エントロピーのはなし
（エントロピーとはなにか？）

川島直輝

8月4日　高校生のためのオープンクラス（第1日）

エントロピーとは何か

エントロピー. . .

熱力学,
統計力学,
通信, 情報科学,
環境科学, etc.

「熱」, 「乱雑さ」, 「知識の量」

第1種永久機関？

17世紀イギリスのウースター侯爵が考案した永久機関

前野昌弘氏のホームページから

http://homepage3.nifty.com/iromono/

熱力学第1法則

エネルギーは減りも増えもしない.

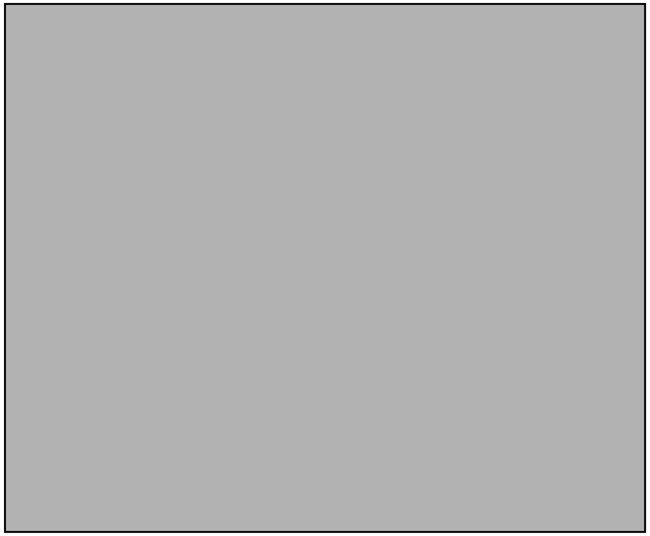
$$\Delta E = \Delta W + \Delta Q$$

ΔE： 系の全エネルギー

ΔW： そとから入ってくる力学的エネルギー

ΔQ： そとから入ってくる熱エネルギー

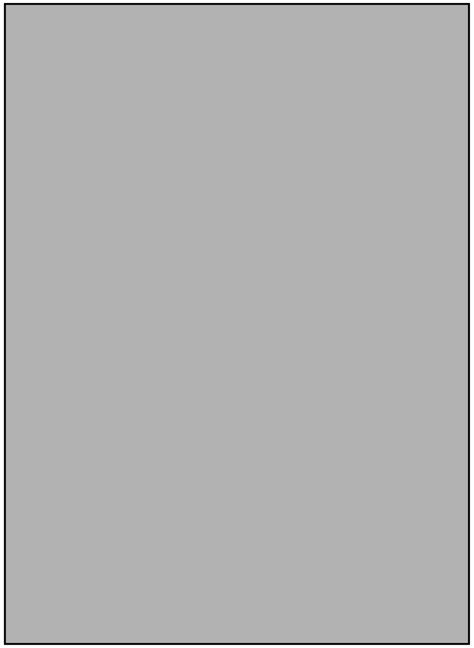
第2種永久機関？



熱力学第２法則

●世の中うまい話はない.
●第２種永久機関はつくれない.

熱とエントロピー



Nicolas Leonard Sadi Carnot

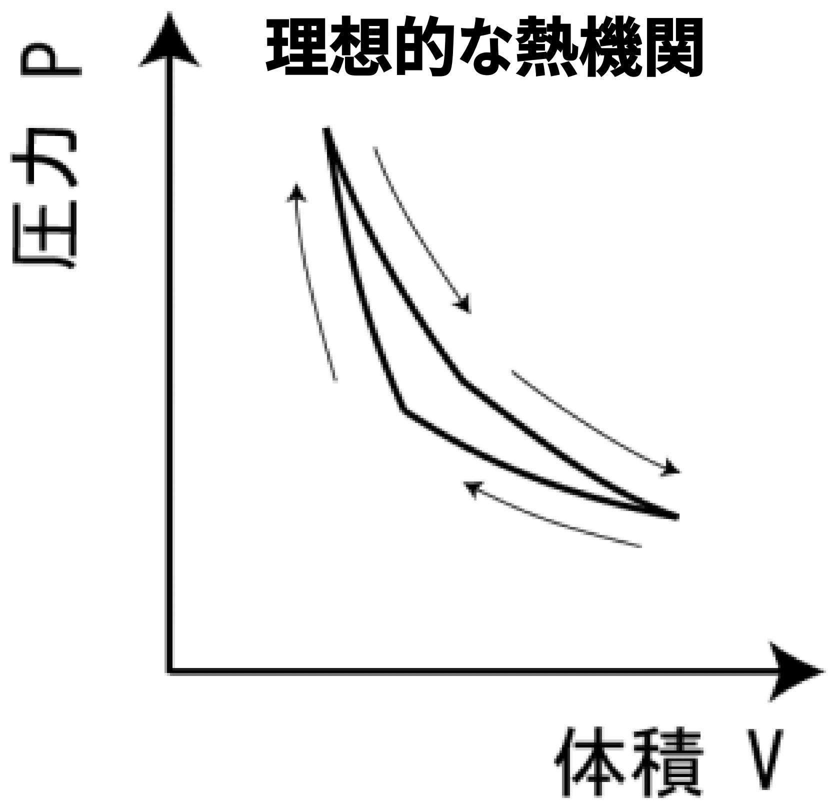
1796〜1832

フランスの物理学者で数学者

熱機関の効率を理論的に論じた.

「熱機関の最大効率は温度にしか依存しない」

熱とエントロピー (2)

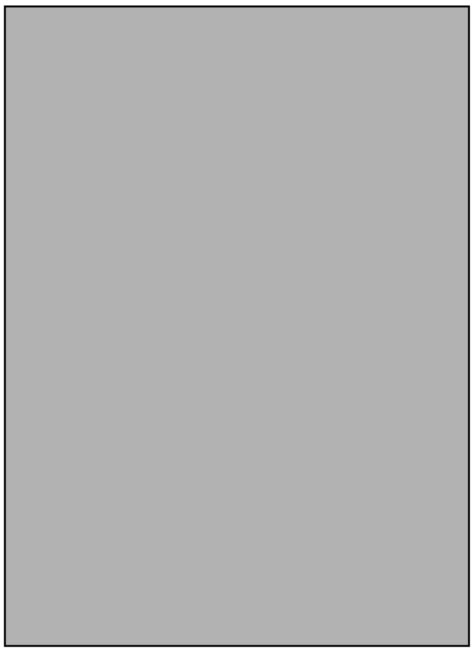


同じ状態に到達するために加える熱量は必ずしも同じではない.

↓

熱量Q は状態によって決まるのではなく, 途中経過によって決まる量である.

熱とエントロピー（3）



Rudolf Julius Emanuel Clausius

1822〜1888

ドイツの理論物理学者

カルノーの定理をいま知られている形に体系化した．

熱力学第１法則，第２法則

「エントロピー」の導入

熱とエントロピー (4)

「温度 T の物体に外から熱を ΔQ だけ加えると，その物体のエントロピーは

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T}$$

だけ増える」とエントロピーを定義するとエントロピーは途中経過によらず状態だけに応じて決まる量になる．

熱とエントロピー(5)

高温の物体から低温の物体に熱が伝わると...

$$\Delta S = \frac{\Delta Q_{low}}{T_{low}} + \frac{\Delta Q_{high}}{T_{high}} = \frac{\Delta Q_{low}}{T_{low}} + \frac{-\Delta Q_{low}}{T_{high}}$$

$$= \left(\frac{1}{T_{low}} - \frac{1}{T_{high}} \right) \Delta Q_{low} > 0$$

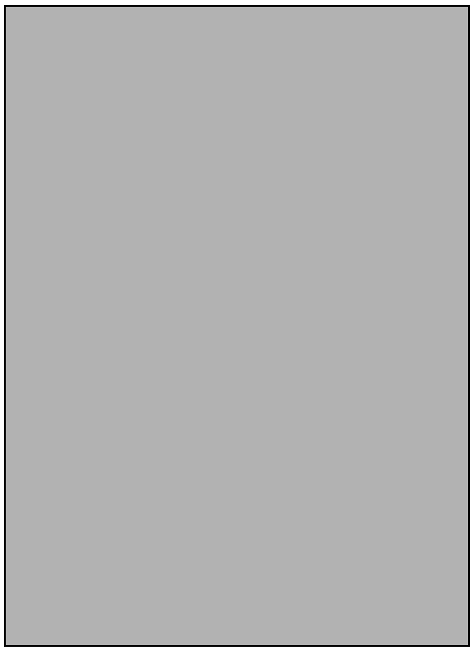
...エントロピーは増える.

熱力学第２法則

●世の中うまい話はない．
●第２種永久機関はつくれない．
●マクロな世界に時間反転対称性はない．
●エントロピーは常に増える．

しかし，このエントロピーとは何なのか？

乱雑さとエントロピー



Ludwig Boltzmann

1844〜1906

オーストリアの理論物理学者

統計力学の創始者,

エントロピーの微視的な意味を発見

乱雑さとエントロピー（2）

○が０個だと可能な組合せは１通り

×　×　×　×　×　×　×　×　×　×

○が５個だと可能な組合せは２５２通り

○　×　○　×　×　○　○　×　×　○

どちらの配列が乱雑に見えるか？

乱雑さとエントロピー (3)

エントロピーは可能な状態の総数の対数 (log) であると定義.

たとえば，4枚のコインのうち2枚が表で2枚が裏と知っているとき，その情報にあうコインの裏表の配列は

××○○	○××○
×○×○	○×○×
×○○×	○○××

の6通り. よって，4枚のコインのエントロピーは

$$S = \log 6 \approx 1.79$$

乱雑さとエントロピー (4)

統計力学的エントロピーの定義:

$$S = k_B \log \Omega \qquad (\Omega : \text{状態数})$$

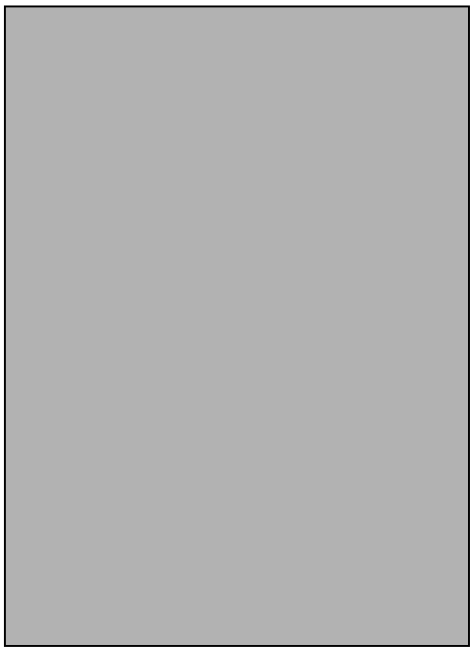
$\longrightarrow$ **乱雑さはつねに増大する**.

ただし, この式で定義されるエントロピーが常に増大する量であることは, 単に観察を通して確かめられているだけであって, 他の基本原理から論理的に導かれているわけではない.

熱力学第2法則

●世の中うまい話はない．
●第2種永久機関はつくれない．
●マクロな世界に時間反転対称性はない．
●エントロピーは常に増える．
●時間がたつと秩序がなくなっていく．
●形あるものは必ず壊れる．
●覆水盆に還らず．

情報とエントロピー



Claude Elwood Shannon

1916〜2001

アメリカの数学者で電気工学者

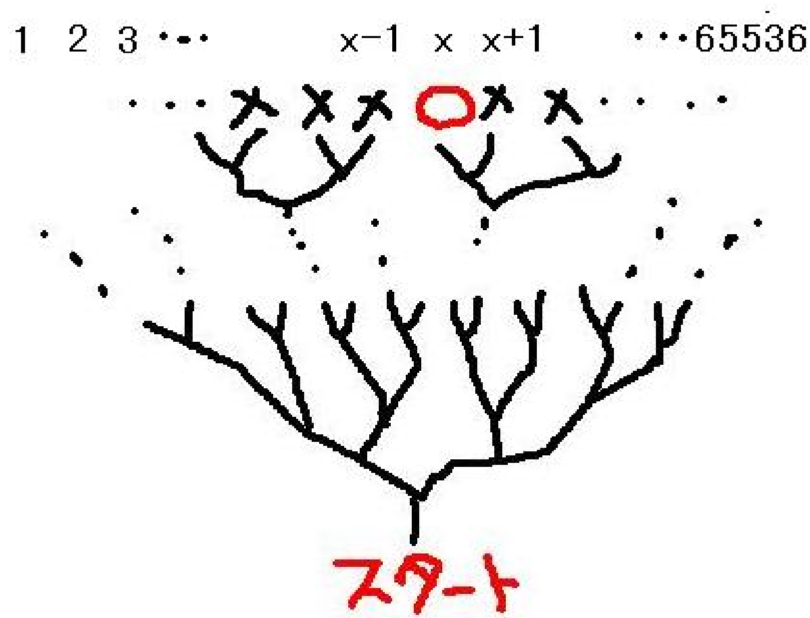
情報科学の創始者．

（あらゆる情報はビット（0，1）の列として表せ，ビットの列として通信できる．）

「ビット」の名付け親．

情報とエントロピー (2)

問題：　　６５５３６個のゴールがある下のような迷路に１つだけ正しいゴールがあり，ここへの道順を知っているとする．これを電子メールで友達に知らせるには最低何文字分のメールをかかなくてはいけないか？



情報とエントロピー（3）

答え：　６５５３６は2の１６乗だから，正しいゴールまでの分岐点の数は１６個．つまり１６回右左の選択をすればいい．つまり「右を0，左を1とする」とあらかじめ約束しておけば，全部で１６回「0」か「1」の信号送ればよい．つまり，メールには１６ビット，つまり漢字1文字分の情報が書いてあれば十分．

情報とエントロピー (4)

問題2：　６５５３６個のゴールのうち正しいゴールが１つある迷路を考える．あなたは正しいゴールが左から数えて１番目から１６３８４番目までのどれかであることを知っているとする．あなたはこの情報をもとに友達に最善のアドバイスをしたいと思っている．あなたから友達に送る情報としては，それがビット単位でおくれるものとして，何ビット分のメールを書く必要があるか．

情報とエントロピー (5)

答え：　１６３８４＝６５５３６÷２÷２だから，最初と２つめの分岐点を左にいけばよいことだけをメールで伝えれば十分．よって２ビット分のメールでよい．

つまりこの知識の情報量は

$$I = \log_2 \frac{65536}{16384} = \log_2 4 = 2 \ \text{bit}$$

情報とエントロピー（6）

問題3：　再び６５５３６個のゴールのうち正しいゴールが１つある迷路を考える．あなたは正しいゴールの番号がこのなかのどれかであるという番号のリストをもっていて，そのリストには全部で１６３８４個の番号が書いてある．あなたから友達に送る情報としては，何ビット分のメールが必要か．

情報とエントロピー（7）

答え：　リストのなかで一番小さい番号を友達に伝えればよい．リストには全体の４分の１の数がのっているのだから，リストがランダムだとすると，大雑把にいって，一番小さい番号は４程度になるはずである．４程度の数をあらわすには２ビット必要だから，結局あなたが送らなくてはいけない情報は２ビット程度．

情報とエントロピー (8)

全部で Ω_{tot} 通りある選択肢のうち，正解を含んだ Ω 個を知っている，という知識の情報量は

$$I = \log_2 \frac{\Omega_{tot}}{\Omega}$$

と定義するのが自然．つまり，エントロピーと情報量の間には

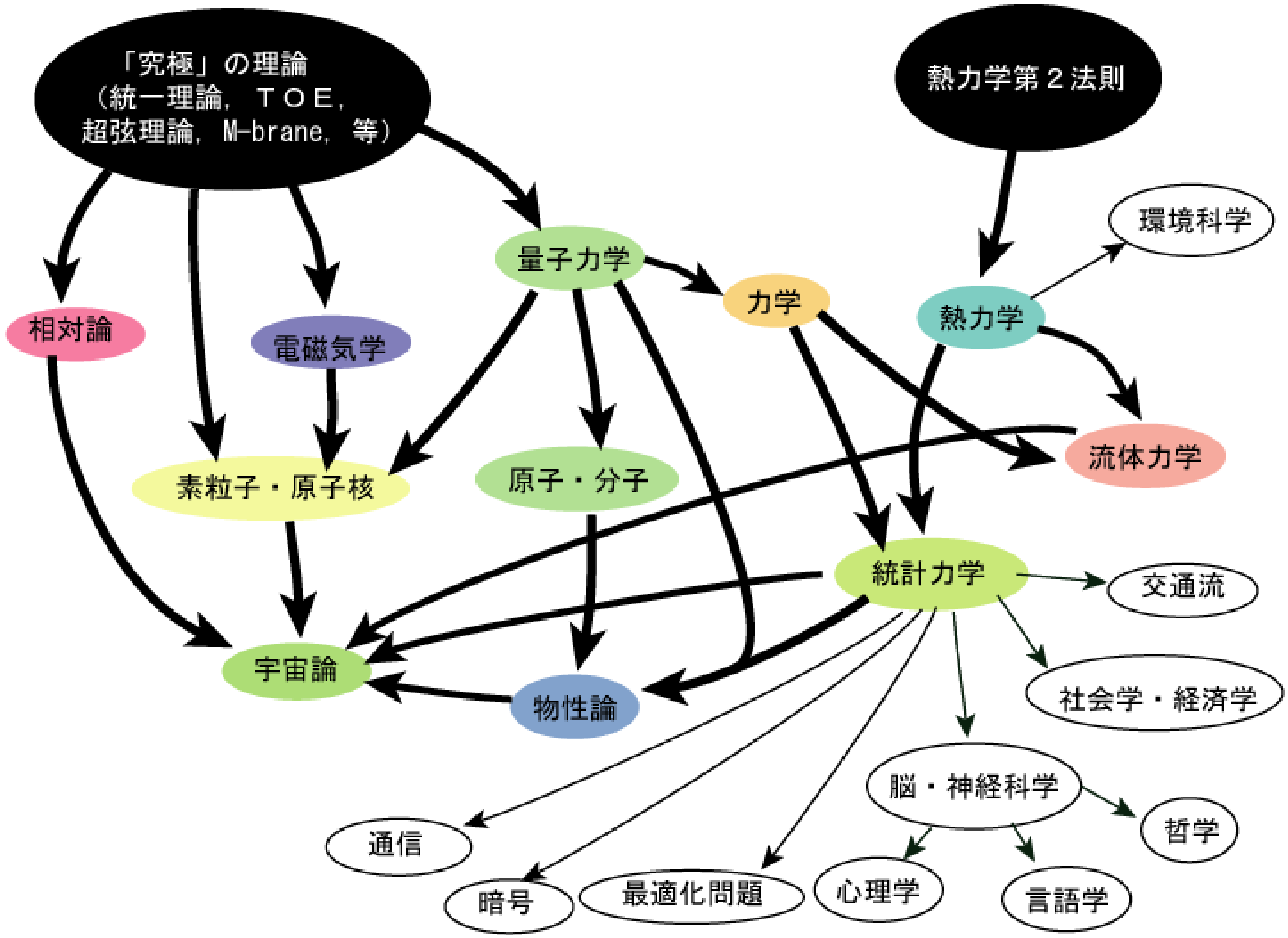
$$I = \log_2 \Omega_{tot} - S$$ または $$S = -I + (\text{定数})$$

の関係がある．つまり**エントロピーとは情報の少なさ**．

熱力学第2法則

●世の中うまい話はない.
●第2種永久機関はつくれない.
●マクロな世界に時間反転対称性はない.
●エントロピーは常に増える.
●時間がたつと秩序がなくなっていく.
●形あるものは必ず壊れる.
●覆水盆に還らず.
●知識は増えない.

熱力学第２法則



「究極」の理論
（統一理論，ＴＯＥ，
超弦理論，M-brane，等）
熱力学第２法則
環境科学
量子力学
力学
熱力学
相対論
電磁気学
流体力学
素粒子・原子核
原子・分子
統計力学
交通流
宇宙論
物性論
社会学・経済学
脳・神経科学
哲学
通信
暗号
最適化問題
心理学
言語学

問題1

物質の性質の観測を通じて我々が得ることのできる
情報の量の大きさがどの程度のものかを考えてみよう.

情報の量は定数 k_{B} を除くとエントロピーの大きさと
同程度である. 身のまわりにあるひとまとまりのものを
構成する原子の数は10^{23}個程度であるが, (かなり
乱暴だが) 仮にこれを10^{23}個のコインだと思ったとす
ると, その裏表の組み合わせは何通り程度あり,
ボルツマンのエントロピーはどの程度の大きさになるか
を考えてみよ. その結果と最近のパソコンについている
ハードディスクに記憶出来るデータの情報量とを比較
してみよ.

エントロピーのはなし
(磁石の統計力学)

川島直輝

8月5日　高校生のためのオープンクラス (第2日)

簡単な実験

磁石は火であぶると磁石の性質を失う.

簡単な実験

磁石は火であぶると磁石の性質を失う.

なぜだろうか？

昨日の話のまとめ

1．カルノー／クラウジウス／etc　．．．

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T}$$

(平衡状態で)

2．ボルツマン　．．．

$$S = k_{\mathrm{B}} \log \Omega$$

(平衡状態で)

3．シャノン　．．．

$$I = k_{\mathrm{B}} \log \frac{\Omega_{\mathrm{tot}}}{\Omega} = k_{\mathrm{B}} \log \Omega_{\mathrm{tot}} - k_{\mathrm{B}} \log \Omega$$

$$= S(\text{知識なし}) - S(\text{知識あり})$$

シャノンのエントロピー

当たりが集合 A の要素のどれかだと知っているときのエントロピーは集合Aの要素数を Ω として

$$S = k_{\mathrm{B}} \log \Omega$$

である．言い換えると，「要素 i が当たりである確率が

$$p_i = \begin{cases} \Omega^{-1} & (i \in \mathrm{A}) \\ 0 & \left(i \notin \mathrm{A}\right) \end{cases}$$

であることを知っているときのエントロピーは

$$S = k_{\mathrm{B}} \sum_{i \in A} \log p_i^{-1} = -k_{\mathrm{B}} \sum_i p_i \log p_i$$

である．」ともいえる．シャノンは右辺の式がエントロピーのより一般的な定義であると考えた．

平衡状態＝エントロピー最大

シャノンのエントロピーは全て要素の当たり確率が同じときに最大になる．つまり全ての要素の数を Ω として

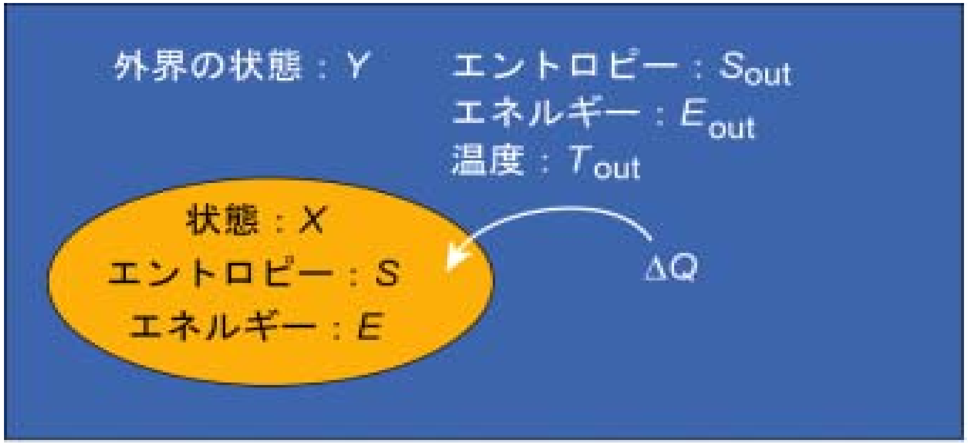
$$S = -k_{\mathrm{B}} \sum_i p_i \log p_i \leq -k_{\mathrm{B}} \sum_i \frac{1}{\Omega} \log \frac{1}{\Omega} = k_{\mathrm{B}} \log \Omega$$

等号成立は $p_i = \Omega^{-1}$ のとき．
これは平衡状態でのボルツマンのエントロピーの式と一致するのでつじつまがあう．

つまり，平衡状態とは全ての要素（ミクロ状態）が同じ確率で出現するような状態である，といえる．

温度が一定のときの出現確率 (1)

これまで外界との相互作用のない閉じた体系を考えてきたが
外界と熱のやり取りがある場合を考える.



全体系の状態：Z = (X, Y)
エントロピー：S_{tot} =S+S_{out}　エネルギー：E_{tot} =E+E_{out}

全体は孤立していると考えていいのでいままでと同じ. つまり

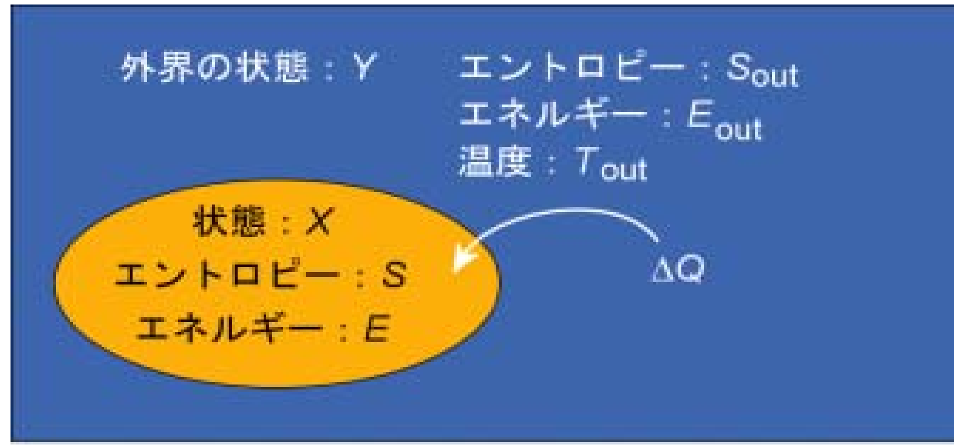
$$p_Z = p_{X,Y} = 1/\Omega_{tot}$$

このとき, 注目している系が状態 X である確率は,

$$\boxed{p_X \propto e^{-E/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{out}}}}$$

(どうしても理由が知りたい人の為の説明)

$$
\begin{aligned}
p_X &= \sum_{\substack{Y \\ (E(X,Y)=E_{\text{tot}})}} p_{X,Y} \\
&= \sum_{\substack{Y \\ (E(X)+E_{out}(Y)=E_{\text{tot}})}} {\Omega_{\text{tot}}}^{-1} \\
&= {\Omega_{\text{tot}}}^{-1} \times \sum_{\substack{Y \\ (E_{out}(Y)=E_{\text{tot}}-E(X))}} 1 \\
&= {\Omega_{\text{tot}}}^{-1} \times \Omega_{\text{out}}\left(E_{\text{tot}} - E(X)\right) \\
&= {\Omega_{\text{tot}}}^{-1} \times \exp\left\{ {k_{\text{B}}}^{-1} S\left(E_{\text{tot}} - E(X)\right) \right\} \\
&= {\Omega_{\text{tot}}}^{-1} \times \exp\left\{ {k_{\text{B}}}^{-1} \left(S\left(E_{\text{tot}}\right) - T_{\text{out}}^{-1} E(X) \right) \right\} \\
&\propto \exp\left(-E(X) / k_{\text{B}} T_{\text{out}} \right)
\end{aligned}
$$



全体系の状態：$Z = (X, Y)$

エントロピー：$S_{\text{tot}} = S + S_{\text{out}}$　エネルギー：$E_{\text{tot}} = E + E_{\text{out}}$

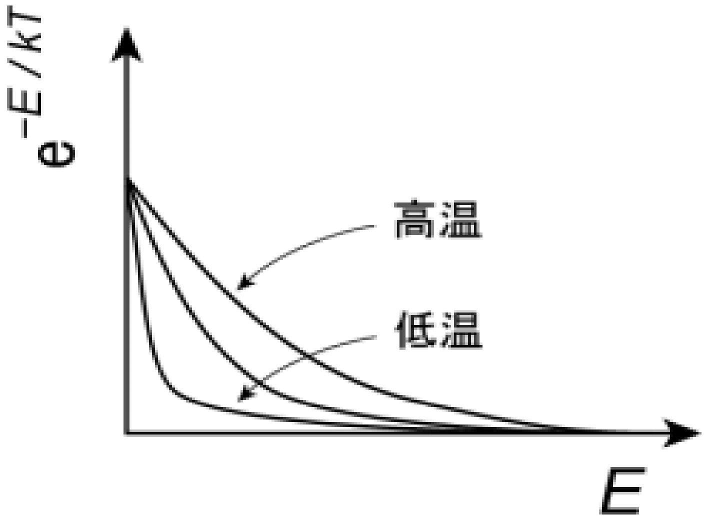
$$
\left(
\begin{array}{l}
\Delta S_{\text{out}} = \dfrac{\Delta Q_{\text{out}}}{T_{\text{out}}} \quad \text{より，} \\
\Delta S_{\text{out}} = S_{\text{out}}\left(E_{\text{tot}} - E(X)\right) - S_{\text{out}}\left(E_{\text{tot}}\right) \quad \text{および} \\
\Delta Q_{\text{out}} = -E(X) \quad \text{として，} \\
S_{\text{out}}\left(E_{\text{tot}} - E(X)\right) - S_{\text{out}}\left(E_{\text{tot}}\right) = -E(X)/T_{\text{out}} \\
\text{つまり} \\
S_{\text{out}}\left(E_{\text{tot}} - E(X)\right) = S\left(E_{\text{tot}}\right) - T_{\text{out}}^{-1} E(X)
\end{array}
\right)
$$

温度が一定のときの出現確率 (2)

ある状態が出現する確率は
その状態でのエネルギー
を E とすると,

$$e^{-E/k_{\mathrm{B}}T}$$

に比例する.

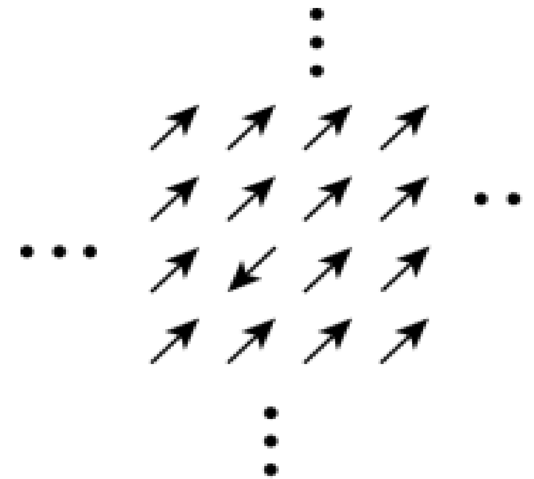


1. エネルギーの高い状態は出現しにくい.

2. 温度が高ければエネルギーはあまり関係なく,
温度が低ければエネルギーの影響は強い.

磁石のはなし

磁石は小さな磁石 (スピン)
のあつまり.



スピン同士は互いに影響を及ぼし
あっていて, その効果は個々の
スピンの向きを±1で表すことに
すると, 相互作用エネルギーで

$$E = \begin{cases} -J & (\text{同じ向きのとき}) \\ +J & (\text{違う向きのとき}) \end{cases}$$

と表される.

だから第 i 番目のスピンを $S_i = \pm 1$ と書くことにして,
全体のエネルギーは

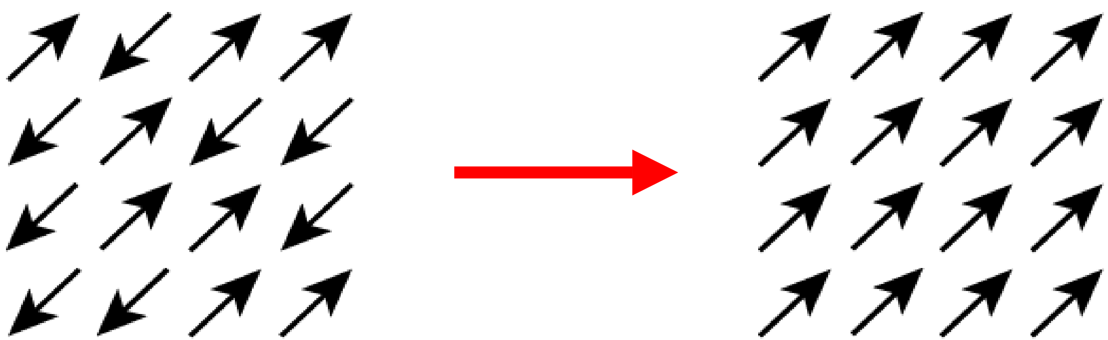
$$\boxed{E = -J \sum_{(ij)} S_i S_j}$$

磁石の統計力学(1)

$$E = -J\sum_{(ij)} S_i S_j$$

1. エネルギーの高い状態は出現しにくい.

2. 温度が高ければエネルギーはあまり関係なく，温度が低ければエネルギーの影響は強い.



高温ではエネルギー
に関係なく状態が出現

低温ではエネルギー
が低い状態が出現

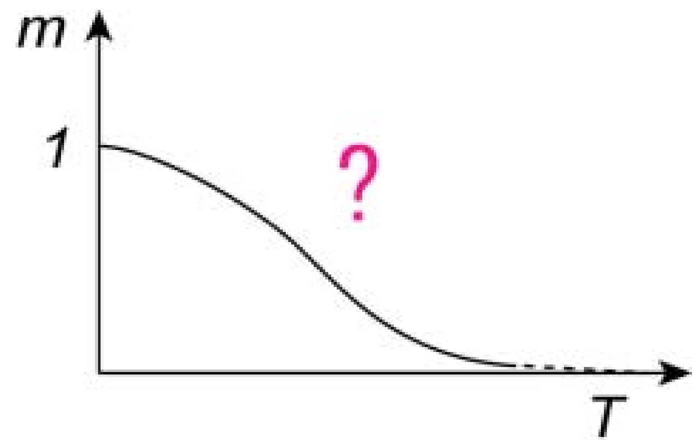
磁石の統計力学 (2)

低温になると, 全てのスピンの向きがそろってくる.

そろっている度合いを

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i$$

で表すと図のようになる？



磁石の統計力学 (3)

きちんとやるには状態 X が出現する確率が
(その状態でのエネルギーを E として)

$$P_X \propto e^{-E/k_\mathrm{B}T}$$

であることを考えないといけない. つまり

$$m = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i$$

の期待値

$$\langle m \rangle = \sum_X \left(P_X \times \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i \right)$$

を計算しないといけない.

磁石のコンピュータシミュレーション

しかし，X に関する和は項の数が多すぎて無理．

$\sum_{X}$ ... 2^N 個の項の和

$2^{10^{23}} = 10^{22}$ 桁くらいの数（その数を書くだけでも無理）

→ **世論調査のやりかたでやればよい．**

つまり確率 $P_X \propto e^{-E/k_{\mathrm{B}}T}$ で状態 X を出現させる方法があれば，単にその方法でいくつかの状態を発生させて，発生した状態について平均をとればよい．

「世論調査」のやりかた

1. 状態 X からスタート.

2. 状態 X をでたらめに少し変更して, X’にしてみる.

3. $P_{X'}/\left(P_X + P_{X'}\right)$ の確率で X’ をキープ,

   そうでなければもとの X に戻す.

4. 現在の状態を改めて X として, 2に戻る.
   (以下繰り返し.)

実際のシミュレーション

実際のシミュレーション

いろいろなことがわかって面白い．

たとえば，

1．変化は急激におきる．（相転移がおきる．）
2．急激な変化にさしかかると，より大きな集団で動くようになる．（相関長の発散．）
3．相転移が起きているときには，フラクタル図形があらわれる．

などなど

→ 対象は磁石に限らない．（超伝導状態，社会現象，交通渋滞，株価変動，脳のしくみ，などなど）

まとめ

エントロピーの考え方からミクロな状態の発生確率を
導いたものが統計力学.

多くの自由度 (変数) を含んだ問題は普通紙と鉛筆だけ
では解く事ができない.

しかし, 統計力学とコンピュータシミュレーションの応用で,
そういう問題をとくことが出来る.

問題2

温度を変化させたとき，磁石はなぜ緩やかに変化するのでなく，ある温度で急激な変化を起こすのか理由を考えてみよ．