B4 ゼミ #3

大上由人

2025 年 4 月 16 日

3 確率熱力学

3.1 Shanon エントロピー

3.1.1 Stochastic エントロピー

Def.Stochastic エントロピー

M 個の事象 $\{x_1, x_2, \cdots, x_M\}$ があるとき、事象 x_i が起こる確率を p_i とする。このとき、事象 x_i の確率的エントロピーは、

$$s(x_i) = -\ln p_i \tag{3.1}$$

と定義される。

この量は、surprisal とも呼ばれ、ある事象がどれほど”驚くべき事象か”を表している。例えば、$p_i = 1$ のとき、$s(x_i) = 0$ であるが、これは、事象 x_i が起こることが確定しているので、”驚くべき事象”ではないことがわかる。逆に、非常に確率が小さい事象 x_i が起こるとき、$s(x_i)$ は非常に大きな値をとる。これは、事象 x_i が起こることは非常に驚くべき事象であることを表している。

Stochastic エントロピーは、以下の要素を満たす。

- 確率分布 p_i について連続関数である。
- 独立な分布 (p, p') に対して、$s(p'_p) = s(p) + s(p')$ が成立する。

実は、この 2 つの条件を満たす関数は、$s(p) = -\ln p + C$ の形のみであることが示される。

Thm.

$f(p)$ が、以下の性質を持つとき、その関数形は定数項を除いて、$-\ln p$ の形に一意に決まる。

- $f(p)$ は、確率分布 p に対して連続関数である。
- $f(p)$ は、独立な分布 (p, p') に対して、$f(p'_p) = f(p) + f(p')$ が成立する。

Prf.

TODO 後で書く。 □

3.1.2 Shanon エントロピー

Stochastic エントロピーの平均として、Shanon エントロピーが定義される。

Def.Shanon エントロピー

M 個の事象 $\{x_1, x_2, \cdots, x_M\}$ があるとき、事象 x_i が起こる確率を p_i とする。このとき、確率変数 x の Shanon エントロピーは、

$$H(x) = -\sum_j p_j \ln p_j \tag{3.2}$$

と定義される。

エントロピーは、事象の不確定性を表す量であるといえる。例えば、二項分布のエントロピーをグラフにすると、以下のようになる。

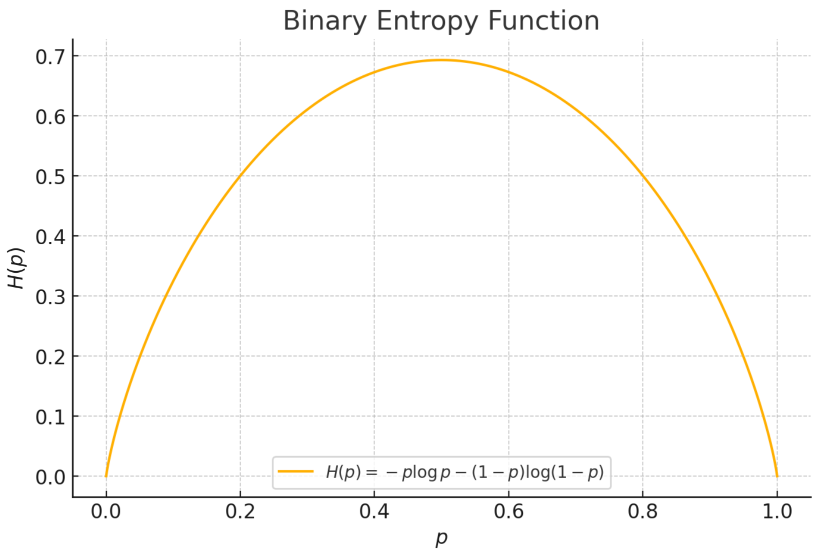

図 1　二項分布のエントロピー

このとき、$p = \frac{1}{2}$ のとき、エントロピーは最大値をとる。例えば、これをコイン投げに例えると、$p = \frac{1}{2}$ のとき、表と裏が均等に出るので、コインを投げる前に、表が出るか裏が出るかは全くわからない。しかし、$p \neq \frac{1}{2}$ のとき、コインの出方が偏っているということになり、ある程度どちらが出るか予測できる。とくに、$p = 0$ または $p = 1$ のとき、エントロピーは 0 となるが、これは、事象の不確実性が 0 であることを表している。

条件付き確率についても、Shanon エントロピーは定義できる。

Def. 条件付き Shanon エントロピー

事象 y のもとでの事象 x の Shanon エントロピーは、

$$H(x|y) = -\sum_{i,j} P(x_i, y_j) \ln P(x_i|y_j) \tag{3.3}$$

$$= -\sum_j P(y_j) \sum_i P(x_i|y_j) \ln P(x_i|y_j) \tag{3.4}$$

と定義される。ただし、$P(x_i, y_j)$ は、事象 x_i と y_j の同時分布である。

特徴をつかむために、コイントスの例を再び考えてみる。TODO 後で書く。

条件付き確率は、条件が付いている分、事象の不確実性が落ちているはずである。実際、以下が成り立つことが知られている。

Thm. 条件付けによる Shanon エントロピーの単調性

任意の確率変数 (x, y) に対して、以下が成り立つ。

$$H(x|y) \leq H(x) \tag{3.5}$$

この証明は、5 章で行う。[*1]

3.2 熱の定義

3.2.1 平衡状態の時間反転対称性

[*1] KL ダイバージェンスの正値性より従う。