* 概要

1．熱・平衡とは？　（入門）

2．等温の場合の平衡

3．平衡に至る時間発展

4．応用の紹介

?

コインを5回投げたとき、
起こりやすいのはどちらか？

① 表 → 裏 → 表 → 裏 → 表

② 表 → 表 → 表 → 表 → 表

どちらの確率も等しい（1/32）！

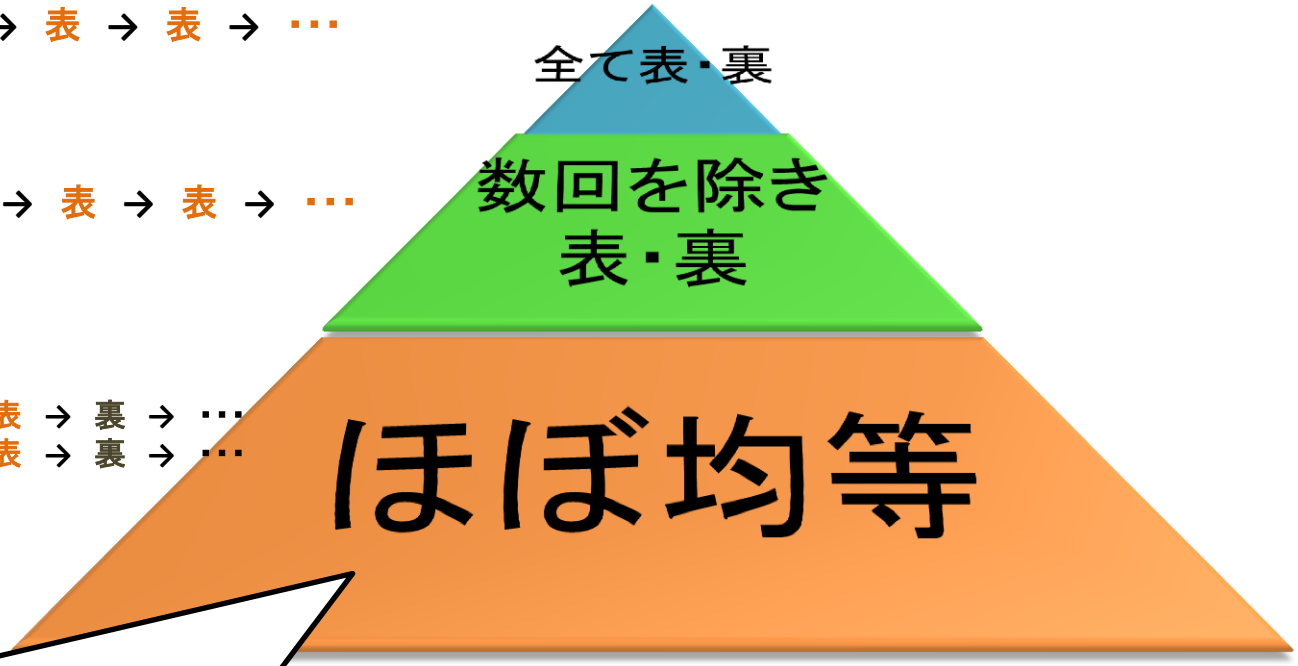
なぜ①の方が多いように見える？＞

われわれが、
表→裏→表→表→裏、 表→表→裏→裏→表・・・などを
ほぼ同じものだと思って同一視してるから。

表 → 表 → 表 → 表 → 表 → 表 → …

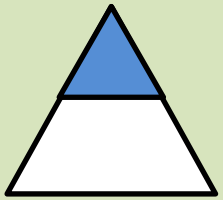
表 → 裏 → 表 → 表 → 表 → 表 → …
など、複数

表 → 裏 → 裏 → 表 → 表 → 裏 → …
表 → 表 → 裏 → 表 → 表 → 裏 → …
など、おびただしい数



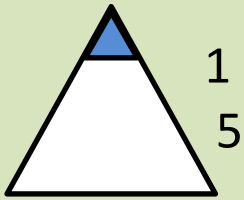
少しずつ違うパターンが相当数　（我々はこれを同一視）

10回　全て表・裏　：　その他



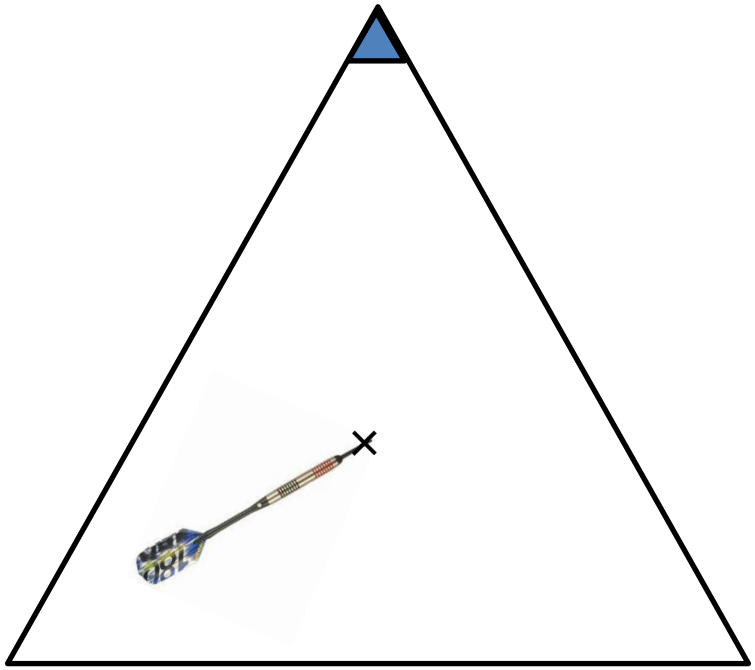
1 :
511

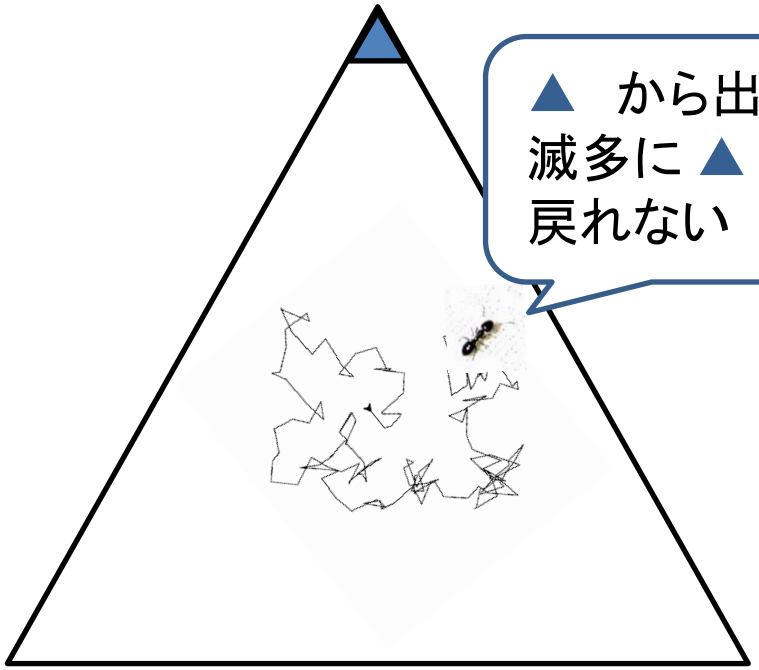
50回　全て表・裏　：　その他



1 :
562兆9499億5342万1311

コイントスやシャッフルは“でたらめ”な操作。
面積が圧倒的に大きい“均等”にいきつく





コイントスn 回
→ **でたらめなダーツの投擲に近い**

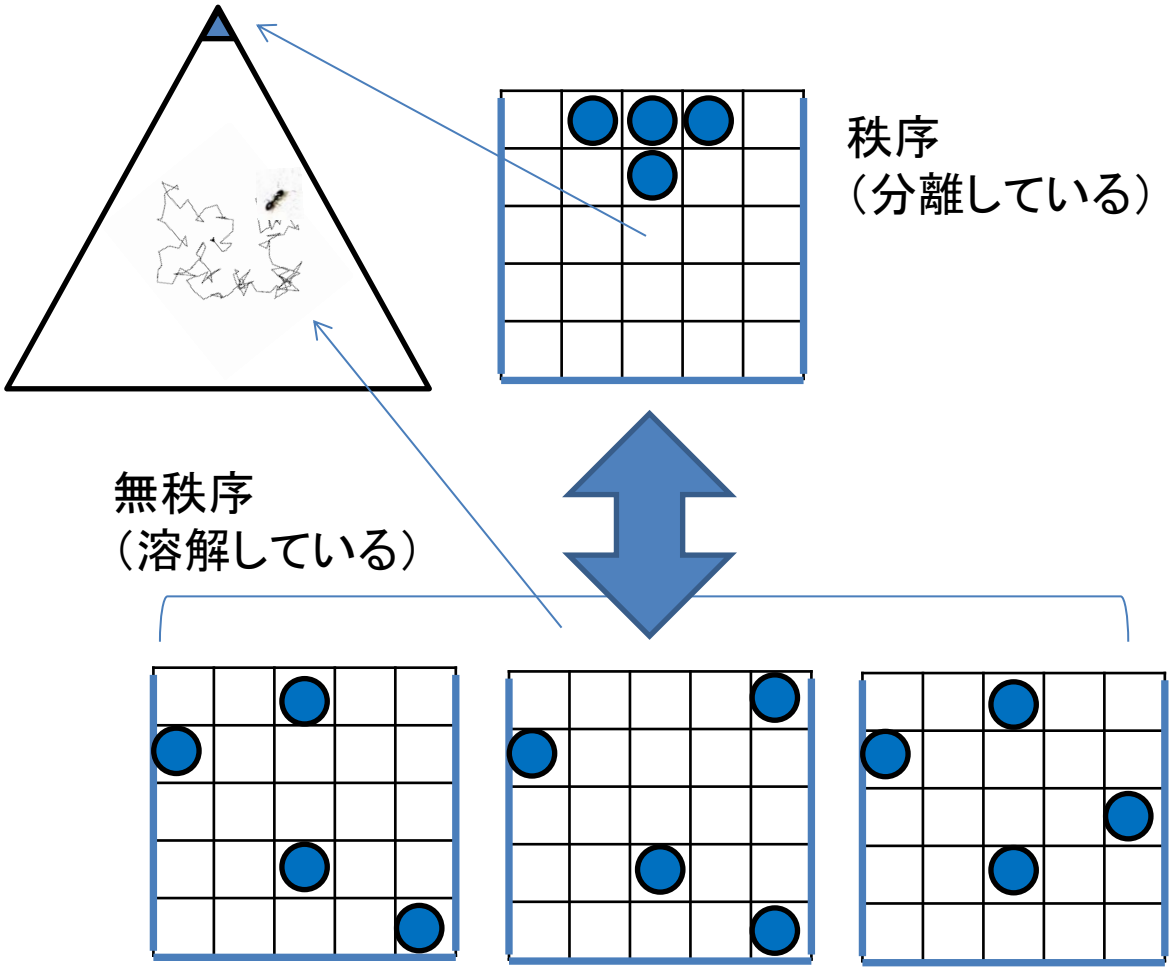
シャッフル

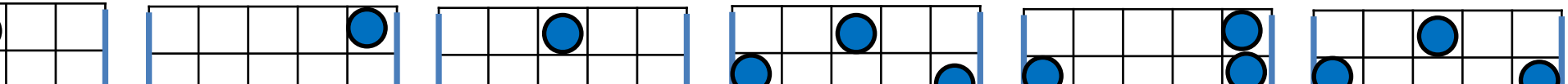
→ **虫のランダムウォークに近い**

「エントロピー」はこの面積(パターン数) W の対数

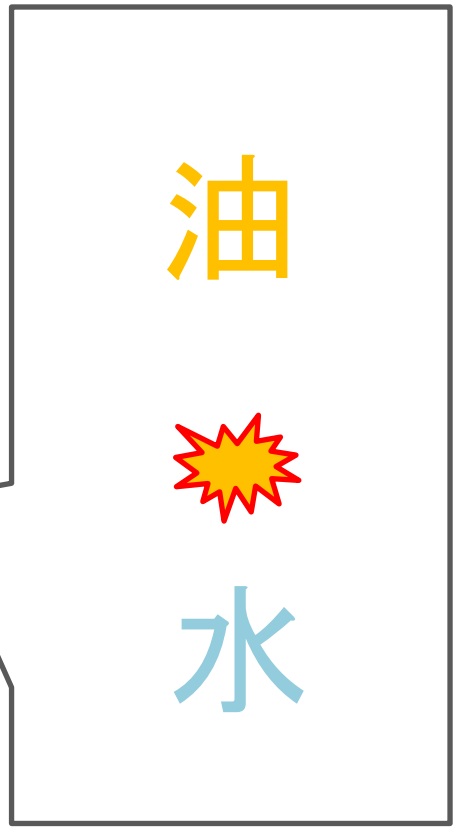
$$S = \underset{\text{定数}}{k} \log W$$

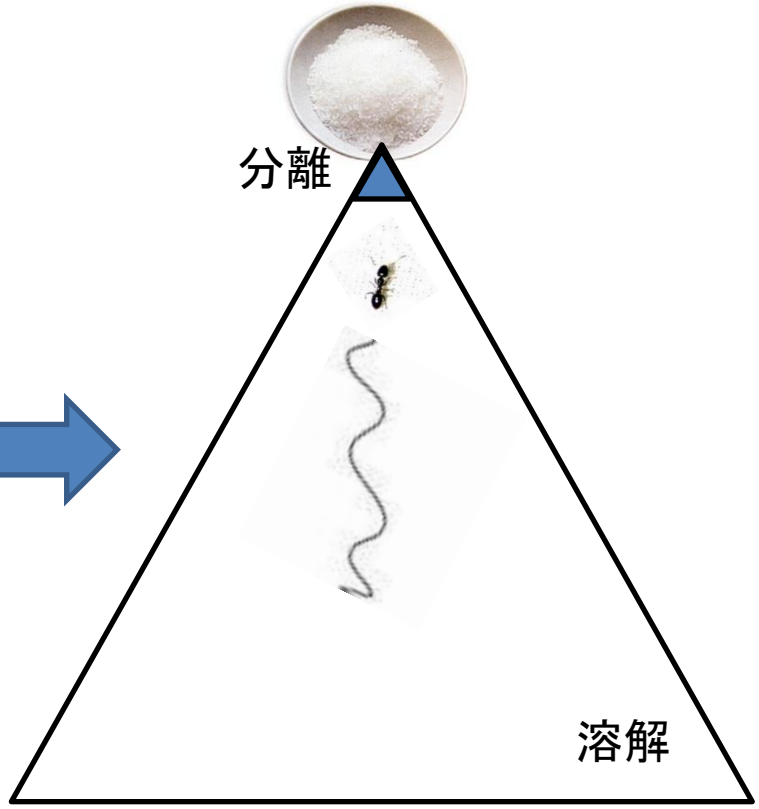
インクの混合もランダムウォークのようなもの





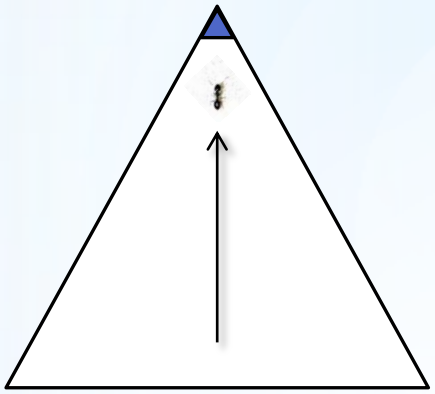
油はなぜ水に溶けないのか・・・
方向性を持ったウォーク



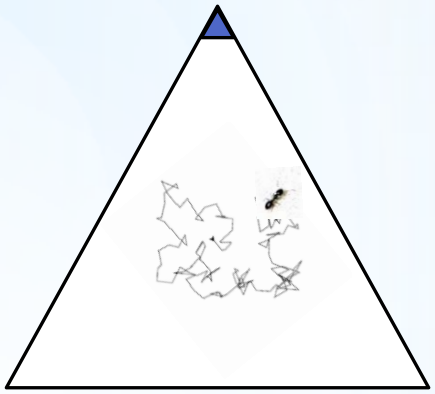


界面エネルギーを小さくする
→　分離する方向へ

* 多くの現象が、方向性とランダムさのバランスで成り立っている

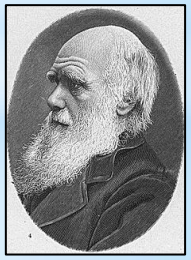


潜在エネルギー最小化

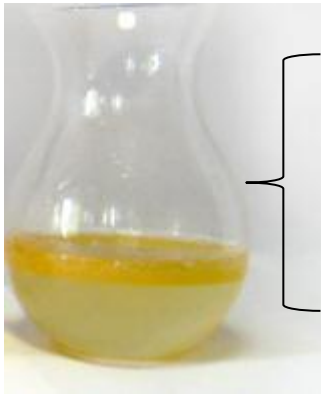


エントロピー最大化

	方向性		ランダムさ
大気	地表から逃げない	vs.	地面に貼りつかない
進化	種の保存	vs.	交配、突然変異
水	結露	vs.	蒸発
市場？	ヒット商品	vs.	ロングテール
	(˘⊖˘)。o(まてよ、エネルギー保存則は・・・？)		



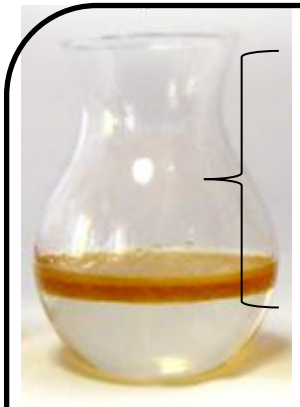
潜在エネルギー最小化 ≒ 外のエントロピー最大化 (等温のもとなら)



$E_{i(\mathrm{potential})}$

$E_{i(\mathrm{thermal})}$

外の系　E_e



$E_{i(\mathrm{potential})}$減少

熱（エネルギー流）

$E_{i(\mathrm{thermal})}$

・・・T 一定のため

$E_{i(\mathrm{thermal})}$も一定！

('ω'メ)

熱（エネルギー流）

外の系　E_e **増加**

（外の系は十分大きいため
T の変化を無視できる）

上より　・・・ $\Delta E_e = -\Delta E_{i(\mathrm{potential})}$

温度の定義 $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$ より　・・・ $\Delta E_e = T\Delta S_e$

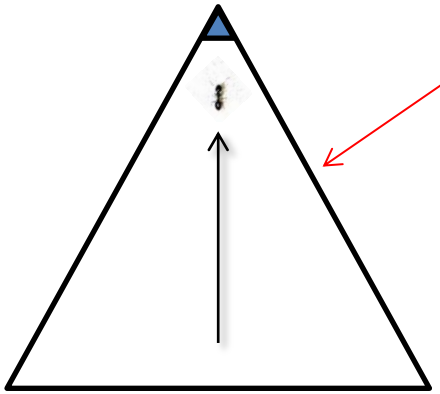
$\Rightarrow -\Delta E_{i(\mathrm{potential})} = T\Delta S_e$

潜在エネルギーが
減少するのは、外の
エントロピーが増加
するがため

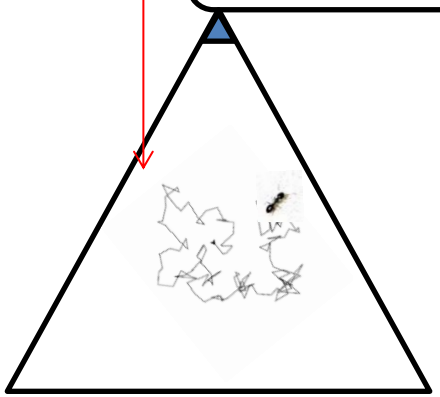
系の中の 方向性 vs ランダムさ
≒全系のエントロピー最大化（等温のもと）

$$S_{\mathrm{all}} = S_e + S_i$$
$$= -\frac{E_{i(\mathrm{potential})}}{T} + S_i$$

中の変数だけで表されている



潜在エネルギー最小化



エントロピー最大化

結局エントロピー増大の法則の書き換えだった

両辺に $-T$ をかければ

$F = E - TS$ の最小化問題！

ヘルムホルツの自由エネルギーはこういう意味だった

ここまでのまとめ

・エントロピーとは“パターン数の対数”

・熱とは“エネルギーの流れ”

・**系のエントロピーは増大し、系の潜在エネルギーは減少する**

・これは**等温下での「全系でのエントロピー増大則」**と等価

・**ヘルムホルツの自由エネルギー減少則**もこれと等価

S_{all} 最大 ⇔ F最小 ⇔ “（等温下での）平衡”

・次節「２．等温の場合の平衡」に続く！（そろそろガチ）

・各状態の具体的な存在比など

～板書タイム～

ボルツマン分布　exp(-ε/kT) がどのようにして得られるかを、
ここまでの議論と変分法とで示しました。

（ふつうの教科書では、エントロピー最大化と、「エントロピーの指数の
確率で起こる」とがごっちゃにされている事があったので、これを整理。）

ノイズのある力学系の終状態が、このボルツマン分布と一致することを、
フォッカー・プランク方程式への書き換えを経て示しました。

板書の結論の概要

- 等温の平衡時の分布はボルツマン型分布

- **ノイズを含んだ時間発展**で同じ結果を再現
  （温度を近似的にノイズ強度だとみなせるかも）

- この時間発展（“確率力学系”）により、平衡に至る**過程**も分かるかも
  （さらに、**平衡に至らない場合**についても議論できそう）

- “確率力学系”では具体的にどんなことが分かる？
  → 最終章

ノイズを含んだ微分方程式系“確率力学系”いろいろな応用

- 全範囲は追い切れていないので・・・
  一部の研究を紹介

現象やモデルの観点から（後述）:

・同期
・パターン形成（化学反応の波やチューリングパターンなど）
・秩序-無秩序転移

対象の観点から:

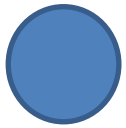
・ソフトマター（膜や液滴など）
・液体、流体
・経済、社会

情報幾何などとも関係！

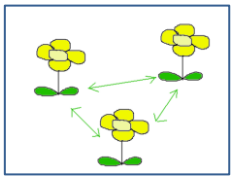
確率力学系のモデルいろいろ

結合のバリエーション

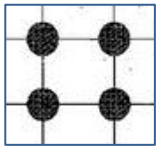
単一素子
（≒独立な多粒子）



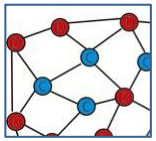
全結合（≒平均場近似）



格子（≒連続な
n次元系）



ネットワーク



個々のダイナミクスのバリエーション

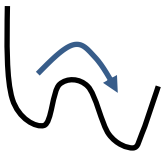
時間が連続

・振動

・双安定系

・イジング ↑↓

・活性・抑制系



時間が離散（写像）

割愛！

解の形

平衡に至る場合

動的な解を持つ場合

- 詳細は色々突っ込まれるとアレなので web 版では割愛です・・・ m(_ _)m

・読んで頂きありがとうございました！