Entropie nejen ve fyzice

Jaromír Kukal, FJFI ČVUT v Praze

Abstract. The paper is oriented to physical, statistical and information meaning of the term entropy. Various entropy definitions are used for the calculations and estimations on small examples. The concept of Alfred Renyi is demonstrated here as a generalization of Shannon entropy. The entropy estimates, which are useful in many areas of data processing, are biased in general and this effect is also demonstrated.

Úvod

Od té doby, co se Homo Sapiens naučil mluvit, může kdokoli povolaný hovořit v klidu o čemkoli, pokud ovšem posluchači neví, o co jde. Příliš mnoho znalců rozumí medicíně a přesně ví, co je to hysterie, deprese či demence jiných osob. Ani matematika, fyzika či informatika nejsou ušetřeny vpádu nadšenců, kteří vědí, co je to chaos, neuspořádanost, informace či fraktál. Cílem tohoto článku je poskytnout základní informace, které umožní se seznámit s pojmem entropie coby míry neuspořádanosti, která se hojně využívá nejen ve fyzice a matematické statistice, ale i v informatice.

Nejlepším úvodem do problematiky entropie je hádka dvou kamarádek o tom, která má větší nepořádek v kabelce. Po vzájemném prošacování bylo zjištěno, že Amélie tam má dvě rtěnky různých barev, hřeben, nůžky a sedm papírových kapesníků. Zuzana tam má dva stejné hřebeny (co kdyby se jeden zlomil), tři stejné rtěnky, dvoje nůžky (člověk nikdy neví) a tři papírové kapesníky. V obou případech je vše jen tak naházeno na dně kabelky. Odpověď nejen na otázku, která z nich je víc nepořádná, naleznete v následujícím pojednání o entropii.

Entropie ve fyzice

Pojem entropie má svou historii, která začíná studiem termodynamiky tepelných strojů. Mladý francouzský inženýr Nicolas Léonard Sadi Carnot (1796–1832) pokračoval v rodinné tradici a dospěl k pojmu Carnotův cyklus, čímž usnadnil formulaci druhé věty termodynamické. Na jeho práci navázali mnozí. Jedním z nich byl Rudolf Julius Emanuel

Clausius (1822–1888), který zavedl pojem entropie. Je to veličina S definovaná jako

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T}, \tag{1}$$

kde Q je teplo dodané do systému, T je absolutní teplota a Δ je symbol změny příslušné veličiny. Z uvedeného vztahu názorně plyne, že Clausiova entropie je definována pouze relativně a nikoli absolutně. Zároveň vidíme, že jednotkou entropie je $\mathrm{J \cdot K^{-1}}$.

S rozvojem fyziky v 19. století souvisí i nová disciplína: statistická termodynamika. Tu zajímá spíše počet stavů, resp. mikrostavů, daného systému a je lhostejné, zda jde o ideální plyn, krystal nebo obsah kabelky. V souvislosti se studiem počtu mikrostavů ideálního plynu dospěl Ludwig Boltzmann (1844–1906) k vyjádření absolutní entropie libovolného systému v jednoduchém tvaru

$$S = k \ln W, \tag{2}$$

kde W je počet možných uspořádání (stavů) systému a $k = R/N_\mathrm{A}$ je Boltzmannova konstanta. Čím větší je neuspořádanost (nepořádek, binec a pod.) systému, tím větší je počet stavů, a tím i entropie. Proto je právem považována za míru neuspořádanosti systému.

Položme si otázku, v kolika stavech se mohou nacházet obsahy těch dvou kabelek. Úplně bude stačit si představit, že v příslušné kabelce šmátráme poslepu a bez opakování postupně vyndáváme věci po jedné. Počet stavů kabelky W pak určíme jako počet možností, jak vyprázdnit kabelku. Je-li v ní n druhů objektů o celkovém počtu N, pak jejich četnosti označíme postupně $N_1, N_2, \ldots, N_n$ a počet stavů určíme jako počet permutací s opakováním podle známého vztahu

$$W = \frac{N!}{N_1!N_2!\ldots N_n!}. \tag{3}$$

Co se Amélie týče, tak $n = 5$, neboť ty rtěnky mají různou barvu, $N = 11$, což na první pohled vypadá jako mnohem větší nepořádek než u Zuzany, kde $n = 4$ a $N = 10$. Úsudek nás zklamal, neboť

$$W_\text{Amélie} = \frac{11!}{1!\,1!\,1!\,7!} = 7\,920,$$
$$W_\text{Zuzana} = \frac{10!}{2!\,3!\,2!\,3!} = 25\,200.$$

V Zuzanině kabelce je tedy mnohem více stavů, tedy je větší bordelářka. Počet stavů raději nebudeme dosazovat do vztahu (2), neboť nejde o systém částic ve fyzikálním slova smyslu.

Při zkoumání fyzikálních systémů obsahujících velké množství částic, tedy i stavů, ve kterých se mohou nacházet, není příliš vhodné pracovat s faktoriály velkých čísel. Místo toho se pracuje s jejich přirozenými logaritmy a využívá se aproximace

$$\ln N! \approx N \ln N - N, \tag{4}$$

kterou odvodil James Stirling (1692–1770). Pokuste se sami dosadit (3) do (2) a po úpravách využít Stirlingův vzorec (4). Pokud se vám podaří využít substituce

$$p_i = \frac{N_i}{N} \tag{5}$$

pro $i = 1, \ldots, n$, pak jste dospěli ke stejné formuli pro entropii, kterou odvodil Josiash Willard Gibbs (1839–1903), tedy ke vztahu

$$S = -kn \sum_{i=1}^{n} p_i \ln p_i. \tag{6}$$

Zde n je počet mikrostavů (např energetických hladin) a p_i je kladná pravděpodobnost, že se systém nachází v i-tém mikrostavu. Pokud studujeme 1 kmol látky, pak $N = N_\mathrm{A}$ a $kN = R$.

Entropie ve statistice a informatice

V polovině 20. století se pojmu entropie chopila matematická statistika a teoretická informatika. Claude Elwood Shannon (1916–2001) se nechal inspirovat Gibbsovou formulí (6) a definoval entropii jako základní pojem teorie informace vztahem

$$H = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log_2 p_i. \tag{7}$$

Zde H je Shannonova entropie vyjádřená v bitech, n je počet různých hodnot diskrétní náhodné veličiny a p_i jsou kladné pravděpodobnosti jejich výskytu, jejichž součet je roven jedné.

Pro pocvičení pohlédneme do kabelek očima statistika či informatika. Při náhodném vytažení předmětu z kabelky máme u Amélie jen 5 možností s pravděpodobnostmi 1/11, 1/11, 1/11, 1/11, 7/11. U Zuzany jsou pouze 4 možnosti s pravděpodobnostmi 2/10, 3/10, 2/10, 3/10. Po dosazení dostaneme příslušné entropie jako

$$H_{\text{Amélie}} = -4\,\frac{1}{11}\log_2\frac{1}{11} - \frac{7}{11}\log_2\frac{7}{11} \approx 1{,}672\,9,$$

$$H_{\text{Zuzana}} = -2\,\frac{2}{10}\log_2\frac{2}{10} - 2\,\frac{3}{10}\log_2\frac{3}{10} \approx 1{,}971.$$

Za příklad dokonalého pořádku by jim mohla sloužit igelitka se šesti stejnými rohlíky, neboť je jenom jedna možnost, co z ní vytáhnout, a to s pravděpodobností rovnou 1. Pak by byla Shannonova entropie $H = 0$ a menší být ani nemůže (dokažte).

Alfréd Renyi a jeho pojetí entropie

Pochybovat je lidské, ale jen někdy tím vznikají nové hodnoty. Vzpomeňme euklidovskou geometrii a pochybnosti o tom, zda daným bodem lze vést pouze jednu rovnoběžku s danou přímkou. Pochybovat o tomto axiomu se vyplatilo a dalo to prostor pro vznik neeuklidovských geometrií (Boylai, Lobačevskij, Gauss). Podobně je tomu i se Shannonovou entropií, která splňuje čtyři axiomy. Pokud na nich trváme, tak Shannonova entropie je ta jediná možná. Alfréd Renyi (1921–1970) rozpoznal, že čtvrtý axiom je mnohem slabší než předchozí tři, a tak se rozhodl ho nerespektovat, čímž vytvořil prostor pro jiné pojetí entropie. Rényiova entropie splňující pouze prvé tři axiomy je definována vztahem

$$H_q = \frac{\log_2 \sum\limits_{i=1}^{n} p_i^q}{1-q}, \tag{8}$$

kde q je reálný parametr různý od jedné, který určuje konkrétní podobu entropie. Vztah (8) je nejčastěji využíván pro následující hodnoty parametru $q\colon 0, 1, 2$ a $+\infty$. Potíž je v tom, že hodnoty $q = 1$ a $q = +\infty$ nelze přímo dosadit do uvedeného vztahu.

Několik limit na procvičení

Máme štěstí, že uznáváme pouze kladné hodnoty pravděpodobností. Pak snadno dosadíme $q = 0$ a dostaneme Hartleyovu entropii jako

$$H_0 = \frac{\log_2 \sum\limits_{i=1}^{n} p_i^0}{1-0} = \log_2 n. \tag{9}$$

Všimněte si, že nezáleží vůbec na příslušných pravděpodobnostech. Je ovlivněna pouze počtem hodnot. Obtížnější situace nastává pro $q = 1$, kdy musíme vyšetřit příslušnou limitu, která je typu $\frac{0}{0}$. Pro její výpočet doporučuji vyjádřit dvojkový logaritmus pomocí přirozeného, vzpomenout si na l'Hospitalovo pravidlo a na pravidla pro derivování. Příslušné pravděpodobnosti považujte přitom za kladné konstanty. Po troše námahy vyjde

$$\lim_{q\to 1} H_q = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log_2 p_i. \tag{10}$$

Pomocí hodnoty limity (10) můžeme dodefinovat entropii H_1 a vzhledem ke shodě se vztahem (7) je Shannonova entropie též označována jako H_1. Prosté dosazení $q = 2$ vede k pojmu kolizní (kvadratická, korelační) entropie, která je dána vztahem

$$H_2 = -\log_2 \sum_{i=1}^{n} p_i^2. \tag{11}$$

S Rényiovou entropií jsou spojeny ještě dvě limity, na kterých můžete trénovat:

$$H_{+\infty} = \lim_{q\to+\infty} H_q = -\log_2 \max_{1\le i\le n} p_i \tag{12}$$

$$H_{-\infty} = \lim_{q\to-\infty} H_q = -\log_2 \min_{1\le i\le n} p_i \tag{13}$$

Entropie $H_{+\infty}$ se nazývá min-entropie, zatímco méně často používaná entropie $H_{-\infty}$ se nazývá max-entropie. Názvy entropií (12) a (13) souvisí s faktem, že Rényiova entropie H_q (po dodefinování H_1) je nerostoucí spojitou funkcí parametru q. Takové tvrzení se pokuste dokázat (těžké). Určitě se vám podaří najít případ, kdy Rényiova entropie nezávisí na q (lehké).

V případě Amélie již víme, že $H_1 = 1{,}672\,9$. Snadno určíme $H_0 = \log_2 5 = 2{,}321\,9$, $H_2 = \log_2 \frac{121}{53} = 1{,}190\,9$, $H_{+\infty} = \log_2 \frac{11}{7} = 0{,}652\,1$ a konečně i $H_{-\infty} = \log_2 11 = 3{,}459\,4$, takže názorně vidíme pokles Réniyovy entopie s rostoucí hodnotou parametru q.

Analogicky je u Zuzany $H_1 = 1{,}971$, $H_0 = \log_2 4 = 2$, $H_2 = \log_2 \frac{100}{26} = 1{,}943\,4$, $H_{+\infty} = \log_2 \frac{10}{3} = 1{,}737$ a $H_{-\infty} = \log_2 5 = 2{,}321\,9$, tedy opět pokles entropie.

Při použití Shannonovy, kolizní nebo min-entropie sice zjistíme, že Zuzana je více nepořádná, avšak použití Hartleyovy nebo max-entropie hovoří naopak v neprospěch Amélie.

Takové dilema čeká každého, kdo „měří různými metry“, a těžko se tomu můžeme divit.

Constantino Tsallis a jeho pojetí entropie

Při zobecňování Boltzmann–Gibbsovy entropie dospěl Constantino Tsallis (nar. 1943) čistě fyzikálními úvahami k alternativnímu vzorci pro tzv. Tsallisovu entropii

$$T_q = \frac{1 - \sum_{i=1}^{n} p_i^q}{q - 1}, \tag{14}$$

kde q je opět reálný parametr různý od jedné, který určuje konkrétní podobu entropie. Zajímavé jsou opět některé jednoduché a limitní případy formule (14) uvedené již jen jako přehled vztahů k individuálnímu procvičení:

$$T_0 = \frac{1 - \sum_{i=1}^{n} p_i^0}{0 - 1} = n - 1 \tag{15}$$

$$\lim_{q \to 1} T_q = -\sum_{i=1}^{n} p_i \ln p_i \tag{16}$$

$$\lim_{q \to +\infty} T_q = 0 \tag{17}$$

$$\lim_{q \to -\infty} T_q = +\infty \tag{18}$$

Tsallisova entropie je opět nerostoucí funkcí parametru q (dokažte) a nemůže být záporná (to jsme očekávali). Zajímavé je rovněž porovnat vztahy (16), (10) a (7). Tsallisova entropie tedy není zobecněním

Shannonovy entropie, neboť se liší základem logaritmu. Pokud bychom v aplikacích cítili potřebu porovnání Renyiovy, Shannonovy a Tsallisovy entropie, pak musíme Tsallisovu entropii vydělit přirozeným logaritmem dvou.

Odhad entropie s využitím experimentálních četností

Loutkoherec Josef Skupa (1892–1957) řekl ústy Spejbla památnou větu: „Fyzika je teorie a pokusy jsou praxe." Rozpor mezi teorií a její praktickou realizací může vzniknout i ve statistice a informatice. Představme si ideální hrací kostku, pro kterou je $n = 6$ a příslušné teoretické pravděpodobnosti jsou rovny 1/6. Pak dostaneme snadno teoretickou hodnotu Shannonovy entropie $H_1 = \log_2 6 = 2{,}585$.

Praxe začíná tím, že se rozhodneme kostku několikrát vrhnout a sledovat experimentální četnosti jednotlivých hodnot. Přitom je lhostejné, zda kostka je dokonale vyvážena (nerealizovatelné) nebo ne, či zda místo vrhání kostkou raději využijeme generátor pseudonáhodných čísel na počítači. Při 10 vrzích reálnou kostkou mi vyšly četnosti: $2, 2, 1, 2, 3, 0$. Po vydělení počtem vrhů snadno obdržíme odhady pravděpodobností nastalých pěti jevů jako 2/10, 2/10, 1/10, 2/10 a 3/10. Po dosazení do vztahu (7) nás čeká „rozčarování z praxe", neboť vyjde odhad Shannonovy entropie $H_1 = 2{,}246\,4$, což je „žalostně málo". Pokud bychom uvedených 10 vrhů několikrát opakovali a ze získaných hodnot entropie vypočetli aritmetický průměr, pak to odstranit systematické vychýlení odhadu nepomůže.

Matematická statistika definuje pojem vychýlení odhadu jako rozdíl mezi střední hodnotou odhadu a hodnotou teoretickou. V případě hrací kostky tedy musíme konstatovat záporné vychýlení odhadu Shannonovy entropie. S uvedeným nešvarem, kdy odhad je „o kus vedle" než skutečnost, bojuje matematická statistika například zvyšováním počtu experimentů. Proto jsem se odhodlal, tentokrát s využitím počítače, simulovat 100, 1 000 a 10 000 vrhů kostkou. Příslušné odhady Shannonovy entropie pak byly: 2,579 2, 2,579 6 a 2,584 7, což již vypadá optimisticky, i když soustavné záporné vychýlení přetrvává. Plyne z toho velké poučení: pokud chceme odhadovat entropii z experimentálních četností jednotlivých jevů, potom musíme mít k dispozici velký počet pokusů (realizací náhodného jevu). Uvedeným postupem můžeme potlačit vychýlení odhadu entropie na přijatelnou míru, ale obecně ho nemůžeme vynulovat.

K obdobnému jevu dochází i při odhadování Renyiovy nebo Tsallisovy entropie a při zpracování dat s ním musíme počítat. Rozhodně je třeba učinit vše pro to, aby četnosti sledovaných jevů byly co nejvyšší, což je jedna z cest, jak zmenšit vychýlení odhadů entropie. Díky smysluplným aplikacím entropie existuje celá řada odhadů, které nejsou založeny na relativních četnostech jevů, ale na podmíněných pravděpodobnostech. Takové odhady mají malé vychýlení i při relativně malém množství dat, ale jejich teorie překračuje rámec tohoto článku.

Aplikace entropie

Klasická entropie ve fyzikálním slova smyslu nachází široké uplatnění při termodynamických výpočtech souvisejících s návrhem i provozováním tepelných strojů (turbíny, kompresory, motory, chladící zařízení) a chemických zařízení (chemické reaktory, absorbéry, destilační kolony). Entropie jako nástroj statistiky a informatiky slouží k charakterizaci neuspořádanosti dat. Z relativních četností znaků v neznámém textu můžeme odhadnout entropii, a tak se pokusit o charakterizaci jazyka, stylu psaní nebo dokonce autora textu. Někdy se ke stejným cílům analýzy textového dokumentu hodí lépe relativní výskyt dvojic (obecně n-tic) za sebou jdoucích znaků. Obecně jde o analýzu fragmentů textu, celých slov a jejich skupin. Pomocí entropie můžeme analyzovat hudební melodie, rytmy či celé skladby, které jsou snadno konvertovatelné na posloupnost znaků. Analogicky můžeme posloupnosti znaků vytvářet z libovolných časových průběhů (EKG, EEG, technologické veličiny), a tak získat cenné informace pro biomedicínskou nebo technickou diagnostiku. Samostatnou kapitolou je využití entropie při analýze bodových množin, kdy z hodnot entropie v různém rozlišení usuzujeme na možný fraktální charakter množiny a odhadujeme její dimenzi.

Literatura

[1] Novák, J.: *Fyzikální chemie I.* VŠCHT, Praha, 1999.

[2] Rényi, A.: On measures of information and entropy. *Proceedings of the 4th Berkeley Symposium on Mathematics, Statistics and Probability*, 1961, str. 547–561.

[3] Tsallis, C.: On measures of information and entropy. *Journal of Statistical Physics* **52** (1988), str. 479–487.