

微小非平衡系における情報熱力学

沙川 貴大*

〈京都大学次世代研究者育成センター 606-8502 京都市左京区北白川追分町 e-mail: sagawa@yukawa.kyoto-u.ac.jp〉

上田 正仁

〈東京大学大学院理学系研究科 113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1 e-mail: ueda@phys.s.u-tokyo.ac.jp〉

「デーモンのパラドックス」がマクスウェルにより提起されて以来、情報処理を含む物理過程に熱力学第二法則をそのままの形では適用できないことが知られてきた。我々は、情報処理を含む形に一般化された熱力学第二法則や非平衡関係式を導き、それらは実験で検証された。我々の結果は、熱力学量と情報量を対等に扱う「情報熱力学」の基本原則を提供する。

1. はじめに：マクスウェルのデーモン

19世紀にマクスウェルが思考実験によって提案した「デーモン」は、一見すると熱力学第二法則に反して、系のエントロピーを減少させることができるように見える。それは熱・統計力学の根本原理に関わるパラドックスとして、多くの研究者によって150年近くにわたって議論されてきた。その結果、デーモンは「情報」と「熱力学」を結び付ける鍵になることが認識されるようになってきた。¹⁾ さらに、近年の微小な熱力学系を測定・制御する技術の進歩により、デーモンは思考実験の世界から現実の実験室へとその活躍の舞台を広げつつある。本稿では、そのような最近の研究の一端を紹介する。

まず、マクスウェルによる思考実験を振り返ってみる。断熱壁で覆われた箱に理想気体が入っており、その箱の中央が断熱壁で仕切られている（田崎晴明氏の解説記事²⁾の1ページ目の図を参照）。最初、左右の気体は同じ温度にあるとする。断熱壁の中央に小さな穴をあけ、そこに開閉できる扉を付ける。ここで、扉の付近に来た分子の速さを測定し、その結果に基づいて扉を開閉することを考えよう。これを行うのが「デーモン」である。デーモンは平均速度よりも速い分子が左から来た場合と、遅い分子が右から来た場合だけに、小さな扉を開ける。それ以外の場合は扉を閉めておく。これを繰り返すと、次第に箱の右側に速い分子が集まり、左側に遅い分子が集まる。こうして長い時間が経つと、右側の気体が高温に、左側の気体が低温になり、温度差が生まれる。この過程でデーモンは分子の速度を観測して扉を開け閉めしただけなので、気体は外界と熱や仕事をやりとりしていない。にもかかわらず、気体に温度差が作りだされたのである。このような操作は熱力学第二法則と矛盾しないのか、矛盾しないとしたらなぜか—これがマクスウェルのデーモンが提起した問題である。

デーモンの働きを抽象化して、何が本質的なのかを考えてみよう。デーモンはまず、測定によって、分子の速度に関する「情報」を得ている。そして測定結果に基づいて、扉を開けるか閉めるかを決めている。このように測定して情報を取得し、測定結果に応じて制御方法（いまの場合は扉の開け閉め）を決めることは、一般に「フィードバック

制御」と呼ばれる。フィードバック制御は、物理学の実験装置から家庭の洗濯機まで広く用いられている。一方ここでデーモンの働きにとって重要なのは、熱ゆらぎのレベル（ここでは分子一つ一つの速度を見分けるレベル）で熱力学系を測定し、得られた情報を扉の開け閉めの決定に使うというフィードバック制御によって、系の熱力学変数（ここでは系の温度）を変化させているという点にある。このように、熱力学系に対するフィードバック制御において、デーモンが測定で得た「情報」が決定的に重要な役割を果たす。

このような背景のもとで、我々は熱力学に新しい要素—情報—を取り入れる研究を行ってきた。³⁻⁶⁾ 熱力学に情報を取り入れることの重要性は、以下の二点にある。

第一は、熱・統計力学の原理に関わる、基礎物理の問題として興味深いことである。我々は、情報理論と近年の非平衡統計力学の理論を組み合わせるにより、フィードバック等の情報処理を含む過程に適用できるように熱力学第二法則等を拡張した。^{3,5)} さらにそれらは最近実験的に検証された。⁶⁾ 我々の導いた結果は、熱力学量と情報量が対等に扱われる形に熱力学第二法則を一般化したものになっており、いわば「情報熱力学」の第二法則と呼ぶものになっている。

第二は、微小な熱力学系を制御する際に要するエネルギーコストなどを、情報熱力学によって明らかにできる点にある。ここで微小な熱力学系とは、常温の水中における単一高分子・単一コロイド粒子や、低温だが熱的な環境下にある量子ドットのような、巨大な熱浴と接触したマイクロ系である。1990年代以降の非平衡統計力学の進歩により、このような微小系における熱力学が理論的にも実験的にも注目されている。⁷⁾ 近年では $k_B T$ のオーダーで熱や仕事の収支を計測することができるばかりでなく (T は熱浴の温度、 k_B はボルツマン定数)、人工的に微小なデバイスや「ナノマシン」⁸⁾ を作製し、情報処理を行うことが可能になってきている。そのような系においてフィードバック制御や情報処理を行う際には、熱力学的な制約が無視できなくなると考えられる。

2. シラード・エンジンと情報熱機関

マクスウェルデーモンのシンプルで定量的なモデルとし

* 京都大学基礎物理学研究所兼務。

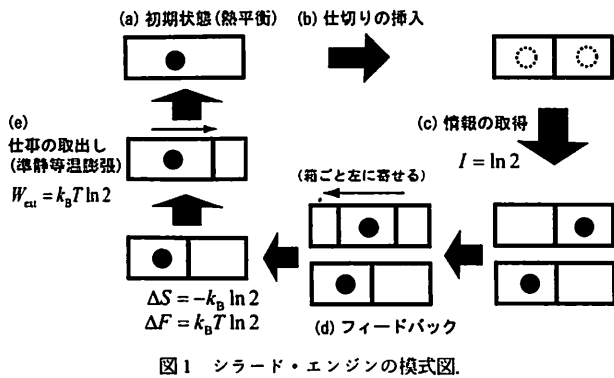


図1 シラード・エンジンの模式図。

て、図1に示すような一分子熱機関を考えよう。これは1929年にレオ・シラード (Leo Szilard) によって提案されたので、シラード・エンジンと呼ばれている。¹⁾

シラード・エンジンの具体的な動作は以下のとおりである。(a) まず一分子気体が温度 T の熱浴に接しており、熱平衡状態にある。(b) 箱の中央に厚さを無視できる仕切りを入れる。この段階では、飛び回っていた分子は左右どちらにあるのか分からない。なお古典系の場合には、この仕切りの挿入に仕事は必要ないことが示せる。(c) 左右どちらに分子があるかをデーモンが測定する。このときに得られる情報量は「右」か「左」かの $1 (= \log_2 2)$ ビット (自然対数で表すと $\ln 2$ ビット) である。(d) 測定結果が「右」の場合には、右側の箱を準静的に左に寄せる (理想的には、この操作にも仕事は必要ない)。「左」の場合には何もしない。このときに、「右」か「左」かの測定結果に応じて操作を変えていることが、フィードバック制御を意味している。(e) 分子が入っている箱を最初の状態まで、等温準静的に膨張させる。この過程で取り出される仕事は、圧力を体積で積分することにより $k_B T \ln 2$ であることが分かる。こうして系は初期状態に戻る。

上記の過程で、デーモンは等温サイクルから正の仕事を取り出したように見える。ここで重要なのは、(b) から (d) のプロセスで、 $\Delta S = -k_B \ln 2$ だけ系のエントロピーが減少していることである。 $\ln 2$ の情報を使って $\Delta S = -k_B \ln 2$ だけ物理的エントロピーを減少させ、そのことによって増大した自由エネルギー $\Delta F = k_B T \ln 2$ を (e) で仕事に変えたことになる。その結果として、測定で得た情報量 $\ln 2$ と、取り出した仕事量 $k_B T \ln 2$ が、 $k_B T$ を比例定数として比例している。

情報とフィードバックの関係をもう少し詳しく見てみよう。測定で $\ln 2$ の情報を得たということは、(c) の測定直後の状態において測定結果と分子の位置 (左右) が完全に相関していることに対応している。しかしフィードバック (d) のあとでは、この相関が失われ、気体は測定結果に依存しない状態になっている。しかも初期状態に比べて箱の体積がちょうど半分になり、エントロピーがフィードバックで減少している。すなわち、測定で取得した情報 (相関) をリソースとして、フィードバック制御によって、物理的

エントロピーを (従来の熱力学とは違った方法で) 減少させたのである。その結果として、等温サイクルにもかかわらず正の仕事を取り出した。いわば、情報 (次節で議論する相互情報量) が熱力学的エネルギー (仕事あるいは自由エネルギー) に変換された、と言える。このように、情報を使ってエネルギー収支を制御する熱機関を、「情報熱機関」と呼ぶことにする。

3. 一般化第二法則と一般化ジャルジンスキー等式

このような情報とエネルギーの関係は、より一般的に成立する。それを定式化するために鍵となるのが、シャノン情報量と相互情報量である。測定によって結果 y が確率 $p(y)$ で得られるとき、シャノン情報量は $H := -\sum_y p(y) \ln p(y)$ と定義される。一方、被測定系の位相空間点を x として、 x と y の結合確率分布を $p(x, y)$ とすると、相互情報量は $I := \sum_{x,y} \ln p(x, y) \ln [p(x, y)/p(x)p(y)]$ と定義される。ここで $p(x) = \sum_y p(x, y)$ 、 $p(y) = \sum_x p(x, y)$ である。相互情報量は測定で得られた実質的な情報量を表しており、次の不等式が成立する: $0 \leq I \leq H$ 。被測定系の状態と測定結果の相関が完全なとき (測定に誤差がないとき) に右側の等号が成立し、相関のないとき (測定が被測定系に関する情報をもたらさないとき) に左側の等号が成立する。シャノン情報量が「測定結果のばらつき」を表しているのに対し、相互情報量は「測定結果と被測定系の状態との相関」を表しており、両者は定性的に異なる意味を持っている。シラード・エンジンの場合は測定に誤差がない (左右を正確に見分けられる) と仮定していたので、 $I = H = \ln 2$ である。

さて、温度 T の熱浴に接触している古典熱力学系においては、熱力学第二法則は $\Delta F - \langle W \rangle \leq 0$ と書ける。ここで W は外部パラメータを操作することで系に対してした仕事、 $\langle W \rangle$ はそのアンサンブル平均、 ΔF はヘルムホルツ自由エネルギーの増分である。すなわち熱力学第二法則は、注入した仕事よりも自由エネルギーが増えることはないことを意味している。しかし、これはデーモンが存在しない場合の法則である。我々は熱力学第二法則を、デーモンが測定とフィードバックを行う状況に拡張した^{3,5)}:

$$\langle \Delta F - W \rangle \leq k_B T I. \quad (1)$$

ここで ΔF にアンサンブル平均がかかっているのは、フィードバックの影響でこの項も確率的に変動しうるからである。

不等式 (1) が意味することは、フィードバックがある状況下では、通常の熱力学第二法則の限界よりも多くの自由エネルギーを獲得でき (あるいは多く仕事を取り出すことができ)、その上限が測定で得た相互情報量で与えられるということである。シラード・エンジンの場合は $\Delta F = 0$ 、 $\langle W \rangle = -k_B T \ln 2$ 、 $I = \ln 2$ なので、(1) の等号が達成される。

シラード・エンジンは、実は情報熱機関の普遍的な効率の上限を達成するモデルだったのである。この意味でシラード・エンジンは、熱力学におけるカルノー・サイクルに相当する基本的な役割を果たすと言える。なお、本稿では古典測定の場合について(1)を述べたが、量子測定の場合も類似の関係式を証明することができる。³⁾

さて、近年の非平衡統計力学の重要な発見の一つは、仕事 W の高次のゆらぎの効果を取り入れると、熱力学第二法則は実は等式 $\langle e^{(\Delta F - W)/k_B T} \rangle = 1$ で表現できるということである。⁹⁾ これはジャルジンスキー (Jarzynski) 等式と呼ばれ、系がカノニカル分布から出発してどのような非平衡状態をたどっても成立する。指数関数の凸性を用いることで、ジャルジンスキー等式から熱力学第二法則 $\Delta F - \langle W \rangle \leq 0$ が導かれる。

フィードバックがある状況では、ジャルジンスキー等式は次のように拡張される⁵⁾：

$$\langle e^{(\Delta F - W)/k_B T} \rangle = \gamma. \quad (2)$$

ここで γ はフィードバックの効率を表すパラメータであり、フィードバックがない場合は $\gamma = 1$ になる。パラメータ γ は、以下に述べるように、(2) の左辺とは独立に実験で直接測定できる。ある測定結果 y を得て、フィードバック・プロトコルに基づいて熱力学系を操作したとする。そのあと、それを時間反転した操作を行い、続いて系の状態をもう一度測定する。そのとき、再び y が得られる確率を $P^{\dagger}[y]$ とする (なお、運動量のように時間反転で符号を変える量を測定する場合は、 y ではなく $-y$ とする)。このとき、 $\gamma = \sum_y P^{\dagger}[y]$ が成立する。これは「ゆらぎの定理」⁷⁾ を用いて一般的に証明することができる。直観的に言うと γ は、逆操作を行ったときに系がもとの状態に戻る確率の和である。もしも操作が系の軌道を完全に決めていれば、系は y ごとに確率 1 で戻ってくるので、 γ は大きな値をとる。系にゆらぎがあり、完全にはもとの状態に戻ってこない場合は、 γ はそれよりも小さくなる。たとえばシラード・エンジンの場合は、操作の過程が二種類あり、しかもフィードバックが完全なので、 $\gamma = 2$ である。

4. 実験による情報熱機関の実現

シラード・エンジンのような情報熱機関には、80年にもわたってさまざまな理論的な考察がなされてきたが、その実験的な実現はなされていなかった。しかし最近になって、我々は情報熱機関を世界で初めて実験的に実現した。⁶⁾

図2(a)に実験装置の概略を示す。直径 287 nm のコロイド粒子の回転ブラウン運動が、勾配のついた正弦波ポテンシャル (図2(b)) を印加することで制御されている。これはいわば螺旋階段状のポテンシャルである。図2(b)に示されたように、位相の違う二種類のポテンシャルを切り替えることができる。このポテンシャルを用いたフィードバック制御のプロトコルを図2(c)に示す。粒子の位置を誤

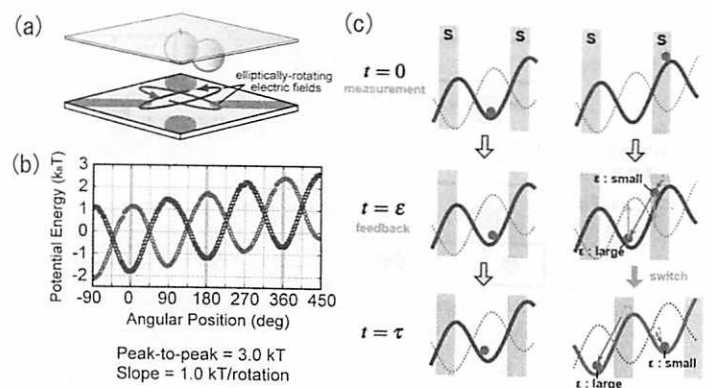


図2 実験の概略。(a) 2個の連なったポリスチレン製コロイド粒子の一方を1点でガラス表面にピン止めし、もう一方が回転ブラウン運動する系。周囲に配列された四つの電極に1 MHzの交流電場をかけることで、ポテンシャルに加えて粒子に一方方向のトルクをかけたため、測定されたポテンシャルに勾配ができています。(c) フィードバック・プロトコル。粒子の位置に応じてポテンシャルを切り替えることで、注入した仕事よりも多くの自由エネルギーを粒子に獲得させながら、ポテンシャル勾配をのぼらせる。 ϵ はフィードバックの遅れ (測定時刻とポテンシャル切り替え時刻の時間差)、 τ は1サイクルに要する時間である。

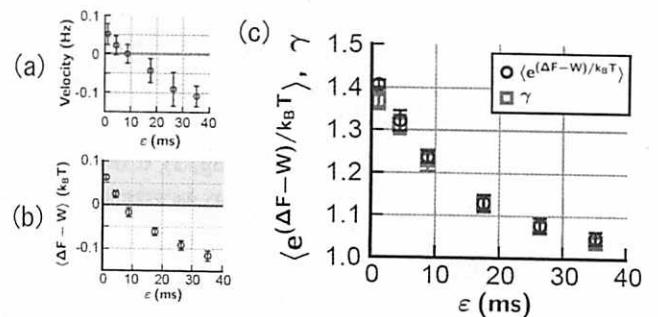


図3 実験結果の概要。(a) 粒子の速度。フィードバックの遅れ ϵ が小さいときは実際に勾配をのぼっている (速度が正である) ことが確かめられた。(b) エネルギー収支。 ϵ が小さいときは、ポテンシャルの切り替えの際に粒子が受け取った仕事 W よりも、フィードバック制御により粒子が獲得した ΔF の方が、平均して大きいことが示された。(c) 一般化ジャルジンスキー等式の検証。式(2)の左辺と、右辺のフィードバック効率 γ を、それぞれ独立に測定した。その結果、等式が高い精度で成立していることが確かめられた。

差なく測定し、粒子が領域 S に見出されたときだけポテンシャルを切り替える。このフィードバックは、左右にゆらいでいた粒子が領域 S に見出されたときに、ポテンシャルを反転させることでその付近に粒子をとどまらせる役割を果たしている。これはシラード・エンジンと類似の操作であり、測定で得られた情報を自由エネルギーに変換することで粒子は右方向に輸送され、勾配をのぼっていくものと期待される。

実験結果を図3に示す。フィードバックの遅れ ϵ が小さい領域では、粒子は注入した仕事 W よりも多くの自由エネルギー ΔF を獲得して、勾配をのぼることが確かめられた。このときのエネルギー収支は、 $\epsilon = 1.1$ ms のとき $\langle \Delta F - W \rangle = 0.062 k_B T$ であった。一方、粒子の位置の測定誤差は無視でき、一回あたりの測定で得られた情報量が $I = 0.22$ であることが測定結果のヒストグラムから分かる。したがって、相互情報量を熱力学的エネルギーに変換する効率は、理論限界(1)の約28%であることが分かる。100%でない

理由は、ポテンシャルの切り替えが準静的でないこと等である。

我々は逆操作の実験を行い、(2)の γ を計測した。それを順操作の実験で計測した $\langle e^{(\Delta F - W)/k_B T} \rangle$ と比較したのが図3(c)である。測定誤差の範囲内で両者は一致しており、一般化ジャルジンスキー等式(2)が実験で検証された。なお、図3(b)においては、 ε が大きい場合は第二法則 $\langle \Delta F - W \rangle \leq 0$ が満たされているが、図3(c)においては、すべての ε に対してジャルジンスキー等式が破れていることが分かる。これは以下のようにして理解できる。一般化ジャルジンスキー等式の指数関数の肩の上には $(\Delta F - W)/k_B T$ の形の項がある。これは第二法則を破る場合 $(\Delta F - W > 0)$ に正の値をとるので、この事象がより増幅されて見える。したがって、一般化ジャルジンスキー等式を用いると、フィードバックの効果がより顕著に表れることが分かる。

この実験の意義は、情報熱機関におけるエネルギー収支や情報量などを測定することで、 $\langle \Delta F - W \rangle$ が正の値を取り一般化ジャルジンスキー等式(2)が成立することを定量的に検証した実験であるという点にある。このことによって、情報を利用して熱浴から自由エネルギーを獲得するという、情報熱機関の原理が実証されたと言える。これが成功した要因としては、鳥谷部氏が考案した上記のポテンシャル作製技術により、きわめてクリーンなポテンシャルが実現したことが大きい。実際、世界中で広く行われているレーザーピンセットを用いた従来の方法では、この精度を達成することは困難であった。

5. デーモンと第二法則の整合性

最後に、マクスウェルのデーモンと熱力学第二法則の整合性について議論する。問題は、情報熱機関とデーモン自身の全系がサイクルをなすとき、情報熱機関が余分に獲得した自由エネルギー $k_B T I$ を何が補償するのか、ということである。歴史的には、全系がサイクルをなすにはデーモンに蓄えられた情報を消去する必要があり、その際に必ず $k_B T H$ の仕事が必要であると考えられてきた(ランダウア原理)¹⁾。ここで H はシャノン情報量である。この仕事が熱機関が余分に得た自由エネルギーを打ち消して、全体として第二法則と整合する、ということがマクスウェルのデーモンの解決であると、広く受け入れられてきた。¹⁾

しかし我々は、ランダウア原理が成り立たない反例が存在することを指摘し、情報の消去に仕事は必ずしも必要ないことを見出した。さらに、測定と情報の消去の二つのプロセスにおいて、合計で $k_B T I$ の仕事が必ずデーモン自身

に必要であることを証明した。⁴⁾ すなわち、測定や情報の消去の個々のプロセスに必要な仕事量の下限は存在せず、両者の合計だけに下限が存在することになる。また、我々が得た下限は相互情報量 I で与えられており、ランダウア原理に現れるシャノン情報量 H ではない。これは、デーモン自身に要する仕事量の起源が、測定結果のばらつきではなく、測定で得た相関にあることを示している。

このように、情報熱機関が余分に獲得したエネルギーは、デーモン自身に要する仕事によって打ち消される。にもかかわらず、熱機関が獲得したエネルギーは依然として有用である。なぜなら、フィードバックを用いれば、たとえデーモンと熱機関の間に直接的なエネルギーのやりとりがなくても、「情報」のやりとりだけを介して熱機関に自由エネルギーを獲得させることができるからである。これがまさに実験で示されたことであり、ナノマシン等に自由エネルギーを獲得させる新しいデバイス原理になることが期待される。

第4節で議論した情報熱機関は、鳥谷部祥一氏(中央大学・宗行研究室)を中心とした実験によって、宗行英朗氏(中央大学)と佐野雅己氏(東京大学)との共同研究によって実現されました。この場を借りて感謝申し上げます。

参考文献

- 1) H. S. Leff and A. F. Rex eds.: *Maxwell's demon 2: Entropy, Classical and Quantum Information, Computing* (Princeton Univ. Press, New Jersey, 2003); K. Maruyama, F. Nori and V. Vedral: *Rev. Mod. Phys.* **81** (2009) 1.
- 2) 田崎晴明: 日本物理学会誌 **66** (2011) 172.
- 3) T. Sagawa and M. Ueda: *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 080403.
- 4) T. Sagawa and M. Ueda: *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 250602; *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 189901(E).
- 5) T. Sagawa and M. Ueda: *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 090602.
- 6) S. Toyabe, T. Sagawa, M. Ueda, E. Muneyuki and M. Sano: *Nat. Phys.* **6** (2010) 988.
- 7) C. Bustamante, J. Liphardt and F. Ritort: *Phys. Today* **58** (2005) 43.
- 8) H. Gu, et al.: *Nature* **465** (2010) 202.
- 9) C. Jarzynski: *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 2690.

(2010年11月17日原稿受付)

Information Thermodynamics in Small Nonequilibrium Systems

Takahiro Sagawa and Masahito Ueda

abstract: We have derived the generalized second law of thermodynamics and nonequilibrium relations which can be applied to information processing by "Maxwell's demon." These results have recently been verified experimentally. Our results constitute fundamental principles of "information thermodynamics."