Maxwellのデーモンと情報熱力学

沙川貴大，上田正仁

1　はじめに：情報は物理的

情報は，それを蓄えるメモリ媒体に依存しない抽象的なものである．だからこそ，ウェブサーバにある情報も，光ファイバを伝わる情報も，パソコンのハードディスクに読み込まれた情報も，等価な情報と見なすことができる．情報そのものは電子や光などそれを表現する媒体とは独立に存在できる．

しかし，情報には必ず，それを実装する物理的な実体が必要である．電子や光などの物理的媒体の助けを借りることなく情報を蓄えたり送信したりすることはできない．個々の情報処理は，煎じ詰めれば物理過程なのだ．この一見自明な事実の意味するところは，実は深刻である．なぜならこれは，情報という抽象的なものを処理する上で，物理法則による制約が避けられないことを意味するからである．その一方，物理法則を積極的に活用することで，夢のような情報処理を実現する可能性も開ける．実際，量子情報科学においては，量子論特有の性質をフル活用することで，古典的には実行不可能な情報処理を実現できる [1]．情報と物理媒体，そして情報処理と物理法則の間には，不可分な関係があるのだ．Landauer はこの事情を象徴的に "Information is physical." と表現した．

本稿のテーマである情報と熱力学の関係は，熱力学的自然認識において本質的であるばかりではなく，量子制御などミクロなスケールの工学的応用においても重要性が増してきている．図1に示すように，情報の熱力学——"情報熱力学"——は量子の世界も含めて様々な研究分野と関係しており，今後研究の裾野が拡大するものと期待される．本稿ではその一端を紹介する．

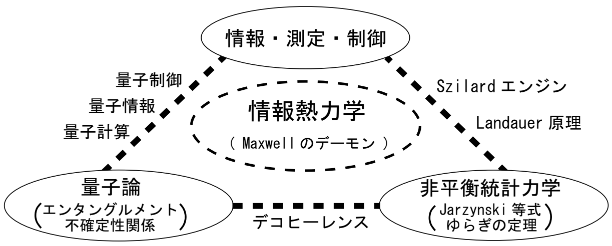

図 1: 本稿で取り上げる内容の相互関係を表わす模式図．情報熱力学は三つの領域が交わるところに位置する．Maxwell のデーモンはその中心的役割を果たす．

2　熱力学と情報

熱力学においては，エネルギーの移動の形態は二種類ある．マクロな自由度を介したエネルギーの移動 (すなわち力学的な仕事) と，着目している系と環境のミクロな自由度間のエネルギーの移動 (すなわち熱) である．たとえばピストンに入った気体分子の場合だと，マクロな自由度はピストンの壁の重心座標，ミクロな自由度は個々の気体分子の相対座標である．熱力学第二法則によれば，エネルギー移動の熱と仕事への配分の仕方には，系の詳細によらない普遍的な制約がある：

$$W_{\mathrm{ext}} \leq -\Delta F. \tag{1}$$

これは任意の等温過程で成り立つ不等式であり，W_{ext} は熱機関から取り出した仕事，ΔF はその際の Helmholtz 自由エネルギーの変化である．たとえば等温サイクルの場合は $\Delta F = 0$ なので，(1) は第二種永久機関が存在しないということを意味する．ここで (1) が不等式であることが重要だ．これは，うまくやれば (つまり準静

的に熱機関を操作すれば) 取り出せるはずの仕事も，下手をすれば取り出せなくなってしまうことを意味している．取り出せなくなる理由は，マクロな自由度を通じて取り出そうとしたエネルギーがミクロな自由度に逃げてしまい，不可逆な散逸が起こるからである．このように，エネルギーの担い手である自由度を二つの階層に分けて捉えることが熱力学の特徴である．

さて，伝統的なマクロ系の熱力学系においては,「マクロ/ミクロ」という区別と,「アクセス可能/不可能」という区別は，実質的に等価である．たとえば，気体分子の相対座標にアクセスする (すなわち，それについての情報を得て制御する) ことが実質的に不可能な理由は，それがミクロだからであるというのが伝統的な熱力学の立場である.「アクセス可能/不可能」という観点からすると，不可逆な過程とは，アクセス可能な自由度からアクセス不可能な自由度にエネルギーが散逸するプロセスを意味している．しかし，もしもミクロな自由度にもアクセス出来れば，散逸したものを元の状態に戻すことが出来るのではないだろうか.

たとえば，比喩的な例として,「覆水盆に返らず」という箴言がある．これを字義どおりに解釈すれば，盆から床への水の散逸が不可逆であることを述べている．しかし，もしも床にこぼれた水を一滴残らず回収することが出来れば，覆水を盆に返せる——水がひとりでに盆に戻ることはないにしても．つまり，もしもこぼれた水のすべてにアクセスできれば，水の散逸は，逆向きの操作を実行できるという意味で可逆になる．このことは一般的に

$$\text{アクセス可能/不可能} \ \Leftrightarrow \ \text{可逆/不可逆} \qquad (2)$$

と表現することができるだろう．つまり,「アクセス可能/不可能」の境界を移動することは,「可逆/不可逆」の境界を移動することでもあるのだ.

そしてその両者の間を移動することができる存在が，Maxwell が考えた “デーモン” に他ならない．デーモンは，アクセス可能な自由度と不可能な自由度の間のインターフェスの役割を果たす．この観点こそが，次節で詳しく議論するように，熱力学と情報を結びつける鍵なのだ．実際，ある自由度にアクセスするためには，その自由度についての情報を得ることが必要であり，得た情報に応じてその自由度を制御することができる．先ほどのたとえで言えば，こぼれた水の各々の位置を知った分だけ盆に返せるということになる.

「マクロ/ミクロ」は系の物理的スケールに関する概念であるのに対し,「アクセス可能/不可能」は情報論的な概念である．そして後者こそが熱力学第二法則における不可逆性の本質と結びついているのである.

3　シラードエンジン

Maxwell のデーモンの機能の本質を見事にモデル化しているのは，シラード (Szilard) エンジンである．このモデルでは，デーモンは気体分子の位置を測定してその情報を得ることで，通常の熱力学では不可能とされる操作——不可逆過程を逆行する操作——を実行する．そしてそのことによって，第二法則 (1) の上限よりも多くの仕事が取り出され，しかもその仕事量は得た情報量に比例している.

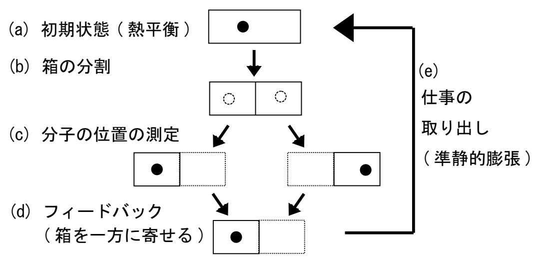

図 2: シラードエンジンの模式図.

シラードエンジンとは以下のような熱機関である．箱の中に入った一分子理想気体を考える (図 2 参照)．これは温度 T の熱浴と接触しており，箱の壁は透熱壁とする．(a) 最初，気体分子は熱平衡状態にあり，箱の中をランダムに飛び回っている．(b) 箱の中央に (厚さの無視できる) 仕切りを入れ，箱を二つに分ける．その結果，分子は等確率で左右どちらかの箱に入るが,

どちらに入っているかは分からない．(c) ここでデーモンが登場し，どちらの箱に分子が入っているかを測定する．このときデーモンは，ちょうど 1 ビット (自然対数で $\ln 2$ ナット) の情報を得る．(d) 次にデーモンは，右側の箱に分子が入っていたときには，それを準静的に左に寄せる (理想的には，この操作は仕事を必要としない)．左側の箱に入っていたときは何もしない．こうすると，デーモンの登場前と比べて箱の体積がちょうど半分になっていて，しかも測定結果に依存しない状態になっている．(e) 最後に箱を準静的に膨張させ，最初の大きさに戻す．このとき，分子が箱の壁を押すことで外部にする仕事は $k_{\rm B}T\ln 2$ になる．

以上の過程において，一見すると，等温サイクルであるにもかかわらず (すなわち，シラードエンジンの始状態と終状態が同じであるにもかかわらず) 正の仕事 $k_{\rm B}T\ln 2$ を取り出せている．したがってデーモンは，熱力学第二法則 (1) と矛盾しているように見える．これは熱力学第二法則の根幹に関わるパラドックスであり，多くの議論を巻き起こしてきた [2].

現在では，デーモンは熱力学第二法則と矛盾しない——すなわち物理法則はデーモンの存在を許容している——と考えられている．現在一般的に受け入れられているパラドックスの解決策は Bennett によるものである．いわゆる Landauer の原理によると，デーモンが測定で得てメモリに蓄えた情報を消去する (つまり，デーモンのメモリを初期化する) ときに，必ず $k_{\rm B}T\ln 2$ 以上の熱が散逸し，それと同量の仕事が必要である．この仕事がシラードエンジンから取り出した仕事を打ち消してしまい，エンジンとデーモンを合わせたサイクルからは正の仕事を取り出せないというのが Bennett のロジックである[1]．

そこで，改めてシラードエンジンを振り返ってみると，デーモンはエンジンから 1 ビット ($\ln 2$ ナット) の情報を得て，それを使ってエンジンを操作することで，結果的に通常の熱力学の制約 (1) よりも $k_{\rm B}T\ln 2$ だけ多くの仕事を取り出している．これを標語的に言えば，

$$1\,\text{ビットの情報} \iff k_{\rm B}T\ln 2\,\text{の仕事} \tag{3}$$

ということになる．つまり，1 ビット情報は $k_{\rm B}T\ln 2$ の仕事のリソースとしての役割を果たしているのだ．

シラードエンジンにおける図 2 の (b) から (d) までの過程は，ちょうど自由膨張 (拡散) の逆になっていることに注意しよう．仕事なしで気体の体積が二倍になる自由膨張のちょうど逆の操作，つまり仕事なしで体積を二分の一にする操作を，デーモンは行っている——自由膨張は本来不可逆であるにもかかわらず，である．デーモンは，情報を得てそれを使って制御を行うことで，不可逆過程の逆過程を可能にしたことになる．このようにシラードエンジンは，(2) に示されたアクセス (不) 可能性と (不) 可逆性の同等性の好例となっている．

4 微小系の非平衡統計力学

シラードエンジンは思考実験上のミクロな熱機関である．一方で近年，高分子一個や微小ビーズのようにミクロな (あるいはメソスコピックな) 熱力学系を，実際に測定・制御する技術が発達している．たとえば DNA 一分子をレーザーで制御して (たとえば一端を固定してもう一方の端を引っ張って)，$k_{\rm B}T$ のオーダーの微小な仕事を測定し，DNA 分子一個の自由エネルギーを知ることができる．

このような微小な熱力学系においては,「マクロ/ミクロ」という区別はあまり意味がなく,「アクセス可能/不可能」という区別が本質的に重要である．というのも，このような系においては，関連するすべての自由度がそもそもマクロではないからだ．DNA を例にとると，アクセス可能な自由度とは DNA 鎖の長さ，不可能な自由度とは DNA を構成する個々の原子の相対座標である．

ところで，19 世紀以来，マクロ系の熱力学は経験則として揺るぎない地位を確立してきた．

[1]本稿の著者は必ずしもこれに同意していない．しかし，このことは以下の議論の本筋には影響しない．

しかし最近になって微小系も熱力学的に扱えるようになった．そもそもこのような微小系でもマクロ系と同じ熱力学が成り立つかどうかは，実は自明なことではない．一つの問題は，微小系においても (デーモンがいなければ) 熱力学第二法則 (1) が成り立つか否かということである――もしも成り立たないのであれば，デーモンによる第二法則の破れを一分子気体で議論することの意味を，再考する必要が生じるだろう．

1990 年代以降の非平衡統計力学の発展により，微小系における熱力学第二法則のあるべき姿が明らかになってきた．その重要な成果の一つは，熱力学第二法則がわずかな確率で破れることを明らかにし，その確率も特定したことである．それを見るために，(1) の両辺の差を温度で割った量を導入し，$\sigma \equiv (k_{\rm B}T)^{-1}(-\Delta F - W_{\rm ext})$ とおこう．σ はエントロピー生成という意味をもっている．これが負の値 $-\sigma$ になる確率 $\Pr(-\sigma)$ は，正の値 $+\sigma$ になる確率 $\Pr(+\sigma)$ よりも，およそ $e^{-\sigma}$ だけ小さい:[2]

$$\Pr(-\sigma) \approx \Pr(+\sigma) e^{-\sigma}. \tag{4}$$

マクロな系では σ がアボガドロ数のオーダーになるため $e^{-\sigma}$ は事実上ゼロになり，エントロピー生成が負になる場合は実際には観測できない．しかし微小系では，エントロピー生成が負になる場合が実験で観測され，その確率は理論の予言と一致した．(4) のタイプの等式はゆらぎの定理 (fluctuation theorem) と呼ばれている [3]．それは平衡から遠く離れた系でも系の詳細によらず普遍的に成り立つという著しい性質を持っている．

ところで，上述のように，エントロピー生成が負になる確率は非常に小さい．そのため，あらゆる場合についての平均を考えると，平均エントロピー生成は正になることが証明できる．この意味においては，熱力学第二法則は，微小系でも成立する――不等式 (1) は，微小系でも，デーモンがいなければ平均値の意味では決して破れないのだ．

結局，デーモンが伝統的な熱力学第二法則を破るということの本当の意味は，可能なすべての場合についての期待値で比較してもなお (1) よりも多くの仕事を取り出せるということである．デーモンによる第二法則の破れは，ゆらぎの定理が主張する確率的破れとは，物理的起源が異なる．情報が関わっているのは前者だ．

なお，微小系における $k_{\rm B}T$ のオーダーの仕事は，デーモンがシラードエンジンから取り出せる仕事と同じオーダーである．微小な熱力学系において，デーモンを実験的に実現・検証する可能性が開かれつつある．それは，情報や制御といった概念を取り込んだ微小系の熱力学を構築するための一歩となるかもしれない．

5 量子デーモン

さて，4 節までは古典系の話であったが，次に量子系におけるデーモンを議論する．量子デーモンは，古典デーモンに類似の，あるいは量子系に特有の，様々な性質をもっている．たとえば，古典デーモンが熱ゆらぎを小さくすることと対応して，量子デーモンは量子ゆらぎを小さくすることが出来る．

ここでは原子集団のスピンを操作する量子デーモンを考えよう (図 3 を参照)．最初，原子集団のスピンは z 方向に偏極して，$\hat{S}_z|\phi\rangle = \hbar S|\phi\rangle$ を満たす量子状態 $|\phi\rangle$ にあるとする (S はスピンの大きさ)．これに対して，以下のようにして，原子スピンの x 方向成分 $\hat{S}_x$ のゆらぎを小さくすることを考える (これはスピン・スクイジングと呼ばれている)．まず $\hat{S}_x$ を量子測定すると，量子測定に伴う波動関数の収縮の効果によって，測定値の付近にゆらぎが集中する．正の測定値 $(S_x > 0)$ が出たときは，磁場をかけて反時計回りスピンをまわし，中央に持ってくる．逆に負の測定値 $(S_x < 0)$ が出たときは，時計回りにスピンをまわし，やはり中央に持ってくる．ここで測定結果に応じた操作を行っていることに注

[2] これを正確に述べるには，時間反転したミクロな経路を導入し，経路ごとのエントロピー生成を定義する必要があるが，本稿では省略する．

意しよう．この操作によって，平均的な位置は変化せず，スピンの $\hat{S}_x$ 成分のゆらぎをせばめていることが分かる．

ところで，量子力学においては不確定性原理が存在する——いまの場合は $\Delta S_x \Delta S_y \geq \hbar S/2$ である．そのため，$\hat{S}_x$ のゆらぎを小さくした代償として，$\hat{S}_y$ のゆらぎは広がってしまう．これは，量子測定によって系が不可避に撹乱されたことの結果であるとも理解できる．このような測定の反作用は，量子デーモンに特有の性質である．

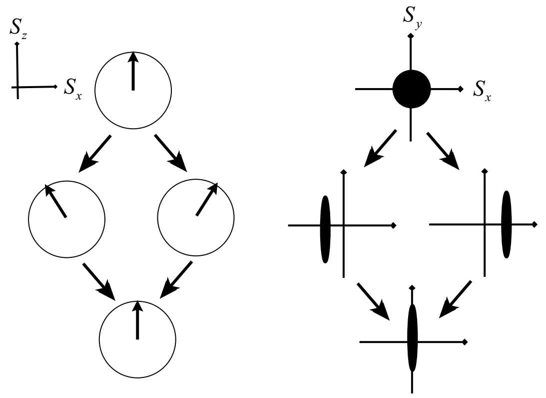

図 3: 量子デーモン (量子フィードバック制御) によるスピン・スクイジングの模式図．左側の図は S_x-S_z 平面で見たスピンの平均的な方向を，右側の図は S_x-S_y 平面で見たスピンの量子ゆらぎを表している．

シラードエンジンの場合を思い出すと，分子が右にあれば左によせることで，デーモンは熱ゆらぎの幅 (箱の左右の幅) を小さくしていた．図 2 と図 3 を比較すると，量子デーモンはこれと本質的に同じ操作を量子的に行っていることがわかる．

実は上記の量子デーモンは,「量子フィードバック制御 (quantum feedback control)」のシンプルな例になっている．量子フィードバック制御は，古典的な制御工学の量子系への拡張として Belavkin によって 1980 年ごろに提唱され，量子系を制御するための重要な手法として近年注目を集めるようになってきた．量子フィードバック制御の特徴は，所望の非ユニタリー操作を高い精度で実行できることである (一方，フィードバックを使わなければ，非ユニタリーな操作は確率的にしか成功しない)．スピン・スクイジングの例からわかるように，量子デーモンはまず対象とする系に対して量子測定を行う．そしてその測定結果に応じた量子操作を行う．ここで「測定結果に応じた」というところが，フィードバック制御たる所以である．

本節では量子フィードバック制御を中心に扱ったが，他にも量子情報科学とデーモンの交流は深まっている [4]．

6　情報熱力学の第二法則

最後に，デーモンによる操作を含んだ形に一般化された熱力学第二法則を紹介する．デーモンが熱力学系に対して測定を行い，測定結果 k を確率 p_k で得て，その結果を使って，(k に依存する) フィードバック制御を行ったとする．このような状況でデーモンが系から取り出せる仕事が熱力学第二法則 (1) を超え得るということはシラード以来知られていたが，最近その上限が決定された．それは

$$W_{\mathrm{ext}} \leq -\Delta F + k_{\mathrm{B}} T I \qquad (5)$$

という不等式で与えられる [5]．ここで I は測定でデーモンが得た相互情報量であり[3]，その上限は Shannon 情報量 $H \equiv -\sum_k p_k \ln p_k$ で与えられる ($0 \leq I \leq H$) [6]．$I = H$ は測定に誤差がない場合，$I = 0$ となるのは測定で情報が得られない場合に相当している．

不等式 (5) の等号は，操作が準静的で，かつフィードバック後の状態が測定結果 k に依存しないときに成立する．シラードエンジンはこの条件を満たしている．実際，$I = H = \ln 2$ なので，シラードエンジンは等号を達成していることが分かる．古くから知られていたデーモンのモデルは，実は最大限の能力を持ったデーモンだったのである．この意味において，情報と仕

[3]測定が量子的な場合は，一般化された相互情報量になる．

事を結びつける (3) の関係が，(シラードエンジン以外の) 一般的な状況でも，定量的に確立されたことになる．

古典的な熱機関は熱の一部を仕事に変換し，可逆なカルノーサイクルがその変換効率の上限を達成する．これに対して，デーモンが操作する熱機関は，情報を仕事に変換するいわば情報熱機関である．シラードエンジンはその変換効率の上限を達成するという意味で，古典的な熱機関におけるカルノーサイクルと同様の，基本的な役割を果たしていると言える．

通常の熱力学では，「ここで測定とフィードバックをしましょう」という状況は想定しない．もしそのようなセットアップを考えるなら，熱力学第二法則 (1) を (5) に変更する必要が生じる．実際，不等式 (5) は，熱力学第二法則 (1) を，情報を表わす変数 I を明示的に含む形に一般化したものになっている．かつてはパラドックスの元凶だと思われていたデーモンは，実は，情報熱力学の第二法則とも呼ぶべき (5) の立役者だったのである．

7　おわりに

情報熱力学においては，デーモンはもはやパラドックスの元凶ではなく，ミクロな世界における情報処理の「デバイス」としての機能を果たす．デーモンは情報を利用することで従来の熱力学第二法則 (1) を破る操作も実行でき，さらにまた，私達が熱力学第二法則の基礎を深く理解する一助にもなるはずだ．それはあたかも古代ギリシアの daemon のように，アクセス可能な世界と不可能な世界の境界に立っている．

本稿で見てきたように，情報熱力学は，物理学だけでなく，情報理論や制御工学といった，様々な分野との関連を持っている．一般化された第二法則 (5) は，情報と熱力学が交わる広大な世界のごく一端を示しているに過ぎないと思われる．情報の物理学はまだ始まったばかりである．

参考文献

[1] 量子測定・計算・情報の標準的な入門書として M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).

[2] Maxwell のデーモンについて，古典から比較的最近の発展までを包括した論文集は， H. S. Leff, and A. F. Rex, (eds.), *Maxwell's demon 2: Entropy, Classical and Quantum Information, Computing* (Princeton University Press, New Jersey, 2003).

[3] このテーマについてのレビューは C. Bustamante, J. Liphardt, F. Ritort, arXiv: cond-mat/0511629 (2005).

[4] このテーマについてのレビューは K. Maruyama, F. Nori, and V. Vedral, arXiv: 0707.3400 (2007).

[5] T. Sagawa and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 080403 (2008).

[6] 古典情報理論についての標準的な入門書として T. M. Cover and J. A. Thomas, *Elements of Information theory* (John Wiley and Sons, 1991).

(さがわ・たかひろ，うえだ・まさひと，
東京大学大学院理学系研究科)