

## 9 章

大上由人

2024 年 6 月 22 日

### 9.1

#### 9.1.1

Maxwell の悪魔と呼ばれる思考実験について考察する。初め左右の部屋が等温である系について、粒子の測度が速いものと遅いものを区別する demon がいるとする。このとき、demon は、粒子の速いものを一方の部屋に、遅いものをもう一方の部屋に分けることができる。そうすると、最終的に左右の部屋の温度が異なる状態になり、系のエントロピーが減少すると思われる。

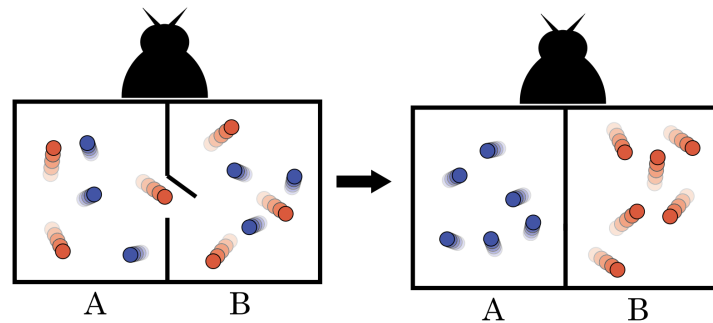


図 1 Maxwell の悪魔

#### 9.1.2

Maxwell の悪魔を単純化したものとして、シラードエンジンとよばれる等温サイクルを考察する。シラードエンジンの過程は以下の通りである。

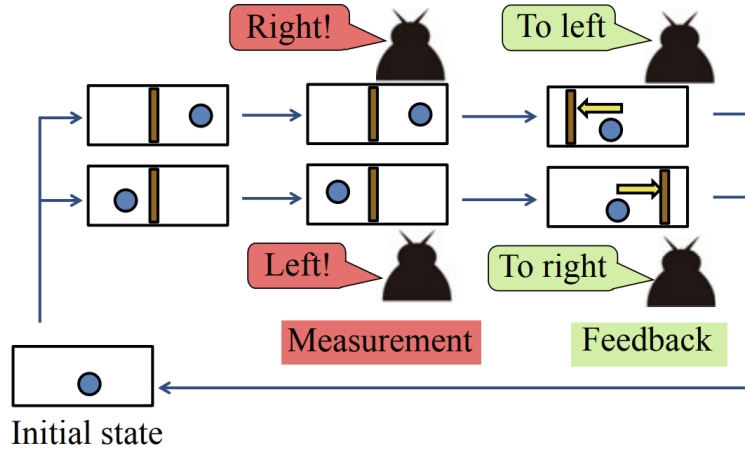


図2 Szilard engine

着目系は1粒子理想気体であるとする。過程は以下の通りである。

1. 粒子が容器全体に存在し得る状態から始める。
2. demon が、系にしきりを入れる。このとき、粒子は左右のどちらかに入り、demon は、粒子がどちらにいるかを確認する。(measurement)
3. 粒子のない方向にしきりを動かす。(feedback)
4. 壁を取り除く (初期状態に戻る)。

このとき、3つ目の過程で仕事を取りだすことができる。とくに、系のちょうど半分にしきりを設けると、この仕事は、

$$W_{\text{ext}} = \int_{\frac{V}{2}}^V P dV = \int_{\frac{V}{2}}^V \frac{kT}{V} dV = kT \log 2 \quad (0.1)$$

となる。この結果は、一見すると、マクロ系の熱力学における Kelvin の原理に反するように思える。<sup>\*1</sup> Szilard は、測定過程を熱機関と測定装置を結び付ける過程と考え、feedback 過程をその結びつきを消費するものとして考えた。それを踏まえて、熱力学第二法則に反しないためには、測定によるエントロピー生成が以下の不等式を満たす必要があると考えた:

$$e^{-\frac{\bar{S}_1}{k}} + e^{-\frac{\bar{S}_2}{k}} \leq 1 \quad (0.3)$$

ここで、 $\bar{S}_1$  は、粒子が領域 1 にいるときの平均エントロピー生成、 $\bar{S}_2$  は、粒子が領域 2 にいるときの平均エントロピー生成である。

<sup>\*1</sup> Kelvin の原理は、任意の等温サイクルにおいて、

$$W_{\text{ext}} \leq 0 \quad (0.2)$$

であるという原理であった。

### (0.3) 式の導出

$p_i = \frac{V_i}{V}$  を粒子が領域  $i$  にいる確率とする。初め、粒子は容器の全体に存在し得るので、エントロピーは

$$k \log V + \text{const.} \quad (0.4)$$

である。同様に粒子が領域 1, 2 にいるときのエントロピーは、それぞれ、

$$S_1 = k \log V_1 + \text{const.} \quad (0.5)$$

$$S_2 = k \log V_2 + \text{const.} \quad (0.6)$$

である。よって、系の平均エントロピー変化は、

$$\bar{s} = p_1 k (\log V_1 - \log V) + p_2 k (\log V_2 - \log V) \quad (0.7)$$

$$= k (p_1 \log p_1 + p_2 \log p_2) \quad (0.8)$$

となる。また、測定による平均エントロピー生成は、

$$\bar{S} = p_1 \bar{S}_1 + p_2 \bar{S}_2 \quad (0.9)$$

である。全系についての熱力学第二法則は、

$$\bar{S} + \bar{s} = p_1 \bar{S}_1 + p_2 \bar{S}_2 + k (p_1 \log p_1 + p_2 \log p_2) \geq 0 \quad (0.10)$$

である。ここで、左辺を最小化することを考える。これは、ラグランジュの未定乗数法を用いて、

$$p_1 \bar{S}_1 + p_2 \bar{S}_2 + k (p_1 \log p_1 + p_2 \log p_2) + k \lambda (1 - p_1 - p_2) \quad (0.11)$$

を最小化することと等価である。 $p_1, p_2, \lambda$  についてそれぞれ偏微分すると、

$$\bar{S}_1 + k \log p_1 - k + k \lambda = 0 \quad (0.12)$$

$$\bar{S}_2 + k \log p_2 - k + k \lambda = 0 \quad (0.13)$$

$$1 - p_1 - p_2 = 0 \quad (0.14)$$

となる。これを変形して、

$$p_1 = \exp\left(\lambda - \frac{\bar{S}_1}{k}\right) \quad (0.15)$$

$$p_2 = \exp\left(\lambda - \frac{\bar{S}_2}{k}\right) \quad (0.16)$$

となる。これを用いて、

$$\lambda e^\lambda (e^{-\frac{\bar{S}_1}{k}} + e^{-\frac{\bar{S}_2}{k}}) \geq 0 \quad (0.17)$$

となる。これより  $\lambda \geq 0$  であることがわかる。ここで、

$$p_1 + p_2 = \exp\left(\lambda - \frac{\bar{S}_1}{k}\right) + \exp\left(\lambda - \frac{\bar{S}_2}{k}\right) = 1 \quad (0.18)$$

より、

$$e^{-\frac{\bar{s}_1}{k}} + e^{-\frac{\bar{s}_2}{k}} = e^{-\lambda} \leq 1 \quad (0.19)$$

となる。よって、(0.3) 式が導かれる。  $\square$

### 具体的なメモリの導入

Szilard は、(0.3) 式を満たすようなメモリも導入した。以下ではその概要を見る。

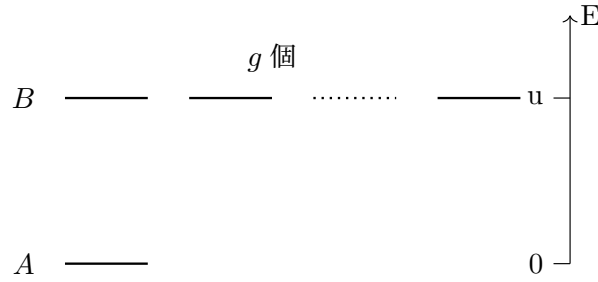


図3 メモリのエネルギー準位

図3のような系を考える。1つのエネルギー準位が0であり、他の  $g$  個のエネルギー準位が  $u$  であるとする。エネルギーが低い準位、高い準位をそれぞれ A,B とする。初期状態における温度を  $T_0$  とする。系の状態が  $x = 1, 2$  のとき、メモリの温度を  $T_A, T_B$  とする。ただし、 $T_A < T_0 < T_B$  であるとする。

このとき、メモリの平均エネルギーは、

$$\bar{u}(T) = uq(T) = \frac{uge^{-\frac{u}{kT}}}{1 + ge^{-\frac{u}{kT}}} \quad (0.20)$$

である。このとき、測定によるエントロピー生成とメモリ消去によるエントロピー生成の合計は、

$$S_i = \frac{\bar{u}(T_i) - \bar{u}(T_0)}{T_0} + \int_{T_i}^{T_0} \frac{1}{T} \frac{d\bar{u}(T)}{dT} dT \quad (0.21)$$

である。第一項がメモリ消去、第二項が測定によるエントロピー生成である。これを整理すると、

$$S_i = k \left( q(T_i) \log \frac{q(T_i)}{q(T_0)} + p(T_i) \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \right) \quad (0.22)$$

となる。ただし、

$$q(T) = \frac{1}{1 + ge^{-\frac{u}{kT}}} \quad (0.23)$$

$$p(T) = \frac{ge^{-\frac{u}{kT}}}{1 + ge^{-\frac{u}{kT}}} \quad (0.24)$$

である。

(0.3 式の導出)

$$S_i = \frac{\bar{u}(T_i) - \bar{u}(T_0)}{T_0} + \int_{T_i}^{T_0} \frac{1}{T} \frac{d\bar{u}(T)}{dT} dT \quad (0.25)$$

$$= \frac{\bar{u}(T_i) - \bar{u}(T_0)}{T_0} + \int_{T_i}^{T_0} \left( \frac{d}{dT} \left( \frac{\bar{u}(T)}{T} + k \log(1 + ge^{-\frac{u}{kT}}) \right) \right) dT \quad (0.26)$$

$$= \frac{\bar{u}(T_i) - \bar{u}(T_0)}{T_0} + \left( \frac{\bar{u}(T_0)}{T_0} + k \log(1 + ge^{-\frac{u}{kT_0}}) \right) - \left( \frac{\bar{u}(T_i)}{T_i} + k \log(1 + ge^{-\frac{u}{kT_i}}) \right) \quad (0.27)$$

$$= \bar{u}(T_i) \left( \frac{1}{T_0} - \frac{1}{T_i} \right) + k \log \frac{1 + ge^{-\frac{u}{kT_0}}}{1 + ge^{-\frac{u}{kT_i}}} \quad (0.28)$$

$$= q(T_i) \left( \frac{u}{T_0} - \frac{u}{T_i} \right) + k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad \because \frac{1}{p(T)} = 1 + ge^{-\frac{u}{kT}} \quad (0.29)$$

$$= q(T_i) \left( -k \log \frac{q(T_0)}{p(T_0)} \right) + k \log \frac{q(T_i)}{p(T_i)} + k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad (0.30)$$

$$= q(T_i) k \log \frac{p(T_0)}{q(T_0)} \frac{q(T_i)}{p(T_i)} + k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad (0.31)$$

$$= q(T_i) k \log \frac{q(T_i)}{q(T_0)} - q(T_i) k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} + k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad (0.32)$$

$$= q(T_i) k \log \frac{q(T_i)}{q(T_0)} + p(T_i) k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad \because p(T) + q(T) = 1 \quad (0.33)$$

$$= k \left( q(T_i) \log \frac{q(T_i)}{q(T_0)} + p(T_i) \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \right) \quad (0.34)$$

により、(0.3) 式が導かれる。 □

これの極限を考える。  $T_A \rightarrow 0, g \rightarrow \infty$  とすると、  $p(T_A) = q(T_B) = 1, p(T_B) = q(T_A) = 0$  となる。 よって、

$$S_A = -k \log p(T_0) \quad (0.35)$$

$$S_B = -k \log q(T_0) \quad (0.36)$$

となる。これは、(0.3) 式の等号が成り立つときのエントロピー生成である。

### 9.1.3

Brillouin、Gabor の議論についてみる。

Brillouin は、光を用いて粒子の位置を測定することを考えた。光が粒子に当たると光が散乱し、そのエネルギーが熱に変わる。測定結果を見るには  $h\nu \gg kT$  である必要がある。(背景輻射との区

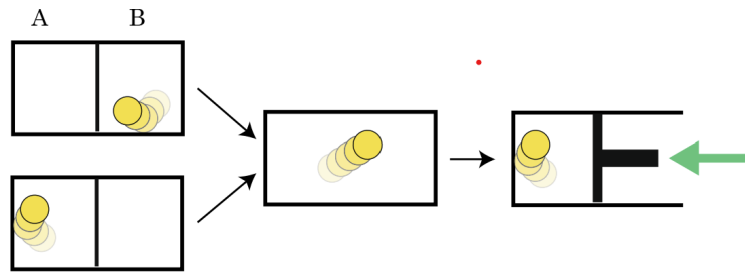


図 4 Landauer の原理

別をするため。) このとき、測定過程におけるエントロピーが、feedback 過程で取り出される仕事よりも大きくなることを主張した。

また、Gabor も光を用いて粒子の位置を測定することを考えた。

箱の中に単一の粒子が入っている。ある  $X > 1$  を固定し、粒子が箱の底の  $\frac{1}{X}$  の範囲にいるかどうかを考える。粒子がこの領域の中に入っていたら、箱の底と上側とを分離する壁を挿入する。壁が挿入されると、粒子のエントロピーは  $kT \log X$  だけ減少する。Gabor は、この測定には少なくとも  $\frac{X}{2}$  個の光子が必要であると考えた。このとき、 $\frac{Xh\nu}{2}$  以上のエネルギーが散乱される (これは、エントロピーによる利得  $kT \log X$  よりもはるかに大きい)。

#### 9.1.4

Landauer および Bennett の議論についてみる。彼らは、メモリー消去にかかるコストに注目した。

メモリー消去は、消去前の状態によらず、一意な状態になる。このとき、シャノンエントロピーが減少する。シャノンエントロピーが減少することが熱放出と結びついていると考えた (Landauer の原理)。

Bennett も memory 消去にかかるコストに注目した。彼は以下のような具体例を構成した。

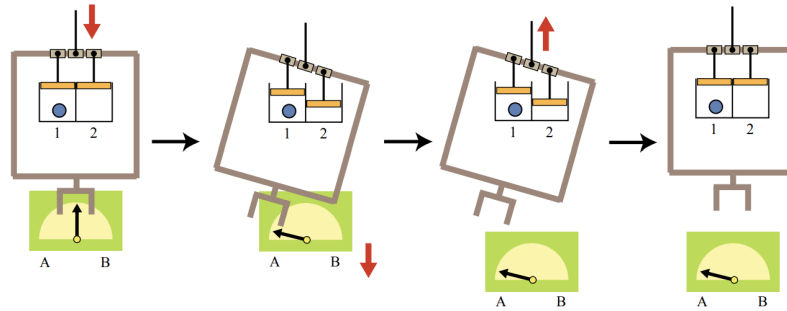


図5 Bennett の議論

1. ピストンを準静的に下げ、engine の状態を記録する。(この過程では仕事が必要)
2. メモリー消去を行い、ピストンを準静的に上げる。(この過程では、一つ前と同じだけの仕事を取り出すことができる)

これは Brillouin の議論の反例である。

### 9.1.5

Maxwell demon の問題は、engine と memory の相関が大事であり、メモリー消去が大事なわけではないということを言っている。

## 9.2

### 9.2.1

二つの確率変数の相関を測る指標として、相互情報量を導入する。

**Def: 相互情報量**

二つの確率変数  $x, y$  について、その相互情報量  $I(x, y)$  は、

$$I(x, y) = \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i, y_j)}{P(x_i)P(y_j)} \quad (0.37)$$

で定義される。

このとき、シャノンエントロピーの定義と見比べることで、

$$I(x, y) = H(x) - H(x|y) = H(y) - H(y|x) \quad (0.38)$$

であることがわかる。

( $\because$ )

定義から、

$$H(x|y) = - \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log P(x_i|y_j) \quad (0.39)$$

$$H(x) = - \sum_i P(x_i) \log P(x_i) \quad (0.40)$$

である。よって、

$$I(x, y) = \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i, y_j)}{P(x_i)P(y_j)} \quad (0.41)$$

$$= \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i|y_j)P(y_j)}{P(x_i)P(y_j)} \quad (0.42)$$

$$= \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i|y_j)}{P(x_i)} \quad (0.43)$$

$$= \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i, y_j)}{P(x_i)} \quad (0.44)$$

$$= H(x) - H(x|y) \quad (0.45)$$

である。 □

この式を見ると、相互情報量は、 $y$  の値を知ることによる、エントロピーの減少量と解釈することができる。

今、

$$I(x, y) = H(x) - H(x|y) \geq 0 \quad (0.46)$$

であるから、相互情報量は、常に非負である。とくに、 $x, y$  が独立であるとき、

$$I(x, y) = 0 \quad (0.47)$$

である。これは、 $y$  の値を知っても、 $x$  の値に関する情報が何も得られないことに対応している。

また、確率的な相互情報量も導入しておく。

**Def: 確率的相互情報量**

確率的相互情報量  $\hat{I}(x, y)$  は、

$$\hat{I}(x, y) = \log \frac{P(x, y)}{P(x)P(y)} \quad (0.48)$$

で定義される。

確率的相互情報量の期待値は、相互情報量と等しい。



### 9.2.2

$X$  と  $Y$  の複合系を考える。この節では、 $X$  のみが、 $Y$  に依存して時間発展することができ、 $Y$  は時間発展しないとする。初め、 $X$  と  $Y$  は相関があってもよいとする。

初期状態及び終状態の相互情報量を、 $I_i, I_f$  とする。また、初期状態および終状態の系  $X, Y$  のエントロピーを、それぞれ、 $S_{Xi}, S_{Yi}, S_{Xf}, S_{Yf}$  とする。

このとき、初期状態及び終状態の全系のシャノンエントロピーは、

$$S_{\text{tot},i} = S_{Xi} + S_{Yi} - I_i \quad (0.49)$$

$$S_{\text{tot},f} = S_{Xf} + S_{Yf} - I_f \quad (0.50)$$

である。

( $\because$ )

相互情報量の定義から、

$$I_i = \sum_{i,j} P_i(x_i, y_j) \log \frac{P_i(x_i, y_j)}{P_i(x_i)P_i(y_j)} \quad (0.51)$$

$$= \sum_{i,j} P_i(x_i, y_j) \log P_i(x_i, y_j) - \sum_{i,j} P_i(x_i, y_j) \log P_i(x_i) - \sum_{i,j} P_i(x_i, y_j) \log P_i(y_j) \quad (0.52)$$

$$= -S_{X\text{tot},i} + S_{Xi} + S_{Yi} \quad (0.53)$$

である。終状態についても同様である。  $\square$

このとき、全系についての熱力学第二法則は、

$$\sigma_X = \Delta S_X + \beta Q_X \geq \Delta I \quad (0.54)$$

である。この関係は、沙川-上田関係とも呼ばれる。(9.3 で導出する)

この関係は、相関の強さが変わったら、(たとえ片方が時間変化しないとしても) それに合わせて熱力学第二法則を修正する必要があるということである。シラードエンジンにおいては、 $X$  をメモリーに、 $Y$  を着目系に対応させると、この関係が成り立つことがわかる。

### 9.2.3

沙川-上田関係を用いて、シラードエンジンについて考察する。

$W$  を取り出されるエネルギーとして、エントロピー生成は、

$$\sigma = -\beta W + \Delta S \quad (0.55)$$

である。ここで、 $\Delta S$  は、エントロピーの変化である。また、測定過程のあとの相互情報を  $I_{\text{mem}}$  とする。

### 測定過程

しきりを入れたときに、A または B のどちらかに粒子が入り、メモリーのシャノンエントロピーが増加する。また、engine とメモリーの間に相関ができる。このときの沙川-上田関係は、engine が時間変化しないとして、

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_Y + \hat{I}_{\text{mem}}} \rangle = 1 \quad (0.56)$$

すなわち、

$$\sigma_Y \geq I_{\text{mem}} \quad (0.57)$$

である。

### feedback 過程

情報量が変わらないため、engine のエントロピーは変化しないのに対し、しきりを動かすため、外部に仕事を取り出すことができる。また、engine とメモリーが相関を失う。このときの沙川-上田関係は、memory が時間変化しないとして、

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_X - \hat{I}_{\text{mem}}} \rangle = 1 \quad (0.58)$$

すなわち、

$$\sigma_X \geq -I_{\text{mem}} \quad (0.59)$$

である。

### メモリーの消去

粒子がどちらにいたかの情報をリセットするので、その分メモリのシャノンエントロピーが減少する。また、メモリをもとの状態に戻すために外部から仕事をされる。このときの沙川-上田関係は、

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_Y} \rangle = 1 \quad (0.60)$$

すなわち、

$$\sigma_Y \geq 0 \quad (0.61)$$

である。

これまでの過程をまとめると、以下の図のようになる。

Measurement			Feedback			Erasure		
	X	Y		X	Y		X	Y
$W$	0	$\leq 0$	$W$	$\leq kT \ln 2$	0	$W$	0	$\leq -kT \ln 2$
$\Delta S$	0	$k \ln 2$	$\Delta S$	0	0	$\Delta S$	0	$-k \ln 2$
$\sigma$	0	$\geq k \ln 2$	$\sigma$	$\geq -k \ln 2$	0	$\sigma$	0	$\geq 0$

図6 Szilard engine

上の議論からわかるように、熱力学第二法則に修正が必要なのは、測定過程と feedback 過程である。メモリー消去の過程については、普通の熱力学と同じである。このことを踏まえると、メモリー消去を含まないようなシラードエンジンを構成することができる。このサイクルをまとめると以下ようになる。

Measurement			Feedback		
	X	Y		X	Y
$W$	0	$\leq -kT \ln 2$	$W$	$\leq kT \ln 2$	0
$\Delta S$	0	0	$\Delta S$	0	0
$\sigma$	0	$\geq k \ln 2$	$\sigma$	$\geq -k \ln 2$	0

図7 メモリー消去を含まないようなシラードエンジン

## 9.3

沙川-上田関係を導出する。

### 9.3.1

#### 設定

hoge hoge

**Def:** 沙川-上田関係

系  $X$  のエントロピー生成は以下の関係を満たす:

$$\left\langle e^{-\hat{\sigma}_X + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n}} \right\rangle = 1 \quad (0.62)$$

ただし、hoge