

9 章

大上由人

2024 年 6 月 25 日

9 情報熱力学

9.1 Maxwell の demon

9.1.1 Maxwell の demon(1)

Maxwell の demon 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ように思われる。

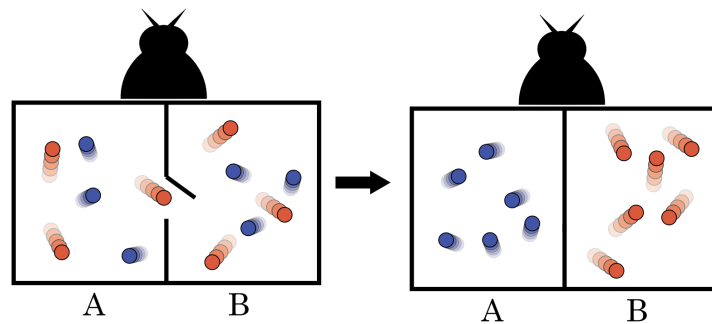


図 1 Maxwell の demon

9.1.2 Szilard engine

Maxwell の demon を単純化したものとして、シラードエンジンと呼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。

(9.3) 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

$$k \log V + \text{const.} \quad (9.4)$$

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、

$$S_1 = k \log V_1 + \text{const.} \quad (9.5)$$

$$S_2 = k \log V_2 + \text{const.} \quad (9.6)$$

である。よって、系の平均エントロピー変化は、

$$\bar{s} = p_1 k (\log V_1 - \log V) + p_2 k (\log V_2 - \log V) \quad (9.7)$$

$$= k(p_1 \log p_1 + p_2 \log p_2) \quad (9.8)$$

となる。また、測定過程において、粒子が領域 1,2 にいるときの相関付けによるエントロピー生成をそれぞれ \bar{S}_1, \bar{S}_2 とすると、その平均は、

$$\bar{S} = p_1 \bar{S}_1 + p_2 \bar{S}_2 \quad (9.9)$$

である。全系についての熱力学第二法則は、

$$\bar{S} + \bar{s} = p_1 \bar{S}_1 + p_2 \bar{S}_2 + k(p_1 \log p_1 + p_2 \log p_2) \geq 0 \quad (9.10)$$

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、

$$p_1 \bar{S}_1 + p_2 \bar{S}_2 + k(p_1 \log p_1 + p_2 \log p_2) + k\lambda(1 - p_1 - p_2) \quad (9.11)$$

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

$$\bar{S}_1 + k \log p_1 - k + k\lambda = 0 \quad (9.12)$$

$$\bar{S}_2 + k \log p_2 - k + k\lambda = 0 \quad (9.13)$$

$$1 - p_1 - p_2 = 0 \quad (9.14)$$

となる。これを変形して、

$$p_1 = \exp\left(\lambda - \frac{\bar{S}_1}{k}\right) \quad (9.15)$$

$$p_2 = \exp\left(\lambda - \frac{\bar{S}_2}{k}\right) \quad (9.16)$$

となる。これを用いて、

$$\lambda e^\lambda (e^{-\frac{\bar{S}_1}{k}} + e^{-\frac{\bar{S}_2}{k}}) \geq 0 \quad (9.17)$$

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

$$p_1 + p_2 = \exp\left(\lambda - \frac{\bar{S}_1}{k}\right) + \exp\left(\lambda - \frac{\bar{S}_2}{k}\right) = 1 \quad (9.18)$$

より、

$$e^{-\frac{\bar{S}_1}{k}} + e^{-\frac{\bar{S}_2}{k}} = e^{-\lambda} \leq 1 \quad (9.19)$$

となる。よって、(9.3) 式が導かれる。 \square

具体的なメモリーの導入

Szilard は、(9.3) 式を満たすようなメモリーも導入した。以下ではその概要を見る。

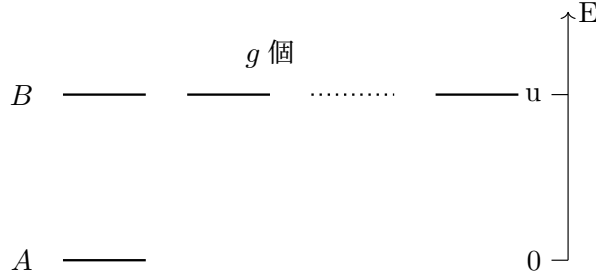


図3 メモリーのエネルギー準位

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、メモリーの温度を 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、メモリーの平均エネルギーは、

$$\bar{u}(T) = uq(T) = \frac{uge^{-\frac{u}{kT}}}{1 + ge^{-\frac{u}{kT}}} \quad (9.20)$$

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

$$S_i = \frac{\bar{u}(T_i) - \bar{u}(T_0)}{T_0} + \int_{T_i}^{T_0} \frac{1}{T} \frac{d\bar{u}(T)}{dT} dT \quad (9.21)$$

である。第一項がメモリー消去、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、

$$S_i = k \left(q(T_i) \log \frac{q(T_i)}{q(T_0)} + p(T_i) \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \right) \quad (9.22)$$

となる。ただし、

$$p(T) = \frac{1}{1 + ge^{-\frac{u}{kT}}} \quad (9.23)$$

$$q(T) = \frac{ge^{-\frac{u}{kT}}}{1 + ge^{-\frac{u}{kT}}} \quad (9.24)$$

である。

(9.22 式の導出)

$$S_i = \frac{\bar{u}(T_i) - \bar{u}(T_0)}{T_0} + \int_{T_i}^{T_0} \frac{1}{T} \frac{d\bar{u}(T)}{dT} dT \quad (9.25)$$

$$= \frac{\bar{u}(T_i) - \bar{u}(T_0)}{T_0} + \int_{T_i}^{T_0} \left(\frac{d}{dT} \left(\frac{\bar{u}(T)}{T} + k \log(1 + ge^{-\frac{u}{kT}}) \right) \right) dT \quad (9.26)$$

$$= \frac{\bar{u}(T_i) - \bar{u}(T_0)}{T_0} + \left(\frac{\bar{u}(T_0)}{T_0} + k \log(1 + ge^{-\frac{u}{kT_0}}) \right) - \left(\frac{\bar{u}(T_i)}{T_i} + k \log(1 + ge^{-\frac{u}{kT_i}}) \right) \quad (9.27)$$

$$= \bar{u}(T_i) \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T_i} \right) + k \log \frac{1 + ge^{-\frac{u}{kT_0}}}{1 + ge^{-\frac{u}{kT_i}}} \quad (9.28)$$

$$= q(T_i) \left(\frac{u}{T_0} - \frac{u}{T_i} \right) + k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad \because \frac{1}{p(T)} = 1 + ge^{-\frac{u}{kT}} \quad (9.29)$$

$$= q(T_i) \left(-k \log \frac{q(T_0)}{p(T_0)} \right) + k \log \frac{q(T_i)}{p(T_i)} + k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad (9.30)$$

$$= q(T_i) k \log \frac{p(T_0)}{q(T_0)} \frac{q(T_i)}{p(T_i)} + k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad (9.31)$$

$$= q(T_i) k \log \frac{q(T_i)}{q(T_0)} - q(T_i) k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} + k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad (9.32)$$

$$= q(T_i) k \log \frac{q(T_i)}{q(T_0)} + p(T_i) k \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \quad \because p(T) + q(T) = 1 \quad (9.33)$$

$$= k \left(q(T_i) \log \frac{q(T_i)}{q(T_0)} + p(T_i) \log \frac{p(T_i)}{p(T_0)} \right) \quad (9.34)$$

により、(9.3) 式が導かれる。^{*2} □

^{*2} 二つ目の等号で、

$$\frac{1}{T} \frac{d\bar{u}(T)}{dT} = \frac{d}{dT} \left(\frac{\bar{u}(T)}{T} + k \log(1 + ge^{-\frac{u}{kT}}) \right) \quad (9.35)$$

であることを用いた。これは計算により確かめることができ、

$$\frac{d}{dT} \left(\frac{\bar{u}(T)}{T} + k \log(1 + ge^{-\frac{u}{kT}}) \right) = \frac{1}{T} \frac{d\bar{u}(T)}{dT} - \frac{\bar{u}(T)}{T^2} + k \frac{ge^{-\frac{u}{kT}}}{1 + ge^{-\frac{u}{kT}}} \left(\frac{u}{kT^2} \right) \quad (9.36)$$

$$= \frac{1}{T} \frac{d\bar{u}(T)}{dT} - q(T) \frac{u}{T^2} + kq(T) \frac{u}{kT^2} \quad (9.37)$$

$$= \frac{1}{T} \frac{d\bar{u}(T)}{dT} \quad (9.38)$$

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

$$S_A = -k \log p(T_0) \quad (9.39)$$

$$S_B = -k \log q(T_0) \quad (9.40)$$

となる。これは、(9.3) 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 と Gabor の議論

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ため、熱力学第二法則に反しないと考えた。

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 と Bennett の議論

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。このシャノンエントロピーの減少が、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。

であることがわかる。教科書 (9.11) 式は誤植っぽい。

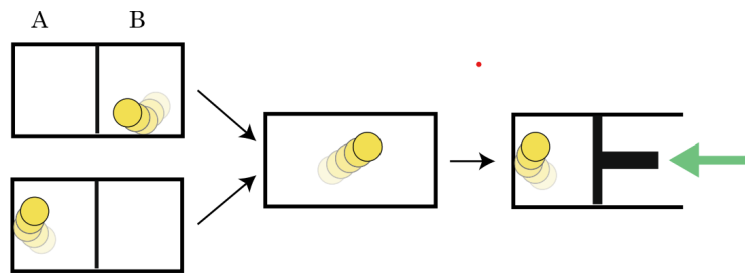


図 4 Landauer の原理

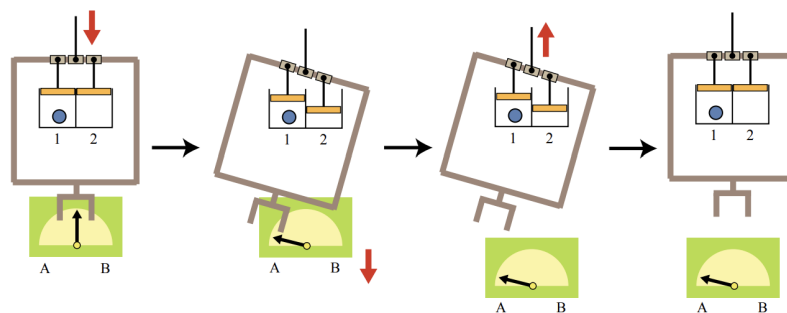


図 5 Bennett の議論

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 は解決されたか

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 情報熱力学の第二法則

9.2.1 相互情報量

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、

$$I(x, y) = \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i, y_j)}{P(x_i)P(y_j)} \quad (9.41)$$

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、

$$I(x, y) = H(x) - H(x|y) = H(y) - H(y|x) \quad (9.42)$$

であることがわかる。

(\because)

定義から、

$$H(x|y) = - \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log P(x_i|y_j) \quad (9.43)$$

$$H(x) = - \sum_i P(x_i) \log P(x_i) \quad (9.44)$$

である。よって、

$$I(x, y) = \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i, y_j)}{P(x_i)P(y_j)} \quad (9.45)$$

$$= \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i|y_j)P(y_j)}{P(x_i)P(y_j)} \quad (9.46)$$

$$= \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i|y_j)}{P(x_i)} \quad (9.47)$$

$$= \sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i, y_j)}{P(x_i)} \quad (9.48)$$

$$= H(x) - H(x|y) \quad (9.49)$$

である。 \square

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、

$$I(x, y) = H(x) - H(x|y) \geq 0 \quad (9.50)$$

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、

$$I(x, y) = 0 \quad (9.51)$$

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、

$$\hat{I}(x, y) = \log \frac{P(x, y)}{P(x)P(y)} \quad (9.52)$$

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 情報熱力学の第二法則

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、

$$S_{\text{tot},i} = S_{Xi} + S_{Yi} - I_i \quad (9.53)$$

$$S_{\text{tot},f} = S_{Xf} + S_{Yf} - I_f \quad (9.54)$$

である。

(\because)

相互情報量の定義から、

$$I_i = \sum_{i,j} P_i(x_i, y_j) \log \frac{P_i(x_i, y_j)}{P_i(x_i)P_i(y_j)} \quad (9.55)$$

$$= \sum_{i,j} P_i(x_i, y_j) \log P_i(x_i, y_j) - \sum_{i,j} P_i(x_i, y_j) \log P_i(x_i) - \sum_{i,j} P_i(x_i, y_j) \log P_i(y_j) \quad (9.56)$$

$$= -S_{X\text{tot},i} + S_{Xi} + S_{Yi} \quad (9.57)$$

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、

$$\sigma_X = \Delta S_X + \beta Q_X \geq \Delta I \quad (9.58)$$

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。

9.2.3 Szilard エンジン

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。

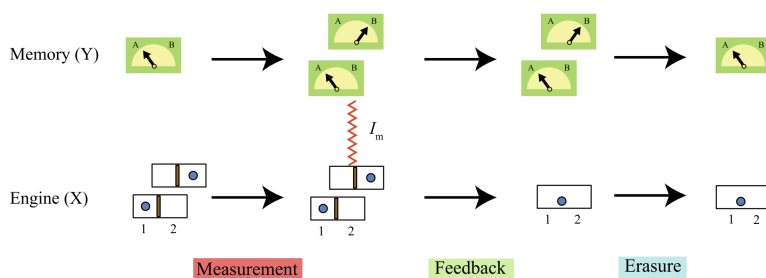


図 6 Szilard engine

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、

$$\sigma = -\beta W + \Delta S \quad (9.59)$$

である。ここで、 ΔS 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_{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、

$$\left\langle e^{-\hat{\sigma}_Y + \hat{I}_{\text{mem}}} \right\rangle = 1 \quad (9.60)$$

すなわち、

$$\sigma_Y \geq I_{\text{mem}} \quad (9.61)$$

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、

$$\left\langle e^{-\hat{\sigma}_X - \hat{I}_{\text{mem}}} \right\rangle = 1 \quad (9.62)$$

すなわち、

$$\sigma_X \geq -I_{\text{mem}} \quad (9.63)$$

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、

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_Y} \rangle = 1 \quad (9.64)$$

すなわち、

$$\sigma_Y \geq 0 \quad (9.65)$$

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	≤ 0	W	$\leq kT \ln 2$	0	W	0	$\leq -kT \ln 2$
ΔS	0	$k \ln 2$	ΔS	0	0	ΔS	0	$-k \ln 2$
σ	0	$\geq k \ln 2$	σ	$\geq -k \ln 2$	0	σ	0	≥ 0

図7 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。

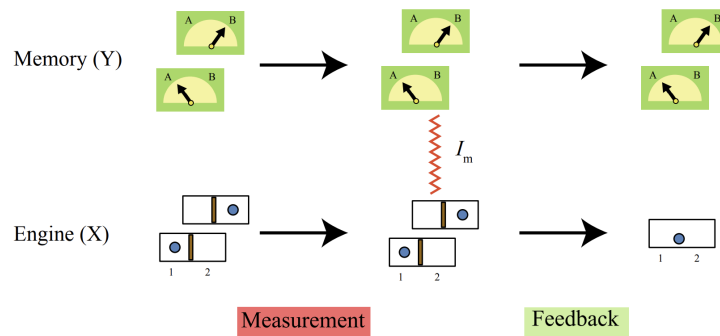


図8 メモリー消去を含まないようなシラードエンジン

普通のシラードエンジンと異なる点は、初期状態のメモリの状態を固定しない点である。この過程においては、memory のシャノンエントロピーは変化しない (過程の間ずっと memory は 2 通りの状態をとる)。このような過程では memory に仕事が行なわれることになる。過程をまとめると、以下の図のようになる。

Measurement			Feedback		
	X	Y		X	Y
W	0	$\leq -kT \ln 2$	W	$\leq kT \ln 2$	0
ΔS	0	0	ΔS	0	0
σ	0	$\geq k \ln 2$	σ	$\geq -k \ln 2$	0

図 9 メモリー消去を含まないようなシラードエンジン

これは、測定過程においては仕事を要することを示しており、Bennett の議論はもはや適応できないことを示している。

9.3 沙川-上田関係

沙川-上田関係を導出する。

9.3.1 沙川-上田関係の導出

設定

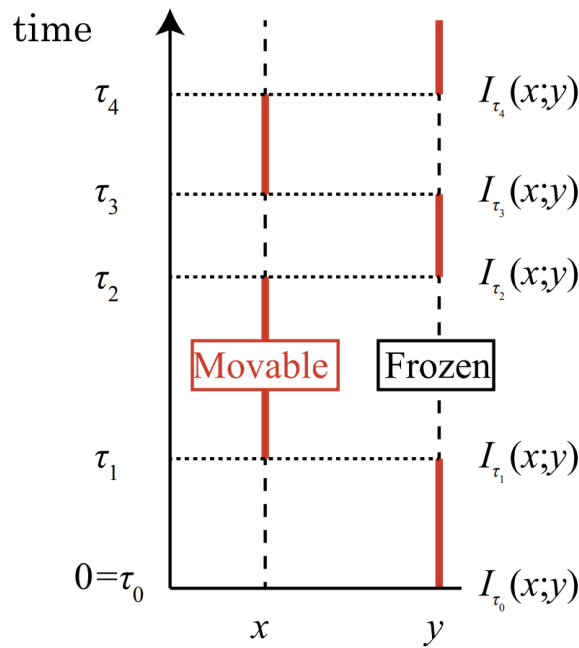


図 10 Sagawa-Ueda setup

- 時刻 $0 \leq t \leq \tau$ の間に、系 $X(\text{engine})$ と $Y(\text{memory})$ の間で N 回の measurement と feedback を行う。
- $0 \leq t \leq \tau$ を $2N$ 個の区間に分割し、 $0 = \tau_0 \leq \tau_1 \leq \dots \leq \tau_{2N} = \tau$ とする。
- $\tau_{2n} \leq t \leq \tau_{2n+1}$ ($n = 0, 1, \dots, N-1$) の間は、 Y のみ状態が変化し、measurement が行われる。
- $\tau_{2n+1} \leq t \leq \tau_{2n+2}$ ($n = 0, 1, \dots, N-1$) の間は、 X のみ状態が変化し、feedback が行われる。
- $\tau_{2n} \leq t \leq \tau_{2n+1}$ と $\tau_{2n+1} \leq t \leq \tau_{2n+2}$ ($n = 0, 1, \dots, N-1$) の時間間隔をそれぞれ第 nY -フェーズと X -フェーズと呼ぶ。
- 第 nX -フェーズについて、 m_n を X でのジャンプ回数とし、 $t_{n,i}$ を第 i 回ジャンプが発生す

る時間とする。 $t_{n,i}$ でのジャンプは X の状態を $x^{n,i-1}$ から $x^{n,i}$ に変える。

- $t_{n,0} := \tau_{2n+1}$ と $t_{n,m_n+1} := \tau_{2n+2}$ とする。
- x は $\tau_{2n} \leq t \leq \tau_{2n+1}$ の間に变化しないため、 $x^{n,0} = x(\tau_{2n}) = x(\tau_{2n+1}) = x(\tau_{2n+1})$ が成り立つ。

このとき、系 X のエントロピー生成は、

$$\hat{\sigma}_X := \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{m_n} \ln \frac{P^{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau_{2n+1}), t^{n,i}}}{P^{x^{n,i} \rightarrow x^{n,i-1}; y(\tau_{2n+1}), t^{n,i}}} - \ln P(x(\tau); \tau) + \ln P(x(0); 0) \quad (9.66)$$

ただし、第一項は系 X に接触している熱浴への熱放出、第二項は系 X のエントロピーの変化である。このエントロピー生成の定義はもっともらしいが、普通の第二法則 $\langle \hat{\sigma}_X \rangle \geq 0$ を満たさない。代わりに、以下の沙川-上田関係をみtas。

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:

$$\left\langle e^{-\hat{\sigma}_X + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n}} \right\rangle = 1 \quad (9.67)$$

ただし、

$$\Delta \hat{I}^k = \hat{I}(x(\tau_k), y(\tau_k)) - \hat{I}(x(\tau_{k-1}), y(\tau_{k-1})) \quad (9.68)$$

は $\tau_{k-1} \leq t \leq \tau_k$ の間の相互情報量の変化である。

とくに、 $n = 1$ としたものは、Szilard engine の feedback 過程に対応している。

Prf

X 系について、

$$P'_{x \rightarrow x'; y, t} := P_{x \rightarrow x'; y, \tau-t} \quad (9.69)$$

とすると、エスケーププレートについても、

$$e_{x, y, t} = e'_{x, y, \tau-t} \quad (9.70)$$

である。また、 Y 系について、今 Y 系については時間発展しないとしていることに注意すると、逆向きの遷移は、

$$P'^{N-n+1}(y|x, y') := \frac{P^n(y'|x, y)P(x, y; \tau_{2n})}{P(x, y'; \tau_{2n+1})} \quad (9.71)$$

である。このとき、 P' は実は遷移確率であることがわかる。すなわち、以下のように規格化条件

を満たす:

$$\begin{aligned}\sum_y P'^{N-n+1}(y|x, y') &= \sum_y \frac{P^n(y'|x, y)P(x, y; \tau_{2n})}{P(x, y'; \tau_{2n+1})} \\ &= \frac{P(x, y'; \tau_{2n+1})}{P(x, y'; \tau_{2n+1})} = 1\end{aligned}\quad (9.72)$$

(9.67) 式の左辺は、

$$\left\langle e^{-\hat{\sigma}_X + \sum_{n=1}^N \Delta I^{2n}} \right\rangle \quad (9.73)$$

$$\begin{aligned}&= \int d\Gamma \prod_{n=0}^{N-1} \left(\prod_{i=1}^{m_n} P_{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau_{2n+1}), t^{n,i}} \cdot \exp \left(- \sum_{i=0}^{m_n} \int_{t^{n,i}}^{t^{n,i+1}} dt e_{x^{n,i}, y(\tau_{2n+1}), t} \right) \right) \\ &\quad \cdot \prod_{n=0}^{N-1} P^n(y(\tau_{2n+1})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n})) \cdot P(x(0), y(0); 0) \cdot e^{-\hat{\sigma}_X + \sum_{n=1}^N \Delta I^{2n}}\end{aligned}\quad (9.74)$$

ここで、 P' を用いて書き換える。 X 由来のほうについては、

$$\begin{aligned}&\prod_{n=0}^{N-1} \left(\prod_{i=1}^{m_n} P_{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau_{2n+1}), t^{n,i}} \cdot \exp \left(- \sum_{i=0}^{m_n} \int_{t^{n,i}}^{t^{n,i+1}} dt e_{x^{n,i}, y(\tau_{2n+1}), t} \right) \right) e^{-\hat{\sigma}_X} \\ &\left(e^{-\hat{\sigma}_X} = \frac{P(x(\tau); \tau)}{P(x(0); 0)} \prod_{n=0}^{N-1} \prod_{i=1}^{m_n} \frac{P_{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau-\tau_{2n+1}), t^{n,i}}}{P_{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau_{2n+1}), t^{n,i}}} \text{ を用いて、} \right) \\ &= \prod_{n=0}^{N-1} \left(\prod_{i=1}^{m_n} P_{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau-\tau_{2n+1}), t^{n,i}} \cdot \exp \left(- \sum_{i=0}^{m_n} \int_{t^{n,i}}^{t^{n,i+1}} dt e_{x^{n,i}, y(\tau-\tau_{2n+1}), t} \right) \right) \\ &\quad \cdot \frac{P(x(\tau); \tau)}{P(x(0); 0)}\end{aligned}\quad (9.75)$$

逆過程に直して、

$$\begin{aligned}&= \prod_{n=0}^{N-1} \left(\prod_{i=1}^{m_n} P'_{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau-\tau_{2n+1}), \tau-t^{n,i}} \cdot \exp \left(- \sum_{i=0}^{m_n} \int_{t^{n,i}}^{t^{n,i+1}} dt e'_{x^{n,i}, y(\tau-\tau_{2n+1}), \tau-t} \right) \right) \\ &\quad \cdot \frac{P(x(\tau); \tau)}{P(x(0); 0)}\end{aligned}\quad (9.76)$$

Y 由来のほうについては、

$$\begin{aligned}&\prod_{n=0}^{N-1} P^n(y(\tau_{2n+1})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n})) \cdot e^{\sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n}} \\ &= \prod_{n=0}^{N-1} P^n(y(\tau_{2n+1})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n})) \frac{P(x(\tau_{2n+2}), y(\tau_{2n+2}); \tau_{2n+2})}{P(x(\tau_{2n+2}); \tau_{2n+2})y(\tau_{2n+2}; \tau_{2n+2})} \frac{P(x(\tau_{2n+1}))P(y(\tau_{2n+1}))}{P(x(\tau_{2n+1}), y(\tau_{2n+1}); \tau_{2n+1})}\end{aligned}\quad (9.77)$$

$y(\tau_{2n+2}) = y(\tau_{2n+1})$ として、

$$\begin{aligned}&= \prod_{n=0}^{N-1} P^n(y(\tau_{2n+1})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n})) \cdot \frac{P(x(\tau_{2n+2}), y(\tau_{2n+2}); \tau_{2n+2})}{P(x(\tau_{2n+1}), y(\tau_{2n+1}); \tau_{2n+1})} \cdot \frac{P(x(\tau_{2n+1}; \tau_{2n+1}))}{P(x(\tau_{2n+2}); \tau_{2n+2})}\end{aligned}\quad (9.78)$$

となる。ここで、

$$P^n(y(\tau_{2n+1})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n})) = \frac{P'^{N-n+1}(y(\tau_{2n})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n+1})) \cdot P(x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n+1}); \tau_{2n+1})}{P(x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n}); \tau_{2n})} \quad (9.79)$$

を用いて、

$$\begin{aligned} &= \prod_{n=0}^{N-1} P'^{N-n+1}(y(\tau_{2n})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n+1})) \cdot \frac{P(x(\tau_{2n+2}), y(\tau_{2n+2}); \tau_{2n+2})}{P(x(\tau_{2n+1}), y(\tau_{2n+1}); \tau_{2n+1})} \\ &\quad \cdot \frac{P(x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n+1}); \tau_{2n+1})}{P(x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n}); \tau_{2n})} \frac{P(x(\tau_{2n+1}), y(\tau_{2n+1}); \tau_{2n+1})}{P(x(\tau_{2n+2}), y(\tau_{2n+2}); \tau_{2n+2})} \end{aligned} \quad (9.80)$$

Π を処理して、 $x(\tau_{2n+1}) = x(\tau_{2n})$ を用いて、

$$= \prod_{n=0}^{N-1} P'^{N-n+1}(y(\tau_{2n})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n+1})) \cdot \frac{P(x(\tau), y(\tau); \tau)}{P(x(0), y(0); 0)} \cdot \frac{P(x(0); 0)}{P(x(\tau); \tau)} \quad (9.81)$$

となる。

これらをまとめて、

$$\left\langle e^{-\hat{\sigma} X + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n}} \right\rangle \quad (9.82)$$

$$\begin{aligned} &= \int d\Gamma \prod_{n=0}^{N-1} \left(\prod_{i=1}^{m_n} P'^{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau - \tau_{2n+1}), \tau - t^{n,i}} \cdot \exp \left(- \sum_{i=0}^{m_n} \int_{t^{n,i}}^{t^{n,i+1}} dt e' x^{n,i}, y(\tau - \tau_{2n+1}), \tau - t \right) \right) \\ &\quad \cdot \frac{P(x(\tau); \tau)}{P(x(0); 0)} \end{aligned} \quad (9.83)$$

$$\cdot P'^{N-n+1}(y(\tau_{2n})|x(\tau_{2n}), y(\tau_{2n+1})) \cdot \frac{P(x(\tau), y(\tau); \tau)}{P(x(0), y(0); 0)} \cdot \frac{P(x(0); 0)}{P(x(\tau); \tau)} \quad (9.84)$$

$$\cdot P(x(0), y(0); 0) \quad (9.85)$$

$$\begin{aligned} &= \int d\Gamma \prod_{n=0}^{N-1} \left(\prod_{i=1}^{m_n} P'^{x^{n,i-1} \rightarrow x^{n,i}; y(\tau - \tau_{2n+1}), \tau - t^{n,i}} \cdot \exp \left(- \sum_{i=0}^{m_n} \int_{t^{n,i}}^{t^{n,i+1}} dt e' x^{n,i}, y(\tau - \tau_{2n+1}), \tau - t \right) \right) \\ &\quad \cdot \frac{P(x(\tau), y(\tau); \tau)}{P(x(0), y(0); 0)} \end{aligned} \quad (9.86)$$

$$= \int d\Gamma P'(\Gamma^\dagger) \quad (9.87)$$

$$= 1 \quad (9.88)$$

よって、沙川-上田関係が成り立つ。 \square

沙川-上田関係に Jensen の不等式を適用することで、

$$\sigma_X \geq \sum_{n=1}^N \Delta I^{2n} \quad (9.89)$$

が成り立つ。

9.3.2 加法性

X と Y の合成系をまとめて一つの系とみると、

$$\langle \hat{\sigma}_{\text{tot}} \rangle = 1 \quad (9.90)$$

が成り立つ。これを、部分系 X と Y に分解することを考える。部分系 X, Y についての沙川-上田関係は、

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_X + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n}} \rangle = 1 \quad (9.91)$$

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_Y + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n-1}} \rangle = 1 \quad (9.92)$$

である。これらの指数の肩を足し合わせると、

$$-\hat{\sigma}_X + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n} - \hat{\sigma}_Y + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n-1} \quad (9.93)$$

$$= -\hat{\sigma}_X - \hat{\sigma}_Y + I(x(\tau), y(\tau)) - I(x(0), y(0)) \quad (9.94)$$

$$= -\hat{\sigma}_{\text{tot}} \quad (9.95)$$

となる。よって、

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_X + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n}} \rangle \langle e^{-\hat{\sigma}_Y + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n-1}} \rangle = \langle e^{(-\hat{\sigma}_X + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n}) + (-\hat{\sigma}_Y + \sum_{n=1}^N \Delta \hat{I}^{2n-1})} \rangle \quad (9.96)$$

$$= \langle e^{-\hat{\sigma}_{\text{tot}}} \rangle = 1 \quad (9.97)$$

が成り立つ。したがって、たしかに全系のエントロピー生成は、部分系のエントロピー生成の和に分解することが可能であり、そのそれぞれで沙川-上田関係が成り立つことがわかる。

9.4 自律的な Maxwell demon

9.4.1 4-state モデル

自律的な Maxwell demon を考えるうえで、その単純化である 4-state モデルを考える。

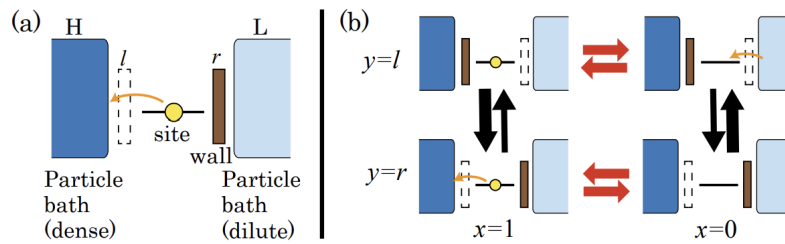


図 11 4 状態モデル

図のように、化学ポテンシャル μ_L をもつ粒子浴 L から、化学ポテンシャル μ_H をもつ粒子浴 H に粒子が移動する等温過程を考える。ただし、 $\mu_H > \mu_L$ である。二つの粒子浴の間には site があり、最大 1 個の粒子まで保持することができる。

$x \in \{0, 1\}$ を site に粒子があるかないかを表す変数とする。加えて、site と粒子浴の間には壁を挿入することができ、これが demon の操作に対応する。壁の位置を $y \in \{l, r\}$ で表す。

もし、 $y = l$ であったら、粒子は site と粒子浴 H の間を移動できない。同様に、 $y = r$ であったら、粒子は site と粒子浴 L の間を移動できない。そうでないときは、粒子は以下のような遷移確率で遷移可能である。

$$\ln \frac{P_{(r,0) \rightarrow (r,1)}}{P_{(r,1) \rightarrow (r,0)}} = \beta \mu_H \quad (9.98)$$

$$\ln \frac{P_{(l,0) \rightarrow (l,1)}}{P_{(l,1) \rightarrow (l,0)}} = \beta \mu_L \quad (9.99)$$

壁の遷移確率は以下で表されると仮定する：

$$\ln \frac{P_{(r,0) \rightarrow (l,0)}}{P_{(l,0) \rightarrow (r,0)}} = \beta E_0 \quad (9.100)$$

$$\ln \frac{P_{(r,1) \rightarrow (l,1)}}{P_{(l,1) \rightarrow (r,1)}} = \beta E_1 \quad (9.101)$$

ただし、 $E_0 > E_1$ である。粒子が site に存在するとき壁は右側に（すなわち、粒子が H に入るように）動きやすく、粒子が site に存在しないときは、壁は左側に（すなわち、粒子が L に入るように）動きやすい。このようにして、化学ポテンシャルのより高いところに粒子が集められることとなる。

9.4.2 一般の第二法則

自律的な Maxwell demon については、沙川-上田関係を用いることはできない。というのも、沙川上田関係では、片方の系を固定して考えていたが、実際にはそんなことはなく、両方時間発展するからである。自律的な Maxwell demon に用いることのできる第二法則のような関係は、以下のようになる。

$$\sigma_x(t) \geq \sum_{x, x', y} J_{x, x'}^y(t) \left(\hat{I}_t(x'; y) - \hat{I}_t(x; y) \right). \quad (9.44)$$

ここで、 $J_{x, x'}^y(t) := J((x', y) \rightarrow (x, y); t)$ は時刻 t における状態 (x', y) から (x, y) への確率流であり、 \hat{I}_t は時刻 t における確率相互情報である。右辺は情報流と呼ばれ、 X のカレントにより相互情報量がどれほど変化するかを表す。

この関係式は 9.5 節で導出される。

9.4.3 沙川-上田関係の限界

上と同じようなことが書いてある。

9.5 部分エントロピー生成および IFT

沙川-上田関係においては、系全体のエントロピー生成を部分系に分解することができた。この節では、この考え方を一つの遷移に対して考える。

9.5.1 部分エントロピー生成

時間 $0 \leq t \leq \tau$ において、状態 w_1, w_2, \dots, w_M に対する Markov ジャンプ過程を考える。また、この節では詳細つり合い条件が成り立っているものと仮定する。全系のエントロピー生成

$$\sigma = - \sum_{\nu_1}^k \beta_{\nu} \hat{Q}_{\nu} + \hat{s}(w(\tau); \tau) - \hat{s}(w(0); 0) \quad (9.102)$$

を、それぞれの単一遷移 $w' \rightarrow w$ によるエントロピー生成 $\hat{\sigma}_{w' \rightarrow w}$ に分解する。この分解したあとの $\hat{\sigma}_{w' \rightarrow w}$ を部分エントロピー生成と呼ぶ。部分エントロピー生成が満たすべき性質として、以下の2つを要請する。

1. 加法性

任意の一つの経路について、任意の取りうる経路の部分エントロピー生成の和が全系のエントロピー生成になる：

$$\sum_{w' \rightarrow w \in G} \hat{\sigma}_{w' \rightarrow w} = \sigma \quad (9.103)$$

ただし、 G は全ての経路の集合である。

2. 熱力学的な構造

取りうる経路の集合任意の部分集合 Ω について、この部分集合の部分エントロピー生成は、

$$\hat{\sigma}_{\Omega} = \sum_{w \rightarrow w' \in \Omega} \hat{\sigma}_{w \rightarrow w'} \quad (9.104)$$

となる。これが、IFT 型の等式を満たす：

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_{\Omega}} \rangle = 1 \quad (9.105)$$

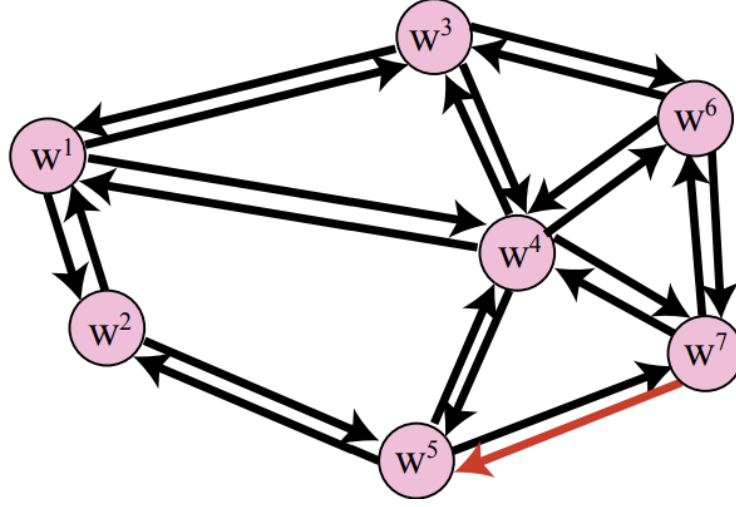


図 12 caption

一つの遷移に対するエントロピー生成を、

$$\hat{\sigma}_{w' \rightarrow w} = -\beta \hat{Q}_{w' \rightarrow w} + \Delta \hat{s}_{w' \rightarrow w} \quad (9.106)$$

とする。ここで、

$$\delta_{w(t), w} = \begin{cases} 1 & (w(t) = w) \\ 0 & (w(t) \neq w) \end{cases} \quad (9.107)$$

とし、

$$\delta_{w' \rightarrow w}(w^{(i-1)}, w^{(i)}) = \delta_{w^{(i-1)}, w'} \delta_{w^{(i)}, w} \quad (9.108)$$

とする。(すなわち、遷移の順番まできっちり決定するクロネッカーデルタである。) このとき、

$$\hat{Q}_{w' \rightarrow w} = \sum_{i=1}^N \hat{Q}_{w^{(i-1)} \rightarrow w^{(i)}; t^i} \delta_{w' \rightarrow w}(w^{(i-1)}, w^{(i)}) \quad (9.109)$$

となる。 $\Delta s_{w' \rightarrow w}$ は、もう少し定義が複雑である。

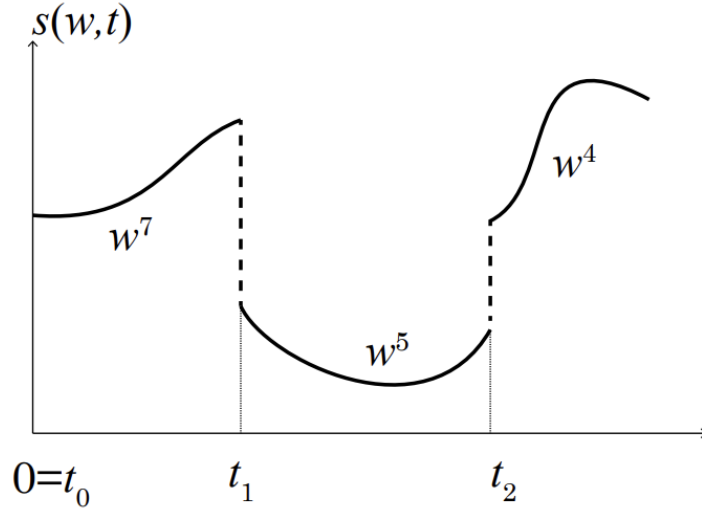


図 13 自己情報量の振る舞い

上の図からわかるように、不連続に変化する部分と連続的に変化する部分がある。離散的なほうに関しては熱のときと同様に定義することができ、

$$\hat{s}_{w' \rightarrow w, \text{jump}} = \sum_{i=1}^N (s_{w^{(i)}; t^i} - s_{w^{(i-1)}; t^i}) \delta_{w' \rightarrow w}(w^{(i-1)}, w^{(i)}) \quad (9.110)$$

となる。連続的なほうについて、自己情報量を微分すると、

$$\frac{ds_{w, t}}{dt} = -\frac{1}{p(w, t)} \frac{dp(w, t)}{dt} \quad (9.111)$$

$$= -\frac{1}{p(w, t)} \sum_{w''} J_{w'' \rightarrow w; t} \quad (9.112)$$

となる。ただし、

$$J_{w'' \rightarrow w; t} = p_{w'', t} P_{w'' \rightarrow w; t} - p_{w, t} P_{w \rightarrow w''; t} \quad (9.113)$$

である。これを用いると、 $w' \rightarrow w$ における連続的な部分エントロピー生成は、

$$\hat{s}_{w' \rightarrow w, \text{cont}} = -\int_0^\tau dt \frac{J_{w' \rightarrow w; t} \delta_{w(t), w}}{p(w(t), t)} \quad (9.114)$$

となる。以上より、エントロピーの変化分は、

$$\Delta \hat{s}_{w' \rightarrow w} = \hat{s}_{w' \rightarrow w, \text{jump}} + \hat{s}_{w' \rightarrow w, \text{cont}} \quad (9.115)$$

$$= \sum_{i=1}^N (s_{w^{(i)}; t^i} - s_{w^{(i-1)}; t^i}) \delta_{w' \rightarrow w}(w^{(i-1)}, w^{(i)}) - \int_0^\tau dt \frac{J_{w' \rightarrow w; t} \delta_{w(t), w}}{p(w(t), t)} \quad (9.116)$$

となる。

Def: 部分エントロピー生成

ある単一の $w' \rightarrow w$ なる遷移について、部分エントロピー生成を、

$$\hat{\sigma}_{w' \rightarrow w} = \beta \hat{Q}_{w' \rightarrow w} + \Delta \hat{s}_{w' \rightarrow w} \quad (9.117)$$

と定義する。ただし、

$$\hat{Q}_{w' \rightarrow w} = \sum_{i=1}^N \hat{Q}_{w^{(i-1)} \rightarrow w^{(i)}; t^i} \delta_{w' \rightarrow w}(w^{(i-1)}, w^{(i)}) \quad (9.118)$$

$$\Delta \hat{s}_{w' \rightarrow w} = \sum_{i=1}^N (s_{w^{(i)}; t^i} - s_{w^{(i-1)}; t^i}) \delta_{w' \rightarrow w}(w^{(i-1)}, w^{(i)}) - \int_0^\tau dt \frac{J_{w' \rightarrow w; t} \delta_{w(t), w}}{p(w(t), t)} \quad (9.119)$$

である。また、遷移の部分集合 Ω の部分エントロピー生成は、単一遷移のエントロピー生成を Ω にわたって足し合わせたものとして定義する:

$$\hat{\sigma}_\Omega = \sum_{w' \rightarrow w \in \Omega} \hat{\sigma}_{w' \rightarrow w} \quad (9.120)$$

$$= \beta \hat{Q}_\Omega + \Delta \hat{s}_\Omega \quad (9.121)$$

ここで、以下の四つの式を定義した:

$$\hat{Q}_\Omega := \sum_{w' \rightarrow w \in \Omega} \hat{Q}_{w' \rightarrow w} \quad (9.122)$$

$$\Delta \hat{s}_\Omega := \hat{s}_{\Omega, \text{jump}} - \int_0^\tau \frac{J_\Omega(w, t) \delta_{w(t), w}}{p_{w, t}} dt \quad (9.123)$$

$$\hat{s}_{\Omega, \text{jump}} := \sum_{w' \rightarrow w \in \Omega} \hat{s}_{w' \rightarrow w, \text{jump}} \quad (9.124)$$

$$J_\Omega(w, t) := \sum_{\{w' | (w' \rightarrow w) \in \Omega\}} J_{w' \rightarrow w; t} \quad (9.125)$$

9.5.2 部分エントロピー生成に対する FT

部分エントロピー生成は以下の加法性を満たす:

$$\hat{\sigma}_{\text{tot}} = \sum_{w' \rightarrow w \in G} \hat{\sigma}_{w' \rightarrow w} \quad (9.126)$$

また、部分エントロピー生成に対する IFT は以下ようになる:

Thm: 部分エントロピー生成に対する FT

部分エントロピー生成に対して、以下が成り立つ:

$$\langle e^{-\hat{\sigma}_\Omega} \rangle = 1 \quad (9.127)$$

Prf

$$\begin{aligned} e'_{w,t} &= \sum_{w'} P'_{w' \rightarrow w;t} \\ &= \left(\sum_{w': w' \rightarrow w \notin \Omega} \frac{P_{w',t} P_{w' \rightarrow w;t}}{p_{w,t}} \right) + \left(\sum_{w': w' \rightarrow w \in \Omega} P_{w' \rightarrow w;t} \right) \\ &= \left(\sum_{w': w' \rightarrow w \notin \Omega} \frac{P_{w',t} P_{w' \rightarrow w;t}}{p_{w,t}} \right) + \left(\sum_{w': w' \rightarrow w \in \Omega} P_{w \rightarrow w';t} + \frac{P_{w',t} P_{w \rightarrow w';t} - p_{w,t} P_{w \rightarrow w';t}}{p_{w,t}} \right) \\ &\quad + \left(\sum_{w': w' \rightarrow w \in \Omega} P_{w \rightarrow w';t} \right) \\ &= e_{w,t} + \frac{J_\Omega(w,t)}{p_{w,t}}, \end{aligned} \quad (9.63)$$

9.5.3 一般の情報過程における FT