総説

熱ゆらぎを利用する—情報熱機関の実現—

鳥谷部祥一^{1,2}, 宗行英朗¹¹中央大学理工学部物理学科²Ludwig-Maximilians-Universität München

We review the relationship between information and thermodynamics, especially with focusing on the issues surrounding the Maxwell's demon. Furthermore, we briefly introduce our experimental demonstration of an "information-heat engine", which can pump heat from an isothermal environment by using information about the system's microscopic degrees of freedom.

Maxwell's demon / Nonequilibrium thermodynamics / Brownian motion / Information / Jarzynski equality

1. Maxwell の悪魔と Szilard エンジン

コップ 1 杯の水には、 10^{24} 個もの水分子が含まれており、これらは秒速数百メートルで運動している。このように、ただの水も非常に小さいスケールではすさまじい世界である。すると、それら水分子のエネルギーを利用すれば、エネルギー問題など一気に解決しそうである！ しかし、これが残念ながらできない。この制約が熱力学第二法則である。水分子が同じ方向に揃って動いているのならそれで車を押すことができるが、動きが乱雑なのでそのエネルギーを使えないのだ。しかし、乱雑に動いていても、もし、個々の分子の動きを追うことができれば、そのエネルギーを利用できないだろうか。これを実現するのが Maxwell の悪魔である^{1),2)}。

透熱壁で囲まれた空間で運動する 1 分子気体を考える (図 1)。i) 中央に仕切りを入れると、この分子は 1/2 の確率で左と右のどちらかの部屋に入る。ii) もし左にいた場合は仕切りの左側に、右にいた場合は仕切りの右側におもりをつける。そして、仕切りの固定をはずし、準静的に等温膨張させれば、周囲から吸収した熱でおもりをもちあげて $k_B T \ln 2$ の仕事を取り出すことができる。iii) 仕切りとおもりを除けば最初の状態に戻ってサイクルが 1 まわりしたことになる。さて、仕切りの挿入やおもりの脱着には、理想的には仕事がいらない。それにもかかわらず、サイクルをまわすたびに $k_B T \ln 2$ の仕事を取り出してしまうのである。

しかし、熱力学第二法則に反するこのような第二種永久機関を、絶対に作ることができないとわれわれは経験上信じている。では、どこにカラクリがあるのだろうか。これが Maxwell の悪魔のパラドックスであり、その解決には 100 年以上が必要であった。

サイクル自体には問題がなさそうなので、怪しいのは、このサイクルを運転する操縦者である。その操縦者を「悪魔」とよぶことにする。悪魔が何をしているのか注意深く考えてみると、まず、分子が左にいるか右にいるかを測定する。測定すると、悪魔のメモリーに情報が記憶される。この情報に基づいて制御をして仕事を取り出し、記憶した情報を消去する。情報を消

図 1 Szilard エンジン^{1),2)}. Maxwell の悪魔の本質をとらえ、情報と操作の関係を定量的に扱うことが可能なモデル。サイクルをまわすたびに、 $k_B T \ln 2$ の仕事を取り出すことができる。

Utilizing Thermal Fluctuations: Experimental Demonstration of Information-heat Engine

Shoichi TOYABE^{1,2} and Eiro MUNYUKI¹¹Chuo University²Ludwig-Maximilians-Universität München

※図 1–図 3 は、電子ジャーナル (<http://www.jstage.jst.go.jp/browse/biophys/-char/ja/>) ではカラー版を掲載しています。

さなければ悪魔のメモリーはどんどん増えてしまうので、悪魔自身のサイクルはまわらない。サイクルでなくてもよいのなら、第二法則うんぬんは関係ない。さて、どうやら情報の測定や消去というのが怪しい。しかし、「情報」を物理でどう扱えばよいのだろうか。

2. 情報量

身のまわりを見てみると、「情報」というのはそれだけで存在することはなく、レコード盤上の凹凸、電圧、磁石の向きなど、必ず物理的な実体にコードされている。したがって、情報の獲得、消去、通信、複製などの情報処理は常に物理的な過程であり、物理法則に支配される。情報の量（情報量）を以下のように定量化することも可能である。

Shannon は、確率 p_i で生じるイベント i を観測したときに得られる情報量を $-\log p_i$ と定義した³⁾。この定義によれば、情報量とは「驚き」の多寡といえる。たとえば、野原でクローバーを摘んだときに、3つ葉だと驚きはしないが、4つ葉だと驚く。したがって、「4つ葉だ」という情報のもつ情報量の方が大きくなる。1回の観測で得られる情報量の期待値は $H = -\sum_i p_i \log p_i$ となり、これを Shannon 情報量（Shannon エントロピー）とよぶ。このように定義すると、「情報量」が満たすべき性質を備え、また、物理法則との相性がよい。 $\log$ を自然対数と解釈し H に Boltzmann 定数を掛ければ Gibbs エントロピーと同じ形である。

H は、得た情報により減少する不確定性の大きさを定量化している。クローバーは、摘む前から、おそらく3つ葉だろうと予想できる。つまり、もともとの不確定性が小さいので H は小さい。しかし、サイコロを振って「偶数が出る」かどうかはまったく予想できないので H が大きくなる。式の形からわかるように、すべてのイベントが等確率で生じる場合に H は最大となる。ところで、測定にはエラーがつきものであり、4つ葉なのに3つ葉だと勘違いすることもあるだろう。その分だけ、実際に観測で得る情報量は H よりも少なくなる。エラーを含めた情報量は、相互情報量 I として記述できる。詳細は他に譲るが、相互情報量とは観測者とシステムが共有する Shannon 情報量であり、測定にエラーがない場合は $I = H$ となる。

3. 情報処理のコスト

悪魔の話に戻りたい。測定に関しては Brillouin による議論が有名である。彼は分子1個の位置を測定する

図2

情報の消去。(a) Landauer-Bennett のメモリーモデル。気体分子の位置を測定すると、分子が箱の左にいたらL、右にいたらRに粒子が入る。仕切りを除去し、圧縮して常にL状態にすれば、分子の位置とメモリーの状態との間の相関はなくなり、LかRかという1bitの情報を消去できる。図1と似た図だが、こちらは「悪魔のメモリー」であることに注意。(b) 沙川-上田の非対称メモリーモデル。

ためには、少なくとも光子1個が必要であると考えた。しかし、分子の周りには黒体放射による $k_B T$ のエネルギーをもった光子が存在しており、それらと区別して分子の位置を測定するためには、 $k_B T$ よりもずっと大きなエネルギーをもつ光子が必要である。彼は、そのような測定に必要な仕事を含めれば、Szilard エンジンから正味の仕事をとり出すことはできないと主張し、第二法則との整合性を説明しようとした。しかし、その後、IBM の Bennett は、光を使わない機械仕掛けの測定装置を考案し、必ずしも測定に光は必要とせず、そして、測定には必ずしも仕事が必要ないことを示した。

すると、怪しいのは情報消去である。IBM の Landauer と Bennett は、悪魔のメモリーを箱の中の粒子としてモデル化し(図2a)、1bitの情報を消去するには、少なくとも $k_B T \ln 2$ の仕事が必要であることを示した(Landauer 原理)。この仕事を含めれば、結局、Szilard エンジンから正味の仕事は取り出せず第二法則と整合する。情報消去になぜ仕事が必要なのかを想像するのは容易ではないが、エントロピーを減らすのに仕事が必要であることを思い出すとわかりやすいかもしれない。測定によりメモリーはLかRの2状態をとるようになりメモリーのエントロピーは増えるが、情報を消去するためには仕事をしてエントロピーを減らさなくてはいけない。

4. 沙川-上田の情報熱力学

教科書的には、これでMaxwellの悪魔は解決ということになる。しかし、まだ続きがある。2009年、沙川と上田は、悪魔のメモリーを非対称にすると

(図 2b), その非対称性の大きさに応じて, 情報消去に仕事が必要なくなったり, もしくは, 情報消去により仕事を取り出せたりできることを示した⁴⁾. しかし, 今度は測定に仕事が必要になる. 彼らは, 相互情報量 I の測定と消去に必要な仕事を足し合わせると, これが $k_B T I$ 以上になることを示した. すなわち, オリジナルの Landauer 原理は対称メモリーという特殊な状況に限られ, より一般的には, 消去と測定に必要な仕事にトレードオフがあり, それらの和に対して下限が存在するわけである. さらに, 相互情報量 I を用いて取り出せる仕事は最大で $k_B T I$ であることも彼らは示している⁵⁾:

$$W_{\text{測定}} + W_{\text{消去}} \geq k_B T I \geq W_{\text{出力}}.$$

これが Maxwell の悪魔と熱力学第二法則との整合性に関する現在の解釈である. なお, 相互情報量が情報熱力学において重要な役割を果たすことを明らかにしたことも, 彼らの大きな功績である.

5. 情報-自由エネルギー変換

Maxwell の悪魔に関する 150 年近い議論を通して 2 つのことがわかってきた. 1 つは, すでに述べたように, 情報は常に物理的な実体にコードされ, したがって, 情報処理は常に物理的な過程であることである. もう 1 つは, 情報があれば, Szilard エンジンのように自由エネルギーをくみ出すことができることである. 熱力学で習うように, 等温過程で取り出せる最大仕事は, 自由エネルギー $F = U - TS$ の減少分である.

これを情報論的に言い換えれば, エントロピーは, われわれが系に関してもっている情報の不確かさといえ, 情報が完全でないので系をきちんと制御できず, すべてのエネルギーを取り出すことはできない. しかし, ミクロな自由度を測定して情報が得られれば, 系のエントロピーを減らして自由エネルギーを増やし, 余計に仕事を取り出すことができそうである.

6. 情報-自由エネルギー変換の実現

われわれは, ブラウン粒子の熱ゆらぎを高速カメラで追い, 得た情報を粒子にフィードバックすることで, 情報-自由エネルギー変換をはじめて実現した.

2 枚のガラスの間を水で満たし, 天井のガラス表面に, 2 個連なったポリスチレン粒子をたんぱく質のリンカーを用いて 1 点でピン止めした (図 3a). この周りで粒子は自由回転でき, 回転ブラウン運動をする. 床面に蒸着した 4 重極電極に高周波 (1 MHz) の交流電圧を印加した. 4 つの電極で位相を適当にずらすと, 電極の間に楕円状に回転する電場を生じさせることができる. このような電場下で, 粒子は勾配のある周期ポテンシャルを角度方向に感じる. 実際にポテンシャルを見積もると, 非常にきれいな sin 状となり, その振幅は $1.5 k_B T$, 勾配は 1 回転あたり $1 k_B T$ と, 熱ゆらぎと同程度の大きさであった. 電場なので瞬時に変調でき, たとえば, 楕円状回転電場の方向を 90° 回転させると, 位相が反転したポテンシャルを得ることができた.

この系を用い, 次のようなリアルタイムのフィードバック制御を行った (図 3b). ある瞬間に, 粒子の角

図 3 情報-自由エネルギー変換の実現⁷⁾. (a) 実験系および粒子が感じるポテンシャル. (b) フィードバック制御の 1 サイクル. 1 サイクルは $\tau = 44$ ms で, $t = \tau$ で次のサイクルが始まる. これを繰り返す. ε は測定してから制御するまでの時間遅れであり, フィードバックの効率を決める. (c) 粒子の回転トラジェクトリ. (d) 粒子が得た正味の自由エネルギー. 1 サイクルあたり, 粒子が獲得した自由エネルギー差と粒子にした仕事の差として計算. 仕事は, スイッチ前後のポテンシャルエネルギーの差として計算.

度を測定する。粒子は、たいていは谷底でブラウン運動しているが、たまに、少し登ったSという領域にいる。もし、Sに粒子を観測したら、ポテンシャルをスイッチし、それ以外の場合は何もしない。このサイクルを繰り返すと、スイッチするたびに粒子は高い確率で1段高いところに登るので、だんだんと勾配を登っていくことが期待できる。この系はSzilard エンジン(図1)を模した系になっている。ポテンシャルのスイッチは、Szilard エンジンにおける仕切りの挿入に相当する。Szilard エンジンでは仕切りを挿入してから測定しているが、本実験では、おもりが熱ゆらぎにより自発的にもちあがる(粒子が勾配に逆らって登る)のを見計らって、つまり、測定してから仕切りを挿入している。これらを、PC上のプログラムによって全自動で制御しており、PCが「悪魔」に相当する。

さて、このようなフィードバック制御を行った結果、確かに粒子を勾配に逆らって登らせることができた(図3c)。ただし、測定してから制御するまでの時間遅れ ε を延ばすと、熱ゆらぎに押されてせっかくSまでたどり着いても、スイッチする前に高い確率でまた谷に落ちてしまうので、登れない。

さて、Szilard エンジンと違い、ポテンシャルのスイッチにより、粒子に仕事をしたり、もしくは、粒子が電場に対して仕事をする。これは、ポテンシャルを切り替えた瞬間の粒子の位置に依存する。もし、粒子に外から仕事をして勾配を登らせたのであれば、特に面白くはない。そこで、エネルギーの収支をきちんと見積もってみた。すると、 ε が短いときは、熱力学第二法則を見かけ上破り、外からした仕事以上に粒子が自由エネルギーを獲得したことがわかった(図3d)⁷⁾。これが可能なのは、ミクロな運動である個々の熱ゆらぎを測定し、その情報に基づいて制御をしたからである。熱ゆらぎで励起されてSまで登ったときに、ポテンシャルをスイッチさせることで、吸収した熱エネルギーを熱浴には返さず儲けてしまったわけである。

なお、測定したときにSにいる確率を p とすれば、1回の測定で得るShannon情報量を $H = -p \ln p - (1-p) \ln (1-p)$ と計算できる。本実験では測定エラーはほぼ無視でき、相互情報量 I は H とほぼ等しい。正味の自由エネルギー増加量を $k_B T$ で割った「情報-自由エネルギー変換効率」は約30%であった。悪魔であるPCやその周りを含めた系全体では獲得した自由エネルギー以上にエントロピーは増えているはずであり、熱力学第二法則は当然ながら破れていない。しかし、ミクロな系に注目すると、情報と自由エネルギーが交換されているように見えるわけである。

ところで、統計力学では、熱力学第二法則はJarzynski 等式として記述される。Jarzynski 等式は、熱力学第二法則をゆらぎの影響まで含めて一般化した等式であり、きわめて重要である。本実験のようなフィードバック系ではそのままでは使えないが、沙川と上田によって、フィードバック系に一般化されたJarzynski 等式が導かれている⁶⁾。われわれは、情報熱機関の最も基本的な関係式の1つと期待できるこの等式を、高精度で実証することにも成功した⁷⁾。

7. まとめと展望

本実験では、ブラウン粒子の熱ゆらぎを測定し、得た情報に基づいて粒子周りの環境を制御することで、粒子の自由エネルギーを増やすことができた。悪魔と粒子は離れた場所にあり、情報を介してPCから粒子に自由エネルギーを転送したともいえる。その意味で、この「情報熱機関」はナノデバイスの新しい制御法としても期待できるかもしれない。一方、生物物理においても、たとえば分子モーターがこのような「ガジェット」を含んでいると考えると面白い議論ができるかもしれない^{8),9)}。本稿を書くにあたり、沙川貴大氏と佐野雅己氏に原稿を読んでいただきました。お礼を申し上げます。

文 献

- 1) Leff, H. S., Rex, A. F. (2003) "Maxwell's demon 2", Institute of Physics Publishing, London.
- 2) Szilard, L. (1929) Z. Phys. **53**, 840-856.
- 3) Shannon, C. (1948) Bell Sys. Tech. J. **27**, 379-423, 623-656.
- 4) Sagawa, T., Ueda, M. (2009) Phys. Rev. Lett. **102**, 250602.
- 5) Sagawa, T., Ueda, M. (2008) Phys. Rev. Lett. **100**, 080403.
- 6) Sagawa, T., Ueda, M. (2010) Phys. Rev. Lett. **104**, 090602.
- 7) Toyabe, S. *et al.* (2010) Nature Phys. **6**, 988-992.
- 8) Kawaguchi, K., Sano, M. (2011) J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 083003.
- 9) Toyabe, S. *et al.* (2012) EPL **97**, 40004.

鳥谷部祥一

鳥谷部祥一(とやべ しょういち)

ミュンヘン大学研究員

2007年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了, 博士(理学)。中央大学理工学部物理学科助教を経て, 11年10月より現職。

研究内容: 非平衡物理, 生物物理。

連絡先: Amalienstr. 54, 80799 München, Germany

E-mail: s.toyabe@lmu.de

宗行英朗

宗行英朗(むねゆき えいろう)

中央大学理工学部物理学科教授

1989年東京大学大学院理学系研究科生物化学専門課程博士課程修了, 理学博士

研究内容: 生物物理学

連絡先: 〒112-8551 東京都文京区春日 1-13-27

E-mail: emuneyuk@phys.chuo-u.ac.jp