

情報熱力学ポスター解説

Physics Lab 2020 生物物理班

1 熱力学第2法則

ポスターにおける関係式 $W_{\text{ext}} \leq -\Delta F$ は任意の等温操作において成り立つことが知られています。ここで F は Helmholtz の自由エネルギーと呼ばれる量で、外界に対して仕事をする能力を表すものです。これはポテンシャルのようなものと考えると理解しやすいと思います。例えばボールを高さ h_1 から h_2 に動かすとき (始点と終点においてボールは固定する。), ボールを操作する相手に対して行うことのできる仕事は $mgh_1 - mgh_2 = -\Delta U$ として与えられます。 (ΔU は最初と最後の位置エネルギー差。) ここから F がポテンシャルに対応していることが感じ取れるのではないのでしょうか。 (図1 の場合ではボールの位置エネルギーは高さによって決まりますが, Helmholtz の自由エネルギーは体積によって決まっています。)

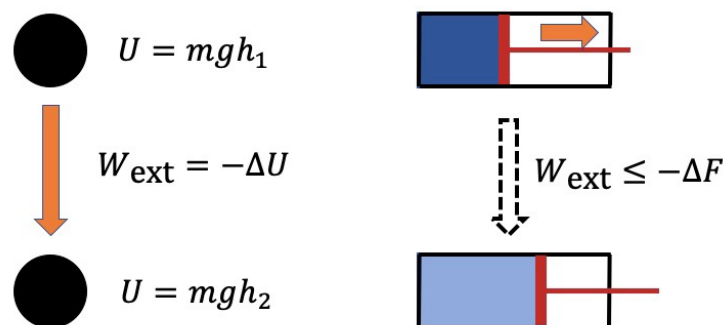


図1 左はボールと位置エネルギー, 右は熱力学的な系と Helmholtz の自由エネルギー

この不等式と熱力学第2法則はどのように関係しているのでしょうか? この不等式を等温サイクルに対して適用してみると, 状態が元に戻るから $\Delta F = 0$ であり $W_{\text{ext}} \leq 0$ となります。つまり, 等温サイクルは外界に対して正の仕事を行う事はないということを表しています。これはまさしく第二種永久機関は存在しないということです。 (実際にはわれわれは第二種永久機関が存在しないことを経験事実として知っているのをそれを熱力学の基本的な仮定として要請し, その他の熱力学における基本的な仮定と合わせて不等式 $W_{\text{ext}} \leq -\Delta F$ が導かれるという流れになっています。 [1])

2 Maxwell のデーモンと Szilard エンジン

ここでポスターにある Szilard エンジンについてももう少し詳しく見てみましょう。

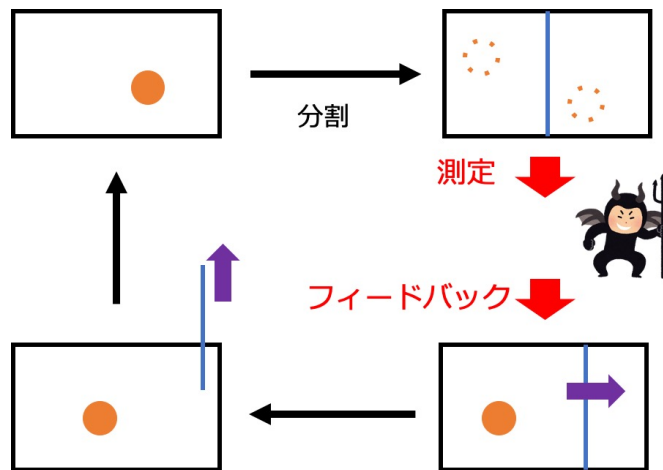


図2 Maxwell の悪魔と Szilard エンジン

- (1) まず左上の図のように、温度 T 、体積 V の箱に粒子が一つ入っている状況を考えます。ここでは粒子は一様に分布しているものとします。
- (2) 次に箱を仕切りで分割します。仕切りを入れるのには仕事は必要としないものとします。
- (3) ここで Maxwell のデーモンが登場します。デーモンが粒子が右左どちらかにいるかを測定し、その測定結果をメモリに記録します。ここではデーモンの測定に誤差はないものとします。
- (4) 続いて、メモリの情報に基づき仕切りを粒子が正の仕事をする方向に動かします。これがフィードバック操作にあたります。
- (5) 仕切りを箱の端まで動かした後は仕切りを取り除きます。この時にも仕事は必要ないものとします。

すると、この Szilard エンジンは仕切りを動かす段階でのみ外界に仕事を行なっていることがわかります。これが等温準静操作であるとする、その仕事は

$$\begin{aligned}
 W_{\text{ext}} &= \int_{\frac{V}{2}}^V p dV \\
 &= \int_{\frac{V}{2}}^V \frac{k_B T}{V} dV \\
 &= k_B T \ln 2
 \end{aligned}$$

となっており、一方で $\Delta F = 0$ ですから、上で述べた従来の熱力学第 2 法則には反していることがわかります。

3 熱力学と情報

ポスターにあるように、Maxwell のデーモンを理解するためには情報という概念を定量的に考える必要があるのではないかと考えられます。具体的にどのような情報を考えるのでしょうか。壁を挿入した段階ではデーモンは粒子がどちらにあるかは把握しておらず、右と左それぞれ $\frac{1}{2}$ ずつの確率でどちらかに粒子があるだろうということしかわかりません。しかしこの後で測定をすることで粒子の位置を把握し仕事を取り出す操作を行うことができます。

得た情報を評価できるような量として相互情報量というものがあります。これは離散的な確率分布については

$$I(X;Y) = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(X=x, Y=y) \ln \frac{p(X=x, Y=y)}{p(X=x)p(Y=y)}$$

のように定義される値で、測定に誤差がない時に最大値をとり測定で情報が得られない時には最小値をとります。例えば以下のように精度の良い天気予報とでたらめな天気予報を考えると、精度の良い天気予報の方が相互情報量が大きな値をとっていることがわかります。

予報 Y \ 実際 X	晴れ	曇り
	晴れ	30%
曇り	10%	50%

表1 精度の良い天気予報 ($I(X;Y) \doteq 0.18$)

予報 Y \ 実際 X	晴れ	曇り
	晴れ	20%
曇り	20%	30%

表2 でたらめな天気予報 ($I(X;Y) = 0$)

これを使ってデーモンが得た情報量を計算してみましょう。Xとして分割後の粒子の位置を、Yとして測定結果(デーモンが測定して情報を記録したメモリ)を使うと、Xには「右」「左」の二種類があり、対応してYにも「右」「左」の二種類があります。測定に誤差がないとすれば、粒子が右にあるときは測定結果も右になり、左にあるときは測定結果も左になります。すると、相互情報量は右をR、左をLと記して、

$$\begin{aligned} I(X;Y) &= \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(X=x, Y=y) \ln \frac{p(X=x, Y=y)}{p(X=x)p(Y=y)} \\ &= p(X=R, Y=R) \ln \frac{p(X=R, Y=R)}{p(X=R)p(Y=R)} + p(X=R, Y=L) \ln \frac{p(X=R, Y=L)}{p(X=R)p(Y=L)} \\ &\quad + p(X=L, Y=R) \ln \frac{p(X=L, Y=R)}{p(X=L)p(Y=R)} + p(X=L, Y=L) \ln \frac{p(X=L, Y=L)}{p(X=L)p(Y=L)} \\ &= \frac{1}{2} \ln \frac{\frac{1}{2}}{\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}} + 0 + 0 + \frac{1}{2} \ln \frac{\frac{1}{2}}{\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}} \\ &= \ln 2 \end{aligned}$$

となります。ここで、便宜的に $0 \ln 0 = 0$ としました。($\lim_{x \rightarrow 0} x \ln x = 0$ をイメージしていただくと良いと思います。) $\ln 2$ という値が Szilard エンジンのなす仕事にも現れたことから、やはりこのパラドックスには情報が関係あるのではないかと予想することができます。

4 一般化された熱力学第2法則

ポスターの不等式 $W_{\text{ext}} \leq -\Delta F + k_B T I$ をみると、従来の熱力学第2法則 $W_{\text{ext}} \leq -\Delta F$ に $k_B T I$ の項が加わっていることがわかります。これはまさしく従来の熱力学に情報の概念を取り入れた成果になっています。(なお、この不等式は実際には平均の意味で考える必要があります、自由エネルギーについては平衡自由エネルギーというものを考える必要があります。[2])

実際に Szilard エンジンがこの不等式と整合しているか確認してみましょう。まず外界に行う仕事は既に計算したように $k_B T \ln 2$ です。仕事をして壁を取り除くと粒子の入った箱は最初の状態

に戻るので、 $\Delta F = 0$ となります。また、メモリが得た情報量についても既にみたように $I = \ln 2$ となります。よって、Szilard エンジンはこの不等式を等号で満たす例になっていることがわかります。

従来の熱力学では、Maxwell のデーモンのような測定やフィードバックを行うことは考えていませんでした。そのため $W_{\text{ext}} \leq -\Delta F$ という関係式が満足されていました。しかし実際には、 $W_{\text{ext}} \leq -\Delta F + k_B T I$ のようなより一般的な形で議論をすることが (測定やフィードバックといった情報を伴う操作を考える際には) 必要だったのです。[2]

5 生物への応用

情報熱力学を応用した研究のひとつとして、大腸菌の走化性を見てみましょう。大腸菌には餌の濃度変化を察知し、濃度の高い方に進もうとする走化性という性質があります。入力信号として餌の濃度勾配は受容体を通して内部に伝わり、その出力として内部のキナーゼ (リン酸化酵素のこと) を活性を変化させます。その結果、大腸菌の鞭毛のモーターのようなものが推進モードに切り替わることで、大腸菌は泳ぐことができるようになるのです。

走化性には適応と呼ばれる特徴があります。これは受容体がきちんと餌の濃度変化を検知するために、現在の濃度に慣れるといった現象です。適応を可能にするには、現在の濃度を記録しておくメモリのような機能が必要であり、大腸菌の場合は受容体のメチル化がメモリにあたります。この受容体のメチル化により、濃度変化があるときのみキナーゼの活性を変えることが可能になっています。

このような生体内のシグナル伝達に対して、情報熱力学の考えを適応することで、情報伝達の効率を定量化することができます。つまり、一般化された熱力学第二法則について、等号達成にどれだけ近いのかを議論することができるのです。また、通常の熱力学第二法則の等号達成にどれだけ近いのかという熱力学的効率と、先の情報伝達の効率を比較することで、系全体がどちらの効率を重視しているのかを調べることができます。実際に大腸菌の走化性モデルを用いたシミュレーションにより、通常の熱力学的効率に比べて情報熱力学的効率が低いことが明らかになっています。

6 もっと学びたい人のために

情報熱力学を一から学びたいという人のために、いくつか参考文献を紹介します。[3] には、情報理論の基本的な概念から説明されています。[4] では大腸菌の走化性のより具体的な解説が書かれています。またシラードエンジンの解説は、[2] に詳しく書いてあります。最後に、情報熱力学に関連した最近のいくつかの進展を紹介します。

Maxwell のデーモンの検証として、コロイド粒子系や単電子箱を使った検証実験を行った研究 [5, 6, 7] があります。また、大腸菌の他の生体系への応用として、酵素反応、複製過程への応用 [8, 9] が試みられています。最近では機械学習との関連した応用 [10] も考えられています。

このように、情報熱力学は物理にとどまらず様々な分野へ応用しようとする動きが見られ、今後さらなる進展が期待されています。

参考文献

- [1] 田崎晴明 (2000) 『熱力学 現代的な視点から』 培風館.
- [2] 沙川貴大, 『情報処理の熱力学』
http://noneq.c.u-tokyo.ac.jp/natsugaku_Sagawa.pdf
- [3] 伊藤創祐, 『情報理論と小さな系の熱力学』
<http://sosuke110.com/NoteBenkyokai.pdf>
- [4] 伊藤創祐, 『ネットワーク上の情報熱力学とその生体情報処理への応用』
<http://mercury.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~bussei.kenkyu/wp/wp-content/uploads/6200-064232.pdf>
- [5] S. Toyabe, T. Sagawa, M. Ueda, E. Muneyuki and M. Sano, *Nat. Phys.* 6, 988-992 (2010).
- [6] A. B. erut, A. Arakelyan, A. Petrosyan, S. Ciliberto, R. Dillenschneider and E. Lutz, *Nature* 483, 187 (2012).
- [7] J. V. Koski, V. F. Maisi, T. Sagawa and J. P. Pekola, *Phys. Rev. Lett.* 113, 030601 (2014).
- [8] T. McGrath, N. S. Jones, P. R. ten Wolde and T. E. Ouldridge, *Phys. Rev. Lett.* 118, 028101 (2017).
- [9] T. E. Ouldridge, C. C. Govern and P. R. ten Wolde, *Phys. Rev. X*, 7, 021004 (2017).
- [10] S. Goldt and U. Seifert, *Phys. Rev. Lett.* 118, 010601 (2017).