

計算の熱力学について

石岡 俊也

神奈川大学理学部情報科学科

e-mail : ishioka@educ.info.kanagawa-u.ac.jp

舘上 信子

東京都立大学大学院理学研究科物理学専攻

e-mail : fuchi@phys.metro-u.ac.jp

(1998年12月4日受理)

概要

計算に必要なエネルギーの理論的最小値は何かという問題で, Landauer は次のように主張している. すなわち, 論理的に不可逆な情報消去を行うと, メモリ系のエントロピーが1ビットあたり $\Delta S \sim k \log 2$ だけ減少し, その分だけ熱浴のエントロピーが増える. こうして $T\Delta S$ の発熱がおこる.

メモリ系は, ハードウェアとしては双安定な物理系に対応する. それが情報を保持しているというのは, いずれかの安定状態に系が凍結していることであると我々は考える. このような凍結系の熱力学について考察し, Landauer 理論にたいして次のような反論を試みる.

メモリ系の情報を消すのは, 凍結系を解凍する過程である. この過程は, ΔS のエントロピーが発生する不可逆過程であるが発熱はない. 情報の書き込みは, メモリ系のエントロピーを ΔS だけ減少させ, それを熱浴に廃棄する可逆過程であり, この可逆過程で $T\Delta S$ の発熱を伴う.

また, 凍結系の熱力学が含意する 2, 3 の問題について論じる.

§1 はじめに

計算機を走らせるときに必要なエネルギーをどこまで少なくできるか, その理論的境界は何かという問題を Landauer[1] は考察した. 彼の理論はその後 Bennett[2] や Feynman[3] 等の強い支持を受け, 現在では多くの研究者に広く受け入れられているように見える.

Landauer 理論の基本は, 「演算が論理的に可逆であるか不可逆であるかということは, それが計算機上で実行される際の物理的過程が, 熱力学的可逆過程であるか不可逆過程であるかに対応している」というものである. ここでいう「論理的に可逆」とは, 論理過程の結果(出力)から入力 of 全情報が一意的に再現できることをいう. 「論理的に不可逆」とはしたがって, 再現不可能な情報の消去が行われるこ

とを意味する。

この対応関係は成り立っている、と我々も考える。しかし、情報消去の具体的な物理過程についての Landauer の議論には異を唱えざるをえない。1ビットのメモリ素子は、ハードウェアとして見たとき双安定な物理系であり、それが情報を保持している状態とは、いずれかの安定状態に系が「凍結」していることに対応する。このような「凍結」した物理系の熱力学的エントロピーについての Landauer の考えに我々は納得できないのである。

本稿の目的は、Landauer の指摘した対応関係をより具体的に明らかにし、計算の熱力学を再検討することである。我々の結論は「論理的に不可逆な情報消去に対応するのは、凍結系の解凍過程という熱力学的不可逆過程であり、これはエントロピーの発生過程である」というものである。ところで「解凍過程がエントロピー発生過程である」ということは、「凍結系にはエントロピーは残留していない」ことを意味している。すなわち「残留エントロピー」なるものは存在しないという主張が本稿で行われることになる。

§2 で Landauer の情報消去論の骨子を紹介しその問題点を指摘する。§3 では熱統計力学におけるエントロピーを我々がどう理解しているかについて述べる。そして凍結系のエントロピーはその非エルゴード性を重視して考えるべきことを主張する。§4 では凍結系には「残留エントロピー」なるものは存在しないという議論を展開する。§5 で計算の熱力学を論じる。§6 でいくつかの問題の(計算機)実験による検証可能性を検討する。補では凍結概念の問題点、および「解凍過程の逆である凍結過程はエントロピー消滅過程である」ことの熱力学における意味等について考察する。

§2 Landauer の情報消去論

Landauer は情報消去の方法として RESTORE TO ONE (RTO) という過程を考えた。これは、メモリの内容が“1”であろうが“0”であろうが“1”にリセットするという情報の消去法である。N 個のメモリ素子から成るメモリ系で一斉に RTO を行ったとき何が起るかを Landauer はおおよそ次のように説明している：1 個のメモリ素子を 1 個のスピンに対応させると、RTO は向きの乱雑なスピンを整列させることに対応する。スピンの整列すればスピン系のエントロピーが減少する。しかし、熱力学第二法則により全エントロピーは減少できないので、スピン系のエントロピーの減少を打ち消すように格子系のエントロピーが増大する。こうして格子が温められる。これをメモリの問題に対応させると RTO によりメモリ系のエントロピーが減少し、これを打ち消すようにメモリの環境(以後「熱浴」と呼ぶ)でエントロピーが増大する。すなわち熱浴では次のような発熱がある：

$$Q = T(S_{\text{before}} - S_{\text{after}}). \quad (2-1)$$

(Q : 発熱量, T : 熱浴の温度, S_{before} : RTO 前のメモリ系のエントロピー, S_{after} : RTO 後のメモリ系のエントロピー.)

RTO によるメモリ系のエントロピーの減少量については, メモリの保持していた情報が完全に乱雑なら $Nk \log 2$, すべて “1” もしくは “0” に揃っているなら 0 であると Landauer は述べているが, 中間の「乱雑さ」の場合については具体的には明示していない. いっぽう 鎮目 [4] は, 情報論的にエントロピーを捉える立場から “0” である確率が P_0 , “1” である確率が P_1 のとき $-Nk(P_0 \log P_0 + P_1 \log P_1)$ であると論じている. 「乱雑さ」によってエントロピーを定義しようとする, 素子の数 N が 1 の場合にエントロピーの減少量がどのように見積られるべきかが自明ではないが, 鎮目の立場に立てば $N = 1$ でも定義可能である.

さて Landauer はスピン系とのアナロジーで問題を論じたが, 我々はこのアナロジーは成立しないと考える. それは, スピン系は熱平衡にあつて, 個々のスピンは上下に揺らいでいるが, メモリ系の各素子は “0” 状態もしくは “1” 状態に凍結していて揺らいでいないからである. (メモリ素子が揺らいでいては, 計算は出来ない!)

我々の考えは §3 以後で詳しく述べるが, ここで Landauer や 鎮目との違いに簡単に触れておく. 我々は, 時間的に変動しない乱雑さや, 各素子の状態が “0” か “1” か判らないことが, メモリ系の熱力学的エントロピーに寄与するとは考えない. したがって, メモリ系のエントロピーは個々の素子の持つエントロピーの和であり, また個々の素子のエントロピーは, そのメモリの内容を知っているかいないかによって変化することはない. こうして, “1” 状態と “0” 状態が対称に作られている素子ならば, いずれの状態でもエントロピーは等しいので, RTO 前後でメモリ系のエントロピー変わらない:

$$S_{\text{before}} = S_{\text{after}}. \quad (2-2)$$

上のように考える理由は次節以後で論じることとし, ここでは Landauer の RTO 論における重大な難点を指摘したい. Landauer の説明によれば, RTO は全エントロピー, すなわちメモリ系と熱浴のエントロピーの和が一定の過程であり, したがって熱力学的可逆過程である^{*1)}. すると「論理的に不可逆な情報消去」が「熱力学的可逆過程」で実現されることになり, Landauer は本人の基本思想に反した議論を自ら行っていることになるのである. (Landauer は RTO を, メモリに蓄積されたエントロピーを熱浴に廃棄する過程として捉えている. この観点に立つならば, RTO 論よりも, そのエントロピーがいつ, どこで, どのようにして発生したのかを計算の熱力学における主要な問題とするべきであろうと我々には思われる.)

^{*1)}Landauer や Bennett は「発熱, すなわち不可逆過程」と考えているのではないかと思えてならない. だが発熱があるからといって不可逆過程とは限らない. たとえば等温圧縮過程は発熱過程であるが可逆過程である.

§3 ボルツマンのエントロピー

前節で、時間的に変動しない乱雑さや、系の状態が判らないことは、系の熱力学的エントロピーには寄与しないと述べた。本節でその論拠を明らかにする。

ボルツマンによるエントロピーの表式

$$S(\alpha) = k \log W(\alpha) \quad (3-1)$$

は、熱力学をミクロな立場から確率論的に理解すべく提案されたものである。「熱的に接触している2つの系は、等しい温度となって熱平衡状態を実現する」という熱力学における最も基本的な命題は、孤立系のエントロピーについてのこの表式を用いて証明される。ここで α は系のエネルギーや体積等マクロな物理量を代表するものとし、 $W(\alpha)$ はその物理量が α という値を取るようなミクロな状態の数である。上の命題の証明は、「 $W(\alpha)$ 個のミクロな状態が等しい実現確率を持つ」という等重率の原理を仮定し、さらに「熱平衡状態とは最も確からしい(すなわち実現確率の最も高い)状態である」という確率論的解釈を採用して行われる。

(3-1) 式が以上のような文脈の中で導入されていることを考えるなら、 $W(\alpha)$ としてどのような状態を数えあげるべきかは自ずと決まってくる。まず第一に、系が時々刻々ミクロな状態を変えつつある ことが必要である。もしそうでないならば $W(\alpha) = 1$ である。(ミクロな状態がまったく変化しないならば、現在の状態以外のミクロな状態の実現確率はゼロであり、それらを数えてはならない。) 第二に、現在実現しているミクロな状態から 到達可能な状態のみ を数えなければならない。到達し得ない状態の実現確率はゼロだからである。すなわち、たとえエネルギーが等しい状態であっても、越えることのできない高いエネルギー障壁の彼方にある状態は $W(\alpha)$ に加えてはならない。もっとも極端な例は、後に取り上げるシラード機関のように、中央を壁で仕切られた容器の左側に気体が閉じ込められている場合である。気体が右側に閉じ込められた状態は、左側にあるのと同じエネルギーであっても勘定に入れないのである。

$W(\alpha)$ として数えるべき条件を満たした状態を以後簡単に「つながった状態」または「到達可能な状態」と呼ぶことにする。この条件はエルゴード問題と関係する。「エネルギー E の状態はすべてつながっている」というのが、エルゴードの仮定である。系が非エルゴード的な場合には、 $W(\alpha)$ としてつながっている状態のみを数えねばならない。系が凍結しているというのは非エルゴード的になっているということである。

(3-1) は孤立系、したがってエネルギーが一定の場合のエントロピーの表式であるが、系が温度 T の熱浴に接して平衡である場合のエントロピーは、実効的な状態数 $\bar{W}(T, \alpha)$ を用いて次のように表わされる:

$$S(T, \alpha) = k \log \bar{W}(T, \alpha), \quad (3-2)$$

$$\bar{W}(T, \alpha) \equiv \sum_E W(E, \alpha) \exp[-\beta(E - \langle E(\alpha) \rangle)], \quad (3-3)$$

$$\langle E(\alpha) \rangle \equiv \left\{ \sum_E W(E, \alpha) E \exp(-\beta E) \right\} / \sum_E W(E, \alpha) \exp(-\beta E). \quad (3-4)$$

ここで α はエネルギー以外の巨視的な物理量を表す ($\beta \equiv 1/kT$). この表式においては, 同じ E の状態同志のみならず, 異なる E の状態同志も, 互いに到達可能な関係になっていなければ $W(E, \alpha)$ に含めてはならない. (補-1 参照.)

熱統計力学におけるエントロピー, より具体的には (3-1), (3-2) 式によって定義されるエントロピーを, 以後簡単にボルツマンのエントロピーと呼ぶことにする. 統計力学においては, (3-4) 式のような統計平均が物理量の観測値と見なされる. 観測値は元来, 対象としている一つの系の時間平均として求めるべきものである. 上で長々と延べた注意は, 時間平均と同じ結果を与えるような統計集団を作るための注意であるとも言える.

(3-1), (3-2) で与えられたボルツマンエントロピーに関して, ここで特に強調しておきたいのは, それがエネルギーや体積等と同じような客観的物理量だということである. ボルツマンエントロピーは, 系の現在の状態に関する知識の有無によって変化するような量ではない. それは熱力学が客観的な物理系の振舞いを記述するものであって, 系の振舞いは, その系に関する情報を人間が持つか持たないかに左右されるものではないからである^{*2)}. この客観性は (3-1), (3-2) 式中の W, \bar{W} が客観的な量であることにより保証される. 換言すれば, ボルツマンエントロピーを情報論的に捉えてはならないということである. すなわち, 「 W 個の状態のどれであるかわからない」という「無知の程度」を表現しているものではないということである.

Landauer が論じた N 個の素子から成るメモリ系のエントロピーは, 我々の立場からは次のように見積られる: 1 個の素子について, “1” が記録されている場合の (実効的) 状態数を \bar{W}_1 , “0” が記録されている場合のそれを \bar{W}_0 としよう. N 個の素子のうち n_0 個が “0” 状態, n_1 個が “1” 状態に凍結しているならば, 系の状態数は $(\bar{W}_0)^{n_0} (\bar{W}_1)^{n_1}$ に等しい. 対称に作られた素子ならば $\bar{W}_0 = \bar{W}_1$ と考えてよいので, $S = Nk \log \bar{W}_0$ となり「乱雑さ」の影響はない. メモリ素子が凍結していない (すなわち, 熱的に揺らいで状態 “0” と “1” を行き来しており, したがってメモリとしての用をなさない) 場合は \bar{W}_0 個と \bar{W}_1 個のマイクロな状態はつながっているため, そのような素子のエントロピーは $k \log[\bar{W}_0 + \bar{W}_1] = k \log \bar{W}_0 + k \log 2$ であり, 全体では凍結状態に比べて $Nk \log 2$ だけ大きい値を持つ. こうして動的な乱雑さは熱力学的エントロピーに寄与するが, 静的な乱雑さはこれに寄与しない. RTO という操作を行った後のメモリ系のエントロピーが, 操作前のエントロピーに比べて減少することなどあり得ないのである.

我々は非エルゴード性を重視して凍結系のエントロピーを定義した. だがこのような考え方は広く一

^{*2)}本稿での議論はすべて古典論に限るものとする. 量子論的観測の効果は考えていない.

般に認められているものとは異なる。その違いを次節で論じる。

§4 「残留エントロピー」について

凍結する系の持つエントロピーは一般に「残留エントロピー」と呼ばれている。標準的な教科書 [5] でこれは次のように説明されている：「氷においては水素原子の位置が乱雑なままで冷却されて極低温でエントロピーが残る。ガラス状のものを冷却していく際もエントロピーが残ることが多い。絶対零度において残ったエントロピーを残留エントロピーという。これを知るには、気体の状態から出発するのが普通である。理想気体の状態では核や電子のスピンのためのエントロピーも含めて、エントロピーの絶対値が理論的に求められる。これを基準にして、比熱、潜熱の測定によってエントロピー変化の測定を低温へのぼしていき、絶対零度へ外挿すれば残留エントロピーが分かるのである。」こうして、残留エントロピーは次のように定義されていることがわかる。温度 T にある系を 0 K まで冷却する過程で、系から外部に流れ出る熱と共に流出するエントロピーを

$$S_{\text{out}}(T) = \int_0^T \frac{d'Q}{T'} \quad (4-1)$$

とし、温度 T での理論的に得られた系のエントロピーを $S(T)$ とすれば、

$$S_{\text{R}} = S(T) - S_{\text{out}}(T) \quad (4-2)$$

が 0 K において残留しているエントロピーである。この S_{R} を (3-1) 式の形に書くならば、状態数 W は基底状態の縮退度 W_{D} と考えてよい。氷では2個の酸素原子の間に可能な水素の位置が2ヶ所あることによる縮退であり、ガラスの場合は原子の可能な配置の仕方の数である。低温では、系はこの W_{D} 個の中の一つの状態に凍結されて静的に乱雑な状態を実現している。系はもはや W_{D} 個の状態を渡り歩くことはできない。そのような系が上述のような議論によってエントロピー S_{R} を持つとされているのである。だが、凍結系の非エルゴード性を重視する我々の立場では、エントロピーは残留していない。(4-2) 式で定義されたエントロピー S_{R} は、系に残留しているエントロピーではなく、凍結時に消滅したエントロピーの量を表わしている。氷の例でいえば、水素原子にとって可能な2つの安定位置の間にポテンシャルの山があつて、低温になると水素原子はこの山を越えることが出来なくなり、どちらか一方に凍結されてしまう。この過程で系の動き得る位相空間の領域は W_{D} 個の狭い領域に分離され、系はそのうちのひとつの領域内に閉じ込められる。したがってエントロピーは $S_{\text{R}} = k \log W_{\text{D}}$ だけ減少する。逆に温度を上昇させていくと、凍結状態が解凍し、分離した領域の合体が起こり、系の動き得る範囲が W_{D} 倍に拡大する。こうして大きさ S_{R} のエントロピーが発生する。

次節で詳しく論じるが、「論理的に不可逆な情報の消去」に対応する不可逆な物理過程とは、「凍結していたメモリ系の解凍過程」のことであるというのが我々の主張である。

なお、系が凍結しているか否かを明確に決められるか、という問題について補 - 1 で、またエントロピー消滅と熱力学第二法則との関わりについては補 - 2 で議論する。

§5 計算の熱力学

Landauer は情報消去の方法として RTO を考えたが、この過程はより基本的な2つの過程—古い情報の消去と新しい情報の書き込み—を合成したものであり、この2つの基本過程は分けて論じるべきものである。そのためには情報を消去したときの状態を陽に扱わねばならない。この“0”でも“1”でもない、情報の消された状態を以後 n(neutral)-状態と呼ぶことにしよう。これに対し、“0”ないしは“1”という情報の書き込まれている状態を m(memory)-状態と呼ぶ。m-状態は凍結状態であり n-状態は解凍した状態である。

m-状態から n-状態へ、またはその逆の過程で何が起こるかを具体的に論じるには、メモリのモデルを決める必要がある。ここでは2つのモデルを取り上げることにする。

なお、我々は計算に必要なエネルギーの理論的最小値を問題にしている。この観点からみて理想的なメモリのモデルを考えるのであって、現在実際に使われているメモリは本稿では対象にしない。

<シラード機関>

はじめに考えるのは、シラード (Szilard) 機関である。これは Bennett がマクスウェルの悪魔を論じたときにも利用したものである [2]。このモデルは計算機のメモリとしてはリアリティーに欠けるが、理想的な凍結系になれるという意味で、いま問題にしている物理の本質を捕えるには便利である。それは次のような系である：

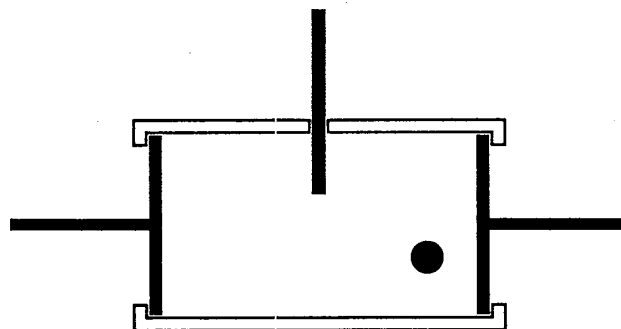


図 1: シラード機関

シリンダー内に閉じ込められた気体を、シリンダーの左右いずれの側からも圧縮できるように2つのピストンがついている。シリンダーの中央には仕切り板を入れることができる。このシリンダー内に1個の分子が熱浴と相互作用しながら運動している(図1)。両ピストンとも、最も押し出された状態で仕

切り板が入れられているときが m-状態である。m-状態は、分子が仕切り板の左にあるか右にあるかによって、“0” 状態または“1” 状態として区別する。仕切り板がはずされた状態が n-状態である。m-状態と n-状態における熱力学的諸量の関係は

$$\text{エネルギー: } \Delta E \equiv E_n - E_m = 0, \quad (5-1)$$

$$\text{エントロピー: } \Delta S \equiv S_n - S_m = k \log 2, \quad (5-2)$$

$$\text{自由エネルギー: } \Delta F \equiv F_n - F_m = \Delta E - T\Delta S = -kT \log 2 \quad (5-3)$$

となる。ボルツマンのエントロピーは情報論的なものではないと §3 で強調したが、それは情報とエントロピーが無関係であることを意味しているわけではない。物理系が1ビットの情報を記録しているというのは、そのエントロピーが $k \log 2$ だけ低い状態になることである。式 (5-2) はこの関係を表わしている。

書き込みの過程:

n-状態においていずれかのピストンを中央まで押し込み (等温圧縮過程)、仕切り板を入れ、そしてピストンをもとの位置にもどす過程である。これは熱力学的に可逆な過程で実現可能である。この間にエイジェント (=メモリ系に外から働きかけるシステム) がなさなければならない仕事 W_{write} 、熱浴に流れるエネルギー Q_{write} はそれぞれ次のようになる:

$$W_{\text{write}} = -\Delta F = kT \log 2, \quad (5-4)$$

$$Q_{\text{write}} = T\Delta S = kT \log 2. \quad (5-5)$$

もちろん、系と熱浴を合わせた全系ではエントロピーは不変である。

情報消去の過程:

情報の消去には2通りの方法がある。第1の方法は、書き込みの過程を逆にたどる方法である。これは当然可逆過程として実行可能であり、 W_{delete} 、 Q_{delete} は書き込みの場合の符号を逆にしたものになる:

$$W_{\text{delete}} = -W_{\text{write}} = -kT \log 2, \quad (5-6)$$

$$Q_{\text{delete}} = -Q_{\text{write}} = -kT \log 2. \quad (5-7)$$

この方法を用いるならば、エイジェントは書き込み時に使ったエネルギーを熱浴から回収することができる。だがこの消去法は、メモリの保持している情報をエイジェントが知っていること、つまり同じ内容の情報が別に存在しているという条件がないかぎり確実に実行することはできない。

第2の情報消去法は、m-状態において単に仕切り板をはずす方法である。この方法は「書き込みの逆過程」の場合と異なり、情報の内容を知らなくても実行できる。その意味でこれを「標準的消去法」と呼ぶことにする。この場合エージェントのする仕事はゼロ、また熱浴も何の影響も受けない。しかし、この過程は解凍過程であり、メモリ素子ではエントロピー S_g が発生する：

$$W_{\text{delete}} = 0, \tag{5-8}$$

$$Q_{\text{delete}} = 0, \tag{5-9}$$

$$S_g = k \log 2. \tag{5-10}$$

この方法では、エージェントは書き込み時に使ったエネルギーを熱浴から回収することができず、(書き込み) → (標準的消去) という1サイクルで $kT \log 2$ のエネルギーを必要とする。したがって熱浴ではそれだけの発熱を生じる。

<双安定ポテンシャル系>

次に、シラード機関より現実的な1次元双安定ポテンシャル中の1粒子系を考えることにする。これは Goto によって考案された quantum flux parametron (QFP)[6] の動作をほぼ忠実に再現しているモデルである。双安定ポテンシャルのいずれかの側に粒子が閉じ込められている状態が m-状態 (図2 (a)), ポテンシャルが変形して単安定になっている状態が n-状態 (図2 (b)) である。

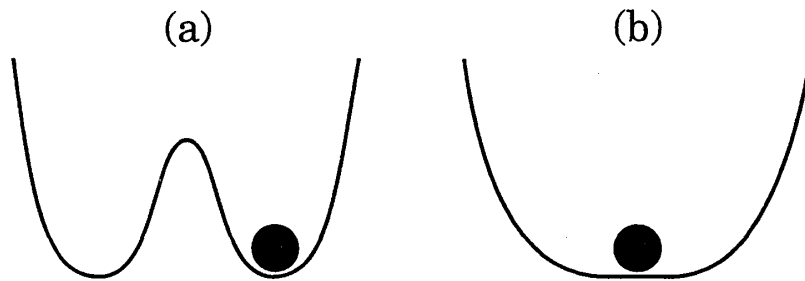


図 2: 双安定ポテンシャル系 (a) m-状態 (m = “1”) (b) n-状態

熱力学的諸量は次のようになっている：

$$\text{エネルギー: } \Delta E \equiv E_n - E_m \approx 0, \tag{5-11}$$

$$\text{エントロピー: } \Delta S \equiv S_n - S_m \approx k \log 2, \tag{5-12}$$

$$\text{自由エネルギー: } \Delta F \equiv F_n - F_m = \Delta E - T\Delta S \approx -kT \log 2. \tag{5-13}$$

ここで、(5-12) 式中の m-状態におけるエントロピーは粒子が中央の山を越えることは出来ないとした場合のものである。

書き込みの過程：

n -状態において、粒子を単安定ポテンシャルの底から左側または右側いずれかに移動させるために、バイアスポテンシャルを加え、その状態で中央にポテンシャルの山を成長させてゆく。山の成長が完了したらバイアスポテンシャルを取り除く。この過程は可逆過程であり、エイジェントのなす仕事、すなわちポテンシャルの変形のためになす仕事 W_{write} と熱浴に流れるエネルギー Q_{write} はそれぞれ次のようになる：

$$W_{\text{write}} = -\Delta F \approx kT \log 2, \quad (5-14)$$

$$Q_{\text{write}} = T\Delta S \approx kT \log 2. \quad (5-15)$$

情報消去の過程：

書き込みの逆過程はやはり可逆過程であり、シラード機関の場合と同様エイジェントは書き込み時に使ったエネルギーを全て回収できる。また(書き込み) \rightarrow (書き込みの逆過程) という1サイクルで、熱浴における正味の発熱はない。

標準的消去法はバイアスポテンシャルを加えることなく中央のポテンシャルの山を低くしてゆき、単安定のポテンシャルに変える方法である。この過程のある時点で解凍が起こり、粒子の運動可能な範囲が一挙に2倍に広がる。こうして、(5-10)式のエントロピー S_g が発生する。この消去の過程で、系のエントロピーは ΔS 増加し、また系と熱浴のエントロピーの和は S_g だけ増加するので、熱浴のエントロピーの増加量は $S_g - \Delta S$ となる。対応する発熱は

$$Q_{\text{delete}} = T(S_g - \Delta S) \approx 0 \quad (5-16)$$

である。この間にエイジェントのなした仕事は、系のエネルギー増加 ΔE と Q_{delete} の和に等しいので、

$$W_{\text{delete}} = \Delta E + T(S_g - \Delta S) = \Delta F + TS_g \approx 0 \quad (5-17)$$

となる。結局、[標準的消去で回収できなかったエネルギー] = [正味の発熱] は

$$TS_g = kT \log 2 \quad (5-18)$$

となり、シラード機関の場合と一致する。

「書き込みの逆過程」と「標準的消去」という2通りの消去法が、計算の各過程でどのように使い分けられるかを詳しく議論することはここではしないが、おおよそ次のようにまとめられる：論理的に可逆な計算過程(例えばコピーやNOT演算)においては、入力情報を消すのに「書き込みの逆過程」で行うことが可能である。いっぽう、論理的に不可逆な計算過程(例えばAND演算)では、すべての入力情

報の消去を「書き込みの逆過程」で行うことはできない。(QFP を用いる AND 演算において、個々の素子での消去がどのようになされるかを補 - 3 で解説する.)

以上の議論に基づき、我々の主張を要約すると以下ようになる。

「メモリ素子に情報を書き込む過程でエネルギーが必要である。ある素子に書き込まれた情報を書き込みの逆過程で消去できる場合には、その過程でエネルギーが回収され、結果としてエネルギー消費なし(すなわち発熱なし)で(書き込み) → (消去) の 1 サイクルが実行できる。標準的な消去の場合には、その過程でメモリ素子内に $k \log 2$ のエントロピーが発生し、その結果 $kT \log 2$ のエネルギーが回収不能となる。すなわち、(書き込み) → (標準的消去) の 1 サイクルでは $kT \log 2$ のエネルギーが必要であり、その分だけ発熱する。論理的に可逆な計算は、その計算に使われるすべてのメモリ素子において、エントロピーの発生を伴わない消去法のみを用いて実行可能であるが、論理的に不可逆な計算過程では一般に、エントロピー発生を伴う不可逆過程による消去が必要である。こうして、論理的に不可逆な情報消去を含む計算を実行するのに必要な最小のエネルギーは、失われる情報 1 bit 当り $kT \log 2$ 程度である。」

Landauer の論じた RTO は (標準的消去) + (“1” の書き込み) と考えられる。消去法は「書き込みの逆過程」ではなく「標準的消去」でなければならない。鎮目の強調しているように、情報の内容によって RTO の具体的なプロセスを変えてはならないからである。(「書き込みの逆過程」ではこの具体的なプロセスが情報の内容に依存してしまう。) こうして、我々の観点からは、RTO 前のメモリ系の乱雑さとは無関係に、 $kT \log 2$ の発熱が RTO によって生じることになる。

§6 計算機実験による検証の可能性

前節で述べた我々の計算の熱力学は、書き込み、消去の各過程での仕事量、熱浴でのエネルギー変化(=発熱)を明示しているので、実験によって正否の決着を付けることが原理的には可能である。しかし現在の段階では実際上これは難しく、計算機実験が現実的である。つまり、前節で展開した我々の主張は計算機実験によって真偽が判定できる。以下で、2つの問題について計算機実験での判定可能性を検討する。

[1] 凍結系は残留エントロピーを持っているか、いないか?

もし凍結系が残留エントロピーを持っているとすれば、解凍時にエントロピーが発生することはない。したがって双安定ポテンシャルのメモリ素子の場合、標準的消去過程は「等エントロピー過程」になる。(ただし、本稿で言う「等エントロピー過程」とは、熱浴をも含めた全系のエントロピーが一定の過程を意味する。) こうして(書き込み) → (標準的消去) の 1 サイクルは全て「等エントロピー過程」となるので、このサイクルでのエントロピーの増加はなく熱浴のエネルギー変化も無いことになる。結論として、(書き込み) → (標準的消去) の 1 サイクルで熱浴のエネルギーが変化しなければ残留エントロピー

は存在する。 $kT \log 2$ 増加すれば残留エントロピーは存在しない^{*3)}。

[2] Landauer の RTO 論は正しいか？

Landauer の RTO 論は (2-1) 式で表わされる発熱を主張するものである。したがって RTO 前後でのメモリ系のエントロピーが等しければ発熱はない。問題はエントロピーの評価法である。我々ではなく Landauer の採用している評価法を用いなければならない。そこで考えられるのは、RTO を 2 度続けて行い、2 度目の RTO の際の発熱を測定する方法である。Landauer の立場ではメモリ内容の乱雑さがメモリ系のエントロピーを決めている。2 度目の RTO の前後ではいずれも乱雑さは無く、Landauer の立場からみてもエントロピーは等しいはずである。(乱雑さではなく、メモリ内容についての知識の確実度でエントロピーが決まると考える立場の場合も、2 度目の RTO 前後の状態では共に、すべてのメモリ素子の内容が“1”であることが確定しているので、エントロピーは等しくなる。) この際発熱がないならば Landauer の RTO 論は正しい。我々の立場からは $kT \log 2/\text{bit}$ の発熱が観測されるはずである。双安定ポテンシャルのメモリモデルでこれは検証可能である。

§7 おわりに

「RTO で情報を消去するとメモリ系のエントロピーが減少する」[1] とか「発熱なしにメモリレジスタをクリアできない」[2] といった表現に対する違和感が、計算の熱力学に関心を持つに至った動機である。情報を記録するには、構造のない(エントロピーの大きい)ところにエネルギーを費して構造を作り出す(=エントロピーを減らす)必要がある。ほうっておいても構造は風化し(=エントロピー増大の法則)、情報は消えていってしまう。つまり情報は、消去よりも記録することの方が大変なのであり、情報が記録されているというのは物理系のエントロピーが低くなっているのだ、というのが常識ではないだろうか。上のような表現はこれと全く逆に響くのである。本稿はこのような常識の立場から計算の熱力学を考え直したものである。問題の中心は凍結系のエントロピーをどう評価するかということであった。そして「残留エントロピーなるものは存在しない」とか「マクロな系でエントロピーは減少することがある」という我々自身予期していなかった大きな問題に気づかされることになった。

最後に鎮目 [4] の議論にもう一言付け加えておく。双安定ポテンシャル中の 1 粒子系というメモリモデルにおいて、“0” 状態の場合の粒子の位置の分布関数を f_0 、“1” 状態の場合のそれを f_1 としよう。鎮目は“0” であるか“1” であるか判らない場合の分布関数は $f_{01} = (f_0 + f_1)/2$ であるとして、RTO によるエントロピーの減少を $f_{01} \rightarrow f_1$ によるものと考え、その際の発熱が $kT \log 2$ になると論じている。(“0” であるか“1” であるか判らないときは分布関数が f_0 であるか f_1 であるか判らないということであって、

^{*3)}氷のような自然に存在する凍結系では、凍結状態でエントロピーが残留しているか否かを実験的に知る方法はない。実験で知り得る量は (4-1) 式の $S_{\text{out}}(T)$ のみだからである。もしも、すべての水素原子の位置を制御しつつ凍結状態を実現することが可能になれば、氷でもメモリ系の場合と同様の方法で残留エントロピーの有無を知ることができるだろう。

それを f_{01} と見做してしまうことは許されない、というのがエントロピーを客観的物理量と考える我々の立場である。) 分布 f_{01} は我々の議論で用いた n -状態におけるそれに近い。その意味で、鎮目が論じたことは、書き込み過程における発熱 ((5-5) または (5-15) 式に対応) と解釈しなおせば正しいのである。

謝辞

筆者の一人 (S. I.) は、計算の熱力学に関心を持つに至った直後から、後藤英一氏から直接お話を伺う幸運にめぐまれた。本稿には氏の影響が色濃く反映されているものと思う。また QFP についての多くの文献をお譲りいただいた。ここに深謝する。

補 - 1 凍結概念の曖昧さについて

系が凍結状態にあるか否かは、問題にする時間スケールに依存している。メモリ素子が “1” 状態に凍結しているというのは、計算速度に応じたある時間スケールで見るとその間に “0” 状態になることはない、という意味である。一般に W_D 個の基底状態を持つ系において、その一つの基底状態近傍に系が留まる平均滞在時間を τ としよう。 τ よりも十分短い時間スケールでの系の振舞を問題にするとき、系は凍結状態にあるとすることができる。このような縮退系の熱平衡状態とは、 W_D 個の基底状態近傍を系が渡り歩いている状態と考えられる。つまり τ より十分長いスケールで見た系の状態が「真の」の熱平衡状態である。凍結状態とは、まさにその同じ熱平衡状態にある系を、 τ より短い時間の窓で切り取って眺めたもの、すなわち熱平衡状態の一部である。したがって凍結状態は厳密な意味での熱平衡状態とは言えないが、非平衡状態 (熱平衡からずれている状態) とは異なるものである。我々は熱平衡状態の概念を拡張し、凍結状態をもひとつの熱平衡状態として扱うことにし、§5 で計算の熱力学を議論した。

このように考えると、ひとつの系のボルツマンエントロピーは、問題にしている時間スケールによって異なる値を持つことになる。それで良いのだろうかという疑問が生じる。我々はそれで良いのだと考える。つまり τ より長い時間スケールと短い時間スケールで熱平衡状態の意味が異なるのであり、したがってエントロピーが異なってもよいと考えるわけである。しかし、このように解釈しても凍結概念に関わる曖昧さが完全に解消するわけではない。

以下で、凍結系のカノニカルアンサンブルについて考えてみる。アンサンブルを次の方針で構成する：

1. ボルツマン因子 $\exp[-(E - E_g)/kT]$ がある小さな値 $e^{-\eta}$ 以下の場合、その状態の実現確率をゼロとみなす。すなわちエネルギー E が $E > E_g + \eta kT$ なるマイクロな状態の実現確率をゼロと見做す。ここで E_g は系の基底状態のエネルギー、 η は 1 より十分大きい定数とする。
2. 位相空間の、 $E < E_g + \eta kT$ を満たす ひとつらなりの領域 に含まれるマイクロな状態のみでアンサン

ブルを構成する。

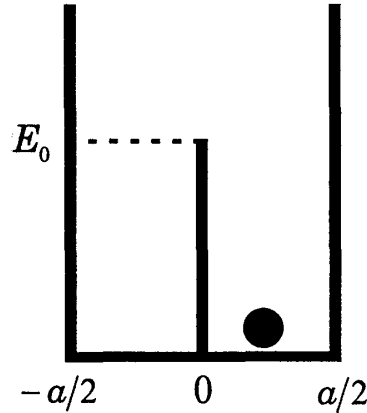


図 3: 双安定ポテンシャル中の粒子

例として、図 3 のような双安定ポテンシャル中の 1 粒子系の状態和を考える。中央のポテンシャルの高さは E_0 、巾は簡単のためゼロとする。粒子の運動し得る空間的領域は、

$$\begin{aligned} kT < E_0/\eta \text{ のとき} & \quad 0 < x < a/2 \quad \text{または} \quad -a/2 < x < 0, \\ kT > E_0/\eta \text{ のとき} & \quad -a/2 < x < a/2 \end{aligned}$$

となる。また運動量の取り得る範囲は $0 < |p| < \sqrt{2m\eta kT}$ である。よって状態和は

$$Z(T) = \frac{1}{h} \int e^{-p^2/2mkT} dp \int dx = \frac{2a\sqrt{2mkT}}{h} \text{Erf}(\sqrt{\eta}) \times \begin{cases} 1/2 & kT < E_0/\eta \\ 1 & kT > E_0/\eta \end{cases} \quad (\text{A1-1})$$

(m : 粒子の質量, h : プランク定数, $\text{Erf}(x) \equiv \int_0^x e^{-t^2} dt$: 誤差関数.)

となる。これよりエネルギーの期待値は

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} kT \quad (\text{A1-2})$$

となって、比熱に対する凍結の影響は全くないことがわかる。凍結という現象が、これまであまり真剣に考察の対象とされなかった原因は、このようなところにあるのかもしれない。(3-2) 式を用いてエントロピーを求め、温度と E_0 を変数としてその変化量を書くと次のようになる：

$$dS = \frac{1}{T} \frac{d\langle E \rangle}{dT} \cdot dT + k \log 2 \cdot \delta \left(T - \frac{E_0}{k\eta} \right) \cdot \left(dT - \frac{1}{k\eta} dE_0 \right). \quad (\text{A1-3})$$

右辺第 2 項が、発生・消滅するエントロピーである。メモリ系での情報消去過程におけるエントロピーの発生は、 $dT = 0$, $dE_0 < 0$ の場合に対応している。なお、はじめに述べた「曖昧さ」とは、上の例で言えば η をどう決めるべきかはっきりしないということに現れている。

補 - 2 凍結と熱力学第二法則

解凍過程でエントロピーが発生するとするならば、その逆過程である凍結過程ではエントロピーが消滅するとせざるを得ない。しかし熱力学にはエントロピーの消滅という概念がない。したがって凍結過程でのエントロピー消滅が熱力学の体系とどのように折り合いがつくのか考察しておくべきであろう。問題はもちろん熱力学第二法則である。熱力学第二法則は内容が少しずつ異なる一連の命題で表現されている。ここではそれらを4つに整理し、それぞれについて修正の必要があるかどうかを検討しておく。

[命題 - 1] 熱は低温の物体から高温の物体に自然に移ることはない(クラウジウスの原理)。または、ひとつの熱源から取った熱をすべて仕事に変え、それ以外に変化を残さないことは不可能である(トムソンの原理)。

この命題は熱力学の大前提であり、当然のことながら修正の必要はない。

[命題 - 2] ある系が外界と作用しながら行うひとつのサイクルを考える。これが実行可能なサイクルあるとき、不等式

$$\oint \frac{d'Q}{T} \leq 0 \quad (\text{A2-1})$$

を満足する(クラウジウスの不等式)。ここで $d'Q$ は系に流入する熱量、 T はその熱源の温度である。サイクルのすべての過程が「両方向可逆過程」の場合に等号が成り立つ。

この命題は異なる温度の物体間でカルノーサイクルが作動し得ることを仮定すれば、[命題 - 1] から導かれるものである。

ただし「可逆過程」と言うべきところで「両方向可逆過程」という表現をもちいた。これは、「可逆過程、かつ、その逆過程も可逆」の意味である。凍結系を対象にしなければ、可逆過程は常に両方向可逆過程なのでこれを区別する必要はない。だが、凍結系の存在を考えるとこの区別が必要になる。なぜなら凍結過程は、可逆ではあるがその逆の解凍過程が不可逆のため両方向可逆とは言えないからである。(解凍すると、その逆の凍結過程で元と同じ凍結状態に戻れるとは限らないので、解凍過程は不可逆過程である。) 「両方向可逆過程」という表現を用いたのはこのような事情のためである。これは簡単にいえば、解凍過程(エントロピー発生)やその逆の凍結過程(エントロピー消滅)を含まない、準静的過程の意味である。

[命題 - 1] とカルノーサイクルが成立していると我々も考えるので、[命題 - 2] も当然(上に述べた但し書き付きで)成り立っている。

(A2-1) 式の等号関係から、状態量としての熱力学的エントロピーの存在が導かれ、定義される：

$$S(B) - S(A) = \int_A^B \frac{d'Q}{T}. \quad (\text{A2-2})$$

ただし右辺は上に述べた「両方向可逆過程」についての積分である。

[命題 - 3] 系の、状態 A から B への任意の変化は、不等式

$$\int_A^B \frac{d'Q}{T} \leq S(B) - S(A) \quad (\text{A2-3})$$

を満たす。A → B の変化が「両方向可逆過程」のとき等号となる（狭義の熱力学第二法則）。

A → B が凍結過程の場合この命題は成り立たない。例えばシラード機関を考えてみよう。A として n-状態、B として m-状態、A → B を単に仕切り板を入れる過程 ($d'Q = 0$) とする。すると左辺はゼロ、右辺は $-k \log 2$ となり、(A2-3) 式はあきらかに正しくない。[命題 - 3] は A → B の過程に B → A の「両方向可逆過程」を付け加えてサイクルにしたとき、それが [命題 - 2] を満足するサイクル（すなわち実現可能なサイクル）であれば成り立つ。A → B が凍結過程のときはこのサイクルが実現不可能なサイクルになってしまう。上のシラード機関の例でいえば、B → A を「両方向可逆過程」で実行しようとするれば、「書き込みの逆過程」を用いなければならないので

$$\oint \frac{d'Q}{T} = \int_A^B \frac{d'Q}{T} + \int_B^A \frac{d'Q}{T} = 0 + (S(A) - S(B)) = k \log 2 > 0. \quad (\text{A2-4})$$

となって [命題 - 2] の不等式 (A2-1) を破っている。すなわち現実にこのようなサイクルを実行することはできない。ゆえに、単に仕切り板を挿入する過程にたいしてはこの命題は成立しないのである。（このサイクルが実現不可能であるのは、仕切り板の挿入結果が“0”であるか“1”であるかが判らず、したがって書き込みの逆過程が実行できないためである。これを実行できる者がいるとすれば、彼（または彼女）はマクスウェルの悪魔と呼ばれることになる。）シラード機関を例にとって説明したが、一般の凍結過程でも事情は同じである。こうして、[命題 - 3] は A → B が凍結過程を含まない場合にのみ成立する。

[命題 - 4] 断熱系のエントロピーは減少しない（エントロピー増大の法則）。

[命題 - 3] おいて $d'Q = 0$ として導かれる命題である。[命題 - 3] が常に成り立つとは限らない以上、この命題も常に成り立つとは限らない。

以上の議論をまとめると、[命題 - 1, 2] は無修正であるが、[命題 - 3, 4] は無条件で成り立つとは言えないということになる。

補 - 3 QFP の AND 演算における「エントロピー発生過程による消去」

§5 で述べたバイアスポテンシャルは、問題にしている素子と相互作用している他の素子のメモリ内容によって決まる。書き込み時におけるバイアスポテンシャルの符号は、相互作用している奇数個の素子のメモリ内容の多数決で決まる。

さて、AND 演算としてつぎのようなプロセスを考える。素子 A', B' に記録されている情報を素子 A と B にコピーし、A AND B の結果を素子 C に書き込み、その後 A と B の情報を消去する。この A と B の情報の消去が、等エントロピー過程となるかエントロピー発生過程となるかを考える。

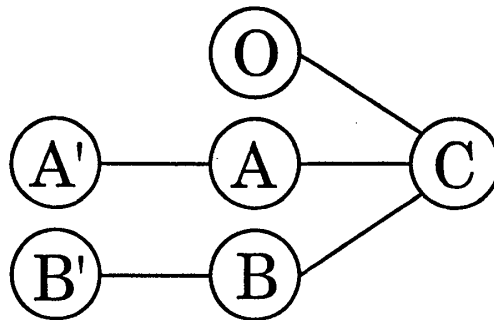


図 4: AND 演算回路

図 4 において、素子 O は “0” なる定数のみを持つ素子である。はじめ、A', B' 以外の素子は n-状態にある。次に A, B, O を m-状態に変化させる。このとき、A と B はそれぞれ A' と B' によるバイアスポテンシャルを受けているので、同じ情報がコピーされることになる。次のステップは、A' と B' を n-状態にすることである。この消去過程は、A と B によるバイアスポテンシャルの影響下で行われるので等エントロピー過程による消去となる。

次が AND 演算であり、C を n-状態から m-状態に変化させる。(O と A と B の多数決でバイアスポテンシャルの符号が決まる。) そして最後に、A と B の情報が消去される。このとき、C によるバイアスポテンシャルの影響下でこれが行われるので A, B のメモリ内容が C と同じときは等エントロピー過程による消去、異なるときにはエントロピー発生過程による消去となる。結果をまとめると表のようになる。

A	B	C	エントロピーを発生する素子	論理的
1	1	1	なし	可逆
1	0	0	A	不可逆
0	1	0	B	
0	0	0	なし	

ここで注意すべき点は、論理的に不可逆でもエントロピーの発生無しで消去される場合 (この例では A=0, B=0, したがって C=0 の場合) があることである。

本文 (§5) では、エントロピー発生過程による消去として、バイアスポテンシャルのない状態での消去のみを論じた。実際の QFP の場合には、ハードウェア上の制約により、計算の論理上では不必要なバイアスポテンシャルが加わった状態で情報消去が行われる。そのバイアスポテンシャルの符号が書き込み時と同じ場合は等エントロピー過程による消去、逆符号の場合はエントロピー発生を伴う消去となる。

参考文献

- [1] R. Landauer: “Irreversibility and heat generation in the computing process”,
IBM J. Res. Dev. 5 (1961) 183.
- [2] C.H. Bennett: “Demons, engines and the second law”, Scientific American (Nov. 1997) 88.
- [3] R.F. Feynman: “Feynman Lectures on Computation” (Adison-Wesley, 1997).
- [4] 鎮目浩輔: 「情報消去と熱散逸」, 物性研究 vol 116 no2(1996年5月) 270.
- [5] 戸田盛和: 「統計物理学」(岩波講座 現代物理学の基礎 6) 第2章(岩波書店 1972).
- [6] W. Hioe and E. Goto: “Quantum Flux Parametron” (World Scientific, 1991).