

## 情報熱力学の構築：ランダウアー原理を超えて

沙川貴大<sup>1</sup>, 上田正仁<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> 東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻

<sup>2</sup> ERATO-JST マクロ量子制御プロジェクト

(Dated: June 20, 2010)

情報処理やフィードバック制御を含むプロセスには、熱力学第二法則はそのままの形では適用できない。このことは、はやくも 19 世紀に「Maxwell のデーモンのパラドックス」として指摘され、熱力学や統計力学の根本原理に関わる問題としてたくさんの研究者によって議論されてきた。我々は最近、情報処理のプロセスにも適用できる形に、熱力学第二法則を拡張することに成功した。これは、量子・古典をとわず、微小系における情報処理の基本原則としての役割を果たすと考えられる。本稿では、我々の結果と、その意義について述べる。

### I. イントロダクション

情報と熱力学の関係について、初めて本格的な定量的解析を行ったのは Szilard である [1]. 1929 年に彼が発表した熱機関のモデル — Szilard エンジン — によれば、熱機関に対して測定を行って 1 ビット（自然対数で  $\ln 2$  ナット）の情報を得て、それをを用いたフィードバックを行うと、通常の熱力学の限界よりも  $k_B T \ln 2$  だけ多くの熱力学的エネルギー（仕事）が取り出せる（ $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は環境の温度）。図 1 にその模式図を示す。

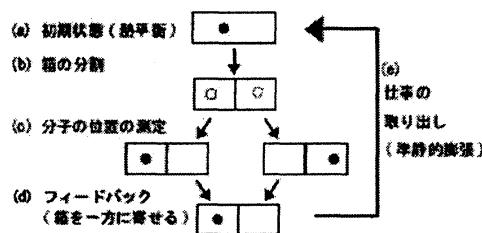


FIG. 1: Szilard エンジンの模式図.

Szilard エンジンとは、等温サイクルから正の仕事は取り出せないという熱力学第二法則と、一見すると矛盾しているように見える。このように第二法則を破っているかに見える存在が「Maxwell のデーモン」に他ならない。それと第二法則の整合性がどうやって保証されるのか

という問題は、「Maxwellのデーモンのパラドックス」として、Brillouin, Landauer, Bennettらによって議論されてきた [1, 2]. とくに Landauer と Bennett の議論によれば, 測定で得た情報がメモリ (=測定器=コントローラ=デーモン) に蓄えられているので, その情報を消去して初めて全体としてサイクルをなす. そして, メモリから1ビットの情報を消去するには必ず  $k_B T \ln 2$  以上の仕事 (エネルギー) が必要であると主張した. これは Landauer 原理と呼ばれ, Maxwellのデーモンのパラドックスの解決として最近まで広く受け入れられてきた.

しかしながら, Szilard エンジンは特定のモデルに基づいた思考実験であり, Landauer や Bennett の議論もそうであった. すなわち, 従来の研究においては, モデルに依存しない一般的な結論が存在していなかった. 論文 [3-5] において, 我々は情報処理のプロセスにも適用できる形に, 微小系の熱力学第二法則を拡張することに成功した. その結果は, 量子系にも古典系にも適用することができ, モデルの詳細に依存しないユニバーサルなものになっている.

なお, メモリの情報を消去する必要がない場合や, フィードバック制御の対象である微小系の熱力学的エネルギー収支だけを問題にする場合は, Szilard エンジンから取り出せる仕事は実際に有用なものになりうる. 現代的な観点からは, Maxwellのデーモンは, 情報を利用して, 第二法則と矛盾はせずに, 熱ゆらぎを仕事や自由エネルギーに変換できるデバイスである, と理解できる. 実際, 我々は, Szilard エンジンと本質的には同じ動作をするシステムを, 実験で実現することに成功した [6].

## II. 主要な結果

我々の主要な結果は, 以下に述べる三つの不等式からなる. いずれの場合も, 温度  $T \equiv (k_B \beta)^{-1}$  の単一の熱浴と接触しながらの情報処理を考える. セットアップと証明の詳細は [3, 4] にある.

まず, 熱力学系  $S$  に対して, 「Maxwellのデーモン」が測定とフィードバック ( $S$  が量子系の場合は, 量子測定と量子フィードバック) を行う状況を考える. このプロセスでの  $S$  の自由エネルギーの変化を  $\Delta F^S$  とする. もしも測定とフィードバックがなければ, このプロセスで  $S$  から取り出せる仕事  $W_{\text{ext}}^S$  は  $-\Delta F^S$  でバウンドされる:  $W_{\text{ext}}^S \leq -\Delta F^S$ . これは伝統的な熱力学第二法則に他ならない. しかし Maxwellのデーモンが測定とフィードバックを行えば, 伝統的な熱力学よりも多くの仕事を取り出すことができ, その上限は不等式

$$W_{\text{ext}}^S \leq -\Delta F^S + k_B T I \quad (1)$$

で与えられる [3]. これが我々の一つ目の結果である. ここで  $I$  は測定で得た相互情報量である [7, 8]. 被測定系が量子系の場合は,  $I$  は量子測定の効果を含んだ一般化された相互情報量になる: これは小澤 [9] によって初めて導入された. 不等式 (1) は, システム  $S$  の初期状態がカノニカル分布であるという条件のもとで成立する.

次に, デーモンが動作するために必要な仕事量を考える. デーモンは測定とフィードバックを行うので, 情報を蓄えるメモリを保持してはならない. そこで, デーモンとこのメモリを同一視して,  $M$  と書く. 実際, 測定とフィードバックを行うためには, メモリに対応する物理的自由度があれば十分である. メモリ  $M$  は, 測定結果  $k$  ( $k = 1, 2, 3, \dots$ ) を蓄えることができるとする. また, 測定前には, メモリは標準状態  $k = 0$  にあるとする (なお, 標準状態は  $k = 1, 2, \dots$  のどれかであっても構わない, 言い換えれば  $k = 0$  も何らかの測定結果に対応していても構わないものとする). 数学的に言えば, メモリに対応する Hilbert 空間が,  $k = 0, 1, 2, \dots$  でラベリングされた直交部分空間の直積に分解されている. これらの部分空間にメモリの密度演算子のサポートが含まれているとき, メモリは測定結果  $k = 1, 2, \dots$  を蓄えている (または標準状態  $k = 0$  にある) ことになる.

メモリが  $k = 0, 1, 2, \dots$  に対応する状態にあり, かつその条件のもとで平衡状態にあるとき, メモリの自由エネルギーを  $F_k^M$  とする. 数学的に言えば, メモリのハミルトニアンを  $\hat{H}$  とし, それが各部分空間にサポートをもつ部分ハミルトニアン  $\hat{H}_k$  の直和で書かれているとする:  $\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k$ . このとき,  $\hat{\rho}_k \equiv e^{-\beta \hat{H}_k} / \text{tr}[e^{-\beta \hat{H}_k}]$  で与えられる状態が条件付きカノニカル分布であり,  $F_k^M \equiv -k_B T \ln \text{tr}[e^{-\beta \hat{H}_k}]$  が対応する自由エネルギーである. したがって, 測定前のメモリの自由エネルギーは  $F_0^M$  であり, 測定結果  $k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) を得たときの自由エネルギーは  $F_k^M$  である. 測定結果  $k$  を得る確率を  $p_k$  とすると, 測定プロセスでの平均の自由エネルギー変化は

$$\Delta F^M \equiv \sum_k p_k F_k^M - F_0^M \quad (2)$$

となる.  $\Delta F^M$  はメモリの構造 (ポテンシャルの形状など) によって決まる.

ここで, 我々の二つ目の主要な結果を述べる. 測定のプロセスで, メモリに必要な仕事量  $W_{\text{meas}}^M$  の下限は

$$W_{\text{meas}}^M \geq -k_B T (H - I) + \Delta F^M \quad (3)$$

で与えられる [4]. ここで  $H \equiv -\sum_k p_k \ln p_k$  は測定後のメモリの Shannon 情報量である. この不等式は,  $H = I$  かつ  $\Delta F^M = 0$  の場合には, 古くから知られた不等式  $W_{\text{meas}}^M \geq 0$  に帰着する [1]. なお不等式 (3) は, メモリの初期状態が  $k = 0$  に対応するカノニカル分布であるという条件のもとで成立し, システム  $S$  の状態については何も仮定していない.

次に、メモリ  $M$  がシステム  $S$  から離れた状況を考え、メモリからそれが蓄えている情報を消去するプロセスを考える。情報の消去とは、メモリの状態が、確率 1 で  $k = 0$  に戻ることである。ここで、情報の消去を考えるときは、メモリを何か別の系によって測定したりしてはならない、ということに注意が必要である。というのも、そういった測定をしてしまうと、その測定器にやはり情報が残ってしまい、消去したことにならないからである。したがって、メモリと熱浴だけがある状況を考える。

情報の消去の際にメモリに必要な仕事量  $W_{\text{eras}}^M$  の下限は、

$$W_{\text{eras}}^M \geq k_B T H - \Delta F^M \quad (4)$$

で与えられる [4]。これが我々の三つ目の主要な結果である。とくに  $\Delta F^M = 0$  の場合は、(4) は

$$W_{\text{eras}}^M \geq k_B T H \quad (5)$$

となり、Landauer 原理に帰着する [1]。しかし一般には、 $\Delta F^M > 0$  ならば、Landauer 原理が与える下限よりも少ない仕事で情報を消去することが可能である。なお不等式 (4) は、メモリの初期状態が条件付き平衡にあるという条件のもとで成立する。

### III. 主要な結果についての考察

前節で述べた三つの不等式 (1), (3), (4) においては、情報量  $H$ ,  $I$  と、熱力学量  $W$ ,  $F$  が対等に扱われる形になっている。さらに、情報量のタームをすべてゼロにすると ( $H = I = 0$ )、これらは全て伝統的な熱力学第二法則

$$W \geq \Delta F \quad (6)$$

に帰着する。この意味で、これらの不等式は、情報処理過程への熱力学第二法則の一般化 — 情報熱力学の第二法則と呼びうるもの — になっている。伝統的な熱力学第二法則が、熱力学的なプロセスに必要な最小仕事を与えたように、情報熱力学の第二法則は、情報処理過程に必要な最小仕事（最小エネルギーコスト）を与える。言いかえれば、フィードバック、測定、情報の消去のプロセスにおけるエネルギーコストが、これらの不等式の導出によってはじめて明らかになったと言える。また、我々の結果は、量子情報理論と量子非平衡統計力学に基づいて導出されたが、古典極限でも形を変えない。したがって、結果は量子と古典の両方の領域に適用できる。量子効果は、 $F$  や  $I$  の具体的な形の中に現れることになる。

また, (3) と (4) を合計することで, 次の不等式を得ることができる:

$$W_{\text{meas}}^{\text{M}} + W_{\text{eras}}^{\text{M}} \geq k_{\text{B}} T I. \quad (7)$$

ここで不等式の下限が, 自由エネルギー差 (メモリの形状) にも Shannon 情報量にもよらず, 測定で得た相互情報量だけで決まることが注目になる。すなわち, 不等式 (3) と (4) の下限は, メモリの形状 (それは  $\Delta F^{\text{M}}$  に反映される) を変えればいくらでも大きくも小さくも出来るが, それらを合計した不等式 (7) の下限は, 相互情報量だけに依存し, 常に 0 以上である。また, 不等式 (7) は Landauer 原理 (5) に似ているが, 物理的にはまったく異なる内容をもっている。その点について, 以下の二点を強調しておきたい。

- 不等式 (7) の下限は相互情報量であるのに対して, 不等式 (5) の下限は Shannon 情報量である。この二つの情報量は, 定性的にも定量的にも異なる意味をもっている。たとえば, Shannon 情報量は測定プロセスに依存しないが, 相互情報量は測定プロセス (POVM など) に依存する。Landauer 原理 (5) が意味することは, 情報を消去する際には, メモリが蓄えている情報に対応するエントロピー (それは Shannon 情報量で特徴づけられる) を, 熱浴に捨てる必要があるということである。一方で, 我々の不等式 (7) が意味することは, 測定と消去のプロセスにおいて, 途中でシステム S とメモリ M の間に生じた相関 (それは相互情報量で特徴づけられる) を必ず熱浴に捨てる必要がある, ということである。すなわち, 何を捨てているか, に関する物理的な描像が異なるのである。この点については, 別の論文で詳しく議論する予定である。
- 我々の不等式 (3) と (4) は, 測定と消去の境界を適当に変えて (それぞれを適当に再定義して) 不等式 (5) を分解した, というわけでは, 決してない。これは, 合計した下限が異なる情報量で与えられるという, 上記の点からも明らかである。それだけではなく, 我々は, 測定と消去がそれぞれ何であるかについての広く用いられている定義 [1] を採用し, その定義のもとでもなお, メモリの構造によって決まる  $\Delta F^{\text{M}}$  を変えることで (3) と (4) の下限がそれぞれ変わりうることを主張している。

また, 不等式 (1) と (7) を合計することで, システム S とメモリ M をあわせた系に対する熱力学第二法則

$$W_{\text{ext}}^{\text{S}} - W_{\text{meas}}^{\text{M}} - W_{\text{eras}}^{\text{M}} \leq -\Delta F^{\text{S}} \quad (8)$$

が成り立つことがわかる。とくに  $\Delta F^{\text{S}} = 0$  の場合を考えると  $W_{\text{ext}}^{\text{S}} - W_{\text{meas}}^{\text{M}} - W_{\text{eras}}^{\text{M}} \leq 0$  となり, システム S とメモリ M をあわせた系からはサイクルで正の仕事を取り出すことはで

きない、言い換えれば第二種永久機関はできないことがわかる。これは、Maxwellのデーモンが余分に取り出せる仕事  $k_B T I$  が、測定と消去のプロセスでデーモンに要する仕事によってちょうど打ち消されてしまうことによる。この意味で、Maxwellのデーモンは熱力学第二法則と矛盾していないことがわかる。

デーモン（メモリ）とシステムをあわせた系でサイクルを考えると熱力学第二法則と矛盾しないこと自体は、以前からよく認識されていた [1, 2]。しかし、その際に、サイクルの具体的にどのプロセスでデーモンに仕事が必要なのか、ということは今まで明らかになっていなかった。一般には、消去のプロセスだけでなく、測定と消去の両方のプロセスを考えなければ、デーモンに必要な仕事はそれが取り出した仕事を打ち消すことはできない、というのが我々の発見である。すなわち、我々の結果によって、デーモンが「なぜ、どのようにして」第二法則と矛盾しないかについての、(統計力学に基づいた) 厳密な証明が初めて与えられ、Maxwellのデーモンのパラドックスが最終的に解決されたと考えられる。

#### IV. 二状態メモリ

具体例として1ビットの古典メモリを考え(図2)，その場合について、不等式(4)の簡単な証明を与えることにする。それによって、我々の結果と熱力学第二法則の整合性についても議論する。本節での証明と議論は、この具体例に限定されるものではなく、より一般的な場合のエッセンスを含んでいると考えられる。

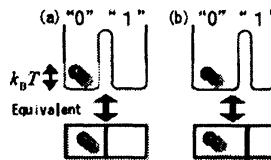


FIG. 2: 二状態メモリの模式図.

##### A. セットアップ

メモリの二重井戸ポテンシャルの左側に粒子が入っている状態を“0”，右側に粒子が入っている状態を“1”とする(図2)。ポテンシャルの中央の障壁の大きさが熱ゆらぎに比べて十分に大きければ、二つの井戸を二つの箱で置き換えることができる。左右の箱の体積比を  $t : 1 - t$  ( $0 < t < 1$ ) とする。情報を消去する前の初期状態において、左側の箱に粒子が

入っている（メモリの状態が“0”である）の確率を  $p$  とする。  $t = 1/2$  のとき、メモリは対称であるということにする。メモリの初期状態は、  $p = t$  のときにかぎり、平衡状態にある。

なお、メモリは任意の確率分布  $\{p, 1-p\}$  を蓄えることができることを強調しておきたい。というのも、そうでなければ、メモリがメモリとしての機能を果たせないからである。実際、もしも測定に誤差がなければ、  $p$  は被測定系の確率分布だけで決まり、メモリの構造には依存しない。なお、メモリの構造は  $t$  で特徴づけられている。一般には  $p \neq t$  でありうる。

このとき、Landauer 原理 (5) における Shannon 情報量  $H$  は、  $H(p) \equiv -p \ln p - (1-p) \ln(1-p)$  で与えられる。  $t = 1/2$  の対称メモリの場合は、Landauer 原理 (5) は、  $p \neq t$  の場合も含めて成り立つことが示されてきた [1, 2]。我々の仕事は、今のセットアップで言えば、これを  $t \neq 1/2$  の場合にも拡張することである。

### B. 非平衡状態における熱力学第二法則

不等式 (4) を証明するために、論文 [4] とは異なる出発点をとる。それは、非平衡状態に拡張された熱力学第二法則である。二状態メモリとは限らず一般の系において、たとえ始状態と終状態が熱平衡になくても、次の不等式が成立する [1, 2, 10–12]：

$$\Delta S \geq \beta Q. \quad (9)$$

ここで  $Q$  はシステムが吸収した熱量であり、  $\Delta S$  は古典系の場合は Shannon エントロピー、量子系の場合は von Neumann エントロピーである [7, 8]。これらのエントロピーは非平衡状態でも定義されている。不等式 (9) は、始状態と終状態が熱平衡状態にある場合には、Clausius の不等式に帰着する。しかしここで重要な点は、(9) は始状態と終状態が熱平衡でなくとも成立するという点である。本稿の付録でこの不等式の証明を与える。

### C. 不等式 (4) の証明と熱力学第二法則の整合性

確立されている情報理論によれば [7, 8]、メモリの Shannon または von Neumann エントロピー  $S^M$  は、次のように分解することができる：

$$S^M = pS_0^M + (1-p)S_1^M + H(p). \quad (10)$$

ここで  $S_k^M$  は、“ $k$ ” ( $= 0, 1$ ) を蓄えているという条件のもとでの条件付きエントロピーである。この分解は、トータルのエントロピーを、情報処理に関与する部分（情報量）とそれ以

外の部分（熱的なエントロピー）に分解したことに対応している。我々は条件付きのメモリの状態は熱平衡であると仮定するので、それに対応する自由エネルギーは  $F_k^M = -\beta^{-1}S_k^M$  と書ける。なおここで，“0” and “1” のエネルギーが等しいことを用いて、右辺のエネルギーの項を無視した。

情報を消去するには、メモリの状態を確率 1 で “0” にもってくる必要がある。したがって、消去の前後でのエントロピーの変化は  $\Delta S^M = S_0^M - (pS_0^M + (1-p)S_1^M + H(p))$  となる。ここで不等式 (9) を用いると、(4) を導出することができる：

$$W_{\text{eras}}^M = Q \geq -\beta^{-1}\Delta S^M = \beta^{-1}H(p) - (1-p)(F_1^M - F_0^M). \quad (11)$$

ここで  $(1-p)(F_1^M - F_0^M) = (1-p)[\ln t - \ln(1-t)]$  は条件付きの自由エネルギーの平均の差である。実際、条件付きの自由エネルギーの平均は、消去の前は  $pF_0^M + (1-p)F_1^M$  で、消去のあとは  $F_0^M$  で与えられ、 $[pF_0^M + (1-p)F_1^M] - F_0^M = (1-p)(F_1^M - F_0^M)$  が成り立つ。

$t = 1/2$  の対称メモリの場合は、情報量  $H(p)$  の消去に対応して減少するエントロピーは、環境に熱として散逸するしかなかった。というのも、 $S_0^M = S_1^M$  なので  $\Delta S^M = -H(p) \geq \beta^{-1}Q$  が成り立つからである。一方、非対称メモリの場合は、情報の消去によるエントロピーの減少は、メモリ自身の熱力学的なエントロピー  $S_0^M - (pS_0^M + (1-p)S_1^M)$  によって吸収されることが可能になる。したがって  $\Delta S^M = 0$  となりうる。これが、熱力学第二法則に矛盾せず Landauer 原理の下限よりも少ない仕事量で情報の消去が可能であることの物理的意味である。

## V. 熱力学についての考察

最後に、我々の議論はそもそも「熱力学」なのか？という問題を考えたい。

まず、「熱力学」を通常の、マクロな体系に適用可能なユニバーサルな体系 [13-16] として理解したとき、答えはおそらく No である。これは二つの観点から説明できる。

- 第一に、我々の結果における情報の項  $k_B T I$  や  $k_B T H$  は、情報量が 1 のオーダーの量である限り、熱力学極限で他の項に比べて無視できる大きさになってしまう。測定で得る情報量がアボガドロ数のオーダーならばこれらの項は熱力学極限でも残るが、そのためにはアボガドロ数のオーダーの回数の測定を行わなければならない、これは非現実的である。
- 第二に、もっと重要かつ微妙な点として、我々の証明においては、熱力学系の熱平衡状態がカノニカル分布であると仮定している点がある。これは、マクロ系においては、



一般には正しくないことが知られている。これと本質的には同じ問題は、マクロ系の場合は、非平衡状態の第二法則 (9) の左辺の Shannon または von Neumann エントロピーが、一般には熱力学エントロピーとは異なるかもしれないという問題がある。一般にこの論点は、(我々の結果の文脈を離れても) 十分に理解されているとは言えず、これからの研究が待たれる [17, 18].

しかし我々の結果は、これまでも述べたように、微小系においては厳密に正しいと考えられる。上記の二つの論点に則して考えるならば、

- 微小系においては、仕事や熱や自由エネルギーが  $k_B T$  のオーダーになり、情報量の項はそれと同程度の寄与をする。単一原子や単一分子のレベルでの情報処理を行うことが可能になってきた近年のナノサイエンス・ナノテクノロジーにおいて、我々の結果は実用的な意味をもつと考えられる。
- 微小系においては、その熱平衡状態が厳密にカノニカル分布に従っているかどうかを実験で直接検証可能であり、かつ実際にカノニカル分布であることが多くの系で確かめられている。量子ドットや単一高分子、コロイド粒子といった微小非平衡系においては、我々が用いた仮定は正当化される。実際、近年注目を集めている「ゆらぎの定理」や「Jarzynski 等式」[19] は、微小系で成り立っていることが実験で確認されており、少なくともそれらと同程度の妥当性をもって、我々の結果は正しくかつユニバーサルであると言える。

すなわち、「情報熱力学」における「熱力学」とは、マクロ系における熱力学の意味というよりもむしろ、「微小系における熱力学」あるいは「確率的熱力学 (stochastic thermodynamics)」の意味として理解することができる [20, 21]. この新しい (あるいは、拡張された) 意味での「熱力学」は、近年さかんに研究されており、微小な情報処理デバイスや生体内の高分子の動きといった、多くの系に適用可能であることが明らかに成りつつある。このような微小系においても、情報処理がなければ、伝統的な熱力学第二法則 (6) が (平均値の意味で) 成り立つことが知られている (なお、微小系における第二法則の確率的な破れの性質は「ゆらぎの定理」として知られている)。ここにさらに「情報」を定量的に取り入れたものが、我々の言う意味での情報熱力学である。

では、このような「微小系の熱力学」の適用範囲はどこまでか? それとマクロ系の熱力学はどのようにつながっているのか? たとえば、100 原子程度の「人工の固体」— 量子コンピュータの候補である光格子中の冷却原子気体 — に、微小系の熱力学は適用可能か? こ

れは未開拓の、基礎物理としても応用物理としても重要な問題であると考えられる。このことが明らかにいなくなったとき、「ミクロ」と「マクロ」のクロスオーバーに新しい光が当たるかもしれない。

## APPENDIX A: 非平衡状態における熱力学第二法則

この付録では、非平衡状態における熱力学第二法則 (9) の証明を二通りの方法で行う。他の証明は、たとえば [1, 12] などにある。なお、環境と強く相互作用した系の場合は、エントロピーの定義などを補正する必要があることが知られている [22, 23]。

### 1. 不等式 (9) の導出 1 : 古典ゆらぎの定理

まずは、不等式 (9) を Crooks のゆらぎの定理 [10, 11] に基づいて証明する。単一の熱浴 (温度  $T \equiv (k_B\beta)^{-1}$ ) に接触している古典熱力学系の、時刻 0 から  $\tau$  までの確率的時間発展を考える。コントロール可能な外部パラメータを  $\lambda$  とし (たとえば光ピンセットの周波数などを表す)、そのコントロール・プロトコルを  $\lambda \equiv \{\lambda(t)\}_{0 \leq t \leq \tau}$  とする。時刻  $t$  におけるシステムの位相空間点を  $x(t)$  とし、 $\mathbf{x} \equiv \{x(t)\}_{0 \leq t \leq \tau}$  を軌道とする。

次に、逆過程を考える。そのコントロール・プロトコルは  $\lambda^\dagger \equiv \{\lambda^\dagger(t)\}_{0 \leq t \leq \tau}$  (ここで  $\lambda^\dagger(t) \equiv \lambda(\tau - t)$ ) で与えられる。また、位相空間点  $x$  の時間反転を  $x^*$  とする。たとえば、位置  $q$  と運動量  $p$  によって  $x = (q, p)$  と書けるならば、 $x^* = (q, -p)$  となる。軌道  $\mathbf{x}$  の時間反転は  $\mathbf{x}^\dagger \equiv \{x^\dagger(t)\}_{0 \leq t \leq \tau}$  (ここで  $x^\dagger(t) \equiv x^*(\tau - x)$ ) となる。

Crooks のゆらぎの定理は

$$\frac{P^\dagger[\mathbf{x}^\dagger | x_0^\dagger]}{P[\mathbf{x} | x_0]} = e^{\beta Q[\mathbf{x}]}, \quad (\text{A1})$$

である。ここで  $P[\mathbf{x} | x_0]$  は、コントロール・プロトコルが  $\lambda$  で初期状態が  $x_0$  であるという条件のもとで、軌道  $\mathbf{x}$  が実現される確率密度である。また逆過程を考えたとき、 $P^\dagger[\mathbf{x}^\dagger | x_0^\dagger]$  は、コントロール・プロトコルが  $\lambda^\dagger$  であり逆過程の始状態が  $x_0^\dagger$  であるという条件のもとで、軌道  $\mathbf{x}^\dagger$  が実現される確率密度である。さらに  $Q[\mathbf{x}]$  は、コントロール・プロトコル  $\lambda$  のもとで軌道  $\mathbf{x}$  に沿ってシステムが時間発展するときに、それが熱浴から吸収する熱量である。

$P(x_0)$  と  $P(x_\tau)$  を、順操作における初期分布と終分布とする。これらは任意の分布でよく、カノニカル分布である必要はない。式 (A1) の両辺に  $P(x_\tau)/P(x_0)$  をかけて、

$$\frac{P^\dagger[\mathbf{x}^\dagger | x_0^\dagger] P(x_\tau)}{P[\mathbf{x}]} = e^{\ln P(x_\tau) - \ln P(x_0) + \beta Q[\mathbf{x}]} \quad (\text{A2})$$

を得る。ここで  $P[\mathbf{x}]$  は順操作において軌道  $\mathbf{x}$  が実現する確率である。したがって

$$\langle e^{\ln P(x_\tau) - \ln P(x_0) + \beta Q[\mathbf{x}]} \rangle \equiv \int dx_0 \mathcal{D}\mathbf{x}_{t>0} P[\mathbf{x}] e^{\ln P(x_\tau) - \ln P(x_0) + \beta Q[\mathbf{x}]} = \int dx_0 \mathcal{D}\mathbf{x}_{t>0} P^\dagger[\mathbf{x}^\dagger | x_0^\dagger] P(x_\tau) \quad (\text{A3})$$

が成り立つ。ここで  $\mathcal{D}\mathbf{x}_{t>0}$  は、 $x_0$  を固定したときの経路積分要素である。また、 $\mathcal{D}\mathbf{x} \equiv dx_0 \mathcal{D}\mathbf{x}_{t>0}$  と書くことにする。 $\mathcal{D}\mathbf{x} = \mathcal{D}\mathbf{x}^\dagger$  および  $\mathcal{D}\mathbf{x}^\dagger = dx_0^\dagger \mathcal{D}\mathbf{x}_{t>0}^\dagger$  が成り立つこと、また  $x_\tau$  は  $x_0^\dagger$  だけで決まること ( $x_\tau = (x_0^\dagger)^*$ ) に注意して、

$$\langle e^{\ln P(x_\tau) - \ln P(x_0) + \beta Q[\mathbf{x}]} \rangle = \int dx_0^\dagger \mathcal{D}\mathbf{x}_{t>0}^\dagger P^\dagger[\mathbf{x}^\dagger | x_0^\dagger] P((x_0^\dagger)^*) = 1 \quad (\text{A4})$$

を得る。ここに Jensen の不等式を適用して、

$$S_\tau - S_0 \geq \beta \langle Q \rangle \quad (\text{A5})$$

を得る。ここで  $S_\tau = -\int \mathcal{D}\mathbf{x} P[\mathbf{x}] \ln P(x_\tau) = -\int dx_\tau P(x_\tau) \ln P(x_\tau)$ ,  $S_0 = -\int \mathcal{D}\mathbf{x} P[\mathbf{x}] \ln P(x_0) = -\int dx_0 P(x_0) \ln P(x_0)$ , および  $\langle Q \rangle = \int \mathcal{D}\mathbf{x} P[\mathbf{x}] Q[\mathbf{x}]$  とした。不等式 (A5) は不等式 (9) の古典的な場合に他ならない。

## 2. 不等式 (9) の導出：量子系の場合

次に、不等式 (9) を、熱浴との相互作用が弱い量子系の場合について証明する。時刻  $t$  における、システムと熱浴をあわせた全系の密度演算子を  $\hat{\rho}(t)$  とする。全系は外界から熱的孤立しているとして、ユニタリ発展するものとする。また、 $\hat{\rho}^M(t) \equiv \text{tr}_B(\hat{\rho}(t))$ ,  $\hat{\rho}^B(t) \equiv \text{tr}_M(\hat{\rho}(t))$ , および  $\hat{\rho}_{\text{can}}^B \equiv e^{-\beta \hat{H}^B} / \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}^B})$  とする (ここで  $\hat{H}^B$  は熱浴のハミルトニアン)。全系の時刻 0 から  $\tau$  までの時間発展を考え、 $\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}^M(0) \otimes \hat{\rho}_{\text{can}}^B$  と仮定する (この仮定は熱浴とシステムの相互作用が弱いことを反映している)。また、 $S(\hat{\rho}) \equiv -\text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$  を状態  $\hat{\rho}$  に対応する von Neumann エントロピーとする。これらを用いて、

$$\begin{aligned} S(\hat{\rho}^M(0)) + S(\hat{\rho}_{\text{can}}^B) &= S(\hat{\rho}(0)) = S(\hat{\rho}(\tau)) \\ &\leq S(\hat{\rho}^M(\tau)) + S(\hat{\rho}^B(\tau)) \\ &\leq S(\hat{\rho}^M(\tau)) - \text{tr}(\hat{\rho}^B(\tau) \ln \hat{\rho}_{\text{can}}^B), \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

を得る。ここで von Neumann エントロピーの凸性と Klein の不等式を用いた。したがって  $S(\hat{\rho}^M(\tau)) - S(\hat{\rho}^M(0)) \geq \beta \text{tr}(\hat{H}^B(\hat{\rho}^B(0) - \hat{\rho}^B(\tau)))$  となり、これは弱結合の量子系における不

等式 (9) に他ならない.

---

- [1] “*Maxwell’s demon 2: Entropy, Classical and Quantum Information, Computing*”, H. S. Leff and A. F. Rex (eds.), (Princeton University Press, New Jersey, 2003).
- [2] K. Maruyama, F. Nori, and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1 (2009).
- [3] T. Sagawa and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 080403 (2008).
- [4] T. Sagawa and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 250602 (2009).
- [5] T. Sagawa and M. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 090602 (2010).
- [6] S. Toyabe, T. Sagawa, M. Ueda, E. Muneyuki, and M. Sano, submitted.
- [7] T. M. Cover and J. A. Thomas, “*Elements of Information Theory*” (John Wiley and Sons, New York, 1991).
- [8] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, “*Quantum Computation and Quantum Information*” (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [9] M. Ozawa, *J. Math. Phys.* **27**, 759 (1986).
- [10] G. E. Crooks, *Phys. Rev. E* **60**, 2721 (1999).
- [11] C. Jarzynski, *J. Stat. Phys.* **98**, 77 (2000).
- [12] H. P. Breuer and F. Petruccione, “*The theory of open quantum systems*,” (Oxford, 2002).
- [13] H. B. Callen, “*Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, 2nd Edition*,” (John Wiley and Sons, New York, 1985).
- [14] 佐々真一, 『熱力学入門』, 共立出版 (2000).
- [15] 田崎晴明, 『熱力学 — 現代的な視点から —』, 培風館 (2000).
- [16] 清水明, 『熱力学の基礎』, 東京大学出版会 (2007).
- [17] J. von Neumann, *Zeitschrift fuer Physik* **57**, 30-70 (1929); translated in arXiv:1003.2133.
- [18] S. Goldstein *et al.*, arXiv:1003.2129 (2010).
- [19] C. Jarzynski, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2690 (1997).
- [20] 関本謙, 『ゆらぎのエネルギー論』, 岩波書店 (2004).
- [21] C. Bustamante *et al.*, *Physics Today* **58**, 43 (2005).
- [22] C. Jarzynski, *J. Stat. Mech: Theor. Exp.* P09005 (2004).
- [23] C. Horhammer and H. Buttner, *J. Stat. Phys.* **133**, 1161 (2008).