

“情報理論と小さな系の熱力学”: 講義資料 (ver. 1.11)¹
第一回若手勉強会「非平衡統計力学の基礎理論」²

伊藤 創祐³

平成 29 年 9 月 25 日

¹ノート配布先: <http://http://sosuke110.com/NoteBenkyokai.pdf>. このノートは古典情報理論の基礎から、情報熱力学における我々[Ito-Sagawa]の最新の成果までを、ごまかしなしにきちんと説明するという目的でつくられています。これは実際の講義の補助的なノートであり、実際の講義はこれを縮小した内容で講義する予定です。

²慶応大学, 2014 年 8 月 7 日: <http://sfs-dynamics.jp/kenkyukai/20140806/index.html>

³メール: [sosuke\(at\)daisy.phys.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:sosuke@daisy.phys.s.u-tokyo.ac.jp). [(at) → @]. ノートにミスなどがありましたら教えていただくと幸いです。

目次

第 1 章	情報理論入門	2
1.1	確率分布	2
1.2	Shannon entropy (シャノンエントロピー)	3
1.3	Relative entropy (Kullback-Leibler divergence, 相対エントロピー)	4
1.4	相互情報量 (Mutual information)	7
1.5	Communication channel (通信路)	9
1.6	Noisy-channel coding theorem (シャノン第二定理)	11
1.7	まとめ	14
第 2 章	情報理論と小さな系の熱力学	17
2.1	詳細ゆらぎの定理 (Detailed fluctuation theorem)	17
2.2	エントロピー生成 (Entropy production)	19
2.3	フィードバック制御下での小さな系の熱力学	21
2.4	小さな“部分系”の数学的記述: Bayesian network	25
2.5	小さな“部分系”の熱力学: ネットワーク上の情報熱力学	29
2.6	まとめ, 今後の展望	36

第1章 情報理論入門

情報理論¹ —通信の入力と出力の間の確率的な相関を見ることで、通信の精度を議論する体系。

情報理論で出てくる各量は確率分布の対数の形をしているので、実験的に得られた統計的なデータから計算できる量である。情報理論で出てくる多くの不等式は確率論の基礎をなしており、確率過程で記述される小さな系の熱力学や、統計力学の研究に使えるツールである。情報理論の多くの教科書が対数の底を2として構成するが、小さな系の熱力学へと自然と拡張する為に、このノートでは自然対数 \ln を用いて構成する。

1.1 確率分布

本ノートでは簡単のため、確率変数と確率分布の記号として確率変数を X, Y, Z と大文字で、事象を x, y, z のような小文字で表し、確率分布は同一の記号 p を用いる。を用いる。

確率分布 (Probability distribution)

$p(X = x)$: 確率変数 X が x をとる確率 ($0 \leq p(X = x) \leq 1$)

$$\sum_x p(X = x) = 1 \quad (x \text{ が離散量 のとき}). \quad (1.1)$$

もしくは

$$\int dx p(X = x) = 1 \quad (x \text{ が連続量 のとき}). \quad (1.2)$$

Remark. 以後わかりやすさのために、 $p(X = x)$ を $p(x)$ と記述する。また、必要な所以外は離散の場合の表記をする。

同時確率分布 (Joint probability distribution)

$p(x, y)$: 確率変数 X, Y がそれぞれ x, y を同時に取る確率

$$\sum_{x,y} p(x, y) = 1. \quad (1.3)$$

$$\sum_y p(x, y) = p(x). \quad (1.4)$$

条件付き確率分布 (Conditional probability distribution)

$p(x|y)$: y の条件のもと、 x を取る確率

$$p(x|y) := \frac{p(x, y)}{p(y)}. \quad (1.5)$$

¹ 古典情報理論の標準的な教科書は T. M. Cover and J. A. Thomas, *Elements of Information Theory* (John Wiley and Sons, New York, 1991) が良い。日本語訳も “情報理論 -基礎と広がり-” というタイトルで出ている。

Lemma 1.1.1 (*Chain rule*)

$$p(x, y, z) = p(x|y, z)p(y|z)p(z). \quad (1.6)$$

Proof. $p(x, y, z) = p(x|y, z)p(y, z)$ より.

Lemma 1.1.2 (*Bayes' rule*)

$$p(y|x) = \frac{p(x|y)p(y)}{\sum_y p(x|y)p(y)}. \quad (1.7)$$

Proof. $p(y|x)p(x) = p(x|y)p(y)$ より.

Remark. $p(y)$ と $p(x|y)$ を既に知っているときに, 事後確率 $p(y|x)$ を求めるために使う.

1.2 Shannon entropy (シャノンエントロピー)

情報量の尺度²として, シャノンエントロピーを導入する.

Shannon entropy

$$S(X) := - \sum_x p(x) \ln p(x) \quad (x \text{ が離散量のとき}). \quad (1.8)$$

Remark. x が連続量のときは differential entropy とよばれる.

$$S(X) := - \int dx p(x) \ln p(x) \quad (x \text{ が連続量のとき}). \quad (1.9)$$

どちらのケースもアンサンブル平均 $\langle \dots \rangle$ を用いて

$$S(X) = \langle -\ln p(x) \rangle. \quad (1.10)$$

Lemma 1.2.1 (*Nonnegativity*)

$$S(X) \geq 0. \quad (1.11)$$

Proof. (x が離散量のとき) $0 \leq p(x) \leq 1$ より.³

Joint entropy

$$S(X, Y) := \langle -\ln p(x, y) \rangle \quad (1.12)$$

$$= - \sum_{x, y} p(x, y) \ln p(x, y). \quad (1.13)$$

²シャノンエントロピーそのものは, 日常的に使う “情報” という言葉とは若干異なる概念である. 日常的に使う “情報” のいう言葉に相当するのはこのシャノンエントロピーではなく, 後に導入する相互情報量である.

³ x が連続量の場合は $\int dx p(x) = 1$ の規格化条件より, $p(x)$ 自体は 1 を超えるので Nonnegativity は成り立たない.

Conditional entropy

$$S(X|Y) := \langle -\ln p(x|y) \rangle \quad (1.14)$$

$$= -\sum_{x,y} p(x,y) \ln p(x|y). \quad (1.15)$$

Lemma 1.2.2 (*Chain rule*)

$$S(X, Y) = S(X|Y) + S(Y). \quad (1.16)$$

Proof. $S(X, Y) = \langle -\ln[p(x|y)p(y)] \rangle = \langle -\ln p(x|y) - \ln p(y) \rangle$ より.

1.3 Relative entropy (Kullback-Leibler divergence, 相対エントロピー)

ほとんどの情報理論の不等式も, 熱力学第二法則も, 情報熱力学法則も, 本質的にはこの量の非負性からくる⁴. 情報理論において重要な概念であり, 小さな系の熱力学はこの量の立場から見ると見通しがよくなる.

Relative entropy (Kullback-Leibler divergence)

二つの確率分布 $p(X)$ と $q(X)$ の間の “距離” のようなもの.

$$D_{\text{KL}}(p(X)||q(X)) := \langle \ln p(x) - \ln q(x) \rangle_p \quad (1.17)$$

$$= \sum_x p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)}. \quad (1.18)$$

$\langle \dots \rangle_p$ は確率分布 p でのアンサンブル平均 (以降 $\langle \dots \rangle_p$ は省略して $\langle \dots \rangle$ とかく.)

Remark. $D_{\text{KL}}(p(X)||q(X)) \neq D_{\text{KL}}(q(X)||p(X))$ なので, 対称性を満たさないため数学的な意味の “距離” ではない. しかしながら, 後に示すように, $D_{\text{KL}}(p(X)||q(X)) \geq 0$ [任意の x で $p(x) = q(x)$ のとき等号成立] なので二つの確率分布の間の “距離” っぽい量である.

Joint relative entropy

$$D_{\text{KL}}(p(X, Y)||q(X, Y)) := \langle \ln p(x, y) - \ln q(x, y) \rangle \quad (1.19)$$

$$= \sum_x p(x, y) \ln \frac{p(x, y)}{q(x, y)}. \quad (1.20)$$

Conditional relative entropy

$$D_{\text{KL}}(p(X|Y)||q(X|Y)) := \langle \ln p(x|y) - \ln q(x|y) \rangle \quad (1.21)$$

$$= \sum_x p(x, y) \ln \frac{p(x|y)}{q(x|y)}. \quad (1.22)$$

⁴いわば全ての元凶.

Lemma 1.3.1 (*Chain rule*)

$$D_{\text{KL}}(p(X, Y) \| q(X, Y)) = D_{\text{KL}}(p(x|y) \| q(x|y)) + D_{\text{KL}}(p(y) \| q(y)). \quad (1.23)$$

Proof. $D_{\text{KL}}(p(X, Y) \| q(X, Y)) = \langle \ln p(x, y) - \ln q(x, y) \rangle = \langle \ln[p(x|y)p(y)] - \ln[q(x|y)q(y)] \rangle$ より.

以降, relative entropy の非負性 $D_{\text{KL}}(p \| q) \geq 0$ を示す準備をする. relative entropy の非負性は \ln の凸性を用いて証明できる. まずは凸性を定義しよう.

Concave function (関数の凸性)

関数 $f(g)$ が上に凸 (concave) であるとは, 任意の g^1, g^2 と $0 \leq \lambda \leq 1$ に対して,

$$f(\lambda g^1 + (1 - \lambda)g^2) \geq \lambda f(g^1) + (1 - \lambda)f(g^2), \quad (1.24)$$

であることをいう.

Remark. \ln は上に凸な関数. $f(g)$ が下に凸 (convex) とは, $-f(g)$ が上に凸.

Theorem 1.3.2 (*Jensen's inequality*)

$g(x)$ は確率変数 x の関数で, $f(g)$ が上に凸 (concave) なら, 次の不等式を満たす.

$$\langle f(g) \rangle \leq f(\langle g \rangle) \quad (1.25)$$

Proof.

(i) $x = x^1, x^2$ のみをとる場合. ($g^i := g(x^i)$)

$$\langle f(g) \rangle = p(x^1)f(g^1) + (1 - p(x^1))f(g^2) \quad (1.26)$$

$$\leq f(p(x^1)g^1 + p(x^2)g^2) \quad (1.27)$$

$$= f(\langle g \rangle). \quad (1.28)$$

(ii) $x = x^1, \dots, x^k$ のとき. $x = x^1, \dots, x^{k-1}$ までで, 定理が成り立つと仮定して, $p'(x^i) = p(x^i)/(1 - p(x^k))$ ($i = 1, \dots, k-1$) という確率分布を導入すると,

$$\langle f(g) \rangle = \sum_{i=1}^k p(x^i)f(g^i) \quad (1.29)$$

$$= p(x^k)f(g^k) + (1 - p(x^k)) \sum_{i=1}^{k-1} p'(x^i)f(g^i) \quad (1.30)$$

$$\leq p^1 f(g^1) + (1 - p(x^1))f\left(\sum_{i=1}^{k-1} p'(x^i)g^i\right) \quad (1.31)$$

$$\leq f\left(\sum_{i=1}^k p(x^i)g^i\right) \quad (1.32)$$

$$= f(\langle g \rangle). \quad (1.33)$$

Remark. $f(g)$ が下に凸の場合は, $\langle f(g) \rangle \geq f(\langle g \rangle)$. x が連続の場合でも拡張可能.

Theorem 1.3.3 (*Information inequality*)

$$D_{\text{KL}}(p(X)||q(X)) \geq 0. \quad (1.34)$$

Proof. Jensen's inequality より,

$$-D_{\text{KL}}(p(X)||q(X)) = \left\langle \ln \frac{q(x)}{p(x)} \right\rangle \quad (1.35)$$

$$\leq \ln \left\langle \frac{q(x)}{p(x)} \right\rangle \quad (1.36)$$

$$= \ln \left[\sum_x q(x) \right] \quad (1.37)$$

$$= \ln 1 \quad (1.38)$$

$$= 0. \quad (1.39)$$

Remark. 等号成立条件 (必要十分) は, 任意の x で $p(x) = q(x)$.

次の章で言及する Integrated fluctuation theorem (Jarzynski 等式) との関係との見通しを良くする為に, Information inequality の別の証明を与える. まずはそのために stochastic relative entropy という量を導入する.

Stochastic relative entropy

$$d_{\text{KL}}(p(x)||q(x)) := \ln p(x) - \ln q(x) \quad (1.40)$$

Remark. アンサンブル平均が relative entropy $D_{\text{KL}}(p(X)||q(X)) = \langle d_{\text{KL}}(p(x)||q(x)) \rangle$.

Theorem 1.3.4 (*Identity*)

stochastic relative entropy $d_{\text{KL}}(p(x)||q(x)) := \ln p(x) - \ln q(x)$ に対して, 次の identity が成り立つ.

$$\langle \exp[-d_{\text{KL}}(p(x)||q(x))] \rangle = 1. \quad (1.41)$$

Proof.

$$\langle \exp[-d_{\text{KL}}(p(x)||q(x))] \rangle = \langle [q(x)/p(x)] \rangle \quad (1.42)$$

$$= \sum_x q(x) \quad (1.43)$$

$$= 1. \quad (1.44)$$

Corollary

$$D_{\text{KL}}(p(X)||q(X)) \geq 0. \quad (1.45)$$

Proof. Identity に Jensen's inequality を用いる. \exp は下に凸なので,

$$\exp[0] = \langle \exp[-d_{\text{KL}}(p(x)||q(x))] \rangle \quad (1.46)$$

$$\geq \exp[-D_{\text{KL}}(p(X)||q(X))], \quad (1.47)$$

よって, $D_{\text{KL}}(p(X)||q(X)) \geq 0$.

Remark. この Identity と Corollary が, 実は小さな系の熱力学における Jarzynski 等式と熱力学第二法則に対応する⁵. また熱力学第二法則を一般化するというタイプの話は, 基本この $q(x)$ の取り方の任意性から出てくる.

relative entropy の非負性を用いる例を紹介する.

Lemma 1.3.5 (Concavity of entropy)

x が $|\mathcal{X}|$ 個の離散量の場合, $S(X)$ は $p(x)$ が一様分布 $p_u(x)$ のとき最大値をとり $\ln |\mathcal{X}|$.

Proof.

$$S(X) = \langle -\ln p_u(x) \rangle_p + \langle -\ln p(x) \rangle_p - \langle -\ln p_u(x) \rangle_p \quad (1.48)$$

$$= \ln |\mathcal{X}| + \langle -\ln p(x) \rangle_p - \langle -\ln p_u(x) \rangle_p \quad (1.49)$$

$$= \ln |\mathcal{X}| - D_{\text{KL}}(p(x)||p_u(x)) \quad (1.50)$$

$$\leq \ln |\mathcal{X}|. \quad (1.51)$$

等号成立は $p(x) = p_u(x)$.

1.4 相互情報量 (Mutual information)

情報理論における“情報”に相当する概念. 二つ (以上) の確率変数の間の相関を表現する量. 例えば, X と Y の間の相互情報量が大きい場合, X の状態を知れば, Y のことをある程度推測できる (すなわち X によって Y の“情報”を手に入れた), ということになる.

相互情報量 (Mutual information)

確率分布 p での, 確率変数 X と Y の間の相関.

$$I(X; Y) := \langle \ln p(x, y) - \ln p(x) - \ln p(y) \rangle \quad (1.52)$$

$$= S(X) - S(X|Y) \quad (1.53)$$

$$= D_{\text{KL}}(p(x, y)||p(x)p(y)). \quad (1.54)$$

Joint mutual information

$\{X, Z\}$ と Y の間の相関.

$$I(\{X, Z\}; Y) := \langle \ln p(x, y, z) - \ln p(x, z) - \ln p(y) \rangle. \quad (1.55)$$

⁵第二章で詳しく述べる.

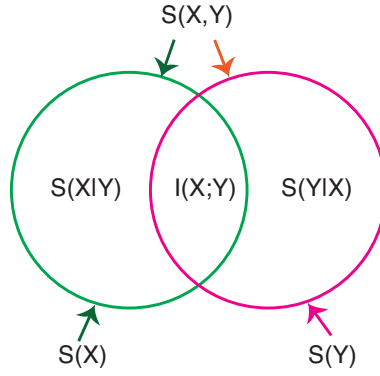


図 1.1: 相互情報量と Shannon entropy の関係を表現する Venn 図.

Conditional mutual information

確率変数 Z を知っているときに, X と Y の間の相関がどれだけあるか, という量.

$$I(X;Y|Z) := \langle \ln p(x,y|z) - \ln p(x|z) - \ln p(y|z) \rangle. \quad (1.56)$$

Lemma 1.4.1 (Nonnegativity)

$$0 \leq I(X;Y). \quad (1.57)$$

Proof. $D(p(X,Y)||p(X)p(Y)) \geq 0$. 等号成立は X と Y が独立, すなわち任意の x, y について $p(x,y) = p(x)p(y)$.

Lemma 1.4.2 (Conditioning reduces entropy)

$$S(X|Y) \leq S(X). \quad (1.58)$$

Proof. $I(X;Y) = S(X) - S(X|Y) \geq 0$.

Lemma 1.4.3

$$I(X;Y) \leq S(X), \quad (1.59)$$

$$I(X;Y) \leq S(Y). \quad (1.60)$$

Proof. $I(X;Y) = S(X) - S(X|Y) = S(Y) - S(Y|X)$ で, $S(X|Y) \geq 0, S(Y|X) \geq 0$ より. 以上の相互情報量の性質を表現する為に, よく図 1.1 のような Venn 図が用いられる.

Lemma 1.4.4 (*Chain rule*)

$$I(\{X, Z\}; Y) = I(X; Y) + I(Z; Y|X). \quad (1.61)$$

Proof. $I(X, Z; Y) = S(X, Z) - S(X, Z|Y) = [S(X) + S(Z|X)] - [S(X|Y) + S(Z|X, Y)] = I(X; Y) + I(Z; Y|X)$.

後の小さな系の熱力学への自然な導入のために stochastic relative entropy と同様の量 (stochastic mutual information) を導入しておこう.

Stochastic mutual information

$$i(x; y) := \ln p(x, y) - \ln p(x) - \ln p(y), \quad (1.62)$$

$$i(\{x, z\}; y) := \ln p(x, y, z) - \ln p(x, z) - \ln p(y), \quad (1.63)$$

$$i(x; y|z) := \ln p(x, y|z) - \ln p(x|z) - \ln p(y|z). \quad (1.64)$$

Remark. アンサンブル平均は相互情報量になる. すなわち, $\langle i(x; y) \rangle = I(X; Y)$, $\langle i(\{x, z\}; y) \rangle = I(\{X, Z\}; Y)$, $\langle i(x; y|z) \rangle = I(X; Y|Z)$.

1.5 Communication channel (通信路)

エラー (ノイズ) が存在する通信を考えよう. 入力を X , 出力を Y としたときに, “どれだけ正確に情報が伝わったか” ということを言い換えると, 直感的には “入力 X と出力 Y の間にどれだけ相関があるか”, つまり相互情報量を考えることに対応しそうではないだろうか.

事実, ノイズのある通信路に置いて, 相互情報量 $I(X; Y)$ を考えることこそ, “情報” の通信の精度を考えることに対応している. この事実は数学的には noisy-channel coding theorem (Shannon 第二定理) が保証してくれる.

まずはエラーのある通信での相互情報量の具体例をみよう.

Example 1.5.1 Binary symmetric channel (2元対称通信路)

入力 X , 出力 Y が, 0 か 1 の二値を持つとする. このとき入力に対する出力のエラー (通信路の性能) は, 条件付き確率 $p(x|y)$ によって表現される. ここで, Binary symmetric channel と呼ばれる通信路は次のような条件付き確率で与えられる [図 1.2]:

$$p(Y = 1|X = 1) = p(Y = 0|X = 0) = 1 - e \quad (1.65)$$

$$p(Y = 1|X = 0) = p(Y = 0|X = 1) = e \quad (1.66)$$

e は通信のエラーの確率を意味する.

このとき, 相互情報量は出力 X の分布 $p(x)$ があれば計算できる. ここでは, $p(x)$ の分布の偏りは

$$p(X = 1) = 1 - r \quad (1.67)$$

$$p(X = 0) = r \quad (1.68)$$

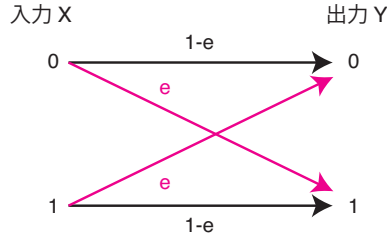


図 1.2: Binary symmetric channel を表す図.

としよう. このとき相互情報量は次のように計算される.

$$\begin{aligned}
 I(X; Y) &= \langle \ln p(x, y) - \ln p(x) - \ln p(y) \rangle & (1.69) \\
 &= \sum_{x, y} p(x) p(y|x) \left[\ln p(y|x) - \ln \left[\sum_x p(y|x) p(x) \right] \right] \\
 &= (1-e) \ln(1-e) + e \ln e \\
 &\quad - [(1-e)r + e(1-r)] \ln [(1-e)r + e(1-r)] - [(1-e)(1-r) + er] \ln [(1-e)(1-r) + er].
 \end{aligned}$$

この量が大きいほど “正確に情報が伝わる” といえる. $e = 1/2$ のときは $I(X; Y) = 0$ となり, この場合どう出力分布 r を工夫しても, 何の “情報” も伝えられないことがわかる.

また入力分布 $p(x)$ が $r = 1/2$ のときに相互情報量は最大値となり, $I(X; Y) = \ln 2 + e \ln e + (1-e) \ln(1-e)$ である.

このように, 相互情報量は通信路の性質 $p(y|x)$ と入力の仕方 $p(x)$ の両方がないと計算できない. しかしながら, 通信路の性能だけを定量化したい場合, 通信路の性質 [すなわち $p(y|x)$] だけから計算される $I(X; Y)$ のような量が欲しい. よって次のような量 C を考える:

Channel capacity

$$C := \sup_{p(x)} I(X; Y) \quad (x \text{ が離散量の場合}) \quad (1.70)$$

Binary symmetric channel の場合は, $C = \ln 2 + e \ln e + (1-e) \ln(1-e)$ である.

Remark. この量は, 入力分布 $p(x)$ が好きに選べて, その上で $I(X; Y)$ を最大化したいという感覚で定義される量である. x が離散量の場合は入力分布 $p(x)$ が好きに選べると期待できるので, この定義がその感覚を表現できているが, x が連続量の場合は状況が異なる. x が連続量の場合は入力分布 $p(x)$ は好きに選べる訳ではなく, 入力分布 $p(x)$ を作る為の現実的な制限があるはずである. 今, 出力の平均の値を $\langle x \rangle = 0$ とおこう. このとき $\langle x^2 \rangle$ はこの分布を作り出す power に対応するので, この量が現実的な制限として有限の値 P 以下であることを期待する. よって x が連続量の場合, [特に次に述べる Gaussian channel と呼ばれる通信路の] channel capacity は次のように定義される.

$$C := \sup_{p(x): \langle x^2 \rangle \leq P} I(X; Y) \quad (x \text{ が連続量の場合}) \quad (1.71)$$

Example 1.5.2 Gaussian channel

入力 x と出力 y が $[-\infty, \infty]$ の連続量を持つとする。Gaussian channel は次のように表される:

$$p(y|x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N}} \exp\left[-\frac{(x-y)^2}{2N}\right] \quad (1.72)$$

$N = \langle (x-y)^2 \rangle$ は通信のノイズの分散を意味する。このとき、相互情報量は出力 x の分布 $p(x)$ があれば計算できる。ここでは、 $p(x)$ の分布は次のようなガウシアンとしよう。

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi P}} \exp\left[-\frac{x^2}{2P}\right] \quad (1.73)$$

としよう [$P = \langle x^2 \rangle$ は出力の power に対応する]。このとき相互情報量は次のように計算される。

$$I(X;Y) = \int dx dy p(y|x)p(x) \left[\ln p(y|x) - \ln \left[\int dx p(y|x)p(x) \right] \right] \quad (1.74)$$

$$= -\frac{1}{2} \ln[2\pi N] - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln[2\pi(P+N)] + \frac{1}{2} \quad (1.75)$$

$$= \frac{1}{2} \ln\left(1 + \frac{P}{N}\right). \quad (1.76)$$

この量が大きいほど“正確に情報が伝わる”といえる。 $N \rightarrow \infty$ のときは $I(X;Y) \rightarrow 0$ となり、この場合どう power P を増やしても、何の“情報”も伝えられないことがわかる。また、power P が大きいほど、 $I(X;Y)$ は大きくなる。つまり、頑張れば頑張るほど“情報”が伝えられる、ということになる。直感的には、出力分布の幅が広いほど、“情報”を連続的な x の値に余裕をもって載せられるということである。

Theorem 1.5.3

Gaussian channel における通信路容量 C は先ほど計算した

$$C := \sup_{p(x): \langle x^2 \rangle \leq P} I(X;Y) = \frac{1}{2} \ln\left(1 + \frac{P}{N}\right), \quad (1.77)$$

で与えられる。

Proof. $\langle x^2 \rangle \leq P$ の条件のもと、ガウス分布 $p_P(x) := (2\pi P)^{-1/2} \exp[-x^2/(2P)]$ で $I(X;Y)$ が最大値をとることを示す。つまり、 $\langle x^2 \rangle = P' \leq P$ を満たす任意の分布 $p'(x)$ に対して、 $I(X;Y)|_{p_P(x)} - I(X;Y)|_{p'(x)} \geq 0$ を示せば良い。証明は次の通り。 [$p_P(x, y) := p(y|x)p_P(x)$, $q(x, y) := p(y|x)p'(x)$ とする.]

$$I(X;Y)|_{p_P(x)} - I(X;Y)|_{p'(x)} = \langle \ln p(y|x) - \ln p_P(y) \rangle_{p_P} - \langle \ln p(y|x) - \ln q(y) \rangle_q \quad (1.78)$$

$$= \langle -\ln p_P(y) \rangle_{p_P} - \langle -\ln q(y) \rangle_q \quad (1.79)$$

$$\geq \langle -\ln p_{P'}(y) \rangle_{p_{P'}} - \langle -\ln q(y) \rangle_q \quad (1.80)$$

$$= \langle -\ln p_{P'}(y) \rangle_q - \langle -\ln q(y) \rangle_q \quad (1.81)$$

$$= D_{\text{KL}}(q(Y)||p_{P'}(Y)) \geq 0 \quad (1.82)$$

ここで $\langle -\ln p_P(y) \rangle_{p_P} = 2^{-1} \ln[2\pi(P+N)] + 2^{-1}$ より、 $\langle -\ln p_P(y) \rangle_{p_P} \geq \langle -\ln p_{P'}(y) \rangle_{p_{P'}}$ であることを使った。

1.6 Noisy-channel coding theorem (シャノン第二定理)

相互情報量 $I(X;Y)$ の入力分布に対する上限 C (通信路容量) が、“情報”伝達精度の限界になっていることを示しているのが、この noisy-channel coding theorem である。今回は入力 x と出力 y が離散であり、証明が簡単になるケースのみ紹介する。

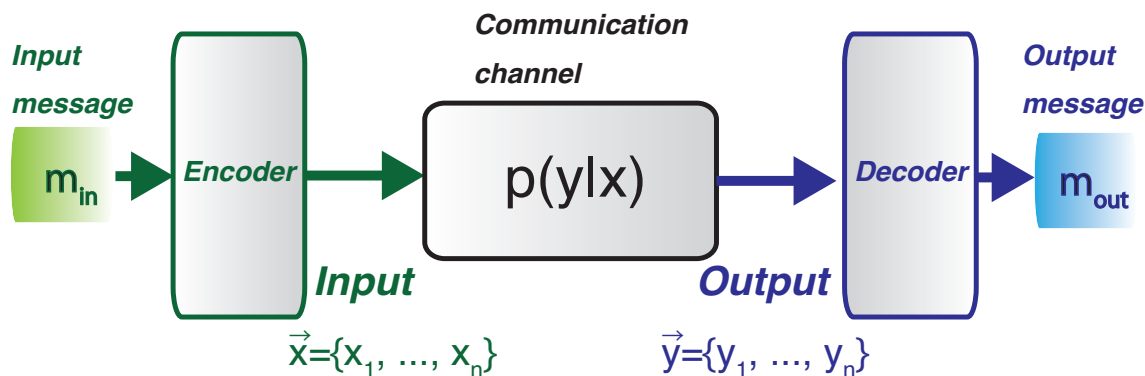


図 1.3: Communication system.

Communication system [図 1.3]

今, ある程度多いメッセージを、通信路を通してどこかへ送ることを考えよう。デジタルな通信のときは、まず入力メッセージを符号器 (エンコーダ) によって, 0101010010 のような 0-1 列で入力を符号化する。この 0-1 符号列を Binary symmetric channel のようなものを使って, 出力側に送る。勿論, 出力側も 01010100010 のような符号列を正しいメッセージに復号化しないと読み取れないので, 復号器 (デコーダ) によってメッセージに戻す (復号化)。このプロセスによって, ようやくメッセージが入力から出力へと送られることになる [図 1.3]。

この一連の過程において通信の精度という観点から気になることは, 通信路のエラーがどれだけメッセージの誤差に影響を与えるか, ということである。もしある程度通信路のエラーが大きければ, 正しく復号化できないはずであり, そういうエラーがあるときにも正しく情報を通信する為には, 直感的には 0-1 符号列を十分長くにとって, ある程度のエラーを訂正できるような冗長度をもたせることが必要であろう⁶。通信路のエラーは C で定量化でき, 符号列の長さはレート R という量で定量化できる。この C と R の関係こそがシャノン第二定理である⁷。

さて, このプロセスを定式化していこう。

入力メッセージ $m_{in} \in \{1, \dots, |M_{in}|\}$ があるとする。この $|M_{in}|$ 個の入力メッセージは十分多く, m_{in} は一様に分布しているとする。すなわち,

$$p(m_{in}) = \frac{1}{|M_{in}|} \quad (m_{in} = 1, \dots, |M_{in}|) \quad (1.83)$$

のような一様分布である。この入力メッセージ m_{in} を, エンコーダ (符号器) によって, 十分大きな n 個の入力信号 \vec{x} に変換することを考えよう。すなわち

$$\vec{x}(m_{in}) := \{x_1(m_{in}), \dots, x_n(m_{in})\} \quad (1.84)$$

のような関数で入力メッセージ m_{in} を入力信号 \vec{x} に変換する (符号化)。この符号化自体は決定論的に行われるとする。

次にこの入力信号 \vec{x} を, 条件付き確率 $p(x|y)$ で特徴付けられるノイズのある通信路を通して, n 個の

⁶例えばハミング符号は, 冗長度を持たせた誤り訂正符号のなかで最も古いものであり, エラーを訂正できるようにするため 0-1 列の偶奇性 (パリティ) を冗長的に付け加えたものである。

⁷第一もなく, いきなり第二をやることに面食らうかもしれないが, 安心してほしい。シャノン第一定理は第二定理に含まれていて, 通信路にエラーがない特殊な場合に相当する。このとき C は単なる Shannon entropy になる (相互情報量は誤差がないとき, Shannon entropy に一致するので)。第一定理は特に source coding theorem と呼ばれる。

$\vec{y} := \{y_1, \dots, y_n\}$ の出力信号にする. 簡単のため, この通信路による信号伝達は

$$p(\vec{y}|\vec{x}) = \prod_{i=1}^n p(y_i|x_i) \quad (1.85)$$

のような確率過程で行われるとし, 各 $p(y_i|x_i)$ は同一の条件付き確率 $p(y|x)$ で与えられているとする.

そして出力信号 \vec{y} はデコーダーによって, やはり $|M_{\text{in}}|$ 種類の出力メッセージ $m_{\text{out}} \in \{1, \dots, |M_{\text{in}}|\}$ に決定論的に復号されるとする. すなわち

$$m_{\text{out}}(\vec{y}) \quad (1.86)$$

のような決定論的な関数があるということである.

以上が, シヤノン第二定理を示すための, 通信システムの (簡単な) 設定である.

Rate

$|M_{\text{in}}|$ 種類のメッセージを, どれくらいのスピードで送れたかというのを定義するために, レート R という量が用いられる⁸. 次のように定義される.

$$R := \frac{\ln |M_{\text{in}}|}{n}. \quad (1.87)$$

Average probability of error

入力メッセージ m_{in} と出力メッセージ m_{out} が一致しないときの確率 P_e は次のように定義される:

$$P_e := \frac{1}{|M_{\text{in}}|} \sum_{j=1}^{|M_{\text{in}}|} p(m_{\text{out}}(\vec{y}) \neq j | \vec{x}(m_{\text{in}} = j)). \quad (1.88)$$

Theorem 1.6.1 (Noisy-channel coding theorem [逆定理])

$P_e \rightarrow 0$ となる符号, 復号化ならば, $R \leq C$.

Proof. 入力メッセージの分布 $p(m_{\text{in}})$ が一様なので,

$$nR = S(M_{\text{in}}) \quad (1.89)$$

$$= S(M_{\text{in}}|M_{\text{out}}) + I(M_{\text{in}}; M_{\text{out}}) \quad (1.90)$$

ここで, エラーを意味する e という量を導入する

$$e := \begin{cases} 0 & (m_{\text{in}} = m_{\text{out}}), \\ 1 & (m_{\text{in}} \neq m_{\text{out}}). \end{cases} \quad (1.91)$$

$S(E|M_{\text{in}}, M_{\text{out}}) = 0$ より,

$$S(M_{\text{in}}|M_{\text{out}}) = S(M_{\text{in}}|M_{\text{out}}) + S(E|M_{\text{in}}, M_{\text{out}}) \quad (1.92)$$

$$= S(E, M_{\text{in}}|M_{\text{out}}) \quad (1.93)$$

$$= S(E|M_{\text{out}}) + S(M_{\text{in}}|E, M_{\text{out}}) \quad (1.94)$$

$$\leq \ln 2 + P_e \ln |M_{\text{in}}| \quad (1.95)$$

$$= \ln 2 + P_e nR \quad (1.96)$$

⁸符号化の冗長さの定量化にもなっている. R が小さいほど, 冗長さ (n の長さ) が必要になる

ここで $e = 0$ のとき, $m_{\text{in}} = m_{\text{out}}$ であるため, その分の $S(M_{\text{in}}|E, M_{\text{out}})$ の寄与は 0 になることを用いた⁹.

また, 任意の $m_{\text{in}}, \vec{x}, \vec{y}, m_{\text{out}}$ で $p(m_{\text{in}}, \vec{x}, \vec{y}, m_{\text{out}}) = p(m_{\text{in}})p(\vec{x}|m_{\text{in}})p(\vec{y}|\vec{x})p(m_{\text{out}}|\vec{y})$ (Markov 性¹¹) であることから, $I(M_{\text{in}}; M_{\text{out}}|Y) = I(M_{\text{in}}; Y|X) = 0$ が示せることより¹²,

$$I(M_{\text{in}}; M_{\text{out}}) \leq I(M_{\text{in}}; M_{\text{out}}) + I(M_{\text{in}}; Y|M_{\text{out}}) \quad (1.97)$$

$$= I(M_{\text{in}}; Y) + I(M_{\text{in}}; M_{\text{out}}|Y) \quad (1.98)$$

$$= I(M_{\text{in}}; Y) + 0 \quad (1.99)$$

$$\leq I(M_{\text{in}}; Y) + I(X; Y|M_{\text{in}}) \quad (1.100)$$

$$= I(X; Y) + I(M_{\text{in}}; Y|X) \quad (1.101)$$

$$= I(X; Y) + 0 \quad (1.102)$$

$$= S(y_1, \dots, y_n) - \sum_i^n S(y_i|x_i) \quad (1.103)$$

$$\leq \sum_i^n S(y_i) - \sum_i^n S(y_i|x_i) \quad (1.104)$$

$$= \sum_i^n I(x_i; y_i) \quad (1.105)$$

$$\leq nC. \quad (1.106)$$

以上より,

$$nR = S(M_{\text{in}}|M_{\text{out}}) + I(M_{\text{in}}; M_{\text{out}}) \quad (1.107)$$

$$\leq nC + \ln 2 + P_e nR \quad (1.108)$$

$$R \leq C + \frac{\ln 2}{n} + P_e R \quad (1.109)$$

が得られる. 十分大きな n に対して, 右辺第二項は $\ln 2/n \rightarrow 0$ であるため, これより, $P_e \rightarrow 0$ ならば $R \leq C$ が示せた.

Remark. この主張は, 逆定理と呼ばれるものである. 順定理と呼ばれるものは, “任意の $R < C$ となるレートで, $P_e \rightarrow 0$ となる符号, 復号化が存在する.” というものである. ここでは紹介にとどめる.

1.7 まとめ

ここまでで, 情報理論の(恐らく) ミニマムとも言える内容を, ごまかしなしに紹介した.

情報理論でもっとも重要な概念は, ある確率変数とある確率変数の間の相関を表す相互情報量である. この量こそが, 僕らが普段日常生活で使う意味の “情報” なのであり, 日常生活で言う “ある確率変数 Y に対する情報 X を得た” とは, “ $I(X; Y)$ が大きい値を持つ” ことである.

例えば, 天気予報を X , 実際の天気を Y としたとき, よく当たる天気予報は “ $I(X; Y)$ が大きい値を持つ”. (かならず外れる天気予報も同様に $I(X; Y)$ が大きい値を持つが, それはそれで “情報” があるといえよう.)

⁹すなわち, Lemma 1.3.5 と Lemma 1.4.2 を用いて, $S(M_{\text{in}}|E, M_{\text{out}}) = P_e S(M_{\text{in}}|E = 0, M_{\text{out}} \neq M_{\text{in}}) \leq P_e S(M_{\text{in}}) = P_e \ln |M_{\text{in}}|$ という式変形を行っている. また $S(E|M_{\text{out}}) \leq S(E) \leq \ln 2$ であることも用いた.

¹⁰この不等式 $S(M_{\text{in}}|M_{\text{out}}) \leq \ln 2 + P_e \ln |M_{\text{in}}|$ は Fano の不等式として知られている.

¹¹ $M_{\text{in}} \rightarrow X \rightarrow Y \rightarrow M_{\text{out}}$ のように, 一個前の状態のみが現在の状態を確率的に決定する (決定論も含む) ことを意味する. 今考えている設定はこの Markov 性を満たす.

¹² $A \rightarrow B \rightarrow C$ という Markov 過程において, $I(A; C|B) = 0$ であることからえられる不等式 $I(A; B) \geq I(A; C)$ は, data-processing inequality と呼ばれる.

逆に無意味な天気予報 X とは, 実際の天気 Y とは無関係に適当に予報することであり, その場合は $I(X;Y)$ はゼロになる.

一方で Shannon entropy は, そういう意味では “情報” ではない. $S(X)$ や $S(Y)$, $S(X,Y)$ が大きくても, それは単に “確率変数 X や Y がとる可能性が多く, 一様分布に近い” という意味でしかない. 僕らが日常生活で使う “情報” という意味からはかけ離れている.

よって, 相互情報量こそが真の “情報” であると言える. そしてその直感だけにとどまらず, 相互情報量の情報通信における意味を数学的に支えてくれるのが, noisy-channel coding theorem である.

数学的には, 情報理論とはいわば, 確率論と \ln の凸性からくる不等式 (Jensen の不等式) のゲームである. 不等式のゲームにおいて, もっとも有用な概念は relative entropy であり, 基本的にこの非負性がいろんな関係式を生み出す. その強力は noisy-channel coding theorem の逆定理の証明を見れば, 実感するのではないだろうか.

実は小さな系の熱力学でも, この relative entropy の非負性こそが, 熱力学第二法則に相当している. 私的な感想を言えば, 情報理論に現れる式変形と不等式のゲームに慣れ親しんでおくことは, Brown 運動のような小さな系の熱力学を研究する上で非常に重要なことだと思う. そして, ここ最近の研究トピック “情報熱力学” では, まさにこの情報理論で出てきた相互情報量や relative entropy が色々な側面で現れてきて, 多くの物理的な洞察を生んでいる. 次章で説明するのは, そのような情報理論と小さな系の熱力学の接点になる.

SUMMARY

Shannon entropy

$$S(X) := \langle -\ln p(x) \rangle, S(X|Y) := \langle -\ln p(x|y) \rangle.$$

1. (非負性) $0 \leq S(X) \leq \ln |\mathcal{X}|$. ($|\mathcal{X}|$ は x が離散量の際の事象の個数)
2. (条件付きによる減少) $S(X) \geq S(X|Y)$.

Relative entropy

$$D_{\text{KL}}(p(X)||q(Y)) := \langle \ln p(x) - \ln q(x) \rangle_p, [\text{stochastic}] d_{\text{KL}}(p(x)||q(x)) := \ln p(x) - \ln q(x).$$

1. (非負性) $D_{\text{KL}}(p(X)||q(Y)) \geq 0$. (等号成立条件は任意の x で $p(x) = q(x)$)
2. (Identity) $\langle \exp[-d_{\text{KL}}(p(x)||q(x))] \rangle_p = 1$.

Mutual information

$$I(X; Y) := \langle \ln p(x, y) - \ln p(x) - \ln p(y) \rangle, [\text{stochastic}] i(x : y) := \ln p(x, y) - \ln p(x) - \ln p(y).$$

1. (非負性) $I(X; Y) \geq 0$. (等号成立条件は独立 $p(x, y) = p(x)p(y)$) f 2. $S(X) \geq I(X; Y)$, $S(Y) \geq I(X; Y)$.
3. (Chain rule) $I(\{X, Z\}; Y) = I(X; Y) + I(Z; Y|X)$.

Binary symmetric channel

e : エラー率, r : 分布の偏り, x : 入力信号, y : 出力信号

$$I(X; Y) = e \ln e + (1 - e) \ln(1 - e) - e' \ln e' - (1 - e') \ln(1 - e')$$

$$\text{ただし } e' = (1 - e)(1 - r) + er$$

Gaussian channel

入力分布 $p(x)$ が平均 0, 分散 P の Gaussian.

$$I(X; Y) = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{P}{N} \right)$$

ただし N は Gaussian channel のノイズの分散.

Channel capacity

$$C := \sup_{p(x)} I(X; Y) \quad (x \text{ が離散量の際})$$

Rate

$$R := \ln |M_{\text{in}}|/n$$

$|M_{\text{in}}|$ は入力メッセージの個数, n は符号化した入力信号の長さ.

Noisy-channel coding theorem [逆定理]

エラーのない符号, 復号化 ($P_e \rightarrow 0$) ならば, $R \leq C$.

Noisy-channel coding theorem [順定理]

任意の $R < C$ となるレートで, エラーのない符号, 復号化 ($P_e \rightarrow 0$) が存在する.

第2章 情報理論と小さな系の熱力学

Brown 運動などの揺らぎが無視できない小さな系¹の熱力学を構築する研究が近年盛んである。²特にこのような小さな系の熱力学の応用先として、1 細胞内でおきている生化学反応なども扱えることが知られており、理論生物学としての側面からの研究も行われている。

また一方で、そのような小さいスケールにおいて、近年“Maxwell のデーモン”の研究に代表されるように“情報”と熱力学の間の接点が模索されており、徐々に理解が進んできている。今回は小さな系の熱力学と情報理論の関わりを示す一連の研究を纏めながら、我々の最新の成果まで追うことにする。³

2.1 詳細ゆらぎの定理 (Detailed fluctuation theorem)

ゆらぎの定理と呼ばれる一連の研究は、小さな系の熱力学を構築する上での基礎となっている。多くのバージョンのゆらぎの定理が存在しているが、その本質は“詳細つりあい”と呼ばれる考え方の亜種である。

詳細釣り合いとは、変数 $x = \{x_+, x_-\}$ [x_+ は時間反転に対して不変な量⁴ x_- は時間反転に対して反転する量⁵] の、マイクロなダイナミクスが“可逆”⁶であるとき、

$$p(x'_+, x'_- | x_+, x_-; \lambda) p_{\text{eq}}(x; \lambda) = p(x_+, -x_- | x'_+, -x'_-; \lambda) p_{\text{eq}}(x'; \lambda), \quad (2.1)$$

の形で与えられる関係式のことである。ここで p_{eq} は平衡分布をあらわし $p(x'_+, x'_- | x_+, x_-)$ は遷移確率を意味する条件付き確率であり、 λ はマイクロなダイナミクスを決定するためのコントロールパラメータである。具体的な (古典孤立系の) 証明は、例えば van Kampen の教科書⁷などをみるとよい。

さらに、熱浴に対して十分小さい系⁸の変数 x のダイナミクスが、(複数の) 熱浴に (弱く) 接触しているという条件でも、詳細釣り合いと同等の関係式が導ける。全熱浴の自由度を z で表したとき、(ある程度正しいと思われる物理的な要請から)、次の関係を導くことができる。[添字 t (t') は時刻を表し、 t' は t から微小時間たった時刻とする。]

$$p(x_{t'} | x_t; \lambda_t) p_{\text{eq}}(x_t; \lambda_t) = p_B(x_t | x_{t'}; \lambda_t) p_{\text{eq}}(x_{t'}; \lambda_t), \quad (2.2)$$

ここで簡単のために、 $p_B(x_t | x_{t'}; \lambda_t) = p(\{x_+, -x_-\}_t | \{x_+, -x_-\}_{t'}; \lambda_t)$ という表記を導入した。この関係式を詳細ゆらぎの定理⁹という。具体的な物理的な設定と証明は Jarzynski の論文¹⁰を参照してほしい。

¹ちなみにこのノートでいう“小さい系”とは、媒質などの熱浴に比べて、ゆらぎが観測できる程度に十分小さい [例えば Brown 粒子のスケール ($\mu\text{m} - \text{nm}$)] という意味で、量子効果が効くスケールは意味していない。

²小さな系の熱力学に関する標準的な教科書は Ken Sekimoto, *Stochastic Energetics* (Springer, New York, 2010)。関本謙 “ゆらぎのエネルギー論” (新物理学叢書, 岩波書店, 2004) [日本語版, 絶版] が最もよく書かれていると思う。また最近の研究までの包括的なレビューは Udo Seifert, *Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machine*. Rep. Prog. Phys. **75**, 126001 (2012)。がよい。しかしながら、これらの教科書やレビューは、情報理論と小さな系の熱力学の間の関わりについての記述は不十分である。

³今回のノートは、主に我々の最近の理解 T. Sagawa and M. Ueda, *Fluctuation theorem with information exchange: Role of correlations in stochastic thermodynamics*. Phys. Rev. Lett. **109**, 180602 (2012)。S. Ito and T. Sagawa, *Information thermodynamics on causal networks*. Phys. Rev. Lett. **111**, 180603 (2013)。S. Ito and T. Sagawa, *Maxwell's demon in biochemical signal transduction*. arXiv: 1406.5810 (2014)。に基づいている。

⁴例えば粒子の位置。

⁵例えば粒子の運動量。

⁶Hamilton 系などのように。

⁷N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry, Third Edition* (North-Holland, Amsterdam, 1981)。

⁸例えば Brown 粒子。

⁹後に述べる熱浴のエントロピー変化量の意味で。

¹⁰C. Jarzynski *Hamiltonian Derivation of a Detailed Fluctuation Theorem*. J. Stat. Phys. **98**, 77 (2000)。

詳細ゆらぎの定理の意味をもう少し考えよう．熱浴の分布 $p_{\text{eq}}(x_t; \lambda_t)$ は次のようなカノニカル分布でかけると仮定しよう．

$$p_{\text{eq}}(x_t; \lambda_t) = Z^{-1} \exp \left[-\frac{U(x_t; \lambda_t)}{k_B T} \right] \quad (2.3)$$

すると、詳細ゆらぎの定理は次のような形の表現でかけることがわかるだろう．

$$\ln \frac{p(x_{t'}|x_t; \lambda_t)}{p_B(x_t|x_{t'}; \lambda_t)} = \Delta s_{\text{bath}} \quad (2.4)$$

$$\Delta s_{\text{bath}} := -\frac{U(x_{t'}; \lambda_t) - U(x_t; \lambda_t)}{k_B T} \quad (2.5)$$

ここで Δs_{bath} は、 x_t から $x_{t'}$ への小さい系 x の変化に誘起された全熱浴のエントロピー変化である．なぜならば $U(x_{t'}; \lambda_t) - U(x_t; \lambda_t)$ は小さい系 x から時刻 t に熱浴に流れたエネルギー総量、すなわち熱であり、それを熱浴の温度 T で割っているため、 Δs_{bath} は全熱浴のエントロピー変化になっている、というわけである．

$U(x_{t'}; \lambda_t) - U(x_t; \lambda_t)$ が熱とみなせるのは次のような理由による．系にした仕事 W という量はコントロールパラメータによる内部エネルギー U の変化であるため、 $W := U(x_{t'}; \lambda_{t'}) - U(x_t; \lambda_t)$ のように定義される．このため、 $U(x_{t'}; \lambda_t) - U(x_t; \lambda_t)$ について次の熱力学第一法則が成り立ち、まさしく熱になるというわけである．

$$U(x_{t'}; \lambda_t) - U(x_t; \lambda_t) = \Delta U - W \quad (2.6)$$

ここで、 $\Delta U = U(x_{t'}; \lambda_{t'}) - U(x_t; \lambda_t)$ は時刻 t から t' までの内部エネルギーの変化量である．

この表記は、熱浴のエネルギー変化を陽に考慮しない確率モデル（たとえば Langevin 系）でも同様に有効であり、この式はむしろ熱浴のエネルギー変化を陽に含まない確率過程における、熱浴のエントロピー変化の定義とみなしてもよい．よって、詳細ゆらぎの定理とは次のような熱浴側のエントロピー変化の定義と考えることにする．

詳細ゆらぎの定理 (detailed fluctuation theorem)

x_t は時刻 t での小さい系 x の状態とする．この小さい系 x が複数の熱浴と接触して、Markov 過程で発展するとき [すなわち $p(x_1, \dots, x_N) = p(x_1)p(x_2|x_1) \cdots p(x_N|x_{N-1})$ のような確率過程で発展するとき]、小さな系 x によって引き起こされる時刻 1 から時刻 N までの熱浴のエントロピー変化 Δs_{bath} は次のように与えられる.¹¹

$$\Delta s_{\text{bath}} := \ln \left[\frac{p(x_2|x_1)}{p_B(x_1|x_2)} \frac{p(x_3|x_2)}{p_B(x_2|x_3)} \cdots \frac{p(x_N|x_{N-1})}{p_B(x_{N-1}|x_N)} \right] \quad (2.7)$$

ここで p_B は backward process の確率と呼ぶべきもので、 $x = \{x_+, x_-\}$ [x_+ は時間反転に対して不変な量 (例えば位置), x_- は時間反転に対して反転する量 (例えば運動量)] としたときに $p_B(x|x') := p(x_+, -x_-|x'_+, -x'_-)$ のように与えられる遷移確率である.¹²

¹¹たとえば Langevin 系 $\gamma \dot{x}_t = F_t(x_t) + \xi_t$ (ξ_t は平均 0, 分散 $2\gamma k_B T$ の white gaussian noise) の場合, $\Delta s_{\text{bath}} = [\int dt F_t(x_t) \circ \dot{x}_t] / [k_B T]$ となることがこの定義から計算できる．導出は [Y. Chernyak, M. Chertkov and C. Jarzynski, J. Stat. Mech. (2006) P08001.]などを参照．

¹²後の議論では、 p_B がなんらかの確率分布であること “のみ” を使って議論を行うため、この p_B の選び方は $p_B(x|x') := p(x_+, -x_-|x'_+, -x'_-)$ の形である必要性は必ずしもない．たとえば定常状態熱力学 [T. Hatano and S-I Sasa, Phys. Rev. Lett. **86**, 3463 (2001).] などはこの p_B のとり方を、backward process であえてとらないことで普通の熱浴のエントロピー変化 Δs_{bath} とは異なる量に関する熱力学を構築している．

2.2 エントロピー生成 (Entropy production)

エントロピー生成とは, 熱浴のエントロピー変化 Δs_{bath} に加えて, 小さい系のエントロピー変化¹³ $\Delta s_x := \ln p(x_t) - \ln p(x_{t'})$ を足し合わせた, 熱浴 + 着目系のエントロピーの変化量 $\sigma := \Delta s_{\text{bath}} + \Delta s_x$ のことである. この量は後に示すように前章で導入した stochastic relative entropy の一種であり, アンサンブル平均は非負になる. この事実こそが小さな系における熱力学第二法則になる.¹⁴

エントロピー生成 (entropy production)

x_t は時刻 t での小さい系 x の状態とする. この小さい系 x が複数の熱浴と接触して, Markov 過程で発展するとき, すなわち $p(x_1, \dots, x_N) = p(x_1)p(x_2|x_1) \cdots p(x_N|x_{N-1})$ のような確率過程で発展するとき, エントロピー生成は次のように定義される.

$$\sigma := \Delta s_{\text{bath}} + \Delta s_x \quad (2.8)$$

$$= \ln \left[\frac{p(x_2|x_1)}{p_B(x_1|x_2)} \frac{p(x_3|x_2)}{p_B(x_2|x_3)} \cdots \frac{p(x_N|x_{N-1})}{p_B(x_{N-1}|x_N)} \right] + \ln \frac{p(x_1)}{p(x_N)} \quad (2.9)$$

Remark. エントロピー生成の物理的な意味を理解するために, 初期状態分布 $p(x_1)$ と終状態分布 $p(x_N)$ がカノニカル分布を仮定してみよう. すなわち内部エネルギー $E_t(x_t)$ と自由エネルギー F_t を用いて次のように記述されるとする,

$$p(x_1) = p_{\text{eq}}(x_1) \quad (2.10)$$

$$= \exp[\beta[F_1 - E_1(x_1)]] \quad (2.11)$$

$$p(x_N) = p_{\text{eq}}(x_N) \quad (2.12)$$

$$= \exp[\beta[F_N - E_N(x_N)]], \quad (2.13)$$

また熱浴のエントロピー変化量を, 小さい系が得た熱量 Q で

$$\Delta s_{\text{bath}} = -\beta Q \quad (2.14)$$

と書けるとしよう. 熱力学第一法則により, 系にされた (stochastic な) 仕事 W を次のように定義する.

$$W := -Q - [E_1(x_1) - E_N(x_N)] \quad (2.15)$$

このときエントロピー生成は,

$$\sigma := \beta(W - \Delta F) \quad (2.16)$$

と書ける. $[\Delta F := F_N - F_1]$

Theorem 2.2.1 (Relative entropy)

エントロピー生成 σ は, 小さい系の発展が Markov 過程のとき $[p(x_1, \dots, x_N) = p(x_1)p(x_2|x_1) \cdots p(x_N|x_{N-1})]$, stochastic relative entropy によって,

$$\sigma = d_{\text{KL}}(p(x_1, \dots, x_N) || p_B(x_1, \dots, x_N)) \quad (2.17)$$

$$p_B(x_1, \dots, x_N) := p_B(x_1|x_2)p_B(x_2|x_3) \cdots p_B(x_{N-1}|x_N)p(x_N) \quad (2.18)$$

¹³ アンサンブル平均が Shannon entropy の差分になる量.

¹⁴ エントロピー生成が stochastic relative entropy に系なるのは, 小さい系が Markov 過程で発展するとき, という条件が重要である. つまり小さい系での普通の熱力学第二法則は, 小さい系の Markov 性からきている, といえる.

とかける.¹⁵

Proof. Markov 性 $p(x_1, \dots, x_N) = p(x_1)p(x_2|x_1) \cdots p(x_N|x_{N-1})$ を用いる.

$$\sigma := \ln \left[\frac{p(x_2|x_1)}{p_B(x_1|x_2)} \frac{p(x_3|x_2)}{p_B(x_2|x_3)} \cdots \frac{p(x_N|x_{N-1})}{p_B(x_{N-1}|x_N)} \right] + \ln \frac{p(x_1)}{p(x_N)} \quad (2.19)$$

$$= \ln \frac{p(x_1, \dots, x_N)}{p_B(x_1, \dots, x_N)} \quad (2.20)$$

また $p_B(x_1, \dots, x_N)$ が確率分布であることをしめすためには, $\sum_{x_t} p_B(x_t|x_{t+1}) = 1$ を用いて,

$$\sum_{x_1, \dots, x_N} p_B(x_1|x_2)p_B(x_2|x_3) \cdots p_B(x_{N-1}|x_N)p(x_N) \quad (2.21)$$

$$= \sum_{x_2, \dots, x_N} p_B(x_2|x_3) \cdots p_B(x_{N-1}|x_N)p(x_N) \quad (2.22)$$

$$= \dots \quad (2.23)$$

$$= \sum_{x_N} p(x_N) \quad (2.24)$$

$$= 1. \quad (2.25)$$

と, 確率の規格化を満たすことと, 確率の非負性 $p_B(x_1, \dots, x_N) \geq 0$ を, $p_B(x_i|x_{i+1}) \geq 0$, $p(x_N) \geq 0$ からいえば OK.

Theorem 2.2.2 (Second law of thermodynamics)

小さい系の発展が Markov 過程のとき, エントロピー生成のアンサンブル平均 $\langle \sigma \rangle$ は非負. すなわち,

$$\langle \sigma \rangle \geq 0. \quad (2.26)$$

Proof. Markov 過程のとき, エントロピー生成は Theorem 2.2.1 より, stochastic relative entropy. そのアンサンブル平均は relative entropy $D_{\text{KL}}(p(X_1, \dots, X_N) || p_B(X_1, \dots, X_N))$ になるので, relative entropy の非負性 (Theorem 1.3.3) より $\langle \sigma \rangle = D_{\text{KL}}(p(X_1, \dots, X_N) || p_B(X_1, \dots, X_N)) \geq 0$.

Theorem 2.2.3 (Integrated fluctuation theorem, Jarzynski equality¹⁶)

小さい系の発展が Markov 過程のとき, 次の等式が成り立つ.

$$\langle \exp[-\sigma] \rangle = 1. \quad (2.27)$$

Proof. Markov 過程のとき, エントロピー生成は Theorem 2.2.1 より, stochastic relative entropy. よって, relative entropy の identity (Theorem 1.3.4) より $\langle \exp[-\sigma] \rangle = 1$.

¹⁵ この定理の主張は $p(x_1)p(x_2|x_1) \cdots p(x_N|x_{N-1})$ が joint probability distribution $p(x_1, \dots, x_N)$ に一致するということと, $p_B(x_1, \dots, x_N)$ が確率の規格化 $\sum_{x_1, \dots, x_N} p_B(x_1, \dots, x_N) = 1$ を満たす, ということを主張する.

¹⁶ 特に Remark で記述したように $\sigma := \beta(W - \Delta F)$ と書けるケース, すなわち $\langle \exp[-\beta W] \rangle = \exp[-\beta \Delta F]$ で書かれているものを Jarzynski 等式と呼ぶ. (ΔF は stochastic な量でない (時刻にのみ依存して, 小さな系の状態 x によらない) のでアンサンブル平均を通り抜ける: $\langle \exp(\beta \Delta F) \rangle = \exp(\beta \Delta F)$).

2.3 フィードバック制御下での小さな系の熱力学

「Maxwell のデーモン¹⁷」の思考実験に代表されるように、メモリ状態に応じた（フィードバック）制御をある程度¹⁸小さな系で行うことで、熱力学第二法則は“見かけ上”破れることが知られている¹⁹。この見かけ上の破れ、というのをどのように小さな系の熱力学で定式化すればよいのか、というのがここで議論する内容になる。Maxwell のデーモンの話として、代表的な関係式である Sagawa-Ueda の式²⁰の導出までをここではみる²¹。

フィードバックプロトコル

ここでは一番簡単なケース。すなわち、単一のメモリの状態 m だけがあってフィードバック制御を行う場合を考えよう。つまりどのような状況を考えるかという、次のような [(i)-(iii)] プロトコルである。

(i) 時刻 $t = 1$ の小さい系の初期状態を x_1 とする。

[小さい系の初期状態は $p(x_1)$ で確率的に与えられる.]

(ii) メモリ m の状態は、測定によって x_1 に応じて決まるとする。

[測定の効果は、条件付き確率 $p(m|x_1)$ で与えられる.]

(iii) 小さな系 x の時間発展は、メモリの状態 m に依存して（フィードバック制御で）発展するとする。

[フィードバック制御により、 $p(x_2|x_1, m)p(x_3|x_2, m) \cdots p(x_N|x_{N-1}, m)$ の形で確率的に発展するとする.]

すなわち、次のような（小さな系 x については非 Markov 的な²²）確率過程を考える。

$$p(x_1 \dots, x_N, m) = p(x_1)p(m|x_1)p(x_2|x_1, m)p(x_3|x_2, m) \cdots p(x_N|x_{N-1}, m) \quad (2.28)$$

このような過程で小さい系 x のエントロピー生成を考えよう。

詳細ゆらぎの定理（フィードバック制御下）

メモリ m によるフィードバック制御下で、詳細ゆらぎの定理は次のように修正される。

$$\Delta s_{\text{bath}} := \ln \left[\frac{p(x_2|x_1, m)}{p_B(x_1|x_2, m)} \frac{p(x_3|x_2, m)}{p_B(x_2|x_3, m)} \cdots \frac{p(x_N|x_{N-1}, m)}{p_B(x_{N-1}|x_N, m)} \right] \quad (2.29)$$

ここで、 p_B は backward process の確率と呼ぶべきもので、 $x = \{x_+, x_-\}$ 、 $m = \{m_+, m_-\}$ のように時間反転に不変な量（添え字 +）と時間反転で反転する量（添え字 -）で記述したとき、 $p_B(x|x', m) = p(x_+, -x_-|x'_+, -x'_-, m_+, -m_-)$ のように与えるのが適切であろう。²³

¹⁷Maxwell のデーモンを提唱した J. C. Maxwell の熱力学の教科書 “Theory of heat” では、仕切りに分かれた箱の中にあるガスに対して、1 分子レベルのフィードバック操作（速度の速い粒子を仕切りの右側に、遅い粒子を左側にいるように仕切りを開け閉めする）を行うことで、外から仕事を加えることなく、ガスを温度が高い部分と小さい部分に分けることができるとし、熱力学第二法則に反すると主張した。ちなみにデーモンというおどろおどろしいネーミングセンスは、実は Maxwell によるものではなく Kelvin 卿によるものである。

¹⁸熱浴のサイズに比べて、Maxwell はこの思考実験から、熱力学の適用範囲は十分大きい系でなければならないという結論を出した。すなわち “小さい系” の熱力学において、その適用範囲の広さを示す一例として 「Maxwell のデーモン」というトピックが本質的に重要である、というのは自然なことだし、「Maxwell のデーモン」と熱力学の真の理解は “小さな系” の熱力学の発展なしにはわからなかったのだと思う。

¹⁹「Maxwell のデーモン」を含んだ “全系” を考えれば、“全系” のダイナミクスは Markov 過程なので、熱力学第二法則は破れようがない。

²⁰ここでは T. Sagawa and M. Ueda, *Generalized Jarzynski equality under nonequilibrium feedback control*, Phys. Rev. Lett. **104**, 090602 (2010). および T. Sagawa and M. Ueda, *Fluctuation theorem with information exchange: Role of correlation in stochastic thermodynamics*, Phys. Rev. Lett. **109**, 1806022 (2012). で得られた古典系での関係式を意味している。

²¹導出の仕方は S. Ito and T. Sagawa, *Information thermodynamics on causal networks*. Phys. Rev. Lett. **111**, 180603 (2013). での一般論の枠組みと同じように行う。

²²各時刻の小さな系 x の時間発展は、初期時刻 x_1 の状態をメモリ m を介して引きずっていることになる。すなわちフィードバック制御下では、Markov 的な時間発展とは異なる。実はこの局所的な非 Markov 性から熱力学第二法則の見かけ上の破れが出てくるわけである。

²³ただし、フィードバック制御下でも、普通の小さな系の熱力学と同様に p_B のとり方には任意性がある。たとえば p_B の任意性を用

エントロピー生成 (フィードバック制御下)

メモリ m によるフィードバック制御下で, エントロピー生成は次のように修正して定義される.

$$\sigma := \Delta s_{\text{bath}} + \Delta s_x \quad (2.30)$$

$$= \ln \left[\frac{p(x_2|x_1, m)}{p_B(x_1|x_2, m)} \frac{p(x_3|x_2, m)}{p_B(x_2|x_3, m)} \cdots \frac{p(x_N|x_{N-1}, m)}{p_B(x_{N-1}|x_N, m)} \right] + \ln \frac{p(x_1)}{p(x_N)}. \quad (2.31)$$

Remark. Markov 性を持つ小さな系の場合と異なり, この量は stochastic relative entropy ではない. すなわちアンサンブル平均 $\langle \sigma \rangle$ は非負ではなく, 負にもなれる量である²⁴.

Theorem 2.3.1 (Relative entropy)

フィードバック制御下での, 終状態とメモリとの間の相関である stochastic mutual information $i(x_N : m)$ と始状態とメモリとの間の相関である stochastic mutual information $i(x_1 : m)$ を考える. このとき $\sigma - i(x_N : m) + i(x_1 : m)$ は stochastic relative entropy で

$$\sigma - i(x_N; m) + i(x_1; m) = d_{\text{KL}}(p(x_1, \dots, x_N, m) || p_B(x_1, \dots, x_N, m)) \quad (2.32)$$

$$p_B(x_1, \dots, x_N, m) := p_B(x_1|x_2, m)p_B(x_2|x_3, m) \cdots p_B(x_{N-1}|x_N, m)p(m|x_N)p(x_N) \quad (2.33)$$

とかける.

Proof. フィードバックプロトコル

$$p(x_1 \dots, x_N, m) = p(x_1)p(m|x_1)p(x_2|x_1, m)p(x_3|x_2, m) \cdots p(x_N|x_{N-1}, m), \quad (2.34)$$

を用いる.

$$\sigma - i(x_N; m) + i(x_1; m) \quad (2.35)$$

$$= \ln \left[\frac{p(x_2|x_1, m)}{p_B(x_1|x_2, m)} \frac{p(x_3|x_2, m)}{p_B(x_2|x_3, m)} \cdots \frac{p(x_N|x_{N-1}, m)}{p_B(x_{N-1}|x_N, m)} \right] + \ln \frac{p(x_1)}{p(x_N)} - \ln \frac{p(m|x_N)}{p(m)} + \ln \frac{p(m|x_1)}{p(m)}$$

$$= \ln \frac{p(x_1, \dots, x_N, m)}{p_B(x_1, \dots, x_N, m)} \quad (2.36)$$

また $p_B(x_1, \dots, x_N, m)$ が確率分布であることをしめすためには, $\sum_{x_t} p_B(x_t|x_{t+1}, m) = 1$ を用いて,

$$\sum_{x_1, \dots, x_N, m} p_B(x_1|x_2, m)p_B(x_2|x_3, m) \cdots p_B(x_{N-1}|x_N, m)p(m|x_N)p(x_N) \quad (2.37)$$

$$= \sum_{x_2, \dots, x_N, m} p_B(x_2|x_3, m) \cdots p_B(x_{N-1}|x_N, m)p(m|x_N)p(x_N) \quad (2.38)$$

$$= \dots \quad (2.39)$$

$$= \sum_{x_N, m} p(m|x_N)p(x_N) \quad (2.40)$$

$$= \sum_{x_N} p(x_N) \quad (2.41)$$

$$= 1. \quad (2.42)$$

と, 確率の規格化を満たすことと, 確率の非負性 $p_B(x_1, \dots, x_N, m) \geq 0$ を, $p_B(x_i|x_{i+1}, m) \geq 0$, $p(m|x_N)p(x_N) \geq 0$ からいえば OK.

いてフィードバック制御下での定常系熱力学を構成している例は Udo Seifert, *Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machine*. Rep. Prog. Phys. **75**, 126001 (2012). などがある.

²⁴Maxwell のデーモンにおける, 見かけ上の第二法則の破れに対応する.

Theorem 2.3.2 (*Sagawa-Ueda, Generalized second law of thermodynamics under feedback control*)

フィードバック制御下では、次の一般化熱力学第二法則が成り立つ。²⁵

$$\langle \sigma \rangle \geq I(X_N; M) - I(X_1; M) \quad (2.43)$$

Proof. フィードバック制御下では、 $\sigma - i(x_N; m) + i(x_1; m)$ が Theorem 2.3.1 より stochastic relative entropy. よって、アンサンブル平均は非負 (Theorem 1.3.3), すなわち $\langle \sigma - i(x_N; m) + i(x_1; m) \rangle \geq 0$. [$I(X_N; M) = \langle i(x_N; m) \rangle$, $I(X_1; M) = \langle i(x_1; m) \rangle$.]

Remark. [T. Sagawa and M. Ueda, *Generalized Jarzynski equality under nonequilibrium feedback control*, Phys. Rev. Lett. **104**, 090602 (2010).] では、同等の結果が $\beta(\langle W \rangle - \Delta F) \geq -I(X_1; M)$ の形で得られている。²⁶ Theorem 2.3.2 と [T. Sagawa and M. Ueda, *Generalized Jarzynski equality under nonequilibrium feedback control*, Phys. Rev. Lett. **104**, 090602 (2010).] の関係を以下述べる

初期状態の分布 $p(x_1)$ と、ある測定結果 m が実現された下での終状態の分布 $p(x_N|m)$ がカノニカル分布:

$$p(x_1) = p_{\text{eq}}(x_1) \quad (2.44)$$

$$= \exp[\beta[F_1 - E_1(x_1)]] \quad (2.45)$$

$$p(x_N|m) = p_{\text{eq}}(x_N|m) \quad (2.46)$$

$$= \exp[\beta[F_N(m) - E_N(x_N|m)]], \quad (2.47)$$

だと仮定し、また熱浴のエントロピー変化量を、ある測定結果 m が達成されたときの小さい系が得た熱量 $Q(m)$ で

$$\Delta s_{\text{bath}} = -\beta Q(m) \quad (2.48)$$

と書けるとしたときに、熱力学第一法則を用いて、ある測定結果 m が達成されたときに系にされた (stochastic な) 仕事 $W(m)$ を次のように定義する。

$$W(m) := -Q(m) - [E_1(x_1) - E_N(x_N|m)] \quad (2.49)$$

このときエントロピー生成は、

$$\sigma - i(x_N; m) := \beta(W(m) - \Delta F(m)) \quad (2.50)$$

と書ける。 [$\Delta F(m) := F_N(m) - F_1$] よって、このアンサンブル平均を取ることで Theorem 2.3.2 より

$$\langle \sigma - i(x_N; m) \rangle = \beta(\langle W \rangle - \Delta F) \quad (2.51)$$

$$\geq -I(X_1; M) \quad (2.52)$$

が得られる。 [$\Delta F := \langle \Delta F(m) \rangle$] ここで注意したいのは ΔF とは、メモリ m の状態でアンサンブル平均をとった自由エネルギーであるということである。

Theorem 2.3.3 (*Generalized Jarzynski equality under feedback control*)

フィードバック制御下では、Jarzynski 等式は次のように一般化される。

$$\langle \exp[-\sigma + i(x_N; m) - i(x_1; m)] \rangle = 1. \quad (2.53)$$

Proof. Theorem 2.3.1 より、 $\sigma - i(x_N; m) + i(x_1; m)$ は stochastic relative entropy. よって、identity (Theorem 1.3.4) より、 $\langle \exp[-\sigma + i(x_N; m) - i(x_1; m)] \rangle = 1$ が成り立つ。

²⁵T. Sagawa and M. Ueda, *Fluctuation theorem with information exchange: Role of correlation in stochastic thermodynamics*, Phys. Rev. Lett. **109**, 1806022 (2012). で得られた表記に基づく。

²⁶ここでの自由エネルギー変化 ΔF は、実は測定結果 m の確率でアンサンブル平均をとったという意味で、有効自由エネルギーと呼ぶべきものである。

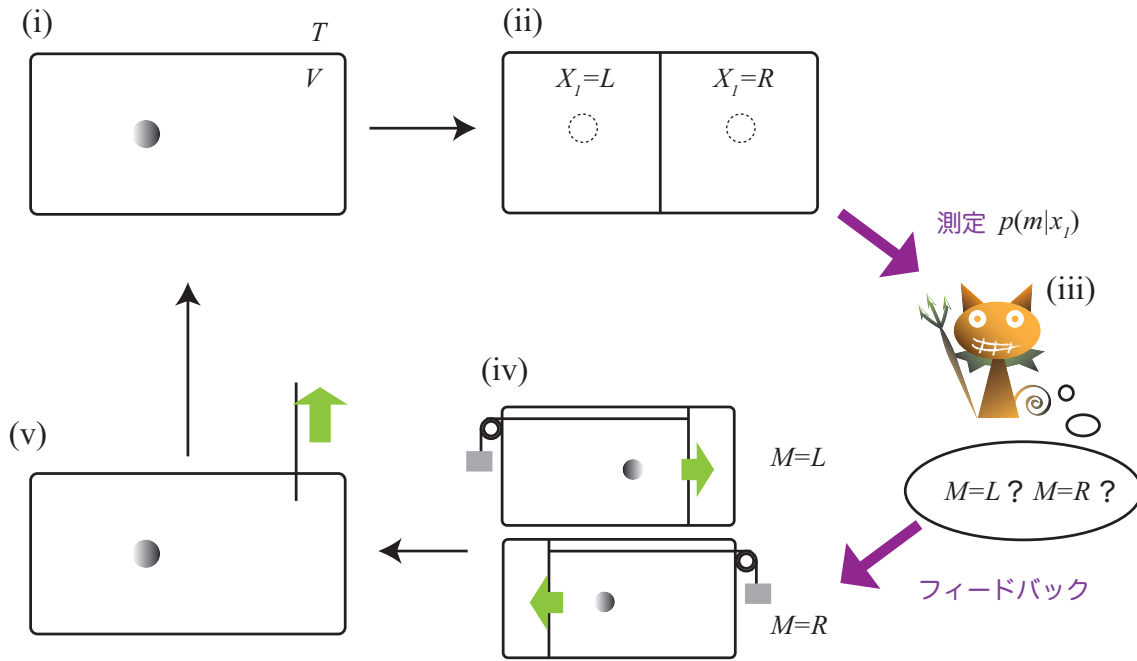


図 2.1: Szilard's engine.

Example 2.3.4 Szilard's engine (シラードのエンジン) [図 2.1]

Maxwell のデーモンのミニマルモデルを通じて, Theorem 2.3.2 の物理的な意味を明確にしていこう. Leo Szilard が 1929 年に考えた Maxwell のデーモンのモデル²⁷は次のような設定で語られる.

- (i) 温度 T の単一の熱浴中にある, 体積 V の箱に単一の粒子が空間的に一様な分布で存在する.
- (ii) 体積が $V/2$ ずつになるように, 仕切りを箱の中心に入れる²⁸.
- (iii) 粒子が仕切りの左側 ($X_1 = L$ で表現), もしくは仕切りの右側 ($X_1 = R$ で表現) にいるかを, Maxwell のデーモンが測定して, 測定結果をメモリ M に蓄える.
- (iv) メモリの状態に応じて, 粒子が左 ($M = L$) にいたら仕切りを右側に, 粒子が右 ($M = R$) にいたら仕切りを左側に動かし, 仕事を取り出す.
- (v) 仕切りを動かしきったら²⁹, 仕切りを取り外して十分待って (i) と同じ状態に戻す.

この (i)-(v) を 1 サイクルとすると, 一見熱力学第二法則に反して熱浴から 1 粒子を介して仕事を取り出せてしまう, という設定がシラードのエンジンである³⁰.

簡単のため, 測定の誤差のない場合にのみ, Theorem 2.3.2 の適用をみていこう.

まず, 粒子の (iii) における分布 $p(x_1)$ は,

$$p(X_1 = L) = \frac{1}{2} \tag{2.54}$$

$$p(X_1 = R) = \frac{1}{2} \tag{2.55}$$

²⁷L. Szilard, *On the decrease of entropy in a thermodynamic system by the intervention of intelligent beings*. Z. Phys. **53**, 840-856 (1929).

²⁸たとえば仕切りは十分薄い, もしくは小さい, といった, (ii) の過程では仕事はしない状況を考える.

²⁹測定に誤差がない場合は, 体積が V になるまで動かす. 測定に誤差がある場合は, 誤差レートに応じて仕切りを途中まで移動させる.

³⁰単一熱浴から 1 サイクルで仕事を取り出せてしまうので, 一見熱力学第二法則に反する, というわけである.

であると仮定し, 測定誤差はない, すなわち

$$p(M = L|X_1 = L) = p(M = R|X_1 = R) = 1 \quad (2.56)$$

$$p(M = R|X_1 = L) = p(M = L|X_1 = R) = 0 \quad (2.57)$$

のようなケースを考える

粒子は (iv) の段階でのみ, 仕切りに対して仕事を行う. (iv) の段階で取り出せる仕事 $W_{\text{ext}}(m) := -W(m)$ の上限は, 普通の平衡熱力学から見積もることができる. 平衡熱力学より, 準静的な操作で取り出せる仕事は最大化される. 準静的な操作では 1 粒子は常に平衡に緩和しているため, 体積 V' の 1 粒子が壁に加える圧力は $p_{\text{eq}} = (k_B T)/V'$ で与えられ, (iv) の段階で取り出せる仕事 $W_{\text{ext}}(m) := -W(m)$ は

$$W_{\text{ext}}(m) \leq \int_{V/2}^V dV' p_{\text{eq}} \quad (2.58)$$

$$= k_B T \int_{V/2}^V d \ln V' \quad (2.59)$$

$$= k_B T \ln 2 \quad (2.60)$$

となり, m の状態に依らない. また (i)-(v) で, メモリ状態 m によらず 1 サイクルで元の状態に戻るため, $\Delta F = \langle F(m) \rangle = 0$ である.

一方でメモリ M と初期状態 X_1 の間の相互情報量は, Binary symmetric channel (Example 1.5.1) で計算したように

$$I(X_1; M) = \ln 2 \quad (2.61)$$

となっている. よって, $\langle W \rangle = -W_{\text{ext}}(m)$ より, Theorem 2.3.2 (Sagawa-Ueda)

$$\beta(\langle W \rangle - \Delta F) \geq -I(X_1; M) \quad (2.62)$$

が成り立っていることがわかる. [$\beta = 1/(k_B T)$, $\Delta F = 0$, $I(X_1; M) = \ln 2$]

Remark. (iii) での測定のエラーの確率 (e) を Binary symmetric channel のように入れた, エラーありシラードエンジンも考えることができる. この場合は, 仕事を取り出す (iv) の段階で, 最終的な仕切りの位置を $(1-e)V$ になるところで止めたときに, “アンサンブル平均”の意味で取り出せる仕事 $\langle W_{\text{ext}}(m) \rangle$ が最大化される. その際に取り出せる仕事の上限は Binary symmetric channel での相互情報量 $\ln 2 + e \ln e + (1-e) \ln(1-e)$ になり, Theorem 2.3.2 (Sagawa-Ueda) を満たす.³¹

2.4 小さな“部分系”の数学的記述: Bayesian network

これまでに見たように, 情報理論と小さい系の熱力学は, relative entropy や相互情報量という量を介して非常に密接にかかわっている. しかしながら, Sagawa-Ueda (Theorem 2.3.2) の導出は, “フィードバック制御”の状況下のみ成り立つフィードバックプロトコル

$$p(x_1, \dots, x_N, m) = p(x_1)p(m|x_1)p(x_2|x_1, m)p(x_3|x_2, m) \cdots p(x_N|x_{N-1}, m) \quad (2.63)$$

の性質に大きく依っている. しかしながら, 複雑なフィードバックと測定を含んだシステムや, 相互作用する小さい系, 時間遅れのあるフィードバック制御, などの普遍的な物理的な問題への適用を考えた際,³² Sagawa-Ueda のフォーマリズムだけではいささか不十分である.

³¹たとえば, T. Sagawa and M. Ueda, *Nonequilibrium thermodynamics of feedback control*, Phys. Rev. E **85**, 021104 (2012). などを参考.

³²たとえば, シグナル伝達系などの生化学現象では, 人工的なフィードバックではないため, Sagawa-Ueda のフォーマリズムは適用できない. 一方で S. Ito and T. Sagawa, *Information thermodynamics on causal networks*. Phys. Rev. Lett. **111**, 180603 (2013). による “部分系”の熱力学は, 非常に広いクラスの確率過程で成り立つ一般理論になっており, ここで挙げたような普遍的な状況下で適用できる. たとえば, S. Ito and T. Sagawa, *Maxwell's demon in biochemical signal transduction*. arXiv: 1406.5810 (2014). では大腸菌 (*E. coli*) の走化性シグナル伝達に着目して, “部分系”の熱力学の応用を考えている.

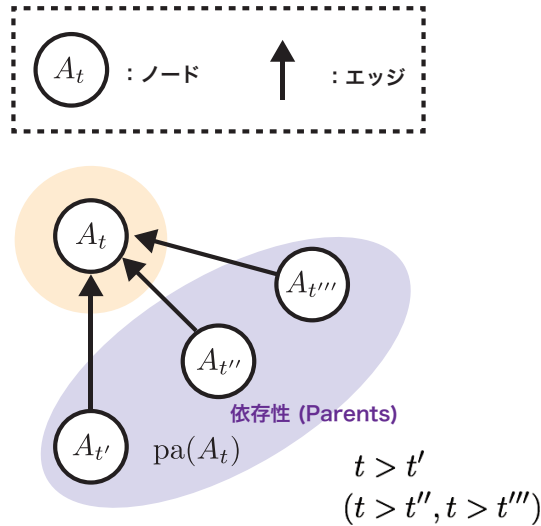


図 2.2: Bayesian network.

よってどんなケースでも適用可能な理論の拡張を行うために、まずは Bayesian network というグラフ理論を導入して、複雑な“プロトコル”を数学的に記述できるようにする。そのうえで、小さな”部分系”の熱力学の一般論を構築しよう³³。

Bayesian network³⁴とは、同時確率分布を chain rule (Theorem 1.1.1) によって条件付き確率で展開するときに、各確率変数の依存性を網羅的に表現するための、グラフ理論³⁵による記述法である。

今 N_A 個の確率変数 $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_{N_A}\}$ があるとしよう。Chain rule (Theorem 1.1.1) より、同時確率分布 $p(a_1, \dots, a_{N_A})$ は、任意の a_1, \dots, a_{N_A} に対して

$$p(a_1, \dots, a_{N_A}) = p(a_1)p(a_2|a_1)p(a_3|a_2, a_1) \cdots p(a_{N_A}|a_{N_A-1}, \dots, a_1) \quad (2.64)$$

のように、条件付き確率の積の形で常に表現される。ここに確率変数間の依存性(条件付き独立性)を陽に考えて、条件付き確率の条件がどこまで減らせるかを(有向非循環)グラフによって表現するのが Bayesian network の考え方である。まずは、グラフ理論における各用語(ノード、エッジ)を与え、Bayesian network を定義してゆこう。

ノード (Node, 頂点) [Bayesian network]

各確率変数 A_t ($t = 1, \dots, N_A$) は、グラフ上でそれぞれひとつのノード [図 2.2] に対応する。

エッジ (Edge, 辺) [Bayesian network]

各ノード間に

$$A_{t'} \rightarrow A_t \quad (2.65)$$

³³ここで展開する内容は、S. Ito and T. Sagawa, *Information thermodynamics on causal networks*. Phys. Rev. Lett. **111**, 180603 (2013). の内容になる

³⁴人によっては directed acyclic graph (DAG, 有向非循環グラフ) と呼ばれるグラフの一種を用いる確率モデルであることから、DAG とだけいうことがある。また陽に因果律を気にして Bayesian network を用いる場合、特に causal network と呼ぶことがある。ここで言う議論で利用する Bayesian network は、causal network と呼ぶほうが正確だろう。

³⁵Bayesian network は有向グラフによって数学的に定義される。有向グラフの定義とは次のようなものである。集合 V (ノード)、集合 E (エッジ)、そして写像 $f: E \rightarrow V \times V$ の三つ組みを、有向グラフ $G := (f, V, E)$ と呼ぶ。すなわち有向グラフという専門用語を使ったがこれは単に、各頂点(ノード) V 間を、向きのあるエッジ E でつないだ構造である、ということをつけているにすぎない。Bayesian network においては、この有向グラフを確率モデルとして利用し、ノード V を確率変数に、 V, f は確率変数間の依存性 (Parents で記述される) に対応させる。

のようなエッジがあるとき、2つの確率変数間 ($A_{t'}, A_t$ 間) には依存性があることを意味する [図 2.2]。今、有向グラフの非循環性 (acyclic) を満たすために、 $A_{t'} \rightarrow A_t$ ならば $t' < t$ であることを要請する。³⁶

Parent (親)

$A_{t'} \rightarrow A_t$ というエッジがあるとき、 $A_{t'}$ は A_t の parent(親) という [図 2.2]。 A_t の parent の集合 (parents) を $\text{pa}(A_t)$ と表記する。

Theorem 2.4.1 (Ancestor)

$$\text{pa}(A_t) \subseteq \{A_1, \dots, A_{t-1}\} \quad (2.66)$$

Proof. 任意の $A_{t'} \in \text{pa}(A_t)$ で、 $t' < t$ 。

Remark. $\{A_1, \dots, A_{t-1}\}$ を a_t の ancestor(先祖) とよび、 $\text{an}(A_t) := \{A_1, \dots, A_{t-1}\}$ と表記する。

Bayesian network

条件付き確率 $p(a_t | a_{t-1}, \dots, a_1)$ は

$$p(a_t | a_{t-1}, \dots, a_1) = p(a_t | \text{pa}(a_t)) \quad (2.67)$$

のように、parents を用いて条件を減らすことができる。この関係式こそが、Bayesian network の定義、すなわちグラフに確率的な意味を持たせるものになっている。³⁷

Remark. a_t と $\{a_1, \dots, a_{t-1}\}$ は $\text{pa}(a_t)$ の下で条件付き独立³⁸になっている (local Markov property)。

Theorem 2.4.2 (Chain rule for Bayesian networks)

$$p(a_1, \dots, a_{N_A}) = \prod_{t=1}^{N_A} p(a_t | \text{pa}(a_t)). \quad (2.68)$$

Proof. Chain rule に $p(a_t | a_{t-1}, \dots, a_1) = p(a_t | \text{pa}(a_t))$ を代入すれば OK。 [ただし、Theorem 2.4.1 より $\text{pa}(a_1) = \emptyset$ (空集合) であるため、 $p(a_1 | \text{pa}(a_1)) = p(a_1 | \emptyset) = p(a_1)$.]

この Bayesian network を小さな“部分系”の記述に使うことを考えよう。すなわち、Theorem 2.4.2 (chain rule for Bayesian network) によって全系の確率的な発展を表現し、各変数間の依存性をネットワークによって表現する。当然物理現象でさえあれば因果律を持つはずなので、Bayesian network によってほぼすべての現実的な (非 Markov や時間遅れなどを含む) 時間発展する確率過程を網羅的に記述できる。この下で、情報と熱力学の一般法則を構築しようというのがこのノートで行われる試みである。まずは着目する部分系 X と、それ以外の他の系 C というのを定義しよう。

³⁶この要請は、 $A_{t'} \rightarrow A_t \rightarrow \dots \rightarrow A_{t'}$ のようなエッジを辿って元のノードに戻ってくる経路がないこと [非循環性] を保障する。このような添え字 t の順序は、グラフ上のトポロジーに関連するため、topological ordering (トポロジカル順序) と呼ばれる。ちなみに、この topological ordering を因果関係の順番 [e.g. t が小さいほど過去の状態を表す確率変数] にとっている Bayesian network を、特に causal network と呼ぶ。causal network においてはグラフの非循環性 (もしくは topological ordering) こそが、因果律 (causality) を破らないことを保障する。

³⁷ノード a_t が確率変数を表し、エッジが確率変数間の依存性を表すのは、この定義があるからである。Ancestor: $\text{an}(a_t) := \{a_1, \dots, a_{t-1}\}$ という表記を持ちいれば、 $p(a_t | \text{an}(a_t)) = p(a_t | \text{pa}(a_t))$ となる。

³⁸親を含まない先祖の集合を $\text{an}^\dagger(A_t) := \{A_1, \dots, A_{t-1}\} \setminus \text{pa}(A_t)$ と表記したときに、関係式 $p(a_t, \text{an}^\dagger(a_t) | \text{pa}(a_t)) = p(a_t | \text{pa}(a_t))p(\text{an}^\dagger(a_t) | \text{pa}(a_t))$ を満たす。

小さな部分系

全確率変数 \mathcal{A} の部分集合 $\mathcal{X} = \{X_1, \dots, X_N\} \subseteq \mathcal{A}$ が, ある小さな部分系の時間発展であるとき, 次の関係を満たすとする³⁹.

$$X_{k'-1} \in \text{pa}(X_k) \quad (k' = k), \quad (2.69)$$

$$X_{k'-1} \notin \text{pa}(X_k) \quad (k' \neq k). \quad (2.70)$$

ここで X_k は時刻 k での系 \mathcal{X} の状態を表す確率変数である.

他の系

他の系 \mathcal{C} は, 全確率変数 \mathcal{A} から部分系 \mathcal{X} を除いたもの (差集合 \setminus) で定義する.

$$\mathcal{C} = \{C_1, \dots, C_{N'}\} := \mathcal{A} \setminus \mathcal{X}. \quad (2.71)$$

ここで, C_l の添え字 l による順序は以下のようにしておく.

C_l は \mathcal{A} の要素なので, $C_{l'}, C_l$ は $C_{l'} = A_{l'}, C_l = A_l$ のように \mathcal{A} の要素の形でかける⁴⁰. このとき $t' < t$ ならば $l' < l$ となっていることを要請する⁴¹.

Lemma 2.4.3

$$p(a_1, \dots, a_{N_{\mathcal{A}}}) = \prod_{k,l} p(x_k | \text{pa}(x_k)) p(c_l | \text{pa}(c_l)). \quad (2.72)$$

Proof. Theorem 2.4.2, および $\mathcal{C} := \mathcal{A} \setminus \mathcal{X}$ より.

Remark. ここで $\prod_k p(x_k | \text{pa}(x_k))$ が系 \mathcal{X} の時間発展を, $\prod_l p(c_l | \text{pa}(c_l))$ が他の系 \mathcal{C} の時間発展を表している.

Example 2.4.4 Markov chain

Markov chain, すなわち

$$p(x_1, \dots, x_N) = p(x_1) p(x_2 | x_1) p(x_3 | x_2) \cdots p(x_N | x_{N-1}) \quad (2.73)$$

という確率過程は Bayesian network で図 2.3 のように記述される.

[ノード (全確率変数, $\mathcal{A} = X \cup \mathcal{C}$)]

$$X = \{x_1, \dots, x_N\} \quad (2.74)$$

$$\mathcal{C} = \emptyset \quad (2.75)$$

[エッジ (条件付き独立性: Parents, $\text{pa}(a_t)$)]

$$\text{pa}(x_k) = \emptyset \quad (k = 1) \quad (2.76)$$

$$\text{pa}(x_k) = \{x_{k-1}\} \quad (k = 2, \dots, N) \quad (2.77)$$

³⁹一つ目の関係式は, 各時刻 k の部分系 x_k の状態は時間発展するために, 一個前の時刻の状態 x_{k-1} に確率的に依存しなければならぬという仮定を意味する. 二つ目の関係式は, 部分系 \mathcal{X} は局所的には Markov 的に発展する, すなわち (フィードバックプロトコルというメモリのような) 他の系によって部分系 \mathcal{X} は非 Markov に発展はしてもよいが, 見ている “部分系” そのものは刻一刻と時間発展で変化している, という (それなりに強い) 仮定である. 実はこの二つ目の仮定をきちんと要請しないと, 熱浴のエントロピー変化量という物理的な量が, きちんと定義できなくなってしまう.

⁴⁰ \mathcal{A} の要素の各添え字は, $A_{t'} \rightarrow A_t$ というエッジがあれば, $t' < t$ を満たすような順序になっている (topological ordering).

⁴¹つまりと, . 添え字 l が小さいほうが, 過去の確率変数を意味するという順序付けである.

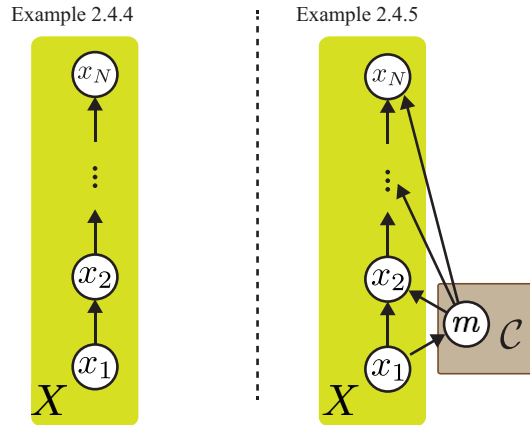


図 2.3: Example (Bayesian network).

Example 2.4.5 フィードバックプロトコル

フィードバックプロトコル, すなわち

$$p(x_1, \dots, x_N, m) = p(x_1)p(m|x_1)p(x_2|x_1, m)p(x_3|x_2, m) \cdots p(x_N|x_{N-1}, m) \quad (2.78)$$

という確率過程は Bayesian network で図 2.3 のように記述される.

[ノード (全確率変数, $\mathcal{A} = X \cup \mathcal{C}$)]

$$X = \{x_1, \dots, x_N\} \quad (2.79)$$

$$\mathcal{C} = \{m\} \quad (2.80)$$

[エッジ (条件付き独立性: Parents, $\text{pa}(a_t)$)]

$$\text{pa}(x_k) = \emptyset \quad (k = 1) \quad (2.81)$$

$$\text{pa}(x_k) = \{x_{k-1}, m\} \quad (k = 2, \dots, N) \quad (2.82)$$

$$\text{pa}(m) = \{x_1\} \quad (2.83)$$

2.5 小さな“部分系”の熱力学: ネットワーク上の情報熱力学

Bayesian network を用いた小さな“部分系”の記述を用いて, 熱力学を構成することを考えよう. 普通の小さな系の熱力学を構成するのと同様に, やはり重要になってくるのは詳細ゆらぎの定理である. ネットワーク上でも, 詳細ゆらぎの定理を熱浴のエントロピー変化の定義として導入してやれば, エントロピー生成は定義できる.

なので, 小さな“部分系”で熱力学第二法則の一般化を構築する為に重要なのは, ネットワーク上で定義されたエントロピー生成に, どのような項を付加すれば stochastic relative entropy になるか, という点である. フィードバック制御下では, 相互情報量の差分を付加すればよかったのだが, 一般の確率過程⁴²の場合には, どうすればいいのかが自明でない.

もしどのようなケースでもある“一定の項”を付加すれば, 常に stochastic relative entropy になるのであれば, その“一定の項”には物理的な意味があるだろう, と非自明ながら予想が立てられる⁴³. 本講義資料で

⁴²特に非 Markov な効果が入ったとき

⁴³どのようなケースでも成り立って, 物理的な意味が明らかであれば, “一般法則”と読んでさしつかえないと思う. そういった意味で, ここで示す結果は“一般法則”である.

は、その非自明な“一定の項”が存在して、“情報の流れ”とよべる量になっているところまで示して終わりにしよう⁴⁴。

まずは詳細ゆらぎの定理を導入しよう。 x_k から x_{k+1} への時間発展の確率は

$$p(x_{k+1}|\text{pa}(x_{k+1})) \quad (2.84)$$

によって与えられる。ここで $x_k \in \text{pa}(x_{k+1})$ であるため、この時間発展に寄与する他の系 \mathcal{C} の変数は $\mathcal{B}_{k+1} := \text{pa}(x_{k+1}) \setminus \{x_k\}$ で与えられる⁴⁵。よって、 \mathcal{B}_{k+1} という条件の下での、 x_k から x_{k+1} への時間発展による熱浴のエントロピー変化は、

$$\ln \frac{p(x_{k+1}|x_k, \mathcal{B}_{k+1})}{p_B(x_k|x_{k+1}, \mathcal{B}_{k+1})} \quad (2.85)$$

の形で与えられる。 (p_B は backward process の確率.)

詳細ゆらぎの定理 (ネットワーク上)

ネットワーク上での、詳細ゆらぎの定理は次のように修正される⁴⁶。

$$\Delta s_{\text{bath}} := \ln \left[\frac{p(x_2|x_1, \mathcal{B}_2)}{p_B(x_1|x_2, \mathcal{B}_2)} \frac{p(x_3|x_2, \mathcal{B}_3)}{p_B(x_2|x_3, \mathcal{B}_3)} \dots \frac{p(x_N|x_{N-1}, \mathcal{B}_N)}{p_B(x_{N-1}|x_N, \mathcal{B}_N)} \right] \quad (2.86)$$

$$= \ln \left[\prod_{k=2}^N \frac{p(x_k|\text{pa}(x_k))}{p_B(x_{k-1}|x_k, \mathcal{B}_k)} \right] \quad (2.87)$$

ただし、 $\mathcal{B}_{k+1} := \text{pa}(x_{k+1}) \setminus \{x_k\}$ 。ここで p_B は backward process の確率である。⁴⁷

エントロピー生成 (ネットワーク上)

ネットワーク上での、小さな部分系 X のエントロピー生成は、次のように定義される。

$$\sigma := \Delta s_{\text{bath}} + \Delta s_x \quad (2.88)$$

$$= \ln \left[\prod_{k=2}^N \frac{p(x_k|\text{pa}(x_k))}{p_B(x_{k-1}|x_k, \mathcal{B}_k)} \right] + \ln \frac{p(x_1)}{p(x_N)} \quad (2.89)$$

このエントロピー生成に“一定の項”を加えて、stochastic relative entropy になるようなもの⁴⁸を求めて、熱力学第二法則の小さな“部分系”への一般化を導出する、というのがこの後で示す主要結果になるのだが、勿論その“一定の項”は物理的な意味が明確でなければならない。ここで、加えるべき“一定の項”である量、“情報の流れ”と“始状態相関”、“終状態相関”を先に導入しておこう。

⁴⁴ここで言う“情報の流れ”とは、transfer entropy [T. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **85**, 461 (2000).] と呼ばれる量に対応している。実はフィードバック制御下での Sagawa-Ueda における相互情報量も、この transfer entropy と呼ばれる量の最も単純な場合になっている。

⁴⁵フィードバック制御下ではメモリ m に対応する。

⁴⁶この定義は、通常のエントロピー生成や、フィードバック制御下でのエントロピー生成の一般化になっている。

⁴⁷もちろん、ネットワーク上でも p_B には任意性があるが、物理的な熱という場合には、 $x = \{x_+, x_-\}$ 、 $\mathcal{B} = \{\mathcal{B}_+, \mathcal{B}_-\}$ のように時間反転に不変な量 (添え字 +) と時間反転で反転する量 (添え字 -) で記述したとき、 $p_B(x|x', \mathcal{B}) = p(x_+, -x_-|x'_+, -x'_-, \mathcal{B}_+, -\mathcal{B}_-)$ のように与えるべきだろう。

⁴⁸当然、“一定の項”の加え方にはある程度任意性があるが、Sagawa-Ueda の一般化になるように“一定の項”を決めている。また、繰り返しフィードバック制御における関係式 [J. M. Horowitz and S. Vaikunathanathan, Phys. Rev. E. **82**, 061120 (2011).] の一般化にもなっている。

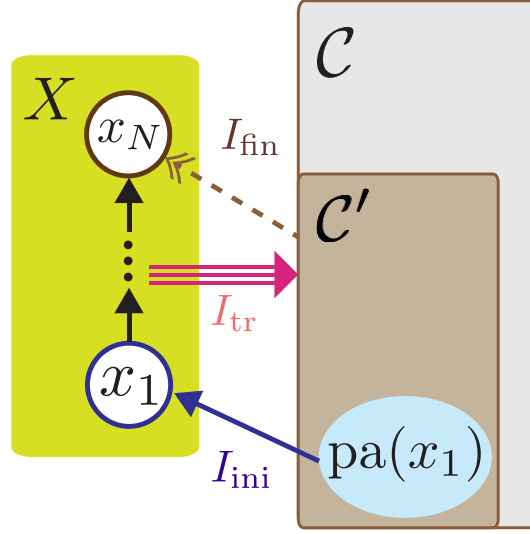


図 2.4: “情報の流れ”, “始状態相関”, “終状態相関”の模式図.

Transfer entropy (ネットワーク上)

小さな部分系 X から他の系の変数 $c_l \in \mathcal{C}$ への情報の流れ [図 2.4] は次のように定義される.

$$I_{\text{tr}}^l := \langle \ln p(c_l | \text{pa}(c_l)) - \ln p(c_l | c_{l-1}, \dots, c_1) \rangle. \quad (2.90)$$

また stochastic な transfer entropy を

$$i_{\text{tr}}^l := \ln p(c_l | \text{pa}(c_l)) - \ln p(c_l | c_{l-1}, \dots, c_1) \quad (2.91)$$

と表記する.

Remark. この量の意味を直感的に説明しよう.

今 X のダイナミクスは知らないとする. そうすると, 他の系 \mathcal{C} の時間発展は, 時刻 l で

$$p(c_l | c_{l-1}, \dots, c_1) \quad (2.92)$$

で確率的に決まる. そのため, 時間発展のエントロピー的な定量化⁴⁹は

$$h_{\mathcal{C}} := \langle -\ln p(c_l | c_{l-1}, \dots, c_1) \rangle \quad (2.93)$$

で与えられる.

一方で, X のダイナミクスを知っている場合は, 他の系 \mathcal{C} の時間発展は, 時刻 l で

$$p(c_l | \text{pa}(c_l)) \quad (2.94)$$

で確率的に決まり, エントロピー的な定量化は

$$h_{\mathcal{C}|X} := \langle -\ln p(c_l | \text{pa}(c_l)) \rangle \quad (2.95)$$

となる. すなわちこの差分, transfer entropy $I_{\text{tr}}^l = h_{\mathcal{C}} - h_{\mathcal{C}|X}$ は, 系 X のおかげで, \mathcal{C} の時間発展の際にエントロピー的にどれだけ得をしたか, という量になっている.

⁴⁹エントロピーレートと呼ばれる.

また、別の見方もできる。この量 i_{tr}^l は (stochastic な) 条件付き相互情報量を用いて、

$$i_{\text{tr}}^l = i(c_l : \text{pa}_X(c_l) | c_{l-1}, \dots, c_1) \quad (2.96)$$

とかける⁵⁰。ただし、 $\text{pa}_X(c_l)$ は c_l への依存関係をもつ X の変数であり、 $\text{pa}_X(c_l) := X \cap \text{pa}(c_l)$ と定義した。すなわち、他の系 \mathcal{C} の過去の履歴 $\{c_1, \dots, c_{l-1}\}$ を条件付けた、系 X と他の系の変数 $c_l \in \mathcal{C}$ の間の相関、という意味をもつ⁵¹。Transfer entropy は条件付き相互情報量の種類になるため、非負の量である。

始相関 (ネットワーク上)

ネットワーク上で、 X の始状態 x_1 と他の系 \mathcal{C} との相関 [図 2.4] は

$$I_{\text{ini}} = I(x_1 : \text{pa}(x_1)) \quad (2.97)$$

で与えられる。stochastic な始相関は

$$i_{\text{ini}} = i(x_1 : \text{pa}(x_1)) \quad (2.98)$$

とする。

終相関 (ネットワーク上)

ネットワーク上で、 X の終状態 x_N と他の系 \mathcal{C} との相関 [図 2.4] は、

$$I_{\text{fin}} = I(x_N : \mathcal{C}') \quad (2.99)$$

で与えられる。ここで \mathcal{C}' は、 x_N の ancestor $[\text{an}(x_N)]$ を用いて、 $\mathcal{C}' := \mathcal{C} \cap \text{an}(x_N)$ で定義される。他の系 \mathcal{C} のなかで、 x_N に影響を与えられる⁵²変数を意味する。

stochastic な終相関は

$$i_{\text{fin}} = i(x_N : \mathcal{C}') \quad (2.100)$$

とする。

Theorem 2.5.1 (Relative entropy)

ネットワーク上では、

$$\sigma - i_{\text{fin}} + i_{\text{ini}} + \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} i_{\text{tr}}^l \quad (2.101)$$

が stochastic relative entropy で次のように書ける。

$$\sigma - i_{\text{fin}} + i_{\text{ini}} + \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} i_{\text{tr}}^l = d_{\text{KL}}(p(\mathcal{A}) || p_B(\mathcal{A})) \quad (2.102)$$

$$p_B(\mathcal{A}) := \prod_{k=2}^N p_B(x_{k-1} | x_k, \mathcal{B}_k) p(\mathcal{C}', x_N) \prod_{l|c_l \notin \mathcal{C}'} p(c_l | \text{pa}(c_l)) \quad (2.103)$$

Proof.

⁵⁰ $p(c_l | \text{pa}(c_l)) = p(c_l | \text{pa}_X(c_l), c_{l-1}, \dots, c_1)$ が示せる。

⁵¹ フィードバック制御下の Sagawa-Ueda においては、後にもるように $I(x_1 : m)$ が測定の際の“情報の流れ”，すなわち transfer entropy の一種だった、ということになる。フィードバック制御下では、他の系がメモリ 1 つしかないため、過去の履歴を条件付ける必要がなかったのである。

⁵² 因果律的に、topological ordering において、 x_N よりも前の (昔の) 変数である。

$p(\mathcal{A}) = \prod_{k,l} p(x_k | \text{pa}(x_k)) p(c_l | \text{pa}(c_l))$ を用いる.

$$\sigma - i_{\text{fin}} + i_{\text{ini}} + \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} i_{\text{tr}}^l \quad (2.104)$$

$$= \ln \left[\prod_{k=2}^N \frac{p(x_k | \text{pa}(x_k))}{p_B(x_{k-1} | x_k, \mathcal{B}_k)} \right] + \ln \frac{p(x_1)}{p(x_N)} - \ln \frac{p(\mathcal{C}' | x_N)}{p(\mathcal{C}')} + \ln \frac{p(x_1 | \text{pa}(x_1))}{p(x_1)} + \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} \ln \frac{p(c_l | \text{pa}(c_l))}{p(c_l | c_{l-1}, \dots, c_1)}$$

$$= \ln \left[\frac{\prod_{k,l|c_l \in \mathcal{C}'} p(x_k | \text{pa}(x_k)) p(c_l | \text{pa}(c_l)) \prod_{l|c_l \notin \mathcal{C}'} p(c_l | \text{pa}(c_l))}{\prod_{k=2}^N p_B(x_{k-1} | x_k, \mathcal{B}_k) p(\mathcal{C}' | x_N) p(x_N) \prod_{l|c_l \notin \mathcal{C}'} p(c_l | \text{pa}(c_l))} \right] \quad (2.105)$$

$$= \ln \frac{p(\mathcal{A})}{p_B(\mathcal{A})} \quad (2.106)$$

ここで $p_B(\mathcal{A})$ が確率の規格化を満たしていることをみよう.

$$\sum_{\mathcal{A}} p_B(\mathcal{A}) = \sum_{\mathcal{A}} \left[\prod_{k=2}^N p_B(x_{k-1} | x_k, \mathcal{B}_k) p(\mathcal{C}', x_N) \prod_{l|c_l \notin \mathcal{C}'} p(c_l | \text{pa}(c_l)) \right] \quad (2.107)$$

$$= \sum_{X, \mathcal{C}'} \left[\prod_{k=2}^N p_B(x_{k-1} | x_k, \mathcal{B}_k) p(\mathcal{C}', x_N) \right] \quad (2.108)$$

$$= \sum_{\mathcal{C}', x_N} p(\mathcal{C}', x_N) \quad (2.109)$$

$$= 1 \quad (2.110)$$

よって, $\sigma - i_{\text{fin}} + i_{\text{ini}} + \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} i_{\text{tr}}^l$ は stochastic relative entropy.

Theorem 2.5.2 (*Ito-Sagawa, Generalized second law of thermodynamics for subsystem*)

小さな部分系では, 次の一般化第二法則が成り立つ.

$$\langle \sigma \rangle \geq I_{\text{fin}} - I_{\text{ini}} - \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} I_{\text{tr}}^l \quad (2.111)$$

Proof. Theorem 2.5.1 より $\sigma - i_{\text{fin}} + i_{\text{ini}} + \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} i_{\text{tr}}^l$ は stochastic relative entropy. よって, アンサンブル平均は非負 (Theorem 1.3.3).

Remark. この定理の主張は, 部分系のエントロピー生成はどんなダイナミクス (他の系が non-Markov 的に影響しても良い) であっても常に, “初期と終状態の相関”, および “情報の流れ” で制限されているということである. 初期と終状態の相関を一種の境界条件のように考えると, “エントロピーの世界” にもある種の “流れ” のようなものがあって⁵³, その “流れ”こそが部分系の熱力学構造を決める要因になっている, という描像が見えてくるのではないだろうか⁵⁴.

Theorem 2.5.3 (*Ito-Sagawa, Generalized Jarzynski equality for subsystem*)

小さな部分系では, 次の一般化 Jarzynski 等式が成り立つ.

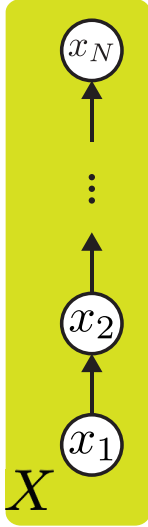
$$\left\langle \exp \left[-\sigma + i_{\text{fin}} - i_{\text{ini}} - \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} i_{\text{tr}}^l \right] \right\rangle = 1. \quad (2.112)$$

Proof. Theorem 2.5.1 より $\sigma - i_{\text{fin}} + i_{\text{ini}} + \sum_{l|c_l \in \mathcal{C}'} i_{\text{tr}}^l$ は stochastic relative entropy. よって, identity が成り立つ. (Theorem 1.3.4).

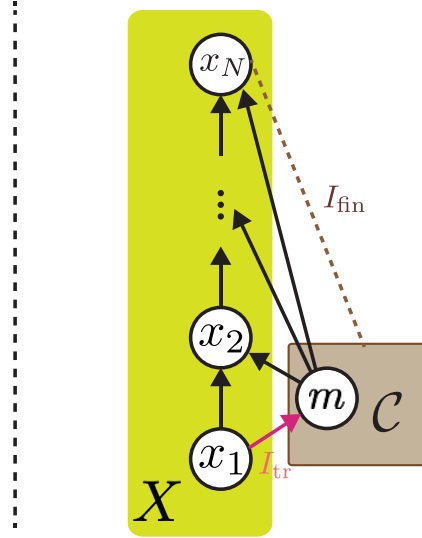
⁵³ 粒子数の保存則みたいなものがあるかはわからないが.

⁵⁴ まだクリアな数学的表現を見つけれられてないので, 妄想の域を出ていないが, 数年のうちに解決したい...

Example 2.5.4



Example 2.5.5



Example 2.5.6

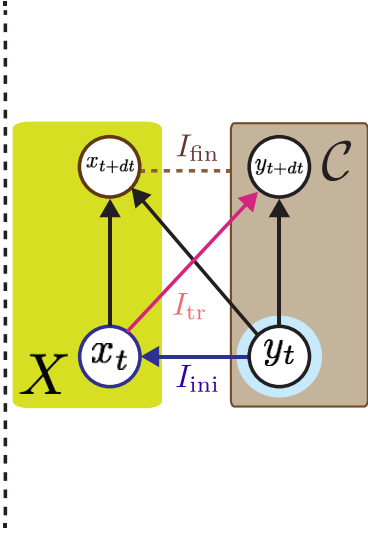


図 2.5: 個々の Bayesian network への Ito-Sagawa (Theorem 2.5.3) の適用例.

Example 2.5.4 Markov chain

Markov chain, すなわち

$$p(x_1, \dots, x_N) = p(x_1)p(x_2|x_1)p(x_3|x_2) \cdots p(x_N|x_{N-1}) \quad (2.113)$$

という確率過程では, Ito-Sagawa (Theorem 2.5.2) は, 熱力学第二法則を与える.

$$\langle \sigma \rangle \geq 0. \quad (2.114)$$

なぜなら, 図 2.5 より $\mathcal{C} = \mathcal{C}' = \emptyset$, $\text{pa}(x_1) = \emptyset$ であるため⁵⁵,

$$I_{\text{ini}} = I(x_1 : \text{pa}(x_1)) \quad (2.115)$$

$$= 0 \quad (2.116)$$

$$I_{\text{fin}} = I(x_N : \mathcal{C}') \quad (2.117)$$

$$= 0 \quad (2.118)$$

また I_{tr}^l は c_l ごとに定義されるので今は存在しない. よって, Theorem 2.5.2 は熱力学第二法則 ($\langle \sigma \rangle \geq 0$) を与える.

Example 2.5.5 フィードバックプロトコル

フィードバックプロトコル, すなわち

$$p(x_1, \dots, x_N, m) = p(x_1)p(m|x_1)p(x_2|x_1, m)p(x_3|x_2, m) \cdots p(x_N|x_{N-1}, m) \quad (2.119)$$

という確率過程では, Ito-Sagawa (Theorem 2.5.2) は, Sagawa-Ueda を与える.

$$\langle \sigma \rangle \geq I(x_N : m) - I(x_1 : m) \quad (2.120)$$

⁵⁵任意の確率変数 a_t に対し, $I(a_t : \emptyset) = 0$. なぜなら $I(a_t : \emptyset) = S(a_t|\emptyset) - S(a_t)$ で $S(a_t|\emptyset) = S(a_t)$.

なぜなら, 図 2.5 より $C = C' = \{m\}$, $\text{pa}(x_1) = \emptyset$ であるため,

$$I_{\text{ini}} = I(x_1 : \text{pa}(x_1)) \quad (2.121)$$

$$= 0 \quad (2.122)$$

$$I_{\text{fin}} = I(x_N : C') \quad (2.123)$$

$$= I(x_N : m) \quad (2.124)$$

$$I_{\text{tr}}^1 = \langle \ln p(c_1 | \text{pa}(c_1)) - \ln p(c_1) \rangle \quad (2.125)$$

$$= \langle \ln p(m | x_1) - \ln p(x_1) \rangle \quad (2.126)$$

$$= I(x_1 : m) \quad (2.127)$$

よって, Theorem 2.5.2 は Sagawa-Ueda ($\langle \sigma \rangle \geq I(x_N : m) - I(x_1 : m)$) を与える.

Example 2.5.6 Markov で発展する 2 体相互作用

Markov で発展する 2 体の相互作用は, 単位時間の変化 t から $t + dt$ で

$$p(x_t, x_{t+dt}, y_t, y_{t+dt}) = p(x_t, y_t)p(x_{t+dt}|x_t, y_t)p(y_{t+dt}|x_t, y_t) \quad (2.128)$$

で発展する⁵⁶. このとき, Ito-Sagawa (Theorem 2.5.2) は, 次のような関係式を与える⁵⁷.

$$\langle \sigma \rangle \geq I(x_{t+dt} : y_{t+dt}) - I(x_t : y_t) + I(x_{t+dt} : y_t | y_{t+dt}) - I(x_t : y_{t+dt} | y_t) \quad (2.129)$$

$$= I(x_{t+dt} : \{y_{t+dt}, y_t\}) - I(x_t : \{y_{t+dt}, y_t\}). \quad (2.130)$$

まず, このダイナミクスは Bayesian network では図 2.5 で与えられる. なぜなら,

$$p(x_t, x_{t+dt}, y_t, y_{t+dt}) = p(y_t)p(x_t|y_t)p(x_{t+dt}|x_t, y_t)p(y_{t+dt}|x_t, y_t) \quad (2.131)$$

とかけ, $\text{pa}(y_t) = \emptyset$, $\text{pa}(x_t) = \{y_t\}$, $\text{pa}(y_{t+dt}) = \{y_t, x_t\}$, $\text{pa}(x_{t+dt}) = \{y_t, x_t\}$ であるからである. 今 $X = \{x_1 = x_t, x_2 = x_{t+dt}\}$, $C = C' = \{c_1 = y_t, c_2 = y_{t+dt}\}$ としている.

このとき各項は次のように計算される.

$$I_{\text{ini}} = I(x_1 : \text{pa}(x_1)) \quad (2.132)$$

$$= I(x_t : y_t) \quad (2.133)$$

$$I_{\text{fin}} = I(x_2 : C') \quad (2.134)$$

$$= I(x_{t+dt} : \{y_t, y_{t+dt}\}) \quad (2.135)$$

$$= I(x_{t+dt} : y_{t+dt}) + I(x_{t+dt} : y_t | y_{t+dt}) \quad (2.136)$$

$$I_{\text{tr}}^1 = \langle \ln p(c_1 | \text{pa}(c_1)) - \ln p(c_1) \rangle \quad (2.137)$$

$$= \langle \ln p(y_t) - \ln p(y_t) \rangle \quad (2.138)$$

$$= 0 \quad (2.139)$$

$$I_{\text{tr}}^2 = \langle \ln p(c_2 | \text{pa}(c_2)) - \ln p(c_2 | c_1) \rangle \quad (2.140)$$

$$= \langle \ln p(y_{t+dt} | x_t, y_t) - \ln p(y_{t+dt} | y_t) \rangle \quad (2.141)$$

$$= I(x_t : y_{t+dt} | y_t) \quad (2.142)$$

⁵⁶一般には $p(x_t, x_{t+dt}, y_t, y_{t+dt}) = p(x_t, y_t)p(x_{t+dt}, y_{t+dt}|x_t, y_t)$ が二体相互作用による Markov 発展の定義なので, $p(x_{t+dt}, y_{t+dt}|x_t, y_t) = p(x_{t+dt}|x_t, y_t)p(y_{t+dt}|x_t, y_t)$ にはならない. しかしながら, 系 X と Y の熱浴によるノイズの効果に対して, ノイズの独立性を要請すれば, $p(x_{t+dt}, y_{t+dt}|x_t, y_t) = p(x_{t+dt}|x_t, y_t)p(y_{t+dt}|x_t, y_t)$ が成り立つ. $p(x_t, x_{t+dt}, y_t, y_{t+dt}) = p(x_t, y_t)p(x_{t+dt}, y_{t+dt}|x_t, y_t)$ の場合でも, Ito-Sagawa (Theorem 2.5.2) は同じ結果を与えるが, この場合は部分系のエントロピー生成の定義の正当性が, 熱浴のノイズが独立でないためにそこまでクリアでないという事情があるため, ここではノイズが独立なときのみを議論している.

⁵⁷大腸菌 (*E. coli*) の走化性シグナル伝達の解析 [S. Ito and T. Sagawa, *Maxwell's demon in biochemical signal transduction*. arXiv: 1406.5810 (2014).] で用いた関係式である.

以上より, Theorem 2.5.3 は $\langle\sigma\rangle \geq I(x_{t+dt} : y_{t+dt}) - I(x_t : y_t) + I(x_{t+dt} : y_t | y_{t+dt}) - I(x_t : y_{t+dt} | y_t)$ を与える.

2.6 まとめ, 今後の展望

ここまでで, 小さい系の熱力学と情報理論の関わりを, 熱力学第二法則の一般化という観点で, 最新の我々の成果まで紹介した.

これまでで見た通り, 小さい系の熱力学の話は情報理論と非常に密接に関わっている. 特に熱力学第二法則や Sagawa-Ueda, 我々の結果 (Ito-Sagawa) は, 異なる状況下での relative entropy の非負性からきていた.

また, Causality(因果律)によるネットワーク (Bayesian network, causal network) による定式化は熱力学第二法則 (の一般化) と非常に相性がよい⁵⁸. 熱力学第二法則は, 時間の矢などの因果律に密接に関わっていることが知られているので, causal network と熱力学の数学的な相性の良さは非自明ではあるが自然なことだろうと思う.

また, 当然の疑問として, ここで展開した小さい系の熱力学理論と Shannon の情報理論の間に深い関係があるかどうかも気になることである. 第 1 章でみたように Shannon の情報理論を象徴するのが, Noisy-channel coding theorem という不等式であるが, この不等式と小さい系の熱力学の第二法則との関係はクリアに理解したいと思うのはごくごく自然なことだと思う. 導出を見れば当然両者は大きく違うけれども, 我々の結果 (Ito-Sagawa) を生体内シグナル伝達系 (大腸菌走化性) に応用したところ, 実は我々の結果 (Ito-Sagawa) と Noisy-channel coding theorem の間にアナロジーが成り立つという非自明なことがわかった⁵⁹.

このように, 小さい系の熱力学と情報理論の間の一般法則は徐々に明らかになりつつあり, 今はこのような理論体系をどこまで意味のある現象へ応用可能か, という段階にある. ネットワークによるフォーマリズムは, 原理的にはありとあらゆる確率過程⁶⁰に適用可能なので, このような理論体系の応用可能性が一気に広がった⁶¹といえる. 個人的には生命現象への応用が興味深い, 量子情報や量子測定との関係, 力学系理論との関係, 冷却システムとの関係, などなど, まだまだ色々と応用可能性を秘めているように思う.

また, 理論的な側面では, これからの情報理論と小さな系の熱力学の研究は, 不等式の論理から一歩進まなければならないと思う. Shannon が Noisy-channel coding theorem の不等式を与えてから, 効率のよい符号化⁶²の研究が進み現在のコンピュータ技術につながったように, 情報理論と小さい系の熱力学の密接な関係も熱力学第二法則の一般化だけにとどまらず, 別の方向性を模索する必要があると考えている. 将来的には, このような研究を続けて行くことで, SF でよくある未来の生命技術⁶³の基礎理論ができれば面白いと思う.

⁵⁸例えば図 2.5 のグラフを見ると, 熱力学第二法則 (の一般化) に関わる transfer entropy や始相関, 終相関が, 矢印 (エッジ) によるグラフのトポロジーから計算出来ていることがわかる.

⁵⁹S. Ito and T. Sagawa, *Maxwell's demon in biochemical signal transduction*. arXiv: 1406.5810 (2014). きわめて挑戦的な主張である. しかしながら, このようなアナロジー自体が成立する背景に何か大きな構造があるかもしれない, と考えると非常に興味深い.

⁶⁰因果律をもつような.

⁶¹2010 年に Sagawa-Ueda が出たときに, Sagawa-Ueda を生命現象に適用するというのは, 夢のまた夢のようなチャレンジングな課題であったが, 4 年間で一気に風景が変わりつつある.

⁶²たとえばハフマン符号など. zip や jpg などのデータ圧縮で使われており, 日常生活でなじみ深い.

⁶³死後も脳だけで生き続けられる生体コンピュータとか. 不老不死は人類の夢です.

SUMMARY

エントロピー生成

$$\sigma := \Delta s_{\text{bath}} + \Delta s_x. \quad (\Delta s_x := -\Delta \ln p(x))$$

詳細揺らぎの定理 (Markov chain)

$$\Delta s_{\text{bath}} := \ln p(x_{k+1}|x_k) - \ln p_B(x_k|x_{k+1}).$$

熱力学第二法則

Markov chain で, $\langle \sigma \rangle \geq 0$

フィードバックプロトコル

$$p(x_1, x_2, \dots, x_N, m) = p(x_1)p(m|x_1)p(x_2|x_1, m) \cdots p(x_N|x_{N-1}, m)$$

m : メモリ

詳細揺らぎの定理 (フィードバック制御下)

$$\Delta s_{\text{bath}} := \ln p(x_{k+1}|x_k, m) - \ln p_B(x_k|x_{k+1}, m).$$

Sagawa-Ueda (フィードバック制御下の熱力学)

フィードバック制御下で, $\langle \sigma \rangle \geq I(x_N : m) - I(x_1 : m)$

Bayesian network

$\mathcal{A} = \{a_1, \dots, a_{N_A}\}$: 全確率変数

$X = \{x_1, \dots, x_N\}$: 小さな部分系

$\mathcal{C} := \mathcal{A} \setminus X = \{c_1, \dots, c_{N'}\}$: 他の系

$a_{t'} \rightarrow a_t$ のとき, $a_{t'}$ は a_t の親 (parent). $[t' < t$ (topological ordering)]

Chain rule for Bayesian network

$$p(\mathcal{A}) = \prod_t p(a_t | \text{pa}(a_t))$$

$\text{pa}(a_t)$: a_t の親 (parent) の集合

Transfer entropy

小さな部分系 X から他の系 \mathcal{C} への情報の流れ.

$$I_{\text{tr}}^t := \langle \ln p(c_t | \text{pa}(c_t)) - \ln p(c_t | c_{t-1}, \dots, c_1) \rangle$$

始相関

小さな部分系 X と他の系 \mathcal{C} の初期相関.

$$I_{\text{ini}} := I(x_1 : \text{pa}(x_1))$$

終相関

小さな部分系 X と他の系 \mathcal{C} の終相関.

$$I_{\text{fin}} := I(x_N : \mathcal{C}')$$

$$\mathcal{C}' := \mathcal{C} \cap \text{an}(x_N)$$

$\text{an}(a_t) := \{a_1, \dots, a_{t-1}\}$: a_t の先祖 (ancestor)

詳細揺らぎの定理 (ネットワーク上)

$$\Delta s_{\text{bath}} := \ln p(x_{k+1}|x_k, \mathcal{B}_{k+1}) - \ln p_B(x_k|x_{k+1}, \mathcal{B}_{k+1}).$$

$\mathcal{B}_{k+1} := \text{pa}(x_{k+1}) \setminus \{x_k\}$: 他の系 \mathcal{C} の影響.

Ito-Sagawa (小さな部分系の熱力学)

小さな部分系では常に, $\langle \sigma \rangle \geq I_{\text{fin}} - I_{\text{ini}} - \sum_l I_{\text{tr}}^l$.

特に二体相互作用で Markov 的に発展する系では, $\langle \sigma \rangle \geq I(x_{t+dt} : \{y_t, y_{t+dt}\}) - I(x_t : \{y_t, y_{t+dt}\})$