

# 物理学と情報幾何学—ゆらぐ系の熱力学の視点から

伊藤 創祐

## 1. 公開にあたって

この原稿は「数理科学」Vol.58-11, pp.38-45, サイエンス社, 2020.」中の記事“伊藤創祐, 物理学と情報幾何学—ゆらぐ系の熱力学の視点から, 数理科学 Vol.58-11, pp.38-45, サイエンス社, 2020.”の原稿バージョンになります. 発売から1ヶ月以上経過してからサイエンス社の公開の条件に則って記事を公開しています. 公開にあたって一部形式などの修正や追記を行っています.

## 2. はじめに

物理学の中でも統計力学における分野の一つにゆらぐ系の熱力学 (stochastic thermodynamics)<sup>1)</sup> がある. これはブラウン運動などのゆらぐダイナミクスを記述する確率過程にエントロピー生成率という熱力学量を導入することで, 平衡から離れたメゾスコピックな系の熱力学の法則性を探求する分野である.

近年このゆらぐ系の熱力学の研究において, 情報幾何学による定式化や微分幾何学的な視点の重要性が認識されつつある. 情報幾何学自体の数学的な解説は他の豪華な執筆陣の記事や最近の教科書<sup>2)</sup> にお任せすることにして, 本稿ではゆらぐ系の熱力学の初歩的な解説と, 最近の我々の研究<sup>3~5)</sup> から見えてきた情報幾何とゆらぐ系の熱力学の関係について紹介したい.

## 3. マスター方程式でのゆらぐ系の熱力学

まず, ゆらぐ系の熱力学のマスター方程式での定式化について紹介する. マスター方程式とは Markov 過程で遷移する確率ダイナミクスを記述する微分方程式である.

Markov 過程により  $n \in \mathbb{N}$  個の状態が連続的な時刻  $t \in \mathbb{R}$  で遷移する状況を考える. 時刻  $t$  における状態  $i = 1, 2, \dots, n$  の確率分布を  $p_i(t)$  とする. この確率分布には規格化  $\sum_{i=1}^n p_i(t) = 1$  および非負性  $p_i(t) \geq 0$  の制約が入っているとす. 確率分布の時間発展  $dp_i(t)/dt$  は, 時刻  $t$  での状態  $i = 1, 2, \dots, n$  から  $j = 1, 2, \dots, n$  の遷移レート  $W_{ij}(t) \geq 0$  を用いて, 次のマスター方程式で与えられる.

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = \sum_{j=1}^n J_{ij}(t),$$
$$J_{ij}(t) = W_{ij}(t)p_j(t) - W_{ji}(t)p_i(t). \quad (1)$$

ここで  $J_{ij}(t)$  は時刻  $t$  での状態  $j$  から状態  $i$  への流れとよばれる量である. 流れについて反対称性  $J_{ij}(t) = -J_{ji}(t)$  が成り立つので, 確率の保存則からくる制約  $\sum_{i=1}^n dp_i(t)/dt = 0$  は自動的に満たされていることがわかる.

熱浴に接触している系のダイナミクスがマスター方程式で記述される状況を考え, 熱力学的に妥当な要請として次の二つの仮定をする. (i) 任意の時刻  $t$ , 任意の状態  $i$  に対し  $p_i(t) > 0$ , (ii) 任意の時

刻  $t$ , 任意の状態のペア  $(i, j)$  に対し,  $W_{ij}(t) \neq 0$  ならば  $W_{ji}(t) \neq 0$ . 仮定 (i) は有限の確率でとりうる状態だけを考慮すること, 仮定 (ii) は熱浴とのエネルギー交換により状態  $j$  から状態  $i$  への変化が有限の確率で起こるとき, その逆過程 (すなわち状態  $i$  から状態  $j$  への変化) も起こりうることを意味する. 本稿では簡単のため, (ii) よりも強い仮定 (iii) 任意の時刻  $t$ , 任意の状態のペア  $(i, j)$  に対し,  $W_{ij}(t) > 0$  を (ii) の代わりににおいて議論しよう.

(i), (iii) の仮定の下で, 状態  $j$  から状態  $i$  への熱力学的な力<sup>6)</sup>. と呼ばれる量

$$F_{ij}(t) = \ln \frac{W_{ij}(t)p_j(t)}{W_{ji}(t)p_i(t)}, \quad (2)$$

を導入し, 熱力学の指標の一つであるエントロピー生成率を次のように定義しよう.

**定義 1** 熱力学的な力  $F_{ij}(t)$  と流れ  $J_{ij}(t)$  の積を, すべての状態間のペア  $(i, j)$  に対して足し上げたもの

$$\sigma(t) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j)} J_{ij}(t) F_{ij}(t), \quad (3)$$

を時刻  $t$  でのエントロピー生成率とよぶ.

ここで和の範囲は  $\sum_{(i,j)} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n$  であり, 係数の  $1/2$  は  $J_{ij}(t)F_{ij}(t) = J_{ji}(t)F_{ji}(t)$  の寄与を重複で数えないようにする係数である. ちなみに仮定 (i), (ii) から出発する場合,  $F_{ij}(t)$  が定義できない  $W_{ji}(t) = W_{ij}(t) = 0$  となる状態間のペア  $(i, j)$  を除いた和の範囲を用いて, 式 (3) を修正してエントロピー生成率を定義する.

熱力学的な力と流れの同符号性により, エントロピー生成率は常に非負

$$\sigma(t) \geq 0, \quad (4)$$

である. この非負性 (4) がゆらぐ系における熱力学第二法則に相当する. 等号が成立するのは詳細釣り合い条件, すなわち任意の状態間のペア  $(i, j)$  に対し  $W_{ij}(t)p_j(t) = W_{ji}(t)p_i(t)$  を満たすときのみである. この詳細釣り合い条件は, 物理的に

は系が平衡状態にいることを意味する. よって, 系が平衡のときは  $\sigma(t) = 0$  でエントロピー生成率がないと考えることができ, 逆に系が非平衡ならば  $\sigma(t) > 0$  で有限のエントロピー生成率がある.

#### 4. エントロピー生成と Kullback–Leibler ダイバージェンス

確率分布の 2 点間の離れ具合の指標である **Kullback–Leibler ダイバージェンス** は情報幾何学において重要な役割を果たすが, ゆらぐ系の熱力学においても重要な役割を果たす. その一例として, エントロピー生成率が Kullback–Leibler ダイバージェンスを用いて記述されることを説明しよう.

2 つの確率分布  $p, q$  の  $k \in \mathbb{N}$  番目の要素を  $(p)_k = p_k, (q)_k = q_k$  と書く. 確率分布であることから非負性  $p_k \geq 0, q_k \geq 0$  と規格化  $\sum_k p_k = \sum_k q_k = 1$  を満たすとし, 和  $\sum_k$  の範囲はとりうる全ての状態  $k$  についてとるとする. このとき, 確率分布  $p, q$  間の Kullback–Leibler ダイバージェンス  $D(p||q)$  は

$$D(p||q) = \sum_k p_k \ln \frac{p_k}{q_k}, \quad (5)$$

のように定義される. この Kullback–Leibler ダイバージェンスは非負  $D(p||q) \geq 0$  であり, 等号成立条件は  $p = q$  のときに限る.

Kullback–Leibler ダイバージェンスを用いて, エントロピー生成率  $\sigma(\tau)$  を記述可能なことを見ていこう. いま, 時刻  $t = \tau$  から微小な時間間隔  $dt > 0$  後の時刻  $t = \tau + dt$  までの遷移を考えよう. マスター方程式 (1) は  $p_i(\tau + dt) = p_i(\tau) + \sum_{j=1}^n J_{ij}(\tau)dt$  と書けるため, 時刻  $t = \tau$  に状態  $j$ , 時刻  $t = \tau + dt$  に状態  $i$  にいる同時確率分布  $\mathcal{P}_{(i,j)}(\tau)$  は,  $dt$  の二次以上のオーダーを無視すると次のように与えられる,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{(i,j)}(\tau) &= T_{(i,j)}(\tau)p_j(\tau), \\ T_{(i,j)}(\tau) &= \delta_{ij} + W_{ij}(\tau)dt. \end{aligned} \quad (6)$$

ここで  $\delta_{ij}$  は Kronecker のデルタであり, また

同時確率分布の規格化を満たすため  $W_{jj}(\tau) = -\sum_{i|i \neq j} W_{ij}(\tau)$  とおく。  $T_{(i,j)}(\tau)$  は時刻  $t = \tau$  での状態  $j$  から状態  $i$  への遷移確率とよぶ。遷移確率  $T_{(i,j)}(\tau)$  は十分小さい  $dt$  で規格化  $\sum_{i=1}^n T_{(i,j)}(\tau) = 1$  と非負性  $T_{(i,j)}(\tau) \geq 0$  を満たしているため、時刻  $t = \tau + dt$  に状態  $i$  にいる条件付き確率分布だとみなすことができる。よって  $\mathcal{P}_{(i,j)}(\tau)$  は同時確率分布の性質、すなわち非負性  $\mathcal{P}_{(i,j)}(\tau) \geq 0$  と規格化  $\sum_{(i,j)} \mathcal{P}_{(i,j)}(\tau) = 1$  を満たす。また  $p_i(\tau + dt) = \sum_j \mathcal{P}_{(i,j)}(\tau)$  を満たしている。

(6) 式の同時確率分布  $\mathcal{P}_{(i,j)}(\tau)$  を用いると、(3) 式で定義されるエントロピー生成率  $\sigma(\tau)$  に  $dt$  をかけたもの (エントロピー生成とよぶ) は

$$\sigma(\tau)dt = \sum_{(i,j)} \mathcal{P}_{(i,j)}(\tau) \ln \frac{\mathcal{P}_{(i,j)}(\tau)}{\mathcal{P}_{(j,i)}(\tau)}, \quad (7)$$

とかける。さらに新たに同時確率分布  $\mathcal{Q}_{(i,j)}^*(\tau) = T_{(j,i)}(\tau)p_i(\tau + dt)$  を導入すると  $dt$  の二次以上のオーダーを無視することで、式 (7) は

$$\sigma(\tau)dt = D(\mathcal{P}(\tau) || \mathcal{Q}^*(\tau)), \quad (8)$$

と Kullback–Leibler ダイバージェンスを用いてかける。Kullback–Leibler ダイバージェンスの性質から、 $\sigma(\tau) \geq 0$  および等号成立条件が  $\mathcal{P}_{(i,j)}(\tau) = \mathcal{Q}_{(i,j)}^*(\tau)$  すなわち  $\mathcal{P}_{(i,j)}(\tau)/p_i(\tau + dt) = T_{(j,i)}(\tau)$  とかける。Bayes ルールより  $\mathcal{P}_{(i,j)}(\tau)/p_i(\tau + dt)$  は時刻  $t = \tau + dt$  に状態  $i$  にいる下で時刻  $t = \tau$  に状態  $j$  にいる条件付き確率分布とみなせ、それが時間順方向で定義される遷移確率  $T_{(j,i)}(\tau)$  に等しいことが等号成立条件になっている。よって、等号成立条件は時間順方向と時間逆方向の確率的なダイナミクスの区別がつかないこと (可逆性) を意味する。よって、エントロピー生成は Kullback–Leibler ダイバージェンスで定義される確率過程の可逆性の指標だと考えることもできる。

## 5. 射影とエントロピー生成

前節で取り扱ったようにエントロピー生成率が

Kullback–Leibler ダイバージェンスを用いて与えられるため、情報幾何学の視点からエントロピー生成の性質を議論することができる。この節ではエントロピー生成率を情報幾何学における射影を用いて表現できることをみていこう。

情報幾何とは確率分布の集合である確率単体を多様体として捉え、確率分布を多様体上の点とみなす微分幾何学である。よって、ある拘束条件で制限された確率分布の集合は、確率単体上の部分多様体とみなせる。部分多様体  $\mathcal{M}$  が平坦 ( $e$ -平坦) であるとき、部分多様体に属する任意の確率分布  $q \in \mathcal{M}$  に対して

$$D(p||q) = D(p||q^*) + D(q^*||q), \quad (9)$$

となる確率分布  $q^* \in \mathcal{M}$  が存在する。式 (9) は情報幾何におけるピタゴラスの定理であり、点  $p$  と点  $q^*$  間を結ぶ測地線 ( $m$ -測地線) と点  $q^*$  と点  $q$  間を結ぶ測地線 ( $e$ -測地線) の直交条件に相当する。Kullback–Leibler ダイバージェンスの非負性  $D(q^*||q) \geq 0$  から、式 (9) より

$$\min_{q \in \mathcal{M}} D(p||q) = D(p||q^*), \quad (10)$$

と  $q = q^*$  のときに Kullback–Leibler ダイバージェンス  $D(p||q)$  が最小化されることがわかる。このとき確率分布  $q^* \in \mathcal{M}$  は、確率分布  $p$  から部分多様体  $\mathcal{M}$  への射影だとみなすことができる。

この射影を用いて、エントロピー生成率  $\sigma(\tau)$  を捉え直すことが可能である<sup>3)</sup>。そのために次のような部分多様体  $\mathcal{M}_B$  を導入する。

**定義 2**  $T_{(i,j)}(\tau)$  を時刻  $t = \tau$  での状態  $j$  から状態  $i$  への遷移確率とする。このとき

$$T_{(j,i)}(\tau) \left[ \sum_{j=1}^n \mathcal{Q}_{(j,i)} \right] = \mathcal{Q}_{(j,i)}$$

という拘束条件を満たす同時確率分布  $\mathcal{Q}_{(i,j)}$  の集合がなす部分多様体を backward manifold とよび、 $\mathcal{M}_B$  と書く。

部分多様体  $\mathcal{M}_B$  は

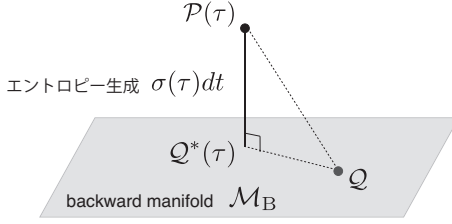


図 1 射影とエントロピー生成の模式図.

$$T_{(j,i)}(\tau) = \frac{\mathcal{P}_{(j,i)}(\tau)}{\sum_{j=1}^n \mathcal{P}_{(j,i)}(\tau)} \quad (11)$$

によって与えられるため、 $\mathcal{P}(\tau)$  に対して一つ定まる。この部分多様体  $\mathcal{M}_B$  は平坦 ( $e$ -平坦) であり、任意の同時確率分布  $\mathcal{Q} \in \mathcal{M}_B$  に対し、ピタゴラスの定理を満たす同時確率分布  $\mathcal{Q}^*(\tau)$  が以下のように存在する、

$$D(\mathcal{P}(\tau) \parallel \mathcal{Q}) = D(\mathcal{P}(\tau) \parallel \mathcal{Q}^*(\tau)) + D(\mathcal{Q}^*(\tau) \parallel \mathcal{Q}),$$

$$\mathcal{Q}_{(i,j)}^*(\tau) = T_{(j,i)}(\tau) \left[ \sum_{j=1}^n \mathcal{P}_{(i,j)}(\tau) \right]. \quad (12)$$

いま  $\sigma(\tau)dt = D(\mathcal{P}(\tau) \parallel \mathcal{Q}^*(\tau))$  より、以下の定理が成り立つ。

**定理 1** エントロピー生成  $\sigma(\tau)dt$  について

$$\sigma(\tau)dt = \min_{\mathcal{Q} \in \mathcal{M}_B} D(\mathcal{P}(\tau) \parallel \mathcal{Q}), \quad (13)$$

が成り立つ。

よってエントロピー生成は、点  $\mathcal{P}(\tau)$  とその点を backward manifold  $\mathcal{M}_B$  に射影した点  $\mathcal{Q}^*(\tau)$  との間の Kullback–Leibler ダイバージェンスで与えられる。この射影を図で表すと、図 1 のような模式図になる。

## 6. Fokker–Planck 方程式でのゆらぐ系の熱力学

ここまでは状態  $i$  が離散変数で与えられる状況を考察してきた。ここからは状態が連続変数で与えられる場合を考察しよう。状態が連続変数で与えられる状況の中でも、特にマスター方程式がブラ

ウン運動のダイナミクスなどを記述する **Fokker–Planck** 方程式で与えられる場合には、ゆらぐ系の熱力学と情報幾何学は興味深い関係を持つ。その関係を議論するために、まずは Fokker–Planck 方程式でのゆらぐ系の熱力学の定式化を紹介しよう。

時刻  $t \in \mathbb{R}$  でのブラウン粒子の位置  $x \in \mathbb{R}$  の確率分布を  $p(x; t)$  とし、非負性  $p(x; t) \geq 0$  と規格化  $\int_{-\infty}^{\infty} dx p(x; t) = 1$  を満たすとする。Fokker–Planck 方程式は

$$\frac{\partial p(x; t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [\nu(x; t)p(x; t)],$$

$$\nu(x; t) = f(x; t) - k_B T \frac{\partial}{\partial x} \ln p(x; t), \quad (14)$$

と確率分布  $p(x; t)$  の時間発展を与える。物理的には、 $f(x; t)$  は時刻  $t$  での位置  $x$  においてブラウン粒子に加わる外力、 $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は熱浴 (媒質) の温度を意味し、媒質の粘性は規格化している。また  $\nu(x; t)$  は時刻  $t$  での位置  $x$  における平均局所速度 (mean local velocity) と呼ばれ、Fokker–Planck 方程式 (14) は  $\nu(x; t)$  を流れの速度とした連続の式の形になっている。

この Fokker–Planck 方程式において、エントロピー生成率  $\sigma(t)$  は次のように定義される。

**定義 3** 平均局所速度  $\nu(x; t)$  と確率分布  $p(x; t)$  に対し、

$$\sigma(t) = \frac{1}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} dx \nu(x; t)^2 p(x; t), \quad (15)$$

を Fokker–Planck 方程式における時刻  $t$  でのエントロピー生成率とよぶ。

この Fokker–Planck 方程式におけるエントロピー生成率の定義は、マスター方程式におけるエントロピー生成率の定義と整合的である<sup>1)</sup>。時刻  $t$  での  $x$  の実数値関数  $A(x; t)$  の期待値の表記を  $\langle A \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} dx A(x; t)p(x; t)$  とおくと、エントロピー生成率は  $\sigma(t) = \langle \nu^2 \rangle_t / [k_B T]$  と平均局所速度の二乗の期待値でかける。

エントロピー生成率は式 (15) より非負  $\sigma(t) \geq 0$  であり、等号達成条件は  $\nu(x; t) = 0$  と平均局所速度がないときである。ポテンシャル  $U(x)$  を用い

て外力がポテンシャル力で  $f(x; t) = -\partial U(x)/\partial x$  とかける場合、以下で定義されるカノニカル分布

$$p^{\text{can}}(x) = \frac{1}{Z} \exp \left[ -\frac{U(x)}{k_B T} \right],$$

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[ -\frac{U(x)}{k_B T} \right], \quad (16)$$

で  $p(x; t) = p^{\text{can}}(x)$  とかけるときに等号達成条件  $\nu(x; t) = 0$  を満たす。物理的にはカノニカル分布は平衡状態での確率分布を意味する。また Fokker–Planck 方程式におけるエントロピー生成率  $\sigma(t)$  の表記は、Fokker–Planck 方程式が連続の式でかけていることから最適輸送理論の指標である  $L^2$ -Wasserstein 計量<sup>7,8)</sup> と関係づく。

## 7. 時間に関する Fisher 情報量とゆらぎ系の熱力学

この節以降は、我々の最近の研究<sup>4,5)</sup> である時間に関する **Fisher 情報量**のゆらぎ系の熱力学における役割を紹介しよう。時間に関する Fisher 情報量は情報幾何学における確率単体上の速度の指標とみなせ、確率過程で記述される熱力学的なダイナミクスの振る舞いを理解する上で面白い量である。

時間  $t$  に関する Fisher 情報量  $I(t)$  は確率分布  $p(x; t)$  に対して

$$I(t) = \left\langle \left( \frac{\partial \ln p}{\partial t} \right)^2 \right\rangle_t, \quad (17)$$

のように定義される。情報幾何学において Fisher 情報行列は Riemann 計量を与えるため、時間に関する Fisher 情報量は

$$ds^2 = I(t) dt^2, \quad (18)$$

と線素  $ds$  と微小時間間隔  $dt$  を用いて書くことができる。よって、 $I(t) = (ds/dt)^2$  は確率単体上の速度の二乗の指標とみなせる。この時間に関する Fisher 情報量  $I(t)$  とエントロピー生成率  $\sigma(t)$  には面白い対応関係があることが我々の研究でわかってきた。以下、両者を比較してみよう。

まず、エントロピー生成率  $\sigma(t)$  も時間に関する Fisher 情報量  $I(t)$  も非負である。エントロピー生成  $\sigma(t)$  が 0 となるのは平衡分布であるときに相当するのに対し、時間に関する Fisher 情報量が 0 になるのは  $\partial p(x; t)/\partial t = 0$  であり、すなわち定常分布のときである。すなわちエントロピー生成率が非平衡度を表す指標なのに対し、時間に関する Fisher 情報量は非定常度を表す指標になっている。

また Fisher 情報量は推定理論の文脈でよく考察され、推定理論における意味は **Cramér–Rao 不等式**を用いて議論される。この Cramér–Rao 不等式は Fisher 情報量  $I(t)$  に関する下限を以下のように与える、

$$I(t) \geq \left( \frac{d\langle r \rangle_t}{dt} \right)^2 \frac{1}{\langle (r - \langle r \rangle_t)^2 \rangle_t}. \quad (19)$$

ここで  $r(x)$  は任意の推定量で、位置  $x$  の実数値関数である。特に  $r(x)$  が時刻  $t$  に関する不偏推定量 ( $\langle r \rangle_t = t$ ) であるときは、 $d\langle r \rangle_t/dt = 1$  より  $I(t) \geq 1/[\langle (r - \langle r \rangle_t)^2 \rangle_t]$  のように不偏推定量の分散の逆数が  $I(t)$  の下限になるため、推定理論において Fisher 情報量が不偏推定量のゆらぎの指標であるという意味づけを与える。

一方、エントロピー生成率に関しても、Cramér–Rao 不等式のような次の下限があることが最近わかってきており、熱力学的不確定性関係という名前でよばれている。熱力学的不確定性関係を Cramér–Rao 不等式と対応関係が分かりやすい形で書くと

$$\sigma(t) \geq \left( \frac{d\langle r \rangle_t}{dt} \right)^2 \frac{1}{k_B T \langle (\frac{\partial r}{\partial x})^2 \rangle_t}, \quad (20)$$

となる。この呼び方は、量子力学における不確定性関係とのアナロジーが成り立つことに起因する。式 (20) は

$$\sigma(t) \frac{\langle (\frac{\partial r}{\partial x})^2 \rangle_t}{\left| \frac{d\langle r \rangle_t}{dt} \right|^2} \geq \frac{1}{k_B T}. \quad (21)$$

と書けるため、エントロピー生成率  $\sigma(t)$  と  $\partial r/\partial x$  のゆらぎを  $|d\langle r \rangle_t/dt|$  で規格化した量との間の積を  $1/(k_B T)$  以下にすることはできない不等式とみ

なせる。このように二つの量の積が一定以下にできないという関係式が量子力学における不確定性関係とのアナロジーになっている。

時間に関する Fisher 情報量とエントロピー生成率で似た形の下限が得られる理由は、Fokker-Planck 方程式 (14) が連続の式の形で書けていることによる。無限速での寄与が 0 になることを仮定して部分積分を用いると、恒等式として

$$\begin{aligned} \frac{d\langle r \rangle_t}{dt} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (r(x) - \langle r \rangle_t) p(x; t) \frac{\partial \ln p(x; t)}{\partial t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial r(x)}{\partial x} \nu(x; t) p(x; t). \end{aligned} \quad (22)$$

が得られる。ここで  $\int_{-\infty}^{\infty} dx \langle r \rangle_t [\partial p(x; t) / \partial t] = 0$  を用いた。Cauchy-Schwarz 不等式を式 (22) の一行目に用いると Cramér-Rao 不等式が得られ、二行目に用いると熱力学的不確定性関係が得られる。

さらに Fisher 情報量  $I(t)$  とエントロピー生成率  $\sigma(t)$  の間の関係をみるのも面白い。先ほどと同様のやり方で Cauchy-Schwarz 不等式から次のような不等式を導出できる、

$$\frac{[I(t)]^2}{k_B T} \leq \sigma(t) \left\langle \left( \frac{\partial^2 \ln p}{\partial x \partial t} \right)^2 \right\rangle_t. \quad (23)$$

この式をみてわかるように、もしエントロピー生成率が  $\sigma(t) = 0$  であったら、時間に関する Fisher 情報量は常に  $I(t) = 0$  となる。物理的には平衡であれば定常であるということに対応する。この式のさらなる意味は 8 節で議論しよう。

## 8. 長さ と 熱力学的速度制限

時間に関する Fisher 情報量の  $ds$  を用いた表現から、時刻  $t = 0$  から  $t = \tau$  までに確率単体上で動いた長さを

$$\mathcal{L} = \int_0^\tau dt \frac{ds}{dt} = \int_0^\tau dt \sqrt{I(t)} \quad (24)$$

で定義しよう。この長さは二つの状態間の離れ方の指標となり、状態間遷移にかかる時間との関係がつくため、ゆらぐ系の熱力学の考察対象になりえる。

この長さには次の上限と下限が知られている。

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &\geq \mathcal{D}, \\ \mathcal{D} &= 2 \cos^{-1} \left( \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{p(x; 0) p(x; \tau)} \right), \\ \mathcal{L} &\leq \sqrt{\tau} \sqrt{\int_0^\tau dt I(t)}. \end{aligned} \quad (25)$$

この下限  $\mathcal{D}$  は時刻  $t = 0$  と時刻  $t = \tau$  での確率分布間の **Bhattacharyya angle** を 2 倍したものである。離散 3 状態のとき確率分布の平方根を座標にとると確率単体は球面とみなせるが、その場合  $\mathcal{D}$  は球面上の二点間の大円距離に相当する。また上限は Cauchy-Schwarz の不等式から得られた。

式 (23) と式 (25) を組み合わせることでエントロピー生成率  $\sigma(t)$  の時間積分、遷移にかかる時間  $\tau$ 、状態間の離れ方  $\mathcal{D}$  の間のトレードオフ関係を導ける。このトレードオフ関係は、量子力学の時間とエネルギーの間の不確定性関係である量子速度制限 (quantum speed limit) とのアナロジーで、熱力学的速度制限とよばれははじめている。

## 9. 時間に関する Fisher 情報量の単調性と定常への緩和

時間に関する Fisher 情報量  $I(t)$  だけでなく、その時間微分  $dI(t)/dt$  も熱力学的に面白い量である。なぜなら、 $\sqrt{I(t)} = ds/dt$  は確率単体上の速度を意味するため、 $dI(t)/dt$  は緩和していくときの速度の変化についての指標になるからである。この  $dI(t)/dt$  の法則性は熱力学第二法則とのアナロジーを用いて、以下のように議論できる。

まず Fokker-Planck 方程式においてエントロピー生成率は、連続の式 (14) を用いて計算すると

$$\sigma(t) = \frac{1}{k_B T} \langle \nu f \rangle_t + \frac{d}{dt} \langle -\ln p \rangle_t \quad (26)$$

となる。ここで以前と同様に無限速の寄与がないとして部分積分している。よって、エントロピー生成率の非負性 (熱力学第二法則) は

$$\frac{d}{dt} \langle -\ln p \rangle_t \geq -\frac{1}{k_B T} \langle \nu f \rangle_t \quad (27)$$

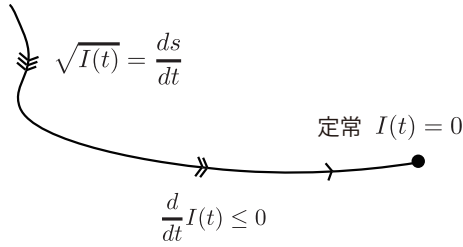


図 2 緩和過程における Fisher 情報量の単調性.

の形でかける. 左辺は Shannon 情報量の連続変数への拡張である微分エントロピーの時間変化率であり, 物理的には系 (ブラウン粒子) のエントロピー変化率を表す. また右辺は熱浴 (媒質) のエントロピーの変化率を表す. よって熱力学第二法則は, 系のエントロピーの変化率が熱浴のエントロピーの変化率で制限されることを主張するとみなせる.

熱力学第二法則のアナロジーで  $dI(t)/dt$  の制限を考えてみよう. いまエントロピー生成率に似た  $\mathcal{I}(t) = \langle (\partial \nu / \partial t)^2 \rangle_t / [k_B T] \geq 0$  という非負の量を連続の式を用いて同様に計算すると

$$\mathcal{I}(t) = \frac{1}{k_B T} \left\langle \frac{\partial \nu}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle_t - \frac{1}{2} \frac{dI(t)}{dt} \quad (28)$$

となる. すなわち,  $\mathcal{I}(t)$  の非負性から

$$\frac{dI(t)}{dt} \leq \frac{2}{k_B T} \left\langle \frac{\partial \nu}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle_t \quad (29)$$

という不等式が得られる. 外力  $f(x; t)$  が時間に依存しない場合 ( $\partial f / \partial t = 0$ ) は確率分布は定常分布に緩和していくが, このとき式 (29) からは時間に関する Fisher 情報量の単調性, すなわち

$$\frac{dI(t)}{dt} \leq 0 \quad (30)$$

が得られ, 確率単体上の速度  $ds/dt$  が単調減少することがわかる (図 2). また積の期待値を内積だとみなすと, 平均局所速度の変化率  $\partial \nu / \partial t$  と外力の変化率  $\partial f / \partial t$  の方向が内積の意味で同じであれば緩和に反することができ, 方向が逆の場合は緩和を促進することが式 (29) からわかる.

また外力が時間に依存しない緩和過程では, 式 (30) より強い上限を与えることができる. 連続の

式 (14) と  $\partial f / \partial t = 0$  を用いると式 (28) から

$$\left\langle \left( \frac{\partial^2 \ln p}{\partial x \partial t} \right)^2 \right\rangle_t = -\frac{1}{2k_B T} \frac{dI(t)}{dt} \quad (31)$$

と計算できるので, 式 (23) は

$$\frac{dI(t)}{dt} \leq -\frac{2[I(t)]^2}{\sigma(t)} \quad (32)$$

と書き直せる. よって緩和過程で速度の減衰度合い  $dI(t)/dt$  はエントロピー生成率  $\sigma(t)$  と時間に関する Fisher 情報量  $I(t)$  のトレードオフにより決まることがわかる.

## 10. 展望

我々の研究を通して, 情報幾何学の視点はゆらぐ系の熱力学の法則性を理解する上で有望そうなが見えてとれるだろう. また情報幾何学の研究に, これらのゆらぐ系の熱力学の視点を導入するのは面白いのではないかと思う. たとえば最適輸送理論とゆらぐ系の熱力学は相性が良く, 情報幾何学と最適輸送理論のつながりを考察する上で良い具体例や方向性を提示する可能性がある.

ゆらぐ系の熱力学と情報幾何学の関係は発展途上の研究分野であり, 様々な研究の方向性が考えられる. 方向性の一例として現在私が研究しているテーマを二つ紹介して本稿を締めようと思う. まず一つ目は Glansdorff-Prigogine の安定性理論を情報幾何学の視点から捉え直すのが面白いと考えている<sup>9)</sup>. 実際, 安定性理論における過剰エントロピー生成と呼ばれる量と  $dI(t)/dt$  の対応関係が成り立つ. また安定性理論は非線形力学系の視点が導入されているため, 情報幾何学を力学系の視点から考え直すことにつながるだろう. 二つ目は, レート方程式で駆動される化学反応ネットワーク上の化学熱力学を考えることである<sup>10)</sup>. このとき Gibbs の自由エネルギーと正測度空間の  $f$ -ダイバージェンスが対応づく. 確率分布の規格化の形をしていない保存則による拘束条件が入った正測度空間が考察対象になるため, 情報幾何学的にも新規性があり面白いと思う.

## 11. 記事を書いてからの進展

また、今回の話を元に、細胞内シグナル伝達でのキナーゼ (ERK) の化学反応の時系列を用いて、式 (25) などを実験的に検証をしているところである<sup>11)</sup>。このような情報幾何学を用いた熱力学の進展が、生体システムの情報処理の側面の理解にどう役立つかを今後調べて行きたいと考えている。

### 参考文献

- 1) U. Seifert, Reports on progress in physics, **75**, 126001 (2012).
- 2) S-i. Amari, *Information geometry and its applications*. (Springer, 2016).
- 3) S. Ito, M. Oizumi and S-i. Amari, Physical Review Research, **2**, 033048 (2020).
- 4) S. Ito, Physical Review Letters, **121**, 030605 (2018).
- 5) S. Ito and A. Dechant, Physical Review X, **10**, 021056(2020).
- 6) J. Schnakenberg, Reviews of Modern physics, **48**, 571 (1976).
- 7) R. Jordan, D. Kinderlehrer, D and F. Otto, SIAM journal on mathematical analysis, **29**, 1-17 (1998).
- 8) J. D. Benamou and Y. Brenier, Numerische Mathematik, **84**, 375-393 (2000).
- 9) S. Ito, arXiv:1908.09446 (2019).
- 10) K. Yoshimura and S. Ito, arXiv:2005.08444 (2020).
- 11) K. Ashida, K. Aoki, and S. Ito, bioRxiv (2020).  
<https://doi.org/10.1101/2020.11.29.403097>

(いとう そうすけ, 東京大学生物普遍性研究機構)