

(第 90 回) KS クラブ議事メモ

開催日	2019 年 1 月 8 日 (火)	出席者	坂下勲、西村二郎、山崎博、大谷宏、松
時間	15:00~17:00	敬称略	村眞、持田典秋、小林浩之、宮本公明、
場所	かながわ県民センター		飯塚弘、神田稔久 (文責)
資料	熱力学の展開 (その 1) ~古典熱力学から情報熱力学へ~ (飯塚弘)		
議題	<p>1. 技術課題</p> <p>1) 熱力学の展開 (その 1) ~古典熱力学から情報熱力学へ~ (飯塚弘)</p> <ul style="list-style-type: none">・熱力学第二法則の見直し・熱力学第二法則への挑戦 (マックスウエルの悪魔は存在しうるか)・微小系においても熱力学第二法則が成り立つか否か (マックスウエルの悪魔の実証)・シャノンの情報理論 (熱力学と情報) <p>参加者からのコメント</p> <ul style="list-style-type: none">・古典の熱力学第二法則のエントロピーと情報量のエントロピーの一元化は 60 年前の情報理論の授業で教わった記憶がありますが、その詳細、さらに量子力学から熱力学の第二法則が導き出される話や、微小系で起こり得る「ゆらぎ」が惹起する現象など、小生が知らない斬新な話が聴けて、久し振りに若い頃の知的興奮が蘇りました。量子化すれば、重ね合わせ状態が実現するので量子コンピューターが生まれる。化学反応において量子化が実現すれば「生命」が合成されるかどうかは「？」ですが・・・ <p>6 日の日経に米国が量子情報科学の研究を強化するとありましたが、夢のある話を紹介して頂きありがとうございました。 (西村)</p> <p>熱力学が大の苦手科目であった私にとってはなかなかコメントするのが難しいテーマでしたが、得意の移動現象論に関して以前は分子運動論とレナード-ジョーンズのポテンシャル関数使って拡散係数を推算する方法が理論的な方法でしたが、近年、多体の原子-分子の相互作用を第一計算原理をもちいた方法で解かれることが可能になりつつあります。このなかでは、それぞれの電子の存在確率分布を計算することで、たとえば水素の拡散を防ぐボンベ材料の開発につながるものが期待されているそうです。この分野の進展は目が離せないとおもいます。とりあえず。 (宮本)</p> <ul style="list-style-type: none">・ 演者にまず敬意を表します。 <p>かかる研究分野があることも、その分野への訴求があることも、小生は知らず、理解もおぼつかない現状ではコメントする能力もない。その上でのコメントです。狭い化学工学、広い化学工学、深い化学工学と浅い化学工学、化学工学が活躍できる分野は多岐にわたる。しかし、この報告の引用は多くは諸物理のアカデミアからのものであり、おそらくは化学工学のさらに外にあるものだと思う。私自身は、浅くて、広い分野を追及してきて、熱力学と言っても、その結果をひたすら使うだけに関心があって、そのこと自身をさらに理論や科学として、追及したことは経験もない。その意味でも距離のある分野でした。</p> <p>まとめのところでは実用性向と結びつけて、わかりやすく説明していただきたかった。それでも理解できたかどうかはわからないけれども、何を創り出すのか、何を変えるのかをわからせて欲しかった。続きを期待しています。 (小林)</p>		

飯塚さんはこのプレゼンに「古典熱力学から情報熱力学へ」とのサブタイトルを使っています。従って、この両者がどうなっているか、どう関係しているかが、飯塚さんが主張したかった主要テーマだろうと推察します。しかし、飯塚さんの資料は、古典的熱力学や統計熱力学、情報理論に関するかなり詳しく且つ難しい資料が多数提示されています。この分野に必ずしも明るくはなく、又、少々頭の固くなっている私には、全体の流れが中々見え難く読むのに苦労しました。しかも、飯塚さんの資料 p9 に熱力学第二法則の展開という図があり。とても参考になるのですが、残念なことに、この図には情報熱力学と他の学問領域と関係が示されておりません。

そこで、私は、飯塚さんの言いたいことの真意を理解出来るよう、再度入念に読み返してみました。その結果を以下に大胆にパラフレーズしてみました

- ① マクロを扱う古典熱力学とミクロ粒子の世界を扱う統計熱力学とではどこが違う、どこが同じか？この答えをざっくり言ってしまうと、両領域で熱力学第二法則は共に有効であるが、エントロピー(S)の計算方法が全く異なるという事であろう。
- ② 統計熱力学では、箱の中に多数の粒子を包含する箱(系)を熱浴に入れる状況を仮定し、あらゆる粒子の動きの状況を想定し、そのような状況を作り出す可能性(確率)を計算し、粒子の全ての状況の期待値からエントロピーを計算する。古典熱力学と統計熱力学の根本的違いの一つは、統計熱力学では確率を使うという事である。
- ③ さて上記②のような想定下では、粒子はあらゆる状態を取る可能性がある。例えば、熱浴の温度が 100 度でも箱(系)の中の粒子の状況によってはその温度が 0 度となってしまう確率もゼロではない。又、熱浴の温度が 100 度でも箱(系)の温度が 200 度になるケースもあるかもしれない。しかし、実際にはそのような状況が具現する確率は 1 兆 X 1 兆分の 1 くらいの確率だから、統計熱力学で計算してもエントロピー(S)はごく常識的な値に落ち着くことになる。
- ④ しかし、1 つだけ大変困った状況がある。それはマクスウエルの悪魔である。もし悪魔が本当に存在すると、上記③のような状況は 100 分の 1 とか 10 分の 1 とかの確率で起こってしまうかもしれないのである。そうなったら、確率モデルに依拠する統計熱力学は崩壊してしまうことになる。この困難を克服するために飯塚さん資料の P11 にあるように様々な提案が行われて来た。このような想定を行うと、現実と理論の間の整合性が取れるということで、これら提案は行われ来たが、それらはいくまでもつじつま合わせのためであり、つい最近に至るまで、誰一人としてマクスウエルの悪魔が存在しないことを実証的に示すことが出来る人は居なかった。
- ⑤ ところが、宗行暎郎中大教授、沙川貴大ほかの日本人グループが 2010 年に至り、「マクスウエルの悪魔の画期的実験」に成功したのである(飯塚資料 p19 参照)。これにより、統計熱力学の基礎が崩される恐れは完全になくなったし、又同時に、「情報をエネルギーに変換することに成功したことにより、今後の情報熱力学分野の飛躍的発展の基礎をも確立したとも言えるのである。実に見事な日本人グループの業績である。

(参考)

<https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/2010/42.html>

<http://event.phys.s.u-tokyo.ac.jp/physlab2011/sassi/13-14.pdf>

以上が、私が思う、「飯塚さんの言いたかったこと」の概要です。間違っていますか？
(大谷)

(大谷様の問いに応える形で発表者からのコメント)

歴史的経緯をみると、クラジウス(1822~1888)がカルノーの定理を体系化、エントロピーの概念 $\Delta S = \Delta Q / T$ (式①)を導入した(1865年)。マクロな世界の熱力学におけるエントロピー S と、そのマクロ状態に相当するミクロの状態数 W を結びつける式、 $S = K_B \ln W$ (K_B はボルツマン定数) (式②)をボルツマン(1844~1906)が提唱(1977年)、マクロな状態を扱う熱力学からミクロな状態を扱う統計力学に発展した。熱力学で熱の流入によってエントロピーが増大する現象も、ミクロの視点から厳密に考えると、ミクロな可能な状態が増えると説明が付きまます(8頁)。これにより従来経験に基づいて組み上げられていた熱力学の物理的関係が、原子や分子レベルの運動の結果として理解できるようになった。これがボルツマンやギブスによって完成された平衡状態と呼ばれる「すべてがバランスした」状態を記述する平衡統計力学です。熱力学と統計力学の関係は相互に補い合う関係にあり、用いる対象によって使い分ければよいようです。ただ、熱力学は統計力学に完全に還元できている訳ではなさそうで、そのことに言及している箇所を末尾に追記します。これは田崎晴明著からとったものです。話を戻すと、ボルツマンの時代では、統計力学の前提になる原子・分子の存在が否定され、ボルツマンはその激しい論争のため自殺しました。そして、アインシュタインは1905年に、微少な粒子の水中での運動(ブラウン運動)を観察することにより、水分子の個数が分かるという論文を出し、非平衡統計力学のきっかけを作りました。マックスウェルの悪魔の存在を実証できたのは、この20年ほどで急速に発展した微小スケールの物体を扱う非平衡統計力学、「ゆらぎの定理」によるものと言われます。すなわち、悪魔が得た情報量の分だけ通常(古典的)の第二法則を超えてシステムから仕事を取り出せることです。ただ、それは従来の熱力学第二法則による仕事量と、情報から変換される仕事量が比肩しうほどのミクロスケールの話です。マクロのスケールでは例えば、気体の分子数は1モルで 10^{24} 個レベルで、情報で扱うビット数よりはるかに大きく、ボルツマン式①とシャノンの情報量が同じ式で表されますが、数値の大小に大きな差があります。当然のことながらマクロスケールでは情報エントロピーの寄与は無視されますが、ミクロスケール、電子一個一個、量子一個一個を演算に使うナノエレクトロニクス・コンピュータでは情報エントロピーは重要な役割を担うことになるだろうと思います。既に人の脳などの生体システムでは微小なエネルギーでスーパーコンピュータに匹敵する情報処理を難なく実現しています。半導体のサイズは量子効果が発現するレベルまで微小になり、ムーアのスケール則が物理的な限界となっています。

そこで、俄か勉強ですが、私の理解の範囲でコメントさせていただきます。

- (1) 古典熱力学は温度、圧力、体積という目に見える量からエントロピーを定義、統計力学は気体分子運動論から導き、古典熱力学のエントロピー S と一致させるためにボルツマン定数 k_B を決めました。
- (2) 統計力学のボルツマンの式②の状態数は、系の分子数が非常に多くなると分布を示し、「存在確率の最も高い分布(安定な分布)」の場合の数となります。通常分子数が多くなればなるほど、正規分布の中心が高くなり、そこに収束していきます。気体分子のエネルギー分布はマックスウェル・ボルツマン分布で明らかにされています。分子の数が少なくなると確かに確率という表現になり、シャノンのエントロピーと一致します。ただ、昔の統計力学ではそういうナノスケールの考えはなかったと思います。
- (3) 統計力学は平衡状態で想定しており、古典熱力学では、熱い気体は冷たい気体に熱を伝え、エントロピーが最大となる平衡状態で安定します。例が妥当かどうか別として考え方としてあると思います。
- (4) (5) マックスウェルの悪魔は、分子を観測してフィードバック制御をする役割で、確率の小さい分子が存在するだけでは用が足りません。沙川らの実験では、熱ゆらぎにより、非平衡状態の極短時間に位置のポテンシャルの高い所に、たまたま存在する粒子を観測し、後戻りできないようなフィードバック制御をし、その位置のエネルギーを回収することで、古典熱力学を超えるエネルギーが得られることを実証

しました。

[田崎晴明著の『熱力学 現代的な観点から』から]

・経験科学として見たとき、ミクロな統計物理学がマクロな熱力学の基礎だと考えるべきでなく、逆にマクロな熱力学がミクロな統計物理学の基礎だと考えるべきなのだ。
・熱力学の対象となるのは、単に平衡状態の性質だけでなく、平衡状態の間の（許される範囲での）任意の操作による移り変わりとその際のエネルギーのやりとりなのである。操作の前後が平衡でありさえすれば、途中でいかに荒々しい非平衡の時間変化がおきても、熱力学は定量的に厳密に適用できる。しかし、現在完成している統計物理学では、このような荒々しい時間変化を含む問題には手も足もでない。つまり、統計物理学から「導出」されるのは、熱力学のごく限られた一側面だけなのである。ミクロな理論に立脚して熱力学を導くという計画は、決して完全なものではあり得ない。（飯塚）

非常に分かり易く且つ論理的で明確なコメント有難うございます。

飯塚さんが、古典熱力学から統計力学、量子力学、情報力学などへの現代にいたるまでの発展の様相を様々な文献資料を駆使して我々の目の前に示し、我々のこの分野への関心を喚起してくださいましたこと、改めて深く感謝致します。この続きを、是非、次回もお聞きしたいものと思っています。

所で、私が、何故あんな奇妙なコメントをしたか、と言いますと、飯塚さんの資料を見ていて、沙川氏達が「マックスウエルの悪魔」の実験に成功したという事実を知り、200年近く世界で誰一人実証実験が出来なかったことを京都大学の大学院3年生が（勿論、宗行氏など有能な大学教授達との共同研究ではあるが）成し遂げたとの事実には驚き、改めて、日本人の中には「すげー奴」がいるなあと感動し、きっと飯塚さんも沙川氏らの業績には感動したに違いない、と思ったからです。でも、飯塚さんのやりたかったことは、古典的熱力学から情報熱力学に至る発展の様相と最新の状況を客観的に提示するという事であり、沙川氏らの業績を必要以上にクローズアップすることは差し控えるべきとの判断があったのだと推察します。そして、それは、実にまっとうなことであると思っています。

ただ、沙川氏らのやっている事には注目すべき点もあるのではないかと、全くの門外漢の素人判断ではありますが、私は、依然としてその様に思っております。2017年9月6日の日経電子版に「東大、量子力学から熱力学第二法則を導き出すことに成功」との記事が載っており、それは東大伊与田英輝助教、同大学博士課程1年生金子和哉、同東大准教授沙川貴大らの研究成果と書かれており「本研究成果は量子力学だけに基づいて不可逆の起源を理解する大きな一歩となる。又、この理論はブラックホールの情報パラドックスなどへの応用も期待される」とも記載されています。この論文を理解する能力を持ち合わせていない私はこれ以上何も申し上げられませんが、飯塚さんの次回発表では、そういうことをも含めて解説して頂ければありがたいと大いに期待しています。

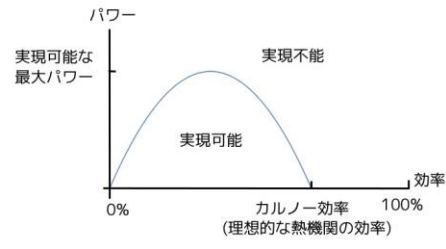
（参考 https://www.nikkei.com/article/DGXLRSP456335_W7A900C1000000/）

（大谷）

大谷さんのメールに便乗させてください。飯塚さんのお話は技術屋の「教養」に関わる話だと思っています。小生、新事業立上げの仕事で実感したのですが、良い仕事をしてくれた人は、専門知識はもちろんですが、周辺知識と技術的教養が豊かな人でした。

（西村）

資料では、広範な熱エンジンに適用可能な普遍的な関係式を導出したとある。なぜか、関係式は示されていないが、右図のような実現可能な最大パワーと効率の関係がグラフで示されている。このグラフの形からみると、カルノー効率がわかるとその半分のあたりで実現可能な最大パワーが発揮されるのであろうか。工学系の人間は、このようなグラフを見ると、すぐピークの値とその位置を知りたがる。



・ 平均値としては一定な系も、拡大してミクロにみると、平均からの「揺らぎ」が存在する。情報として仮にその「揺らぎ」を選別して区別する操作ができれば、系のランダム性を減らせることから、Maxwell は 1867 年頃（なんと明治維新の頃）、飛び交う分子の「熱（速度）の揺らぎ」を検出し、ドアを開け閉めして選別操作するデーモン（悪魔）の存在を仮定すると、熱力学の第二法則が破られるのではないかという仮説を発表し、その後、長きにわたり議論を呼んだ。

・ 右の第一番目の式は、自由エネルギーの減少以上の仕事はできないという、熱力学の第二法則である。第二番目の式は、右辺の第二項は利用した情報操作に関わる量で、デーモンによる情報操作を考慮した一般式となっている。この式は、2008 年に日本の研究者である沙川、上田により提示され、熱力学系と情報系の項を融合して一般化した「情報熱力学」の先駆的な式である。

第二法則 $W_{\text{ext}} \leq -\Delta F$

デーモンが操作すると $W_{\text{ext}} \leq -\Delta F + k_B T I$
 I : 相互情報量

・ 生体系はミクロに見ると、デーモンの役割を持つ生体センサーを有し、巧みな情報の検知・伝送・操作系が生き残るために発達している。例えば大腸菌は、腸の中で餌となるリガンドの濃度勾配を受容体が検知し、濃度の揺らぎの濃い方に鞭毛モーターを回して泳ぐことが知られており、伊藤、沙川はこれをモデル化しシミュレーション実験した。生体のミクロな運動と情報の融合関係は今後の発展が期待される。以上、「情報熱力学」は、物事をミクロに捉え、物理学と情報理論の融合する新しい分野である。まだ勉強が足りませんが、以上が発表を聞いての私の理解です。
 (山崎)

(山崎様のコメントに対して発表者からのコメント)

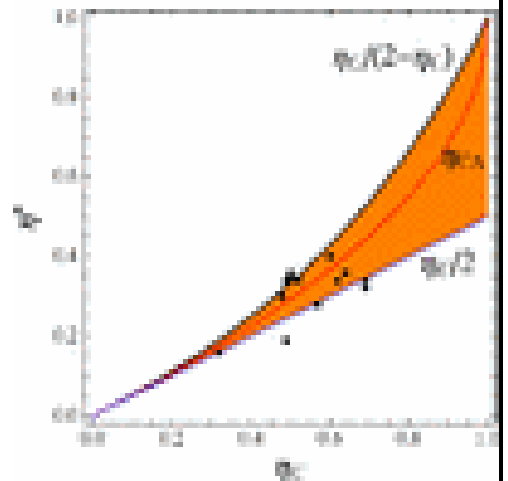
(1) 一般の熱エンジンの効率とパワーのトレードオフの関係式は発表されています(文末の参考文献)が、私の知識では理解できませんでしたので記載しませんでした。従って最適点も不明です。大変失礼しました。調べている中で気が付いたのは、最大パワーでの最大効率として頻繁に採用されているものとして、クルゾン-アルボン効率(1975年)というのがあるようで、これが、発表されている発電所の効率をプロットするとよく一致しているようです(Phys. Rev. Lett. 105, 150603(2010))。下図は、原紙は有料なので、アブストラクトの図です。ぼんやりして見難いですが、横軸がカルノー効率、縦軸が実効率です。黒点が実際の発電所の効率です。真ん中の赤線がクルゾン-アルボン効率です。クルゾン-アルボン効率はヒートソースとヒートシンクの間を、不可逆な熱伝達(損失)過程と可逆な正味の仕事をする過程

に分けて考えたとのこと。最大パワーでの

効率は $1 - \sqrt{\frac{T_l}{T_h}}$ と表されます。厳密な式では

ないようですが、実際の発電所の値と一致しており、発電所の効率も最適点に近いと言えるかも知れません。

[参考文献]：熱エンジンの効率とパワーのトレードオフの関係 file:///C:/My%20eBook/トピックス/情報通信/熱力学/ゆらぎ/6300-072213 ゆらぐ系の熱力学から熱機関の法則へ：パワーと効率の普遍的関係（白石直人 2018. 11）.pdf



- (2) 当日の説明で「電流ゆらぎ」を少し補足しますと、通常は電圧の高い所から電流の低い所に電流が流れますが、資料で説明したミクロの状態（量子効果が発現する状態）では逆に電流が流れ、それが電流のノイズとして実際に観察されたとのこと。まさに「ゆらぎの定理」を実証しました。（飯塚）

2. SCE. Net 幹事会報告

- ・ 20周年記念事業では、20年史の計画概要が固まった。
- ・ 化学学会 84 年会 3月13日（水）～15日（金） 芝浦工大 豊洲キャンパス 早期登録は1月31日締め切り
- ・ SCE. Net 総会 4月18日（木） 記念講演は藤岡副会長を予定
- ・ 2月5日に最近の新入会員を対象にオリエンテーションを開催予定

3. 今後の予定

- 2月 西村氏
- 3月 宮本氏
- 4月 坂下氏
- 5月 見学会（仮：産総研 つくば）
- 6月 大谷氏
- 7月 小林氏
- 8月 持田氏
- 9月 神田氏
- 10月 見学会
- 11月 松村氏
- 12月 山崎氏
- 1月 猪股氏

次回日程

- 2019年2月12日（火）15:00～17:00
1. 技術課題 「企業文化と経営」（仮題）西村氏
 2. 5月見学先検討
 3. その他

次々回日程

- 2019年3月12日（火）15:00～17:00
1. 技術課題 坂下氏
 2. その他