

ここで紹介するのは、有名な「マックスウェルの悪魔」の問題をパソコン上でシミュレートしたものである。

ただし、周知の事実の焼き直しではない。

物理的に矛盾の無い、実在する可能性を秘めたマックスウェルの悪魔の姿をここに示そうと思う。

「マックスウェルの悪魔」とは何かについては、ここで改めて解説はしない。

(詳しく知りたい人は [link:../index_theory.html] か、他の文献をあたって下さい [link:<http://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%9E%E3%82%AF%E3%82%B9%E3%82%A6%E3%82%A7%E3%83%AB%E3%81%AE%E6%82%AA%E9%AD%94>])

さしあたって、マックスウェルの悪魔とは

「人知を超えた能力を使って、分子の熱運動から利用可能なエネルギーを取り出す小人」のことだと思ってほしい。

さて、ここで1つ重要なことだが、熱力学の法則、エントロピー増大則は、**決して、絶対に、**破れることはない。

以下に示す結果が「熱力学の法則の例外だ」などと主張するつもりは毛頭ない。

にもかかわらず、物理的に矛盾しないマックスウェルの悪魔が存在するとは、いかなることか。

マックスウェルの悪魔と、熱力学の法則には共存の道がある。

これが、私の(いまのところの)考えだ。かなり常軌を逸した考えである。

正直に申し上げれば、私はこの考えに100%の自信があるわけではない。

むしろ、どうにも納得がゆかない、というのが本音である。

きっと、この納得のゆかないモヤモヤした雲の中に、何かおもしろいものが隠れているに違いない。

そう思って、ありのままの結果をここに提示することにした。

マックスウェルの悪魔は、その間違いを指摘することによってコンピュータの熱力学など幾多の知見をもたらした。

それと同じように、これから紹介するシミュレーションからも、願わくば何かおもしろいアイデアが出ないものかと期待している。

シミュレーションをWindows上で実行するには、以下のソフトウェアが必要だ。

1: MinGW

フリーで入手できるGNUコンパイラ(gcc)のWindows版。

[link:<http://sourceforge.net/projects/mingw/>]

2: g95

フリーな Fortran 95 コンパイラ

[link:<http://g95.sourceforge.net/>]

3: GrWin グラフィクス・ライブラリ

「Windows プログラミングについての知識や経験が全くない人でも

Windows (x86) プラットフォーム上でのフリーなグラフィクス・プログラミングを手軽に楽しむことができます。」

[link:<http://spdg1.sci.shizuoka.ac.jp/grwinlib/>]

4: メルセンヌ・ツイスター

「Mersenne Twister(以下MT)は、松本眞・西村拓士(アルファベット順)により

1996年から1997年に渡って開発された疑似乱数生成アルゴリズムです。」

[link:<http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/mt.html>]

以下で配布されている “mtfort.f” を、組み込みのために若干の修正を加えて使用している。

A restorable MT19937 code in fortran 90 by Richard Woloshyn:

[link:<http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/VERSIONS/FORTRAN/fortran.html>]

修正点:

- ・ファイル名を “mtfort.f” -> “mtfort.f90” に変更
- ・オリジナルに含まれていた program main 以下を無効とした

■コンパイル方法

シミュレーションはFORTRANで書かれている。

実行するには、FORTRANのソースファイルをコンパイルする必要がある。

コンパイル方法は、Windows環境上ではおおむね次のように行う。

```
g95 (ソースファイル).F90 -Wno=165 -Wall -O -o (実行ファイル名) -Wl,--subsystem,console -lGrWin
-mwindows
```

これで、(ソースファイル).F90 から (実行ファイル).exe ができあがる。

(ソースによっては、オプションが若干異なる場合がある。ソースファイルのコメント中にコンパイル方法が書かれているので、それを参考にしてください。)

もしグラフィクス表示は不要で、結果の数字だけを得たい、というのであれば GrWinグラフィクス・ライブラリは必要ない。この場合は、コンパイル時に **-D=NOGR** というオプションを指定すれば、グラフィクス表示無しの実行ファイルができあがる。グラフィクス無しの実行ファイルは、グラフィクス有りに比べると処理速度が格段に速い。

私は、まずグラフィクス有りの状態で動作を確認し、時間のかかる計算結果はグラフィクス無しの状態で求めた。グラフィクス無しのコンパイル方法は、次のようになる。

```
g95 (ソースファイル).F90 -Wno=165 -Wall -O -D=NOGR -o (実行ファイル名) -Wl,--  
subsystem,console -lGrWin -mwindows
```

GrWinグラフィクス・ライブラリの動作環境は「AT 互換機 (いわゆる DOS/V 機) で、Windows
Xp/2000/NT/Me/9x (x86) の何れかの OS が動作している環境」となっている。

なので、グラフィクス有りの**動作環境はWindows**に限られる。グラフィクス無しの状態であれば、g95が動作するほとんどのプラットフォームで動作可能だろう。(もちろん、その環境に即した g95を用意して、ソースをコンパイルし直す必要がある。)

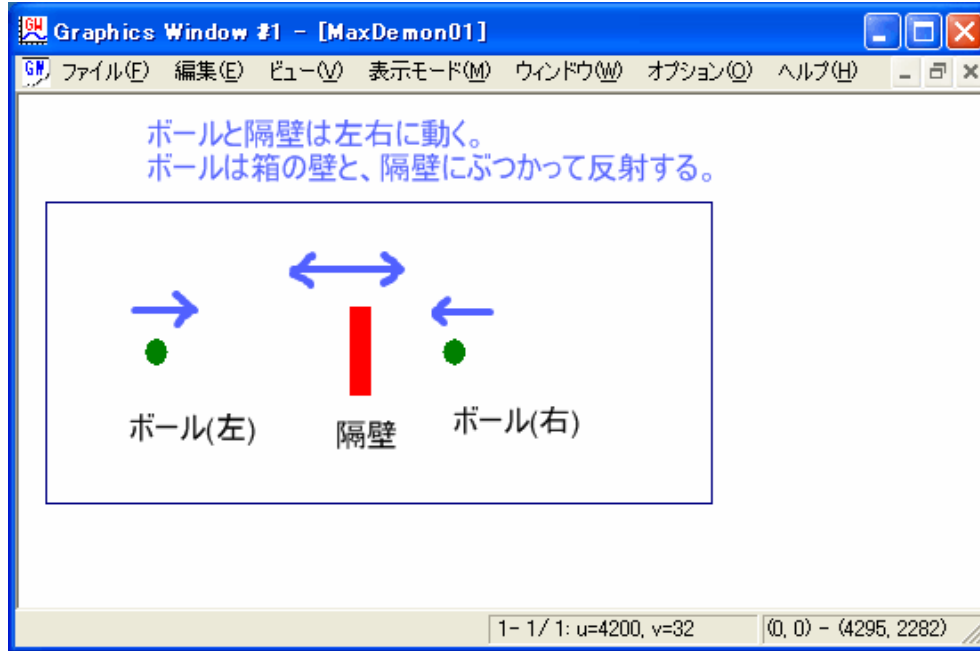
シミュレーションのソースは、g95 の持つプリプロセッサを利用して書かれている。(ifdef ~ #endif と
いった記述) そのため、プリプロセッサの記述が異なる他のFORTRAN処理系ではそのままコンパイル
できない。

プリプロセッサには、上記の **-D=NOGR** というオプションの他に、**-D=LIMIT** というオプションを設けている。
この **-D=LIMIT** オプションを指定すれば、シミュレーションはある一定の上限回数(1000回、または3000
回)で終了する。**-D=LIMIT** オプションを指定しなかったなら、シミュレーションは止まることなく動き続け
る。

ここで紹介するシミュレーションのプログラムは規模も小さく、手元にパソコンがあれば割と手軽に実行で
きる。興味があれば(私の出した結果を鵜呑みにせず)、ぜひご自分で試していただきたい。

■ シミュレーション 1 : 2 個のボールに挟まれた隔壁

まずは準備段階。とにかく動かしてみよう。一次元の有限の範囲内を動く、2 個のボールの間に 1 枚の隔壁がある。ボールは両端と隔壁で反射する。隔壁はボールに押されて移動する。



ここで確認しておきたいのは「隔壁の位置」である。長時間に渡って観察したとき、隔壁の位置はどのような分布を示すだろうか。直感的にわかることだが、隔壁は平均して中央にある確率が最も高い。左右対称なのだから、当然といえば当然だろう。

[link:src/MaxDemon01.F90]

■ シミュレーション 2 : 左右のボールの速度を一定に保つ

準備段階その 2。シミュレーション 1 と同じことを、今度は「左右のボールの速度をできるだけ一定に保ったまま」行ってみる。

左右のボールの速度を等しく保つために、右端と左端の反射に細工を施す。右端と左端でボールが反射するたびに、ボールの反射後の速度を一定の平均値に近づける。そうなるように、ボールに対して適切に加速・減速を行う。具体的には

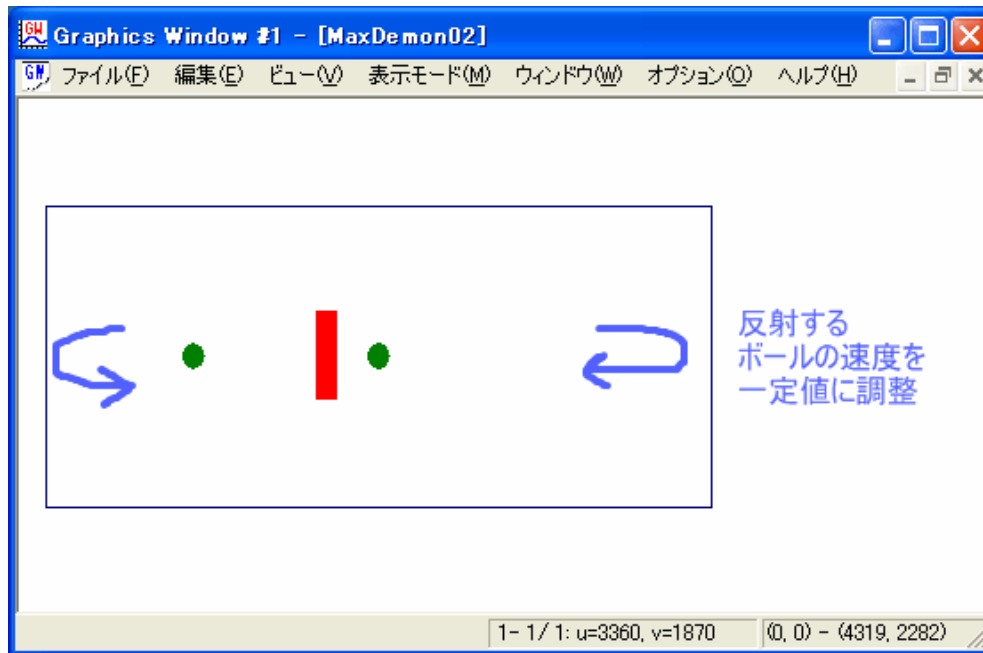
$$\begin{aligned} \text{(ボールの反射後の速度)} = \\ \text{(ボールの反射前の速度)} + ((\text{一定の平均速度}) - \text{(ボールの反射前の速度)}) / 2 \end{aligned}$$

といった操作を行う。

例えば、ボールの反射前の速度が 2 で、一定の平均速度が 1 だとしたら、反射後の速度は

$$2 + (1 - 2) / 2 = 1.5$$

となる。何度も反射を繰り返すうちに、ボールの速度は次第に一定の平均速度に近づくことになる。2 → 1.5 → 1.25 → 1.125 → 1.0625 → ... といった具合に。(実際のシミュレーションでは両端の反射の他に、隔壁との反射もあるので、必ずしもここに並べた数字通りにはならない。)



[link:src/MaxDemon02.F90] , [link:src/mtfort90.f90]

■ シミュレーション2の応用：乱数を加える

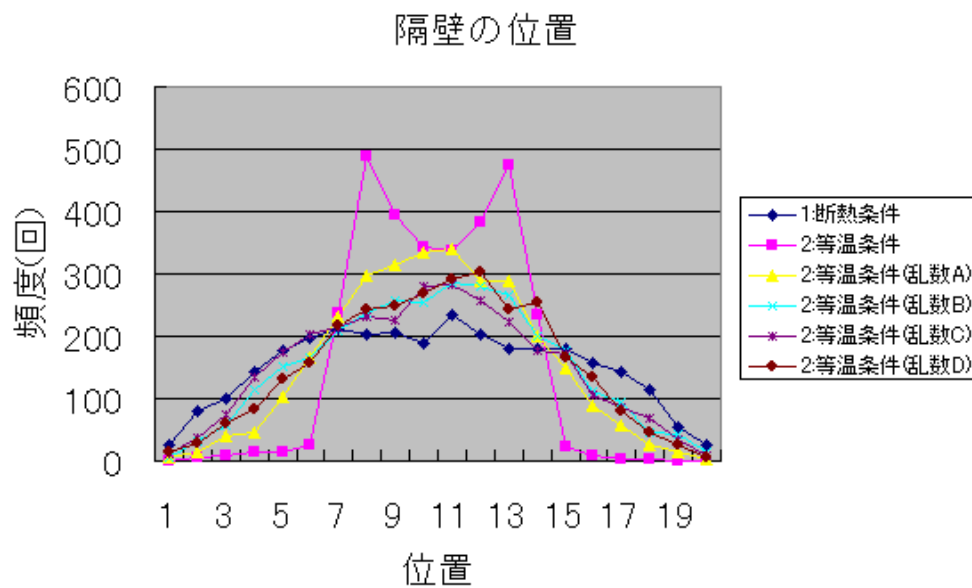
上ではボールの平均速度を固定した平均速度に近づける操作を行ったが、次に、平均速度にある程度の乱数を加えてばらつきを持たせた状態でシミュレーションを行ってみよう。乱数の加え方として、次の4パターンについて調べた。

- 乱数パターンA: 平均速度 = 固定値 + (一様乱数 - 一様乱数) / 2
 - 乱数パターンB: 平均速度 = 固定値 + (一様乱数 - 一様乱数)
 - 乱数パターンC: 平均速度 = 固定値 + (一様乱数 * 2) - 1
 - 乱数パターンD: 平均速度 = 固定値 + (気体の速度分布に従う乱数)
- ここで、気体の速度分布は $f(x) = x^2 * \text{EXP}(-x^2)$ という形状の分布

ここでもシミュレーション1と同様、隔壁の位置を調べてみよう。今度の場合も左右対称なので、やはり隔壁は中央付近に位置する確率が最も高い。

■ 結果のグラフ

グラフは隔壁の位置を一定間隔で数え上げたものである。
横軸は隔壁の位置を表しており、1が左端、20が右端、10が中央付近である。
縦軸はその位置に隔壁があった頻度を表している。
頻度は各シミュレーションごとに3000回ずつカウントしている。

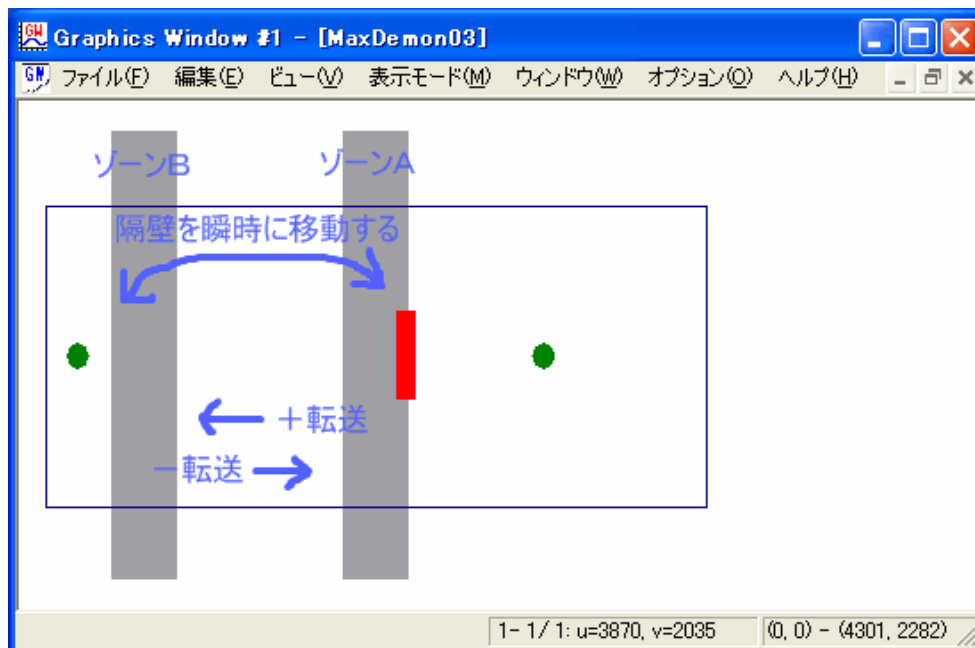


ほとんどのシミュレーションでは、中央付近が最も頻度が高くなっている。
条件の違いによって、分散(裾野の広がり具合)が若干異なっている。
2:等温条件(乱数なしでボールの速度を一定値に近づけたもの)では、最も頻度の高いピークが2つ見られる。これは、ボールと隔壁の反射が左右交互に一定の周期で行われた結果である。

■ シミュレーション3： ワープゾーン

準備段階その3。先のシミュレーション1に、中央の隔壁を一瞬で別の位置に移動させる仕掛けを入れる。この仕掛けのことを「ワープゾーン」と呼ぶことにしよう。ワープゾーンとは、次のような仕掛けのことだ。

- ・隔壁が運動する範囲内に、2つの部分(ゾーン)を指定する。
 - ・1つの部分は中央付近に、もう1つの部分は左右どちらかに片側に位置付ける。
- それぞれの部分を、ゾーンA、ゾーンBと呼ぶことにしよう。
- ・2つの部分(ゾーン)の大きさは等しいものとする。
 - ・もし隔壁がゾーンAにあって、2つのボールが2つのゾーンの外側にあれば、隔壁を瞬時にゾーンBに移動する。
 - ・反対に隔壁がゾーンBにあって、2つのボールが2つのゾーンの外側にあれば、隔壁を瞬時にゾーンAに移動する。
- (2つのゾーンの外側とは、ボールが(ゾーンA)U(ゾーンB)U(ゾーンAとBの間の領域)には無いとき、ということ。要は、2つのボールが常に隔壁の左右に分かれるようにする、ということだ。)
- ・一度隔壁が移動した後は、一定時間次の移動は行われない。
- そうしないと、隔壁が2つのゾーン間を行ったり来たりすることになるので。一定時間を経過してもなお、隔壁がゾーンの上に留まっていたら、そのときには次の転送が起こって隔壁は再び元のゾーンに転送される。
- ・転送前の隔壁の速度と、転送後の隔壁の速度は等しい。
- また、ゾーン内での隔壁の相対的な位置は、転送前と転送後で保たれる。
(そのために2つのゾーンの大きさは等しくなっているのだ)



ワープゾーンとは、要するにA ↔ B間を瞬時に移動する「転送装置」のことだ。(SF映画「スタートレック」に登場する小道具、あるいは「ハエ男の恐怖」のようなものだ。)言葉による説明より、実際にシミュレーションを見てもらった方が理解が早いだろう。どうやってワープゾーンを実現するか、という話は

ひとまず置いておいて、ここでは「仮にこのようなワープゾーンがあったとしたら」という仮定のもとに話を進めることにする。

A→Bへの転送を、ここでは便宜的に正方向(+)の転送、とする。逆に、B→Aの転送を、ここでは便宜的に負方向(-)の転送、としよう。

さて、ここで問題。長時間観察したとき、正方向(+)の転送と負方向(-)の転送は、どちらがより多く行われることになるか？ もし2つのゾーンが左右対称に配置されていれば、おそらく正負の転送回数は等しくなるだろう。それでは、左右対称ではなく、どちらか一方の側に片寄せてゾーンを配置したら？

答はシミュレーションを動かしてみれば分かる。直感に反して(あるいは直感通り、という人もいるかもしれないが)ゾーンを片側に寄せても、正負の転送回数は等しくなる。ワープゾーンの位置が非対称だからといって、転送回数が正負で非対称になるわけではない。隔壁の位置の分布をシミュレーション1と比較しても、はっきりとした違いは認められない。また、左右のボールの速度にも有意な差は認められない。つまり、ワープゾーンという仕掛けを施す前と後で、何も変わっていないということだ。

[link:src/MaxDemon03.F90]

■ シミュレーション4： 左右のボールの速度を一定に保つ

さて、ここからが本命だ。上のシミュレーション3と同じことを、今度は「左右のボールの速度をできるだけ一定に保った状態で」行ってみる。ボールの速度を一定に保つ方法は、先のシミュレーション2と同様だ。

そして、ここでも先のシミュレーション3と同じ問を發してみる。時間観察したとき、正方向(+)の転送と負方向(-)の転送は、どちらがより多く行われることになるか？

シミュレーションの結果は、明らかに非対称な傾向を示す。ゾーンの位置を非対称に、左右どちらか片側に寄せた場合、それに応じて正負の転送は、正または負のどちら一方がより多く起こるようになる。先のシミュレーション3の結果と比較すれば、違いは一目瞭然だ。

- ・シミュレーション3： 正負の転送回数は等しい
- ・シミュレーション4： 正負いずれか一方の転送が優位

ここで鋭く直感の働く人(あるいは熱・統計力学に詳しい人)であれば、実はこのシミュレーション4こそが「マックスウェルの悪魔」となっていることに気付くのではないかな。

「えっ！何のこと？」と思っている人、心配ご無用。何のことか分からないのが当然です。以下において説明しましょう。

[link:src/MaxDemon04.F90] , [link:src/mtfort90.f90]

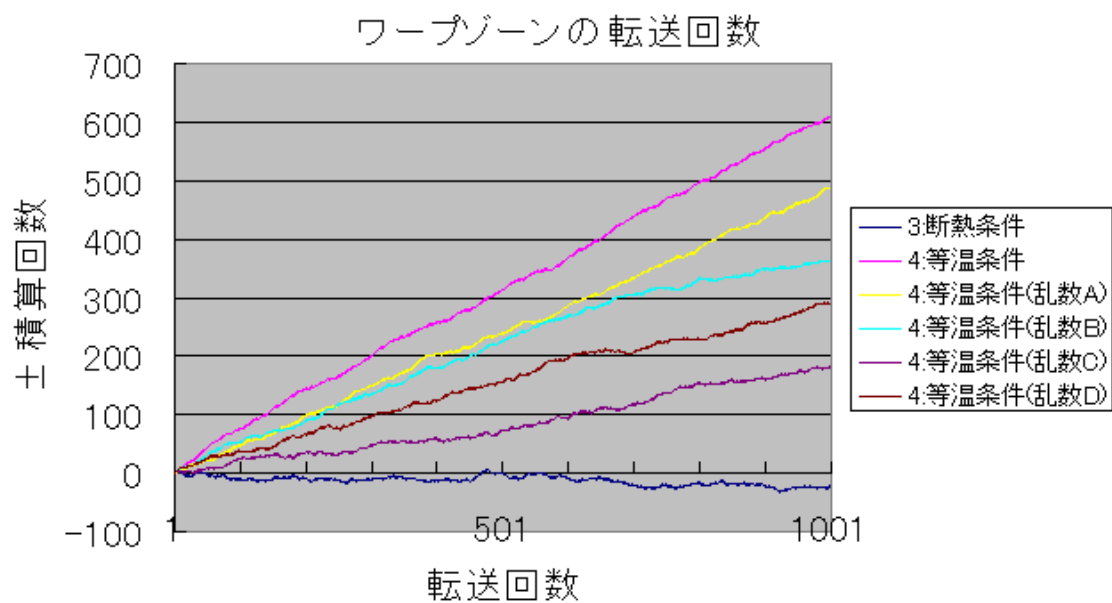
■ 結果のグラフ

グラフは正負の転送についての積算回数を表している。

積算回数が正(+)であれば、それだけ正方向(+)の転送が負方向(-)の転送より多く行われたことになる。

縦軸は正負合わせた転送回数。

各シミュレーションは、転送が1000回行われるまで実施した。



3:断熱条件(シミュレーション3)では、正負の転送回数に明確な差異が見られない。

4:等温条件(シミュレーション4)では、正方向(+)の転送が負方向(-)の転送より明らかに多い。

なぜシミュレーションの結果がこのようになるのか、理由を考えてみよう。この理由を深く知るためには、少しばかり「熱・統計力学」の知識をひもとくことになる。具体的には、次のような視点を導入する。

- ・端の壁と隔壁に挟まれた1個のボールを、「ただ1個の分子から成る気体」と見なす。
- ・ボールが運動できる空間の広さ、つまり端の壁と隔壁の間の長さを「気体の体積」と見なす。
- ・ボールの速度(の2乗)を、気体分子が持つ運動エネルギー、すなわち「気体の温度」と見なす。

例えば空気は膨大な数の酸素分子と窒素分子(とその他の分子)から成っている。1リットルの気体は(標準状態で)およそ $6.02 \times 10^{23} / 22.4 = 2.68 \times 10^{22}$ 個の分子を含む。これと比べれば、ただ1個の分子から成る気体は非常に小さい。しかし、いかに小さくとも運動する分子なのだから、これは一種の「気体」である。より正確に言えば、気体としての性質を有している。

例えば、気体は「(断熱的に)圧縮すると温度が上がる」という性質を有している。この性質は、シミュレーション上でボールが隔壁と衝突する様子を見ればよくわかる。ボールと、ボールの方に向かってくる隔壁が衝突すると、ボールは強くはじき返されて速度が増す。つまり、1個のボールから成る気体の温度が上がる。反対に、気体には「(断熱的に)膨張すると温度が下がる」という性質がある。この場合は、ボールと、ボールから遠ざかる隔壁の衝突を思い浮かべればよい。ボールから遠ざかる隔壁は一種のクッションとして働くので、衝突後のボールの速度は遅くなる。

■ 断熱条件と等温条件

気体分子の視点を導入すると、シミュレーション2と4の「左右のボールの速度を一定に保つ」意図が見えてくる。ボールの速度が等しいということは、気体分子の言葉で言えば「温度が等しい」ということである。つまり、シミュレーション2と4は「温度一定」という条件を想定していたのである。これに対して、シミュレーション1と3は、外界とエネルギーのやりとりを全く行わない、断熱的な条件を想定している。

シミュレーション1&3: 断熱条件
シミュレーション2&4: 等温条件

■ シミュレーション3

シミュレーション3で、正負の転送回数が等しくなった理由を考えてみよう。シミュレーション1で見たように、もしワープゾーンが無ければ、隔壁の移動にともなってボールとの衝突が起こる。その結果として「体積が狭くなった側の、気体の温度が上がる」。言い換えれば、平均的に見て、狭い側のボールの速度は大きい。

ところが、ワープゾーンがあると話が違って来る。ワープゾーンを通じて隔壁が移動した場合、ボールとの衝突は全く起こらない。この場合、体積が変化しても気体の温度は変わらない。例えば、ワープゾーンを通じて隔壁を中央より左側に移動したとしよう。このとき、狭くなった左側の部屋にあるボールが速くなることもないし、広くなった右側の部屋にあるボールが遅くなることもない。もし左側の部屋にあるボールの方が、右側の部屋にあるボールよりも速かったのであれば、隔壁を左から右に押し戻す力が働くであろう。ところが、ワープゾーンを通じて隔壁が移動した場合には、ボールに速度差が生じないため、隔壁を左から右に押し戻す力が働かない。つまり転送された直後の隔壁は、中央に戻ろうとする傾向を特に有してはいない。結局のところ隔壁は、ワープゾーンを通じて中央から左側に移動したのと同じ確率で、左側から中央への移動を行うのである。

たとえ左右の温度が等しくても、狭い部屋の方が分子の1往復に時間がかからないので、隔壁を左から右に押し戻す傾向は全く消えるわけではない。ただ、ワープゾーンを通じて移動した場合の方が、そうでなかった場合よりも、中央に戻ろうとする傾向が弱くなる。ワープゾーンを通じて隔壁を中央から左に移動し、その後、普通に隔壁を中央に戻したら、右側の部屋のボールの速度は、左側の部屋のボールの速度よりも大きくなる。なぜなら、隔壁が中央に戻る過程で、ボールと隔壁が衝突し、速度が変化するからである。右側の圧縮される側のボールは速くなり、左側の膨張する側のボールは遅くなる。ワープゾーンを通じて隔壁の移動を何度も行くと、中央に戻ろうとする傾向は徐々に弱くなる。やがて中央に戻ろうとする傾向はなくなり、最終的に左右の転送回数は等しくなるのである。(訂正:2008/01/27)

■ シミュレーション4

シミュレーション3で等しかった正負の転送回数が、シミュレーション4では等しくならなかった。なぜ一方の転送回数が増したのだろうか。

ワープゾーンを置かないシミュレーション1とシミュレーション2では、隔壁が中央付近にある確率が最も高かった。もし隔壁の分布をそのまま変化させずにワープゾーンを設置したならば、確率の高い中央から確率の低い端への転送の方が、その逆よりも多く生じるはずだ。問題は「分布をそのまま変化させずに」という点にある。

以下で、ボール(気体分子)と隔壁の分布について考えてみよう。

■ シミュレーション1の場合:

隔壁が受ける圧力 P は、いわゆる断熱曲線 $PV^r = \text{const}$ に従う。
 r は比熱の比、 $C_p(\text{定圧比熱}) / C_v(\text{定積比熱})$ を表す。今の場合、分子の運動は1次元なので、分子の自由度 $f=1$ 。このとき $r = (f + 2) / f = 3$ となる。左右のボールから受ける圧力 P を重ね合わせると、隔壁は中央で釣り合う。

■ シミュレーション2の場合:

隔壁が受ける圧力 P は、いわゆる等温曲線 $PV = \text{const}$ に従う。
隔壁が左右のボールから受ける圧力 P を重ね合わせると、隔壁は中央で釣り合う。シミュレーション1と2の圧力 P は異なっているので、隔壁の分布形状も1と2では理論上は異なるはずだ。ただ、その違いを今回のシミュレーション結果から見出すのは難しい。分子の数がただ1個なので、隔壁の分布形状は1と2でほとんど違いが見られない。

■ シミュレーション3の場合:

隔壁がワープゾーンを通じて転送されたときの、ボール(気体分子)の分布について考えてみよう。隔壁が転送されたときには、ボールの速度に変化は無い。シミュレーション1(断熱条件)と比較して、本来上がるはずのボールの速度は上がらず、本来下がるはずのボールの速度は下がらない。ここでPV曲線を思い描けば、狭くなった側の部屋の圧力は低く、広くなった側の圧力は高くなっている。隔壁の転送によってPV曲線の形状に変化が生じるので、転送後の隔壁を中央に押し戻す傾向が消えるのである。隔壁を中央に押し戻す傾向は、転送前に比べて弱くなるのである。(訂正:2008/01/27)

■ シミュレーション4の場合:

同じことをシミュレーション4について考えてみよう。シミュレーション4においても3と同様、隔壁が転送されたときにボールの速度変化は無い。しかし、今度の場合はシミュレーション2(等温条件)と比較して、特にボールの速度が上がったり下がったりする訳ではない。なぜなら、ボールの速度は「温度」が支配しているからだ。たとえ隔壁との衝突によってボールの速度が変化したとしても、外壁を通じての熱のやりとりによって、ボールはほどなく元の温度に戻る。ここでPV曲線を思い描けば、シミュレーション2と4との間には差異が見られない。隔壁の転送によってPV曲線の形状に変化が生じないので、転送後の隔壁を中央に押し戻す傾向はそのまま保持される。

シミュレーション3(断熱条件)と4(等温条件)の違いは次の通り。

ワークゾーンの導入によって、

- ・シミュレーション3では、シミュレーション1と比べて、PV曲線の形状が変化する。
- ・シミュレーション4では、シミュレーション2と比べて、PV曲線の形状が変化しない。

「隔壁の分布をそのまま変化させずにワークゾーンを設置したならば」、正負の転送に有意な差が生じる。隔壁は中央付近に位置する確率が高いので、確率の高い中央から確率の低い端への転送が、その逆よりも多く生じる。これがシミュレーション4の結果である。

断熱条件と等温条件、2つの条件のうち、どちらか一方の正負の転送回数が等しいのであれば、他方の転送回数に差異が出ることは想像に難くない。そして、外界から閉ざされている断熱条件で転送回数に差異が出るとは考えにくい。であれば、等温条件で転送回数に差異が出ることは納得がいくであろう。

さて、もし本当に等温条件下の正負の転送回数に有意な差があったならば、これは重大な事態を引き起こす。転送が一方向に優位に起こるなら、エネルギーの流れも一方向に優位に起こる。つまり、シミュレーション4は全体として熱を一方向に流す弁として働くのである。もし中央から左端への転送が優位に起こったとすれば、左端の反射では壁→ボールのエネルギー移動が優位に起こり、右端の反射ではボール→壁のエネルギー移動が優位となる。シミュレーション全体で見れば、熱を左から右に移動していることになる。これで、なぜシミュレーション4の結果がマックスウェルの悪魔となるのか、理由がわかり頂けたことと思う。

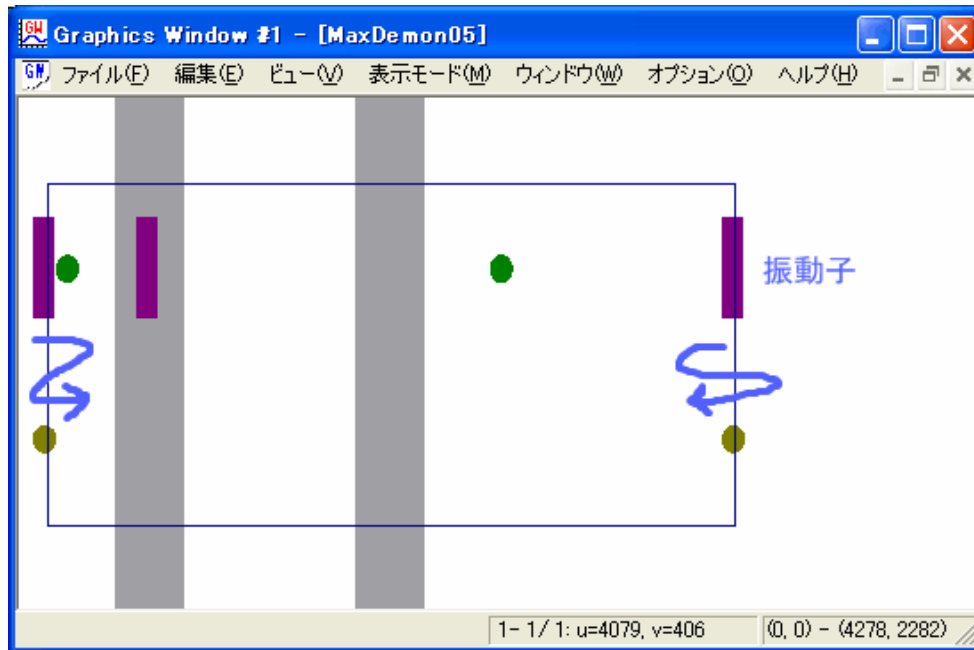
シミュレーション5：両端の壁を振動子に置き換えてみる

2007/12/20

シミュレーション4は、本当に「マックスウェルの悪魔」になり得るのだろうか？

この結果を疑うのは当然だが、さらにいくつかのシミュレーションを行って、真偽の程を確かめてみよう。

シミュレーション4では直接ボールの速度を操作したが、これをもう一步現実の熱運動に近づけるため、両端の壁を振動する壁面に置き換えてみた。そして、壁面の振動エネルギーが一定値に近づくように調整した。

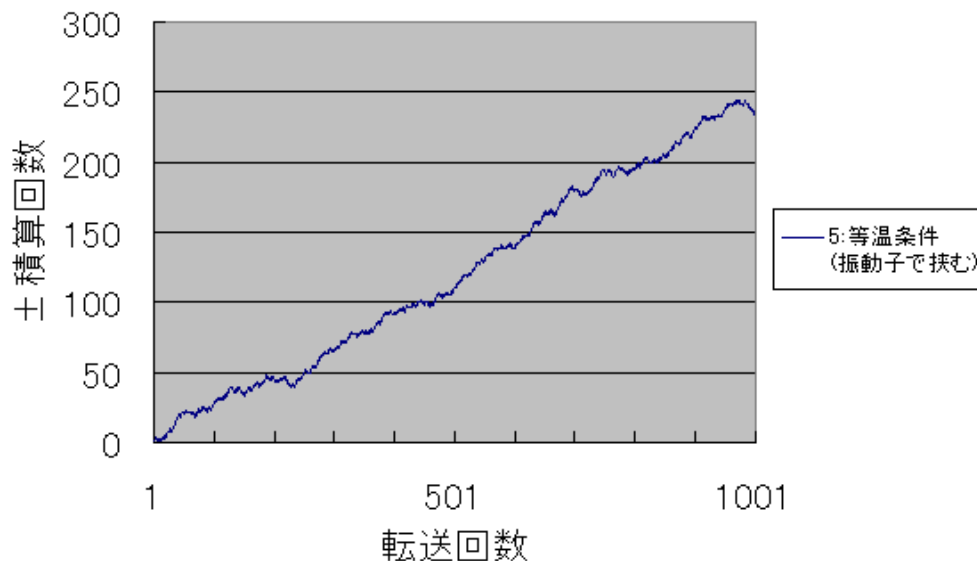


[link:src/MaxDemon05.F90]

■ 結果のグラフ

結果は、先のシミュレーション4と同じように、正(+)の転送がより多く起こっていた。

振動子で挟む



シミュレーション6：両端の振動子の平均エネルギーを変えてみる

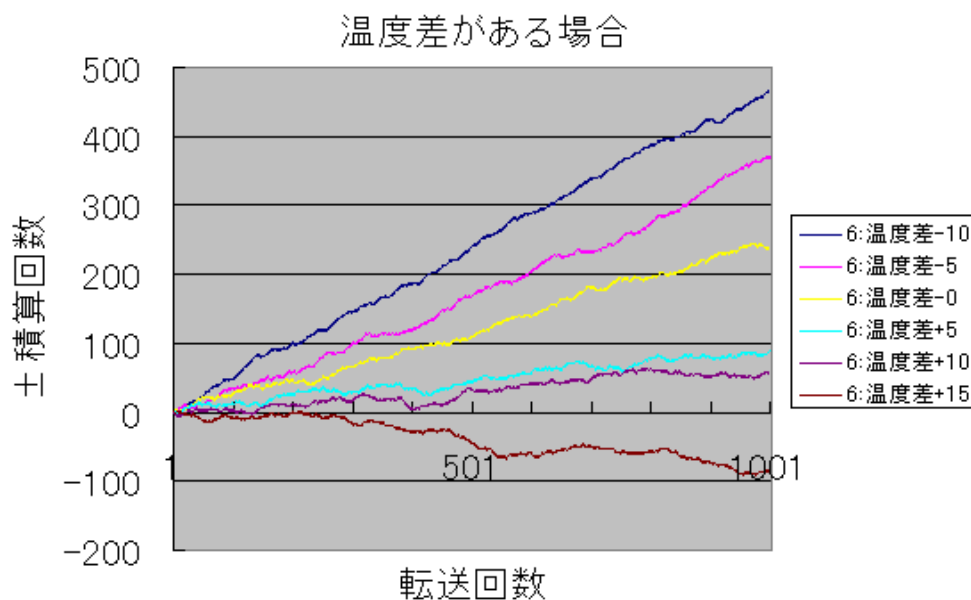
2007/12/20

右端の壁と左端の壁の温度を等しく保つのではなく、右と左で温度差があった場合はどうなるだろうか。左右の壁の振動エネルギーを変えて、その傾向を調べてみた。

その結果、正負の転送の傾向は、左右の温度差に依存していることが確かめられた。狭い部屋の側の温度を上げれば、正負の転送回数の差は増大した。反対に広い部屋の側の温度を上げれば、正負の転送回数の差は小さくなった。

[link:src/MaxDemon06.F90]

■ 結果のグラフ



「温度差」の数字は、

$$((\text{右側の振動子の運動エネルギー}) - (\text{左側の振動子の運動エネルギー})) \times 10$$

である。例えば「温度差-10」のグラフでは、右側の振動子の方が左側の振動子よりも 10/10 (つまり1) だけ運動エネルギーが小さい。

グラフの結果は、明確に「温度差」に依存している。左側の振動子の運動エネルギーが、右側の振動子の運動エネルギーより大きいほど、正(+)の転送回数が大きくなる。ここから、正負の転送回数の差異が、左側から右側へのエネルギーの流れに関連付いていることがわかる。

注:

シミュレーション上での「温度」とは、両端の振動子の平均運動エネルギーのことである。

シミュレーション上での物理的な単位は、それぞれ次のようになっている。

長さ: 画面の1ピクセルが1単位。

時間: 計算の1ステップを 0.05単位時間 とした。

質量: ボールの重さが1単位。

この単位系における振動子のエネルギーを、ここでは「温度」と呼んでいる。

現実の物理的な温度(ケルビン温度)と整合がとれている訳ではない。

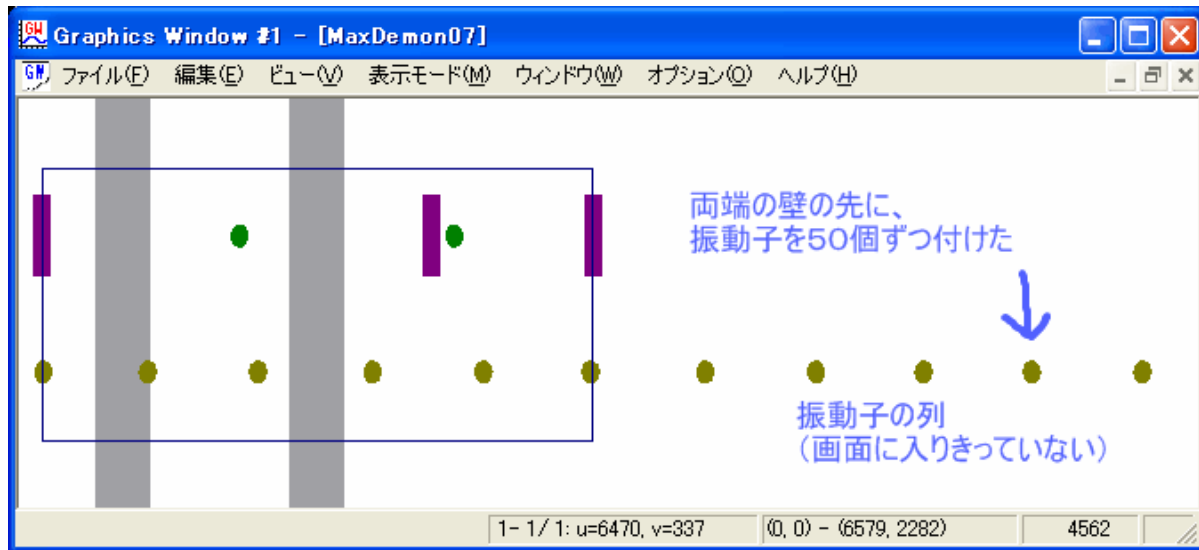
(シミュレーション上での -10 が -10°C となっているわけではない。)

シミュレーション7：両端の振動子の先に連成振動子をつなげてみる

2007/12/20

それでは、このような仕掛けを用いて2つの熱浴の間に温度差を作り出すことができるだろうか？

それを確かめるために、左右の端の壁の先に、一次元の連成振動子をつなげてみた。一次元の連成振動子とは、複数の質点を直線的にバネでつないだものだ。このシミュレーションでは、左右それぞれに50個の質点をつないでみた。連成振動子の反対側の端は固定した。もし左側にある連成振動子の有するエネルギーよりも、右側にある連成振動子のエネルギーの方が大きくなれば、温度差が作り出されたことになる。



結果はどうなったか。予想に反して、左右の振動子で有意なエネルギーの差異は認められなかった。また、正負の転送回数についても有意な差は認められなかった。

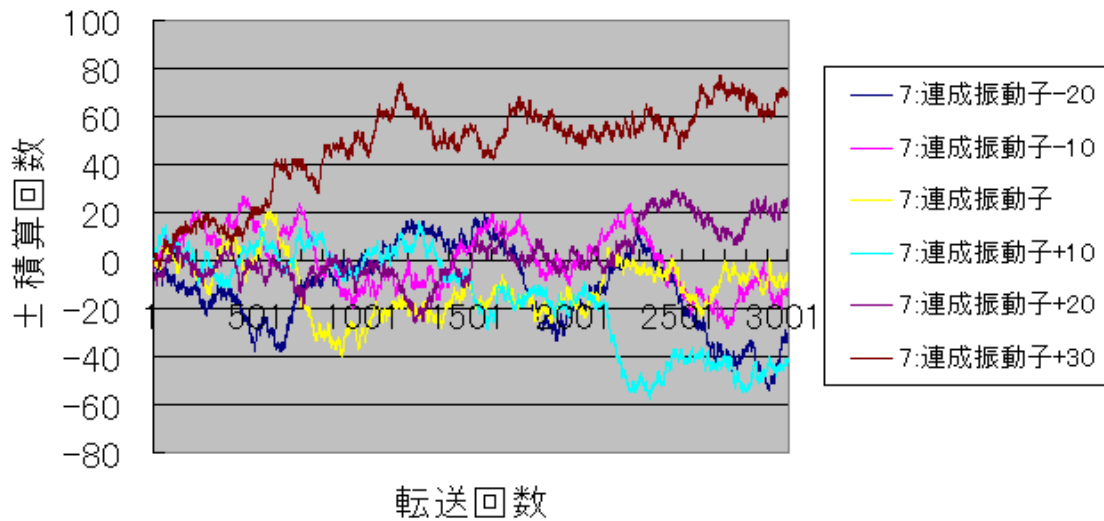
この結果は、先のシミュレーション4～6の結果と相反しているように見える。両端が固定されているという状況からすれば、むしろシミュレーション3の挙動に近い。少なくともこれで、無条件に温度差が生み出されるわけではないことが明らかになった。やはり「マックスウェルの悪魔」は非現実的な幻なのだろうか・・・

[link:src/MaxDemon07.F90]

■ 結果のグラフ

シミュレーションは、転送回数3000回まで実施した。
(前のシミュレーション6までの転送回数は1000回)

温度差は生じるか？



各グラフ名にある -20～+30 の数字は、ワープゾーンの相対的な位置関係を示す数字である。数字がプラスに大きくなるほど、ワープゾーンは中央付近に寄っており、偏りは小さい。反対にマイナスになると、ワープゾーンは片側に寄り、偏りが大きくなっている。

もしシミュレーション4～6までの考え方が妥当であれば、偏りが大きいほど正負の転送回数の差異も大きくなるだろう。(ワープゾーンが左右対称であれば、正負の転送回数の差異はなくなるだろう。) こうした偏りに対する挙動を確認するため、ここではワープゾーンの位置を少しずつ変えてシミュレーションを実施してみた。

結果、正負の転送回数に有意な差異は認められなかった。

「連成振動子+30」の結果は正(+)の転送が多く起こっているようにも見えるが、偏りから考えれば、この+30は他よりも正(+)の転送が少なくなっていないかならないはずだ。なので、この結果は単にランダムな振れに過ぎない。

シミュレーション8：連成振動子を丸くつないでみる

2007/12/20

左右の連成振動子の端をつなげて、1つの輪にした。ここでは101個の質点を輪にしてつないでみた。

結果は何とも興味深いものとなった。まず、正負の転送回数に差異が認められる。ただし、その差異はシミュレーション4〜6ほど明確ではない。そして、転送回数の差異は、何らかの形でワープゾーンの位置に依存している。興味深いのは、転送回数の差異が、ワープゾーンの位置に対して単調な比例関係にはなっていない点だ。左側に置かれたワープゾーンの位置を少しずつ変えて転送の傾向を調べてみると、同じ左側でありながら、正の転送が優位になる場合と、負の転送が優位になる場合があった。つまり、ワープゾーンの位置の変化に対して、正負の転送傾向が交互に現れる、ということになる。

この結果はどう解釈すればよいのだろうか。1つのヒントは「線形な連成振動子はエルゴード的ではない」ということだろう。

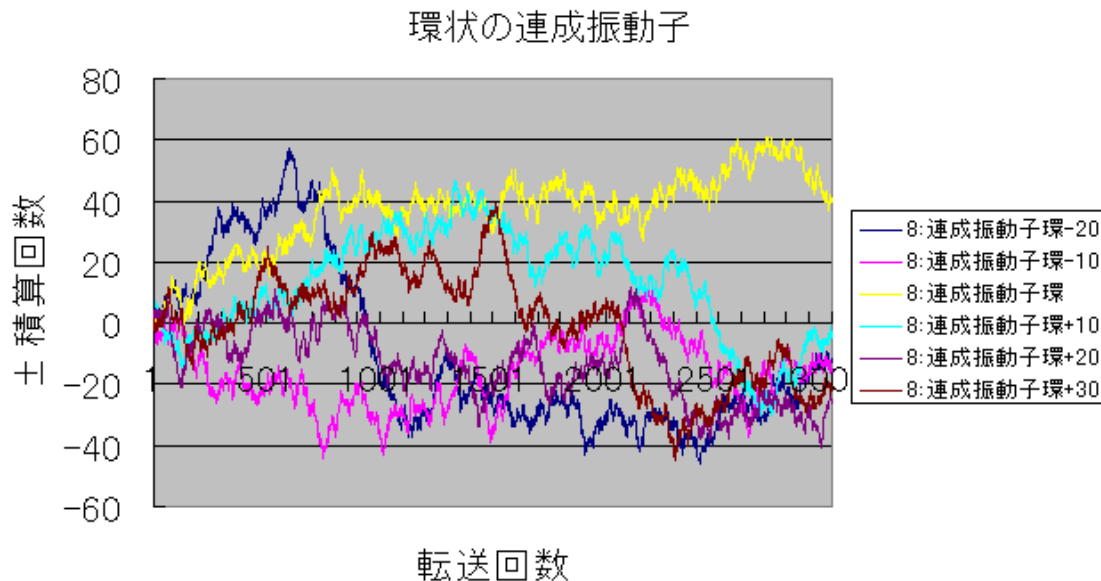
「連成振動子を長時間に渡って観察すれば、エネルギーはまんべんなく行き渡るのだろうか？」

Fermi-Pasta-Uramの実験と呼ばれるシミュレーションが、この疑問に答えている。それによると、線形振動子の場合、エネルギーは全ての状態をまんべんなく行き渡るのではなく、幾つかの状態を周期的に巡回するのである。

ここでのシミュレーション8の場合、輪にした線形な連成振動子は「左右の部屋を等温に」保ってはいない。むしろ、ある周期的な規則でもって、左右の部屋に温度差を与えているのだ。その温度差に応じて、転送の傾向は正が優位になったり、負が優位になったりするのではないだろうか。

[link:src/MaxDemon08.F90]

■ 結果のグラフ



各グラフ名にある -20〜+30 の数字は、ワープゾーンの相対的な位置関係を示す数字。前のシミュレーション7と同様。

シミュレーション9：連成振動子に非線形項を入れてみる

2007/12/20

線形で駄目なら非線形でやってみよう、ということで、シミュレーション8の連成振動子に非線形の項を入れてみた。

線形のバネは、長さに比例して張力が働く。

$$d^2x/dt^2 = -kx$$

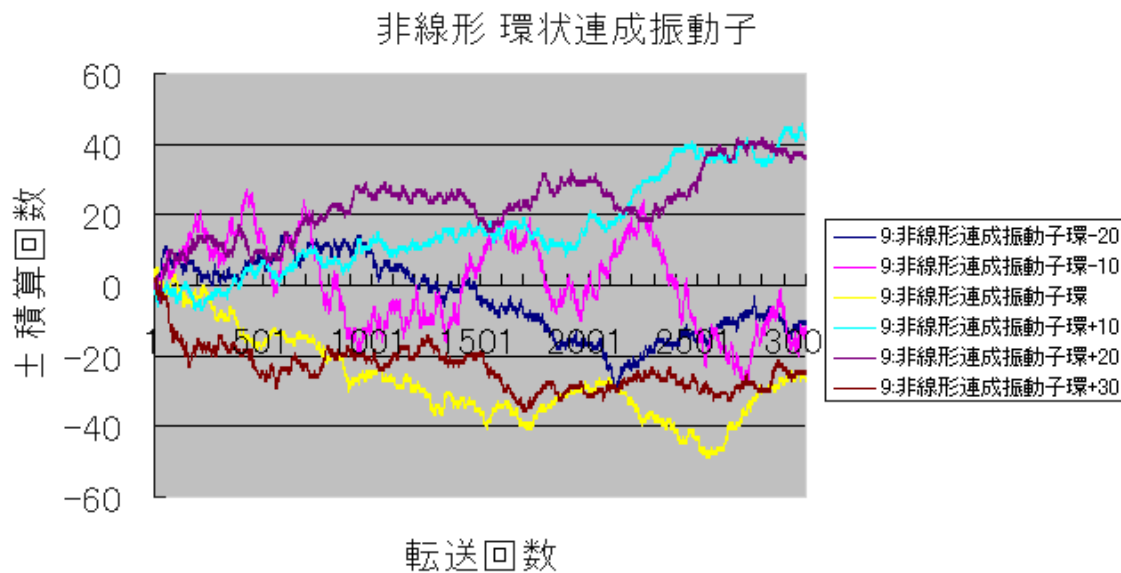
これまで(シミュレーション8までに)扱った振動子は、全てこの線形のバネであった。
線形のバネに対して、ここでは次のように、長さの2乗に比例して働く力を加えた。

$$d^2x/dt^2 = -kx - \alpha x^2$$

結果はシミュレーション8と似た、複雑なものとなった。正負の転送回数の差異は、線形なシミュレーション8の方が非線形なシミュレーション9よりも大きい。また、シミュレーション9の方が、シミュレーション8に比べて転送回数の変動がやや小さいように見える。

[link:src/MaxDemon09.F90]

■ 結果のグラフ



シミュレーション10 & 11 : 乱数による熱浴と接してみる

2007/12/20

乱数によってエネルギーを交換し合う6個の分子から成る熱浴を用意し、それを左右の端の壁につなげた。この状態で、左右の端の壁の振動は、常に熱浴からの攪乱を受けることになる。(シミュレーション10)

ここで「分子」と呼んでいるものは、シミュレーション上ではエネルギーの値を保持する1個の変数のことである。分子6個の熱浴とは、エネルギーの値を保持した6個の変数があり、各変数間でエネルギーをランダムに交換しているものを指し示す。

[[link:src/MaxDemon10.F90](#)] , [[link:src/thpool.f90](#)] , [[link:src/mtfort90.f90](#)]
[[link:src/MaxDemon10_eFlow.F90](#)]

また、比較のため熱浴を左右2つに分割し、右に分子3個、左に分子3個という状態でシミュレーションを行った。(シミュレーション11)

[[link:src/MaxDemon11.F90](#)] , [[link:src/thpool2.f90](#)] , [[link:src/mtfort90.f90](#)]
[[link:src/MaxDemon11_eFlow.F90](#)]

その結果、いずれの場合も正負の転送回数の差異が認められた。シミュレーション10と11を比較すると、10の方が11よりも転送回数の差異が大きい。シミュレーション11にはエネルギーが循環して流れる経路が存在しないので、10の方が11よりも転送回数の差異が大きい点については納得できる。しかし、シミュレーション11の転送回数にも有意な差異が出たのは、予想に反した結果であった。

なぜシミュレーション11の転送回数にも差異が見られるのだろうか？

次の理由が考えられる。

- ・**理由1:** シミュレーションの精度が低い。
- ・**理由2:** 転送回数に差があったとしても、それが必ずしもエネルギーの流れに直結していない。つまり空回りしている。
- ・**理由3:** シミュレーション時間が十分ではなく、まだ平衡状態に達していない。

■ 理由1: の検証

同じシミュレーションを倍精度で実施したが、結果は単精度と比べて大差なかった。(シミュレーション9までの結果は単精度) つまり、精度不足が理由ではなかった。

■ 理由2: の検証

一方向のエネルギーの流れが生じているかどうかを確かめるため、壁と熱浴の間で受け渡されたエネルギーの値を調べた。シミュレーション10では予想通り、左右の壁で受け渡されたエネルギーの符号が逆(プラスとマイナス)であった。つまり、1方向のエネルギーの流れが生じていた。

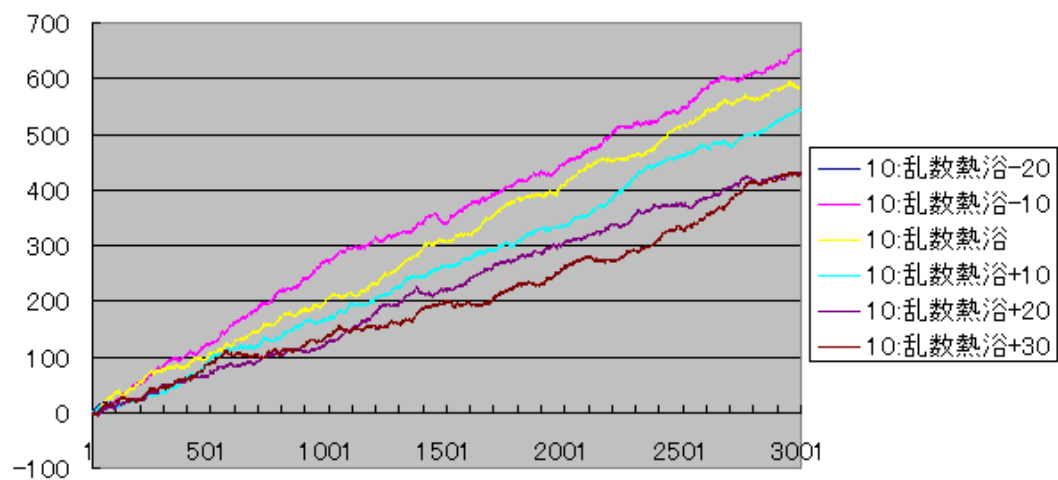
一方、シミュレーション11では、左右の壁で受け渡されたエネルギーにはっきりとした差異は見られなかった。シミュレーション11では、転送回数の差異はあるのだが、エネルギーの流れは生じていない。ということで、理由2: は成り立っていたのである。

■ 理由3: の検証

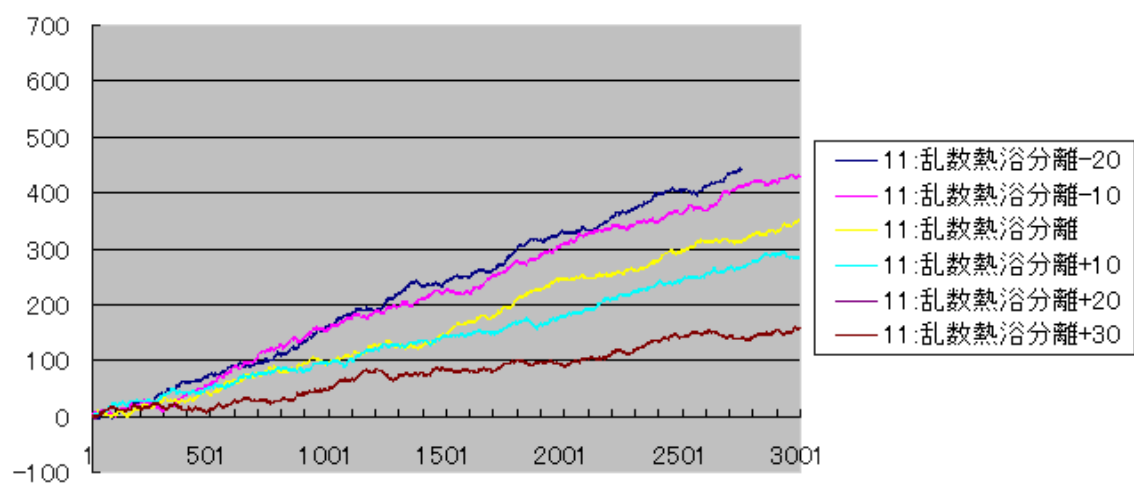
熱浴の大きさをもっと小さくすれば、シミュレーション11で見られた転送回数の差異は無くなるのではないか？ これを確かめるために、熱浴の大きさを変えてみたのが次のシミュレーション12、13である。

■ 結果のグラフ

シミュレーション10: 6個の分子から成る熱浴 (倍精度)



シミュレーション11: 右3個+左3個の分子から成る熱浴 (倍精度)



シミュレーション 12 & 13 : 熱浴の大きさを変えてみる

2007/12/20

先のシミュレーション10、11と同様のシミュレーションを、熱浴の大きさを分子4個(又は左右2個ずつ)に変えて実施した。(シミュレーション12と13)

その結果、シミュレーション12では転送回数の差異が見られ、13に差異は少しだけ見られた。

さらに、熱浴の大きさを、分子2個(又は左右1個ずつ)に変えてシミュレーションを実施した。
結果は分子4個の場合とほぼ同様だった。

まとめると、

		熱浴は一続き		熱浴は左右に分割	
	分子6個 (又は左右3個ずつ)		シミュレーション10		シミュレーション11
	分子4個 (又は左右2個ずつ)		シミュレーション12_N4		シミュレーション13_N2
	分子2個 (又は左右1個ずつ)		シミュレーション12		シミュレーション13

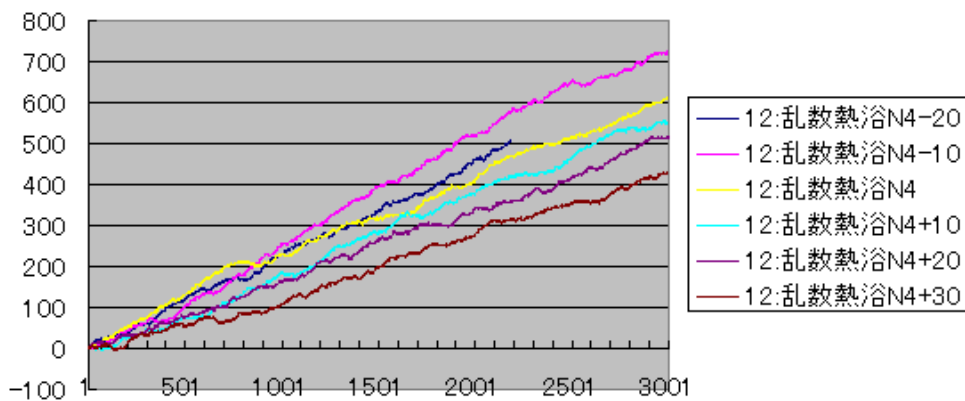
先のシミュレーション10&11と比較して、分子数が少ない方が±転送回数の差異が顕著に表れていた。

熱浴が左右別々に分かれていても、転送回数の差異は全く無くなるわけではない。これは、先の理由2:転送の「空回り」によって生じたものだろう。

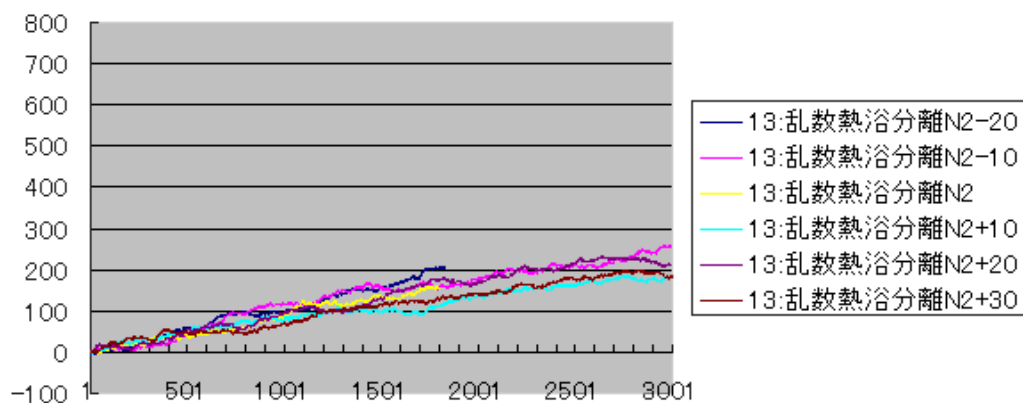
いずれの分子数の場合でも、熱浴が一続きだった場合に比べて、左右に分割されていた方が転送回数が少なくなっていた。熱浴が一続きだった場合には、いずれも一方向のエネルギーの流れが生じていた。

■ 結果のグラフ (分子4個 or 2+2個)

シミュレーション12: 4個の分子から成る熱浴

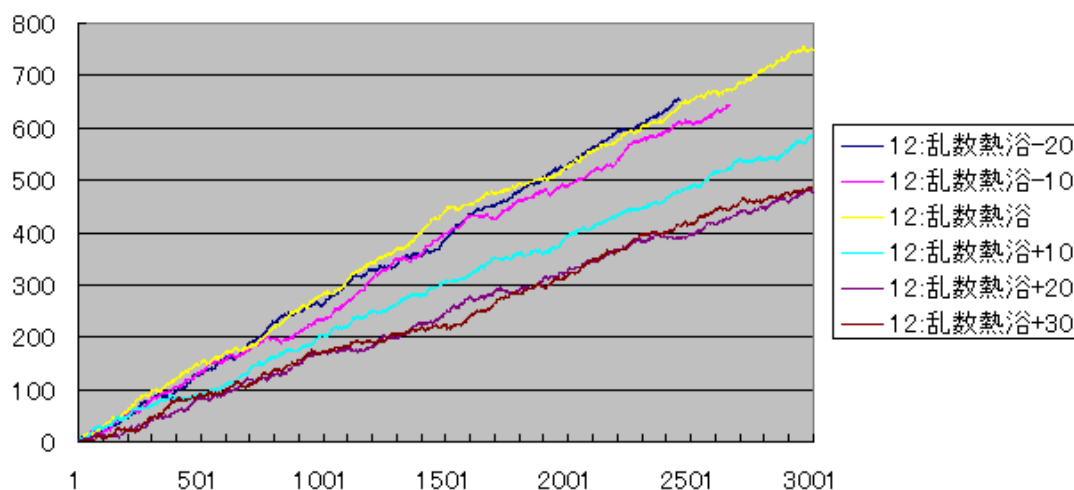


シミュレーション13: 右2個+左2個の分子から成る熱浴

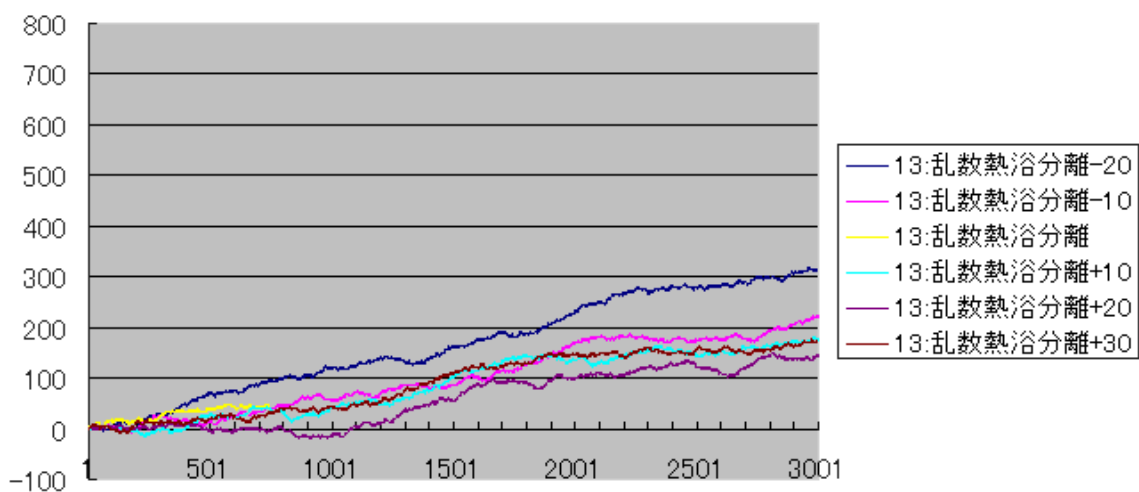


■ 結果のグラフ （分子 2 個 or 1 + 1 個）

シミュレーション12: 2個の分子から成る熱浴



シミュレーション13: 右1個+左1個の分子から成る熱浴



シミュレーション 14 : カオス振動子を丸くつないでみる

2007/12/20

乱数による熱浴ではなく、力学的な仕組みだけを組み合わせでエネルギーの流れを確認することはできないだろうか。

シミュレーション8, 9では、一次元の連成振動子を用いたが、一方向のエネルギーの流れは確認できなかった。一次元の連成振動子では、性質の良い乱数のように均一な分布を実現するのは困難であろう。

そこで、連成振動子の代わりに、カオス的な運動を行う系を用いてシミュレーションを試みた。下に示すような系を想定し、いろいろとシミュレーションを試みたのだが、いずれにおいても明確な一方向のエネルギーの流れは確認できなかった。

1. 2次元の連成振動子

連成振動子を一次元ではなく、2次元に配置する。

分子は平面上に、3角形の格子状(トラス状)に配置する。

このとき、相互作用が前後1個の分子だけでなく、前後複数個に渡って及ぶようにする。

[link:src/MaxDemon10_Caos/MaxDemon10a.F90]

[link:graph/MaxDemon10_Caos/Sim10a.png]

※ソースファイルの番号が'10'となっているのはイレギュラーな付番です。

前のシミュレーション10とは内容的には別の物です。

2. 多体問題の応用

互いに引き合う多数の分子を用意し、2つの等温壁の間に置く。

分子同士は引力によって、分子と等温壁は衝突によって、力を伝達する。

[link:src/MaxDemon10_Caos/MaxDemon10_EdgeNbody.F90]

[link:graph/MaxDemon10_Caos/Sim10_EdgeNBody.png]

3. エノンのカオスを並べる

”エノンのカオス”と呼ばれる、三角形形状のポテンシャルの中に分子を置いたものを並べる。

分子間に引力を働かせ、力の伝達を行った。

[link:src/MaxDemon10_Caos/MaxDemon10enon.F90]

[link:graph/MaxDemon10_Caos/Sim10_enon.png]

4. ばね振り子を並べる

ばねの先に質点をぶら下げた振り子を複数個用意し、一列に並べた。

それぞれの質点同士をバネで結んで力の伝達を行った。

[link:src/MaxDemon14_Spring1Light.F90] , [link:src/mtfort90.f90]

[link:graph/Sim14Spring1Light.png]

なぜ乱数による熱浴であればエネルギーは一方向に流れるのに、力学的なカオスでは一方向の流れが実現できないのだろうか？

ここで、乱数による熱浴シミュレーションとカオスシミュレーションを比較して、ある1つのプロセスの導入を試みた。それは「エネルギーを等分配する」プロセスである。

等温壁に分子が衝突したとき、分子の持つ運動エネルギーと、等温壁の持つ運動エネルギーの差が小さくなるようにエネルギーを再分配した。カオスシミュレーションでは、等温壁という1つの振動子と、分子の衝突によって、エネルギーの分配を行っていた。そこには恣意的に「エネルギーを等分配する」、「平均化する」というプロセスが組み込まれているわけではない。一方、乱数によるエネルギーの交換では、結果としてエネルギーが平均化されることになる。この差異に着目し、エネルギーを等分配するプロセスをカオスシミュレーションに組み入れたのである。

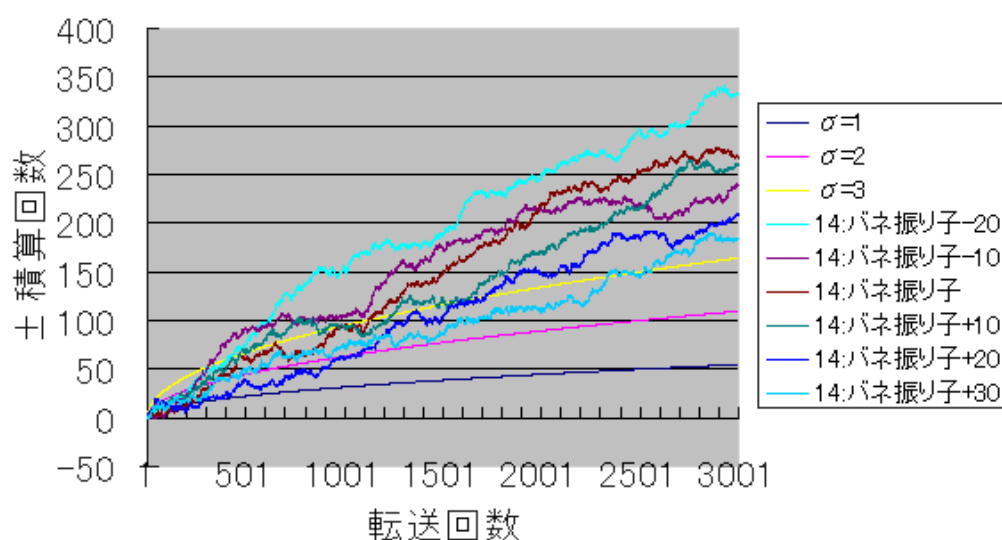
ばね振り子を並べた系に、等温壁でエネルギー等分配を行うプロセスを組み込んだシミュレーションを行った。その結果、はっきりとした一方向のエネルギーの流れが確認できた。

以上より得られる帰結は、「一方向のエネルギーの流れを作り出すには、“エネルギーを等分配する”プロセスが不可欠」ということだ。

[[link:src/MaxDemon14_Spring1Exchg1.F90](#)] , [[link:src/mtfort90.f90](#)]

■ 結果のグラフ

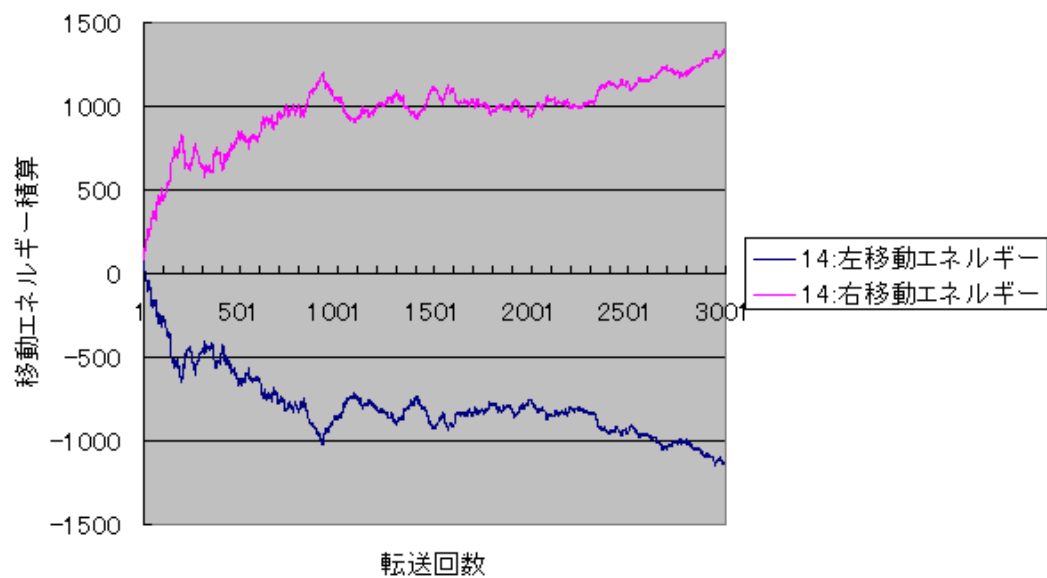
バネ振り子振動子



($\sigma=1$ 、 $\sigma=2$ 、 $\sigma=3$ のグラフは、転送回数が有意かどうかの判断基準として付け加えた補助的な線)

■ 左右の端でのエネルギー移動の様子

ワープゾーンの偏り無し (上のグラフで“14:バネ振り子” 茶色の線に対応する)



エネルギーが左側から流入し、右側に流出していることがわかる。
開始から1000回目付近までの積算値の変化は、それ以降に比べて急になっている。これは、初期の状態から定常的な状態に至るまでの緩和過程が含まれているからであろう。1000回目以降の積算値の変化は緩やかになるが、止まってはいない。

■ シミュレーション1～2:

ボールと隔壁の運動を調べた。
隔壁は中央付近にある確率が高い。

■ シミュレーション3:

断熱条件、正負の転送回数は等しい。

■ シミュレーション4:

等温条件、正負の転送回数に差異が認められる。
そこには左右非対称なエネルギーの流れが生じていた。

■ シミュレーション5～6:

両端を振動子に置き換えても、転送回数には差異が認められる。
転送回数は左右の温度差(振動子の平均エネルギー)に依存する。

■ シミュレーション7:

ただし、このエネルギーの流れによって無条件に温度差が生じるわけではない。

■ シミュレーション8～9:

連成振動子を輪にして一方向のエネルギーの流れを試みた。
しかし、振動子固有の特性により、はっきりとした一方向の流れは見られなかった。

■ シミュレーション10～13:

ランダムにエネルギーを交換する熱浴につなぐと、はっきりとした転送回数の差異が見られた。

■ シミュレーション14:

カオス振動子を輪にして一方向のエネルギーの流れを試みた。
力学的な部品だけを組み合わせで一方向の流れを作ることはできなかった。
系の中に、エネルギーを等分配するプロセスを組み入れると、一方向の流れが確認できた。

シミュレーションの精度を確認しておこう。

このシミュレーションでは物体の衝突が中心だが、1回の衝突で、最大1ステップの移動量だけの誤差が生じている。つまり、100回衝突すれば、最大100ステップ分の誤差が累積する。特に、3個以上の物体が同時に衝突した場合、まず1と2を処理し、次に2と3を処理する、といった手順を踏む。試しに、隔壁に対して左右から同時にボールをぶつけてみれば、衝突後のボールの挙動は左右で全く対称にはならない。

振動子が登場するシミュレーション5以降では、振動子の運動をルンゲ・クッタ法によって積算している。断熱条件下では、シミュレーション全体でのエネルギーは保存するはずだ。シミュレーション7および8について、全エネルギーを表示してみた。その結果、エネルギーについては(転送回数が3000回に達するまでの全シミュレーション期間で)最大±10%の累積誤差があることがわかった。

10%もの誤差が生じたなら、決して精緻なシミュレーションとは言えない。ただ、上の結果から±10%の誤差を差し引いたとしてもなお、主たる傾向は読み取れる。90点の粗いシミュレーションではあるが、誤差に埋もれた全くのでたらめではないようだ。

もし正の転送と負の転送が全くランダムに行われたとすると、結果はどのようになるだろうか？ いわゆるランダムウォークであれば、結果は正規分布を成し、偏差はステップ数のRootとなることが知られている。シミュレーション結果がランダムかどうか判断するには、ランダムウォークの偏差を超えているかどうか1つの目安となる。一般に使われている統計的に有意といった基準はさらに高く、例えば95%=2 σ といった値を基準としている。

判定基準: $\sigma = \text{Root}(\text{試行回数}) \times 1.1$

・試行回数が1000回であれば、 $\text{Root}(1000) \times 1.1 = 35$ 回以上が目安

・試行回数が3000回であれば、 $\text{Root}(3000) \times 1.1 = 60$ 回以上が目安

有意基準: 2 σ = 上の判定基準の2倍

・試行回数が1000回であれば、70 回以上が有意

・試行回数が3000回であれば、120 回以上が有意

ところで、ひとまず棚上げにしておいたワープゾーンの可否はどうなのだろう？

そもそもワープゾーンが物理的に不可能なのだとしたら、このシミュレーション自体、物理的な意味を持たないのではないか。シミュレーションとは自由である反面、物理的に不可能なものであっても、それなりに描き出せるといった危険性を持つ。まずは「物理的に可能」であるとは何か、ここでのルールを明確にしよう。

■ 物理的なルール

- ・ルール1：ニュートンの運動法則に従う
- ・ルール2：摩擦が無い
- ・ルール3：決定的である、因果律を満たす

ルール1については問題ないだろう。

ここでのシミュレーションは古典力学に基礎を置く。

ルール2について。

なぜ摩擦が無いことをルールに入れたのか。それは、ここでのシミュレーションが極めて小さな「分子の世界」、「ナノ・テクノロジーの世界」を想定しているからだ。そもそも摩擦とは、巨視的な物体の運動が微視的な分子の熱運動に散逸する過程で生じる。ここでのシミュレーションは、もともと分子の熱運動を扱っているのだから、これ以上小さな「熱運動」は存在しない。

摩擦が無い状態は、日常的な感覚とはかなり食い違っていることに注意。例えば、このシミュレーションの世界では、ボールが「壁にぶつかって止まる」ことはない。また、「一方通行の弁やラチェット」のような仕組みは存在しない。全ての部品は可逆的に、行きも帰りもえこひいきなく、同等に動作しなければならない。

ルール3については説明が必要だろう。

「決定的である」とは、ある1つの初期状態に対して、必ず1つの結果が対応する、という意味だ。また、この逆に、ある1つの結果には、必ず1つの初期状態が対応していることも要請される。原因と結果が必ず1対1に対応すること。1つの原因から(確率的に)異なる2つの結果が導かれたり、反対に、異なる2つの初期状態から同一の結果が得られたりしてはならない。同じ条件で開始したシミュレーションは、何回行っても必ず同じ結果にたどり着かねばならない。(疑似乱数の初期値を変えない限り) また、シミュレーションの時間を反転して、結果から全く逆の過程をたどれば、もとの開始の状態に戻ることができる。

(実は、このルール3は完全に守られてはいない。詳しくは [\[link:#equ_eg\]](#))

■ ワープゾーンの存在可能性

上の3ルールを満たしつつ、ワープゾーンを構成することは可能なのだろうか。私は可能だと考えている。その理由は、ワープゾーンの動作が可逆であるからだ。もしワープゾーンが分子を「広い範囲から狭い範囲に」転送したとすれば、それは物理的に不可能であろう。熱運動する分子をより狭い領域に押し込めようとすれば、そこには必ずや外部からの自由エネルギー投入が必要となる。ところが、シミュレーションに用いたワープゾーンは「同じ大きさの範囲に」転送を行っている。転送前と転送後は1対1に、上への対応となっている。なので、転送のプロセスは必ずしも外部からの自由エネルギー投入を必要としない。転送前と転送後の状態に着目すれば、ワープゾーンが物理的なルールを満たしていることが明らかとなる。

- ・分子の運動量は変化していない
 - = エネルギーの増減がない
 - = ルール1、2:を満たす
- ・分子の「動き得る範囲」を狭めてはいない
 - = エントロピーの減少がない
 - = ルール3:を満たす

具体的なワープゾーン内部の仕組みは、かなり複雑なものとなる。そこには「完全な剛体」や「瞬時に動く物体」などの理不尽な幾つかの仮定を布くことになるだろう。なので、この場でワープゾーン内部の仕組みについて詳しくは述べない。どうしても気になる方は理論編 第2章を参照のこと。

[link:]

■ エネルギー等分配の仮定について

実は、上に掲げたルール3は、ここでのシミュレーション全体に対しては適用できない。というのは、一方向のエネルギーの流れが確認できたシミュレーションは全て、何らかの形で“エネルギーを等分配するプロセス”を含んでいるからである。

例: 速度の平均化

シミュレーションでは、ボールと振動子の衝突時に“速度の平均化”を行っている。“速度の平均化”とは、全エネルギーを一定に保ちつつ、互いの物体の速度の差を小さくする処理である。

▪ @ 速度Root(1)の分子 + 速度Root(9)の振動子 => 速度Root(5)の分子 + 速度Root(5)の振動子
 ▪ A 速度Root(4)の分子 + 速度Root(6)の振動子 => 速度Root(5)の分子 + 速度Root(5)の振動子
 この例では ▪ @、▪ Aという2つの異なる状態から、同一の結果が生じている。結果から逆に元の状態を再現できないので、ルール3は満たされていない。

“エネルギーを等分配するプロセス”は、純粋に力学的なプロセスだけから作り出すことはできない。“エネルギーを等分配するプロセス”は不可逆過程(不等式)、純粋に力学的なプロセスは可逆過程(等式)だからである。

物理的な状況を考えて場合、“エネルギーを等分配するプロセス”は理不尽な仮定ではない。高温の物体と低温の物体との間でエネルギーのやりとりを行えば、最後には等しい温度に落ち着く、というのは周知の事実であろう。このシミュレーションでは、10の何十乗といった大多数の分子を扱っているわけではないので、その代わりにエネルギー等分配の仮定を布いたのである。

純粋な力学から不可逆過程を導く、というのは統計力学上の大問題だ。そして、純粋な力学だけから不可逆過程を導くことは不可能で、統計力学では確率的な仮定を導入している。シミュレーションで用いたエネルギー等分配の仮定は、統計力学で導入されている確率的な仮定と同じ内容を含んでいるのである。

シミュレーション全体ではなく、上で問題としたワープゾーンに限って言えば、純粋に力学的なプロセスから構成できる(というのがここでの主張)。不可逆過程の導入は考慮していない。

前節で、シミュレーションが満たすべき3つの物理的なルールを挙げた。その中で、特に3個目のルールをシミュレーションは満たしているのだろうか。

・ルール3: 決定的である、因果律を満たす

1つには、シミュレーションには”エネルギーを等分配するプロセス”が含まれており、必ずしもルール3を遵守してはいない。これは前節に述べた通りだ。

他には無いだろうか。改めてシミュレーション全体を見直すと、ワープゾーンの仕掛けの中に一点、時間反転に対して非対称な箇所がある。

・一度隔壁が移動した後は、一定時間次の移動は行われない。
そうしないと、隔壁が2つのゾーン間を行ったり来たりすることになるので。

「A: 隔壁が移動した後、一定時間次の移動は行われない」

を時間反転すると、

「B: 一定時間待った後、隔壁の移動を行う」

となる。両者は必ずしも同じではない。

そこで、これまで **A:** で実行してきたワープゾーンの仕掛けを **B:** に変えてシミュレーションを試みた。具体的には、先に実施した [link:Sim05.html] を **B:** に変えて実行した。

これは多分にテクニカルな問題かもしれないが、非対称性の原因が潜んでいないかどうかの確認は必要だろう。

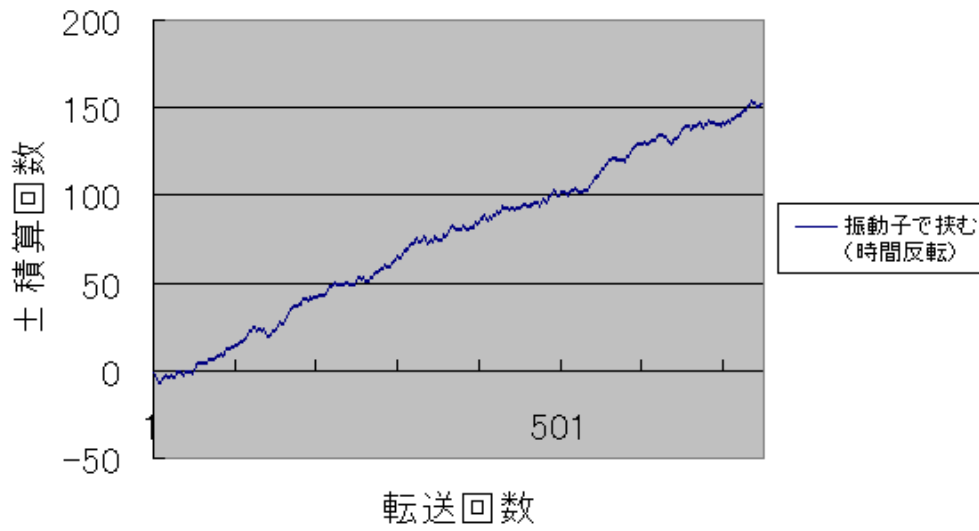
[link:src/MaxDemon05_Rev.F90]

■ 結果のグラフ

結果は、元のシミュレーション5と似通ったものとなった。

シミュレーションは、転送回数749回まで実施した。(今回のシミュレーションでは途中で無限ループに陥り、以降の結果が取れていない)

振動子で挟む(時間反転)



この結果から、少なくともワープゾーンでの一定の待ち時間が原因となって非対称性が生じているわけではないことが確認された。

これまでのシミュレーションでは、乱数に [\[link:http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/mt.html\]](http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/mt.html) を用いてきた。メルセンヌ・ツイスターは「従来にない長周期, 高次元均等分布を」持った、性質の良い乱数である。それでは、反対に、周期が短く不均等な、性質の悪い乱数を用いてシミュレーションを行ったらどうなるだろうか。

[\[link:Sim08.html\]](#)、[\[link:Sim09.html\]](#) では、連成振動子の列を用いてシミュレーションを行ったが、一方向の流れは確認できなかった。その理由は、おそらく連成振動子の列が”性質の良い乱数”になっていないからではないか。であれば、”性質の悪い”乱数を用いたならば一方向の流れが生じない、といった予想が成り立つ。

上の予想を確かめるため、[\[link:Sim12_13.html\]](#) で分子数2個のケースを、性質の悪い乱数に置き換えて実施した。性質の悪い乱数として、線形合同法による次のような乱数列R[n]を用いた。

$$R[n+1] = (R[n] \times A + B) \bmod MD$$

$$A = 9, B = 5, MD = 16$$

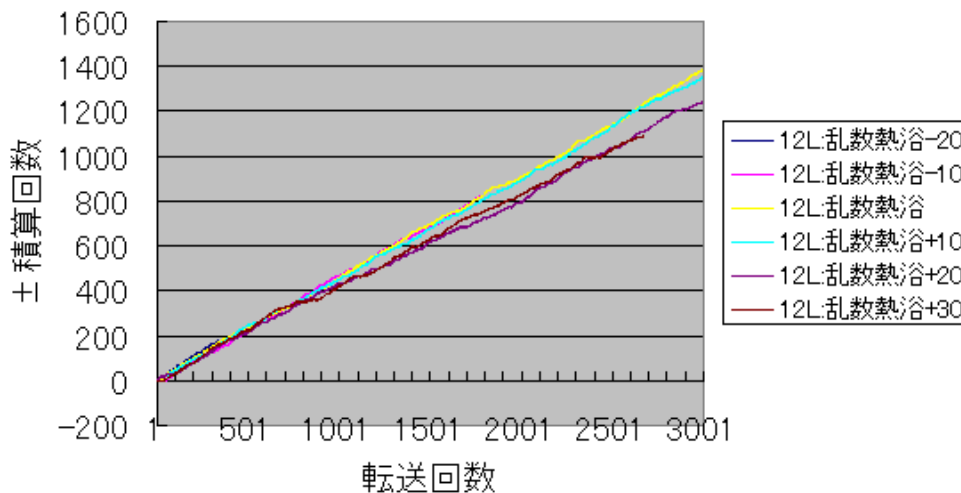
$$R[0] = 8$$

乱数列と言うより、むしろ周期的な数列に近い。

[\[link:src/MaxDemon12_lrand.F90\]](#) , [\[link:src/thpool_N2_lrand.f90\]](#) , [\[link:src/lrand.f90\]](#)

■ 結果のグラフ

性質の悪い乱数熱浴（分子数2）



結果は予想に反して、正(+)の転送が高い頻度で起こっていた。
元のシミュレーション12と比べると、グラフの揺らぎが少なく、直線的だ。
また、ワープゾーンの位置の偏りの影響が小さい(全てのグラフがほとんど重なっている)。

なぜこのような結果になったのか。乱数列の周期と、仕掛けの動作周期がたまたま一致した場合には、このように綺麗に直線的な結果が出るのだろうか。いまのところ良い説明が思い付かない。1つだけ確かなのは、乱数の善し悪しによって結果が左右される、ということだ。

さて、以上のシミュレーション結果をどのように受け止めたら良いのだろうか。

- 1: シミュレーション自体が根本的に間違っている。
- 2: シミュレーション自体は間違っていないのだが、ワープゾーンを物理的に構成することはできない。
それゆえ、ここに示すようなマックスウェルの悪魔は実在しない。
- 3: シミュレーションは基本的に正しい。
なので、ここに示すようなマックスウェルの悪魔が実在し得る！

この3者のいずれが正しいのか、私には判断が下せなかった。これを読まれた読者のご意見、ご教示を賜りたく思う。

■ シミュレーションは永久機関に成り得るか

もし「マックスウェルの悪魔＝第二種永久機関」だとしたら、いかなるシミュレーション結果であろうとも検討に値しないであろう。ここで行ったシミュレーションは、少なくとも**第二種永久機関には成り得ない**。
[link:Sim07.html] の結果が示すように、このような仕掛けによって無制限に温度差を作り出すことはできないからである。

しかし、もしシミュレーションの結果が正しいのであれば、熱揺らぎの中に一方向のエネルギーの流れを作り出せる可能性がある。つまり、実現不可能な第二種永久機関と、実現可能なマックスウェルの悪魔は別物だということになる。

第二種永久機関： 温度差を作り出す： 実現不可能
マックスウェルの悪魔： エネルギーの流れを作り出す： 実現可能

どうやら実現不可能と可能の境界は、かなり微妙な場所に位置しているようだ。
改めて今回のシミュレーションからの帰結をまとめると、次のようになる。

熱揺らぎの中に自然に(外部から自由エネルギーの供給なしに)温度差を生じることはできない。これは熱力学の教えるところである。

しかしながら、熱揺らぎの中に一方向のエネルギーの流れを作り出す方法は存在する。エネルギーの流れが円環状であれば、温度差を生じることなしに、一方向の流れを作り出すことができる。これがマックスウェルの悪魔の正体である。

■ 大胆な仮説

もちろん「こんなシミュレーションどこかが間違っている」として片付けるのは簡単だし、実際どこかに見落としがあるのかもしれない。それでも、私はシミュレーションの結果を肯定的にとらえ(そっちの方がおもしろそうだから)、考えあぐねた末、1つの大胆な仮説に思い至った。

以下に述べることは、全くの思い過ごしかもしれない。しかし、一方でそれなりの説得力もあるのではないかと、私は感じている。この思い付きをくずかごに葬り去るのは、あまりにも惜しい気がしたのである。以下の「大胆な仮説」は、心して読んで頂きたい。

「マックスウェルの悪魔」と「熱力学の第二法則」は両立する。
いかなる条件のもとで両立するのか。それは「マックスウェルの悪魔から、いつエネルギーが取り出されるのか、その時刻を予め言い当てることができない」場合である。

これまで(100年以上もの間)考えられてきた、熱力学第二法則に反するマックスウェルの悪魔は「いつエネルギーが取り出されるのか、その時刻を予め言い当てることができる」性質のものであった。
「時刻を予め言い当てることができる」マックスウェルの悪魔は、物理的に実現不可能である。

ところが「時刻を予め言い当てることができない」マックスウェルの悪魔は、熱力学第二法則に反する訳ではない。そのような「時刻が不確定な」悪魔であれば、物理的に実在する可能性がある。

あまりにも飛躍した内容に面食らったかもしれない。とにかく上記のような「大胆な仮説」を採用すれば、シミュレーションの結果は説明できてしまうのだ。

上の仮説の内容を詳しく説明するには、残念ながらかなり多くの紙面を必要とする。しかもそれは、単なる思い過ごしである可能性も高い。それでも説明を読もうという奇特な方は、[\[link:.../index_theory.html\]](#)の方を参照されたい。そんな説明を読まずとも、悪魔を否定する明確な理由をご存じの方は、考え違いを(なるべく親切に)ご指摘いただければ幸いである。

以上にて、マックスウェルの悪魔のシミュレーションを終える。

[link:../etc/refer.html#reflink] に挙げた、[link:http://www.gakushuin.ac.jp/~881791/d/0012.html#15] 上に興味深い問題が載っていました。以下に引用します。

■ 12/15/2000 (金)

一昨日の晩につくってしまった(12/14)第二種永久機関をここだけで公開！

質量 m の質点 N 個が集まってできた物体を考える。質点の間には、任意の力(通常どおり全体の並進について不変)が働いていて、この物体をひとまとめにしている。簡単のため、1次元系を考察するが、3次元への拡張は自明。

はじめ、物体の重心は、速度 V で x 正方向に動いている。物体の内部自由度は、温度 T の平衡状態にある。よって、各々の質点の速度は、この重心の速度 V に、熱運動によるゆらぎを付加した $V + v$ である。 V は共通だが、 v は質点ごとに異なる。ただし、 $|v|$ は V に比べてずっと小さいとする。

この物体が、ポテンシャル 0 の $x < 0$ の領域から、ポテンシャルの低い $x > 0$ の領域に入り、加速する状況を考える。各々の質点の感じるポテンシャルは、 $x < 0$ では 0 であり、 $x > 0$ では $-mu$ であるとする。ここで x は座標であり、 u は正の定数。

もし、内部自由度のことを考えなければ、原点を通過すると、物体のポテンシャルエネルギーは Mu だけ下がる($M = mN$ は物体の全質量)。よって、原点を通過したあとの物体の速度 V' は、エネルギー保存則

$$(M/2) V^2 + Mu = (M/2) (V')^2$$

により決まる。 (V^2) というのは、 V の二乗のこと。)よって

$$V' = (V^2 + 2u)^{(1/2)}$$

となる。

ここで、 V が非常に大きいと仮定する。よって、物体は、ポテンシャルが急激に変化する $x = 0$ という場所をきわめて短時間で通過する。時間が短ければ、質点の間に働く力の効果は小さくなる。以下では、物体が原点を通過している間の質点間の相互作用を無視する。(よって以下の結果には、質点間の相互作用による補正がつくはずだが、それは、 V を大きくすればいくらかでも小さくなる。)

初速度 $V + v$ を持っていた質点が、原点を通過した後の速度 V'' は、やはりエネルギー保存則

$$(m/2) (V+v)^2 + mu = (m/2) (V'')^2$$

より

$$V'' = ((V+v)^2 + 2u)^{(1/2)}$$

と求められる。無論、 $v = 0$ とすれば、これは上の V' に一致する。 v が V よりはるかに小さいと仮定したので、この表式を v について二次まで Taylor 展開しておこう。

$$V'' = V' + \{ V (V^2 + 2u)^{(-1/2)} \} v + \{ 2u (V^2 + 2u)^{(-3/2)} \} v^2 + O(v^3)$$

これが、 N 個の質点各々について成り立つ。原点を通過したあとの重心の速度 V_{final} は、この V'' を N 個の質点すべてについて平均すれば、求まる。 v は熱運動によってばらついているので、明らか

に、 v の平均は 0。他方、 $(m/2)v^2$ の平均が $(kT/2)$ 程度であるべしということから、 v^2 の平均は $(kT/m)^{1/2}$ 程度と知れる。よって、

$$V_{\text{final}} = V' + 2u(V^2 + 2u)^{-3/2} (kT/m)^{1/2} + O(v^3)$$

となり、最終的な重心の速度は、内部自由度を無視した場合の V' より真に大きい。 $(kT/m) = (NkT/M)$ であるから、これは別に微小な量ではないことを強調しておく。

もちろん、(磁力発電とは違って)エネルギー保存は成り立っているので、重心の速度の増加分は内部運動のエネルギーから来ている。(実際、 $T=0$ では $V_{\text{final}} = V'$ であって、内部自由度を無視した力学の答がでる。) つまり、ポテンシャルの境目(原点)を通過する際に、内部自由度の熱エネルギーの一部が重心の運動の力学的エネルギーに転換された ことになる。(これはエネルギー保存則に反しない。この系には運動量保存則は、もちろん、ない。)



ところが、ここでは、熱力学第二法則で禁止されている熱エネルギーの力学的エネルギーへの直接の変換がおこなわれている。つまり、これが正しいと、第二種永久機関ができる。よりサイクルっぽくしたければ、右図のようなポテンシャルをつくり、周期的境界条件にしておくといよい。はじめ、物体をある温度にしておき、重心にはポテンシャルの山を越えられる程度の右向き速度を与えておく。すると、山を越えるときに、上の機構が働き、物体は力学で予想される以上に加速され物体の温度が下がる。(ポテンシャルが不連続に変化するところ以外では、質点には一様な力が働くので、重心運動と内部運動は完全に分離する。重心は力学どおりの運動をし、内部自由度は新たな熱平衡に緩和するだろう。) よって、一周して出発点に戻るときには、はじめに同じ点を通ったときよりも大きな速度をもつことになる。これをくり返すことで、物体の温度が下がりきるまでは、物体は加速をつづける。サイクロトロンのようなが、静的なポテンシャルによる連続した加速であることに注意。

物体が適度に加速し、温度が下がったところで、運動エネルギーを何らかの方法で回収する。これは、最初に物体に速度を与えるのに必要なエネルギーより真に大きいから、エネルギー収支はプラスである。そのため物体の温度は下がっているが、物体を空気等の環境に接触させれば、その温度を再び上げることができる。これを繰り返せば、単一の温度の環境から熱を吸収して繰り返し仕事に変換することができる。21世紀のエネルギー問題は解決する。

同じ話で、 u を負にとると、 V'' における v^2 の項の係数は負になり、この場合は、内部自由度へのエネルギーの散逸による減速というまともな話になる。面白いことだが、 u が正の上の話が冗談であるにもかかわらず、こちらの散逸の話は、ある種のモデルで厳密化できる可能性がある。

↑ ↑ ↑ 引用ここまで ↑ ↑ ↑

こんなサイトを作っておいて言うのもなんだが、こと永久機関のうそを見破ることについては、私は少々うるさい。これまで事あるごとにあちこちの永久機関を漁っては調べてきたが、その中にあって、この「ドクター田崎エンジン」は、おそらく最強の一品ではないかと思う。

一見して、どこにうそがあるのか全く分からず、かなり考え込んだ。

・・・まさか・・・

しかし、世の中そんなに上手い話は転がっていない。考えた末、こんな答にたどりついた。

■ 直感的な説明

この問題のヒントは「二人三脚」にある。二人三脚とは、運動会で2人の足の片方ずつをはちまきで縛って走る、あの競技のことである。もし2人の歩調がぴったり一致していれば、二人三脚の速さは1人で走った場合と変わらないはずだろう。しかし、実際には歩調が一致せず、必ず一方が他方の足を引っ張ってしまう。

これと似たような話が、熱振動する分子についても言える。もし分子が1個だけだったなら、問題の説明通り、ポテンシャルの落下地点で{振動エネルギー → 並進運動エネルギー}の変換が行われるだろう。

それでは、2個の分子が「二人三脚」のようにつながったまま、ポテンシャルの落下を行ったらどうなるか。もし2個の分子の「足並み」がぴったりとそろっていれば、つまり、振動の位相がぴったり一致していれば、1分子と同じように{振動 → 並進}の変換が行われる。しかし、もし足並みがそろっていなかったなら、つまり、振動の位相がずれていたならば、2個の分子の加速が異なるため、一方が他方の足を引っ張ることになる。振動の位相がずれていたなら、振動エネルギーは必ずしも全て並進運動に転じるわけではない。同時に、一方の振動子から、他方の振動子へのエネルギー移動も起こる。なので、振動エネルギーが一方的に減少し、並進運動が一方的に増大するということにはならない。

さらに分子数を増やして、二人三脚ではなく、三人四脚、五人六脚、、、と増やしていったらどうなるか。実際に1クラス10数人ほどの人数で競争しているのを見たことがある。この人数になると、いかに足並みをそろえるかが重要になってくる。お互いに声をかけあって「イチ、ニ、イチ、ニ」で歩を運ばないと、前進することすらままならない。

同じことが分子でも起こる。位相のそろっていない多数の分子がポテンシャルの落下を行えば、エネルギーの大半はお互いの振動間のやりとりに費やされてしまい、ほとんど並進に回ってこない。なので、多数の分子から成る物体の熱振動が「そろいもそろって」並進エネルギーに転ずることはほとんどあり得ないのである。

ここで、もし全ての分子の「足並みがそろっていたら」、つまり振動の位相が一致していたらどうなるか。その場合には、例外的にポテンシャルの落下によって振動エネルギーを並進エネルギーに変換することができる。足並みがそろっていた場合に限り、エネルギーの取り出しが可能なのである。

それではもし仮に、多数の分子の「足を縛ることなしに」互いに独立したまま、ポテンシャルの落下を行ったらどうなるか。この場合には「足の速い分子と遅い分子」が出ることになる。つまり、分子が拡散する。拡散した分子を1つに集めようとすれば、それは熱運動する気体分子を圧縮することになるから、自由エネルギーの消費が避けられない。なので、個々の分子をばらばらに落下させることによって、並進エネルギーを取り出すことはできない。

この問題のポイントは「多数の分子の」「位相がバラバラなこと」にある。1個の分子だけを扱う限りにおいては、矛盾は見えてこないし、事実、矛盾はない。例えばレーザー光線は、波長と位相がぴったり一致した光のことである。位相が一致している状態は、ばらばらな状態よりも「利用価値が高い」。すなわちエントロピーが小さい。てんでんバラバラに運動する「利用価値の低い」分子集団から、利用可能な並進エネルギーを取り出すことはできないのである。

■ シミュレーション

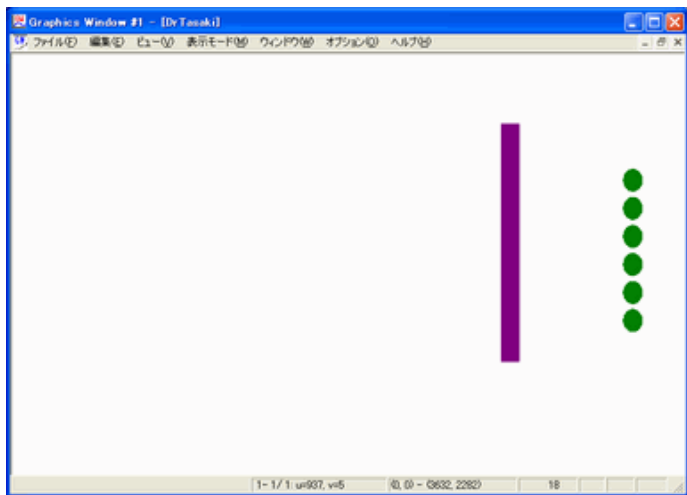
直感的なたとえ話ではなく、まともな計算で答を示すのは、かなり難しい。

そこで、計算の代わりにパソコン上のシミュレーションで動作を確かめてみた。

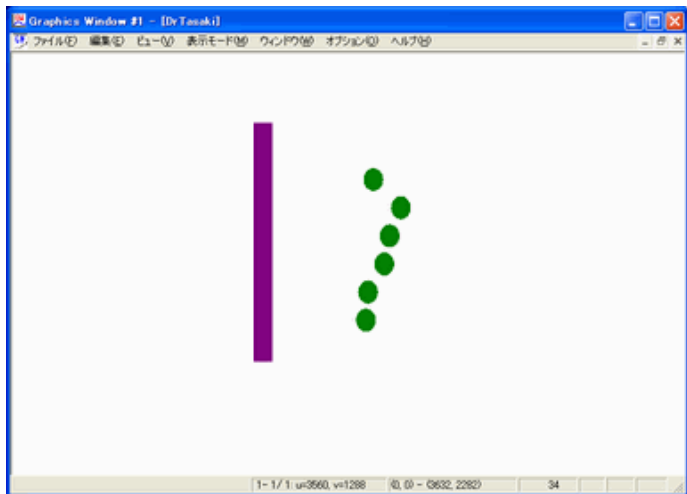
(シミュレーションの動作に必要なソフトは [\[link:/Prepare.html\]](http://link:/Prepare.html) を参照のこと。)

[link:src/DrTasaki.F90]

一枚の大きな板に6個の振動子(ばね+質点)が付いた物体を想定した。



全ての振動子の位相がそろっている場合、物体は落下の度に加速して、画面右の方へ移動する。



位相がそろっていなかった場合、落下を繰り返しても、物体は左右どちらにも移動しない。
なので、振動エネルギーが一方向的に並進運動エネルギーに変換されないことが確認できた。