覆水は本当に盆に返らないのか?

森田憲一

(広島大学・名誉教授)

く0> はじめに

「可逆的なコンピュータ」という題名のエッセイを「明日への休憩室」に寄稿したのはもう3年以上前になります[8]。そのときに、可逆性と密接な関係にある「エントロピー」についての話を1年後ぐらいに書きますと編集部に約束したのですが、これまで果たせていませんでした。今回、遅ればせながらこの話題について述べたいと思います。しかし、エントロピーの話を大々的にし始めると非常に長くなりますし、教科書や啓蒙書に書いてあるような内容と同じようなことを述べても仕方がありません。そこで、ここでは話題をしぼり、「ロシュミットのパラドックス」と呼ばれる、エントロピーに関連するパラドックスを中心に述べることにします。特に、この問題を通して、表題に書いたような疑問点を素朴な視点から考察してみます。また、コンピュータ科学でよく用いられるセル・オートマトンと呼ぶ時空間モデルを使ってこの問題を眺めるという試みもします。

<1> 散らかった部屋はエントロピーが高いのか?

「エントロピー」は理解が難しい概念です。「温度」であれば、温度計を見れば 値が分かりますし、体でも寒暖を感じとれますから、(本当に理解しているかはさ ておき)理解したような気になります。けれども、エントロピーはそうはいきません。エントロピーの正確な定義は、クラウジウスをはじめ、ボルツマン、ギブズ、フォン・ノイマン、シャノン、といった錚々たる研究者によって種々与えられていますが、どれも説明するのに骨が折れます。そのため、本エッセイではこれらの定義を一つ一つ詳しく解説することはしません。但し、ボルツマンの定義については後で言及します。ここではまず、巷に流布している「いい加減な説明」(正確な定義ではないという意味で「いい加減」です)で、多少分かったような気にさせてくれるものを取り上げます。それは、

「エントロピーは無秩序さ(disorder)の度合いである」

です。この説明はある程度当たっているのですが、誤解も招きます。これによると、整然としたものはエントロピーが低く、無秩序(乱雑)なものはエントロピーが高いということになります。もちろん、整然としているとか無秩序であるとかがどんなことかを定めないと話が進まないのですが、整理整頓された部屋と、いろんなものが散らかって混沌とした部屋を思い浮かべると、何となく違いが分かった気にはなります。しかしこれをもとに「散らかった部屋はエントロピーが高い」と言うのは誤りです。誤りの理由は今後少しずつ分かるでしょう。

<2> 太公望によるエントロピー増大則

エントロピーに関する啓蒙書などにときどき現れることわざに「覆水盆に返らず」があります。別れた元妻から復縁を迫られた太公望がそれを断るために言った

という故事によるものだそうです。このことわざは、盆(日本でいう鉢のようなもの)から床にこぼれた水をもとに戻すのは不可能だという「不可逆性」を主張しています。太公望は、元妻との離縁はこれと同様に不可逆な過程であり、もとに戻せないと言いたいのでした。

熱力学の第二法則によれば、不可逆な変化が生じた系のエントロピーは増大します。また、エントロピーが減少することはありません。「覆水盆に返らず」の場合、エントロピーをどのように見積もればよいかは明確ではありませんが、先ほどいい加減な説明として与えた「無秩序さ」を尺度にとれば、こぼれたあとの水の方が広く散らばっているでしょうから、エントロピーが増大していると言えなくはなさそうです。

しかしながら、本エッセイの目的は、熱力学の第二法則を上記のようなあやふやな議論で理解しようというのではありません。太公望は水を盆から床にこぼすという過程が不可逆過程であると主張しましたが、彼の言うことが果たして正しいのか疑ってみようというのです。つまり覆水を自動的に盆に戻すことはできないのか、ということです。

く3> ロシュミットのパラドックス

ロシュミット(Johann Josef Loschmidt, 1821-1895) はオーストリアの化学、物理学者であった人物です。ボルツマン(Ludwig Eduard Boltzmann, 1844-1906) とも親交がありました。ボルツマンが統計力学の枠組みの中で熱力学の第二法則、つ

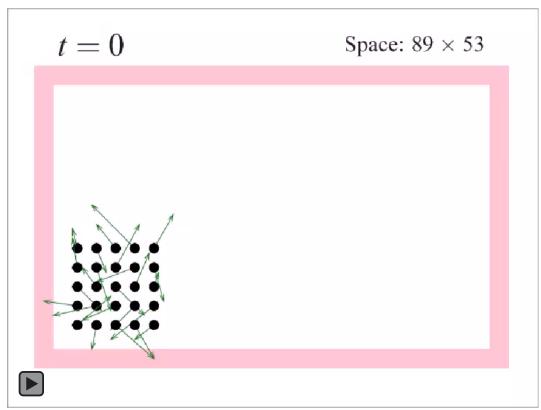
まりエントロピー増大則を証明しようとしていたとき、ロシュミットは、可逆性のパラドックスとも呼ばれる、次のような思考実験に基づくパラドックスを提起しました。ここではそれを少し単純化した形で述べます。

まず、気体を入れる箱(密閉できる容器)を用意します。その箱の中に扉付きの小箱を置いて固定します。気体分子どうし、および気体分子と箱の壁の衝突は弾性的だと仮定します。従って分子の運動は、時間の負方向にも正方向と同じ物理法則が成り立ち、その意味で可逆的です。小箱の扉は最初閉めておきます。その中に適当な量の気体を入れれば準備完了です。さて、時刻 t=0 で小箱の扉を開けます。そうすると、気体分子は小箱の外に出て行き、大きい方の箱全体に散らばります。十分に時間が経過し、平衡状態になったころ(時刻 to とします)に、全ての気体分子の進行方向を反転、つまり速度ベクトルを反転させます。そうすると、各気体分子はそれまでに来た道を逆にたどります。そして時刻2toでは時刻0と全く同じ位置に戻り、全ての分子が小箱の中に収まります。

この過程でのエントロピーの変化はどうなるでしょうか。エントロピーを、先に述べた「無秩序さの度合い」ととらえるならば、時刻 t₀ におけるエントロピーは、時刻 0 のエントロピーよりも大きく、エントロピー増大則が成り立っているようです。しかし、時刻 t₀ から時刻 2t₀ への遷移では逆にエントロピーが減少しているように見えます。

このような過程を視覚化するために、コンピュータによる簡単なシミュレータを 作ってみました。動画 1 にそれを示します。上記の思考実験をさらに簡単化してあ

りますが、本質的な点は伝えられていると思います。ここでは 89×53 のサイズの 2次元の箱を用意します。小箱は描いていませんが、左下隅にあったと仮定してい ます。その中に25個の粒子を整然と配置し、初速度をでたらめに与えます。そし て、t=0 において(小箱の扉を開く代わりに)小箱の壁が全部消失したと考えま す。各粒子の速度ベクトル(u, v)は、動画では矢印で表現されています。粒子は 箱の中を摩擦なしに運動します。ある粒子が時刻 t に座標(x, y) にあったとす ると、時刻 t+1 にはその粒子は座標(x+u, y+v)に到達します。但し、箱の壁に 当たると反射します。反射は弾性的であり、反射の前後で速度の各成分の絶対値が 一定に保たれるとしています。なお、簡単化のため、粒子どうしの相互作用はない としています。さて、時刻を 0 から進めてみると、粒子が箱全体に散らばってい くのが動画から見て取れます。時刻 t=100 において一旦停止し、全粒子の速度べ クトルを反転して再度動かします。そうすると、各粒子はもと来た経路を逆に進 み、時刻 t=200 では、t=0 と同じ配置に戻ります。このように、微視的な物理法 則が可逆的だと、無秩序な粒子の配置で、それから整然とした配置に遷移するもの も存在するということです。



動画 1. ロシュミットのパラドックス

<4> ロシュミットのパラドックスは実用的

ロシュミットのパラドックスのような現象は、前節に述べたように、コンピュータ・シミュレーションなら簡単に見せられますが、実際に起こるか否かは大問題です。このパラドックスに対する反論としてまず考えられるのは、多数の気体分子の運動方向を同時かつ瞬時に反転させるのはそもそも不可能だという主張です。不可能性の証明も難しいのですが、反転させるのは実際問題としてきわめて困難です。従って、そのような実験を本物の分子を使ってやって見せることはできそうにありません。

しかし、運動する気体分子ではなく、原子核を構成する陽子のスピンの場合に はこれが実際に起こることがハーン[3] によって示されています。これは、スピ ン・エコーとかハーン・エコーと呼ばれています。これについては筆者は詳しくないので、詳細は文献 [3,7,9] などを参照していただきたいのですが、概要は次の通りです。最初は多数の陽子のスピンの向きがそろった状態から始めますが、系にかけられた磁場の不均一さのためにスピンの向きがだんだんバラバラに(つまり無秩序に)なってきます。そこで、ある時間 to 経過後にマイクロ波パルスによってすべてのスピンの向きを反転してやると、それまでの過程を逆にたどり、2to 時間後には再びすべてのスピンがそろった状態になるということです。単にこのようなことが起こるというだけでなく、NMR や MRI ではこのスピン・エコー法が実用上欠かせない存在になっているそうです。

ロシュミット・パラドックスの応用は今のところ多くはありませんが、量子コンピューティングや可逆コンピューティングの理論では、計算中に生じた不要な情報を可逆的に消去するために、この考え方が使われます。計算の最終結果以外の不要な情報は、メモ用紙への走り書きのようなもので、最終結果が出てしまえばゴミ情報、つまり無秩序な情報になってしまいます。このとき、メモ用紙を単純に捨てるとゴミ箱にゴミがたまる一方ですので、計算過程を逆にたどる「逆計算」によってクリーンな情報に変え、メモ用紙を再利用するという算段です。

「パラドックス」というのは元来、理論などの欠陥を指摘するために、その理論から帰結される事実をもとに矛盾を導くことをいうのですが、ロシュミットのパラドックスは、今や実用上の役に立っているのですから、「ロシュミット効果」と言うべきかもしれません。このようなことは、量子力学の理論の欠陥を指摘す

るために、アインシュタイン(E)、ポドルスキー(P)、ローゼン(R)の3人が提起した「EPRパラドックス」[1] においてもありました。詳しい説明はここではしませんが、ある場所での量子状態の観測結果が瞬時に(光速より早く)そこから離れた場所に伝わるという「EPR 効果」は、現在では量子通信や量子暗号になくてはならないものになっています。

<5> 離散的な時空間モデルであるセル・オートマトン

ここで、エントロピーの話から横道にそれて、セル・オートマトンの話をしま す。次節ではそれを用いてロシュミットのパラドックスを再考します。

セル・オートマトンというのは、時間、空間、状態がすべて離散的な値をとるような動的なシステムのモデルです。このように述べるよりは、わかりやすい具体例である Game of Life (GoL) [2] を用いて説明しましょう。これは昔、サイエンティフィック・アメリカン誌の数学ゲーム欄に掲載され、話題になったもので、現在でも愛好家が多数います。日本ではライフ・ゲームとよばれていますので、ここでもそう呼びます。

ライフ・ゲームでは図1のように碁盤目に区切られた空間を考えます。各々のます目をセルと呼び、「生きている状態」(●で表示)と、「死んでいる状態」(空白で表示)の2状態のいずれかをとります。時刻 t+1 の各セルの状態は、時刻t におけるそのセルの状態と、その周囲にある8個のセルの状態に依存して次のように決まります。

誕生規則: 周囲8個のセルの内ちょうど3個が生きている状態のとき誕生

生存規則: 周囲8個のセルの内2個または3個が生きている状態のとき生存 誕生とは、時刻tにおいて死んでいる状態のセルがt+1において生きた状態にな ることを、生存とは時刻tにおいて生きている状態のセルがt+1においても生き た状態を保つことを言います。この規則を全セルに一斉に適用して次の時刻の状態を求めます。

ライフ・ゲームは状態遷移規則が単純であるにも関わらず、興味深い現象が現れるセル・オートマトンです。例えば図1はグライダーと呼ばれる移動パターンで、これを信号として使うことで、コンピュータを構成することもできます。セル・オートマトンの汎用高速シミュレータとして Golly [6] という有名なフリー・ソフトがあるのですが、これを使うと非常に興味深いライフ・ゲーム・パターンの振舞いを多数観察できます。筆者は Golly を使って次節の可逆セル・オートマトンをシミュレートしました。

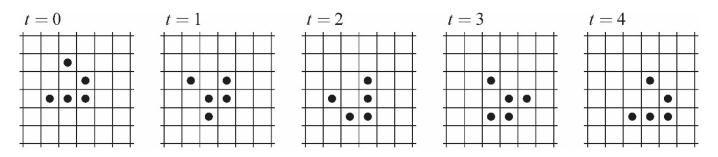


図 1. ライフ・ゲームのセル空間におけるグライダー・パターンの飛行

<6> 可逆セル・オートマトンを用いてロシュミット風の現象を発 現させる

可逆セル・オートマトンは、可逆的な物理法則に従う空間の抽象的モデルと考えられます。従って、可逆的な法則からどのような時空的現象が発現するかを調べるのに適しています。ここでは、図2のように、正三角形が並んだセル空間を考えます[5]。各正三角形はさらに3つの小三角形に分かれていて、各小三角形は粒子●が存在する状態と、しない状態のどちらかの状態をとります。このような枠組みを使う理由は詳しくは説明しませんが、可逆的な遷移規則をできるだけ簡単に与えるためです。

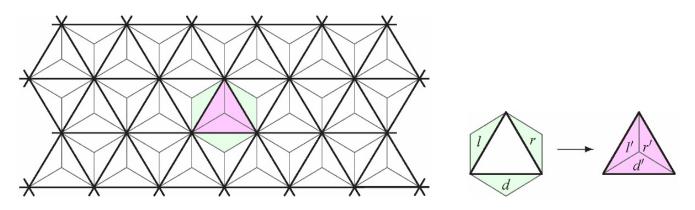


図 2. 三角形セル・オートマトンの空間(左)と、遷移規則の形式(右)

状態遷移規則の集合は、図3に示すものを使います[5]。この規則集合には 0347 という番号が付けられているのですが、この規則集合しか使いませんので以下で は番号は省略します(番号の付け方は巻末の(注1)に説明しました)。4つの規則 は、各セルの周囲において、矢印の左辺に一致する状況が生じたら、次の時刻に はそのセルを矢印の右辺の状態に書き換えるということを示します。但しここでは「回転対称性」を仮定していますので、各規則の両辺を 60 度の倍数だけ回転した規則も含まれているとします。

図3の遷移規則集合は可逆性を持ちます。というのは、右辺が一致するような 異なる2つの規則がないため、右辺から左辺への(逆の)書き換えを行うことで、 直前の時刻の状態への遷移を一意に遂行できるからです。

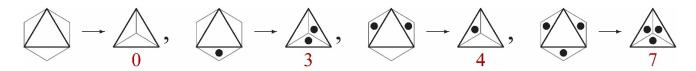


図 3. 三角形セル・オートマトン No. 0347 のための遷移規則集合

このセル空間は、遷移規則集合が図3のように極度に単純かつ可逆でありながら、ライフ・ゲームと同様、興味深い振舞いをするパターンが種々存在します。図4はグライダーとよぶ移動パターンです。図3の規則がどのように使われて図4のようなパターンの変化が生じるかは巻末の(注2)に説明しました。

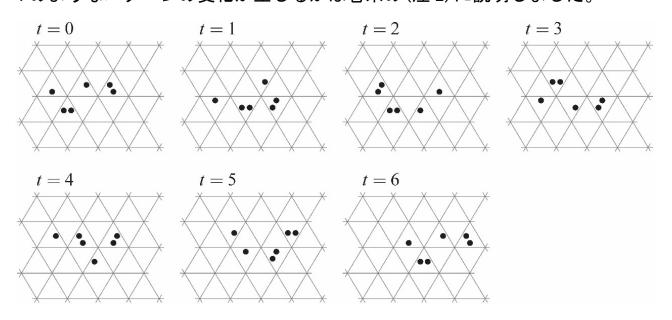


図 4. 三角形可逆セル・オートマトンにおけるグライダー・パターン[5]

筆者は、グライダーなどを用いて計算機の理論モデルであるチューリング機械がこのセル空間に構成できることを示したのですが、それについてはここでは述べません。興味をお持ちの方は文献 [4, 5] をご参照ください。

ロシュミット・パラドックスに関係があるのは、図5のパターンです。時刻 t=0 に1つの粒子だけからなるパターンを置くと、その後、乱雑に見えるパターンが現れ、その後無際限に大きくなります。実はこのセル・オートマトンではこのように乱雑なパターンが現れて大きくなるような初期パターンが多く、周期的なパターンや安定なパターンは少ないのです。計算機をシミュレートするといったような、意味のあることができるパターンはカオスのすき間に存在するということです。

可逆セル・オートマトンでは時刻 0 より過去のパターンを求めるのも容易です。ここでは時刻が -300 のパターンを求め、それがその後どのように時間変化するかを Golly でシミュレートしました。それが動画 2 です。この動画から、最初は乱雑であったパターンが次第に収縮し、時刻 0 で 1 点だけからなるパターンになった後、再び乱雑なパターンが現れ大きくなっていく様子が見て取れます。これはあたかも、エントロピーがどんどん小さくなった後、時刻 0 を境として、その後はエントロピーがどんどん増加するように見えます。しかし、そのように言ってもよいのでしょうか?

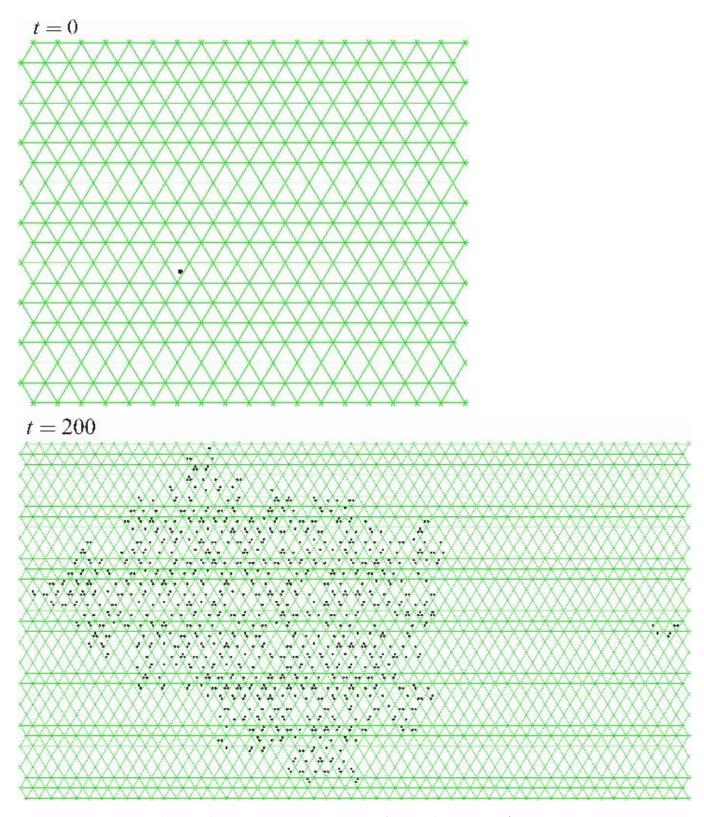
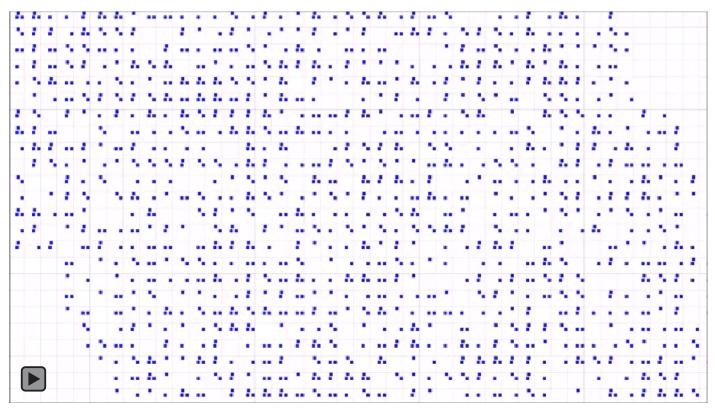


図 5. 粒子 1 個のパターン(t=0) から乱雑なパターンが生まれる(t=200)



動画 2. 三角形可逆セル・オートマトンにおいて発現するロシュミット風の現象

<7> ディジタル・ミルクコーヒー

エントロピー増大則は、どういうときに成り立つのでしょうか。コーヒーにミルクを入れて混ぜると乱雑さが増す、つまりエントロピーが増大するという話は啓蒙書によく出てきます。そのため容易にはミルクとコーヒーを分離できません。直観的にはその通りのように思われます。しかし、他方では乱雑さが減少する例もあります。先に述べたロシュミットのパラドックスがそうであり、スピン・エコー効果はそれに相当することが実際に起こることを示しています。このように、エントロピー増大則が成り立つと思われる場合と、成り立たないと思われる場合の両方があり、混乱してしまいます。

このような混乱が生じた原因は、第1節で考えた

「エントロピーは無秩序さ(disorder)の度合いである」

という説明を誤解していることによります。これよりも

「エントロピーは不確かさ(uncertainty)の度合いである」

の方が誤解が生じにくくてよいと思います。これを正確に述べたのが次節で示す ボルツマンの定義です。この説明には、「微視的状態」と「巨視的状態」の概念が 必要です。

ここでは、ミルクとコーヒーの混ざり方を非常に単純化した「ディジタル・ミルクコーヒー」のモデルでこれらを説明します。図 6 は微視的状態です。コーヒーカップは合計 8 個のセルを持つと仮定します。各セルには 1 個の(抽象化された)ミルク粒子○、またはコーヒー粒子●を入れることができます。最初はカップが中央で仕切られていて、左側に 4 つのミルク粒子、右側に 4 つのコーヒー粒子が入っています。従って、粒子の配置は図 6 (a)に示す 1 通りしかありません。次に、中央の仕切りをとってかき混ぜます。そうすると粒子の位置が入れ替わり、例えば図 6 (b1) や図 6 (b2) のような配置になります。但し、位置が変化する規則(ダイナミクス)についてはここでは記述しません。配置の総数は &C4 = 70 通りあります。しかし、カップをのぞき込んでも普通は粒子の配置までは見えず、図 7 のように見えます。これが巨視的状態です。

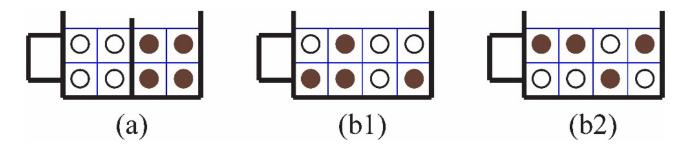


図 6. ディジタル・ミルクコーヒーの微視的状態。(a) 混ぜる前の状態。

(b1) 混ぜた後の状態の例 1。(b2) 混ぜた後の状態の例 2。

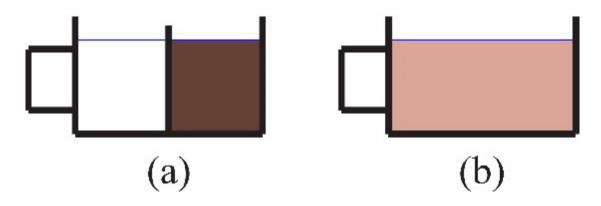


図 7. ディジタル・ミルクコーヒーの巨視的状態。(a) 混ぜる前の状態。

(b) 混ぜた後の状態。

巨視的状態というのは「粗視化」つまり粗っぽく見ることによって得られる状態です。図 7(a) の巨視的状態は図 6(a)の微視的状態 1 つに対応しますが、図 7(b) は図 6(b1), (b2) などを含む 70 個の微視的状態に対応します。もし巨視的状態しか観測できないとすると、70 の内のどれになったのかが分からず、不確かさが増します。これこそがエントロピーの増大に対応します。

もしかき混ぜ方が(微視的な物理法則のように)厳格に定められた決定的な手順だとすれば、図 6(a)から開始し、ある時間後に例えば図 6(b1)に遷移すること

が確定します。さらに、このかき混ぜ手順(物理法則)が可逆的であれば、図 6(b1)から遷移を逆にたどって図 6(a)に戻ることができます。しかし、かき混ぜ後に巨視的状態である図 7(b)しか観測できないのであれば、実際に生じている微視的状態が図 6(b1)なのか、(b2)なのか、その他なのかが決まりません。もし図 6(b1)以外のものだと推定したならば、そこから遷移を逆にたどっても図 6(a)に到達できません。これが可逆的な物理法則からでも不可逆な現象が生じ得る原因です。

結局、エントロピーの概念が必要になるのは、巨視的状態の導入つまり粗視化が不可欠な場合です。このときには、微視的に可逆的な物理法則からでも巨視的レベルで不可逆な現象が生じ得るということです。

く8> ボルツマンの墓

ウィーンにあるボルツマンの墓には、彼の与えた $S = k \ln W$ というエントロピーの公式が刻まれているそうです。ここで、Sは巨視的状態のエントロピー、kはボルツマン定数、 $\ln k$ は自然対数、kは巨視的状態に対応する微視的状態の数です。これによると、図 P(a) の巨視的状態のエントロピーは P(a) をすることでエントロピーは P(a) をなります。従って、このディジタル・ミルクコーヒーは混ぜることでエントロピーが P(a) に P(a) が P(a) に P(a) が P(a) に P(a) が P(a) に P(a) が P(a) に P(a) に

気体の場合には、気体を構成しているすべての分子の位置と速度を記述することによって与えられる状態が微視的状態です。一方、温度、体積、圧力などによって記述されるような状態が巨視的状態です。ロシュミットのパラドックスの場

合には気体の微視的状態だけに注目していたと考えてよく、従って常にエントロピーは 0 となり、結局エントロピーの概念は不要となります。この場合には、平衡状態になったと考えられる時刻 to での分子の配置が見かけ上無秩序になったとしても、不確かさなくその配置を特定できるならば、原理的には時刻 0 の整然とした配置に戻せるということです。

図 5 や動画 2 に示した可逆セル・オートマトンでも、考察対象は微視的状態だけですから不確実さはなく、エントロピーは常に 0 です(エントロピーの概念には用がないと言う方が正しいですが)。

ボルツマンは、エントロピーをこのように不確実さの尺度として定義しました。これはシャノンの情報理論におけるエントロピーでも受け継がれています。

<9> 結局、覆水は盆に返せるのか?

太公望がこぼした水の場合には、水と床との相互作用もありますから、それも 含めた微視的状態を特定することからして極めて困難です。従って、残念ながら、 もとに戻すのは不可能でしょう。それゆえ、太公望の言うように復縁も無理です。 ロシュミットの思考実験の場合には、箱に閉じ込められた気体の微視的状態だけ を考えているのですが、ある時刻に非常に多数の分子の運動方向を反転させるの はやはり技術的に困難です。しかし、スピン・エコー効果のように、微視的状態 をうまくコントロールし、初期状態に戻すことができるような他のシステムが見 つかる可能性は大いにありますので、期待したいところです。

参考文献

- [1] Einstein, A., Podolsky, B., Rosen, N.: Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review*, 47 (10), 777-780 (1935). DOI:10.1103/PhysRev.47.777
- [2] Gardner, M.: Mathematical games: The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "life". *Scientific American*, 223 (4), 120-123 (1970).

DOI: 10.1038/scientificamerican1070-120

- [3] Hahn, E. L.: Spin echoes, *Physical Review*, 80, 580-594 (1950).

 DOI: 10.1103/PhysRev. 80.580
- [4] Morita, K.: Simple reversible triangular cellular automata,
 International Workshop for Celebration of Late Prof. Harold V. McIntosh
 Achievements, Puebla, Mexico (2017). 国際ワークショップでのビデオ講演
 (約 26 分). このファイルは次のところからダウンロードできます:
 http://ir.lib.hiroshima-u.ac.jp/00044512
- [5] Morita, K.: A universal non-conservative reversible elementary triangular partitioned cellular automaton that shows complex behavior.

 Natural Computing, 18(3), 413-428 (2019). DOI:10.1007/s11047-017-9655-9
- [6] Trevorrow, A., Rokicki, T., et al.: Golly: an open source, crossplatform application for exploring Conway's Game of Life and other

cellular automata (2005). セル・オートマトンの汎用シミュレータ. これは 次のところからダウンロードできます: http://golly.sourceforge.net [7] スピンエコー法. ウィキペディア:

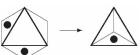
https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%B9%E3%83%94%E3%83%B3%E3%82%B8%E3%82%B3%E3%83%BC%E6%B3%95

- うまく表示されない場合は、ブラウザーの URL 入力部に、次の文字を直接入力して ください。 https://ja.wikipedia.org/wiki/スピンエコー法
- [8] 森田憲一:「可逆的なコンピュータ」サトダサイエンス・明日への休憩室 (2016).
- [9] セス・ロイド(水谷訳): 宇宙をプログラムする宇宙, 早川書房(2007).

注釈

(注 1) 図 3 の各々の遷移規則の右辺に書いてある数 0.3.4.7 は、右辺の 3 つの 小三角形のドット・パターンを2進数とみなして読んだものです(もちろんド ットを 1. 空白を 0 に対応させます)。つまり、a, b, c を 0 または 1 の数とす は、 a x 2² + b x 2¹ + c x 2⁰ という数を表すと解釈します。 (注 2) 例として、図 4 の t=1 における、上から 2 行目で右から 3 つ目のセル (上 向きで空白の三角形) に着目します。これには図3の3番目の規則の両辺を反

時計回りに 120 度回転した規則



果、この三角形セルは t=2 において、この規則の右辺の状態に遷移します。