

12. Справочник по электроснабжению промышленных предприятий: в 2-х кн. / под общ. ред. А.А. Федорова и Г.В. Сербиновского. – М.: Энергия, 1973. – Кн. 2. – 584 с.

13. Харари Ф. Теория графов / Харари Ф. – М.: Мир, 1973. – 304 с.

Проведено обґрунтування доцільності застосування теорії графів для раціоналізації структури системи електропостачання середнього класу напруги. Здійснено теоретико-практичний пошук найкоротших остовів графа. Поставлені завдання подальших досліджень.

Система електропостачання, теорія графів, найкоротший остов графа, мережа з найменшою протяжністю ліній електропередачі.

The justification of the usefulness of the graph theory to rationalize the structure of a medium-voltage power supply. Carried out theoretical and practical search shortest cores graph. Set targets for further research.

Power supply system, graph theory, the shortest skeleton graph, the network with the least length of transmission lines.

УДК 536 (075.8)

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭНТРОПИИ

***А.А. Долинский, академик, доктор технических наук
Институт технической теплофизики НАН Украины
Б.Х. Драганов, доктор технических наук
Национальный университет биоресурсов
и природопользования Украины***

На основе метода статистической физики дана общая характеристика энтропии. Проанализированы вопросы: функция распределения ансамблей; распределение Максвелла-Больцмана; распределение Бозе-Ейнштейна и Ферми-Дирака; Гамильтова теория ансамблей. Рассмотрена связь между микроскопическим поведением среды и макроскопическим законом, соотношение Больцмана и связь энтропии с вероятностью событий. Приведены основы энтропии динамических систем, информационная энтропия; энтропия эволюционных и биологических систем.

Теория ансамблей, функция распределения, информационная энтропия, энтропия флуктуации, энтропия тепловой устойчивости, энтропия эволюции жизни.

Энтропия служит мерой неравновесности, т.е. беспорядка, имеющего место во всех явлениях природы: физико-химических, технических, биологических и т.п. Установив степень генерации энтропии и, тем

самим, величину потерь энергии, определяют путь их уменьшения. Наибольшую информации энтропии дает метод, основанный на статистической физике.

Цель исследований – анализ энтропии с позиции статистической физики; приведение функциональные зависимости для энтропии: вероятностных, информационных, динамических систем; изложение основы энтропии эволюционных и биологических систем.

Материалы и методика исследований. Изучению энтропии, как меры необратимости реально протекающих явлений посвящены работы Р. Каузуса, У. Томсона, Л. Больцмана, Дж.У. Гиббса и др. Однако, заслуживает внимания всесторонний анализ ряда вопросов, характерных для энтропии (функция распределения; энтропия Колмогорова; информационная энтропия; энтропия эволюции), с позиции статистической физики.

Результаты исследования. С точки зрения статистической физики равновесное состояние соответствует максимальной хаотичности системы, т.е. состоянию, реализуемому наибольшим числом возможных микросостояний. Если система находится в равновесном состоянии, то ее макросостояние не меняется, но микроскопические переменные, характеризующие отдельные частицы, могут меняться, но так, чтобы макроскопические системы оставались неизменными.

Функция распределения – это способ конкретизации статических свойств ситуации, в которой возможны случайные события. Иными словами, функция распределения есть способ конкретизации данного макроскопического состояния системы, в которой происходят случайные события; микросостояния, дающие данное макросостояние. Функция распределения связана с энтропией соотношением Больцмана, которое записано в форме:

$$S = -k \sum_v f_v \ln f_v, \quad (1)$$

где f_v – функция распределения, представляющая собой плотность вероятности v -го квантового состояния системы. Суммирование ведется по всем допустимым квантовым состояниям.

Состояние частицы (молекулы) с определенной энергией ε_i может характеризоваться, помимо этой энергии, также и иными признаками или свойствами, проявляющимися, например, под действием каких-либо внешних полей.

Исходя из терминологии квантовой механики, в молекуле возможно существование нескольких уровней энергии g_i с одной и той же (или почти одной и той же) энергией ε_i .

Максвелловское распределение скоростей при поступательном движении молекул идеального газа вытекает как частный случай из более общего распределения молекул идеального газа по энергиям в равновесной молекулярной системе, известного как закон распределения Максвелла-Больцмана (МБ-распределение):

$$N_i = g_i e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{\Theta}} ; \quad (2)$$

$$N = \sum_i g_i e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{\Theta}} ; \quad (3)$$

$$U = \sum_i \varepsilon_i g_i e^{\frac{\mu - \varepsilon_i}{\Theta}} ; \quad (4)$$

где N_i – число молекул, обладающих энергией ε_i ; N – общее число молекул; Θ – статистическая температура, выраженная в единицах энергии, $\Theta = kT$; μ – химический потенциал газа, отнесенный к одной молекуле – величина, заданная для газа в целом и от значения i не зависящая; g_i – кратность вырождения энергетического уровня ε_i .

МБ-распределение устанавливает важную связь между внутренней энергией идеального МБ-газа и температурой как параметра, усредняющего значение энергии по всем микросостояниям системы. Этот вывод остается справедливым и при переходе от МБ-статистики к «более правильным» квантовым статистикам Бозе-Эйнштейна (БЭ-статистика) и Ферми-Дирака (ФД-статистика).

Температура, ниже которой газ перестает подчиняться МБ-распределению и переходит к распределениям Бозе-Эйнштейна или Ферми-Дирака называется температурой вырождения газа T_B , а сам газ называется вырожденным.

В методе анализа ансамблей вместо одной системы рассматривается совокупность систем, обладающих теми же параметрами, что и заданная система, но отличных от нее по микросостоянию.

При исследовании ансамблей делается допущение, что системы ансамбля статистически независимы. Метод Гиббса заключается в том, что вместо того, чтобы следить за изменением состояния данной системы, следует представить себе множество таких систем, находящихся в различных микросостояниях, но дающих в ансамбле одно макросостояние.

Функция распределения f_v ансамбля систем представляет собой плотность вероятности не для одной системы, как это было ранее, а для ансамбля системы.

Функция f_v выражает вероятность того, что система находится в квантовом состоянии, характеризующемся квантовыми числами $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_\Phi$, где Φ – число степеней свободы каждой частицы, входящей в систему. Каждое квантовое состояние системы есть ее определенное микросостояние. Из функции распределения ансамбля Гиббса вытекает БМ-распределение для идеального газа.

Основное соотношение, связывающее функцию распределения f_v ансамбля систем с термодинамическими свойствами макросостояния, было дано Больцманом. Оно связывает энтропию системы S (а через нее и остальные параметры системы) с функцией распределения f_v посредством уравнения

$$S = -k \sum_v f_v \ln f_v \quad (5)$$

при условии

$$\sum_v f_v = 1; \quad \sum_v f_v E_v = U, \quad (6)$$

где E_v – полная энергия системы в v -ом квантовом состоянии; U – внутренняя энергия системы.

Энтропия W разных микросостояний (W – термодинамическая вероятность) системы имеет вид:

$$S = -k \sum_v \frac{1}{W} \ln \frac{1}{W} = k \ln W. \quad (7)$$

Следовательно, энтропия S системы – это мера степени беспорядка системы.

Можно сделать вывод, что общность микроскопических движений в различных средах заключается не только в том, что они всегда хаотичны, но и в том, что закон, описывающий распределение вероятностей, аналогичен для всех анализируемых тел.

В классической механике состояние системы точечных частиц принято описывать координатами q_1, \dots, q_s , и импульсами p_1, \dots, p_s . Особо важную роль играет энергия системы, записанная в этих переменных.

Обычно она имеет вид

$$H = E_k(p_1, \dots, p_s) + V_n(q_1, \dots, q_s), \quad (8)$$

где первый член зависит только от импульсов и является кинетической энергией, а второй зависит только от координат и соответствует потенциальной энергии.

Основная идея введения понятия ансамбля состоит в том, чтобы вместо одной динамической системы, как это принято в гамильтоновой системе, рассматривать множество систем, соответствующих одному и тому же гамильтониану. Гиббсовский ансамбль можно представить в виде множества точек в фазовом пространстве. Эволюцию состояния системы в функции времени принято определять с помощью функции Гамильтона $H = p(q, p)$. Отметим, что гамильтонова функция используется в классическом вариационном исчислении для представления эйлеровского уравнения движения механических систем в канонической форме.

Величины p и q удовлетворяют уравнение движения:

$$q = \frac{\partial H}{\partial p}; p = -\frac{\partial H}{\partial q}. \quad (9)$$

Введем обобщенный вектор тока в фазовом пространстве $J = (\dot{q}, \dot{p})$.

Из уравнения (8) следует, что

$$\operatorname{div} I = \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} + \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} \equiv 0, \quad (10)$$

т.е. фазовая жидкость не сжимается.

Дифференциальной формой закона сохранения числа частиц является уравнение непрерывности в фазовом пространстве:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}(Jf) = 0,$$

или, с учетом условий,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + q \frac{\partial f}{\partial q} + p \frac{\partial f}{\partial p} = 0. \quad (11)$$

Уравнение (11) называется уравнением Лиувилля. В нем компоненты тока $J = (\dot{q}, \dot{p})$ выражены как функции p, q (и, возможно, t). Следующее замечание существенное: уравнение (11) не содержит никакой другой информации, кроме той, которая следует из уравнения движения (9). Это следует из свойств уравнений в частных производных первого порядка. Решение уравнения (11) может быть записано в виде:

$$f(q, p, t) = q_0(q, p, t), \quad p_0 = p_0(q, p, t), \quad (12)$$

где связь между (q_0, p_0) и (q, p) определяется из (7), а $f_0 = f_0(q_0, p_0) = f(t=0)$ – начальное условие.

Пусть $f(q, p, t)$

$$\frac{dS[f]}{dt} = 0, \quad (13)$$

где

$$S[f] = - \int f \ln f dpdq. \quad (14)$$

Выражение (13) определяется из (14) дифференцированием:

$$\frac{dS[f]}{dt} = \int (1 - \ln f) \frac{df}{dt} dpdq. \quad (15)$$

Поскольку согласно уравнению Лиувилля $\frac{df}{dt} = 0$. Следует, что энтропия, определенная по функции распределения f не меняется со временем.

Анализируя связь между микроскопическим поведением среды и макроскопическими законами термодинамики, Больцман ввел свое знаменитое соотношение, связывающее энтропию и вероятность.

$$S = k \ln W, \quad (16)$$

где W – статическая масса состояния, описываемая функцией распределения f ; k – постоянная Больцмана. Детальное обсуждение и доведение формулы (14) были даны Еренфестом. Дальнейшее развитие различных отраслей науки (статистической физики, теории информации и др.) подтверждают ту глубину познания природы, которая заложена в формуле Больцмана.

Из информационной трактовки энтропии могут быть определены распределения статистической физики: канонические распределения Гиббса, т.е. распределения, которые соответствует максимальному значению информации.

А.Эйнштейн, применяя идею Больцмана наоборот, предложил формулу для оценки вероятности флуктуации термодинамических величин:

$$P(\Delta s) = Z e^{k/\Delta s}, \quad (17)$$

где Δs – изменение энтропии, связанное с флуктуацией относительно состояния равновесия; Z – нормированная постоянная, которая обеспечивает сумму всех вероятностей равной единице.

К вероятностным явлениям следует отнести явления флуктуации термодинамических величин, вызванные случайным движением молекул. Устойчивость термодинамического процесса, например, тепловая устойчивость также подчиняется вероятностным законам.

Для определения вероятности флуктуации необходимо получить значение изменения энтропии. В данном случае изменение энтропии определяется членами второго порядка.

Условие тепловой устойчивости состояния равновесия:

$$\frac{1}{2} \delta^2 S = -\frac{c_v (\delta T)^2}{2T^2} < 0. \quad (18)$$

Это условие требует, чтобы теплоемкость $c_v > 0$. Следует, что состояние равновесия устойчиво к тепловым флуктуациям, если теплоемкость при постоянном объеме положительна. В противном случае, т.е. теплоемкость отрицательна, система не находится в устойчивом равновесии.

Одно из существенных направлений метода энтропийного анализа относится к теории информации и вероятности, разработанной А.М. Колмогоровым, который, используя основные положения теории информации, ввел понятие энтропийной теории динамических систем,

называемую также K -энтропия, которая обозначается через h . Формальное определение типичной для различных физических ситуаций K -системы заключается в следующем: это гаммельтоновая система, в которой

$$h > 0. \quad (19)$$

Приведем основные свойства K -энтропии.

1. Энтропия h определяет скорость изменения энтропии S в динамическом процессе изменения траектории в фазовом пространстве.
2. Энтропия h , инкремент локальной неустойчивости h_0 и временных корреляций h_c являются величинами одного порядка:

$$h \sim h_0 \sim h_c. \quad (20)$$

Тем самым раскрывается физический смысл K -энтропии.

3. Энтропия h является метрическим инвариантом системы, т.е. ее величина не зависит от способа разделения фазового пространства.
4. Системы, имеющие одинаковые значения энтропии h , в определенном смысле изоморфны друг другу, то есть статистические законы движения у таких систем должны быть одинаковыми.

Понятие энтропии можно применить и к термодинамическим неравновесным состояниям, если отклонение от термодинамики равновесия невелики и можно ввести представление о локальном термодинамическом равновесии в малых, но еще макроскопических объемах. В целом энтропия неравновесной системы равна сумме энтропий ее частей, находящихся в локальном равновесии.

Термодинамика неравновесных процессов позволяет более детально исследовать процесс роста энтропии и вычислить количество энтропий, образующихся в единице времени вследствие отклонения от термодинамического равновесия.

Статистическая физика связывает энтропию с вероятностью осуществления этого макроскопического состояния системы. Энтропия определяется через логарифм статистического веса Ω приведенного равновесного состояния:

$$S = k \ln \Omega(E, N), \quad (21)$$

где $\Omega(E, N)$ – число квантомеханических уровней в узком интервале энергии ΔE вблизи значения энергии E системы из N частиц, в классической статистической физике; Ω – величина объемов в фазовом пространстве системы при заданных E и N .

Впервые связь энтропии с вероятностью состояния системы было установлено Больцманом. Эволюция замкнутой системы осуществляется в направлении наиболее вероятного распределения энергии по отдельным подсистемам. Статистическая физика рассматривает особый класс процессов – флуктуации, при которых система переходит в менее вероятное положение, и ее энтропия уменьшается. Наличие флуктуации показывает, что закон возрастания энтропии выполняется только в среднем для большого промежутка времени.

Энтропия в статистической физике тесно связана с информационной энтропией, которая является мерой неопределенности сообщений (сообщения описываются множеством величин X_1, X_2, \dots, X_n и вероятностей P_1, P_2, \dots, P_n появления этих величин в сообщении). Для определенного (дискретного) статистического распределения вероятностей P_k информационной энтропией называют величину

$$S_k = -\sum_{k=1}^n P_k \ln P_k \quad \text{при} \quad \sum_{k=1}^n P_k = 1. \quad (22)$$

$S_k = 0$, если количество из P_k равно единице, а остальные – нулю, т.е., информация достоверная, неопределенность отсутствует. Энтропия принимает наибольшее значение, когда все P_k одинаковы (неопределенность в информации максимальная). Информационная энтропия, как и термодинамическая, обладает свойством адитивности. Из вероятностной трактовки информационной энтропии могут быть выведены основы распределения статистической физики: каноническое распределение Гиббса, соответствующее максимальному значению информационной энтропии.

Энтропия эволюционных процессов. В качестве движущей силы эволюции следует рассматривать энергетическую диссипацию. Несмотря на повышение уровня организации и сложности живых систем, с течением времени происходит ускорение биологической эволюции – каждая новая ступень функциональной организации несет в себе зародыш дальнейшей эволюции.

Рассматриваемые системы являются сложноорганизованными, к тому же обладающими иерархической структурой. Это характерно также для случайных изменений, в том числе и эволюции, которые следует рассматривать как каскад дискретных эпизодов – бифуркаций, каждый из которых приводит к появлению более сложного или более абстрактного иерархического уровня в данной динамической системе.

Информация порождается не только каскадом бифуркаций, приводящих к нарушению симметрии, но и последовательными итерациями, приводящими ко все более тонкому разрешению. Именно такие флуктуации по существу и ответственны за новую информацию, порождаемую эволюционирующей иерархической системой.

Собственно синтез информации реализуется тогда, когда индивидуальным взаимодействиям элементов системы между собой и случайности их поведения можно сопоставить детерминированную однозначную величину – энтропию.

Жизнь принципиально связана с иерархическим синтезом случайностей, причем для каждой последующей ступени иерархии синтезируются свои условия, отличные от условий на предыдущих ступенях. В результате к энтропии, описывающей число возможных состояний системы на предыдущем уровне иерархии, добавляется энтропия, создаваемая новыми состояниями, которые регулируют новые условия. Поэтому возникновение жизни и ее эволюция в сторону более высоко

организованных форм есть процесс иерархического увеличения суммарной энтропии. Иерархия синтеза информации и есть эволюция жизни.

Энтропия эволюции k -го вида существа записывается так:

$$S_k = S_{k,ген} + S_{k,сам}, \quad (23)$$

где $S_{k,ген}$ – сумма меры генетической информации; $S_{k,сам}$ – мера информации о процессах самоорганизации, для которых свойства элементов системы создает величина $S_{k,ген}$.

Для живых существ, развитие которых было обусловлено селекцией, в правой части уравнения следует добавить $S_{k,сел}$ – меру информации вследствие селекционной деятельности.

Для эволюции жизни важно отношение количества генетической информации для двух последовательных ступеней иерархии синтеза информации. Назовем ценностью генетической информации число Z_k , показывающее, во сколько раз уменьшается количество информации при переходе к следующей ступени иерархии синтеза информации:

$$Z_k = S_{(k+1),ген} / S_{k,ген}. \quad (24)$$

Превышение диссипации над производством энергии, если и возможно то, как единичная случайность. Однако на этапах возникновения жизни появляется принцип развития, обеспечивающий избыточность производства энергии по сравнению с потребностями в ней. Происходящая при этом концентрация энергии используется в качестве основы для синтеза генетической информации.

Выводы

Энтропия охватывает все аспекты превращения вещества: изменения энергии, объема и химического потенциала. Следовательно, любая система в природе, живая или неживая, характеризуется энтропией. Все явления являются неравновесными, вероятностными и, вследствие этого, их необходимо исследовать с позиции статистической физики.

Список литературы

1. Абрикосов А.А. Методы квантовой теории поля в статистической физике / А.А. Абрикосов, А.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. – М.: Физмат, 1962. – 446 с.
2. Ансельм А.И. Основы статистической физики и термодинамики / А.И. Ансельм. – М.: Физмат, 1973. – 424 с.
3. Арнольд Н.И. Математические методы классической механики / А.И. Арнольд. – М.: Наука, 1974. – 431 с.
4. Atkins P.W. Physical Chemistry. – N. Y.: W. N. Freeman. 1990. – 411 ed.
5. Драганов Б.Х. Иерархические системы и эволюционные процессы / Б.Х. Драганов. // Пром. теплотехника. – 2008. – Т. 30, № 3. – С. 89 – 91.

6. Glansdorf P., Prigogine I. Thermodynamics of Structure, Stability and Fluktnations – N.Y.: Wiley, 1971.
7. Колмогоров А.Н. ДАН СССР / А.Н. Колмогоров. – М., 1958. – Т.118. – 861с.
8. Колмогоров А.Н. ДАН СССР / А. Н. Колмогоров. – М.,1959. – Т.124. – 754с.
9. Prigogine I. Etude Thermodynamique des Proceses Irreversibles. – Liege Desover, 1947.
10. Никульшин Р.К. Термодинамические основы и методы получения низких температур в холодильной и криогенной технике / Р.К. Никульшин, Т.В. Морознюк. Одесса: «Холодильная техника и технология», 1999. – 140 с.
11. Nicolis G., Prigogine I. Organization in Nohequilibrium Systems. – N.Y.: Wiley, 1977.
12. Пригожин И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до дисепативных структур / И. Пригожин, Д. Кондепуди; пер. с англ. Ю.А. Данилова и В.В. Белого. – М.: Мир, 2002. – 460 с.
13. Prigogine I., Stengers I. Order Out of Chuos. – N.Y.: Bantman 1994.
14. Salomon P., Sieniutycz T. Extended Thermodynamics Systems. – N.Y.: Tailor & Francis, 1992.

На основі методу статистичної фізики наведено загальну характеристику ентропії. Проаналізовано питання: функція розподілу ансамблів; розподіл Максвелла-Больцмана; розподіл Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака; Гамільтова теорія ансамблів. Розглянуто зв'язок між мікроскопічними поведінкою середовища і макроскопічними законом, співвідношення Больцмана і зв'язок ентропії з імовірністю подій. Наведено основи ентропії динамічних систем, інформаційна ентропія; ентропія еволюційних і біологічних систем.

Теорія ансамблів, функція розподілу, інформаційна ентропія, ентропія флуктуації, ентропія теплової стійкості, ентропія еволюції життя.

Based on the method of statistical physics, overviews of entropy. Analyzed issues: the distribution function ensembles, the Maxwell-Boltzmann distribution of Bose-Einstein's and Fermi-Dirac theory Gamiltova ensembles. The connection between the microscopic and the macroscopic behavior of the environment law, the ratio of the Boltzmann entropy and communication with the probability of events. The foundations of the entropy of dynamical systems, information entropy, entropy and evolution of biological systems.

The theory of ensembles, the distribution function, information entropy, entropy fluctuations, the entropy of thermal stability, the entropy evolution of life.