

Взаимосвязь термодинамической и информационной энтропии при описании состояний идеального газа

Аверин Г.В., Звягинцева А.В.

Донецкий национальный технический университет
 averin.gennadiy@gmail.com, anna_zv@ukr.net

Аверин Г.В., Звягинцева А.В. «Взаимосвязь термодинамической и информационной энтропии при описании состояний идеального газа». Выполнен анализ основных допущений и моделей, связанных с определением термодинамической и информационной энтропии состояний физической системы. Показаны особенности сходства и различий зависимостей для определения энтропии в обоих случаях. Предложено искать взаимосвязь информационной энтропии не со статистической энтропией в представлениях Больцмана-Планка, а с термодинамической энтропией в представлениях Клаузиуса. Сформулирован общий подход к определению разных видов энтропии, исходя из существования различных эмпирических мер для комплексной характеристики состояний физической системы и принятия гипотезы о полевом представлении области наблюдаемых состояний в многомерном пространстве свойств системы. Для общего случая получены зависимости для энтропии, исходя из описания поля эмпирической меры с помощью мультипликативных моделей относительно параметров свойств системы. На примере идеального газа и на основе существующих опытных данных установлена взаимосвязь между термодинамической и информационной энтропией и определены параметры уравнений связи для различных идеальных газов. Отмечаются некоторые направления исследований, позволяющие развить учение об энтропии применительно к системам различной природы.

Ключевые слова: термодинамическая и информационная энтропия, общая модель энтропии, идеальный газ, взаимосвязь зависимостей для определения энтропий.

Введение

*Понятие энтропии
 чудовищно абстрактно.
 А. Пуанкаре*

В современной науке применение понятия энтропии достаточно распространено [1 – 3]. Различные точки зрения о сути энтропии исходят из того, что она является: некоторой субстанцией, связанной с ходом времени; свойством, характеризующим процессы; характеристикой математической модели процесса; информационным параметром процесса. Причины роста энтропии в изолированных системах также имеют несколько трактовок. Следствием всего этого является то, что различные авторы по-разному определяют смысл энтропии – мера необратимости процессов; мера сложности системного описания объекта; мера неопределенности информации; мера разнообразия; мера хаотичности; мера структурированности и т.д. Все это говорит о том, что даже на первоначальном этапе формулировки понятий вопрос о сущности энтропии проработан явно недостаточно.

Тем не менее, расширенное представление об энтропии создает впечатление

о ее универсальности в науке. Очень часто понятие энтропии в различных науках вводится априори без должного теоретического обоснования и опытного подтверждения, что приводит к заблуждениям и ошибочным обобщениям. Так как основой любой теории является опыт, то только опытные данные отражают характер естественных процессов в природе и обществе, которые в своей массе протекают в направлении наиболее вероятных изменений. Энтропия тесно связана со вторым законом термодинамики, формулировка которого дана Больцманом в следующем виде: «Природа стремится от состояний менее вероятных к состояниям более вероятным». Все это говорит о том, что второй закон является отражением некоторого общего закона природы, который по аналогии с высказыванием Пуанкаре о законе сохранения энергии может быть образно сформулирован в виде: в природе существует «нечто» возрастающее при осуществлении процессов. Возможно, что это может быть энтропия, но изначально может быть и величина, которая более явно и непосредственно связана с опытом, например, вероятность состояния системы в естественных процессах.

Если выходить за рамки термодинамики, то видно, что применение понятия энтропии необязательно [1 – 3]. Анализ состояния множества исследований в этой области указывает на то, что природа энтропии до конца пока не ясна, так как нет однозначного мнения по этому вопросу. Исходя из этого, одной из актуальных задач современной науки является поиск связей между понятиями энтропии, принятыми в различных областях знаний и общесистемное раскрытие сущности этой величины. Отметим, что понятия энтропии наиболее проработаны в термодинамике и теории информации, несмотря на то, что они отличаются между собой. Изучить связи между термодинамической и информационной энтропией можно на основе исследования процессов изменения состояний идеального газа. Однако, для этого следует рассмотреть особенности определений энтропии, которые приняты в термодинамике и теории информации.

Термодинамическая энтропия

Фундаментальным законом в термодинамике является ее второе начало. В общем виде второе начало содержит несколько утверждений, из которых большинство имеет качественный характер. Этот закон устанавливает существование у всякой равновесной термодинамической системы однозначной функции состояния – *термодинамической энтропии*. Второе начало является обобщением данных опыта.

Содержание второго начала термодинамики невозможно определить сжатой формулировкой, так как их слишком много. В работе [4] дается анализ 18 формулировок этого закона, в работе [5] – 16 формулировок. Среди них выделим следующие наиболее распространенные изложения второго начала:

- невозможен процесс, имеющий единственным своим результатом превращение тепла в работу;
- теплота не может сама собой переходить от более холодного тела к более нагретому (Клаузиус);
- природа стремится от состояний менее вероятных к состояниям более вероятным (Больцман);
- энтропия является однозначной функцией состояния и не зависит от пути перехода системы из одного состояния в другое;
- бесконечно малое изменение количества теплоты при равновесном процессе, деленное на абсолютную температуру тела, является полным дифференциалом энтропии.

Второе начало в термодинамике допускает существенную множественность формулировок, причем в своем большинстве качественных формулировок. Именно этот факт

и приводит к вопросам, связанным с неполной ясностью в этой области, которая, в свою очередь, является следствием нечеткости понятий и явно недостаточной определенности области возможного применения этого закона.

В теории понятие энтропии и второе начало тесно связаны между собой. Второе начало накладывает запрет на осуществление многих процессов, следствием чего является то, что среди множества всех термодинамических процессов не все переходы из одного состояния системы в другие возможны. Для равновесных процессов второе начало термодинамики математически выражается уравнением энтропии:

$$ds = \frac{\delta Q}{T}, \quad (1)$$

где s – энтропия; Q – количество теплоты; T – абсолютная температура. На основе объединения первого и второго законов термодинамики формулируется основное уравнение термодинамики, которое для равновесных процессов имеет вид:

$$T \cdot ds = du + p \cdot dv + \sum_{k=1}^n P_k dz_k, \quad (2)$$

а для неравновесных процессов записывается в форме неравенства:

$$T \cdot ds \geq du + p \cdot dv + \sum_{k=1}^n P_k dz_k. \quad (3)$$

Здесь u – энергия, p – давление, v – удельный объем, P_k , z_k – соответственно, термодинамические потенциалы и координаты при наличии взаимодействия k -того рода, которое характеризует определенную форму обмена энергией.

Смысл энтропии раскрывается также в статистической физике. Одно из основных соотношений термодинамики, связывающее термодинамическую вероятность \tilde{W} с энтропией системы s , представляется в виде:

$$s = k_* \cdot \ln \tilde{W} \quad (4)$$

и имеет фундаментальное значение. Данное уравнение математически выражает второе начало в формулировке Больцмана.

Определение термодинамической вероятности состояния системы основано на целом ряде гипотез и тесно увязано с методами оценки и подсчета этой величины. Для обоснования величины \tilde{W} вводятся понятия макросостояний и микросостояний. Вероятность макросостояния (некоторого состояния системы) определяется по числу тех микросостояний, которые реализуют данное макросостояние. В состоянии равновесия системы термодинамическая вероятность достигает максимальных значений.

Обычно за термодинамическую вероятность принимают относительную вероятность $\tilde{W} = w/w_0$, указывающую во сколько раз математическая вероятность w рассматриваемого макросостояния больше, чем математическая вероятность w_0 другого стандартного макросостояния [4]. Основным принципом, позволяющим обосновать понятие термодинамической вероятности, является положение о том, что все микросостояния являются *равновероятными* со статистической точки зрения. Термодинамическая вероятность в отличие от математической вероятности всегда больше единицы ($\tilde{W} \gg 1$) и характеризуется очень большими числами.

Для подсчета термодинамической вероятности существуют разные подходы. Известны способы определения этой величины по методам Больцмана, Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака, основанные на комбинаторной статистике [4]. Например, по методу Больцмана, если в системе N элементов (молекул), то число всех возможных перестановок как внутри групп элементов, так и между группами по теории сочетаний равно $N!$. Для определения вероятности \tilde{W} необходимо исключить все перестановки, которые происходят внутри групп элементов:

$$\tilde{W} = \frac{N!}{\prod_i N_i!}, \quad (5)$$

где N – общее число элементов системы; i – количество групп элементов в системе; N_i – количество элементов в i -той группе.

Однако главное место в статистической физике занимает метод ансамблей, предложенный Гиббсом. При использовании этого метода одновременно рассматривают большое число тождественных термодинамических систем, состояния которых отображаются в гиббсовом фазовом пространстве точками, а термодинамическую вероятность связывают с элементарным объемом фазового пространства и дифференциалом энергии.

Методы определения термодинамической вероятности основаны на умозрительных гипотезах распределения состояний системы по фазовому пространству, которые отвечают основным термодинамическим предположениям о существовании и поведении вещества. В основе подсчета вероятности \tilde{W} лежит допущение о равновероятности микросостояний термодинамических систем, что маловероятно для большинства случаев. Другими словами, исходное допущение о равновероятности микросостояний явно

идеализировано и не привязано к данным опыта. Анализ исследований указывает на то, что при оценке термодинамической вероятности не наблюдается прямой связи с эмпирическими данными, т.к. преобладают теоретические и косвенные методы оценки этой вероятности.

В свое время Ф. Верле [6] отмечал явные недостатки понятия термодинамической вероятности. Практически термодинамическая вероятность сводится к определению числа благоприятных случаев, в то время как классическая вероятность представляет собой отношение наблюдаемых в опыте благоприятных исходов к общему числу всех возможных исходов. Исключение числа возможных исходов оправдано только в том случае, когда это число постоянно, что как раз и имеет место в равновесном идеальном газе, т.к. обычно рассматривается газ с заданным количеством молекул N . Поэтому при использовании понятия термодинамической вероятности нет явно выраженной связи с наблюдаемыми событиями, как это принято в теории вероятности. События, связанные с микросостояниями наблюдать в опыте исключительно сложно. Поэтому в качестве событий могут выступать только события, связанные с макросостояниями, например, события совместного наблюдения значений давления, удельного объема и температуры в заданных условиях опыта.

Критические замечания Ф. Верле затрагивают одну из самых серьезных проблем термодинамики и указывают на то, что понятие вероятности состояния термодинамической системы теоретически проработано крайне слабо. Вероятность состояния любой термодинамической системы должна определяться в опыте, при этом необходимо четко определить: по отношению к какому характерному событию следует относить вероятность состояния системы.

Большое значение в термодинамике имеет понятие идеального газа, который отличается исключительно простой физической структурой. В термодинамике *идеальным газом* считается газ, параметры состояния которого строго подчиняются уравнению Клапейрона вида (6). Данный закон для такой системы, как идеальный газ, представляется уравнением, которое установлено опытным путем:

$$p \cdot v = R \cdot T, \quad (6)$$

где R – индивидуальная газовая постоянная.

В идеальном газе молекулы рассматриваются как материальные точки, силами притяжения и отталкивания между которыми можно пренебречь, а все взаимодействие молекул ограничено соударениями. Идеальный газ отличается

низкой плотностью вещества, многие простые газы (водород, гелий, кислород, азот, неон и т.д.) при низких давлениях ведут себя как идеальный газ, т.е. строго подчиняются уравнению Клапейрона (6).

Идеальный газ и законы идеального газа являются абстрактной моделью в термодинамике, связь которой с опытом видна в том, что состояния простых реальных газов стремятся к предельному состоянию идеального газа. Основное необходимое условие, при котором справедливо уравнение Клапейрона – это то, что давление реального газа должно быть не велико, в идеальном случае считается, что давление должно стремиться к нулю ($p \rightarrow 0$). На практике некоторые реальные газы соответствуют модели идеального газа уже при давлениях, равных или меньших 1 – 2 атм. Модель идеального газа очень удобна для формулировки основных теоретических положений термодинамики.

При определении состояний идеальных газов используется величина энтропии, которая на основе параметров состояния определяется по зависимостям вида:

$$s = s_0 + c_v \cdot \ln p + c_p \cdot \ln v \quad \text{или} \\ s = s_0 + c_v \cdot \ln T + R \cdot \ln v, \quad (7)$$

где c_v и c_p – изохорная и изобарная теплоемкости, которые зависят от температуры.

По отношению к выбранному опорному состоянию зависимость (7) может быть представлена в виде:

$$s = c_v \cdot \ln \frac{p}{p_0} + c_p \cdot \ln \frac{v}{v_0}, \quad (8)$$

где p_0 и v_0 – соответственно давление и удельный объем газа для условий выбранного опорного состояния.

Для многомерных процессов энтропия представляется в виде [7]:

$$s = \sum_{k=1}^n c_k \cdot \ln \frac{z_k}{z_{k0}}, \quad (9)$$

где c_k – величины, характеризующие процессы изменения и развития систем.

Существование энтропии является фундаментальным принципом, определяющим изменение свойств и состояний физических систем в различных термодинамических процессах. Следует отметить, что между множеством формулировок второго начала нет принципиальных различий и противоречий. Скорее всего, все это – различные попытки изложения некоторого закона природы.

Однако при современном уровне знаний принцип существования энтропии рассматривается как отдаленное логическое следствие закона сохранения энергии и результат обобщения опытных данных,

которыми располагает термодинамика. Сегодня в термодинамике существование энтропии не постулируется в качестве самостоятельного принципа (если не рассматривать некоторые аксиоматические направления теории). Здесь согласимся с утверждением автора работы [8, с. 371], что такое решение проблемы в общепринятой системе изложения основ термодинамики ни в какой мере не подготовлено и не оправдано. Система термодинамики даже не располагает понятиями и терминами, в которых можно было бы кратко и ясно сформулировать самостоятельный принцип существования энтропии, при этом однозначно отразив физический или статистический смысл этой величины.

Информационная энтропия

Понятие *информационной энтропии* вводится в теории информации. Данная наука изучает количественные закономерности, связанные с получением, передачей, обработкой и хранением информации. В связи с тем, что в теории информации применяются вероятностные методы, данная наука является разделом теории вероятности.

В качестве объекта, о котором передается информация, рассматривается некоторая физическая система, которая случайным образом может оказаться в том или ином состоянии. Таким образом, считают, что системе заведомо присуща некоторая степень неопределенности. Для физической системы степень неопределенности определяется не только числом ее возможных состояний, но и вероятностями состояний. В качестве меры априорной неопределенности системы в теории информации применяется характеристика, которая называется энтропией.

Рассмотрим некоторую систему X , которая может принимать конечное множество состояний x_1, x_2, \dots, x_n с вероятностями w_1, w_2, \dots, w_n , где $w_i = P(X \sim x_i)$ – вероятность того, что система X примет состояние x_i . Здесь символом $X \sim x_i$ обозначается событие: система находится в состоянии x_i . Так как количество состояний конечно, то очевидно, что

$$\sum_{i=1}^n w_i = 1.$$

В теории информации энтропией системы называется сумма произведений вероятностей различных состояний этой системы на логарифмы этих вероятностей, взятая с обратным знаком:

$$H(X) = - \sum_{i=1}^n w_i \cdot \log w_i. \quad (10)$$

Из соотношения (10) видно, что энтропия обращается в ноль, когда одно из состояний системы достоверно, а другие невозможны. При заданном числе состояний энтропия достигает максимума, когда эти состояния равновероятны, при увеличении числа состояний энтропия увеличивается. Кроме того, энтропия обладает свойством аддитивности, суть которого состоит в том, что, когда несколько независимых систем объединяются в одну, их энтропии складываются. Обычно в теории информации, логарифм в соотношении (10) берут при основании 2. Энтропия одного разряда двоичного числа, если он с одинаковой вероятностью может быть нулем или единицей, называется «двоичной единицей» и иногда обозначается *bit*.

При определении энтропии сложной системы, полученной объединением двух и более простых систем, используется теорема сложения энтропий. Под объединением двух систем X и Y с возможными состояниями x_1, x_2, \dots, x_n и y_1, y_2, \dots, y_n понимается сложная система (X, Y) , состояния которой (x_i, y_j) представляют собой все возможные комбинации состояний x_i, y_j систем X и Y . Если системы X и Y независимы, то есть принимают свои состояния независимо одна от другой, то по теореме умножения вероятностей $P(X, Y) = P(X) \cdot P(Y)$. В свою очередь, при объединении двух независимых систем их энтропии складываются:

$$H(X, Y) = H(X) + H(Y). \quad (11)$$

Данное соотношение верно для любого количества независимых систем.

Если системы X и Y зависимы, то по теореме умножения вероятностей $P(X, Y) = P(X) \cdot P(Y|X)$, где $P(Y|X)$ – условная вероятность того, что система Y примет некоторое состояние при условии, что система X находится в определенном заданном состоянии. В свою очередь, при объединении двух зависимых систем их энтропии также складываются по следующему правилу:

$$H(X, Y) = H(X) + H(Y|X), \quad (12)$$

где $H(Y|X)$ – условная энтропия системы Y относительно системы X .

В случае физических систем с непрерывным множеством состояний энтропия определяется через плотность распределения вероятностей состояний. Наиболее простой пример непрерывной системы – это система, состояния которой описываются одной непрерывной случайной величиной с плотностью распределения $f(x)$. В более сложных случаях состояние системы может

описываться несколькими случайными величинами X_1, X_2, \dots, X_n с плотностью распределения $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Подобную систему можно рассматривать как объединение в совокупность (X_1, X_2, \dots, X_n) простых систем X_1, X_2, \dots, X_n .

Для простой системы X , определяемой одной непрерывной случайной величиной X с плотностью распределения $f(x)$, энтропия имеет вид:

$$H(X) = - \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot \log f(x) dx - \log \Delta x, \quad (13)$$

где Δx – степень точности определения состояний системы.

Все теоремы об определении энтропии физической системы с дискретными состояниями остаются в силе и для непрерывных систем.

В теории информации на основе энтропии оценивается информация, получаемая при наблюдении за физической системой. В частности, количество информации, приобретаемое при полном выяснении состояния некоторой физической системы, равно энтропии этой системы $I_X = H(X)$.

В настоящее время существует несколько десятков различных определений понятия «информация». В теории информации ситуация с понятием информации существенно хуже, чем аналогичная ситуация в термодинамике с понятием энтропии.

Различные точки зрения о сути информации исходят из того, что она является неотъемлемым свойством материи, некоторым материальным процессом, информационным свойством живой природы, целевой функцией, особым видом термодинамической энтропии и т.д. Множество противоречивых определений свидетельствует о том, что ни одно из них не является достаточно обоснованным. Понятие информационной энтропии введено в научный обиход, исходя из аналогий с обобщенным определением энтропии в статистической термодинамике, которое сформулировано Планком, при этом зависимость (10) без теоретического обоснования просто по соглашению распространена на любые физические системы, исходя из аналогий и формальных соображений простоты определения информационной энтропии.

Теория информации основана на вероятностных закономерностях, свойственных процессам и явлениям. Однако множество ситуаций не укладываются в информационную модель Шеннона. Не всегда представляется возможным заранее установить перечень всех состояний системы. Кроме того, в теории

информации рассматривается только формальная сторона сообщения, в то время как смысл его остается в стороне [9].

Далее, так как теория информации является разделом теории вероятности, то теоретический подход к вычислению вероятностей был изначально привнесен как основной принцип анализа. В этом случае, исходя из причинно-следственной картины формирования событий, дается оценка вероятностей сложных событий с привлечением теорем сложения и умножения вероятностей. Однако, на практике часто невозможно достоверно отобразить дерево событий с вероятностями последовательных переходов между событиями, если не пользоваться результатами опыта, а исходить только из теоретических предпосылок, логических и гипотетических предположений. Численные методы определения вероятностей событий на основе данных опыта используются в теории информации существенно реже, нежели теоретические методы подсчета вероятностей. Поэтому для многих сложных физических систем невозможно определить вероятности их состояний.

Также большой проблемой является нечеткость определения, что понимается под состоянием физической системы и как это понятие связано с событиями или с их характеристическими случайными величинами.

Со времен работ Л. Бриллюэна взаимосвязь информации и физической энтропии изучалась многими учеными, однако гипотеза о связи этих величин так и не была подтверждена опытным путем.

Для установления аналогий между термодинамической и информационной энтропией следует начинать с самых основ – согласовать понятия состояния физической системы в термодинамике и в теории информации.

Анализ и согласование понятий энтропии

На первый взгляд, отличия в понятиях термодинамической и информационной энтропий не очень значительны, т.к. форма зависимостей очень похожа. Однако, проблема достаточно существенна, дискуссия о взаимосвязи этих величин тянется уже длительное время.

Сегодня имеется два основных подхода к определению термодинамической энтропии. В первом случае энтропия определяется через эмпирическую формулу Клаузиуса (1). Эта формула верна как для идеальных газов, так и для реальных молекулярных систем, т.е. для расчетов энтропии газов, жидкостей и твердых тел. Энтропия Клаузиуса находится по

известным термодинамическим параметрам макросостояний системы и широко используется в классической термодинамике.

Во втором случае в статистической физике энтропию определяют по формуле Больцмана (4), которая получена исключительно для идеального газа и представляет собой сумму частных энтропий всех молекул. То есть энтропия определяется по всем микросостояниям системы.

Для идеального газа энтропии Клаузиуса и Больцмана тождественно равны. В свою очередь, формулы Больцмана для термодинамической энтропии ($s = k_* \cdot \ln W$) и Шеннона для информационной энтропии $H = -\sum w_i \cdot \log w_i$ имеют некоторое внешнее сходство, но это пока не дает оснований говорить о взаимосвязи двух видов энтропии. Кроме того, имеются существенные различия в размерностях, т.к. информационная энтропия безразмерна, а термодинамическая – имеет размерность энергии. Также по определению информационная энтропия чаще всего применяется по отношению к некоторому процессу изменения макросостояний физической системы, в свою очередь, процесс определения статистической энтропии связан с множеством элементов, образующих физическую систему, микросостояния которых формируют макросостояние системы.

Таким образом, если существуют взаимосвязи между различными видами энтропии, то их следует искать не на уровне изучения микросостояний, а на уровне анализа макросостояний идеального газа, иначе происходит полная путаница с объектами исследований в обоих случаях. В термодинамике энтропия эмпирически определяется через параметры состояния термодинамической системы в соответствии с уравнениями (1) и (7), что обосновано опытом, поэтому и определение информационной энтропии следует осуществлять через вероятности состояния, которые будут определяться параметрами макросостояния физической системы.

В термодинамике состояние системы четко определено – это мгновенная оценка совокупности значений параметров свойств, характерных для данной системы. Параметром может быть любое свойство системы, если оно количественно определено и рассматривается как независимая переменная, определяющая вместе с другими переменными состояние системы.

В теории информации энтропия вводится через вероятности состояний физической системы. Однако, четкого определения, что в самом общем случае понимается под

состоянием физической системы и как, исходя из этого, определяется вероятность состояния, в учебниках особо не раскрывается. Считается, что для каждой изучаемой физической системы этот вопрос уже решен отдельно.

Поэтому, и в термодинамике и в теории информации следует четко сформулировать общее понятие состояния физической системы и показать, как определяется вероятность состояния. Далее это позволит оценивать возможности существования взаимосвязей между интересующими нас величинами, исходя из одинаковых исходных предпосылок.

Таким образом, определим *состояние* физической системы как совокупность ее наблюдаемых физических свойств, параметры которых формируются под действием условий окружающей среды в конкретный момент времени.

Любое множество n переменных для параметров свойств задает n -мерное пространство $\{z_1, z_2, \dots, z_n\}$, являющееся декартовым произведением областей значений всех переменных z_k данного множества. Точки этого пространства соответствуют n -мерным наборам значений всех переменных (z_1, z_2, \dots, z_n) . Таким образом, состояние физической системы в n -мерном пространстве в каждый момент времени будет отображаться многомерной точкой $M = M(z_1, z_2, \dots, z_n)$, процесс изменения состояния системы – многомерной кривой, которая описывается точкой M в этом пространстве.

Рассмотрим сложное совместное событие A_i одновременного наблюдения n параметров и определим, что состояние физической системы в заданный момент времени будет характеризоваться не только совокупностью параметров свойств, которые отображаются точкой M_i , но и данным наблюдаемым событием. Будем считать, что существует вероятность данного события, которая может быть определена или по дискретным наблюдениям процесса изменения состояния системы, или по выборке из множества аналогичных систем, каждая из которых находится в определенном состоянии в заданный момент времени. Другими словами, множество точек M_i в количестве p , где p – число наблюдений, может отражать или наблюдения одного процесса в разные моменты времени, тогда сложные события A_i несовместные, или наблюдения объектов одного класса в определенный момент времени, тогда события A_i совместные. Возможен также распространенный случай, когда объекты одного класса наблюдаются в разные моменты

времени. Все это позволяет для выборки из p наблюдений определить статистическую вероятность события A_i . Назовем данную статистическую вероятность вероятностью состояния физической системы. Статистические вероятности для сложного события A_i одновременного наблюдения n заданных параметров могут быть найдены с использованием алгоритмов перебора, группировки и подсчета частот благоприятных событий в общей выборке всех наблюдений [7].

Таким образом, на основе переменных z_1, z_2, \dots, z_n формируем n -мерное пространство координат $\{z_1, z_2, \dots, z_n\}$, в котором возможные состояния системы образуют некоторую область Ω_n , охватывающую все наблюдаемые в опыте точки. Каждой точке M_i можно поставить в соответствие вероятность состояния w_i .

Предположим непрерывность области Ω_n . Это означает, что в пространстве состояний Ω_n существует бесконечное множество состояний для некоторой генеральной совокупности физических систем и точки состояний $M(z_1, z_2, \dots, z_n)$ непрерывно заполняют это пространство. Будем также считать, что опытные точки $M_i(z_1, z_2, \dots, z_n)$ являются ограниченной выборкой наблюдений из данной генеральной совокупности.

Для того, чтобы показать связи между информационной и термодинамической энтропией и возможность формулировки одинаковых исходных положений, сделаем следующие достаточно общие предположения.

Будем считать, что каждое состояние физической системы однозначно характеризуется n независимыми переменными z_1, z_2, \dots, z_n , причем область определения для каждой переменной распространяется на всю положительную числовую ось $z_k(0, \infty)$. Сформулируем следующие аксиомы.

1. Пусть в пространстве состояний физической системы Ω_n каждой точке M поставлено в соответствие действительное число W , которое будем называть эмпирической мерой состояния системы.

2. Величина $W(M)$ является функцией точки и образует скалярное поле, которое является непрерывным в области Ω_n .

Будем считать, что величина W может определяться в опыте на основе некоторых процедур измерений, оценок или расчетов. Эмпирическая мера W не может являться параметром одного из свойств системы z_1, z_2, \dots, z_n . В общем случае в качестве

эмпирической меры могут выступать различные комплексные величины, например, количество теплоты, эмпирическая температура, вероятность событий, стоимость объектов, время наблюдения и т.д.

Для построения модели описания процессов физической системы используем гипотезу, что скалярное поле эмпирической меры W может быть аналитически описано в окрестности произвольной точки M . Будем считать, что вблизи точки M осуществляется процесс изменения состояния физической системы. Для задания скалярного поля эмпирической меры $W = W(M)$ как функции независимых переменных z_1, z_2, \dots, z_n необходимо определить функцию точки. Предположим, что в области Ω_n можно задать аналитическую непрерывную функцию $\theta(z_1, z_2, \dots, z_n)$, на основе которой будет формироваться математическая модель. При известном виде функции $\theta(z_1, z_2, \dots, z_n)$ и значениях переменных z_1, z_2, \dots, z_n в области Ω_n можно построить еще одно скалярное поле, которое далее будем называть средой моделирования.

Исходя из этого, для построения в общем случае феноменологической модели физической системы сформулируем следующую аксиому.

3. Пусть в пространстве состояний физической системы Ω_n скалярные поля величин W и θ однозначно связаны между собой. Если в окрестности любой точки M физическая система осуществляет некоторый процесс l , то для линии процесса l справедливо соотношение $dW = c_l \cdot d\theta$, где c_l – эмпирические величины, которые являются функциями физического процесса.

Покажем, что аксиом (1) – (3) достаточно для обоснования принципа существования как термодинамической, так и информационной энтропии.

Выберем в области Ω_n произвольную точку M . Будем считать, что вблизи данной точки осуществляется элементарный физический процесс, в результате которого состояние системы изменяется от начального M до конечного состояния M' . Тогда в процессе изменения состояния физической системы элементарное изменение эмпирической меры W можно представить в виде:

$$dW = \left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)_1 \cdot \left(\frac{\partial \theta}{\partial z_1}\right) dz_1 + \left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)_2 \cdot \left(\frac{\partial \theta}{\partial z_2}\right) dz_2 + \dots \\ \dots + \left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)_n \cdot \left(\frac{\partial \theta}{\partial z_n}\right) dz_n \quad \text{или} \quad (14)$$

$$dW = c_1 \left(\frac{\partial \theta}{\partial z_1}\right) dz_1 + c_2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial z_2}\right) dz_2 + \dots + c_n \left(\frac{\partial \theta}{\partial z_n}\right) dz_n$$

При выводе уравнений принято, что $\left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)_k = \left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)_{\dots z_{k-1}, z_{k+1}, \dots} = c_k$.

Будем считать, что аналитическая функция $\theta(z_1, z_2, \dots, z_n)$ может быть представлена в виде произведений функций, зависящих от параметров свойств $\theta = \varphi_1(z_1) \cdot \varphi_2(z_2) \cdot \dots \cdot \varphi_n(z_n)$.

Для решения поставленной задачи сформулируем следующую лемму.

Пусть задано уравнение Пфаффа вида (14) и пусть известно, что в окрестности любой точки M пространства состояний физической системы Ω_n среда моделирования $\theta = \theta(z_1, z_2, \dots, z_n)$ может быть представлена в виде произведения функций, зависящих от параметров свойств $\theta = \varphi_1(z_1) \cdot \varphi_2(z_2) \cdot \dots \cdot \varphi_n(z_n)$. Тогда для уравнения (14) обязательно существует интегрирующий делитель, который обращает данное уравнение в полный дифференциал.

Покажем, что интегрирующим делителем уравнения (14) будет функция $\theta = \varphi_1(z_1) \cdot \varphi_2(z_2) \cdot \dots \cdot \varphi_n(z_n)$. Подставив данную функцию в (14) и деля это уравнение на θ , получим [7]:

$$ds = \frac{dW}{\theta} = c_1 \cdot \frac{\varphi_1'(z_1)}{\varphi_1(z_1)} dz_1 + c_2 \cdot \frac{\varphi_2'(z_2)}{\varphi_2(z_2)} dz_2 + \dots \\ \dots + c_n \cdot \frac{\varphi_n'(z_n)}{\varphi_n(z_n)} dz_n. \quad (15)$$

Интегрируя уравнение (15), представим общий интеграл в виде:

$$s - s_0 = c_1 \cdot \ln \left(\varphi_1 \left(\frac{z_1}{z_{10}} \right) \right) + c_2 \cdot \ln \left(\varphi_2 \left(\frac{z_2}{z_{20}} \right) \right) + \dots \\ \dots + c_n \cdot \ln \left(\varphi_n \left(\frac{z_n}{z_{n0}} \right) \right). \quad (16)$$

где $s_0, z_{10}, \dots, z_{n0}$ – параметры опорного состояния.

Определим общий интеграл s как энтропию, исходя из аналогий с термодинамикой. Энтропия является характеристической функцией пространства состояний системы. Как показано в источнике [7] в параметрическом представлении энтропия является длиной дуги векторной линии некоторого поля направлений, порожденного скалярным полем эмпирической меры состояния системы W .

Таким образом, в зависимости от существующих эмпирических мер W , которые

характеризуют состояния физической системы, различные виды энтропий состояния определяются зависимостью (16). В данной зависимости величины c_k являются характеристиками процесса, который осуществляется физической системой, а частные виды энтропий $s_k = c_k \cdot \ln\left(\varphi_1\left(\frac{z_k}{z_{k0}}\right)\right)$ свойственны определенному k -тому роду физического взаимодействия.

Термодинамическая и информационная энтропии при описании состояний идеального газа

Покажем, как данная модель может быть применена к идеальному газу, состояние которого определяется двумя параметрами – давлением p и удельным объемом v .

Если эмпирическую меру W считать количеством теплоты Q , величину θ – абсолютной температурой T , а c_k – теплоемкостями, то зависимости примут вид:

$$T = \frac{p \cdot v}{R}; \quad R = \frac{p_0 \cdot v_0}{T_0}; \quad dQ = c_{i,t} \cdot dT;$$

$$s_t - s_{t0} = c_p \cdot \ln\left(\frac{v}{v_0}\right) + c_v \cdot \ln\left(\frac{p}{p_0}\right). \quad (17)$$

Здесь v_0, p_0 – параметры идеального газа при нормальных условиях; $T_0 = 273,15 \text{ K}$; c_v и c_p – изохорная и изобарная теплоемкости;

$$\varphi_1(v) = T_0 \frac{v}{v_0} \quad \text{и} \quad \varphi_2(p) = \frac{p}{p_0}.$$

Если эмпирическую меру W считать вероятностью состояния w , величину θ – геометрической вероятностью ρ , а c_k – некоторыми характерными величинами физического процесса, то соответствующие основные зависимости примут вид:

$$\rho = \rho_1 \cdot \rho_2 = \frac{v}{v_{\max}} \cdot \frac{p}{p_{\max}}; \quad dw = c_{i,w} \cdot d\rho;$$

$$s_w - s_{w0} = c_{1w} \cdot \ln\left(\frac{v}{v_{\max}}\right) + c_{2w} \cdot \ln\left(\frac{p}{p_{\max}}\right) = \dots$$

$$\dots = c_{1w} \cdot \ln(\rho_1) + c_{2w} \cdot \ln(\rho_2). \quad (18)$$

Здесь v_{\max}, p_{\max} – максимальные значения удельного объема и давления, наблюдаемые в опыте, $\varphi_1(v) = v/v_{\max} = \rho_1$ и $\varphi_2(p) = p/p_{\max} = \rho_2$.

Термодинамическая энтропия s_t и величины c_p и c_v в уравнении (17) имеют размерность, в свою очередь, информационная

энтропия s_w и величины c_{1w} и c_{2w} в уравнении (18) безразмерны. Среды моделирования в соотношениях (17) и (18) подобны между собой, т.е. $T = (v_{\max} \cdot p_{\max}/R) \cdot \rho$, при этом величина T размерная, величина ρ безразмерная, а коэффициент $v_{\max} \cdot p_{\max}/R$ имеет размерность температуры.

Выполним согласование полученных зависимостей, исходя из данных опыта. Используя метод Монте-Карло, проведем следующий простой статистический эксперимент. Предположим, что состояние физической системы характеризуется двумя измеряемыми и независимыми параметрами z_1 и z_2 . В наблюдаемой области определения этих переменных $\Omega_2 \{0 \leq z_1 \leq z_{1,\max}; 0 \leq z_2 \leq z_{2,\max}\}$ параметр z_1 может изменяться от нуля до $z_{1,\max}$, а параметр z_2 – от нуля до $z_{2,\max}$.

Из теории вероятности следует, что если на плоскости дана *равномерно* распределенная двумерная случайная величина, то в этом случае применимо геометрическое определение вероятности. При этом вероятность ρ попадания точки в прямоугольник определяют в виде отношения площади прямоугольника, образованного правой вершиной $A(z_1, z_2)$, к площади всей прямоугольной области Ω_2 . Для этого случая статистическая вероятность w будет равна отношению опытных точек, попавших в прямоугольник, к общему количеству точек. Для равномерно распределенной величины статистическая и геометрическая вероятности равны между собой, т.е. $\rho = w$. Если величина распределена *неравномерно*, то данное условие нарушается.

Известно [10], что геометрическая вероятность попадания случайной точки в прямоугольник со сторонами, параллельными осям координат Oz_1 и Oz_2 (рис. 1), у которого правая вершина располагается в точке $A(z_1, z_2)$, равна:

$$\rho = P(0 \leq Z_1 < z_1; 0 \leq Z_2 < z_2) = \frac{z_1 \cdot z_2}{z_{1,\max} \cdot z_{2,\max}}. \quad (19)$$

Примем эту геометрическую вероятность за вероятность состояния системы $A(z_1, z_2)$, исходя из необходимости построения среды моделирования.

Предположим, что координаты точки $A(z_1, z_2)$ в процессе проведения статистических экспериментов на плоскости z_1Oz_2 в области Ω_2 (рис. 1) могут быть выбраны на отрезках $[0, z_{1,\max}]$ и $[0, z_{2,\max}]$ каждый раз абсолютно случайно с учетом равномерного распределения

независимых величин z_1 и z_2 . При этом определим вероятность расположения точки $A(z_1, z_2)$ в соответствии с ранее приведенным уравнением (19).

Для решаемой нами задачи параметр z_1 – это удельный объем газа v , а параметр z_2 – это давление газа p .

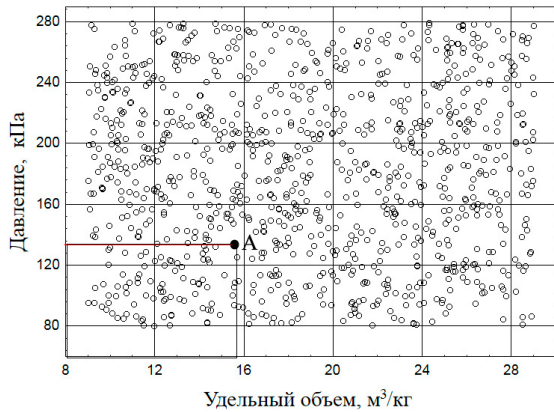


Рисунок 1. – Диаграмма рассеивания физических свойств водорода при равномерном распределении данных (число статистических экспериментов – 1000)

Возьмем произвольный газ, например, водород. Известно, что при давлении среды, равном $p_0 = 101325 \text{ Па}$ и температуре $T_0 = 273,15 \text{ К}$ (нормальные физические условия) удельный объем водорода равен $v_0 = 11,12720 \text{ м}^3 / \text{кг}$. Будем считать состоянием газа некоторое событие, для которого пары значений давления и удельного объема выбраны случайно. Генерируя равномерно распределенным генератором случайных чисел значение параметра v от нуля до v_{\max} и значение параметра p от нуля до p_{\max} и вырезая область $\Omega_2[v_{\min}, v_{\max}; p_{\min}, p_{\max}]$, которая соответствует существующим опытным данным термодинамических свойств газов, получим в области Ω_2 диаграмму рассеивания физических свойств водорода, которая представлена на рисунке 1.

Зная термодинамические параметры состояния водорода, приведенного к идеальному состоянию, можно определить энтропию состояния газа. Воспользуемся для этого таблицами термодинамических свойств газов [11]. При составлении таблиц предполагалось, что газ подчиняется уравнению состояния идеального газа (6). Значение энтропии газа определяется выражением:

$$s_t = \int_0^T \frac{c_p dT}{T} - R \cdot \ln p = s^0 - R \cdot \ln p. \quad (20)$$

Точность таблиц термодинамических свойств газов в области температур -50°C до 1500°C составляет 0,5 %. Эта область для водорода приблизительно соответствует диапазонам изменения давления от $p_{\min} = 80 \text{ кПа}$ до $p_{\max} = 280 \text{ кПа}$ и удельного объема от $v_{\min} = 9 \text{ м}^3 / \text{кг}$ до $v_{\max} = 29 \text{ м}^3 / \text{кг}$.

Для идеального газа, подчиняющегося уравнению (6), путем преобразований [11] из зависимости (20) можно получить уравнение для энтропии (17).

В свою очередь, по термодинамическим параметрам водорода в процессе статистического моделирования можно определить информационную энтропию в виде $s_w = k \cdot \log(w)$, где k – коэффициент пропорциональности, связанный с основанием логарифма, значение $s_{w,0}$ принято равным нулю при $w=1$, а в процессе моделирования параметры состояния водорода подчинены равномерному распределению, т.е. $w = \rho$.

Однако, уравнение (8) указывает на то, что в условиях опыта термодинамические параметры водорода не подчиняются равномерному распределению, так как изобарная и изохорная теплоемкости не равны между собой. Таким образом, статистическую модель состояний водорода, представленную на рисунке 1, можно рассматривать как равномерно распределенную (равновозможную) среду моделирования, которую следует непосредственно увязать с опытными данными.

Используя методы регрессионного анализа, получим уравнение связи между термодинамической и информационной энтропиями состояний водорода в виде:

$$s_t = 88,268 + 12,659 \cdot s_w. \quad (21)$$

Здесь s_t определяется уравнением (20) и данными таблиц [11], а $s_w = \ln(w)$. Коэффициент корреляции уравнения (21) составил 0,99, результаты регрессионного анализа приведены на рисунке 2.

По параметрам водорода определим также частную информационную энтропию в виде, предложенном Шенноном: $s_w = -w \cdot \log(w)$. Результаты сравнения данных приведены на рисунке 3, на котором видна нелинейная зависимость между величинами. Это характерно для информационной энтропии Шеннона $s_w = -w \cdot \log(w)$, которая зависит от произведения вероятности на логарифм вероятности.

Также, зная термодинамические параметры состояния азота, приведенного к идеальному состоянию, можно определить энтропию состояния газа.

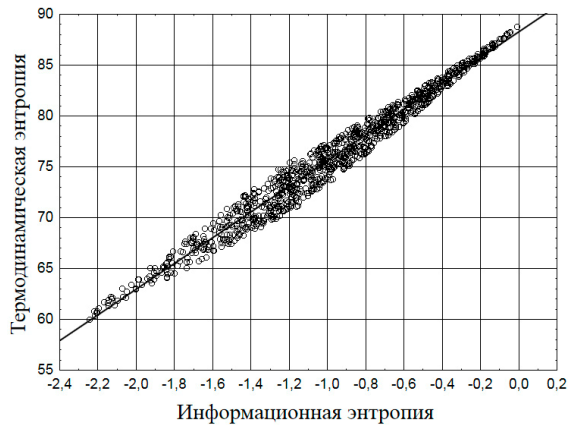


Рисунок 2. – Взаимосвязь термодинамической s_t и информационной энтропии $s_w = \ln(w)$ для состояний водорода

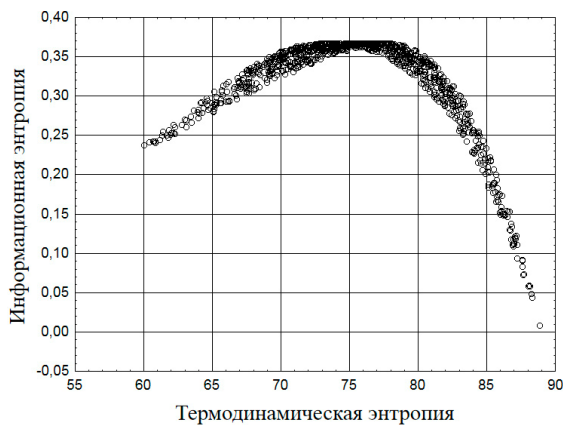


Рисунок 3. – Взаимосвязь термодинамической s_t и информационной энтропии $s_w = -w \cdot \log(w)$ для состояний водорода

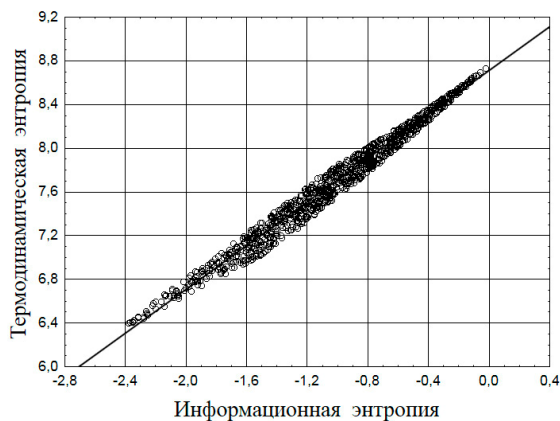


Рисунок 4. – Взаимосвязь термодинамической s_t и информационной энтропии $s_w = \ln(w)$ для состояний азота

Соответствующее регрессионное уравнение связи между энтропиями состояний азота будет иметь вид:

$$s_t = 8,708 + 1,001 \cdot s_w. \quad (22)$$

Коэффициент корреляции уравнения (22) составил 0,99, результаты регрессионного анализа приведены на рисунке 4.

Аналогичным образом, связь между энтропиями состояний кислорода имеет вид:

$$s_t = 8,261 + 0,950 \cdot s_w. \quad (23)$$

Выполненный анализ показывает, что для любого идеального газа зависимость между термодинамической и информационной энтропиями имеет вид $s_t = a + b \cdot s_w$, где коэффициенты a и b имеют свои значения для каждого идеального газа. Данная зависимость позволяет установить связь между термодинамической вероятностью состояния \tilde{W} и математической вероятностью состояния w системы. Учитывая уравнение Больцмана (4) получим эту связь в следующем виде:

$$\tilde{W} = \exp\left(\frac{a}{k_*}\right) \cdot w^{\frac{b}{k_*}}. \quad (24)$$

Здесь k_* – постоянная Больцмана.

Величины c_k в зависимости для частной энтропии $s_k = c_k \cdot \ln(z_k/z_{k0})$ являются функциями процесса и могут в окрестности произвольного состояния системы зависеть от эмпирической меры. В этом случае частные виды информационной энтропии могут быть представлены как в форме $s_k = \alpha_k \cdot \log(w)$, так и в форме $s_k = \beta_k \cdot w \cdot \log(w)$. Если величины c_k в окрестности произвольного состояния имеют линейную зависимость $c_k = \alpha_k + b_k \cdot w$, то получим $s_k = \alpha_k \cdot \log(w) + \beta_k \cdot w \cdot \log(w)$. Оба варианта представления энтропии ($s_k = \alpha_k \cdot \log(w)$ и $\beta_k \cdot w \cdot \log(w)$) используются в термодинамике и теории информации. В первом случае, это энтропии Больцмана и Хартли, во втором случае – энтропии Гиббса и Шеннона.

Выводы

Таким образом, как видно из данной статьи в зависимости от той или иной эмпирической меры, можно предложить различные виды энтропий состояния физической системы.

Принцип существования энтропии имеет свою определенную область применения. Во-первых, понятие энтропии распространяется только на процессы, которые могут наблюдаться в опыте. Исходя из этого, бессмысленно этот принцип распространять на области, где отсутствуют опытные данные (пример – известный вывод о тепловой смерти Вселенной). Во-вторых, понятие энтропии распространяется только на процессы и явления, для которых справедливо существование некоторой эмпирической меры для комплексной оценки состояния физической системы. И, наконец, область применения принципа ограничена эволюционными процессами, которым свойственны более или менее

медленные, постепенные изменения в состоянии систем. Для систем, у которых нарушается однородность и непрерывность пространства состояний, энтропия не определяема.

Следует отметить, что данные выводы справедливы и для биологических, и для экологических, и для социальных систем. Если существует опытный факт того, что для некоторой системы можно выдвинуть гипотезу существования эмпирической меры, то возможно обоснование принципа существования энтропии и установление закономерностей, которые характеризуют изменение состояний этой системы. Поэтому научная значимость данного метода связана с возможностью построения моделей для систем различной природы.

Литература

1. Коганов А.В. Реферативный обзор семестра «Время и энтропия» семинара «Изучение феномена времени». – Электр. ресурс, URL: www.chronos.msu.ru/seminar/rindex.html (10.01.14).
2. Morowitz H.J. The Second Law of Thermodynamics. – Электр. ресурс, URL: www.panspermia.com/seconlaw.htm (26.10.13).
3. Шамбадаль П. Развитие и приложение понятия энтропии. – М.: Наука, 1967. – 280 с.
4. Путилов К.А. Термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 375 с.
5. Хазен А.М. Разум природы и разум человека. – М.: Мооблполиграфиздат, 2000. – 577 с.
6. Wehrle P. L'Univers aleatoire. – Paris: Dunod, 1956.
7. Аверин Г.В. Системодинамика. – Донецк: Донбасс, 2014. – 405 с. – Электр. ресурс URL: <http://www.chronos.msu.ru/ru/trules/item/sistemodinamika-2> (12.02.14).
8. Гухман А.А. Об основаниях термодинамики. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 383 с.
9. Бекман. И.Н. Информатика. Курс лекций / МГУ им. М.В. Ломоносова. 2009. – Электр. ресурс, URL: <http://profbeckman.narod.ru/InformLec.htm> (10.11.13).
10. Вентцель Е.С. Теория вероятности. – М.: Наука, 1969. – 576 с.
11. Ривкин С.Л. Термодинамические свойства газов: Справочник. – 4-е изд., перераб. – М.: Энергоатомиздат, 1987. – 288 с.

Аверин Г.В., Звягинцева Г.В. “Взаємозв'язок термодинамічної та інформаційної ентропії при описі станів ідеального газу”. Виконано аналіз основних припущень і моделей, пов'язаних з визначенням термодинамічної та інформаційної ентропії станів фізичної системи. Показано особливості й відмінності залежностей для визначення ентропії в обох випадках. Запропоновано шукати взаємозв'язок інформаційної ентропії не з статистичною ентропією в уявленнях Больцмана-Планка, а з термодинамічною ентропією в уявленнях Клаузіуса. Сформульовано загальний підхід до визначення різних видів ентропії, виходячи з існування різних емпіричних мір для комплексної характеристики станів фізичної системи та прийняття гіпотези про польове представлення області спостережуваних станів в багатовимірному просторі властивостей системи. Для загального випадку отримані залежності для ентропії, виходячи з опису поля емпіричної міри за допомогою мультиплікативних моделей щодо параметрів властивостей системи. На прикладі ідеального газу та на основі існуючих дослідних даних встановлено взаємозв'язок між термодинамічною та інформаційною ентропією та визначено параметри рівнянь щодо різних ідеальних газів.

Ключові слова: термодинамічна та інформаційна ентропія, загальна модель ентропії, ідеальний газ, взаємозв'язок залежностей для визначення ентропії.

Averin G.V., Zviagintseva A.V. “The relationship of the thermodynamic and information entropy in the description of the ideal gas states”. The paper carries out the analysis of the key assumptions and models related to the definition of information and thermodynamic entropy of a physical system states. The paper also shows the peculiarities of similarities and differences of dependencies for determining the entropy in both cases. It is suggested to seek dependence of information entropy not between the statistical entropy in Boltzmann-Planck representations but between the thermodynamic entropy in Clausius representations. Common approach is formulated for determining different kinds of entropy based on the existence of different empirical measures for the complex characteristics of a physical system states and the acceptance of the hypothesis of the field representation of the observed states in a region from a multidimensional space properties of the system. Dependencies for the entropy are obtained for the general case based on the description of the empirical measure field using multiplicative models with respect to the parameters of the system properties. For an ideal gas and on the basis of existing experimental data revealed a relationship between thermodynamic and informational entropy and parameters of equations for different ideal gases.

Keywords: thermodynamic and information entropy, common entropy model, ideal gas, relationship of dependencies for entropy determination.

Статья поступила в редакцию 14.02.2014

Рекомендована к публикации д-ром техн. наук Ф.В. Недопекиным