

Энтропия в синергетике

Происхождение - от греч. entropia – поворот, превращение.

- а) В термодинамике – мера необратимого рассеяния энергии
- б) В статистич. физике – мера вероятности осуществления какого-либо макроскопического состояния
- в) В теории информации – мера неопределенности



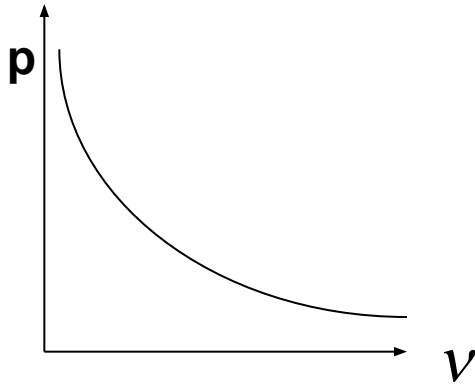
а) Термин был введен в 1865г. немцем физиком и математиком Р. Клаузиусом. Он показал, что процесс превращения теплоты в работу подчиняется определенной физической закономерности – второму началу термодинамики, которое можно сформулировать строго математически, если ввести особую функцию состояния – энтропию. Для термодинамической системы, совершающей квазистатически (бесконечно медленно) циклический процесс, в котором система последовательно получает малые количества теплоты δQ при соответствующих значениях абс. температуры T , интеграл от приведенного количества теплоты по

$$\oint \frac{\delta Q}{T} = 0$$

всему циклу равен 0 (т.н. равенство Клаузиуса).

Это равенство эквивалентно второму началу термодинамики. Математически равенство Клаузиуса необходимо и достаточно, чтобы выражение $dS = \delta Q/T$ представляло полный диф. функции состояния, назв. энтропией

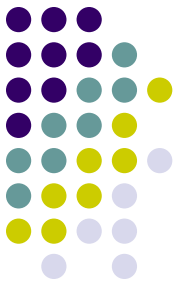
адиабата – непереходимый



$$p v^{\gamma} = const$$

γ – показатель адиабаты

$\gamma = c_p / c_v$. Для двухатом. газов $\gamma = 1,4$



Адиабаты для данного газа не могут пересекаться, т.к. пересечение противоречило бы второму началу термодинамики.

В равновесных адиабатических процессах постоянна энтропия, поэтому адиабат. процессы называются изоэнтропии.

Адиабатический процесс – при котором физ. система не получает теплоты извне и не отдает (т.е. физическая система окружена теплоизолирующей оболочкой)



Согласно первому началу термодинамики $\delta Q = du + pdv$, т.е. сообщаемое системе количество теплоты равно сумме приращений внутренней энергии du и совершаемой системой элементарной работы pdv .

С учетом первого начала термодинамики дифференциальное определение энтропии принимает вид:

$$dS = T^{-1}(du + pdv).$$

Из этого следует, что энтропия – потенциал термодинамический при выборе в качестве независимых переменных внутренней энергии U и объема V .

Частные производные энтропии связаны с T и p соотношениями, которые определяют уравнение состояний

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial u} \right)_v \quad \frac{p}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial v} \right)_u$$

калорическое термическое

Для необратимых (неравновесных) процессов интеграл от приведенной теплоты по замкнутому контуру всегда отрицателен



$\oint \frac{\delta Q}{T} \leq 0$. Энтрoпия адиабатически изолированной системы при необратимых процессах может только возрасти. Термодинамическому равновесию адиабат. с-мы соответствует состояние с максимумом энтропии. Энтропия может иметь не один, а несколько максимумов, т.е. система будет иметь несколько состояний равновесия. Равновесие, которому соответствует наибольший максимум энтропии – абсолютно устойчивое.

Из условия максимальности энтропии адиабатической системы в состоянии равновесия вытекает важное следствие: температуры всех частей системы в состоянии равновесия одинаковы.

Термодинамика неравновесных процессов позволяет более детально исследовать процесс возрастания энтропии.



Термодинамика – наука о наиболее общих свойствах макроскопических физических систем, находящихся в состоянии термодинамического равновесия и о процессах перехода между этими состояниями.

Обоснование законов термодинамики и связь с законами движения отдельных частиц, из которых построены тела дается статистической физикой.

1 начало утверждает, что если система совершает термодинамический цикл, то полное количество теплоты, сообщаемое системе равно совершенной ею работе, т.е. интерпретация закона сохранения энергии.

2 начало. Существует функция состояния системы – ее энтропия S , приращение которой dS при обратимом сообщении системе теплоты равно $dS = \delta Q/T$; при реальных (необратимых) адиабатических процессах $dS > 0$, т.е. энтропия возрастает достигая максимума значения в состоянии равновесия



Б) Статистическая физика связывает энтропию с вероятностью осуществления данного макроскопического состояния системы. Определяется через логарифм статистического веса Ω данного равновесного состояния

$$S = k \ln \Omega(\epsilon, N)$$

$\Omega(\epsilon, N)$ – число квантомеханических уровней в узком интервале энергии $\Delta\epsilon$ вблизи значения энергии ϵ системы из N частиц.

В классической статистической физике Ω – величина объема в фазовом пространстве системы при заданных ϵ и N . Впервые связь энтропии с вероятностью состояния системы была установлена авст. физиком Л.Больцманом в 1872 г. Возрастание энтропии системы обусловлено ее переходом из менее вероятного состояния в более вероятное.

Постоянная Больцмана – одна из фундаментальных физических констант равна отношению газовой постоянной R к числу Авогадро N_A .

Число Авогадро – число структурных элементов (атомов, молекул...) в одном моле (в ед. количества вещества)

$$N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$$



В уравнении состояния идеального газа постоянная Больцмана связывает энтропию физического состояния системы с ее термодинамической вероятностью
 $k = 1,3806... \cdot 10^{-23}$ Дж/к

Больцмана распределение – статистически равновесная функция распределения по импульсам p и координатам r идеального газа, молекулы которого движутся по законам классической механики во внешнем потенциальном поле

$$f(p,r) = A \exp\{-[p^2/2m+u(r)]/kT\}$$

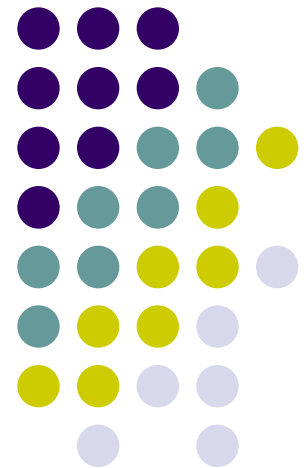


В отличие от термодинамики, статистическая физика рассматривает особый класс процессов – флуктуации, при которых система переходит из более вероятного состояния в менее вероятное и ее энтропия уменьшается. Наличие флуктуаций показывает, что закон возрастания энтропии выполняется только в среднем для большого промежутка времени

В) Мера неопределенности

$$\begin{aligned} & x_1, x_2, \dots, x_n \\ & p_1, p_2, \dots, p_n \quad \sum_n p_i = 1 \\ & H = - \sum_n p_i \log_2 p_i \end{aligned}$$

Энтропия в информатике





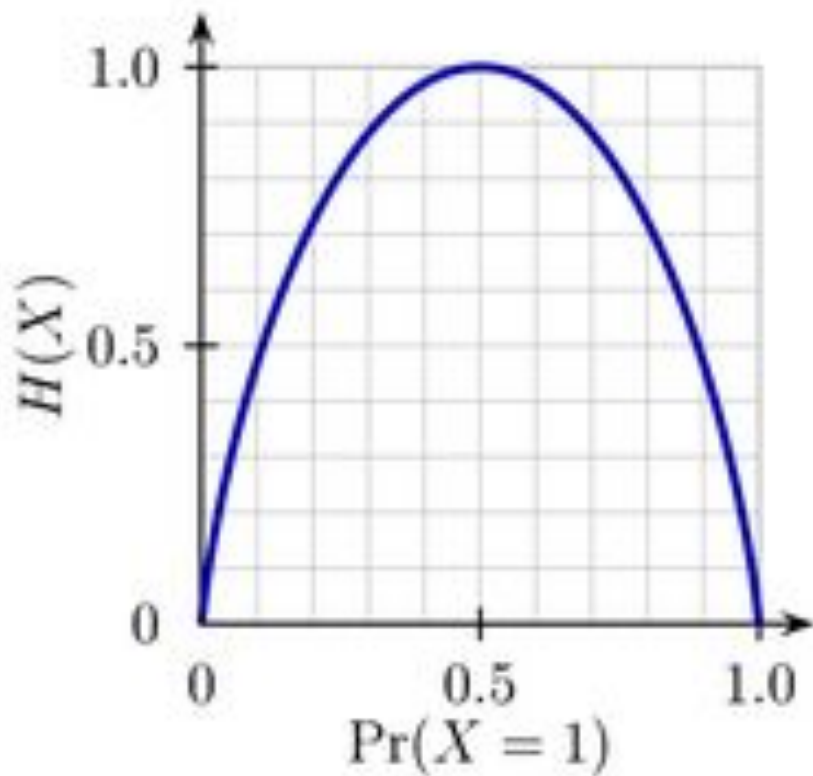
Определение

- entropia – (греч.) поворот, превращение

В теории информации **энтропия** – количество случайности, мера хаотичности информации, мера неопределенности

Предложена Клодом Шенноном в 1948 в работе «Математическая теория информации»

Энтропия



*энтропия испытания Бернулли
как функция вероятности
успеха*



Информационная энтропия

для независимых случайных событий x с n возможными состояниями (от 1 до n) рассчитывается по формуле:

$$H(x) = - \sum_{i=1}^n p(i) \log_2 p(i).$$

Определение энтропии сделано на основе следующих предположений:



- Мера должна быть непрерывной; т. е. изменение значения величины вероятности на малую величину должно вызывать малое результирующее изменение энтропии;
- В случае, когда все варианты равновероятны, увеличение количества вариантов должно всегда увеличивать полную энтропию;
- Должна быть возможность сделать выбор в два шага, в которых энтропия конечного результата должна будет являться суммой энтропий промежуточных результатов.

Оценка энтропии текста (модель Маркова)



Двоичная энтропия:

$$H(\mathcal{S}) = - \sum p_i \log_2 p_i,$$

Для Марковской модели первого порядка:

$$H(\mathcal{S}) = - \sum_i p_i \sum_j p_i(j) \log_2 p_i(j),$$

Для Марковской модели второго порядка:

$$H(\mathcal{S}) = - \sum_i p_i \sum_j p_i(j) \sum_k p_{i,j}(k) \log p_{i,j}(k).$$

Для Марковской модели порядка b :

$$H_b(\mathcal{S}) = - \sum_{i=1}^n p_i \log_b p_i$$

Вывод шенноновской энтропии



$$P = \sum_{i=1}^n A_i$$

$$p = \frac{\Omega}{T} = \frac{P!}{A_1! A_2! A_3! \dots A_n!} \left(\frac{1}{n}\right)^P, \text{ где}$$

$$\Omega = \frac{P!}{A_1! A_2! A_3! \dots A_n!}$$

– число возможных комбинаций исходов (событий), соответствующее данному распределению

$$T = n^P$$

– число возможных комбинаций исходов для группы событий P .



$$H = \log \Omega = \log \frac{P!}{A_1! A_2! A_3! \dots A_n!}$$

$$= \log P! - \log A_1! - \log A_2! - \log A_3! - \dots - \log A_n!$$

$$= \sum_i^P \log i - \sum_i^{A_1} \log i - \sum_i^{A_2} \log i - \dots - \sum_i^{A_n} \log i$$

$$H = \int_1^P \log x \, dx - \int_1^{A_1} \log x \, dx - \int_1^{A_2} \log x \, dx - \dots - \int_1^{A_n} \log x \, dx.$$

$$\int \log x \, dx = x \log x - \int x \frac{dx}{x} = x \log x - x.$$



$$\begin{aligned} H &= (P \log P - P + 1) - (A_1 \log A_1 - A_1 + 1) - (A_2 \log A_2 - A_2 + 1) - \dots - (A_n \log A_n - A_n + 1) \\ &= (P \log P + 1) - (A_1 \log A_1 + 1) - (A_2 \log A_2 + 1) - \dots - (A_n \log A_n + 1) \\ &= P \log P - \sum_{x=1}^n A_x \log A_x + (1 - n) \end{aligned}$$

Заменим A_x на $p_x = A_x/P$ и P на 1

$$H = (1 - n) - \sum_{x=1}^n p_x \log p_x$$

$$H = - \sum_{x=1}^n p_x \log p_x$$



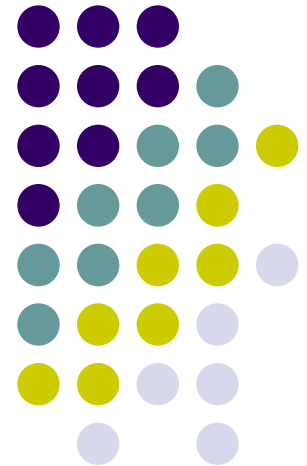
Таким образом, энтропия по Шеннону является решением уравнения:

$$H = \log \Omega$$

$$S = K \ln \Omega$$

- уравнение Больцмана для энтропии в термодинамике

***Понятие энтропии в
статистической физике***



Предмет статистической физики



- **Статистическая физика** - раздел физики, задача которого выразить свойства макроскопических тел, т. е. систем, состоящих из очень большого числа одинаковых частиц, через свойства этих частиц и взаимодействие между ними.
- Исторически возникла в конце XIX века из попыток провести механистическое обоснование законов термодинамики в работах Дж. Максвелла и Л.Больцмана. Практически полное завершение формальный аппарат статистической механики получил в фундаментальном труде Дж.В.Гиббса, появившимся в самом начале XX века.
- Традиционно подразумевается, что статистическая физика рассматривает системы, состоящие из большого числа частиц.
- В настоящее время статистическая физика вышла далеко за рамки первоначальных задач обоснования термодинамики и ее методы и идеология пронизывают, фактически, все основные разделы современной теоретической физики.

Статистический подход



- Если в какой-то момент времени заданы координаты и скорости всех частиц тела и известен закон их взаимодействия, то, решая уравнения механики, можно было бы найти эти координаты и скорости в любой последующий момент времени и тем самым полностью определить состояние исследуемого тела.
- в 1 см³ газа при температуре 0 °С и давлении в 1 *атм* содержится примерно $2,7 \cdot 10^{19}$ молекул.
- Однако именно большое число частиц в макроскопических телах приводит к появлению новых, статистических, закономерностей в поведении таких тел.
- Задачей теории должно являться вычисление не точных значений различных физических величин для макроскопических тел, а средних значений этих величин по времени.



Движение в фазовом пространстве

- Рассмотрим систему из N одинаковых взаимодействующих частиц, находящихся в конечном, но макроскопически достаточно большом объеме V .
- Состояние k -ой частицы задается значениями ее координат q_k и импульса p_k , а состояние всей системы — заданием значений всех координат q_1, q_2, \dots, q_N и импульсов p_1, p_2, \dots, p_N .
- Таким образом, состояние системы может быть описано заданием точки в $6N$ -мерном фазовом пространстве: $(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N)$ — фазовой точки.

- Гамильтониан системы:

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} U(|q_i - q_k|)$$

- Уравнения движения:

$$\frac{dq_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}; \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

$$q_k' = \frac{p_k}{m} \quad p_k' = -\sum_{i \neq k} \frac{\partial U(|q_i - q_k|)}{\partial q_k} = F_k$$

Движение в фазовом пространстве



- Траектория фазовой точки в фазовом пространстве называется фазовой траекторией.
- Для консервативных систем энергия сохраняется. Следовательно, фазовая траектория должна лежать на поверхности постоянной энергии в фазовом пространстве - эргодической поверхности



Статистические ансамбли

- **Статистический ансамбль** - совокупность сколь угодно большого числа одинаковых физических систем многих частиц («копий» данной системы), находящихся в одинаковых макроскопических состояниях; при этом микроскопические состояния системы могут принимать все возможные значения, совместимые с заданными значениями макроскопических параметров, определяющих её макроскопическое состояние.
- Неизвестно, где находится конкретно фазовая точка на эргодической поверхности в любой момент времени.
- Статистический подход заключается в том, что мы можем попытаться определить *вероятность* реализации совокупности всех возможных микросостояний системы, отвечающих данному ее макросостоянию.



Статистические ансамбли

- Статистический ансамбль задается *функцией распределения* $\rho(p, q, t)$
- $dw = \rho(p, q, t) dpdq$
- Условие нормировки: $\int dpdq \rho(p, q, t) = 1$
- Минимальный размер фазовой ячейки для одномерного движения i -й частицы:

$$h = 2\pi\hbar$$

- $N!$ – число перестановок N тождественных частиц
- Условие нормировки с учетом новых данных:

$$\int \rho(q, p, t) \frac{dpdq}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} = 1$$



Микроканонический ансамбль

- Функция распределения $\rho(p, q)$ ансамбля постоянна в слое фазового пространства между двумя изоэнергетическими поверхностями, соответствующими энергиям E и $E + \Delta E$ ($\Delta E \ll E$), и равна нулю вне этого слоя:

$$\rho(q, p) = \begin{cases} [\Omega(E, N, E)]^{-1} & H(q, p) \leq E < E + \Delta E \\ 0 & \text{вне этого слоя} \end{cases}$$

- Распределение выражает принцип равновероятности микросостояний замкнутой равновесной системы, соответствующих данному макроскопическому состоянию.



Статистический вес

- Константа $\Omega(E, N, V)$ называется статистическим весом и определяется из условия нормировки:

$$\int \rho(q, p) \frac{dqdp}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} = 1$$

$$\int_{E \leq H(q, p) \leq \Delta E} \frac{dqdp}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{1}{\Omega(E, N, V)} = 1$$

$$\Omega(E, N, V) = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \int_{E \leq H(q, p) \leq \Delta E} dqdp$$

- Физический смысл - число квантовых состояний в слое ΔE .

Энтропия



- Логарифм функции распределения с обратным знаком:

$$\eta = -\ln \rho(q, p, t)$$

- Энтропия:

$$S = \langle \eta \rangle = - \int \rho(q, p, t) \frac{dqdp}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \ln(\rho(q, p, t))$$

$$\rho(q, p) = \begin{cases} [\Omega(E, N, V)]^{-1} & H(q, p) \leq E, \quad \Delta \\ 0 & \text{вне этого слоя} \end{cases}$$

$$S(E, N, V) = - \int_{E \leq H(q, p) \leq E + \Delta E} \frac{dqdp}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{1}{\Omega(E, N, V)} \ln\left(\frac{1}{\Omega(E, N, V)}\right)$$

$$\Omega(E, N, V) = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \int_{E \leq H(q, p) \leq E + \Delta E} dqdp, \Rightarrow$$

$$S(E, N, V) = - \int_{E \leq H(q, p) \leq E + \Delta E} \frac{dqdp}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{1}{\Omega(E, N, V)} \ln\left(\frac{1}{\Omega(E, N, V)}\right) = \ln(\Omega(E, N, V))$$



Статистический смысл энтропии

- Пусть макроскопическое состояние системы, кроме значений E , N , V характеризуется какими-либо параметрами x или (x_1, x_2, \dots, x_n) .

- Вероятность реализации состояния (E, N, V, x) :

$$\omega(x) = \frac{\Omega(E, N, V, x)}{\sum_x \Omega(E, N, V, x)} = C \exp(\ln(\Omega(E, N, V, x))) = C \exp(S(E, N, V, x))$$

- В большинстве случаев наиболее вероятное значение x^* и среднее значение $\langle x \rangle$ величины x совпадают друг с другом.
- $S(E, N, V, x^*) = \text{Max}$
- Равновесное состояние является состоянием с максимальным статистическим весом, наиболее вероятным состоянием.



Закон возрастания энтропии

- Процесс перехода системы из неравновесного состояния в равновесное есть процесс перехода из менее вероятных состояний в более вероятные.
- Энтропия замкнутой системы может только увеличиваться.
- Если состояние замкнутой системы в некоторый момент времени задано макроскопическим образом, то наиболее вероятным следствием в некоторый другой момент времени будет возрастание энтропии.