

简论物理学中熵概念的泛化

程民治

(巢湖师专物理系 安徽 238000)

熵是物理学中一个非常重要的概念,它是用来描述和研究自然界中广泛存在的运动形式转化的不可逆性的.自从克劳修斯于1850年提出热力学第二定律及1865年引进了一个态函数——熵,并从数学上严格证明了“熵增原理”进而完成了第二定律的量化问题之后,熵概念便很快被泛化,同时在泛化过程中引起了熵概念的层次性.由此在物理学科的内外开辟了一个又一个新的研究领域,成为众多学科发展的“关节”和“引线”.怪不得爱因斯坦赞誉熵是所有科学定律中的第一定律;爱丁顿将熵称为整个宇宙中至高无上的哲学定律.本文拟就熵概念的泛化及其层次性问题,作一简要的论述.

一、熵与热力学

熵诞生于热力学这门学科,在热力学中克劳修斯对熵的定义是:

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \int_1^2 \frac{dQ}{T} \quad (1)$$

式中 S_1 和 S_2 分别表示在状态1和状态2时的熵, T 是绝对温度, Q 为热量, $S_2 - S_1$ 叫熵变.若系统经历了一个可逆过程,(1)式中的函数值是一个与变化的具体途径(或积分路径)无关的量.因此,熵是系统的一个状态函数.

引入熵概念以后,热力学第二定律可表述为:任何系统都存在熵这个态函数,在可逆过程中系统熵的变化等于系统所吸收的热量与热源温度之比,在不可逆过程中,熵变大于热温比.如果用公式表示,即为:

$$S_2 - S_1 \geq \int_1^2 \frac{dQ}{T}$$

(等号对应可逆过程,大于号对应不可逆过程)由此可知,在封闭系统中发生任何不可逆过程导致熵的增加,熵只有对可逆过程才是不变的.这一结论叫做熵增加原理.并有如下推论:

(1)在孤立系统中不可逆过程熵变大于零,

可逆循环中系统的熵变等于零.

(2)不可逆过程都是由非平衡态趋向平衡态的过程,所以平衡态对应高熵态.

从上不难看出在这里熵是一个反映热运动变化过程和方向的物理量.具体地说,熵对系统演化过程发生的条件、运行的方向和运行的限度等都提供了普遍的判据.如过程能否发生,能发生的话,是否可逆,都可以从熵的变化来加以判断.

二、熵与几何热力学

熵概念诞生后,数学物理学家吉布斯很快对它产生了极大的兴趣.他提出用温-熵图的几何方法描述流体热力学的特性.这样做的结果既能给热力学第二定律一个清晰的基本表达,又能表示出某种物质的汽、液、固三相共存的状态.1873年吉布斯在“流体热力学的图解方法”这篇论文中引入了各种不同平面的温-熵图,并提出以它名字命名的流体热力学的基本方程:

$$dU = TdS - PdV \quad (2)$$

式中 T 、 P 、 V 、 U 、 S 分别为温度、压强、体积、内能和熵.接着,吉布斯以熵、体积和内能为坐标轴,把热力学由二维扩充到三维,用微分几何的方法解决了纯净物质不同相的共存和临界现象等问题.

正是吉布斯将熵概念与几何方法相结合,才导致了几何热力学的创立.

三、熵与统计物理学

1877年玻尔兹曼在研究分子运动统计现象的基础上,提出了将热力学的宏观量(熵)和微观量(几率)联系起来的关系式:

$$S = k \ln W \quad (3)$$

式中 k 是玻尔兹曼常数, S 是系统的熵, W 是系统的状态几率(又叫热力学几率).从而使我们能够用熵概念来反映宏观、微观两个层次上

系统状态变量之间的联系。

(3)式被称为玻尔兹曼定律,这个关系式表明:系统某一状态熵的大小与该宏观状态所对应的微观态的数目的多寡有关,而与任一给定的宏观状态相对应的微观状态数的多少,又反映了系统“无序度”或“混乱度”的大小,平衡态熵最大意味着系统内部无序度最大,所以熵是系统内部粒子无序度的量度。这里所谓的无序度,是指客观事物或系统组成要素之间无规则的联系和转化的程度。

(3)式还给出了熵的统计解释,熵增加原理的微观实质是:孤立系统内部发生的过程总是从热力学几率小的状态向热力学几率大的状态过渡。于是,在热力学中很难理解其意义的熵的本质也就被揭示出来了。为了纪念玻尔兹曼将熵概念由热力学中的热温比扩展到微观状态数这一伟大成就,人们将玻尔兹曼定律 $S = k \ln W$ 刻在了他的墓碑上。

四、熵与生物学

奥地利理论物理学家、量子力学理论的创始人之一薛定谔,应用热力学和统计力学等物理学理论来解释生命的本质,开拓了熵跨学科发展的新天地。他最先提出负熵的概念及其与生物生长和进化的关系。薛定谔在他于1944年出版的《生命是什么——活细胞的物理观》一书中,以物理学家的眼光审视和研究了活细胞。在他看来,无生命物质中可具有周期性晶体结构,然而生命物质却以非周期性晶体结构形式出现……,生命物质的有序性比无生命物质高得多。生命有它的热力学基础,但不是用经典热力学定律来解决的,因为有机体是一个开放的、处于非平衡态的系统。薛定谔提出的“生物赖负熵为生”(或译“生物以负熵为食”)的名言,至今仍然脍炙人口,并定义负熵为带负号的熵,即负熵 $= -k \ln W$ 。这就是说,他认为“一个生命有机体在不断地增加它的熵——你或者可以说是增加正熵,并趋于熵为极大值的状态,那就是死亡,要摆脱死亡,就是说要活着,唯一的办法就是从环境里不断汲取负熵。”“新陈代谢中本质的东西,乃是使有机体成功地消除了当它活着

时不得不产生的全部的熵”。亦即任何活的有机物,都通过不断地从它的外界环境中吸取负熵,用它来维持自己相当高的有序能力。这样,生命就能避免退化到死亡的无序状态。比如,高等动物所摄取的食物,其原来的状态是极为有序的,动物在食用这些食物后,排泄出来的就是其有序性大大降低了的东西,而不是另外的有序的物质和能量。这一过程说明了生命有机体就是赖环境的负熵为生的。

由熵概念引发“负熵”这一新概念是薛定谔研究工作的关键,由于熵与系统的无序性联系在一起,那么负熵自然而然与有机体的有序性联系在一起,薛定谔借助熵概念开辟了以物理学语言描述和分析生命本质的一个新方向。后来,随着信息论的提出,负熵的概念被进一步确立,及至普里高金创立耗散结构理论,负熵(流)已成为说明自然界进化机制的极重要的概念。

人们从研究中还逐步发现,熵概念除了有如上所述的宏观与微观层次上的区别与联系之外,不同物质层次之间的熵具有很大的差别性。众所周知,生物的进化过程是一个复杂的系统,我们在对它进行研究时,就应当考虑这个复杂的生命系统中不同层次之间的熵值。这一方面体现在不同层次之间,熵值的大小不一样,另一方面体现在熵值随时间的变化也不一样。例如,从生物个体来看,从单细胞到多细胞生物,生物体器官结构越来越复杂,功能越来越多,其有序程度也越来越高,用来描述生物体无序程度的熵值越来越小,亦即在进化过程中,生物体的熵值随时间减少,并且由于进化,在生物体越来越复杂有序的同时,生物的种类越来越多。为了描述在一定宏观条件下生物种类多少的不确定性,我们可以引入一个熵值,其值大小反映物种的多少,物种越多,对应的熵值越大,而且这种熵变同样反映了生物进化的某种变化趋势。我们可以把与生物个体结构复杂性对应的熵定义为结构熵,而把与物种变化相对应的熵称为演化熵。显而易见,结构熵随时间变小,反映生物个体的进化越来越复杂;演化熵随时间增大,则说明生物种类的增多。从原则上讲,对于由 N

个层次组成的复杂系统,至少可以建立 $(N-1)$ 个熵来反映它们各层次之间不确定的程度.这些熵不仅大小不一样,而且它们随时间变化的趋势也不一样,更为重要的,它们反映的内容不一样,有质的区别.

按照同样的道理,复杂系统不同层次的熵的减小的方式也可以是不同的,即“负熵(流)”同其对应的熵一样,也有层次之分,相互之间一般也是不可比较的.例如,对于人这样的复杂系统,从身体本身而言,有生物学意义上的结构熵,其减少可以通过摄入食物而达到;同时他在记忆和知识的获取方面存在的混乱可以用信息熵来表述,而信息熵的减少则可以从学习中逐渐引入信息来达到;另外,作为社会的一分子,根据他的行为的随机性我们甚至可以定义某种“行为熵”,而这种熵则可以通过社会道德规范以至法律的制约来减少.

熵与生物学的关系还表现在下面“熵与信息论”中即将讨论的“生物群体融合对熵变的影响”.

五、熵与信息论

我们知道,申农是信息论的创始人,他对通讯理论的贡献之一就是提出信息量这一概念,并给出了度量信息量的数学公式.申农认为,通讯的实质就是复制消息,使收信人消除不确定性,他主张用信息量这一概念来度量所消除的收信者不定性的多少,并建议将含有两个独立等概率可能状态的事件(如投硬币)所具有的不定性全部消除所需的信息量叫一个单位信息量,并称之为一个比特,在这种单位制下信息量的定义公式为:

$$H(X) = -C \sum_{i=1}^n P(X_i) \log_2 P(X_i) \quad (4)$$

式中 C 为常数, X_i 表示第 i 个状态, $P(X_i)$ 是第 i 个状态出现的几率, $H(X)$ 是用以消除这个系统不定性需要的信息量.

在申农对信息量确定名称时,一代数学巨匠冯·诺依曼建议称为熵,理由是不定性函数在统计力学中已经用在熵里面了;控制论的创始人维纳说:“信息量的概念非常自然地隶属于

统计力学的一个古典概念——熵.正如一个系统中的信息量是它的组织化程度的度量;这一个正好是那一个的负数.”还有些科学家也认为:“熵的获得永远意味着信息的丢失,而不是别的.”这说明信息与熵是一对相反的量,信息就是负熵,在信息熵公式中有负号表示系统获得信息后无序状态的减少或消除.或者说,一个系统的状态越是有序,它告诉我们的信息就越多;状态越是无序,它给我们的信息就越少.熵增加就意味着信息的减少.所以玻尔兹曼写道:“熵是一个系统失去信息的量度”.一个系统有序度越高,它的熵越小,信息量就越大.还可以说:熵代表无知的程度,信息代表知识的多少,二者是互补的关系.

在通讯理论中,熵概念得到了又一次扩展,在这个扩展中我们又一次看到熵与概率论的密切关系,看到熵不一定必须与热力学过程相联系,也未必非与分子热运动相联系,这就为熵移植到更广阔的领域打开了大门.熵向“理论生物物理遗传学”中的渗透就是一个极为生动的例证.鉴于篇幅所限,这里仅介绍生物群体融合对熵变的影响,以示一斑.

设有 K 个生物群体,其中有 l 种遗传基因,在第 i 个群体中第 j 种基因的频率为 $P_{ij}(i=1, 2, \dots, k; j=1, 2, \dots, l)$.其基因熵可用上文中信息论的申农公式(4)计算:

$$H_i = - \sum_{j=1}^l P_{ij} \log_2 P_{ij}$$

式中 H_i 是 $[0, 1]$ 区间的凸函数.凸函数有一个重要性质,即:平均值的函数 $>$ 函数的平均值.

上述 k 个群体相互融合成一个大群体后,大群体的基因频率等于原来 k 个群体的平均基因频率,而大群体的基因熵则为原来 k 个群体的平均基因频率的申农函数.根据凸函数的性质,融合后的基因熵 $>$ 原来 k 个群体的平均基因熵,亦即群体融合往往导致基因熵增加.

基因熵是生物群体遗传混杂程度的一种量度.融合导致熵增加,即混杂度增加,是对抗进化的因素.只有通过选择作用(包括自然选择和人工选择)提供信息或负熵,才能导致生物进化.

六、熵与耗散结构理论

普里高津以其耗散结构的理论引起了宏观物理学领域的革命。这一变革的主要特点是普里高津从定义非平衡系统的熵开始,引入一系列新概念,把热力学从平衡态拓展到线性近平衡态,进而拓展到远离平衡态,并用这一理论去说明物理、化学、生物系统在远离平衡区的有序现象,取得极大成功,普里高津因而获得1977年诺贝尔化学奖。

普里高津认为熵增原理描述的是孤立系统,对于开放系统必须考虑系统与外界交换能量和物质所引起的熵变 $d_e S$,以及系统内部由于不可逆过程造成的熵变 $d_i S$,即对于开放系统有:

$$ds = d_e S + d_i S \quad (5)$$

式中 $d_e S$ 可正可负,但 $d_i S$ 总是大于零的。若外界提供足够的负熵流 $d_e S < 0$,且 $|d_e S| > d_i S$ 则可使 $ds < 0$,这就是说在不违反热力学第二定律的条件下,远离平衡的非线性系统可以通过负熵流来减少总熵,从而使系统从无序态变为有序态即耗散结构状态,所以普里高津认为“非平衡可以是有序之源”。这个理论已在化学、生物、物理、经济等领域获得广泛应用。

克劳修斯根据热力学的熵增原理,认为整个宇宙将自发地由有序变为无序,最后达到平衡态,也就是死亡。而达尔文的生物进化论却告诉我们从单细胞生物发展到人,进化的方向越来越复杂,越来越有序;物理学和生物学都讲变

关于我国超导研究近况

最近十年来,我国科学家在超导研究和开发上做出了较多成果,累计发表学术论文2000多篇。在探索新的超导材料,研究高温超导材料的电磁性质、高温超导体的弱连接效应,发展铜氧化物材料的实用成材技术,薄膜技术,发展高温超导电子器件等方面,都做出了有先进水平的成果,有些方面处于世界前列。我国科学家研

化发展,但二者却具有迥然不同的方向。耗散结构理论在不违背热力学第二定律的前提下通过采用负熵流来抵消熵产生,使体系可能从原来无序状态向新的有序态转化,解决了长期以来热力学和进化论之间的矛盾,把物理规律和生物发展的规律初步统一起来,为用物理学、化学方法研究生物学开辟了道路,为自然科学、生命科学和人文科学三者的大统一勾画了一幅初步的蓝图。这是本世纪跨学科研究的重大成果之一。

熵概念的泛化除以上所述的之外,宇宙学家莱泽和弗洛奇还提出了宇宙进化中的熵变思想,尤其是在当今众多的自然科学和社会科学的学科中,诸如系统科学、哲学、文学、艺术、历史学和宗教学等,都广泛地涉及到了熵的概念及其应用问题,甚至熵还成了一种新的世界观。

总而言之,一百多年来熵概念在多学科中的泛化过程,实际上是不断认识熵概念深刻而丰富的内涵和不断拓广熵概念的外延的过程,也是在熵概念基础上不断引发新概念、开拓新研究领域、创立新的交叉学科的过程。与此同时,这也显示了熵的这股巨大的冲击力,已深刻地影响到了人类生活的各个方面。热力学理论正是通过其基本概念——熵的多学科发展而使自身永远站稳了脚跟!只要我们正确地理解熵及其相关概念的层次性,我们就能正确地把握熵概念的本质,澄清熵在泛化过程中所产生的各种混乱。更为重要的是,在熵概念被泛化时,就不会误解和滥用。

制的超导量子干涉器件,可在液氮温度下工作,能测量相当于地球磁场的一亿分之一的弱磁场,已开始应用于地球物理勘测。我国研制的高温超导电缆,已达到与美国、日本相当的水平。“九五”期间我国还将建设试验性的实用电缆。我国研制的超导材料,在悬浮能力、磁化性能等方面也达到了国际先进水平,正在开展磁悬浮火车等方面的应用实验。

摘自1997年3月19日《中国科学报》