

熵概念的演化*

韦 群

(湖北大学物理系 武汉 430062)

摘 要 介绍了熵概念从建立到深化、从进化直至泛化的整个发展过程,由此反映出物理概念和理论已成为众多新学科的理论基础,物理学在科学综合发展中起着先导作用.

关键词 进化,泛化,广义熵

EVOLUTION OF THE CONCEPT OF ENTROPY

Wei Qun

(Department of Physics, Hubei University, Wuhan 430062)

Abstract The evolutionary development of the concept of entropy—from its establishment to deeper understanding, to generalization is reviewed. The process reflects the underlying role that physical concepts and theories have played in the development of all fields of science.

Key words evolution, extensionalization, generalized entropy

熵是一个重要的物理概念,又是一个发展十分活跃的基本概念.自1865年诞生以来,它已从孤立系统发展到开放系统,由平衡态发展到非平衡态,由线性系统发展到非线性系统.本世纪以来,随着科学综合化的发展,熵又远远超出物理学范围,在自然科学和社会科学众多领域得到广泛应用,并成为一些新学科的理论基础,由狭义熵发展为广义熵(泛熵).正如爱因斯坦的评价那样:“熵理论对于整个科学来说是第一法则”.熵概念的演化过程,从一个侧面映射物理学自身发展的内在逻辑,以及物理学在科学综合化发展中的先导作用.

1 熵概念的建立

在自然界中,任何实际的宏观过程除必须遵从能量守恒之外,还存在着一个能量转换和传递的方向问题.热力学第二定律就是关于过程进行方向的规律,它指出,一切与热现象有关的实际宏观过程都是不可逆的,即具有单向性.为了寻求判断实际过程方向的普适判据,给热

力学第二定律—数学表述形式,克劳修斯进行了研究.根据热力学第二定律概括的过程单向性的经验,是系统的初态和末态的差异决定了过程的方向.由此预期,可以找到一个新的态函数,用这个态函数在初、终两态的差异来对过程进行的方向作出数学分析.经过14年艰辛探索,克劳修斯终于找到这个物理量,1865年正式给它定名为熵,并用符号 S 表示.

对于可逆过程有

$$dS = \frac{dQ}{T}, \quad (1)$$

$$S_b - S_a = \int_a^b \frac{dQ}{T}. \quad (2)$$

对于不可逆过程则有

$$dS > \frac{dQ}{T}, \quad (3)$$

或

$$S_b - S_a > \int_a^b \frac{dQ}{T}. \quad (4)$$

* 1998-10-19 收到初稿,1999-01-04 修回

式中, a 表示初始状态, b 表示终末状态, S_a 、 S_b 分别对应于 a 、 b 状态的熵值, dQ 为系统在微变化过程中从温度为 T 的热源所吸收的热量.

由上列各式可见, 在可逆微变化过程中, 熵的变化等于系统从热源吸收的热量与热源的温比, 在不可逆微变化过程中, 熵的变化大于这个比. 这是热力学第二定律的直接结果和概括, 它正是该定律的数学表达式. 而“ S ”亦称热力学熵.

从热力学第二定律的熵表述形式可知, 在孤立系统中, 如果变化过程是可逆的, 则熵不变; 如果过程是不可逆的, 则熵增加, 当熵增大到最大值时, 系统处于平衡态. 即一个孤立系统的熵永不减少, 这叫做熵增加原理. 根据这一原理, 以熵变为判据, 不仅可以判断过程进行的方向, 而且还能给出孤立系统达到平衡的必要条件. 熵增加原理揭示了一切自发过程都是不可逆的这一共同本质.

关于热力学熵的含义, 从热力学的角度来讲, 它是不可用能的量度. 在没有外界作用下, 一个系统的熵越增, 不可用能就越大. 换言之, 对于相等的能量, 它们的利用价值可以大不相同.

2 熵概念的发展

纵观熵概念的演化历程, 展现在人们面前的是一幅幅丰富多彩、充满活力的历史画面, 它循着纵向深入和横向拓广两条线索交错发展, 使熵概念的内涵逐步深刻, 包含的内容愈加丰富.

2.1 熵概念的深化

熵的本质是什么? 玻尔兹曼首先引用统计方法, 在概率论的基础上阐明了熵的微观意义, 论述了热力学第二定律的实质, 从而使熵这一抽象概念的物理意义得到深入的解释.

玻尔兹曼将熵与系统的热力学概率联系起来, 建立了著名的玻尔兹曼关系式

$$S = k \ln W, \quad (5)$$

其中 k 是玻尔兹曼常数, W 是热力学概率, 即

与任一给定宏观状态相对应的微观状态数.

(5)式给出了熵的统计意义, 解释了熵的微观本质, 所谓熵, 是反映系统宏观态所具有的微观状态数目或热力学概率的量. 热力学概率愈大, 表示系统的状态愈混乱无序, 从这个意义上讲, 熵是系统无序度或混乱度的量度. (5)式还表明了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概率小的状态向热力学概率大的状态过渡, 熵的增加意味着系统无序程度的增加.

玻尔兹曼关系式中的熵称作统计熵, 它是热力学熵的微观解释, 其实熵的物理含义更为深刻. (5)式也可表为另一形式, 若一个系统共有 W 个微观状态数, 按照等概率原理, 每个微观状态出现的概率均为 $1/W$, 这样, 玻尔兹曼关系就可写为

$$S = -k \sum_i \frac{1}{W} \ln \left(\frac{1}{W} \right), \quad (6)$$

如以 P 表示概率, $P = 1/W$, 上式又可写为

$$S = -k \sum P \ln P. \quad (7)$$

将概率引入热力学第二定律, 建立熵与概率之间的联系, 这在物理学发展史中具有突破性的重要意义, 因为正是这一崭新的观念, 终于在 20 世纪使统治物理学思想近 3 个世纪之久的机械决定论全面崩溃, 概率将偶然性引进了物理学的殿堂. 此外, 概率理论对于物理学的综合发展起着不可估量的作用. 历史上首次沟通热学和力学的尝试, 就是求助于概率. 对于复杂过程的研究, 不论其是偶然的或者是决定论的, 只有用统计方法才更为方便, 而统计熵的提出, 又为熵的发展播下了“综合”的种子, 熵增加原理被推广到一切物质形态中, 使之具有更加普遍的价值. 可以说, 统计熵是沟通物理学与其他自然科学、社会科学的桥梁, 是熵概念泛化的关键因素.

2.2 熵概念的进化

本世纪 40 年代至 50 年代, 为了寻找自组织现象从无序到有序转化的规律, 以普里高京为首的布鲁塞尔学派把平衡态(经典)热力学推广到非平衡态, 将原本孤立系统的熵概念扩展

物理

到开放系统,从而建立了非平衡态热力学.它包括熵的平衡方程、非平衡线性区的最小熵产生定理以及远离平衡区域的耗结构理论.这一理论超越经典热力学范畴,在其他学科领域中表现出广阔的应用前景,

2.2.1 熵的平衡方程

对于非孤立系统,熵的变化由两部分组成:一是系统内部的不可逆过程引起的熵变化,称为熵产生 $d_i S$;二是系统与外界交换能量或(和)物质所引起的熵变化,称为熵流 $d_e S$;整个系统熵的变化 dS 可表为熵的平衡方程:

$$dS = d_e S + d_i S. \quad (8)$$

显然,熵产生 $d_i S$ 永远不可能是负的,总有

$$d_i S \geq 0, \quad (9)$$

对于孤立系统 $d_e S = 0$,则

$$dS = d_i S \geq 0, \quad (10)$$

这就回到经典热力学熵增加原理上,即孤立系中不可能发生熵减小的过程.

一般而言,熵流可以是正值、零或负值,因此系统熵变化的符号是不确定的.由熵的统计意义可知,熵是系统无序程度的量度.(8)式表明,对于封闭系或开放系,要使系统的熵减少,或者说要使系统进入比原来更有序的状态,就必须由外界环境向系统提供足够的负熵流,从而可得

$$dS = d_i S + d_e S < 0.$$

因此,一个封闭系或开放系存在着从无序到有序转化的可能性.

2.2.2 最小熵产生定理

处于非平衡状态的系统,其内部会出现一种或几种“流”,从而产生一种或几种不可逆过程,例如热流、质量流和电流.每一种“流”可以对应一种推动“力”,即指在外界影响下系统中存在的相应梯度,如温度梯度、浓度梯度和电势梯度,它们是产生“流”的原因,亦称广义力.

流 J 和力 X 的关系通常是复杂的,但若系统对平衡态的偏离很小时,两者呈线性关系

$$J_k = L_{ki} X_i, \quad (11)$$

式中 L_{ki} 为比例系数,这种近平衡称为线性非

平衡.普里高京以“局域平衡”的假设作为非平衡态热力学的基本出发点,在昂萨格对易关系基础上导出描述线性非平衡态的一个重要原理——最小熵产生定理.

单位时间的熵产生叫做熵产生率 $p = \frac{d_i S}{dt}$,根据热力学第二定律, $d_i S \geq 0$,所以熵产生率总是正值,即

$$p \geq 0, \quad (12)$$

熵产生率的大小依赖于各种不可逆过程流和力的大小,为流与力的乘积

$$p = \sum_j J_j X_j.$$

进一步分析在非平衡线性区熵产生率随时间的变化,可证明出如下关系

$$\frac{dp}{dt} \leq 0, \quad (13)$$

$\frac{dp}{dt} = 0$ 对应定态, $\frac{dp}{dt} < 0$ 远离定态,从(12)和(13)式可以得到一个结论:在确定的边界条件下,线性区定态的熵产生具有极小值,这就是最小熵产生定理,(13)式为其表达式.从这个定理还能得到一个推论:线性区的定态是稳定的.

在经典热力学中,借助于熵函数 S 导出熵增加原理 $dS \geq 0$,以此作为系统演化的判据.孤立系统必然朝着熵增加的方向演化,最后达到平衡态,此时系统的熵最大,熵产生率为零.在非平衡热力学中,则以熵产生率 p 这一函数为标志,对于线性非平衡态是用最小熵产生定理

$\frac{dp}{dt} \leq 0$ 作为系统演化的判据,由此判定系统的稳定性.只要系统偏离平衡态不远,则系统总是趋向定态,即使有某种扰动,熵产生将增加,但最终系统必然恢复到熵产生率的最小值,即回到原来的定态,这正说明近平衡的定态是稳定的.一般来说,线性区的定态具有和平衡态类似的无序特性.可见,在偏离平衡态较小的线性区,系统是朝着均匀、无序、低级和简单的方向发展,而那种由无序到有序、由低级到高级的进化,即自组织现象,显然不可能在这个区域内发生.

2.2.3 耗散结构理论

由上述可知,平衡系统与线性非平衡系统的演化判据与稳定性是互相密切联系的,演化判据的存在即保证对应定态稳定性判据的存在.然而,当系统远离平衡时,平衡态熵已失去意义,最小熵产生定理也已失效,流和力的关系不再满足线性关系.均匀的非平衡定态有可能失去稳定性,由此而产生时空有序结构.因为任何一种有序状态的出现,都可以看作是某种无序的参考状态失去稳定性的结果.这意味着,非平衡的不可逆过程,并不总是像在近平衡态那样,起着一种破坏有序的作用;相反,它也可以成为形成有序结构所不能缺少的因素,这正是普里高京所说的“非平衡是有序之源”.

对于远离平衡的系统同样可导出其稳定性判据,若系统的一个或几个流与力有任意涨落 δJ_i 或 δX_i ,则熵值变成 $S = S(t)$,并且熵产生率也变得随时间变化, $p = p(t)$.普里高京再次推广熵和熵产生概念,从而得到远离平衡的稳定性判据.涨落力 (δX_i) 与涨落流 (δJ_i) 所引起的部分熵产生 (δ_{xp}),称为超熵产生或过剩熵产生,并有下列关系

$$\delta_{xp} = \frac{1}{2} \delta^2 p = \int dV \sum_k \delta X_k \delta J_k, \quad (14)$$

还可以证明

$$\delta_{xp} = \frac{d}{dt} \frac{1}{2} (\delta^2 S) \geq 0, \quad (15)$$

(15)式表明熵的二次微分的时间导数恰好是超熵产生,且具有不确定的符号,此式将具有明确演化方向的量 $\delta^2 S$,与 δ_{xp} 联系起来,而 δ_{xp} 可从随机涨落求得,因此,(15)式便可充当稳定性判据.

$\delta^2 S$ 度量的是源于扰动的对定态的偏离(由于“局域平衡”条件要求 $d^2 S \leq 0$).如果 $\delta^2 S$ 随时间减少,那么 $(\frac{d}{dt}) \delta^2 S > 0$,则系统返回至参考定态,它是稳定的.如果 $\delta^2 S$ 随时间增加, $(\frac{d}{dt}) \delta^2 S < 0$,则系统将不能返回至参考定态,它是不稳定的.故远离平衡态的稳定性是可以由超熵产生 δ_{xp} 的符号来判定的:

$$\left. \begin{array}{l} \delta_{xp} < 0 \text{ 系统不稳定} \\ \delta_{xp} > 0 \text{ 系统稳定} \\ \delta_{xp} = 0 \text{ 临界情况(边缘稳定性)}. \end{array} \right\} \quad (16)$$

通过调节外界条件,使系统逐渐偏离平衡态,经历远离平衡的临界状态, δ_{xp} 由 ≥ 0 变为 < 0 ,此时系统是不稳定的,小涨落可以被放大,个别的无规的局部涨落,通过非线性的相互作用和协调,能相互耦合而形成宏观的巨大的涨落,这种巨涨落可使系统形成新的有序结构,普里高京称它为耗散结构.耗散结构是自组织现象中出现的各种宏观有序结构,它们是通过能量耗散过程和内部的非线性动力学机制形成和维持时空有序结构的,它与平衡结构那种“死”的有序结构有本质区别.

经典热力学和统计物理学主要是研究系统的平衡结构,而耗散结构理论则是研究非平衡系统中的稳定有序结构,任何生物都是一个远离平衡态的开放系统,生物借以维持生命的新陈代谢就是在不断与周围环境进行能量和物质的交换,生命是一种远离平衡态的高度有序的结构即耗散结构.事实上,宇宙中各种各样的系统,无论是无生命的还是有生命的,不论是社会的还是观念的,都是与周围环境有着相互作用和相互依存关系的开放系统.耗散结构理论已被广泛应用于这些领域.

2.3 熵概念的泛化

近20年来,熵的概念已从狭义的热力学熵、统计熵发展为广义熵(泛熵),而且广义熵概念的外延比狭义熵更广.熵概念、熵理论已扩展到整个自然科学领域,并逐渐向社会科学和思维科学渗透,这正是熵概念的泛化.

2.3.1 信息熵

信息是信息论中一个重要的基本概念,自1948年仙农(E. Shannon)创立信息论以来,人们对信息概念的认识不断深化.如果从信息接收者的角度来定义信息,则“信息是能够减少或消除不确定性的一种客观存在和能动过程”.不确定性是一切客观事物的属性,当接收者未收到某事物的信息之前,对事物的认识是不确定的,一旦收到信息,就了解了该事物,即可以说

物理

对它的认识上的不确定性减少或消除了。

关于信息的度量,首先是仙农在通信领域进行研究的.他建立了由信源(信息的发送者),信道与编、译码器,信宿(信息的接收者)组成的通信系统模型.而信息量就是解除信源不确定度所需的信息的度量,或者说获得这样大的信息量后,信源不确定度就被解除.仙农以概率和数理统计为工具,提出度量信息量的数学公式,对于离散型信源,当它由若干随机事件所组成时,随机事件出现的不确定度用其出现的概率来描述.事件出现的可能性愈小,概率就愈小,而所含信息量却愈大;相反,事件出现可能性愈大,概率就愈大,而所含信息量却愈小,所以信息量可用事件出现概率的单调减函数来表示,若各事件概率分布不等,则信源提供的平均信息量 H 为

$$H = - \sum_{i=1}^n P(X_i) \log P(X_i), \quad (17)$$

式中 $P(X_i)$ 为某个事件 X_i 出现的概率, $-\log P(X_i)$ 为事件 X_i 所提供的信息量, H 取信息量的统计平均值.将(17)式与统计熵的(7)式加以比较可以看出它们完全相似,统计熵是“综合”的种子,(17)式是(7)式的自然推广.故仙农称 H 为信源的信息熵,简称信息熵.

信息熵是从平均意义上描述信源的总体特征的.它表示信源输出的平均信息量,它表征信源的平均不确定性.信息熵越大,说明信源发出的平均信息量越大,而信息量大则表明信源发出信息的概率小,即信源的不确定度大.统计熵是反映系统所具有的可能微观状态数目,是系统不确定性或无序度的量度.可见,信息熵与统计熵在定义和性质上是等同的.从这个意义上讲,信息与负熵相当,信息的失去为负熵的增加所补偿,信息量即负熵.熵成为信息论这门新学科的先导,以致仙农的信息论被称为信息熵理论.此外,信息熵的定义,使得熵的概念得到推广,熵不仅不必与热力学过程相联系,而且也不必与微观分子运动相联系,它可以成为系统状态不确定程度的量度,这个状态可以是热力学的,也可以不是热力学的;可以是微观的,也可

以是宏观的.所以信息熵也称广义熵,它成为熵概念进一步外延的基础.

2.3.2 生物熵

对观测者而言,时间的推移是通过各种类型的与时间相关的不可逆过程来表现的.据此,所有与时间相关的过程都显示出熵性质,而生物进化是与时间相关的,可以说,生物进化是个熵过程,生命的许多基本问题与熵有着密切联系.

生物进化路线的方向,是由单细胞向多细胞演化;是从简单到复杂,由低级向高级或者说由较为有序向更加有序,精确有序方向进化;是沿熵减少的方向发展.这与孤立物理系统朝着无序化方向演化,指向熵最大的方向发展恰好相反.那么,这两类演化是否存在矛盾呢?其实二者并无矛盾,因为生物体是开放系统,根据非平衡态热力学可知,开放系统的熵决定于系统内的熵产生 $d_i S$ 以及与外界环境之间的熵流 $d_e S$.系统的熵可能增加,可能不变,也可能减少,总熵变化由熵平衡方程(8)表示:

$$dS = d_i S + d_e S.$$

因为 $d_i S > 0$,而 $d_e S$ 的正负取决于环境.当系统从外界获得的负熵流大于系统内部的熵产生,即 $-d_e S > d_i S$ 时,有

$$dS < 0,$$

系统熵减小,它将从无序转向有序,或者由原来的状态进入更加有序的状态.由于生物体排泄物的熵要比摄入的营养物的熵来得大,因此它从环境中取得负熵,正如薛定谔的一句名言,即生命“赖负熵为生”.事实上,生物体正是以环境的更大熵增为代价来减小本身的熵,从而促进其生长发育,保持健康.当开放系统处在非平衡的稳态时, $dS = 0$,故有

$$-d_e S = d_i S,$$

这表示系统内部的熵产生正好被流到环境中去的熵所补偿.一个发育完全的健康年轻人,在较长一段时间内保持稳定的体重,就正是处在这种非平衡的稳态.当 $dS > 0$,系统熵增加时,生物体就衰老,直至处于极大混乱状态,而导致死亡.

考虑一个初始均匀的无序系统中的生序过程,由耗散结构理论可知,此系统不仅要处在远离平衡态,而且还要无序状态是不稳定的.即一个系统能够自发地从混乱的状态跃变到有序的状态的必要条件是:混乱的无序状态是不稳定的.可以说,“序”是远离平衡的耗散系统从一个不稳定的状态跃变到相对稳定的状态而产生的.由于生物具有生序过程,因此,正如前面所述,生物系统是远离平衡的耗散结构.

生物体或耗散结构的生序过程还与信息有关,信息熵是广义熵(泛熵),它可以描述任何一种物质运动(包括生命现象)的混乱度或无序度.其对立面信息量或负熵,则是有序度或组织结构复杂程度的表示,生物系统的复杂化或有序化,对应于信息论的熵减.信息在生物进化中起着重要作用,通过接收、挑选和检测环境的信息,生物能调节自身的结构和习性,去适应环境,以求生存和发展,即适者生存,这便是生物的进化.可见,生物的进化在于生物与环境之间的物质、能量和信息的交换,而信息的交换支配着物质与能量的交换.没有信息的交换,物质交换和能量交换就没有方向;没有信息的交换,就不可能产生有意义的进化.这充分说明,熵、信息与生物进化息息相关.

纵观以上讨论,我们清楚认识到,熵的概念在不断扩大,广义熵的内涵在不断丰富,利用(17)式可以将概率分布函数与信息熵联系起来,即每一个概率分布对应着唯一的一个信息熵值.或者说,熵是概率分布这个函数的函数,

从数学意义上讲,熵是概率分布的泛函.而不少实际问题的分布函数与概率分布是等价的.因此,又可以进一步说,每一个分布函数都对应着唯一的一个信息熵值.正是依此思路,又推广熵的概念和原理去研究系统内部某种分布的差异,如海洋中盐分浓度的分布,大气中温度和水汽含量的分布以及环境资源、人的财产、昆虫密度的分布等等.由此而产生一系列广义熵和以熵为基础的新学科,如浓度场熵、温度场熵、经济熵以及熵气象学等等.熵概念的提出至今已有140年的历史了,然而它却像一个正处在蓬勃发展中的新概念.

在科学发展史上,评价某些概念的重要性,是看它们能否反复出现在许多描述和定律之中,是看其是否波及离最初表述很远的领域之内.人们熟悉的“能量”概念便具有此特征.而“熵”却是又一个具备这些特征,完全可以与“能量”媲美的重要性概念.

参 考 文 献

- [1] 邹经文.自然杂志,1986,9(4):255—257
- [2] 阿·巴布洛杨茨.卢佩译.分子动力学与生命.上海:三联书店,1993.129—152
- [3] 周炯A.信息理论基础.北京:人民邮电出版社,1983.178—183
- [4] 余重秀.大学物理,1997,16(5):28—30
- [5] 习岗等.大学物理,1998,17(2):38—39
- [6] 王梅生.现代物理知识,1994(5):9—10
- [7] 王身立.现代物理知识,1994(1):31—32
- [8] 李元杰.宇宙与超弦.武汉:华中理工大学出版社,1991.54—59