

ИНФОРМАЦИЯ, ЭНТРОПИЯ, ТЕМПЕРАТУРА

Эволюция понятий

В предыдущей работе [1] мы рассмотрели такие понятия, как теплота, температура и энтропия, смысл которых постоянно уточнялся по мере развития физики в течение XVII–XIX столетий. Наряду с наукой о теплоте независимо развивались и другие науки, которые стали использовать некоторые из этих понятий для объяснения явлений, относящихся к их области. Наименования понятий при этом остались прежними, однако смысл этих понятий изменился. Некоторые из них, например энтропия, стали не только более понятными, но и более общими. Кроме того, появились новые понятия, которые проникли в физику из других наук. В статье мы рассмотрим эволюцию старых понятий и появление новых понятий в XX столетии.

Информация, информатика и энтропия

В словаре иностранных слов [2] дано следующее определение. *Информация* (см. *информировать*) — осведомление, сообщение о положении дел или о чьей-либо деятельности, сведения о чем-либо. Информировать (от лат. *informare* — изображать, составлять понятие о чем-либо) — осведомлять. В английском словаре Longman Dictionary of English Language and Culture дано такое определение: *information* — knowledge in the form of facts, news, etc. [3]. В энциклопедическом словаре [4] говорится следующее. Информация (от лат. *informatio* — разъяснение, изложение) первоначально — сведения, передаваемые людьми устным, письменным или другим способом (с помощью условных сигналов, технических средств и т. д.); с середины XX века — общенаучное понятие, включающее обмен сведениями между людьми, человеком и автоматом, автоматом и автоматом, обмен сигналами в животном и растительном мире, передачу признаков от клетки к клетке, от организма к организму. Там же дано определение информатики.

Информатика (франц. *informatique*, нем. *Informatik*) — наука, изучающая законы и методы накопления, передачи и обработки информа-

ции с помощью ЭВМ; в переносном смысле — область человеческой деятельности, связанная с применением ЭВМ. Аналог термина информатика в англоязычных странах — *computer science* (вычислительная наука) [4]. Более широкое толкование терминов информации и информатики дано в математическом энциклопедическом словаре [5]. Исторические сведения о развитии информатики приводятся в [6], где подчеркивается: несмотря на то, что информатика — молодая наука, она началась тогда, когда впервые попытались механизировать умственную деятельность.

В основе теории информации лежит способ измерения количества информации, который в 1948 году предложил Клод Шеннон (Claude Elwood Shannon, 1916–2001). Этот способ, позволяющий выразить количество информации числом, можно объяснить на следующем примере [7, 8]. Рассмотрим множество, состоящее из n_0 элементов. Для равновероятных событий вероятность выбора любого элемента равна $1/n_0$. Эта величина характеризует степень (или меру) неопределенности в рассматриваемой ситуации. Если $n_0 = 1$, т. е. множество состоит только из одного элемента, то $p = 1$ и $H = 0$, где p — вероятность, H — степень неопределенности. С другой стороны, $p \rightarrow 0$ и $H \rightarrow \infty$ при $n_0 \rightarrow \infty$. Наиболее простая формула, связывающая p и H , имеет вид $H = -\log p$. Предположим, что число элементов множества уменьшилось до $n_1 < n_0$. При этом вероятность выбора одного элемента увеличится, а степень неопределенности уменьшится. Разность между первоначальной и конечной степенью неопределенности называется количеством информации

$$I = H_0 - H_1 = -\log \frac{p_0}{p_1} = \log \frac{n_0}{n_1}.$$

Если вероятности исходов различны, то за степень неопределенности принимают среднее значение неопределенности отдельных исходов, где n_k — число исходов в ситуации k . Эта формула положила начало теории информации.

Какие логарифмы используют в этих формулах? Чаще всего берут натуральные, десятичные и двоичные. В последнем случае информацию выражают в битах (от англ. *binary digit* — двоичный разряд), а логарифм числа x записывают в виде $\lg x$ (от лат. *logarithmus dualis*) [6], что означает логарифм по основанию 2. Теория информации развивалась независимо от термодинамики и статистической физики. В ней появились свои понятия и термины, такие, как мера неопределенности и количество информации. Однако вероятностный подход Шеннона фактически совпал с вероятностным подходом Больцмана, да и сами конечные формулы оказались удивительно похожими. По-видимому, по этой причине мера неопределенности получила название *информационной энтропии*. В свою очередь в физике энтропию стали рассматривать как меру неопределенности при статистическом описании процессов в различных средах. При этом, чтобы подчеркнуть различие между информацией, относящейся к общим проблемам, и информацией, характеризующей физическую систему, в последнем случае используют термин «*связанная информация*».

Рассмотрим замкнутую физическую систему, чья энтропия равна w — числу микросостояний, которыми можно получить данное β_1 макросостояние, k — постоянная Планка. Предположим, что могут реализоваться w_0 различных микросостояний. Если у нас нет специальной информации об этих микросостояниях, то их следует считать равновероятными. Иногда мы располагаем дополнительными сведениями, например результатами измерений родственной задачи, и число возможных микросостояний уменьшается до w_1 . В первом (общем) случае энтропия равна $S_0 = k \ln w_0$, во втором (специальном) — $S_1 = k \ln w_1$. Таким образом, количество информации равно $I = S_0 - S_1 = k \ln \frac{w_0}{w_1}$.

Информация и научные законы

Пусть мы ставим опыт по измерению двух переменных x и y [7, 8]. При этом величина x меняется в пределах от 0 до a , а y — в пределах от 0 до b (рис. 1). После ряда измерений мы находим, что x и y всегда остаются внутри заштрихованной полосы, которая характеризует некоторый эмпирический закон (пунктирная линия) и пределы

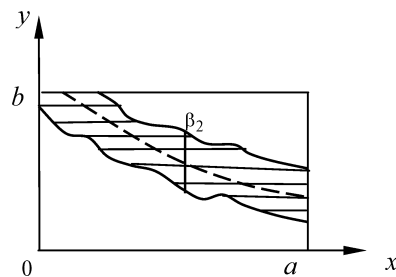


Рис. 1. Эмпирический закон

погрешности $(\beta_2 - \beta_2)$. Если $n_0 = ab$ — полная область изменений x и y , n_1 — площадь заштрихованной полосы, то количество информации равно

$$I = k \ln \frac{n_0}{n_1}.$$

Здесь предполагается, что все области равновероятны.

Таким образом, чтобы подсчитать информацию, нам надо знать общее поле наблюдения и поле случайных ошибок.

Следовательно, научный закон, во-первых, всегда имеет ограниченную область применения, а во-вторых, справедлив в пределах возможных ошибок. На эти два условия неоднократно обращали внимание философы. Если эти условия не конкретизированы, то определение научного закона лишено смысла. Многие физики до сих пор думают, что погрешность можно сделать сколь угодно малой и в теории ее можно не учитывать. Физика — это не математика. Существует много источников экспериментальной погрешности, на которые не удастся внести поправки. Примерами служат броуновское движение, принцип неопределенности, принцип изоляции (невозможно заэкранироваться от многих неизвестных воздействий).

В общем случае можно сказать следующее. Пусть мы проводим некоторый эксперимент, в результате которого получаем какое-то количество информации ΔI . В соответствии с принципом Карно (S. Carnot, 1824) это сопровождается приростом энтропии $\Delta S \geq \Delta I$ в экспериментальной установке. Пусть погрешность измерений стремится к нулю, тогда количество информации и, следовательно, энтропия стремятся к бесконечности. Поскольку энтропия характеризует теряемую энергию, это означает, что для получения нулевой погрешности мы должны затратить бесконечное количество энергии, что практически невозможно.

Эмпирический закон можно выразить с помощью графика, таблицы или формулы. Предположим, что мы располагаем несколькими эмпирическими законами — α , β и γ , в каждом из которых содержится определенное количество информации — I_α , I_β , I_γ . Если эти законы открыты независимо друг от друга, то общая информация $I_\Sigma = I_\alpha + I_\beta + I_\gamma$.

Например, для идеального газа справедливы следующие законы:

закон Бойля–Мариотта (R. Boyle, 1662; E. Mariotte, 1676) — $pV|_{T=\text{const}} = \text{const}$;

закон Гей-Люссака (J.L. Gay-Lussac, 1802) — $\frac{V}{T}|_{p=\text{const}} = \text{const}$;

закон Шарля (J.A.C. Charles, 1787) — $\frac{p}{T}|_{V=\text{const}} = \text{const}$.

Предположим, что мы нашли теорию, которая устанавливает связи между этими законами. В нашем случае такой теорией является уравнение Клапейрона—Менделеева (В.Р.Е. Клапейрон, 1834; Д.И. Менделеев, 1874) — состояния идеального газа $pV = RT$, которое объединяет все три закона. Если мы возьмем результаты первого закона, то в них уже содержатся намеки на второй закон. Например, нам известно, что закон Бойля–Мариотта справедлив в интервале температур (T_1, T_2) (рис. 2, а). Тогда при установлении закона Гей-Люссака мы можем сузить пределы изменения V , что сокращает поле наблюдения (рис. 2, б). Следовательно, рассматривая закон β после закона α , мы получаем меньше

информации $I'_\beta = k \ln \frac{n'_{0\beta}}{n_{1\beta}} < I_\beta = k \ln \frac{n_{0\beta}}{n_{1\beta}}$.

Пусть теперь нам известны первые два закона. Тогда при установлении третьего закона поле наблюдения уменьшается еще больше.

В результате возникает следующая ситуация: $I_\Sigma = I_\alpha + I_\beta + I_\gamma = I_\alpha + I'_\beta + I''_\gamma + K$, где K — информация, содержащаяся в корреляции. Она равна количеству предсказываемой информации, которую дает теория, устанавливающая корреляции между законами α , β и γ .

Рассмотренная картина наблюдается во всех физических теориях с конкретными областями применимости и с обычными экспериментальными ошибками. Любые теории содержат некоторые величины, например массу, заряд, начальные и граничные условия и т. п., которые являются следствием предыдущих наблюдений. Эти предварительные наблюдения, сделанные с некоторой ошибкой, содержатся по нашей схеме в эмпирическом законе α . Идеальной называется такая теория, для которой $I_{theory} = I_\Sigma - I_\alpha$. Это означает, что дальнейшие эксперименты не дадут ничего нового ($I_{\beta'} = I_{\gamma'} = 0$) и экспериментальная погрешность совпадает с ожидаемой

погрешностью. Поэтому $I_{theory} = k \ln \frac{n_0^{theory}}{n_1^{theory}}$, где n_0^{theory} — область, в пределах которой справедлива теория; $n_1^{theory} = n_{1\alpha}$ — ожидаемые ошибки. К идеальной теории близки такие науки, как классическая механика, электродинамика и т. п. Рассмотрим избыточность идеальной теории. В информатике избыточностью называется выражение

$$R = \frac{I_{\max} - I_{actual}}{I_{\max}} = 1 - \frac{I_{actual}}{I_{\max}}.$$

Мы очень часто пользуемся избыточностью. Например, заучивая стихотворение, объясняя

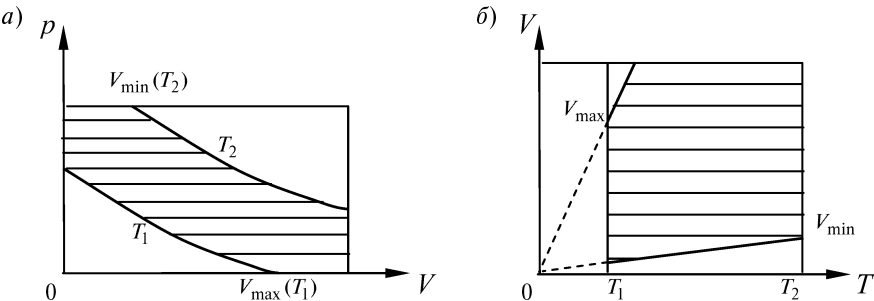


Рис. 2. Закон Бойля — Мариотта (а) и уменьшение поля наблюдения для закона Гей-Люссака (б)

одно и то же несколько раз, повторяя фразы, если плохо слышно, мы невольно увеличиваем избыточность. Слишком низкая избыточность может исказить передаваемое сообщение, слишком высокая — уменьшить скорость передачи информации по каналу связи. В случае идеальной

$$\text{теории } R = \frac{I_{\Sigma} - I_{\alpha}}{I_{\Sigma}} = 1 - \frac{I_{\alpha}}{I_{\Sigma}}.$$

Если R уменьшается, то I_{α} растет. Это означает, что роль эмпирической информации растет и, как следствие, увеличивается вероятность искажений, что снижает ценность теории. Если же $R \rightarrow 1$, то $I_{\alpha} \rightarrow 0$, и, следовательно, эмпирическая информация играет меньшую роль, однако сложность и громоздкость теории значительно увеличиваются. Таким образом, оптимальная теория должна обладать вполне определенной избыточностью.

Следует обратить внимание на отличие математики от физических наук. Исторически математика была вначале системой экспериментальных наблюдений, например геометрия начиналась как сводка правил, которыми пользовались землемеры, и примыкала к геологии и географии. Сейчас считается, что геометрия базируется на системе постулатов, физический смысл которых не рассматривается. Математическая теория представляет собой строгую структуру, пригодную к любой области без всяких ограничений. Когда эту теорию используют как физическую модель, возникают ограничения, связанные с пределами применимости и с погрешностями. Математическая теория, не устанавливая пределов области своей применимости, дает бесконечное количество информации; в физической же теории в силу ограничений содержится конечное количество информации.

Почему мы придаем большое значение открытию научных законов? Ценность энергии определяется ее способностью превращаться без потерь в другие виды энергии. Чем больше ценность, тем меньше потери и, следовательно, меньше энтропия — мера теряемой энергии. Если уменьшается энтропия, то это означает, что увеличивается доля таких видов энергии, которые могут полностью превращаться во все другие виды, и уменьшается доля теплоты, которая этим свойством не обладает. Введем, следуя Шредингеру, негэнтропию $N = -S$. Тогда за критерий качества энергии (ее способности к превращениям) можно принять

величину негэнтропии. Рассмотрим теперь какое-либо исследование. Если взять отдельные результаты, то их можно охарактеризовать определенным количеством информации (или негэнтропии). Упорядочим эти результаты на основе какой-нибудь модели. Упорядоченная система обладает большей негэнтропией за счет информации, содержащейся в модели. Этот вклад называется структурной негэнтропией. Он возникает при появлении связей, когда отдельные части соединяются в единое целое. Информация, которую содержит модель, основана, с одной стороны, на знаниях исследователя, т. е. на физических законах, а с другой стороны, — на его фантазии, которая связывает эти законы вместе. В совокупности с новыми результатами это позволяет создавать упорядоченные системы с большой негэнтропией, часто неизвестные природе.

Существуют два вида информации: эфемерная и классическая [8]. Эфемерная информация появляется в результате немногочисленных измерений, на проведение которых было затрачено небольшое количество негэнтропии. При этом роль структурной негэнтропии, как правило, невелика. Ценность эфемерной информации быстро убывает со временем, поэтому ее необходимо также быстро передавать. Отсюда стремление побыстрее опубликовать результаты. В основе классической информации, вершиной которой являются великие открытия, научные законы и т. п., лежит гораздо больше экспериментов. Закон обобщает большое количество эфемерной информации, и ему соответствует большее количество негэнтропии. Кроме того, научные законы содержат дополнительное количество информации, не следующей из эмпирических результатов. Эта часть информации называется корреляционной.

Таким образом, два фактора определяют значение научных законов:

степень упорядочения (нам проще иметь дело с теорией и общими законами, чем со справочниками, содержащими несвязанные данные);

степень новизны (теория позволяет делать предсказания). Однако, даже открыв научный закон, мы часто не можем сразу оценить всевозможные последствия. «Формулы умнее нас!» — (Генрих Герц).

Заканчивая краткое рассмотрение роли теории информации в развитии старых понятий и создании новых, отметим следующее. Теория

информации дала более понятное, менее формальное и более широкое определение энтропии, связав ее с мерой неопределенности, существующей в любой, а не только в физической системе. Кроме того, она еще раз обратила внимание на необходимость более тщательного изучения корреляций и упорядочения. Актуальность этих вопросов стала очевидной после появления компьютеров и новых численных методов исследования задачи многих тел.

Неполнота и избыточность

Традиционный подход к описанию явлений в системе многих тел заключается в следующем. Предположим, что исследуемая нами система состоит из N одинаковых частиц, которые мы будем считать бесструктурными. Состояние системы характеризуется ее расположением (конфигурацией) и скоростью изменения этого состояния. Если заданы значения координат $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$ и скоростей $\mathbf{v}_i = (v_{i1}, v_{i2}, v_{i3})$ всех N частиц системы, т. е. $i = 1, 2, \dots, N$, то тем самым определено и состояние системы в данный момент времени t . Чтобы исследовать эволюцию системы, необходимо задать еще и закон движения, который указывает, с какой скоростью изменяется состояние системы.

Если рассматривать набор всех величин $(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}, v_{i1}, v_{i2}, v_{i3})$ как координаты точки $\mathbf{u}$ в многомерном пространстве, то состояние системы можно охарактеризовать геометрически этой точкой. Такую точку называют фазовой точкой, а пространство — фазовым пространством. Название связано с тем, что в прошлом состояния нередко называли фазами системы. Изменение состояния во времени изображают как движение фазовой точки по некоторой линии, которую называют фазовой траекторией. Независимые величины $(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}, v_{i1}, v_{i2}, v_{i3})$, которые необходимо знать, чтобы определить состояние системы, называют степенями свободы.

Предположим, что число заданных параметров, которые дают нам возможность судить о состоянии системы, неизмеримо меньше числа степеней свободы. Это означает, что полное динамическое описание невозможно [9]. Вследствие неполноты описания динамическую задачу заменяют другой: определить в каждый момент времени не состояние системы, а функцию распределения микросостояний. При этом полагают, что координаты и скорости частиц со-

ставляют набор $6N$ случайных величин, а при эволюции состояния — набор $6N$ случайных функций времени. Такое неконтролируемое движение частиц макросистемы называют *хаотическим*, или *тепловым*, движением, а для описания этого движения используют два метода: статистический и термодинамический.

По существу, это означает уход от решения вопроса, выходящего за рамки аппарата традиционной теории. Кроме того, это противоречит желаниям предшественников, которые «пытались разобраться во внутреннем состоянии движения нагретого тела и составили себе об этом некоторое представление» [1]. Более продуктивными оказываются принципиально новые методы исследования проблемы многих тел, которые занимают промежуточное положение между теорией и экспериментом, поэтому их часто называют численными экспериментами. Главную роль среди них играет мощный метод, который дает очень много информации, — это метод *молекулярной динамики* [10].

В молекулярной динамике [11–14] движение системы из N частиц описывают, используя уравнения Ньютона. Пусть $\mathbf{r}_i$ радиус-вектор частицы с номером i . Уравнения движения имеют вид

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{f}_i = \mathbf{f}_i^F + \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{f}_{ij}.$$

Здесь m_i — масса частицы; $\mathbf{f}_i$ — действующая на нее сила, которая складывается из силы внешнего поля $\mathbf{f}_i^F$ и сил взаимодействия между частицами. Запишем эти уравнения в декартовых координатах:

$$m_i \frac{d^2 x_{ia}}{dt^2} = f_{ia}^F + \sum_{j=1, j \neq i}^N f_{ij} \frac{x_{ia} - x_{ja}}{r_{ij}}$$

($a = 1, 2, 3$; $f_{ij} = |\mathbf{f}_{ij}|$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$), а затем перепишем еще раз в виде системы дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = v_i;$$

$$\frac{dv_i(t)}{dt} = \frac{1}{m_i} f_i \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_{3N}(t), F\}.$$

Здесь t — время, v — скорость, а символ F , включенный в число аргументов, означает, что сила

f_i учитывает также и действие внешнего поля. Отметим, что индекс i здесь меняется от 1 до $3N$, однако это уже не номер частицы, а счетчик числа степеней свободы; при этом предполагается, что каждая частица имеет три степени свободы.

Введем в фазовом пространстве $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ вектор состояния $\mathbf{u}$. Здесь

$$\mathbf{x} = \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_{3N}(t)\};$$

$$\mathbf{v} = \{v_1(t), v_2(t), \dots, v_{3N}(t)\}.$$

Состояние системы для любого значения t можно найти, решив операторное уравнение

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{x}} \\ \dot{\mathbf{v}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \hat{f} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} = \hat{O}\mathbf{u}.$$

с заданным начальным значением $\mathbf{u}_{t=0} = \mathbf{u}_0$, где вид операторов $\hat{f}$, $\hat{O}$ определяется уравнениями движения.

До сих пор мы рассматривали непрерывные величины. Но чтобы использовать компьютер, надо перейти к дискретным величинам и переформулировать для них уравнения движения. Для этого применим метод конечных разностей (Brook Taylor, 1715), который широко использовался на начальном этапе становления физики как науки. Многие уравнения физики, известные нам сейчас в дифференциальной форме, были впервые сформулированы на языке конечных разностей. Практически дискретные величины получают, отсчитывая значения непрерывной функции через определенные промежутки времени:

$$t_k = k \Delta t, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Интегрируя операторное уравнение по временному шагу Δt , найдем связь между значениями вектора состояния в двух соседних точках — k и $k+1$:

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \hat{O}\mathbf{u} dt.$$

Но мы не знаем значений вектора состояния в интервале $t_k < t \leq t_{k+1}$, поэтому не можем точно вычислить этот интеграл. Предположим, что для достаточно малых временных шагов подынтегральную функцию $\hat{O}\mathbf{u} = f(t)$ можно представить рядом Тейлора с конечным числом членов

$$f(t) \cong f(0) + f'(0)t + f''(0)\frac{t^2}{2} + \dots = \sum_{s=0}^{n-1} \left(\frac{d^s f}{dt^s} \right)_0 \frac{t^s}{s!}.$$

Тогда

$$\mathbf{u}_{k+1} \cong \mathbf{u}_k + \int_0^{\Delta t} dt \left\{ \sum_{s=0}^{n-1} \frac{t^s}{s!} \left[\frac{d^s}{dt^s} (\hat{O}\mathbf{u}) \right]_k \right\}.$$

Интегрируя конечно-разностную аппроксимацию, найдем вектор состояния в следующий момент времени

$$\mathbf{u}_{k+1} \cong \mathbf{u}_k + \sum_{s=1}^n \frac{(\Delta t)^s}{s!} \left[\frac{d^{s-1}}{dt^{s-1}} (\hat{O}\mathbf{u}) \right]_k.$$

Здесь число n характеризует порядок точности разностной схемы по временному шагу Δt . Не следует путать точность с погрешностью: последняя на порядок выше. Мы рассмотрели в общих чертах метод молекулярной динамики. Резюмируя, дадим определение этого метода. Молекулярная динамика — это вид компьютерного эксперимента, в котором, задав закон взаимодействия частиц, начальные и граничные условия, численно интегрируют уравнения движения N частиц. Если число частиц велико, то система обладает статистическими свойствами. Это позволяет наблюдать динамическую структуру системы, следя за движением отдельных частиц, и одновременно вычислять средние по времени и ансамблю свойства системы (энергия, давление, температура и т. д.), которые можно сравнивать с экспериментально наблюдаемыми величинами.

«Молекулярная динамика есть тот самый демон Максвелла, который знает все о движении всех молекул» [10]. Следует подчеркнуть, что компьютерные эксперименты в форме молекулярной динамики не только производят информацию, но и создают базу для разработки новой аналитической теории на основе установленного скрытого движения микрочастиц, которое ускользает от наблюдения в лаборатории [11–14]. Но эти *ненаблюдаемые события* очень важны, так как в конечном счете ими определяются *наблюдаемые явления*.

В отличие от статистического и термодинамического методов с их неполнотой описания, в молекулярной динамике возникает противоположная проблема — проблема избыточности [14]. Подробное изучение траекторий атомов связано с выводом огромного количества информации, что в общем случае становится нецелесообразным. Поэтому наряду с изучением траекторий

в той части системы, где происходят радикальные изменения, необходимо выбрать такую усредненную характеристику, которая, отбрасывая второстепенные детали, позволяет изучать суть явления и получать на выходе информацию, сопоставимую с обычными экспериментальными данными. Удобной характеристикой при изучении природы теплового движения часто оказывается спектральная плотность колебаний.

Информация и стохастичность

Пусть у нас имеется система из N атомов. В простейшей модели твердого тела это может быть ангармоническая цепочка атомов. Траектории атомов можно рассматривать как статистические временные ряды [14, 15]. Под статистическим временным рядом понимают функцию времени $X(t)$, проявляющую свойства случайности или нерегулярного изменения. Имея запись такого ряда, невозможно точно предсказать его будущие значения. Однако такой ряд можно описать с помощью статистических законов. На первый взгляд такой подход к траекториям динамической системы кажется непоследовательным, так как формальное определение случайного процесса включает в себя требование иррегулярности, т. е. отсутствие алгоритма. Для динамических систем это требование нарушается по определению. Поскольку нам известны уравнения движения, начальные и граничные условия, мы можем с достаточной точностью вычислить траектории всех атомов.

В действительности требование иррегулярности не является обязательным [16]. Более того, это свойство относится к числу принципиально ненаблюдаемых, так как любую конечную по времени реализацию можно аппроксимировать некоторой регулярной функцией, например рядом Фурье. Если мы рассматриваем какую-то одну изолированную траекторию, заданную в промежутке (t_1, t_2) , и ничего не знаем о других, то эта траектория нам будет казаться случайной. Таким образом, неполная информация о системе приводит к тому, что наблюдателю поведение системы кажется случайным (стохастическим).

Степень стохастичности можно оценить количественно. Для этого надо взять уже рассмотренную формулу $I = k \ln(n_0/n_1)$. Здесь n_0 — область, в которой справедлива модель; n_1 — область ожидаемых ошибок. При использовании

компьютера $n_1 = n'_1 + n''_1$, где первый член относится к исходным данным, а второй — к ошибкам вычисления. Если мы рассматриваем только одну частицу системы, состоящей из N частиц, то поле наблюдения уменьшается в N раз. Разность между первоначальным и полученным количеством информации дает нам степень неопределенности (энтропию)

$$S = I(n_0) - I\left(\frac{n_0}{N}\right) = k \ln N.$$

Таким образом, с ростом числа частиц системы ее поведение логарифмически приближается к абсолютно случайному процессу.

В общем случае свойства случайного процесса зависят от времени. Однако, если процесс находится в состоянии равновесия, его среднее значение и дисперсия постоянны. Многие ряды проявляют нестационарность только в виде тренда среднего значения. Такими рядами являются, например, траектории атомов при квазистатическом деформировании твердых тел. Траектории атомов твердых тел, деформируемых в динамическом режиме, имеют сложный осциллирующий вид, но их можно разбить на две составляющие:

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i^0 + \delta \mathbf{x}_i.$$

Первая составляющая, которая соответствует медленному (адиабатическому) изменению траектории, дает тренд. Вторая (смещение относительно тренда) — соответствует тепловому движению в быстро осциллирующем поле, которое возникает в результате динамического взаимодействия атомов.

Пусть дискретные значения $x_1, x_2, \dots, x_n$ получены из непрерывного ряда $x(t)$ длительности T при отсчете значений функции через интервалы времени Δt . Это дает $n = T / \Delta t$ выбранных значений x_k , где $x_k = x(t_k) = x(k \Delta t)$, $k = 1, 2, \dots, n$.

Если у нас в распоряжении имеется только запись конечной длины, то вместо истинной функции мы получим ее выборочную оценку. Дискретная выборочная оценка автоковариационной функции равна [15]

$$c_{xx}(k) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n-k} (x_i - \bar{x})(x_{i+k} - \bar{x}),$$

где $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$.

Выборочная оценка автокорреляционной функции находится по формуле

$$r_{xx}(k) = c_{xx}(k) / c_{xx}(0).$$

Преобразование Фурье от выборочной оценки автоковариационной функции дает выборочную спектральную плотность (выборочный спектр)

$$c_{xx}(\omega) = \int_{-T}^T c_{xx}(s) \exp(-i\omega s) ds; \quad -\infty < \omega < \infty.$$

Здесь $s = k \Delta t$; ω — частота. Обычно выборочный спектр временных рядов очень сильно колеблется и мало похож на теоретический. Это связано с тем, что выборочная спектральная плотность не является состоятельной оценкой, т. е. ее распределение не стягивается к истинному значению при увеличении объема выборки. Способы улучшения спектральных оценок основаны на сглаживании выборочных оценок [14, 15]. Для этого исходный временной ряд разбивают на q рядов, каждый из которых имеет длину m , причем $qm = n$. Затем рассматривают среднее значение $\overline{c_{xx}(\omega)}$ выборочных спектров q на частоте ω . В этом случае математическое ожидание (теоретическое среднее) выборочной сглаженной спектральной плотности соответствует просматриванию теоретического спектра через спектральное окно

$$W(\omega) = m \left(\frac{\sin(m\omega/2)}{m\omega/2} \right)^2.$$

Во временной области это соответствует умножению автокорреляционной функции на корреляционное окно

$$w(s) = \begin{cases} 1 - |s|/m & \text{при } |s| \leq m \Delta t; \\ 0 & \text{при } |s| > m \Delta t. \end{cases}$$

Оба окна называются окнами Бартлетта. Для чисто случайных процессов отдельные ряды разбиения независимы друг от друга, поэтому дисперсия $\overline{c_{xx}(\omega)}$ в q раз меньше, чем дисперсия $c_{xx}(\omega)$. Существуют и другие окна, которые нашли применение в молекулярной динамике, например окна Тьюки [17].

Выбирая длину m , можно регулировать ширину окна. Если $m \rightarrow 0$, то дисперсия спектральной оценки уменьшается, но при этом растет и ширина окна, пропорциональная $1/m$, в ре-

зультате чего увеличивается смещение спектральной оценки. С другой стороны, узкое спектральное окно, уменьшая смещение, одновременно увеличивает дисперсию. Оптимальный путь состоит в следующем. Сначала проводится пробный спектральный анализ, на основании которого выбирается точка отсечения m там, где пробная корреляционная функция отклоняется от теоретической [14].

Мы подробно рассмотрели эти вопросы по следующей причине. Физики, как правило, незнакомы со спектральным анализом, который объединяет понятия и методы теории вероятностей и анализа Фурье, поэтому в литературе для оценки спектра процесса обычно используют классический анализ Фурье, разработанный для детерминированных функций. В результате спектральная плотность колебаний, вычисленная по данным молекулярно-динамического эксперимента, содержит большие осцилляции нефизического происхождения и дает искаженную картину спектра (см., например, [18]).

Термализация, эргодичность, перемешивание

Молекулярно-динамические исследования деформации и разрушения различных моделей твердых тел (ангармонические цепочки атомов, двумерные и трехмерные кристаллы) открыли новые явления и привели к новым понятиям в физике прочности [11–14, 19]. Это дало возможность связать деформацию и разрушение с широким кругом явлений, в основе которых лежат нелинейные колебания. Сверх того, эти исследования позволили по-новому взглянуть на «неконтролируемое движение частиц макросистемы, которое называют хаотическим, или тепловым, движением» [9].

Рассмотрим, как менялся взгляд на это движение [19]. В 1914 году Дебай (Peter Joseph William Debye, 1884–1966) предположил, что конечная теплопроводность кристаллов вызвана ангармоничностью (нелинейностью) колебаний атомов. Если сила взаимодействия между атомами линейна, то энергия беспрепятственно переносится независимыми нормальными модами. В кристаллической решетке со слабой нелинейностью нормальные моды, вычисленные для линейаризованных упругих сил, станут взаимодействовать и тем самым ограничат перенос энергии. Это предположение побудило Ферми, Паста и Улама (Enrico Fermi, John R. Pasta, Stan M.

Ulam, 1955) поставить численный эксперимент на компьютере Маниак I в Лос-Аламосе. Объектом исследования служила одномерная ангармоническая цепочка из 64 атомов (нелинейных осцилляторов). Функция Лагранжа для системы с одной степенью свободы, совершающей малые колебания, имеет вид

$$L = E_{kin} - U = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{kx^2}{2}.$$

Здесь E_{kin} — кинетическая энергия; U — потенциальная, m — масса, k — упругая постоянная (такую систему называют линейным одномерным осциллятором). В случае осциллятора со слабой нелинейностью появляется дополнительный член:

$$L = E_{kin} - U = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{kx^2}{2} - \frac{\alpha x^3}{3}, \quad \alpha \ll k,$$

где α — мера нелинейности. При жестко закрепленных концах граничные и начальные условия имеют вид

$$x_0 = 0; \quad x_n = na; \quad x_i(t=0) = ia + A \sin \frac{\pi i}{n};$$

$$\dot{x}_i(t=0) = 0,$$

где a — параметр цепочки.

Таким образом, вначале была возбуждена только одна первая мода. В гармонической (линейной) цепочке энергия осталась бы в этой моде, и высшие моды не могли бы возбуждаться. Из-за нелинейности энергия перетекает от низших мод к высшим, и авторы ожидали, что это в конце концов приведет к равномерному распределению по всем степеням свободы. В таком случае этот численный эксперимент можно было бы рассматривать как модель установления теплового равновесия в системе.

Вопреки ожиданиям результат получился отрицательным. Вначале действительно энергия распределялась по нескольким низшим модам, но затем вновь собиралась в исходной моде с точностью до двух процентов, после чего процесс повторялся. Хотя сам Ферми назвал это явление «insignificant discovery», но эксперимент послужил толчком к многочисленным исследованиям в этой области, которая получила название проблема Ферми — Паста — Улама. Оказалось, что это явление можно описать с помощью представлений о солитонах [20–22].

Одного из авторов статьи интересовал вопрос, что может дать молекулярная динамика физике прочности; в частности, какие процессы, протекающие на атомном уровне, приводят к временной зависимости прочности твердых тел? С этой целью было исследовано растяжение ангармонических цепочек атомов, а также поведение цепочек при постоянной деформации и жестко закрепленных концах [14, 19]. В последнем случае граничные и начальные условия имели вид

$$x_0 = 0; \quad x_n = na(1 + \varepsilon); \quad x_i(t=0) = ia(1 + \varepsilon);$$

$$\dot{x}_i(t=0) = A(\varepsilon) \sin \frac{\pi i}{n},$$

где ε — заданная деформация растяжения. Взаимодействие атомов описывалось потенциалом Морзе; при этом наряду с изучением траекторий атомов рассчитывали и спектральную плотность колебаний.

Спектральный анализ колебаний атомов в разных по длине, температуре и деформации растяжения ангармонических цепочках, выполненный с учетом рассмотренных выше рекомендаций, обнаружил повторяемость спектра. Параллельный анализ траекторий атомов привел к открытию новых квазичастиц, получивших название дилатоны, которые представляли собой аномально растянутые связи [14, 19, 23]. В их траекториях также наблюдалась повторяемость, коррелированная с повторяемостью спектра. Чтобы избавиться от дилатонов, мы повторили расчеты Ферми — Паста — Улама на недеформированных цепочках с потенциалом Морзе и в значительно большем временном интервале. В первом цикле повторяемости картина была такой же, как ее наблюдали первооткрыватели, т. е. возбуждались только низшие моды [20–22]. Однако во втором цикле началось возбуждение высоких мод, которые ослабили низшие моды, и повторяемость постепенно исчезла.

Появление высоких мод вызвано ошибками вычисления, которые возникают по ряду причин [14, 24], в их числе: замена дифференциальных уравнений разностными (ошибки усечения); итерационный способ решения (ошибки итерации); разрыв или резкое изменение производной (ошибки разрыва); конечная длина разрядной сетки компьютера (ошибки округления). Ошибки вычисления неизбежны; они приводят к неустойчивости движения и, как следствие, к нео-

братимости. Мерой неустойчивости движения служит энтропия Крылова — Колмогорова, или K -энтропия [9]. Она определяется формулой

$$K(t) = \frac{1}{t} \ln \frac{D(t)}{D(0)},$$

где $D(t) = \sqrt{[x_1(t) - x_2(t)]^2}$ — расстояние между двумя точками в фазовом пространстве двух траекторий, 1 и 2; $D(0)$ — соответствующее расстояние в начальный момент. Если движение устойчиво, то с ростом t величина $K(t)$ стремится к нулю. Эта формула представляет скорее теоретический интерес и не учитывает дискретную природу компьютера.

Мы оценивали устойчивость движения по удержанию фазовой траектории [14, 25]. Способ заключается в следующем (для простоты рассмотрим одномерный случай). Проинтегрируем при одних и тех же начальных и граничных условиях уравнения движения с разными временными шагами, Δt_1 и Δt_2 , например $\Delta t_2 = \Delta t_1 / 2$. Это дает различный шум. Вычислим величины

$$\frac{x(t, \Delta t_1) - x(t, \Delta t_2)}{x(t, \Delta t_1)} = \frac{\Delta x(t)}{x(t)};$$

$$\frac{v(t, \Delta t_1) - v(t, \Delta t_2)}{v(t, \Delta t_1)} = \frac{\Delta v(t)}{v(t)}.$$

Здесь $x(t)$, $v(t)$ — координата и скорость какого-либо атома. Норма вектора отклонения

$$\delta u(t) = \sqrt{\left(\frac{\Delta x(t)}{x(t)}\right)^2 + \left(\frac{\Delta v(t)}{v(t)}\right)^2}$$

дает погрешность вычисления фазовой траектории, т. е. вычислительную энтропию

$$D(t) = \sqrt{[x_1(t) - x_2(t)]^2}.$$

Как и в случае спектрального анализа, мы подробно рассмотрели методические вопросы. Причина в том, что в большинстве работ по молекулярной динамике в случае замкнутых систем за критерий точности интегрирования уравнений движения принимают закон сохранения энергии. Однако сохранение полной энергии еще не означает, что сохраняются фазовые траектории.

Вернемся к проблеме Ферми — Паста — Улама. Эта проблема вновь привлекла внимание к вопросу, как система частиц приходит в состоя-

ние теплового равновесия. В связи с этим появилось много новых терминов и много гипотез, что затрудняет чтение специализированной литературы. Поскольку эта наша статья, как и предыдущая [1], написана, главным образом, с педагогической целью, рассмотрим кратко эти понятия [5, 10, 19].

Переход системы в состояние, в котором энергия равномерно распределена между собственными колебаниями, называют термализацией (от греч. θερμη — жара, теплота + λυσις — освобождение, разложение). При этом динамические характеристики системы меняются во времени случайным образом и система приобретает статистические свойства. В результате аналитическая механика становится как бы статистической (от греч. στατος — стоящий; статисты, занятые в массовках, обычно стоят, поэтому слово статистика имеет смысл массовости). В соответствии с этим процесс перехода называют еще и стохастизацией (от греч. στοχος — догадка, предположение). Кроме того, под влиянием работ Больцмана (Ludwig Boltzmann) и Гиббса (Josiah Willard Gibbs) применяют термины эргодичность (от греч. εργον — работа + одос — путь) и перемешивание.

По Больцману, система является эргодической, если при переходе в равновесное состояние фазовые траектории начинают равномерно покрывать всю доступную энергетическую поверхность. Эргодичность в физике обычно связывают с эргодической гипотезой. Она заключается в предположении, что средние по времени значения физических величин равны их средним статистическим значениям. Эта гипотеза часто служит обоснованием статистической физики. В математике говорят об эргодической теории. Здесь рассматривают классические динамические системы, движение которых описывается дифференциальными уравнениями. Такие системы имеют сильные статистические свойства, сходные со свойствами случайного процесса. В этом случае говорят, что классическая динамическая система изоморфна вероятностной.

Согласно Гиббсу, переход в равновесное состояние эквивалентен объединению нескольких идентичных систем, первоначально изолированных, в одну. При этом уравнения движения порождают в фазовом пространстве поток первоначальных состояний, перемешивание которых

приводит к равномерному распределению окончательных состояний по энергетической поверхности. Для иллюстрации перемешивания вначале использовали пример Гиббса — разбавление чернил водой. Затем перешли к более крепким напиткам, и перемешивание стали рассматривать на примере приготовления коктейля из джина и вермута.

Температура и дисперсия

В [1] мы рассмотрели эволюцию понятий температура и теплота, но определение дали только для температуры идеального газа, где температура — это величина, пропорциональная дисперсии функции распределения молекул идеального газа по скоростям. В недавно вышедшей работе [26] подвергнуто критике одно из определений температуры, приводимое в физическом энциклопедическом словаре: «В равновесных условиях температура пропорциональна средней кинетической энергии частиц тела». Авторы [26] указывают, что «это положение справедливо для газов, но категорически не выполняется для твердых тел». Подробно рассмотрев тепловое равновесие в твердом теле, авторы приходят к выводу: «поскольку не удастся прийти к простому понятию «температура» исходя непосредственно из характеристик квантовой динамики в твердых телах, поэтому температурой твердого тела предлагается считать температуру газа, находящегося в тепловом равновесии с твердым телом». С критикой приведенного в словаре определения температуры трудно не согласиться, однако то, что предлагают авторы, по существу, представляет собой способ измерения, а не определение понятия.

Изложим нашу точку зрения на этот предмет. Два важнейших достижения характеризуют физику твердого тела в начале двадцатого столетия: теория рассеяния рентгеновских лучей и теория колебаний кристаллической решетки [27]. Последняя теория исходит из того, что тепловые колебания твердого тела представляют собой суперпозицию упругих колебаний, аналогичных звуковым волнам. Чтобы описать уменьшение интенсивности рассеяния рентгеновских лучей под действием тепловых колебаний решетки, пришлось объединить методы обеих теорий. В результате удалось описать уменьшение интенсивности с помощью множителя $\exp(-2W)$, который зависит от температуры. Этот множитель получил название фактора Дебая — Уоллера

(Валлера) [27–29]. В литературе величину W обычно определяют формулой

$$W = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 K^2 T^2}{m k \theta^3} \int_0^{\theta/T} \left\{ \frac{1}{\exp x - 1} + \frac{1}{2} \right\} x dx.$$

Здесь K^2 — квадрат вектора обратной решетки; m — масса атома; k — постоянная Планка; θ — температура Дебая. Напомним, что температура Дебая представляет собой температуру, выше которой возбуждены все нормальные колебания, а ниже — некоторые моды начинают вымерзать. Для нас важно, что величина W пропорциональна среднему значению квадрата амплитуды колебаний $\langle u^2 \rangle$ атома в состоянии теплового равновесия при температуре T [29]:

$$2W = \frac{1}{3} K^2 \langle u^2 \rangle.$$

Из этих формул следует, что при температуре выше дебаевской

$$\langle u^2 \rangle \cong \frac{9 \hbar^2 T}{m k \theta^2}.$$

Среднеквадратичное смещение атома из положения равновесия — это и есть дисперсия. Следовательно, при высоких температурах, как и в случае идеального газа, температура — величина, пропорциональная дисперсии функции распределения. Но эта функция разная: для идеального газа — распределение по скоростям, для твердого тела — по смещениям атомов. Температура ниже дебаевской связана с дисперсией более сложной зависимостью, которую дает фактор Дебая — Уоллера.

Среднеквадратичное смещение атома из положения равновесия, соответствующее нулевым колебаниям, не зависит от температуры и имеет вид [30]

$$\langle u_0^2 \rangle \cong \frac{\hbar^2}{m k \theta}.$$

Здесь дисперсию связывают не с температурой (поскольку ее нет), а с дисперсией волновой функции осциллятора, которая имеет вид гауссиана $A \exp(-\alpha^2 u^2 / 2)$ и равна α^{-2} . Квадрат волновой функции дает вероятность нахождения осциллятора на расстоянии u от центра равновесия.

В радиационной физике твердого тела главным объектом изучения являются реальные

кристаллы, которые содержат много разнообразных дефектов, созданных облучением [31–34]. Структура поврежденной области и поведение радиационных дефектов очень сильно зависят от температуры. Поэтому большие усилия были затрачены на то, чтобы построить соответствующую теорию. Лобовой подход не привел к успеху: теоретические результаты плохо согласовывались с экспериментом.

Альтернативой послужил метод, который заключается в следующем [14, 35, 36]. Из двух последних формул следует, что увеличение амплитуды колебаний атомов происходит за счет роста температуры. Однако точно такой же эффект можно получить, если при нулевой температуре уменьшить массу атома. Следовательно, влияние температуры можно оценить, заменив обычную массу на эффективную, зависящую от температуры:

$$m(T) = m \frac{\theta}{9T}.$$

Эта простая формула оказалась очень эффективной. С ее помощью удалось ввести температуру в уравнения механики и получить зависимость от температуры величин, которые являются ключевыми при исследовании радиационных повреждений: переходной энергии (кинетическая энергия налетающей частицы, выше которой кристаллическая мишень ведет себя как аморфный материал), эффективного диаметра столкновения, длины свободного пробега краудина, размеров субкаскадов и т. п. По-видимому, результативность этой формулы, а также выражений, полученных на ее основе, состоит в том, что она связывает меру хаоса (температура) и меру инерции (масса).

Самоорганизация хаоса

Недостаток любой статистической теории состоит в том, что она дает лишь общее или усредненное описание, не обеспечивая нас всей необходимой информацией относительно поведения многочастичной системы. Характерная особенность таких систем заключается в наличии флуктуаций [10]. Флуктуации (от лат. *fluctuatio* — колебание) — это случайные отклонения физических величин от их средних значений. В статистической физике флуктуации связывают с неконтролируемым движением, которое называют хаотическим, или тепловым

[9]. Только «демон Максвелла» (молекулярная динамика) знает все о движении всех молекул. С помощью этого демона можно «разобраться во внутреннем состоянии движения нагретого тела и составить себе об этом некоторое представление». В кинетической концепции прочности полагают, что разрушение есть процесс последовательного разрыва межатомных связей тепловыми флуктуациями, который относится ко всем твердым телам независимо от природы межатомных сил и структурных особенностей материала [37]. Но что такое тепловые флуктуации, разрывающие межатомную связь? Молекулярная динамика показала [14, 19, 38], что разрывная флуктуация — это не просто тепловая флуктуация, а сложное явление, при котором не только возникают флуктуации кинетической и потенциальной энергии, но и образуются области коррелированного движения. Следовательно, можно говорить о структуре разрывной флуктуации и охарактеризовать эту структуру набором параметров. Наиболее неожиданным оказалось то, что во время разрыва возникает область коррелированного движения двух групп атомов, которые окружают разрываемую связь и, двигаясь в противофазе, играют роль захватов; при этом в каждую группу входит от 5 до 7 атомов.

Рассмотрим, что представляет собой коррелированное движение [14, 19, 39]. В молекулярно-динамических экспериментах вычисляли импульс P , усредненный по периоду τ_0 тепловых колебаний атомов:

$$\langle P(x, t) \rangle_t = \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_0} P(x, t) dt.$$

Здесь x — координата, t — время. Этот импульс можно представить в виде суммы двух составляющих:

$$P(x, t) = P_0(x, t) + p(x, t).$$

Первая составляющая соответствует плавному изменению импульса и описывает тренд (англ. *trend* — общее направление, тенденция), вторая — осцилляциям вокруг тренда с частотой порядка частоты атомных колебаний. Среднее значение функции $p(x, t)$ за время τ_0 близко к нулю, функция $P_0(x, t)$ за это время меняется очень мало, поэтому безразмерную величину

$$\eta(x, t) = P_0(x, t) / \frac{1}{L} \int_0^L P(x, t) dx$$

можно принять за параметр порядка. Здесь L — размер области коррелированного движения.

Функция распределения параметра порядка, который зависит от пространственных координат, имеет вид [40]

$$f(\eta(x)) = N \exp\left(-\frac{F}{kT}\right),$$

где F — функционал Гинзбурга — Ландау. Он равен

$$F = \int \left\{ \frac{\alpha}{2} \eta^2(x) + \frac{\beta}{4} \eta^4(x) + \frac{\gamma}{2} \left[\frac{d\eta(x)}{dx} \right]^2 \right\} dx.$$

Здесь η — параметр порядка; коэффициент α зависит от температуры T по закону $\alpha = \alpha_0(T - T_c)$ и меняет знак при определенном пороговом значении параметра T_c ; положительные коэффициенты α_0 , β не зависят от температуры; γ — коэффициент диффузии параметра порядка. Уравнение релаксации

$$\dot{\eta}(x, t) = -\frac{\delta F}{\delta \eta(x)}$$

дает зависящее от времени уравнение Гинзбурга — Ландау

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\alpha \eta - \beta \eta^3 + \gamma \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}.$$

Молекулярная динамика подсказала, что решение этого уравнения следует искать в виде стационарных бегущих волн $\eta(x, t) = \eta(x - Vt)$. В этом случае уравнение принимает вид

$$\gamma \eta'' + V \eta' - \alpha \eta - \beta \eta^3 = 0,$$

где штрих означает дифференцирование по x . Авторы [39] нашли расходящееся решение этого нелинейного уравнения в виде разрывной волны

$$\eta = \eta_0 \operatorname{cth} \left(\frac{x - Vt}{\Delta} \pm 1 \right),$$

где η_0 — амплитуда; Δ — корреляционная длина (рис. 3).

Этот пример показывает, что в хаосе теплового движения может спонтанно образоваться солитоноподобная структура, которая получила название солитон параметра порядка.

Заключение и выводы

В предыдущей статье [1] мы показали, как зарождались такие понятия, как теплота, температура и энтропия от момента возникновения науки о теплоте и до конца XIX века, когда объектом исследования был сначала пар, а затем идеальные и реальные газы. В данной статье рассмотрена эволюция этих понятий в XX-м веке, примерно до начала девяностых годов. Здесь объектом исследования в физике было, в основном, твердое тело. Наряду с физикой, параллельно и практически независимо развивалась информатика, которая внесла свой вклад в развитие этих понятий. Во второй половине XX века появилась тенденция к проникновению информационного подхода в физику. Это было вызвано тем, что компьютеры стали широко применяться в физических исследованиях. В результате родился новый стиль исследования — комбинация численного эксперимента и последующего анализа полученных результатов, который в идеале завершается построением

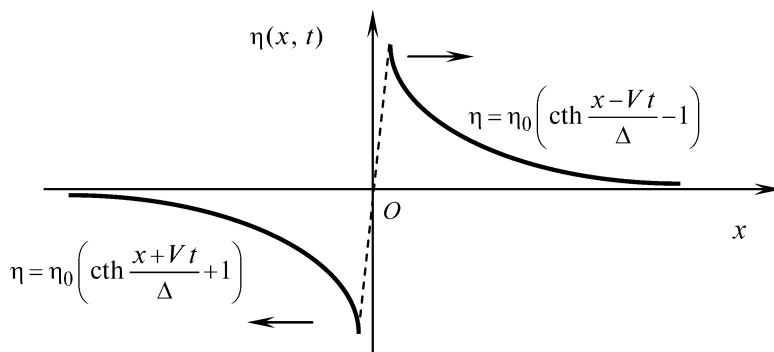


Рис. 3. Солитоны параметра порядка. Обе волны возникают одновременно; входящие в них группы атомов движутся в противофазе и играют роль захватов, растягивающих разрываемую связь

ем теории. Этот стиль становится все более важным для научных открытий.

Подведем промежуточные итоги. Эволюция понятий идет от частного к общему. Самое общее (почти философское) определение теплоты, температуры и энтропии в конце прошлого века могло бы звучать так: теплота — это количество хаоса, температура — это дисперсия хаоса, энтропия — это плотность хаоса. Эти выводы следуют из традиционного подхода к изучению различных моделей конденсированной среды.

Компьютерные, вначале немногочисленные, эксперименты, проведенные во второй половине XX-го века, показали, что хаос, даже в твердых телах, обладает структурой. Однако основной вопрос — как теплота связана с видами движения частиц системы — остался, как и во времена Больцмана, на уровне гипотез. Поэтому приведенные выше определения следует считать предварительными.

Газы и твердые тела — это предельные агрегатные состояния вещества. Наряду с ними су-

ществуют жидкости и полимеры. Полимерами называют вещества, молекулы которых состоят из большого числа повторяющихся групп — мономеров. Если число атомов в молекуле превышает 1000, то такую молекулу называют макромолекулой (Hermann Staudinger, 1922). Считают, что дальнейшее увеличение числа мономеров не меняет существенно свойства макромолекулы. Полимеры обладают свойствами, которые делают их похожими и на жидкости, и на твердые тела одновременно, поэтому их выделяют в особый класс — *soft condensed matter* (в русской литературе этот термин еще не прижился).

Моделирование свойств полимеров и биополимеров показало, что эта мягкая конденсированная среда обладает большой склонностью к самоорганизации [41–43]. В связи с этим возникли новые проблемы и вопросы: каковы механизмы самоорганизации, как при этом ведут себя температура и энтропия, сохраняется ли первоначальный смысл этих понятий? Эти вопросы мы рассмотрим в следующей статье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Melker, A.I.** Heat, Temperature, Entropy [Текст] / A.I. Melker, S.A. Starovoitov, T.V. Vozobyeba // Materials Physics and Mechanics.— Proc. of the Thizteentn Int. Workshop jn Nano-Design, Technology and Computer Simulations.— 2010. Vol. 9. № 3.— P. 194–209.
2. Словарь иностранных слов [Текст].— М.: ГИИНС, 1954.— 856 с.
3. Longman Dictionary of English Language and Culture [Текст].— Essex, England: Addison Wesley Longmans Limited, 1992.— 1528 pp.
4. Новый иллюстрированный энциклопедический словарь [Текст].— М.: Большая Российская энциклопедия, 2000.— 912 с.
5. Математический энциклопедический словарь [Текст].— М.: Советская энциклопедия, 1988.— 848 с.
6. **Бауэр, Ф.Л.** Информатика [Текст] / Ф.Л. Бауэр, Г. Гооз.— М.: Мир, 1976.— 488 с.
7. **Бриллюэн, Л.** Научная неопределенность и информация [Текст] / Л. Бриллюэн. М.: Мир, 1966.— 268 с.
8. **Мелькер, А.И.** Ноофизика (Наука и учение) [Текст] / А.И. Мелькер / Санкт-Петербургская академия наук по проблемам прочности.— СПб., 2006.— 152 с.
9. **Климонтович, Ю.Л.** Статистическая физика [Текст] / Ю.Л. Климонтович.— М.: Наука, 1982.— 608 с.
10. **Балеску, Р.** Равновесная и неравновесная статистическая механика. Том 1–2 [Текст] / Р. Балеску.— М.: Мир, 1978.— 406 и 400 с.
11. **Мелькер, А.И.** Моделирование эксперимента [Текст] / А.И. Мелькер // Серия: Физика 1991. Вып. 10.— М.: Знание, 1991.— 64 с.
12. **Мелькер, А.И.** Физика конденсированного состояния и компьютерное моделирование [Текст] / А.И. Мелькер // Науч.-техн. ведомости СПбГПУ.— 2006. № 3(45).— С. 118–125.
13. **Melker, A.I.** Fiftieth anniversary of molecular dynamics [Текст] / A.I. Melker // Proceedings of SPIE.— Vol. 6597 (SPIE, Bellingham, WA, 2007) 659702-1— 659702-36.
14. **Мелькер, А.И.** Моделирование на ЭВМ разрушения твердых тел [Текст]: Дис. ... докт. физ.-мат. наук / А.И. Мелькер.— Л., 1987.— 445 с.
15. **Дженкинс, Г.** Спектральный анализ и его приложения. Том 1-2 [Текст] / Г. Дженкинс, Д. Ваттс.— М.: Мир, 1971–72.
16. **Заславский, Г.М.** Стохастическая неустойчивость нелинейных колебаний [Текст] / Г.М. Заславский, Б.В. Чириков.— Успехи физических наук.— 1971. Т. 105, № 1.— С. 3–39.
17. **Melker, A.I.** Calculation of energy characteristics of point defects in bcc iron by molecular dynamic technique [Текст] / A.I. Melker, D.B. Mizandrondtzev, V.V. Sirotinkin // Z. Naturforsch.— 1990. Bd. 46a.— P. 233–239.

18. **Евсеев, А.М.** Молекулярно-динамическое исследование совершенных и несовершенных кристаллов [Текст] / А.М. Евсеев, В.М. Дергачев // Физика твердого тела.— 1976. Т. 18. № 8. — С. 2270–2276.
19. **Мелькер, А.И.** Динамика конденсированных сред. Часть 1. Колебания и волны [Текст] / А.И. Мелькер / Санкт-Петербургская академия наук по проблемам прочности.— СПб., 2004.— 235 с.
20. **Скотт, Э.** Волны в активных и нелинейных средах в приложении к электронике [Текст] / Э. Скотт.— М.: Сов. радио, 1977.— 384 с.
21. **Ньюэлл, А.** Солитоны в математике и физике [Текст] / А. Ньюэлл.— М.: Мир, 1989.— 324 с.
22. **Филиппов, А.Т.** Многоликий солитон [Текст] / А.Т. Филиппов.— М. Наука, 1990.— 288 с.
23. **Мелькер, А.И.** Новые квазичастицы в деформированных ангармонических цепочках [Текст] / А.И. Мелькер // Численные методы механики сплошной среды.— Новосибирск.— 1981. Т. 12, № 1.— С. 82–94.
24. **Nordsieck, A.** On numerical integration of ordinary differential equations [Текст] / A. Nordsieck // Math. Comput. 1962. Vol. 16. № 77. P. 22–49.
25. **Мелькер, А.И.** Моделирование нелинейных колебаний одномерной цепочки методом молекулярной динамики [Текст] / А.И. Мелькер, А.И. Михайлин, Н.П. Лиходедов, О.А. Усов.— Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР.— № 661.— Л., 1980.— 28 с.
26. **Слуцкер, А.И.** Понятие температуры и особенности теплового равновесия в системе твердых тел [Текст] / А.И. Слуцкер, Ю.И. Поликарпов, Д.Д. Каров // Науч.-техн. ведомости СПбГПУ. 2008. № 3(59).— С. 94–101.
27. **Слэтер, Дж.** Диэлектрики, полупроводники, металлы [Текст] / Дж. Слэтер.— М.: Мир, 1969. — 648 с.
28. **Займан, Дж.** Принципы теории твердого тела [Текст] / Дж. Займан.— М.: Мир, 1974.— 472 с.
29. **Китель, Ч.** Квантовая теория твердых тел [Текст] / Ч. Китель.— М.: Наука, 1967.— 492 с.
30. **Гюйе, Р.** Физика квантовых кристаллов [Текст] / Р. Гюйе.— В кн.: Квантовые кристаллы / Под ред. С.В. Вонсовского.— М.: Мир, 1975.— С. 23–133.
31. **Томпсон, М.** Дефекты и радиационные повреждения в металлах [Текст] / М. Томпсон.— М.: Мир, 1971.— 368 с.
32. Радиационные дефекты в металлах [Текст] / Под ред. А.Т. Лукьянова.— Алма-Ата: Наука, 1981.— 296 с.
33. **Кирсанов, В.В.** Процессы радиационного дефектообразования в металлах [Текст] / В.В. Кирсанов, А.Л. Суворов, Ю.В. Трушин.— М.: Энергоатомиздат, 1985.— 272 с.
34. **Кирсанов, В.В.** ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении [Текст] / В.В. Кирсанов.— М.: Энергоатомиздат, 1990.— 304 с.
35. **Мелькер, А.И.** Статистика структуры поврежденных областей, созданных ПВА в металлах и сплавах [Текст] / А.И. Мелькер // В кн.: Радиационные дефекты в металлах / Под ред. А.Т. Лукьянова.— Алма-Ата: Наука, 1981.— С. 15–23.
36. **Melker, A.I.** Defect clusters and subcascades. II. The splitting threshold and subcascades dimensions [Текст] / A.I. Melker, S.N. Romanov, N.L. Tarasenko // Physica status solidi (b). — 1986. Vol. 133. № 1.— P. 111–118.
37. **Регель, В.Р.** Кинетическая природа прочности твердых тел [Текст] / В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский.— М.: Наука, 1974.— 560 с.
38. **Мелькер, А.И.** Разрушающие флуктуации энергии в ангармонической цепочке атомов [Текст] / А.И. Мелькер, А.И. Михайлин // Физика твердого тела.— 1981. Т. 23. № 6.— С. 1746–1750.
39. **Мелькер, А.И.** Солитоны параметра порядка в ангармонической цепочке атомов [Текст] / А.И. Мелькер, И.А. Овидько // Физика твердого тела.— 1985. Т. 27. № 2. — С. 594–597.
40. **Хакен, Г.** Синергетика [Текст] / Г. Хакен.— М.: Мир, 1980.— 408 с.
41. **Воробьева, Т.В.** Молекулярно-динамическое исследование самоорганизации цепных макромолекул [Текст]: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / Т.В. Воробьева.— СПб., 1994.— 110 с.
42. **Соловьев, Д.В.** Молекулярно-динамическое исследование деформации полиэтилена [Текст]: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / Д.В. Соловьев.— СПб., 1998.— 156 с.
43. **Френкель, З.М.** Изучение самоорганизации биополимеров методом молекулярной динамики [Текст]: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / З.М. Френкель.— СПб., 2002.— 230 с.