УДК 530

СОХРАНЕНИЕ ЭНТРОПИИ В МАРКОВСКИХ СИСТЕМАХ

*Ю.Е. Хорошавцев**

Академия гражданской авиации (ТУ)

Выдвинуто предположение, что в квантовой механике действует закон сохранения энтропии Показано, что из условия его соблюдения следует интерференция амплитуд вероятностей и выводится уравнение Шредингера.

Понятие энтропии впервые было введено для описания термодинамических процессов. Впоследствии, помимо основного определения, как отношение изменения количества теплоты к температуре адиабатической системы, оно приобрело и второе – логарифм вероятностей состояний этой системы. Не останавливаясь на подробностях, отметим только, что первое определение применяют к макросистемам с числом состояний, соизмеримым с числом Авогадро, второе – когда число состояний невелико. В статистической физике оба определения связаны основным соотношением термодинамики, установленным Больцманом.

Для адиабатических процессов важное теоретическое значение приобрело понятие обратимого цикла, в котором при возврате к исходному состоянию энтропия сохраняется. Вследствие того, что окружающие нас процессы необратимы, энтропия всегда возрастает. Но что будет, если не всегда? К каким следствиям приведет сохранение энтропии в статистическом понимании? Мы рассмотрим этот вопрос применительно к марковским системам и увидим аналогию с квантовой механикой.

Понятие энтропии, определяемое статистически, используется также и в теории информации, где оно служит мерой неопределенности состояний. Эти состояния описываются как априорными вероятностями, имеющимися до наблюдения (получения информационного сигнала по каналу связи), так и апостериорными, получающимися в результате наблюдения [1]. Вероятности связаны по теореме Байеса, чтобы апостериорная вероятность приняла значение, равное единице относительно априорного значения, по каналу связи от входа x к выходу y должно быть передано количество информации

$$T(x,y)=H(x)+H(y)-H(x,y)$$

где энтропия H, определяемая на множестве z, дается формулой

$$H(z)=-\sum_k P(z_k)\log P(z_k)$$

Здесь $P(z_k)$ – вероятность появления значения z_k, $k = 1,...,n$.

Математический аппарат теории информации хорошо развит, поэтому ввиду математических аналогий с рассматриваемыми физическими задачами воспользуемся рядом его положений.

* E-mail: khoroshavtsev@mail.ru

Передача информации происходит по каналу связи, в котором передаваемый сигнал может принимать n значений. По принятому на выходе сигналу делается статистически заключение о его значении на входе. Можно сказать и так: по результату наблюдения конечного состояния оцениваются предыдущие, возможно, ненаблюдаемые. Такая формулировка наталкивает на квантовомеханические аналогии, где детерминизм причинно-следственных связей заменяется статистическими зависимостями.

Работа канала описывается матрицей переходных вероятностей. Если канал идеальный, в котором выходной сигнал y в точности воспроизводит сигнал x на входе, то энтропия $H(x) = H(y)$. После наблюдения у нас не остается первоначальной неопределенности в суждениях об истинном состоянии x. В случае неидеального канала имеется потеря информации, и об x мы можем судить лишь предположительно. Матрица условных вероятностей идеального канала является единичной E. Неквадратных матриц мы пока не касаемся.

Будем рассматривать последовательное соединение каналов. Матрица переходных вероятностей такого соединения равна произведению матриц каждого канала. Для нас представляет интерес соединение двух каналов, когда в первом происходит частичная потеря информации, а второй является восстанавливающим, т.е. в сумме два канала эквивалентны идеальному. Как показано в [2], если элементами матрицы условных вероятностей первого канала являются неотрицательные числа (по определению вероятностей), то по крайней мере один из элементов второй матрицы будет отрицательным числом. Этот результат, запрещающий восстановление информации (при отсутствии избыточности кодирования) в теории связи, оказывается полезным в квантовой механике.

Расширим понятие канала на все приборы, меняющие состояния физического процесса в ходе опыта. Причем характер изменений – статистический, описываемый матрицей вероятностей. Для примера рассмотрим прибор Штерна-Герлаха, сортирующий атомы в неоднородном магнитном поле [3] (рис. 1).

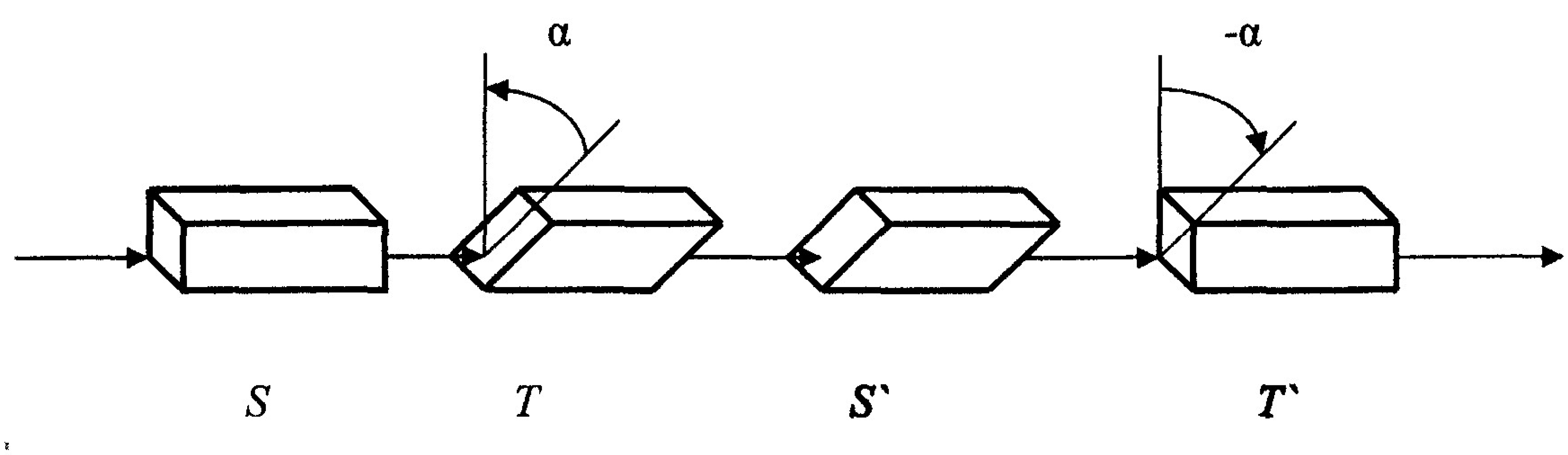

Рис. 1. Возврат к исходному состоянию в схеме двух приборов Штерна-Герлаха

Пусть установлено последовательно два прибора: (S,T) и $(S`,T`)$. В первом приборе T повернут относительно S на угол α, а во втором – $T`$ относительно $S`$ на угол -α. Результатом такого включения является возврат к исходному состоянию. Нас интересует, сохранилась ли при этом энтропия. Чтобы убедиться в факте сохранения, достаточно проверить, будет ли матрица последовательного соединения приборов единичной.

Действительно, для трех базисных состояний матрицами условных вероятностей будут [3] и $A_1A_2 = E$, т.е. энтропия сохраняется.

$$A_1(\alpha)=\begin{Vmatrix} 1+\cos\alpha/2 & -\sin\alpha/\sqrt{2} & 1-\cos\alpha/2 \\ \sin\alpha/\sqrt{2} & \cos\alpha & -\sin\alpha/\sqrt{2} \\ 1-\cos\alpha/2 & \sin\alpha/\sqrt{2} & 1+\cos\alpha/2 \end{Vmatrix}$$

$$A_2(\alpha)=\begin{Vmatrix} 1+\cos\alpha/2 & \sin\alpha/\sqrt{2} & 1-\cos\alpha/2 \\ -\sin\alpha/\sqrt{2} & \cos\alpha & \sin\alpha/\sqrt{2} \\ 1-\cos\alpha/2 & -\sin\alpha/\sqrt{2} & 1+\cos\alpha/2 \end{Vmatrix}$$

Мы видим, что A_2 является обратной к A_1, т.е. $A_2(\alpha)=A_1^{-1}(\alpha)$. С другой стороны, поскольку произошел возврат к исходному состоянию, то $A_1(\alpha) = A_2(-\alpha)$. Таким образом, если распространить наши рассуждения на все квантовые процессы и предположить, что при возврате к исходному состоянию энтропия сохраняется, то мы приходим к следующему ключевому выводу:

$$A^{-1}(x)=A(-x)\quad, \tag{1}$$

где x – параметр задачи.

Далее воспользуемся тем, что собственные числа матриц не зависят от выбора базиса, и будем считать, что $A(x)$ описывается в базисе, совпадающем с ее собственными векторами. В этом случае матрица принимает диагональный вид

$$A(x)=\begin{Vmatrix} a_1(x) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2(x) & \dots & 0 \\ . & . & \dots & . \\ 0 & 0 & \dots & a_n(x) \end{Vmatrix} \tag{2}$$

с определителем $\Delta = a_1(x)a_2(x)...a_n(x)$, который из условия нормировки вероятностей должен быть равен единице. Обратная матрица

$$A^{-1}=\frac{1}{\Delta}\begin{Vmatrix} a_2a_3...a_n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_1a_3...a_n & \dots & 0 \\ . & . & \dots & . \\ 0 & 0 & \dots & a_1a_2...a_{n-1} \end{Vmatrix}=\begin{Vmatrix} a_1^{-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2^{-1} & \dots & 0 \\ . & . & \dots & . \\ 0 & 0 & \dots & a_n^{-1} \end{Vmatrix}. \tag{3}$$

Сравнив (2) с (3) и воспользовавшись формулой (1), заключаем, что $a_1^{-1}(x)=a_1(-x),\dots,a_n^{-1}(x)=a_n(-x)$. Такие равенства возможны только для показательных функций. Но в области вещественных чисел они не могут быть отрицательными, что необходимо для построения восстанавливающего канала. Поэтому получаем следующий результат: из условия сохранения энтропии элементами переходных матриц вероятностей в собственном базисе являются мнимые экспоненты. Для четного размера n – это пары вида $exp(\pm ix)$, для нечетного – имеется еще единица (exp 0).

Например, в собственном базисе матрица A_1 преобразуется в

$$A_1 = \begin{Vmatrix} \exp(i\alpha) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-i\alpha) \end{Vmatrix}, \qquad i = \sqrt{-1}\ .$$

По принятой терминологии эти комплексные величины будем называть амплитудами вероятностей. В общем случае каналы описываются не в собственном базисе и соответственно элементами матриц могут быть любые числа.

Понятие канала, связывающего входные и выходные состояния, может быть применено к рассмотрению физических задач. Например, дифракция электронов при прохождении через отверстия в диафрагме может быть описана с помощью двух каналов: источник – диафрагма и диафрагма – экран (рис. 2).

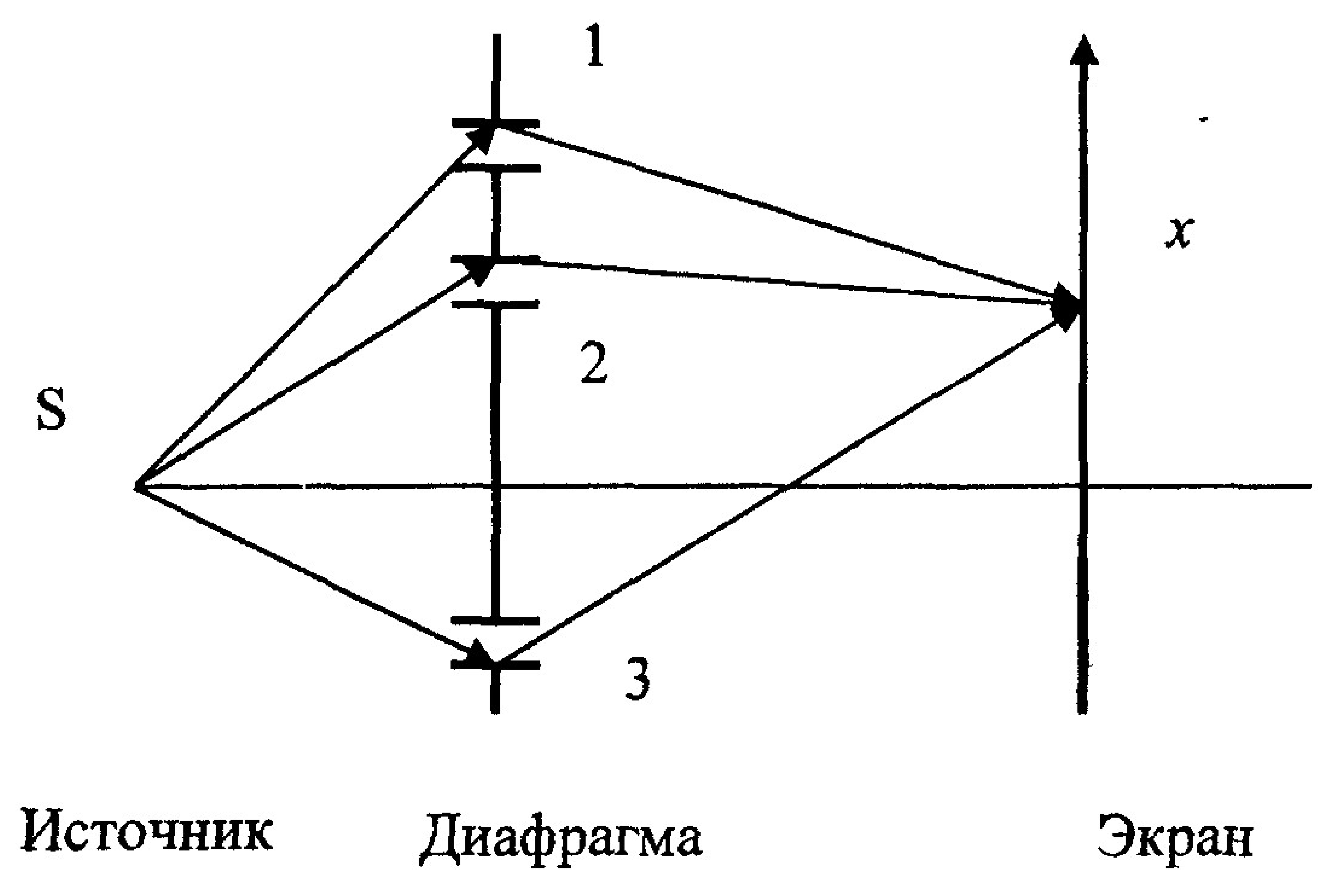

Рис. 2. Схема опыта дифракции электронов

Каналы описываются матрицей-строкой и матрицей-столбцом. Результат умножения матриц – комплексное число:

$$\begin{Vmatrix} a_1 e^{i\alpha_1} & a_2 e^{i\alpha_2} & a_3 e^{i\alpha_3} \end{Vmatrix} \bullet \begin{Vmatrix} b_1 e^{i\beta_1} & b_2 e^{i\beta_2} & b_3 e^{i\beta_3} \end{Vmatrix}^T =$$
$$= a_1 b_1 e^{i(\alpha_1+\beta_1)} + a_2 b_2 e^{i(\alpha_2+\beta_2)} + a_3 b_3 e^{i(\alpha_3+\beta_3)} ,$$

где a, b, α, β – параметры, определяемые схемой опыта, T – знак транспонирования.

Мы имеем интерференцию амплитуд вероятностей. Если известно, что электрон, например, пролетает через щель 1, то неопределенности в состояниях нет (каналы идеальные), и матрицы с точностью до выносимого множителя $a_1 b_1$ будут единичными (псевдо): $\begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \end{Vmatrix} \bullet \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \end{Vmatrix}^T = 1$ Интерференции не наблюдается.

Применим полученные результаты к описанию состояний, меняющихся по времени t и координате x. Мы имеем последовательность, которая для марковских процессов приводит нас к известной в теории массового обслуживания схеме гибели и размножения (рис. 3). Эта схема, подчеркнем, отражает логику переключения состояний, но не их физическую связь.

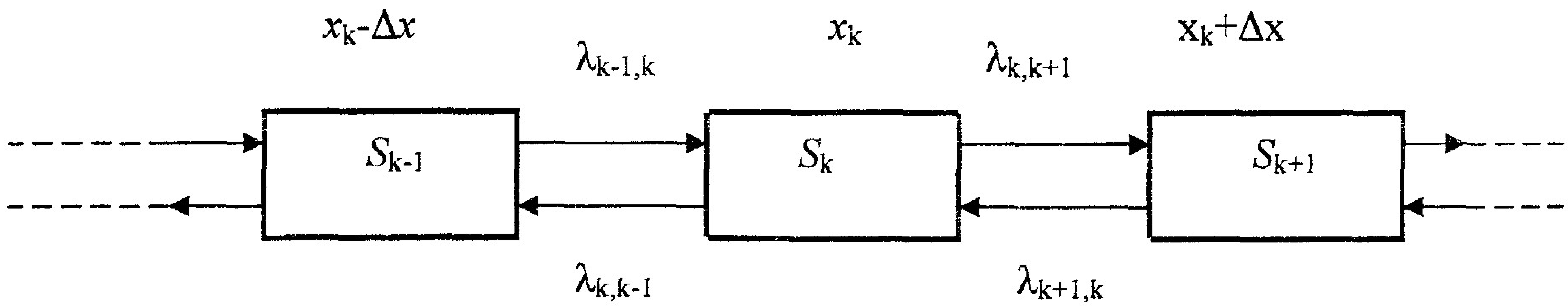

Рис. 3. Граф состояний движущейся частицы

Пусть имеется свободно движущаяся вдоль оси x частица. Тогда состояниям ..., S_{k-1}, S_k, S_{k+1}, ... соответствует нахождение частицы в точках с координатами..., x_k-Δx, x_k, x_k+Δx ,... Интенсивности λ – это среднее число переходов в единицу времени между соответствующими состояниями, в теории массового обслуживания называются также средней частотой потока событий. Для простоты будем полагать, что внешнего поля нет и все λ одинаковые.

Найдем вероятность того, что частица в момент t+Δt окажется в состоянии S_k. Для этого воспользуемся известным выводом уравнений Эрланга. Частица может оказаться в состоянии S_k тремя способами: в момент t она уже была в S_k и за Δt не перешла ни в S_{k-1}, ни в S_{k+1}; в момент t она была в S_{k-1} и за Δt перешла в S_k; аналогично с S_{k+1}. Для марковских процессов – вероятность того, что за Δt произойдет одно событие $P(\Delta t)$=$\lambda\Delta t$. В соответствии с этим

$$P_k(t+\Delta t) = P_k(t)(1-\lambda\Delta t)^2 + P_{k-1}(t)\lambda\Delta t + P_{k+1}(t)\lambda\Delta t\ .$$

Здесь вероятность неперехода записана в виде вероятности противоположного переходу события. Координату x мы для краткости пока не указываем. Раскрывая скобки и отбрасывая члены с величинами второго порядка малости, после группировки приходим к выражению

$$\frac{P_k(t+\Delta t)-P_k(t)}{\Delta t} = \lambda\left[-2P_k(t)+P_{k-1}(t)+P_{k+1}(t)\right]$$

В пределе $\Delta t \to 0$ получаем дифференциальное уравнение, в котором теперь укажем координату x.

$$\frac{\partial P(x_k)}{\partial t} = \lambda\left[-2P(x_k)+P(x_k-\Delta x)+P(x_k+\Delta x)\right]$$

Разлагая функции $P(x_k \pm \Delta x)$ в ряд Тэйлора в окрестности точки x_k и ограничиваясь первыми тремя членами, приходим к уравнению

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \lambda\Delta x^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\ .$$

Если решать это уравнение, рассматривая движение частицы из какого-то детерминированного положения, то ее начальное состояние будет описано вектором вероятностей с одной единицей и остальными нулями. Чтобы с течением времени могли появиться комплексные вероятности, как это необходимо при сохранении энтропии, следует допустить, что λ – комплексное число. Соответственно мы полагаем $\lambda = i\nu\,,\quad \nu \in R$.

В итоге мы приходим к уравнению, в котором для подчеркивания комплексного характера вероятностей вместо P будем, как общепринято, писать ψ.

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}+\nu\Delta x^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=0\cdot$$

Придадим физическое содержание величинам ν и Δx. Воспользуемся фундаментальными формулами квантовой физики для энергии E и импульса p частицы:

$$E=\hbar\nu\,,\qquad p=\hbar/\Delta x\,.$$

В отсутствии поля E – кинетическая энергия. Производя соответствующие подстановки, окончательно получаем

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=0\cdot$$

Это уравнение Шредингера для свободной частицы с массой m. При наличии внешнего поля все λ на рис. 3 будут функциями x и t.

Для статического поля примем из симметрии $\lambda_{k,k+1}=\lambda_{k,k-1}=\lambda_k$,

$$\lambda_{k+1,k}=\lambda_k+\left.\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right|_{x=x_k}\Delta x\quad,\quad\lambda_{k-1,k}=\lambda_k-\left.\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right|_{x=x_k}\Delta x\quad,\quad\left.\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right|_{x=x_k}=\gamma_k\,.$$

Далее, следуя той же процедуре вывода, приходим к уравнению движения во внешнем поле с градиентом $\gamma=i\chi$:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}+\nu\Delta x^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+2\chi\Delta x^2\frac{\partial\psi}{\partial x}=0\quad. \tag{4}$$

Из физических соображений можно предположить, что в электромагнитном поле со скалярным φ и векторным **A** потенциалами для частицы без спина с зарядом q справедливо $\chi\Delta x^2=\frac{q}{m}\sqrt{\frac{\varphi^2}{c^2}-\mathbf{A}^2}\,.$

Непосредственной подстановкой легко убедиться, что уравнению (4) удовлетворяет функция $\psi(x,t)=\exp(kx+i\omega t)$, при

$$\omega=kv\qquad\text{и}\qquad k=\frac{2}{\hbar}(mv-2q\sqrt{\frac{\varphi^2}{c^2}-\mathbf{A}^2})\cdot$$

Здесь v – скорость частицы, c – скорость света.

При отсутствии магнитного поля потенциал $A=0$ и

$$k=\frac{2}{\hbar}(mv-2\frac{q\varphi}{c})=\frac{2}{\hbar c}(mvc-2U_\varphi),$$

где $U_\varphi=q\varphi$ – потенциальная энергия заряда.

Если определить полную энергию $\Omega=mvc$ согласно [4] и принять во внимание, что кинетическая энергия $E=\Omega-U_\varphi$, то решением уравнения (4) в электрическом поле будет функция $\psi(x,t)=\exp[\frac{2}{\hbar c}(E-U_\varphi)(x+ivt)]\cdot$

Пусть теперь имеется только магнитное поле и $\varphi=0$. В уравнении (4) будут уже два мнимых члена. Кроме того, поскольку траектория заряда в магнитном поле искривляется, необходимо использовать пространственное описание, в котором оператор $\partial/\partial x$ должен быть заменен оператором ∇. Ограничимся круговым движением с постоянным радиусом r (рис. 4). Тогда состоянию S_k на рис. 3 будет соответствовать координата $r\varphi_k$, а уравнение относительно искомой функции $\psi(\varphi,t)$ запишется в виде

$$i(\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{qA}{mr}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi})+\frac{\hbar}{2mr^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}=0\quad,\quad r=\mathrm{Const}\quad. \tag{5}$$

Решением уравнения (5) является $\psi(\varphi,t)=\exp[i(kr\varphi-\omega t)]$, при $\omega=kv$ и $k=2(mv-2qA)/\hbar$.

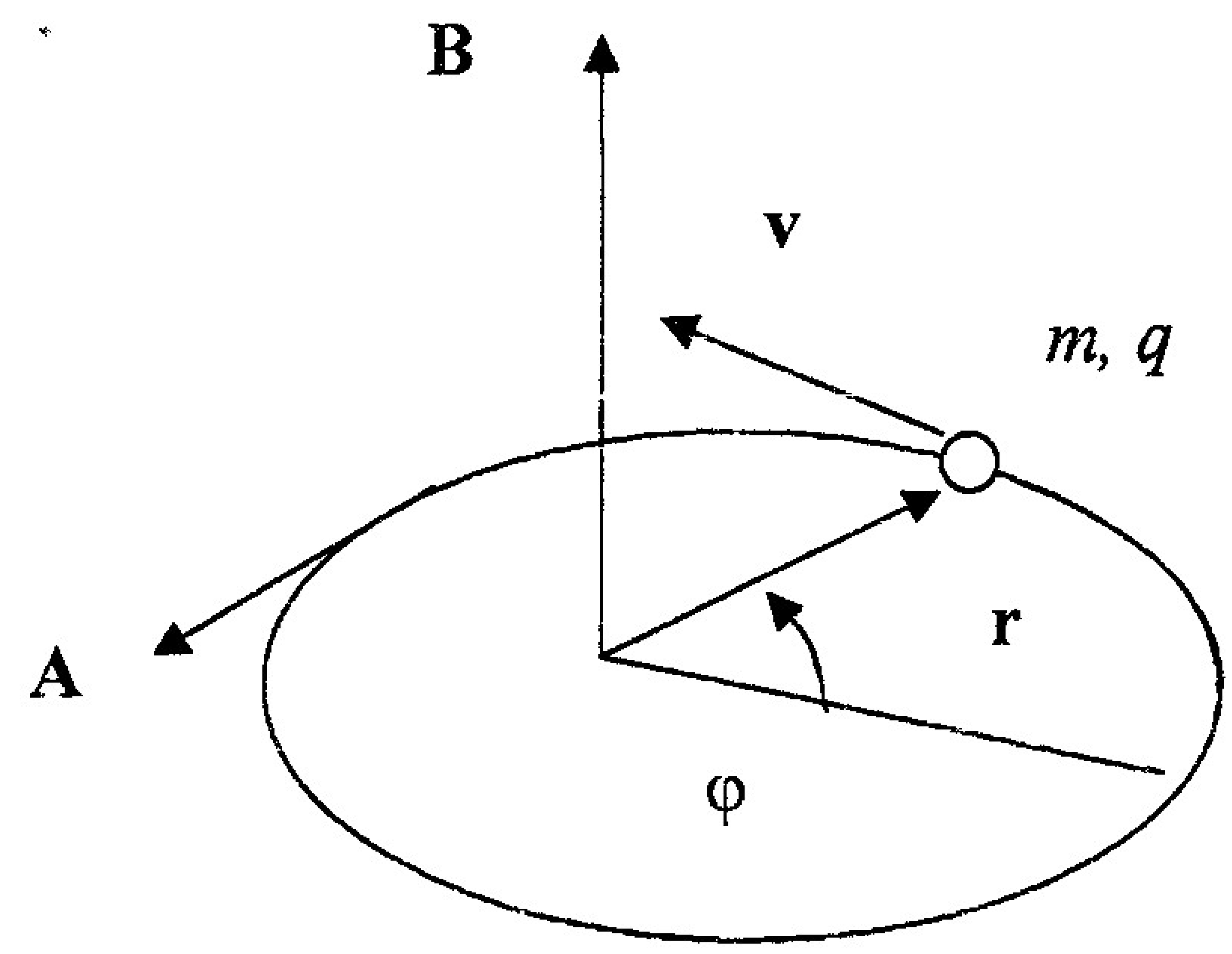

Рис. 4. Движение заряда в магнитном поле

Рассмотрим случай круговой симметрии, когда нахождение в любой точке орбиты равновероятно, т.е. $\psi \neq \psi(\varphi)$. Для этого должно быть $k = 0$, следовательно, $mv = 2qA$. Перейдем от **A** к индукции поля **B**, воспользовавшись теоремой Стокса. Для кругового контура приравнивание поверхностного интеграла от $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$ контурному по **A** дает $A=Br/2$, где A, B, r, v обозначают модули векторов, изображенных на рис.4. В результате получаем равенство $mv\text{-}qBr = 0$, которое запишем в привычной форме $mv^2/r = qBv$. Это классическое условие устойчивости кругового движения заряда в однородном магнитном поле: центробежная сила равна силе Лоренца.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шеридан, Т. Системы человек-машина. Модели обработки информации, управления и принятия решений человеком-оператором / Т. Шеридан, У. Феррелл // М.: Машиностроение, 1980. 399 с.

2. Хорошавцев, Ю.Е. К вопросу построения восстанавливающего канала / Ю.Е. Хорошавцев // Автоматизированные системы управления и обработки информации: Межвуз. темат. сб. тр. / СПбАГА. СПб., 1999. С. 32-35.

3. Фейнман, Р. Фейнмановские лекции по физике. Квантовая механика / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс // М.: Мир, 1978. 524 с.

4. Хорошавцев, Ю.Е. Волновая интерпретация уравнений релятивистской динамики / Ю.Е. Хорошавцев // Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ: Межвуз. темат. сб. тр. / СПбГАСУ. СПб., 2004. Вып.10.

CONSERVATION OF ENTROPY INTO MARKOV PROCESSES

Y.E. Khoroshavtsev

Technical University of Civil Aviation

It is supposed that in the quantum mechanics the law of conservation of entropy takes place. It is shown that it causes the interference of amplitudes of probabilities and from its observance Schrodinger equation is deduced.