

теорема Нернста. Кристалл при абсолютном нуле есть абсолютно устойчивая система.

В других случаях механические системы обладают, конечно, ненулевой энтропией. Можно, например, вычислить энтропию цилиндра и поршня в двигателе внутреннего сгорания. Это означает наличие неустойчивости для множества колебательных степеней свободы металла, из которого построен двигатель. Тем не менее, механический процесс — макроскопическое движение поршня в цилиндре — устойчив, так как это движение не связано с внутренними степенями свободы. Соответственно механический процесс не сопровождается изменением энтропии. Это адиабатический процесс. В механике рассматриваются именно устойчивые степени свободы, для которых понятие энтропии лишено содержания (дальнейшие подробности см. в [54—58]).

Пригожин рассмотрел проблемы механического обоснования энтропии на иной основе, вводя кинетическое уравнение, отличающееся от больцманова тем, что оператор соударений в нем имеет нелокальный характер, изменение во времени зависит от предыдущей истории системы. Кроме того, кинетическое уравнение Пригожина содержит член памяти, зависящий от начальных корреляций [15, 59, 60]. Теория Пригожина не встречается с парадоксом обратимости (который, как мы видели, в действительности отсутствует). Обсуждение теории Пригожина выходит за рамки этой книги. Отметим лишь, что связь между теорией Пригожина и изложенными здесь идеями о неустойчивости механических систем пока не исследована.

§ 2.7. ЭНТРОПИЯ И ИНФОРМАЦИЯ В БИОЛОГИИ

Обращаясь к биологии, мы должны оценить смысл и эффективность понятия энтропии для открытой системы. Соответствующий анализ был проведен Шлэглем [38]. Необходимо рассмотреть систему, взаимодействующую со своим окружением, и определить понятие термического контакта. Допустим, что имеется система A , взаимодействующая с системой (окружением) A' . A плюс A' образуют замкнутую систему. Будем пользоваться количеством информации $I = -S/k_B$. Для системы A имеем (ср. (2.106))

$$I = \sum_i w_i \ln w_i. \quad (2.119)$$

Для полной системы имеем

$$\tilde{I} = \sum_{i, \alpha} w_{i\alpha} \ln w_{i\alpha}, \quad (2.120)$$

где $w_{i\alpha}$ — вероятность того, что A находится в состоянии i , а A' — в состоянии α . Если энергия всей системы фиксирована, то возможны лишь некоторые пары индексов i, α .

Информация \tilde{I} минимальна и энтропия S максимальна, если реализуется равномерное распределение по допустимым состояниям, т. е. $w_{i\alpha}^0 = a = \text{const}$. При этом осуществляется термическое равновесие систем A и A' . Имеем

$$\tilde{I} - \tilde{I}^0 = \sum_{i, \alpha} w_{i\alpha} \ln w_{i\alpha} - \sum_{i, \alpha} w_{i\alpha}^0 \ln w_{i\alpha}^0. \quad (2.121)$$

Совместную вероятность $w_{i\alpha}$ можно представить в виде

$$w_{i\alpha} = w_i w(i|\alpha), \quad (2.122)$$

где $w(i|\alpha)$ — вероятность того, что A' находится в состоянии α , если A находится в состоянии i . Очевидно, что условные вероятности $w(i|\alpha)$ нормированы, т. е.

$$\sum_{\alpha} w(i|\alpha) = 1.$$

Преобразуя выражение (2.121), имеем

$$w_{i\alpha} \ln w_{i\alpha} - a \ln a = w_{i\alpha} \ln \frac{w_{i\alpha}}{a} + (w_{i\alpha} - a) \ln a,$$

$$\sum_{i, \alpha} w_{i\alpha} = \sum_i w_i \sum_{\alpha} w(i|\alpha) = \sum_{i=1}^N w_i = Na,$$

$$\begin{aligned} \sum_{i, \alpha} w_{i\alpha} \ln w_{i\alpha} - Na \ln a &= \sum_{i, \alpha} w_{i\alpha} \ln \frac{w_{i\alpha}}{a} + \\ &+ \sum_{i, \alpha} w_{i\alpha} \ln a - Na \ln a = \sum_{i, \alpha} w_{i\alpha} \ln \frac{w_{i\alpha}}{a}, \end{aligned}$$

т. е.

$$\tilde{I} - \tilde{I}^0 = \sum_{i, \alpha} w_{i\alpha} \ln \frac{w_{i\alpha}}{w_{i\alpha}^0}$$

или согласно (2.122)

$$\begin{aligned} \tilde{I} - \tilde{I}^0 &= \sum_{i, \alpha} w_i w(i|\alpha) \ln \frac{w_i w(i|\alpha)}{w_i^0 w^0(i|\alpha)} = \\ &= \sum_i w_i \ln \frac{w_i}{w_i^0} \sum_{\alpha} w(i|\alpha) + \sum_{i, \alpha} w_i w(i|\alpha) \ln \frac{w(i|\alpha)}{w^0(i|\alpha)} \end{aligned}$$

и в силу нормировки $w(i|\alpha)$

$$\tilde{I} - \tilde{I}^0 = \sum_i w_i \ln \frac{w_i}{w_i^0} + \sum_{i, \alpha} w_i w(i|\alpha) \ln \frac{w(i|\alpha)}{w^0(i|\alpha)}. \quad (2.123)$$

Первый член в правой части относится только к системе A и характеризует энтропию, продуцируемую внутри A . Вторым член

описывает обмен информацией между A и A' . Очевидно, что благодаря взаимодействию энтропия полной системы не аддитивна. Величина

$$K = \sum_i w_i \ln \frac{w_i}{w_i^0} \geq 0,$$

так как $\ln x > 1 - 1/x$ при любых $x \neq 1$. K дает меру отклонений w_i от w_i^0 . K убывает или остается без изменений, если w , претерпевает динамическое преобразование, оставляющее инвариантным распределение w_i^0 . Такое преобразование устремляет систему к равновесию.

Условные вероятности $w(i|\alpha)$, вообще говоря, зависят не только от индексов i, α , но и от начальных условий. Если эти условия не фиксированы, то по ним можно провести усреднение и получить однозначные величины $w(i|\alpha)$. Получается приближение, которое может описать термический контакт систем A и A' , характеризуемое однозначной зависимостью $w(i|\alpha)$ от i, α . При этом поведение системы A описывается однородным марковским процессом. Стационарное равновесие в этом процессе инвариантно

$$w_i^0 = \frac{w_{i\alpha}^0}{w(i|\alpha)}.$$

Здесь $w(i|\alpha)$ зависит лишь от i , и $w^0(i|\alpha) = w(i|\alpha)$. Следовательно,

$$\tilde{I} - \tilde{I}^0 = K.$$

Вследствие однозначности $w(i|\alpha)$ при выравнивании w и w^0 информация в A' не меняется, но лишь обменивается с системой A . Внутри A информация убывает, т. е. возрастает энтропия.

Полученные результаты не зависят от предположения о близости к равновесию.

В работе [39] проведено обобщение теории на неравновесные состояния, для которых интенсивные термодинамические величины зависят от времени. Была получена обобщенная форма второго начала

$$\dot{S}(t) - \frac{1}{T(t)} \dot{U}(t) + \frac{1}{T(t)} \sum_j y_j(t) \dot{x}^j(t) \geq 0, \quad (2.124)$$

где U — внутренняя энергия системы

$$U = \sum_i w_i E_i,$$

y_j и x^j — сопряженные термодинамические величины, скажем, давление и объем,

$$x^j = \sum_i w_i x_i^j.$$

В случае $y_j = p$ из (2.124) следует, что

$$\dot{S} \geq \frac{1}{T} (\dot{U} + p\dot{V}). \quad (2.125)$$

Если изменение состояния системы A происходит путем прохождения лишь состояний равновесия, то (2.125) обращается в классическую формулу Клаузиуса

$$dS \geq dQ/T.$$

Величины, стоящие в правой части (2.125), определены и для неравновесных состояний. Определена, тем самым, и энтропия.

Основной постулат термодинамики необратимых процессов состоит в том, что энтропия может быть определена как функция измеримых параметров состояния.

Мейкснер утверждает, однако, что однозначное определение энтропии для неравновесных процессов на основе макроскопического рассмотрения невозможно [40].

Термодинамическая система определяется как система, действие которой на окружение сводится только к производству или получению работы и тепла [41]. Такое определение применимо и к неравновесию. Термодинамика сетей (см. стр. 79) трактует электрические сети как термодинамические системы. Действительно, электрическая сеть обменивается с окружением электрической работой и теплом. Будем характеризовать сеть взаимосвязью приложенного напряжения u и вызванного им тока i . Измерения производятся лишь на входных и выходных клеммах, т.е. сеть трактуется как «черный ящик». Допустим, что для данной сети мы наблюдаем выполнение закона Ома

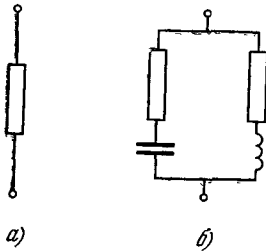


Рис. 2.4. Контур, эквивалентные, если $L = R^2C$.

$$u(t) = Ri(t)$$

для любых изменений напряжения, причем $u(t) = 0$ для $t \leq t_0$. Отсюда мы можем заключить, что электрический контур, сеть, содержит лишь омическое сопротивление R . В действительности, однако, имеется бесконечное множество сетей различной структуры, которые ведут себя на выходных клеммах одинаково, как простое сопротивление. Это относится, в частности, к контуру, изображенному на рис. 2.4, б, при условии, что $L = R^2C$. Ясно, что продукция энтропии в этом контуре иная, чем в контуре на рис. 2.4, а. В простом сопротивлении полученная энергия непрерывно диссипирует, тогда как в модели рис. 2.4, б часть энергии запасается в конденсаторе и в индукционной катушке. Следова-

тельно, продукция энтропии $d_i S$ не определяется однозначно приложенным напряжением, даже если известна связь между током и напряжением. Тем самым не определена и энтропия, так как

$$dS = dQ/T + d_i S.$$

Мейкснер приходит к указанному выше выводу о неоднозначности энтропии. Его содержание сводится к следующему: продукция энтропии, которую мы можем определить разумным образом, зависит от допустимых операций над системой (введение добавочных клемм на конденсаторе и т. д.). «В понятие энтропии входит нечто субъективное... она зависит от информации, которую мы получаем о рассматриваемой системе» [40].

Рассуждения эти, конечно, правильны, но не означают невозможности определения энтропии в необратимом процессе. Они означают необходимость полного знания атомно-молекулярного механизма процесса — раскрытия устройства «черного ящика».

Соображения Мейкснера актуальны для биологической термодинамики. «Черные ящики» в биологии чрезвычайно сложны, и получение полной информации об их структуре и свойствах практически невозможно. Тем самым возникает вопрос о познавательной ценности термодинамических и эквивалентных им теоретико-информационных представлений при рассмотрении основных биологических проблем. Соблюдение элементарных законов термодинамики в изолированной макросистеме, в состав которой входят живые организмы, не подлежит сомнению. Вопрос, однако, состоит в содержательности понятий энтропии и соответственно количества информации применительно к биологическим процессам.

Принято толковать возрастание макроскопической упорядоченности в онтогенезе и филогенезе как возрастание количества информации или убывание энтропии. Когда Шредингер говорил, что организм есть аperiodический кристалл [42], то он имел в виду, что развитие организма подобно росту кристалла в открытой системе и оплачивается возрастанием энтропии в окружающей среде. Это общее положение безусловно правильно. Тем самым, мерой изменения энтропии организма в процессе развития может служить увеличение энтропии внешней среды. Это — единственная мера, так как мы не располагаем точными способами оценки количества информации в клетке или в многоклеточном организме. В ряде работ делались такие оценки. Так, Данков и Кастлер считали, что в организме имеется примерно 500 различных структурно важных молекул. В среднем на одну молекулу приходится 4 бит информации и она может иметь около 12 способов ориентации, что дает еще 3 бит. Организм содержит примерно 10^{28} атомов, каждая молекула состоит из

100 атомов. 90% молекул (подобно воде) информации не несут. Отсюда следует, что человеческий организм содержит примерно $7 \cdot 10^{25}$ бит информации (т. е. $7 \cdot 10^9$ эрг/К или 120 ккал/К). Если рассматривать построение организма из атомов, то получим $2 \cdot 10^{28}$ бит или 48 ккал/К. Для зиготы получается величина, в 10^{14} раз меньшая [43]. Равен дает другую оценку, исходя из числа нуклеотидов в ДНК [44].

По оценке Блюменфельда [52] основное количество информации в человеческом организме определяется упорядоченным расположением аминокислотных остатков в 7 кг белков, чему соответствует $3 \cdot 10^{25}$ остатков. Это количество информации равно примерно $1,3 \cdot 10^{26}$ бит. Другие вклады значительно меньше: 150 г ДНК, содержащимся в человеческом организме, отвечает $6 \cdot 10^{23}$ бит, упорядоченному расположению 10^{13} клеток — $4 \cdot 10^{14}$ бит и упорядоченному расположению 10^8 молекул биополимеров в клетке — всего лишь $2,6 \cdot 10^9$ бит.

Важнейшая особенность обсуждаемой ситуации состоит в том, что биологическая система не является статистической. Это — динамическая система, своего рода химическая машина, поведение которой определяется положением и функциональностью взаимозависимых составных частей. Части эти макроскопичны (макромолекулы, надмолекулярные системы, клетки, ткани), соответственно функциональные изменения их относительного расположения не сопровождаются сколько-нибудь заметными изменениями энтропии. Биологическая система есть система именно в том смысле, что ее части взаимосвязаны и их энергия не аддитивна. Тем самым, в системе не выполняются исходные предпосылки статистической механики, и работа биологической машины не может быть описана в терминах энтропии или количества информации.

Конечно, биологические макромолекулы, вода, ионы и т. д. характеризуются определенной энтропией, определенным количеством информации. Биологическая динамическая система содержит статистические части. Статистичность исчезает на уровне организованных макроструктур, начиная с белковых глобул. Паровая машина или двигатель внутреннего сгорания также содержат динамическую и статистическую части. Поведение водяного пара или горячей смеси закономерно рассматривается на основе термодинамики, но как уже говорилось, статистическая механика бесполезна для описания работы цилиндра и поршня, хотя металл, из которого эти детали построены, есть статистическая система.

Как справедливо указывает Блюменфельд, в организме также имеются обе части (первой является прежде всего внутренняя водная среда), но в отличие от тепловых двигателей они пространственно и функционально совмещены (см. также [37]).

Эффективность рассмотрения открытой системы, исходящего из функции диссипации, т. е. из скорости продукции энтропии, по-видимому, недостаточна для биологии. Энтропия — принципиально усредненная статистическая величина — дает лишь весьма ограниченную характеристику биологической системы. Это, конечно, никак не противоречит описанным выше возможностям применения неравновесной термодинамики в биологии. Ее применения ограничиваются, однако, некоторыми общими феноменологическими положениями и трактовкой «немашинных» процессов. Применительно к регуляторным явлениям и к процессам развития термодинамика может лишь констатировать наличие неустойчивостей, наличие множественных стационарных состояний в нелинейной области. Функция диссипации утрачивает прямое эвристическое значение вдали от равновесия. Тем более это относится к машинной системе. Встречающиеся в литературе попытки модифицировать линейную термодинамику с целью описания процессов роста и дифференцировки (см., например, [45]) основаны на недоразумении и научного значения не имеют.

Понятие количества информации эквивалентно энтропии и, следовательно, является усредненной характеристикой статистической, а не динамической, системы. Соответственно теоретико-информационные подходы к трактовке биологических процессов, оперирующие лишь количеством информации, измеряемым в битах или в энтропийных единицах, недостаточно эффективны.

Моно утверждает, что основное отличие организма от кристалла состоит лишь в гораздо большем количестве информации в организме [46]. В свете сказанного очевидно, что это утверждение ошибочно. Кристалл — равновесная система, которая может быть и замкнутой, организм — неравновесная, открытая динамическая система, характеристика которой посредством энтропии или количества информации недостаточна.

Процессы создания, накопления, передачи, утраты, перекодировки и рецепции информации имеют фундаментальное значение в биологии, в онтогенезе и филогенезе. Обычная теория информации, оперирующая лишь понятием о ее количестве, не рассматривает природу возникновения информации. Тем более она не рассматривает содержание и ценность информации. Именно эти характеристики, в отличие от количества информации, могут оказаться существенными для трактовки биологического развития. Как бы мы ни определяли эти понятия, ясно, что они уже не имеют прямого отношения к термодинамике.

Аптер подчеркивает важность программирующего, инструктивного значения информации в биологических процессах. «В случае такой динамической системы, как работающая вычислительная машина, язык инструкций или команд является

более подходящим, чем язык теории информации». И далее: «Вместо того, чтобы пытаться применить к описанию развития понятие количества информации в организме в данный момент времени, ... надо искать соответствующий причинный ряд событий. Чтобы понять динамику этих событий, надо искать подходящие термины и модели» [47].

Поставим в связи со сказанным вопрос о том, как можно определить содержание информации и является ли этот термин подходящим для биологии.

Вводя понятие содержания или ценности информации, мы делаем попытку сохранить связь проводимого рассмотрения с теорией информации, с термодинамикой, поскольку применяется термин «информация». А *rigor* неясно, может ли такая попытка увенчаться успехом. Молекула ДНК содержит определенное количество информации, исчисляемое в битах, как и любой текст, но смысл слова «информация» во фразе «ДНК несет информацию о белках» не имеет прямого отношения к количеству информации в битах [47]. Ценность (содержание, смысл) информации может быть определена лишь применительно к воспринимающей информацию системе. Тем самым, ценность информации зависит от свойств этой системы, в частности, от уровня рецепции. Теория информации, учитывающая ее ценность, не построена и пока не ясно, может ли она быть построена. Однако целый ряд содержательных идей можно сформулировать (см. §§ 9.7, 9.8, а также [48, 63]). Вместе с тем удастся провести строгое рассмотрение ценности информации в специальных условиях. Такой анализ выполнен Бонгардом [49]. Бонгард вводит понятие полезной информации и определяет ее меру, т. е. меру полезности сообщения для рецептора. Рассматривается модельная система, «которая при решении задачи ведет экспериментальную работу (метод проб и ошибок) и таким образом извлекает некоторые сведения, которых она вначале не имела». Вводится мера трудности решения задачи, выражаемая логарифмом среднего числа проб.

Полезная информация по Бонгарду характеризует ценность информации в ситуациях, определяемых наличием проб и ошибок. Эти ситуации свойственны биологическим системам на молекулярном уровне — процессы узнавания и отбора молекулярных структур осуществляются именно посредством проб и ошибок, возникающих вследствие теплового движения. Динамическая узнающая система биосинтеза белка функционирует в статистическом окружении, перерабатывая его в динамически детерминированные структуры. Это позволило Либерману сформулировать гипотезу, трактующую клетку как «молекулярную вычислительную машину» [50]. Другие определения ценности информации, близкие к приведенному, даны в [61, 62].

В общем случае работа динамической биологической системы означает реализацию инструктивного, программирующего значения информации, содержащейся в конечном счете в биологических макромолекулах нуклеиновых кислот и белков. Модельное описание такой системы действительно требует понятия ценности информации как инструктирующего фактора. Такое понятие, вообще говоря, не может быть универсальным. Оно должно выражаться в строгих физико-математических терминах применительно к конкретным биологическим процессам. Первая попытка описать процесс развития (пребиологическую эволюцию макромолекул) с помощью понятия ценности информации принадлежит Эйгену [51]. Эйген вводит понятие «селективной ценности», характеризующей кинетику матричного синтеза биологических макромолекул. Изложение этой теории и некоторых других вопросов, связанных с понятием ценности информации в биологии, дано в гл. 9 (см. также [63]).

Итак, мы приходим к следующим общим выводам.

Живые организмы являются открытыми системами, соответственно они феноменологически описываются неравновесной термодинамикой.

Линейная термодинамика объясняет реализуемое в организмах сопряжение кинетических процессов и существование неравновесных стационарных состояний.

Процессы развития организмов, а также периодические биологические процессы имеют нелинейный характер. Соответственно они не могут рассматриваться на основе линейной термодинамики. Содержание нелинейной термодинамики сводится к нахождению общих условий устойчивости и неустойчивости состояний, далеких от равновесия.

Функция диссипации утрачивает прямое эвристическое значение в нелинейной области. Трактровка нелинейных процессов выходит за рамки термодинамики.

Количество информации эквивалентно энтропии. Соответственно теория информации, оперирующая только понятием об ее количестве, имеет ограниченное эвристическое значение в биологии.

Биологические процессы и, прежде всего, процессы развития имеют динамический, а не статистический характер. Биологические системы являются химическими машинами и должны описываться соответствующим образом. Наряду с количеством информации необходимо учитывать ее ценность.