

1997

Letnik 44

2

OBZORNIK ZA MATEMATIKO IN FIZIKO



OBZORNIK ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

LJUBLJANA, MAREC 1997

letnik 44, številka 2, strani 33–64

Glasilo Društva matematikov, fizikov in astronomov Slovenije, 1001 Ljubljana, Jadranska c. 19, p.p. 2964, telefonska št. (061) 17-66-553, žiro račun 50106-678-47233, devizna nakazila SKB banka d.d. Ljubljana, val-27621-42961/9, Ajdovščina 4, Ljubljana.

Uredniški odbor: Bojan Magajna (glavni urednik), Boris Lavrič (urednik za matematiko in odgovorni urednik), Martin Čopič (urednik za fiziko), Boštjan Jaklič (tehnični urednik).

Jezikovno pregledal Janez Juvan, računalniško oblikoval Martin Zemljič.

Člani društva prejemajo Obzornik brezplačno. Celoletna članarina 2.500 SIT. Naročnina v knjigarnah in za ustanove 5.000 SIT, za študente 1.250 SIT, za tujino 50 DEM. Posamezna številka za člane 480 SIT, stare številke 320 SIT.

Tisk: Tiskarna KURIR. Naklada 1500 izvodov.

Revijo sofinancirata Ministrstvo za znanost in tehnologijo ter Ministrstvo za šolstvo in šport.

Po mnenju MZT št. 415-52/92 z dne 5.2.1992 šteje revija med proizvode iz 13. točke tarifne št. 3 zakona o prometnem davku, za katere se plačuje 5% davek od prometa proizvodov.

DMFA je včlanjeno v Evropsko matematično društvo (EMS), v Mednarodno matematično unijo (IMU), v Evropsko fizikalno društvo (EPS) in v Mednarodno združenje za čisto in uporabno fiziko (IUPAP). DMFA ima pogodbo o recipročnosti z Ameriškim matematičnim društvom (AMS).

© 1997 DMFA Slovenije – 1310

Poštšina plačana na pošti 1102 Ljubljana

VSEBINA — CONTENTS

Članki — Articles

Str.—Page

Topološki indeksi v kemijski teoriji grafov — Topological indices in chemical graph theory (Janez Žerovnik) 33–39

Binarna zaporedja, prepogibanje papirja in statistična fizika — Binary sequences, paper-folding and statistical physics (Milan Hladnik) 40–51

Ali lahko zaupamo entropijskemu zakonu? — Can the entropy law be trusted? (Ivan Kuščer) 52–64

Nove knjige — New books (Anton Suhadolc) IV

Vesti — News

Seminar za učitelje in profesorje fizike (T. Prosen in S. Žumer) 51
Gospa Marta Klopčič (Niko Prijatelj) III

Na ovitku: H. Matisse, *Rožnordeče čebule*, 1906.

TOPOLOŠKI INDEKSI V KEMIJSKI TEORIJ GRAFOV

JANEZ ŽEROVNIK

Math. Subj. Class. (1991) 05C90

V članku predstavimo Wienerjevo število, enega najbolj znanih topoloških indeksov v kemijski teoriji grafov.

TOPOLOGICAL INDICES IN CHEMICAL GRAPH THEORY

The Wiener number, one of the best known topological indices in chemical graph theory, is introduced.

1. Uvod

Kemikom je doslej uspelo sintetizirati na milijone različnih molekul. Skupaj z njihovimi ugotovljenimi lastnostmi je to ogromna količina znanja. Že vprašanje, kako naj bodo ti podatki shranjeni in organizirani, da jih bo mogoče čim bolje izkoristiti, je zelo zanimivo. Nas pa tokrat zanima, ali in kako je mogoče to znanje uporabiti za napoved lastnosti novih molekul, ki še nikoli niso bile sintetizirane? Razlogov za tako vprašanje je več, morda sta najpomembnejša naslednja dva. Teoretično je različnih možnih molekul seveda poljubno veliko. Tudi če postavimo mejo na število atomov v molekuli, dobimo ogromno molekul, saj raste število različnih molekul izredno hitro¹. Če število kandidatov ne bi bilo preveliko, postane pomemben strošek sinteze nove molekule, v tekmi med (na primer) proizvajalci zdravil pa je zelo pomemben tudi čas.

Fizikalni modeli molekul (glej npr. [1]) lahko dobro napovedo lastnosti molekule, vendar so taki izračuni običajno izredno zahtevni, predvsem pa zanje potrebujemo ogromno časa.

Ali je mogoče s preprostim računom napovedati lastnosti molekule, še preden je sintetizirana? To bi bilo preveč enostavno. Morda pa je to mogoče vsaj za kakšno od lastnosti, in to s precejšnjo zanesljivostjo? Izkazalo se je, da je mogoče s pomočjo teorije grafov v mnogih primerih na ti vprašanji odgovoriti pritrdilno.

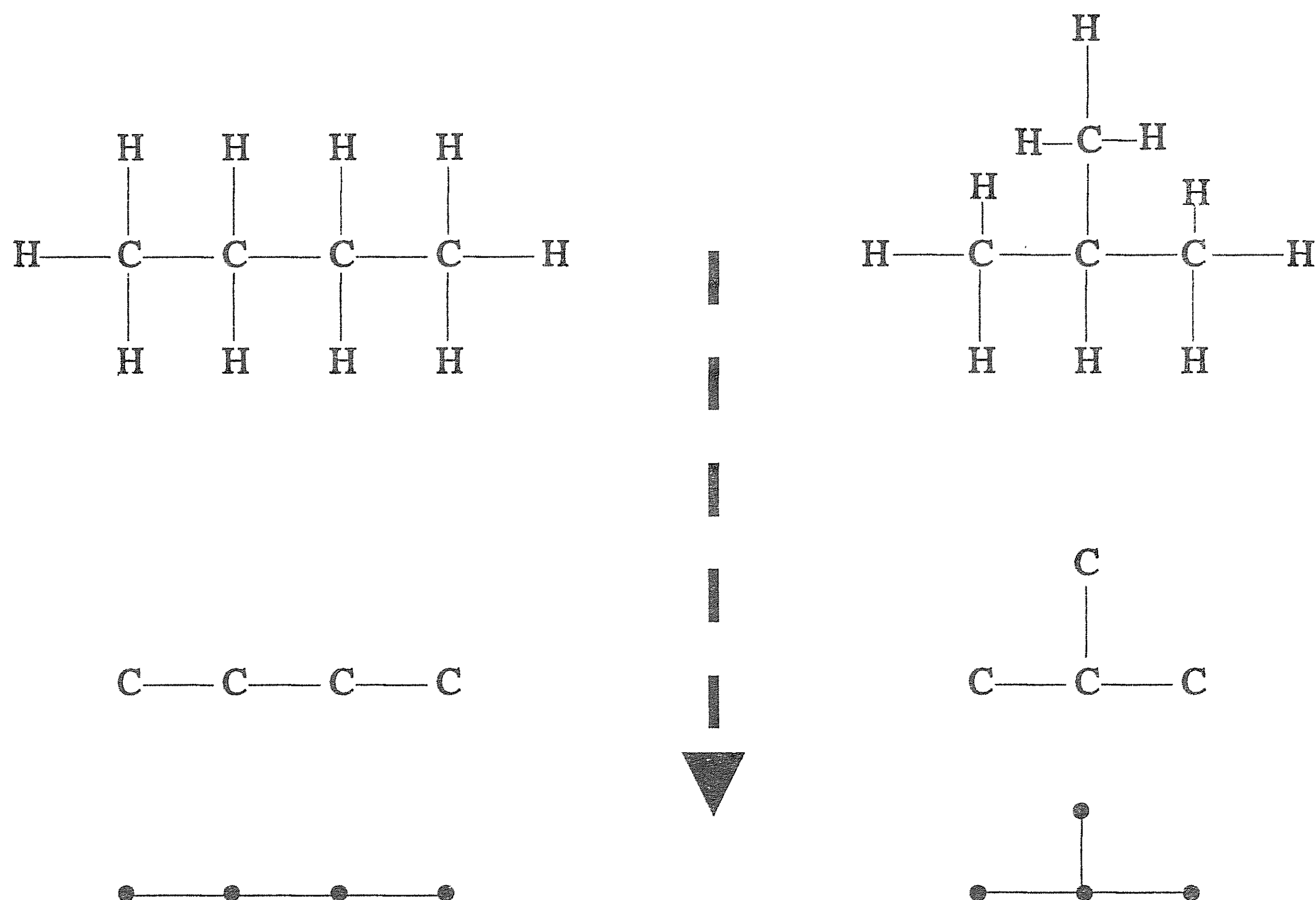
2. Topološki indeksi molekulskih grafov

V naravi je molekula tridimenzionalni objekt, v nekoliko poenostavljenem jeziku lahko rečemo, da jo sestavljajo atomi, ki so lahko različnih „tipov“, in kemijske vezi med njimi.

Kemijski graf molekule je poenostavljena kombinatorična predstavitev molekule. Atomi so točke grafa, vezi pa povezave grafa. V molekuli

¹ Arthur Cayley je leta 1875 rešil problem preštevanja dreves prav zaradi vprašanja štetja števila izomer v kemiji. Število alkanov (ogljikovodikov s samimi enojnimi vezmi med atomi) na primer z rastočim številom atomov ogljika raste takole: 1, 1, 1, 2, 3, 5, 9, 18, 35, 75, 159, 355, 802, 1858 in 4347 (pri $n = 15$) [7].

metana, na primer, ležijo štirje vodikovi atomi v ogljčkih tetraedra, ogljikov atom pa v središču. Graf, ki ga dobimo, ima eno točko stopnje štiri in štiri točke stopnje ena. Pri tem, ko iz molekule naredimo graf, zavestno zanemarimo informacije, kot so na primer koti med povezavami, položaj atomov, in podobno. Če imamo v molekuli različne atome in različne tipe povezav, včasih točke in povezave opremimo z „utežmi“. Vsaj v primeru, ko študiramo ogljikovodike, pa se izkaže, da pogosto zadošča, če študiramo samo skelet molekule, ki je sestavljen iz ogljikovih atomov, torej enostaven graf brez uteži.



Slika 1. Od ogljikovodika do grafa. Dve izomeri pri $n = 4$.

Topološki indeks je funkcija, ki molekelskemu grafu priredi število. V matematiki topološkim indeksom pravimo *grafovske invariante*. V kemiji je znanih prek 120 topoloških indeksov [5], njihovo število pa še vedno narašča. V nekaterih primerih se splača uporabiti primerno kombinacijo različnih indeksov.

Večina indeksov temelji na povezanosti in na razdaljah v grafu. Eden prvih in verjetno najbolj znan na razdaljah grafa temelječi topološki indeks je *Wienerjev indeks* ali *Wienerjevo število*. Leta 1947 je Henry Wiener opazil zelo dobro korelacijo med vreliščem alkanov² in nekim številom, ki ga je dobil s preprostim računom iz grafa molekule. V nadaljevanju si bomo ta indeks nekoliko pobliže ogledali.

Preprostejše indekse, kot je na primer število atomov molekule, so kemiki uporabljali že prej, široko uporabnost Wienerjevega števila in drugih indeksov pa so zares opazili in začeli uporabljati šele konec sedemdesetih let. V zadnjih letih so mnogi raziskovalci preizkusili številne druge indekse, s katerimi napovedujejo različne lastnosti na raznih tipih molekul. Nekaj

² Wiener jih z zdaj nekoliko zastarelo terminologijo imenuje „parafini“.

jih je predstavljenih v poljudnem članku [4], še več pa (na primer) v knjigi [5]. Na to temo je bilo v preteklih letih objavljenih ogromno znanstvenih člankov. Tema pa očitno še ni izčrpana³.

3. Wienerjevo število

Definirajmo najprej Wienerjevo število za drevesa, podobno kot je v originalnem delu naredil Wiener [6].

Drevo je povezan graf brez ciklov. Če izberemo katero koli povezavo drevesa in jo odstranimo, dobimo dve povezani komponenti. Definirajmo utež povezave $e = uv$ z

$$w(e) = n_{e,u}n_{e,v},$$

kjer smo z $n_{e,x}$ označili število točk v povezani komponenti, v kateri je točka x .

Ker v drevesu vsak par točk povezuje natanko ena najkrajša pot, lahko pomen uteži opišemo tudi takole: $w(e)$ je ravno število najkrajših poti v drevesu, na katerih leži povezava e .

Wienerjevo število je vsota uteži vseh povezav drevesa:

$$W(T) = \sum_{e \in E(T)} w(e).$$

Wiener je študiral vrelišča alkanov in opazil izredno dobro korelacijo med izmerjenimi vrelišči in tem številom. Pokazal je tudi zvezo z drugimi fizikalnimi lastnostmi alkanov, na primer z volumnom molekule, izparilno toploto in drugimi.

Ker niti vse molekule, kaj šele vsi grafi, niso drevesa, se je naravno vprašati, kako se da smiselno posplošiti definicijo Wienerjevega števila na poljubne grafe. Hosoya je prvi opazil, da na drevesih velja

$$W(T) = \frac{1}{2} \sum_{u \in V(T)} \sum_{v \in V(T)} d(u, v),$$

kjer je $d(u, v)$ razdalja med točkama u in v .

Dokažimo!

Najprej je

$$\sum_{u \in V(T)} \sum_{v \in V(T)} d(u, v) = 2 \sum_{\{u, v\}} d(u, v),$$

³ Ob petdeseti obletnici odkritja Wienerjevega indeksa (1997) bosta izšli posebni številki revij Discrete Applied Mathematics in Communications in Mathematical and Computer Chemistry (MATCH) 35 (1997), ki ju urejajo Ivan Gutman, Sandi Klavžar in Bojan Mohar.

kjer vsota na desni strani teče po vseh (neurejenih) parih točk $u, v \in V(T)$. Na levi smo vsak tak par $u \neq v$ šteli natanko dvakrat, vse razdalje $d(u, u)$ pa so seveda enake 0.

Veljavnost enakosti

$$\sum_{\{u,v\}} d(u, v) = \sum_e w(e)$$

pa preverimo tako, da na dva načina preštejemo povezave na vseh najkrajših poteh in se spomnimo pomena uteži $w(e)$. Torej je res

$$\frac{1}{2} \sum_{u \in V(T)} \sum_{v \in V(T)} d(u, v) = \sum_e w(e).$$

Wienerjevo število je torej vsota vseh razdalj v drevesu. Zato je bilo Wienerjevo število na poljubnem povezanem grafu definirano kot vsota vseh razdalj grafa:

$$W(G) := \frac{1}{2} \sum_{u \in V(G)} \sum_{v \in V(G)} d(u, v).$$

Potem ko poznamo Hosoyevo posplošitev Wienerjevega števila na poljubne grafe, lahko pogledamo, kako bi bilo treba posplošiti definicijo uteži na povezavah, da bi dobili Wienerjevo število na poljubnem grafu.

Naredimo takole: če je med točkama a in b več najkrajših poti (označimo to število najkrajših poti z $n_{a,b}$), potem naj par a, b prispeva k utežem povezav vsake od najkrajših poti po $1/n_{a,b}$. Skupaj torej par točk prispeva k utežem $d(a, b)$, tako kot prej. Ali pa

$$W(G) = \sum_{e \in E(G)} w(e) \quad (\star)$$

in

$$w(e) = \sum \frac{1}{n_{a,b}},$$

kjer seštevamo po vseh najkrajših poteh med točkama a in b , na katerih leži povezava e .

Pojasnimo definicijo na primeru grafa na sliki 2. Izračunajmo razdalje in število najkrajših poti v grafu in jih zapišimo v tabeli.

par točk	$\{v_1, v_2\}$	$\{v_1, v_3\}$	$\{v_1, v_4\}$	$\{v_1, v_5\}$	$\{v_2, v_3\}$
razdalja	1	2	3	2	1
število najkrajših poti	1	1	2	1	1
par točk	$\{v_2, v_4\}$	$\{v_2, v_5\}$	$\{v_3, v_4\}$	$\{v_3, v_5\}$	$\{v_4, v_5\}$
razdalja	2	1	1	2	1
število najkrajših poti	2	1	1	2	1

Zdaj pa izračunajmo še uteži povezav. Povezava $e_1 = v_1v_2$ ima utež

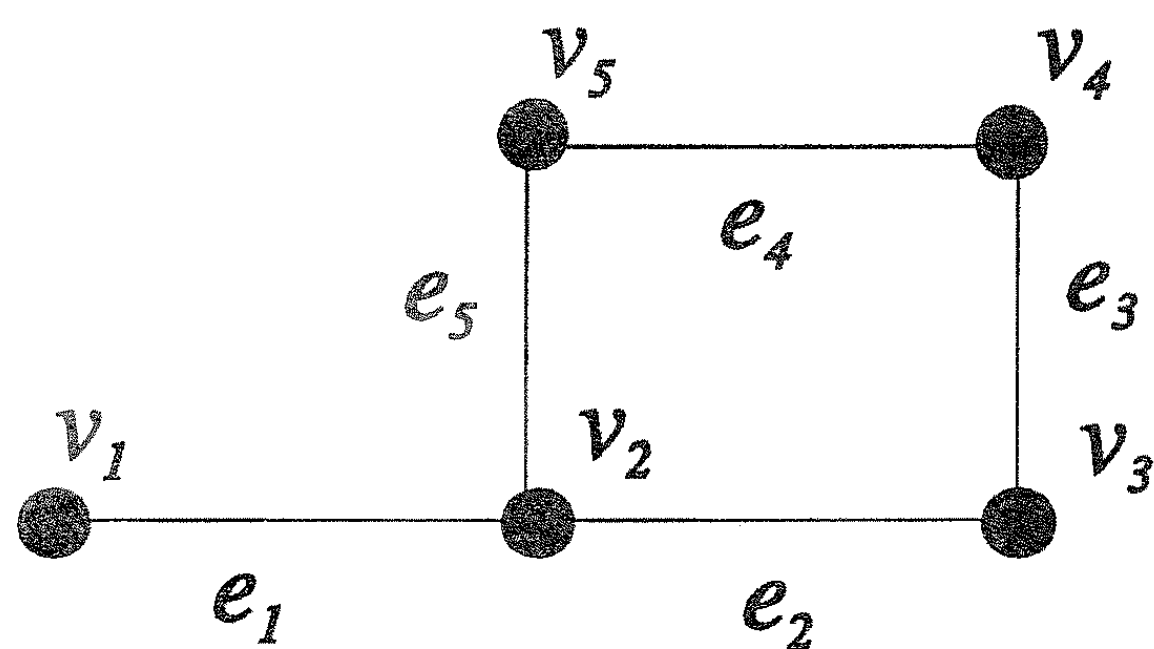
$$\begin{aligned} w(e_1) &= w(v_1v_2) = 1/n_{1,2} + 1/n_{1,3} + 2/n_{1,4} + 1/n_{1,5} = \\ &= 1 + 1 + 2\left(\frac{1}{2}\right) + 1 = 4. \end{aligned}$$

Podobno povezavi $e_2 = v_2v_3$ pripada utež

$$\begin{aligned} w(e_2) &= w(v_2v_3) = 1/n_{1,3} + 1/n_{1,4} + 1/n_{2,3} + 1/n_{2,4} + 1/n_{3,5} = \\ &= 1 + \frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 3.5. \end{aligned}$$

Povezavam $e_3 = v_3v_4$, $e_4 = v_4v_5$ in $e_5 = v_1v_5$ pripadajo uteži $\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} = 2.5$, $\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1 = 2.5$ in $\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} = 3.5$.

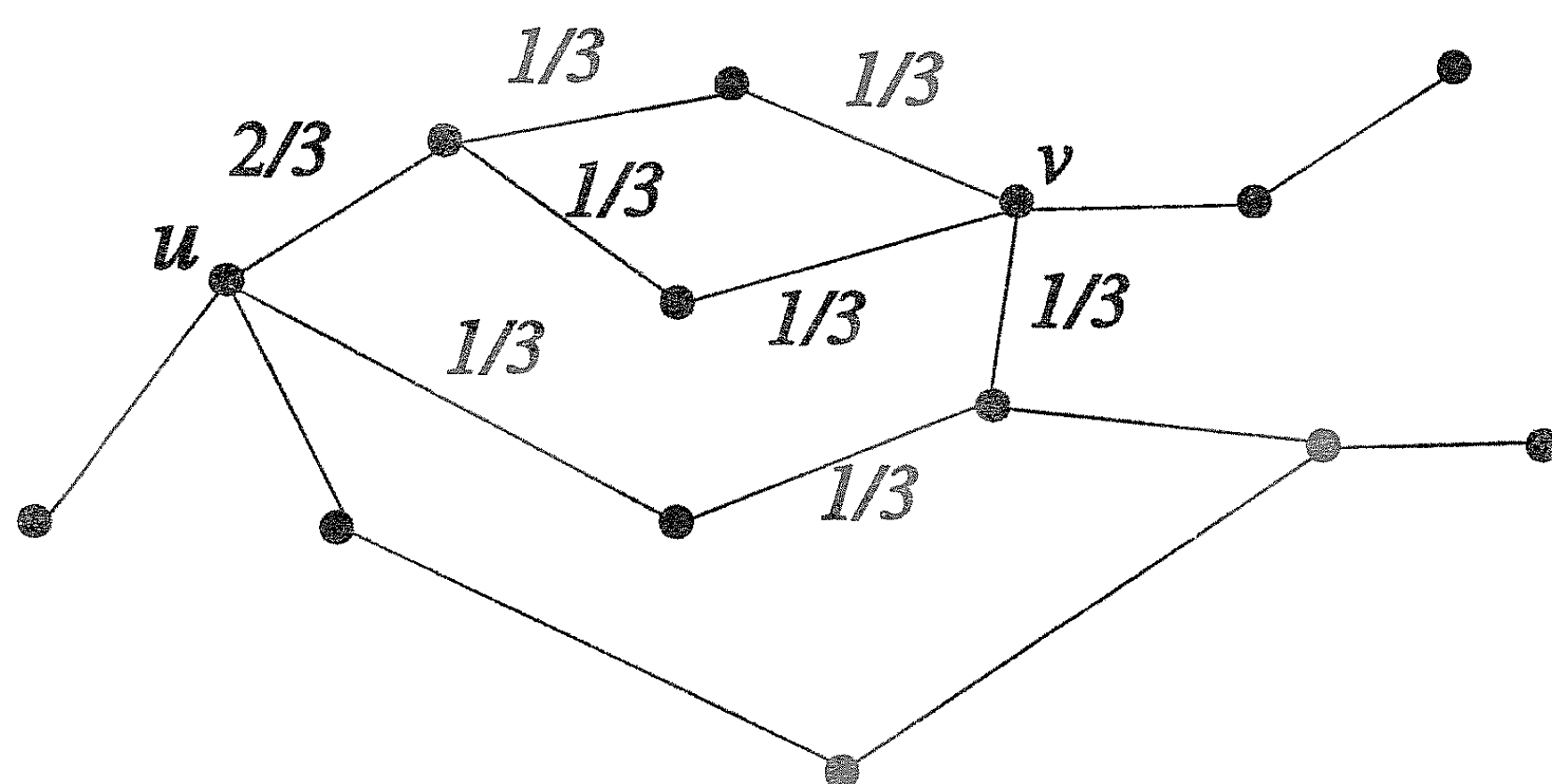
Če izračunamo vsoto vseh razdalj v grafu iz prve tabele in vsoto vseh uteži, obakrat dobimo 16, Wienerjevo število grafa.



Slika 2.

Namesto dokaza trditve ($\star$), ki ni zahteven, si raje oglejmo še eno interpretacijo Wienerjevega števila in uteži na grafu. Mislimo si, da naš graf predstavlja mesta, povezave pa ceste med njimi. Recimo, da je promet med vsakim parom točk enak. Če je graf drevo, potem uteži $w(e)$ na povezavah preštejejo promet, uteži torej povedo, koliko je katera od povezav obremenjena. Kaj pa če graf ni drevo? Potem si mislimo, da se bo promet enakomerno razdelil na vse najkrajše poti, kadarkoli jih je na razpolago več. In spet uteži $w(e)$ merijo obremenjenost povezav.

Primer: Med točkama u in v grafa na sliki 3 so tri najkrajše poti, zato se promet razdeli na tretjine.



Slika 3. Prispevek para točk u in v k utežem na povezavah.

4. Računanje Wienerjevega števila

Wienerjevo število poljubnega grafa lahko izračunamo tako, da seštejemo vse elemente v zgornjem trikotniku matrike razdalj grafa. Matriko razdalj grafa dobimo na primer tako, da izračunamo razdalje od vsake točke do drugih točk z znanim algoritmom iskanja v širino (glej na primer [2]).

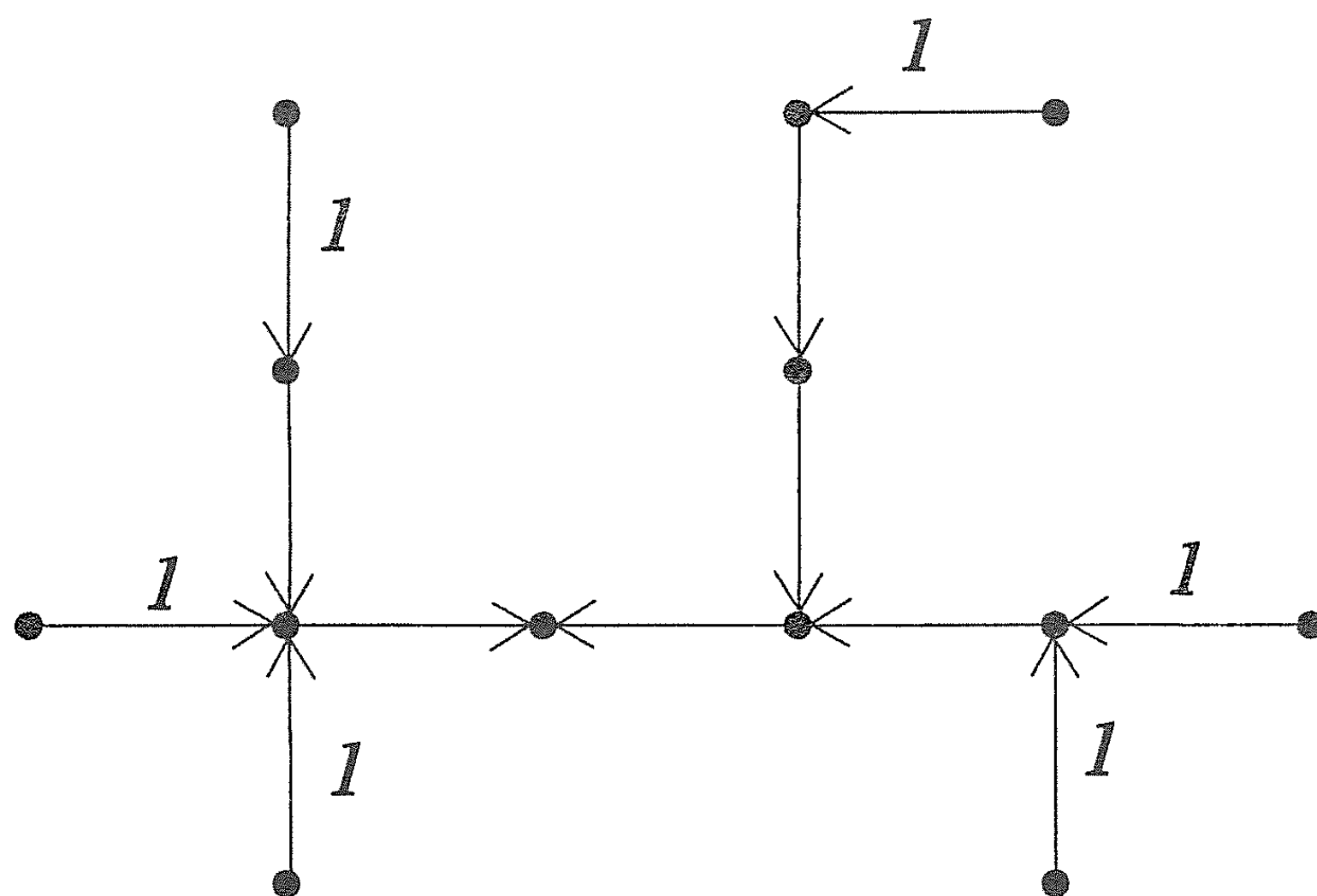
Časovna zahtevnost te metode je $O(mn)$, kjer n pomeni število točk, m pa število povezav grafa.

Na drevesih pa je mogoče Wienerjevo število izračunati še hitreje, v času reda $O(n)$, z elegantnim algoritmom Moharja in Pisanskega [3], ki je izboljšana in poenostavljena verzija algoritma Canfielda, Robinsona in Rouvraya.

- (1) Najprej drevo zapišemo kot usmerjeno drevo s korenom. Predpostavimo, da je drevo dano v obliki vektorja T_i , $i = 1, 2, \dots, n-1$, kjer $T_i = j$ pomeni, da je j oče i -ja. Take predstavitve drevesa ni težko dobiti. Izberemo poljubno točko za koren (ta nima nobenega očeta), imenujmo jo v . Vsi sosedi točke v so sinovi, torej postavimo $T_x = v$, kazalec iz x nazaj k v . Podobno sinovi sinov pokažejo na svoje očete, in tako dalje.
- (2) Za vsako točko izračunamo število sinov, torej število puščic, ki kažejo nanjo. (To lahko storimo kar sproti, ko zapisujemo vektor T .)
- (3) Postavimo vse liste drevesa v čakalno vrsto.
- (4) Vzamemo točko iz čakalne vrste. Zbrišemo ta list drevesa (oz. povezavo do njega) in izračunamo $w(e)$ (kot je to opisano spodaj). Novi list, če se je pojavil, vstavimo v vrsto. Ponavljamo, dokler vrsta ni prazna.
- (5) Seštejemo vse uteži povezav $w(e)$.

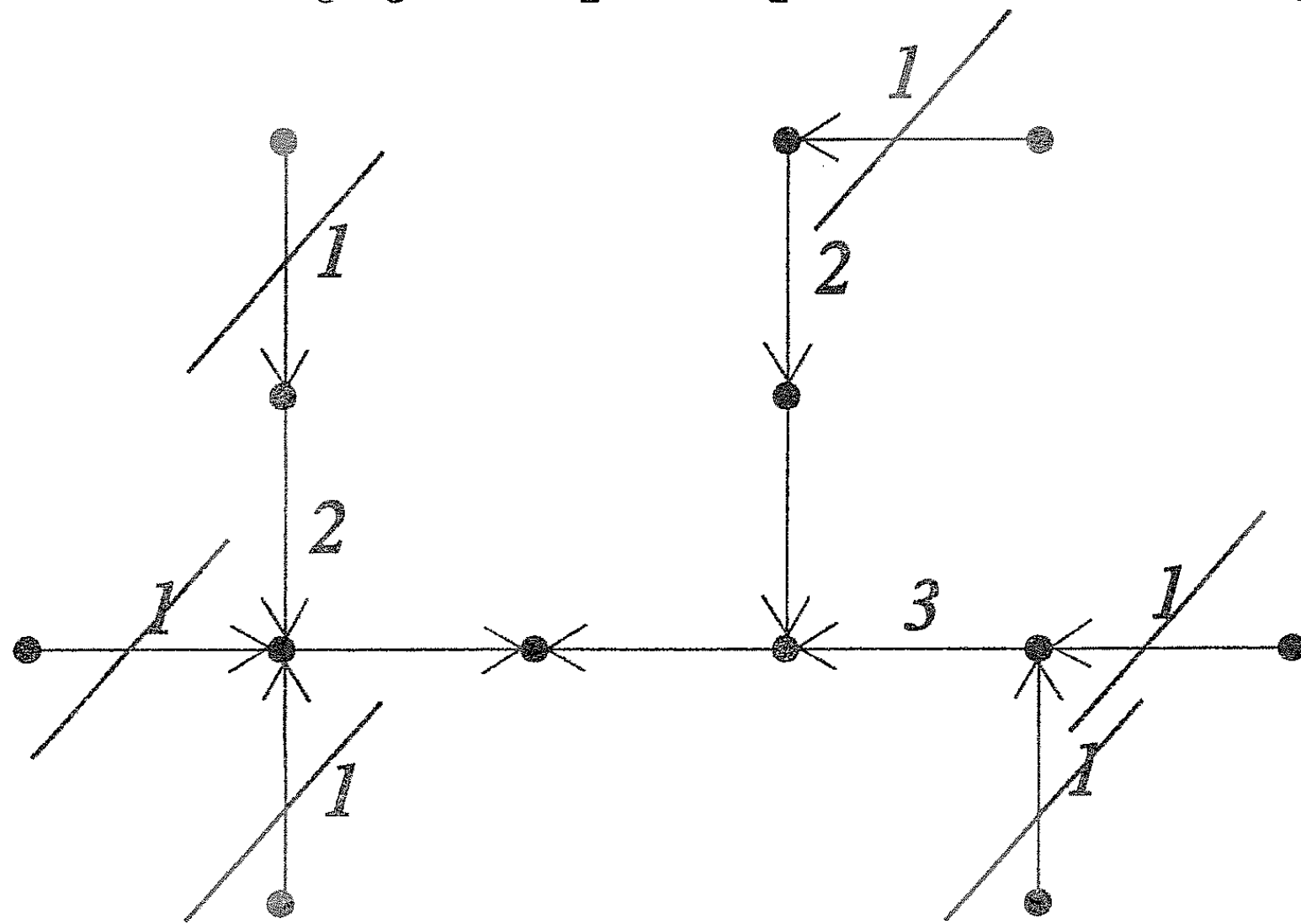
Za konec še primer. Izračunajmo Wienerjevo število za graf na sliki 4. Na povezave bomo zapisovali število točk v tisti „polovici“ drevesa, ki smo ga že zbrisali. Označimo to število s $t(e)$. Iz tega zapisa preberemo utež povezave, $w(e) = t(e)(n - t(e))$. Nadalje t za usmerjeno povezavo $e = uv$, ki je prišla na vrsto za brisanje, dobimo tako, da seštejemo t -je povezav xu in prištejemo 1.

Drevo na sliki 4 smo že usmerili in z utežmi $t = 1$ (v katerem koli vrstnem redu) označili povezave, ki vodijo iz listov.



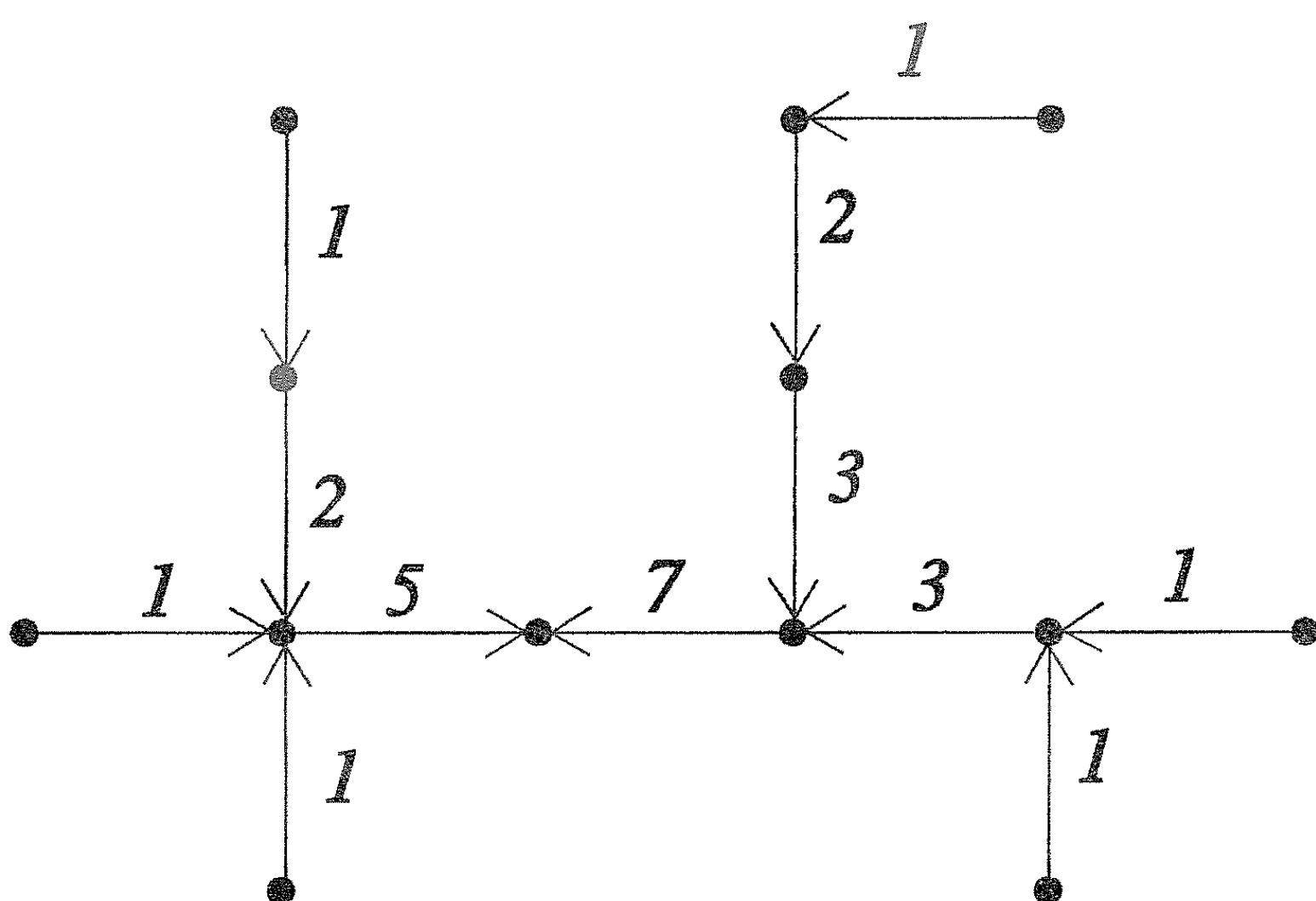
Slika 4. Računanje Wienerjevega indeksa drevesa. Prvi korak.

Liste zberemo in nadaljujemo postopek z listi novega drevesa (slika 5):



Slika 5. Računanje Wienerjevega indeksa drevesa. Nadaljevanje.

Na koncu dobimo uteži (slika 6):



Slika 6. Računanje Wienerjevega indeksa drevesa. Dobljene uteži.

Wienerjevo število je torej enako $W(T) = \sum_e t(e)(n - t(e)) = 6 \times 1(13 - 1) + 2 \times 2(13 - 2) + 2 \times 3(13 - 3) + 1 \times 5(13 - 5) + 1 \times 7(13 - 7) = 258$.

LITERATURA

- [1] J. Koller, *Struktura atomov in molekul*, DZS, Ljubljana 1992.
- [2] J. Kozak, *Podatkovne strukture in algoritmi*, DMFA, Ljubljana 1986.
- [3] B. Mohar, T. Pisanski, *How to Compute the Wiener Index of a Graph*, Journal of Mathematical Chemistry **2** (1988) 267–277.
- [4] D. Rouvray, Predicting Chemistry from Topology, *Scientific American* no. 9 **254** (1986) 40–47.
- [5] N. Trinajstić, *Chemical Graph Theory*, second edition, CRC Press, Boca Raton FL 1992.
- [6] H. Wiener, *Correlation of Heats of Isomerization, and Differences in Heats of Vaporization of Isomers, Among the Paraffin Hydrocarbons*, Journal of the American Chemical Society **69** (1947) 2636–2638.
- [7] R. Wilson, J. Watkins, *Graphs, An Introductory Approach*, John Wiley and Sons, New York 1989.

Članek temelji na predavanju z 48. občnega zbora DMFA, ki je bil v Postojni 11. in 12. oktobra 1996.

BINARNA ZAPOREDJA, PREPOGIBANJE PAPIRJA IN STATISTIČNA FIZIKA

MILAN HLADNIK

Math. Subj. Class. (1991) 11B83, 82B20

V članku definiramo Rudin-Shapirovo in prepogibno zaporedje, pojasnimo nekatere njune aritmetične in geometrijske lastnosti ter ju povežemo z enorazsežnim Isingovim modelom iz statistične fizike.

BINARY SEQUENCES, PAPER-FOLDING AND STATISTICAL PHYSICS

In the article we define Rudin-Shapiro and paper-folding sequences and explain some of their arithmetical and geometrical properties. Both sequences are then related to the one-dimensional Ising's model from statistical physics.

1. Zaporedja

Dvojiški zapis naravnih števil dobro poznamo. Naravno število $n \geq 0$ razvijemo po potencah števila 2 v vrsto

$$n = \sum_{k=0}^{\infty} e_k(n) 2^k,$$

pri čemer so števke $e_k(n) \in \{0, 1\}$. Vrsta je seveda končna in število n običajno zapišemo z dvojiškimi števki v padajočem redu, začnši z največjo potenco števila 2, ki ne presega števila n . V tem sestavku se raje odločimo za dvojiško predstavitev naravnega števila n z neskončnim zaporedjem štev $(e_k(n))_{k \geq 0}$. Tako pripada številu 0 zaporedje samih ničel, številu 1 zaporedje $(1, 0, 0, \dots)$, številu 2 zaporedje $(0, 1, 0, \dots)$ itd.

Iz zaporedja zaporedij $((e_k(n))_{k \geq 0})_{n \geq 0}$ napravimo dve novi zaporedji: za vsak $n \geq 0$ definirajmo

$$s(n) = \sum_{k=0}^{\infty} e_k(n) \quad \text{in} \quad t(n) = \sum_{k=0}^{\infty} e_k(n) e_{k+1}(n).$$

Torej pomeni $s(n)$ število enk v dvojiškem zapisu števila n , tako da zaporedje s zavzame po vrsti naslednje vrednosti: $0, 1, 1, 2, 1, 2, 2, 3, 1, \dots$. Prav tako hitro spoznamo, da $t(n)$ v resnici šteje zaporedne pare enk v dvojiškem zapisu števila n . Torej je t zaporedje: $0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 2, 0, \dots$

Če postavimo $r(n) = (-1)^{t(n)}$, dobimo zaporedje, ki se začne z

$$1 \mid 1 \mid 1 - 1 \mid 1 \, 1 - 1 \, 1 \mid 1 \, 1 \, 1 - 1 - 1 - 1 \, 1 - 1 \mid \dots$$

(Zaradi lažjega prepoznavanja strukture smo skupine členov ločili z navpično črtico.) Bralec naj se sam prepriča, da dobimo naslednjih 16 členov tako,

da ponovimo prvih osem dosedanjih členov, zadnjim osmim pa spremenimo predznak. Zgodba se seveda potem kar naprej ponavlja.

To je znamenito *Rudin-Shapirovo zaporedje*, ki večkrat nastopa npr. v teoriji Fourierovih vrst. Običajno ga srečamo v zvezi z naraščanjem delnih vsot trigonometrijske vrste. Vsote $S_N(x) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n e^{inx}$ s poljubnimi koeficienti $c_n \in \{-1, 1\}$ imajo namreč zaradi ortogonalnosti funkcij e^{inx} na intervalu $[0, 2\pi]$ lastnost

$$\max_{0 \leq x \leq 2\pi} |S_N(x)| \geq \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |S_N(x)|^2 dx \right)^{1/2} = N^{1/2}.$$

Če pa je $c_n = r(n)$, torej ravno Rudin-Shapirovo zaporedje, velja tudi nasprotna ocena

$$\max_{0 \leq x \leq 2\pi} |S_N(x)| \leq \text{konst.} \cdot N^{1/2},$$

kar pomeni, da maksimalna vrednost delnih vsot ne narašča hitreje kot $\sqrt{N}$. To dejstvo je dostikrat ugodno.

Člene Rudin-Shapirovega zaporedja dobimo tudi kot koeficiente polinomov P_n , ki so rekurzivno definirani z naslednjimi formulami:

$$P_0 = 1, \quad Q_0 = 1,$$

$$P_{n+1} = P_n + X^{2^n} Q_n, \quad Q_{n+1} = P_n - X^{2^n} Q_n \quad \text{za } n \geq 0.$$

Zaporedje polinomov P_n se torej glasi: $P_0 = 1$, $P_1 = 1 + X$, $P_2 = 1 + X + X^2(1 - X) = 1 + X + X^2 - X^3$, $P_4 = 1 + X + X^2 - X^3 + X^4(1 + X - X^2 + X^4) = 1 + X + X^2 - X^3 + X^4 + X^5 - X^6 + X^7$ itd. Bralec gotovo opazi isto strukturo tvorbe novih členov polinoma kot prej pri zaporedju.

Izberimo $x \in \mathbb{R}$ in postavimo $X = e^{ix}$. Ker je sedaj $|X| = 1$, dobimo po paralelogramski enakosti $|P_n|^2 + |Q_n|^2 = 2(|P_{n-1}|^2 + |Q_{n-1}|^2) = \dots = 2^{n+1}$ in zato $|P_n| \leq 2^{(n+1)/2}$. Torej je $|S_{2^n}(x)| = |P_n(e^{ix})| \leq \sqrt{2}\sqrt{2^n}$. Vsako naravno število N pa lahko izrazimo kot vsoto nekaj potenc števila 2 (največja naj bo 2^n), zato dobimo $|S_N(x)| \leq \sqrt{2}\sqrt{2^n} + \dots + 1 = \sqrt{2}\sqrt{2^n}(1 + \dots + 1/\sqrt{2^n}) \leq 2(\sqrt{2} + 1)\sqrt{2^n} \leq 2(\sqrt{2} + 1)\sqrt{N}$. To je ti-sta ocena, ki smo jo omenili prej v zvezi z naraščanjem delnih vsot, kadar koeficienti sestavljajo Rudin-Shapirovo zaporedje.

Definirajmo sedaj še eno zanimivo zaporedje. Najprej naj bo za vsak $n \geq 0$

$$q(n) = 2s(n) - 2t(n) - e_0(n),$$

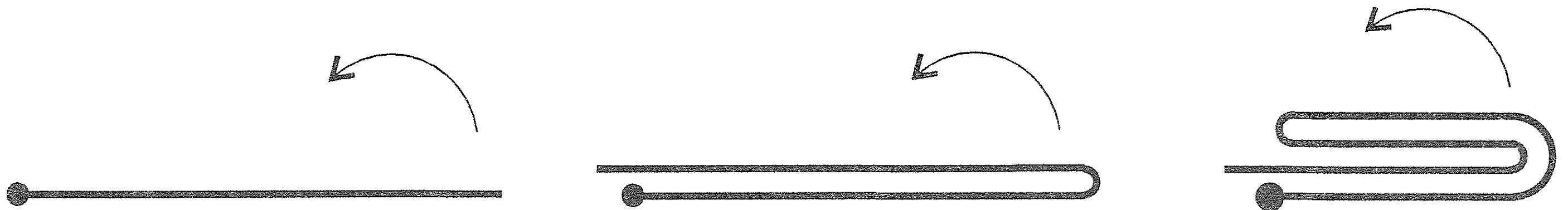
kjer sta s in t prejšnji zaporedji. Za majhne n dobimo naslednje vrednosti: 0, 1, 2, 1, 2, 3, 2, 1, 2, 3, 4, 3, ... Opazimo, da je $q(n)$ sodo število pri sodem in liho število pri lihem n . Za $n \geq 1$ definirajmo še

$$p(n) = q(n) - q(n-1).$$

Torej je $q(n) = \sum_{k=1}^n p(k)$ za $n \geq 1$. Zaporedje p ima začetek (podčrtali smo člene z indeksom, ki je potenca števila 2):

$$\underline{1} \underline{1} - 1 \underline{1} 1 - 1 - 1 \underline{1} 1 1 - 1 - 1 1 - 1 - 1 \underline{1} 1 1 \dots$$

Dobljeno zaporedje imenujmo *prepogibno zaporedje* in poimenovanje opravičimo s prepogibanjem dolgega papirnatega traku. Trak položimo na ravno podlago in ga večkrat zapored prepognemo v isto smer (glej sliko 1) ter nato spet razgrnemo.



Slika 1

Na mestih upogiba ostane vboklina ali izboklina. Če vboklini (upogibu navzgor) priredimo simbol $\vee$, izboklini (upogibu navzdol) pa simbol $\wedge$, moremo rezultat zaporednega prepogibanja traku prikazati z zaporedjem simbolov: $\vee \vee \wedge \vee \vee \wedge \wedge \dots$ Nadomestimo simbol $\vee$ z 1 in simbol $\wedge$ z -1 , pa dobimo naše prvotno zaporedje.

Podčrtana mesta določajo strukturo zaporedja. Če npr. s p_N označimo končno zaporedje prvih $2^N - 1$ členov zaporedja p , s $\tilde{p}_N$ pa isto zaporedje v obratnem vrstnem redu in z nasprotno predznačenimi členi, dobimo zaporedje p_{N+1} tako, da zaporedju p_N preprosto dodamo 1 in še zaporedje $\tilde{p}_N$. Drugače rečeno, za vsak $N \geq 1$ in $k = 1, 2, \dots, 2^N - 1$ velja $p(2^{N+1} - k) = -p(k)$ in $p(2^N) = 1$. Podobno lahko za zaporedje q ugotovimo zvezo $q(2^{N+1} - k) = q(k - 1) + 1$ za $N \geq 0$ in $k = 1, 2, \dots, 2^N$.

Zaporedje ima številne zanimive lastnosti. Npr. že sami sodi členi tvorijo enako prepogibno zaporedje, medtem ko so lihi izmenoma enaki 1 in -1 , kar ustreza izmeničnim upogibom traku navgor in navzdol. Torej dobimo prepogibno zaporedje tudi tako, da med že znane člene izmenično vstavljamo 1 in -1 :

$$\begin{array}{ccccccccccccccccccc} & & & & & & & & & & & & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & & & & & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & & & & & & & & & & 1 & -1 \\ & & & & & & & & & & & & & & & & & 1 & -1 \\ & & & & & & & & & & & & & & & & & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \end{array}$$

Na začetnih členih naj bralec sam preveri, da je zaporedje p tudi multiplikativno, se pravi, da za poljubni naravni števili $m, n \geq 1$ velja $p(mn) = p(m)p(n)$. Naj še omenimo, da prepogibno zaporedje p ni periodično. Realno število med 0 in 1, ki bi imelo za števke dvojiškega razvoja člene $(1 + p(n))/2$, je celo transcendentno [5].

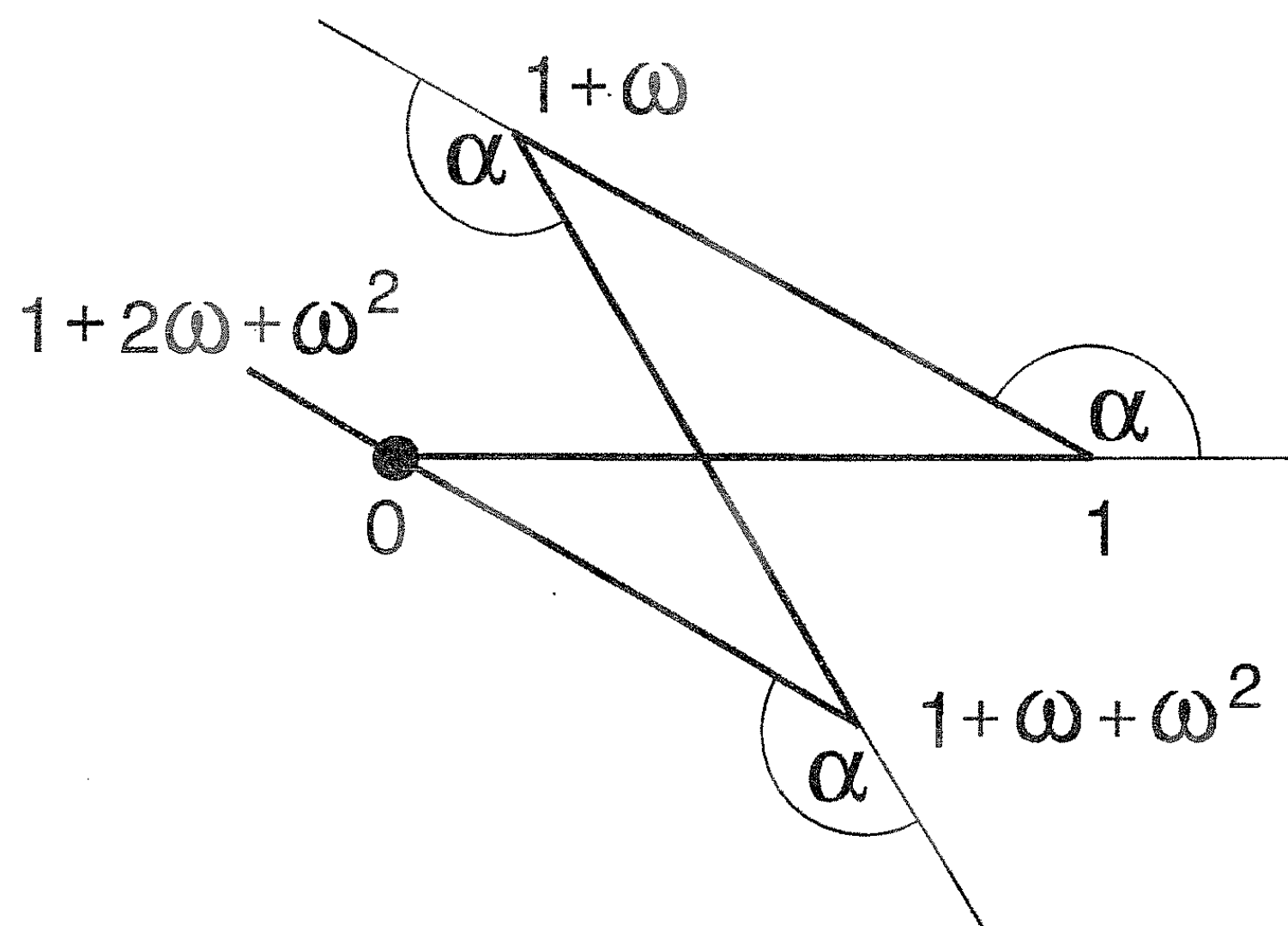
Opomba. Papir seveda lahko prepogibamo še na različne druge načine. Če ga npr. med upogibanjem vedno obrnemo, dobimo t.i. *alternativno prepogibno zaporedje* p' :

$$\underline{1} \quad - \underline{1} \quad - 1 \quad \underline{1} \quad 1 \quad 1 \quad - 1 \quad - \underline{1} \quad 1 \quad - 1 \quad - 1 \quad - 1 \quad 1 \quad 1 \quad - 1 \quad \underline{1} \quad 1 \quad - 1 \quad \dots$$

Potem se zaporedje q' , definirano s $q'(0) = 0$, $q'(n) = \sum_{k=1}^n p'(k)$ za $n \geq 1$, začne s členi: $0, 1, 0, -1, 0, 1, 2, 1, 0, 1, 0, -1, -2, -1, 0, -1, 0, 1, 0, \dots$. Lahko se prepričamo, da je v tem primeru $r(n) = i^{q'(2n)}$ spet Rudin-Shapirovo zaporedje.

2. Krivulje

Prepogibanju lahko damo še eno geometrijsko interpretacijo. Denimo, da v skladu s prepogibnim zaporedjem $1, 1, -1, 1, 1, -1, -1, \dots$ upogibamo neskončen poltrak v ekvidistančnih (npr. celoštevilskih) točkah za kot α v levo (če je $p(n) = 1$) oziroma v desno (če je $p(n) = -1$). Za rezultat dobimo neskončnokrat prelomljeno črto (slika 2), ki jo označimo z $\Gamma(\alpha)$, kjer je $0 \leq \alpha \leq \pi$.



Slika 2

Krivuljo opazujmo v kompleksni ravnini: njen začetek postavimo v koordinatno izhodišče, položaj m -tega oglišča (upogiba) pa označimo z $z(m, \alpha) = x(m, \alpha) + iy(m, \alpha)$. Potem je

$$z(m, \alpha) = e^{i\alpha q(0)} + e^{i\alpha q(1)} + \dots + e^{i\alpha q(m-1)},$$

kjer je q že znano zaporedje: $0, 1, 2, 1, 2, 3, 2, 1, 2, 3, 4, 3, \dots$. Označimo $\omega = e^{i\alpha}$, pa lahko zapišemo $z(m, \alpha)$ tudi v obliki

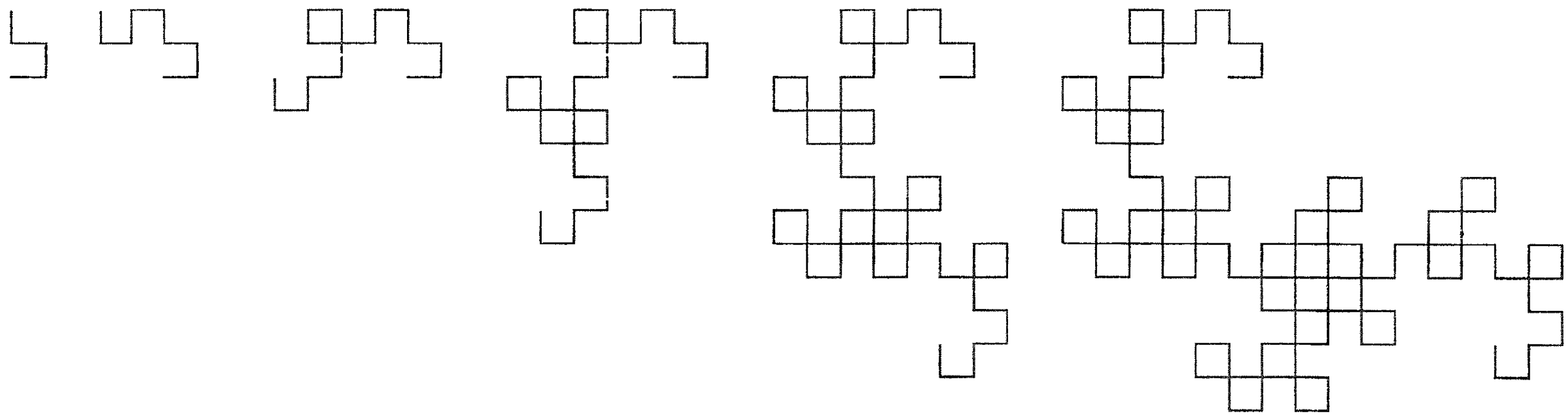
$$z(m, \alpha) = \omega^{q(0)} + \omega^{q(1)} + \dots + \omega^{q(m-1)}.$$

Torej je npr. $z(1, \alpha) = 1$, $z(2, \alpha) = 1 + \omega$, $z(3, \alpha) = 1 + \omega + \omega^2$, $z(4, \alpha) = 1 + 2\omega + \omega^2$ itd. (glej sliko 2).

Ker je prepogibno zaporedje neperiodično, nobena od krivulj $\Gamma(\alpha)$ ni sklenjena. Pri racionalnih vrednostih α/π ima sicer očitno le končno mnogo različnih naklonov, medtem ko pri iracionalnem α niti to ni res.

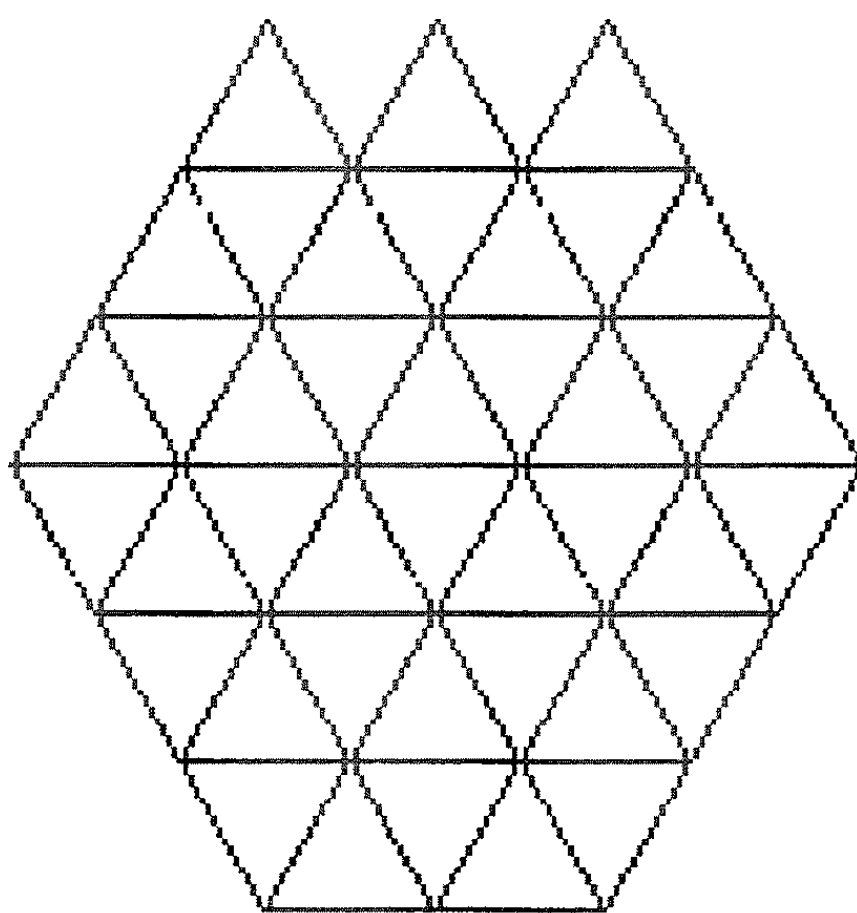
Oglejmo si razne možnosti:

Za $\alpha = 0$ je $\omega = 1$, poltrak ni prelomljen in za vsak $m \geq 0$ dobimo $z(m, 0) = m$. Za $\alpha = \pi$ dobimo $\omega = -1$ ter $z(m, \pi) = 1$, če je m sodo, in $z(m, \pi) = 0$, če je m liho število. Krivulja $\Gamma(\pi)$ je neskončnokrat ponovljena daljica $[0, 1]$. Druge vrednosti za α dajo bolj zanimive rezultate. Pri $\alpha = \pi/2$ dobimo znamenito *zmajnico* Davisa in Knutha [2] (slika 3).



Slika 3

Pri kotu $\alpha = 2\pi/3$ krivulja $\Gamma(\alpha)$ izriše mrežo, sestavljeno iz enakostraničnih trikotnikov (slika 4). Ta mreža pokrije vso ravnino, vendar je to težko dokazati (glej [2]).



Slika 4

Določimo oglišča $z(2^N, \alpha)$ za $N = 0, 1, 2, \dots$. Z matematično indukcijo zlahka ugotovimo, da je v splošnem $z(2^N, \alpha) = (1 + \omega)^N$. Videli smo namreč že, da za zaporedje q velja $q(2^{N+1} - k) = q(k - 1) + 1$ za vsak $N \geq 0$ in vsak $k = 1, 2, \dots, 2^N$. Torej je

$$\begin{aligned} z(2^{N+1}, \alpha) &= z(2^N, \alpha) + \omega^{q(2^N)} + \dots + \omega^{q(2^{N+1}-1)} = \\ &= z(2^N, \alpha) + \omega \left[\omega^{q(0)} + \dots + \omega^{q(2^N-1)} \right] \end{aligned}$$

oziroma

$$z(2^{N+1}, \alpha) = (1 + \omega)z(2^N, \alpha).$$

Od tod sledi zelena enakost. Če še upoštevamo, da je $1 + \omega = 1 + e^{i\alpha} = 2 \cos(\alpha/2) e^{i\alpha/2}$, dobimo za vsak $N \geq 0$ formulo

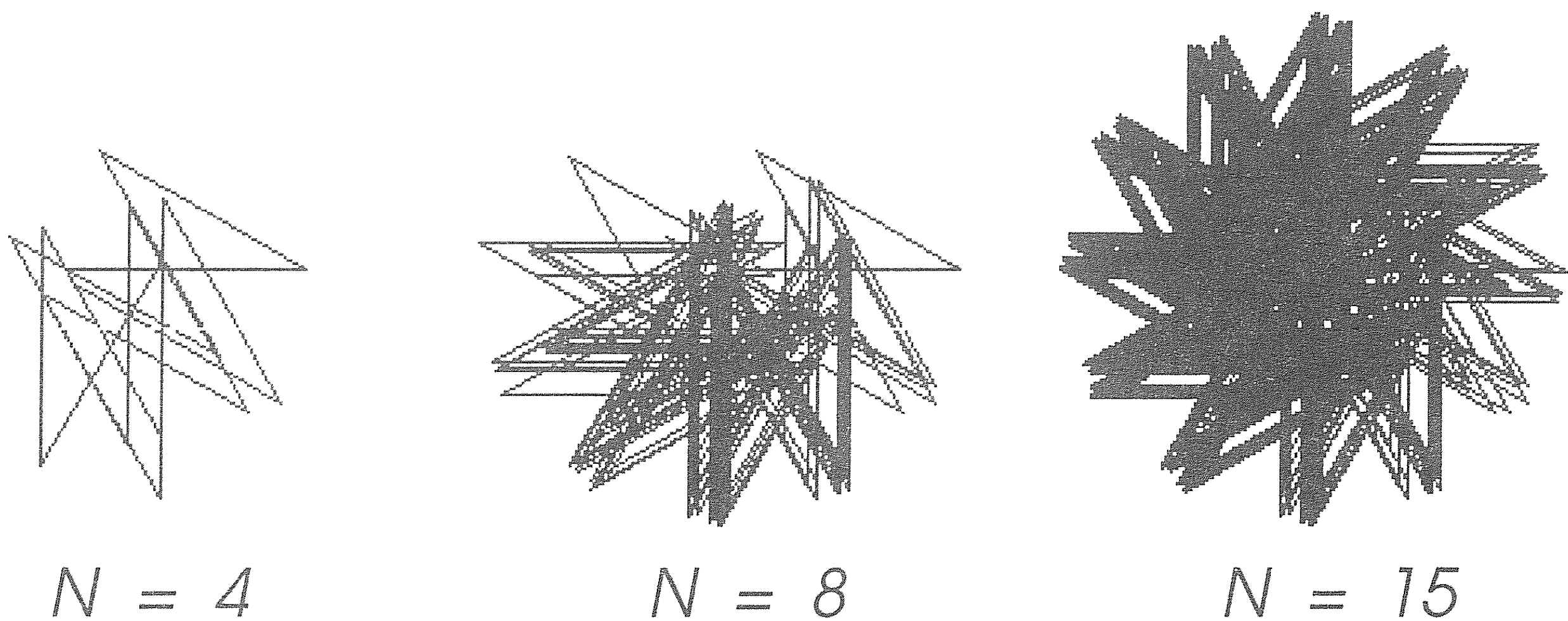
$$z(2^N, \alpha) = [2 \cos(\alpha/2)]^N e^{iN\alpha/2}.$$

Ker je $|z(2^N, \alpha)| = [2 \cos(\alpha/2)]^N$, ležijo ta oglišča na logaritmični spirali $r = e^{c\phi}$ s parametrom $c = \log [2 \cos(\alpha/2)]$. Od parametra c oziroma od kota α je odvisno, kako se bo zaporedje oglišč vedlo, ko bo naraščal N v neskončno.

Vzemimo najprej $2\pi/3 < \alpha \leq \pi$. Tedaj konvergira zaporedje oglišč $z(2^N, \alpha)$ proti koordinatnemu izhodišču 0, saj je $c < 0$ oziroma $|1 + \omega| = 2 \cos(\alpha/2) < 1$. Torej je zaporedje $z(2^N, \alpha)$ omejeno, omejeno pa je tudi celotno zaporedje $z(m, \alpha)$, $m \geq 0$. Vsako naravno število m namreč lahko zapišemo kot vsoto samih različnih potenc števila 2 in zato imamo za vsak m preprosto oceno

$$|z(m, \alpha)| \leq 1 + |1 + \omega| + |1 + \omega|^2 + \dots = (1 - |1 + \omega|)^{-1} = [1 - 2 \cos(\alpha/2)]^{-1}.$$

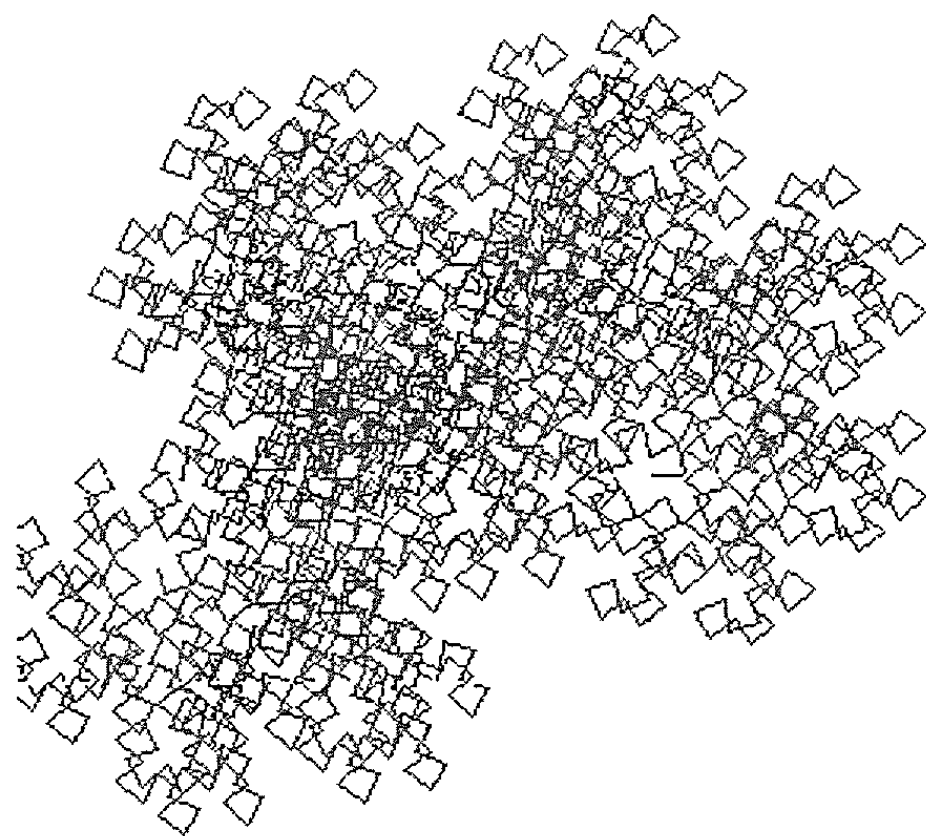
Če je α/π iracionalno število, ni težko spoznati, da vsebuje zaprtje $\overline{\Gamma(\alpha)}$ ves enotski krog s središčem v koordinatnem izhodišču. Vsekakor je za $2\pi/3 < \alpha < \pi$ množica $\overline{\Gamma(\alpha)}$ neka kompaktna (omejena in zaprta) podmnožica kompleksne ravnine, ki je pri racionalnem razmerju α/π lahko močno preluknjana (slika 5).



Slika 5

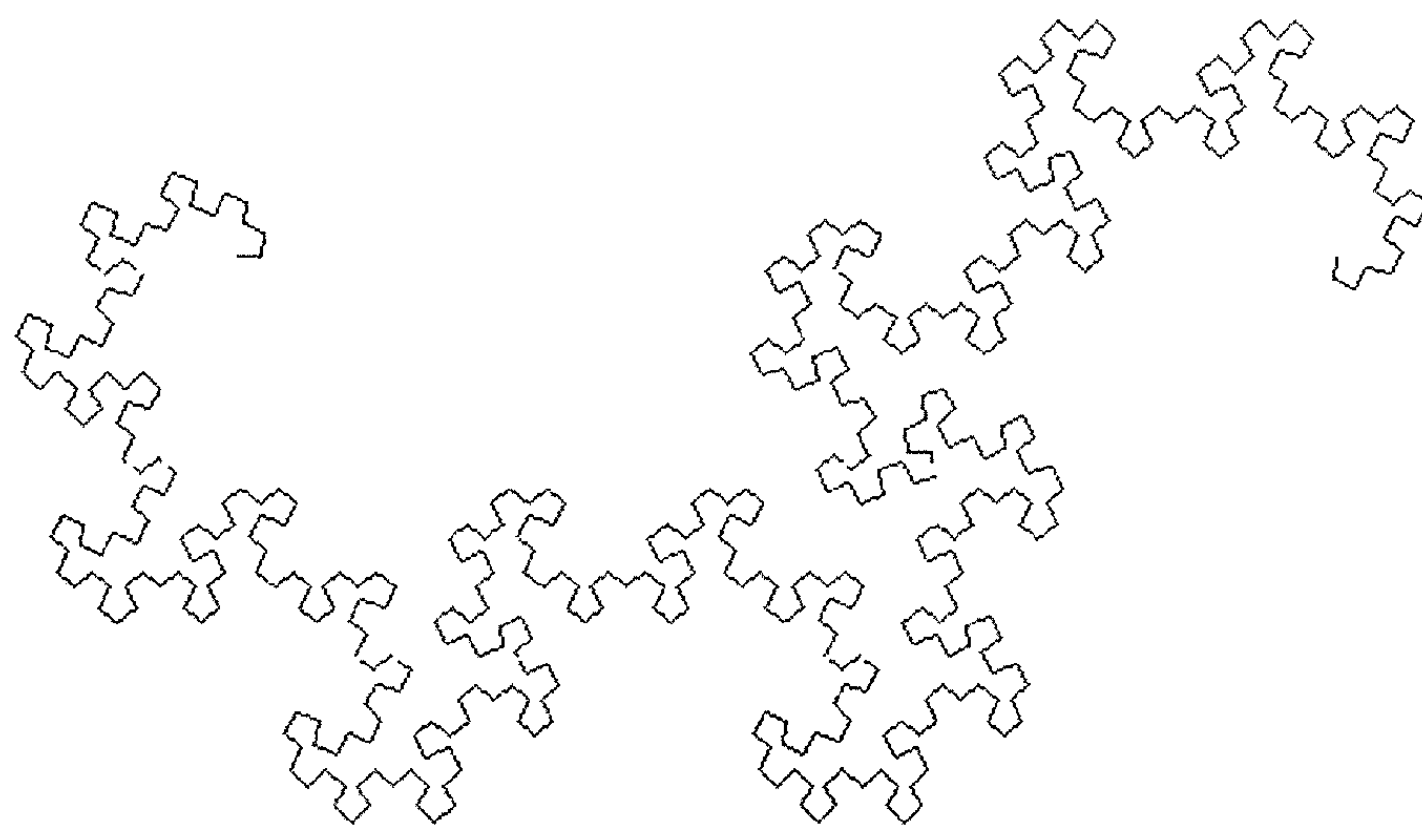
Mejni primer je kot $\alpha = 2\pi/3$, ko ležijo oglišča $z(2^N, 2\pi/3) = e^{iN\pi/3}$ na enotski krožnici ($c = 0$, $|1 + \omega| = 1$). Računalniška simulacija pokaže, da je tedaj zaporedje $(z(m, 2\pi/3))_{m \geq 0}$ neomejeno, vendar se izkaže, da je naraščanje števil $\max_{m \leq n} |z(m, 2\pi/3)|$, ko $n \rightarrow \infty$, zelo počasno. Strog dokaz dejstva, da je $\sup_{m \geq 0} |z(m, 2\pi/3)| = \infty$, ali celo izpeljava hitrosti naraščanja, presega okvir tega prispevka.

Kadar je $\alpha < 2\pi/3$, je $c > 0$ oziroma $|1 + \omega| > 1$, zato je krivulja $\Gamma(\alpha)$ v tem primeru neomejena. Za $\pi/2 < \alpha < 2\pi/3$ sama sebe še vedno seka (slika 6).



Slika 6

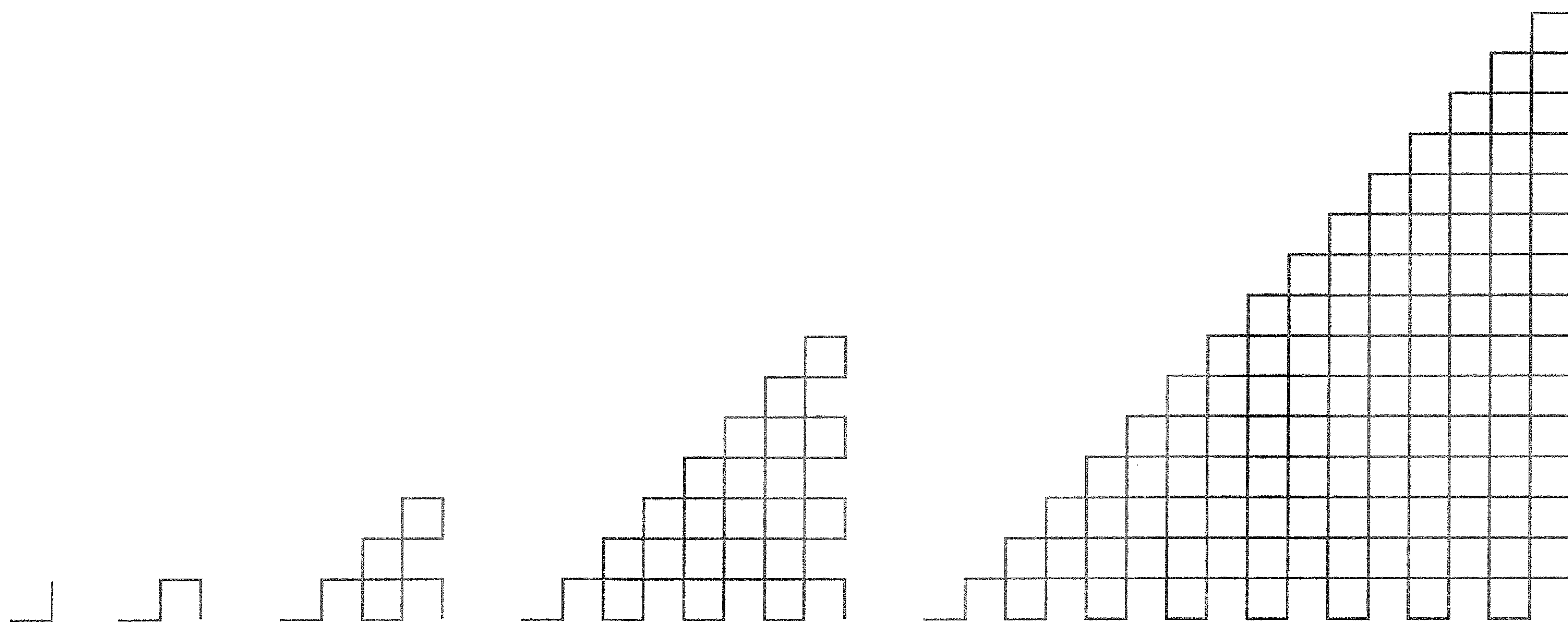
V mejnem primeru $\alpha = 2\pi/3$ se vsaka povezava celo neskončnokrat ponovi (primerjaj sliko 4). Drug mejni primer pa je $\alpha = \pi/2$, ko se zmajnica v nekaterih ogliščih kvečjemu dotakne samo sebe, povezave med oglišči pa se nikoli ne ponovijo (glej sliko 3). V tem smislu se zmajnica, kot sta pokazala že Davis in Knuth [2], že izogne sama sebi. Pri majhnih kotih, za $0 \leq \alpha < \pi/2$, pa krivulja $\Gamma(\alpha)$ ne seka sama sebe, niti se ne dotika, ampak bolj ali manj hitro zbeži v neskončnost (slika 7).



Slika 7

Vedenje krivulje $\Gamma(\alpha)$ pri spreminjanju kota α nas morebiti spomni na prehajanje snovi pri segrevanju iz trdnega v tekoče oziroma naprej v plinasto stanje. Ali je ta podobnost zgolj naključna? Kolikšno zvezo ima vse to s fiziko, si pogledjmo v zadnjem razdelku.

Opomba. Podobno kot s prepogibnim zaporedjem p bi lahko začeli tudi z alternativnim prepogibnim zaporedjem p' in v skladu z njegovimi členi upogibali poltrak v levo ali desno za določen kot α . Dobili bi alternativno krivuljo $\Gamma'(\alpha)$. V posebnem primeru pri $\alpha = \pi/2$ je to t.i. *Peanova krivulja*, ki „izpolni“ ves trikotni izsek (slika 8). Ker nas v tem sestavku alternativni pristop ne zanima, to dejstvo samo omenjamo. O različnih krivuljah, ki „napolnijo prostor“, se lahko bralec seznani npr. v [6].



Slika 8

3. Isingov model

Isingov model je eden od pomembnih modelov v statistični fiziki in se ukvarja s študijem faznih prehodov, t.j. kvalitativnih globalnih sprememb stanja sistema, povzročenih z majhnimi spremembami parametrov. Zgled za to je vsem dobro znana sprememba agregatnega stanja. Njegov začetnik je *Ernst Ising*, ki je v zgodnjih dvajsetih letih raziskoval pojave v zvezi s feromagnetizmom, zlasti nastanek t.i. spontane magnetizacije. Ker je to v bistvu matematični model, ga danes uporabljajo še na številnih drugih področjih, npr. pri obravnavi dvokomponentnih zlitin, pa tudi drugje v kemiji, molekularni biologiji itd., povsod, kjer je potreba po raziskovanju „kooperativnega“ vedenja velikih sistemov. Njegov namen je namreč pojasniti, kako interakcija sosednjih delcev vpliva na globalno obnašanje sistema. Treba pa je reči, da npr. fizika faznih prehodov še vedno ni dovolj pojasnjena. Opišimo na kratko glavne značilnosti Isingovega modela (podrobneje glej npr. [1]).

Imejmo sistem N delcev, ki so med seboj povezani v (ekvidistančno) kvadratno mrežo v (eno-, dvo- ali trirazsežnem) prostoru. Število N je ponavadi zelo veliko, npr. $N \sim 10^{23}$. Vsaka točka v mreži, razen robnih, ima (odvisno od dimenzije) 2, 4 ali 6 najbližjih sosedov. Robne točke zaradi enostavnosti pogosto zanemarimo ali pa vzamemo, da je mreža sklenjena oziroma regularna (se pravi, da ima vsaka točka enako mnogo sosedov). Poleg tega predpostavimo, da poleg zunanjega polja samo najbližji sosedje vplivajo na delec v dani točki.

Vsaki točki $i = 1, 2, \dots, N$ priredimo spremenljivko σ_i , ki lahko zavzame samo dve vrednosti, $+1$ in -1 . Ta spremenljivka opisuje stanje točke i (spin delca v tej točki). Pri feromagnetizmu je npr. to magnetni moment, ki kaže v eno od dveh možnih smeri (npr. „navzgor“ ali „navdol“), pri dvokomponentnih zlitinah pomeni, da položaj zaseda atom ene ali druge

komponente, pri agregatnih spremembah pa je točka zasedena z molekulo ali pa je mesto prazno.

Vsak nabor vrednosti vektorja $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, kjer je $\sigma_i = \pm 1$, se imenuje *konfiguracija* sistema. Vseh konfiguracij je 2^N , ogromno število. Totalna energija sistema je dana s hamiltonianom H , ki je v tem primeru funkcija konfiguracije:

$$H = H(\sigma) = -E \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - J \sum_i \sigma_i.$$

Druga vsota teče po vseh mrežnih točkah, prva pa po vseh parih sosednjih točk. Parameter E ustreza energiji zaradi interakcije sosednjih delcev, parameter J pa interakciji z zunanjim poljem. Pri feromagnetizmu je npr. število E pozitivno, zato ima „namagnetena“ konfiguracija, ko za večino parov (i, j) velja $\sigma_i = \sigma_j$, nižjo energijo kot „nenamagnetena“, ko produkti $\sigma_i \sigma_j$ enakovredno zavzamejo tako vrednost 1 kot -1 . Zunanje polje seveda skuša usmeriti magnetne momente v isto smer, temu pa nasprotuje termično gibanje v snovi. Le-to pri dovolj veliki temperaturi res uniči vpliv zunanjega polja. Pri dovolj nizki kritični temperaturi pa ostane snov namagnetena, tudi ko izključimo zunanje magnetno polje ($J \rightarrow 0$). Pojavu pravimo spontana (residualna) magnetizacija. Ta nezveznost v odvisnosti od parametra J je primer faznega prehoda.

Če je sistem v ravnovesju pri (absolutni) temperaturi T , vse konfiguracije σ niso enako verjetne. V skladu z osnovnimi zakoni statistične mehanike je verjetnost konfiguracije σ enaka

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\sigma)},$$

kjer je $\beta = \frac{1}{kT}$ inverzna temperatura (k je Boltzmannova konstanta) in normalizacijski faktor $Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H(\sigma)}$ t.i. Gibbsova *particijska funkcija* (odvisna je od β , E , J in seveda velikosti sistema N , torej $Z = Z(\beta, E, J, N)$). Particijska funkcija je izbrana tako, da dobimo pravo (Gibbsovo) porazdelitev po vseh konfiguracijah. Če je parameter β majhen (t.j. temperatura T velika), so vse konfiguracije približno enako verjetne. Če je β velik (temperatura T majhna), pa je večja verjetnost konfiguracije z nižjo energijo.

Mnoge termodinamične količine se izražajo s funkcijo Z . Tako je npr. *interna (lastna) energija* sistema definirana kot matematično upanje (povprečna vrednost) hamiltoniana, kar je (do predznaka) isto kot logaritmični odvod Gibbsove funkcije po parametru β , torej

$$H = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} H(\sigma) e^{-\beta H(\sigma)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta, E, J, N).$$

Drug tak primer je t.i. *prosta energija na mrežno enoto*, definirana s „termodinamično limito“

$$F = F(\beta, E, J) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z(\beta, E, J, N).$$

Glavna naloga Isingovega modela je poiskati analitični izraz za F kot funkcijo parametrov β , E , J . Nezveznost funkcije F ali njenih parcialnih odvodov bi pomenila možnost faznega prehoda.

Opomba. Že Ising sam je leta 1925 eksplicitno izračunal enorazsežni model in ugotovil, da ne dopušča singularnosti in zato ni faznih prehodov. Leta 1936 je R. Peierls s preprostim argumentom pokazal, da v dvorazsežnem primeru pri določeni temperaturi pride do faznega prehoda, L. Onsager pa je leta 1944 podal popolno rešitev dvorazsežnega Isingovega modela pri pogoju, da ni zunanega polja ($J = 0$). Kasneje jim je s podobnimi metodami uspelo ugnati številne druge dvorazsežne modele (z drugačno osnovno mrežo). Primer neničelnega zunanega polja, vsaj kolikor je avtorju tega prispevka znano, še niso eksaktno rešili. Prav tako se upira rešitvi tri-razsežni Isingov model, čeprav vedo, da fazni prehodi obstajajo.

Vrnimo se sedaj od fizike spet k zaporedjem. Če je $n < 2^N$, lahko v dvojiškem razvoju števila n seštevamo samo do $N - 1$, torej

$$n = \sum_{k=0}^{N-1} e_k(n) 2^k, \quad e_k(n) \in \{0, 1\}.$$

Za vsak $n < 2^N$ in vsak $k = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ označimo $\sigma_k(n) = 1 - 2e_k(n)$. Očitno so vrednosti za $\sigma_k(n)$ lahko le ± 1 . Dodatno postavimo $\sigma_N(n) = 1$, kar je smiselno, saj je $e_N(n) = 0$. Pri izbranem $n < 2^N$ imamo lahko vektor

$$\sigma(n) = (\sigma_0(n), \sigma_1(n), \dots, \sigma_{N-1}(n))$$

za neko konfiguracijo v enorazsežnem (linearnem) Isingovem modelu. Ko preteče n števila $0, 1, 2, \dots, 2^N - 1$, dobimo ravno vse možne konfiguracije (spomnimo se, da je vseh ravno 2^N), in sicer vsako natanko enkrat. Preslikava $n \mapsto \sigma(n)$ je torej bijekcija iz množice $\{0, 1, 2, \dots, 2^N - 1\}$ na množico vseh Isingovih konfiguracij, zato je tudi hamiltonian, ki pripada posamezni konfiguraciji, v resnici odvisen od n :

$$H(n) = -E \sum_{k=0}^{N-1} \sigma_k(n) \sigma_{k+1}(n) - J \sum_{k=0}^{N-1} \sigma_k(n).$$

Preidimo spet k dvojiškim števkam, pa dobimo

$$\begin{aligned} H(n) &= -E \sum_{k=0}^{N-1} (1 - 2e_k(n))(1 - 2e_{k+1}(n)) - J \sum_{k=0}^{N-1} (1 - 2e_k(n)) = \\ &= -N(E + J) - 4E \sum_{k=0}^{N-1} e_k(n)e_{k+1}(n) + (4E + 2J) \sum_{k=0}^{N-1} e_k(n) - 2Ee_0(n) = \\ &= -N(E + J) - 4Et(n) + (4E + 2J)s(n) - 2Ee_0(n). \end{aligned}$$

Upoštevali smo, da so dvojiške številke enake 0 za $k \geq N$ in uporabili oznake iz 1. razdelka.

Za konec si oglejmo dva posebna primera:

1. $E = 1/2$, $J = 0$. Potem je $H(n) = -N/2 + 2s(n) - 2t(n) - e_0(n) = -N/2 + q(n)$. Gibbsova particijska funkcija Z , ki je odvisna še od β in od N , je tedaj enaka

$$Z(\beta, N) = \sum_{n=0}^{2^N-1} e^{-\beta H(n)} = e^{\beta N/2} \sum_{n=0}^{2^N-1} e^{-\beta q(n)}.$$

Izberimo $0 \leq \alpha \leq \pi$ in $\beta = -i\alpha$ (kar je fizikalno seveda nesmiselno, saj bi pomenilo imaginarno temperaturo). Potem je

$$Z(-i\alpha, N) = e^{-iN\alpha/2} \sum_{n=0}^{2^N-1} e^{i\alpha q(n)} = e^{-iN\alpha/2} \sum_{n=0}^{2^N-1} \omega^{q(n)} = z(2^N, \alpha) e^{-iN\alpha/2},$$

kjer je $z(2^N, \alpha)$ ustrezno oglišče krivulje $\Gamma(\alpha)$ iz 2. razdelka. Tam smo že izračunali, da je $z(2^N, \alpha) = [2 \cos(\alpha/2)]^N e^{iN\alpha/2}$, zato dobimo

$$Z(-i\alpha, N) = [2 \cos(\alpha/2)]^N.$$

Če spet vpeljemo β , dobimo $Z(\beta, N) = [2 \cosh(\beta/2)]^N$, kar je veljavno tudi za $\beta > 0$, kot mora biti v fiziki oziroma Isingovem modelu. Za prosto energijo na mrežno enoto v tem primeru izračunamo

$$F(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z(\beta, N) = \log[2 \cosh(\beta/2)].$$

2. $E = -J = 1/4$. Tedaj je $H(n) = -t(n) + \frac{1}{2}s'(n)$, kjer je $s'(n) = \sum_{k=1}^{N-1} e_k(n) = s(n) - e_0(n)$. Spet vzemimo za β imaginarno število, to pot $\beta = i\pi$, pa se Gibbsova funkcija

$$Z(N) = \sum_{n=0}^{2^N-1} e^{i\pi(t(n)-s'(n)/2)} = \sum_{n=0}^{2^N-1} r(n) e^{-i\pi s'(n)/2}$$

izraža z Rudin-Shapirovim zaporedjem r . Bralec naj se (vsaj za začetne vrednosti N) sam prepriča, da za vsak $m \geq 0$ in $k = 0, 1, 2$ velja formula $Z(3m + k) = 2^k (2 - 2i)^m / k!$, od koder za $k = 0, 1, 2$ sledi $|Z(N)| = (\sqrt{2})^{N+k} / k!$, če je $N \equiv k \pmod{3}$.

V nekem smislu lahko torej rečemo, da teorija krivulj $\Gamma(\alpha)$ (in posredno teorija števil) ni nič drugega kot statistična fizika pri imaginarni temperaturi. In nasprotno, statistična fizika je samo teorija krivulj $\Gamma(\alpha)$ pri imaginarnih kotih α .

LITERATURA

- [1] B. A. Cipra, *An introduction to the Ising Model*, Amer. Math. Monthly **94** (1987), 937–959.
- [2] Ch. Davis, D. Knuth, *Number representations and dragon curves*, J. Recreational Math. **3** (1970), 61–81, 133–149.
- [3] M. Dekking, M. Mendès France, A. J. van der Poorten, *Folds!*, Math. Intelligencer **4** (1982), 130–138, 173–181, 190–195.
- [4] M. Mendès France, *The Rudin-Shapiro Sequence, Ising Chain, and Paperfolding*, Coll.: Analytic number theory (Allerton Park, 1989), pp. 123–131. Progr. Math. **85**, Birkhäuser 1990.
- [5] M. Mendès France, A. J. van der Poorten, *Arithmetic and analytic properties of paperfolding sequences*, Bull. Austral. Math. Soc. **24** (1981), 123–131.
- [6] H. Sagan, *Space-filling curves*, Universitext, Springer-Verlag, New York 1994.

VESTI

Seminar za učitelje in profesorje fizike

Izbrana poglavja iz statistične mehanike in termodinamike

(7. in 8. februarja 1997 v Ljubljani)

Srečanje, posvečeno izpopolnjevanju učiteljev in profesorjev fizike, je bilo že 19. po vrsti. Potekalo je pod okriljem Oddelka za fiziko Fakultete za matematiko in fiziko ob pomoči Pedagoške fakultete Univerze v Ljubljani in Društva matematikov, fizikov in astronomov. V dveh dnevih so se zvrstila naslednja predavanja:

Kuščer	Ali lahko zaupamo entropijskemu zakonu?
Prosen	Deterministični kaos
Likar in Hribar	Animacije in demonstracijski poskusi pri toploti
Kranjc	Mehka snov (tekoči kristali)
Ferbar	Novosti pri pouku fizike
Čepič	Polarni smektiki
Ponikvar, Hribar in Pahor	Študij toplotnih polj in tokov
Kregar	Pogovor o prenovi pouka fizike v srednji šoli
Strnad	Bose-Einsteinova kondenzacija
Vilfan	Isingov model
Ramšak	Superprevodnost

Osnovni namen seminarja je bil pokazati, da je tudi na tako klasičnih področjih, kot sta statistična fizika in termodinamika, veliko zanimivih novosti. Del predavanj pa je poskušal pokazati tudi nekaj novih možnosti za pouk tega dela fizike.

Zapise predavanj sta *T. Prosen* in *S. Žumer* uredila v Zbornik *Izbrana poglavja iz statistične mehanike in termodinamike*, ki bo v naslednjih mesecih po delih izšel v Obzorniku.

T. Prosen in *S. Žumer*

Pacs 05.20.6g

Med splošno sprejetimi zakoni narave je entropijski edini, ki je občasno še izpostavljen dvomom – zdi se, da zaradi zastarelih formulacij s toplotnimi stroji. Vendar pri raznih splošnih povezavah med snovnimi lastnostmi, ki sledijo iz tega zakona, ne manjka zanesljivih eksperimentalnih potrditev. Po drugi strani pa se, ko skušamo entropijski zakon izpeljati iz osnovnih zakonov in iz atomske podobe materije, pokažejo težave – kot tudi pri drugih makroskopskih zakonih. V klasični statistični mehaniki prikažemo sistem, ki je v termodinamičnem ravnovesju, s kanonično verjetnostno gostoto v faznem prostoru, $\rho_0 \propto e^{-\beta W}$. S povprečjem njenega logaritma se da entropija sistema linearno izraziti. Gibbs je zamisel še posplošil na poljubne verjetnostne gostote: $S = -k \overline{\ln \rho} + \text{konst.}$ Tako definirani S je pri dani povprečni energiji $\overline{W}$ maksimalen, kadar je $\rho = \rho_0$. Natanko vzeto pa se tako definirana entropija s časom ne more spreminjati, tako da v strogem pomenu sploh ni približevanja k ravnovesju. Gibbs in Ehrenfest sta nasprotje skušala razrešiti z vpeljavo grobe entropije, pri kateri verjetnost razmažemo po celicah v faznem prostoru, preden njeno gostoto logaritmiramo. Taki samovolji se Zubarev izogne tako, da se omeji na lokalno kanonične in lokalno ravnovesne porazdelitve. Druge opisujejo stanje, s prvimi pa je definirana entropija.

CAN THE ENTROPY LAW BE TRUSTED?

The entropy law is the only one among the generally accepted laws of nature that is still occasionally subject to doubt – perhaps because of obsolete formulations on the basis of heat engines. Yet for the various general relations between properties of matter that follow from the law, there is no shortage of reliable experimental verifications. On the other hand, attempts of derivation from the fundamental laws, on the basis of atomic theory, are beset with difficulties, just as is the case with other macroscopic laws. In classical statistical mechanics a system in thermodynamic equilibrium is described by a canonical probability density in phase space: $\rho_0 \propto e^{-\beta W}$. The average of its logarithm allows a linear expression for the entropy of the system. Gibbs further generalized this concept to arbitrary probability distributions: $S = -k \overline{\ln \rho} + \text{const.}$ For a given average energy $\overline{W}$ this entropy is maximal when $\rho = \rho_0$. However, the Gibbs entropy does not change with time, so that in a strict sense, it cannot describe the approach to equilibrium. Gibbs and Ehrenfest tried to resolve the dilemma by introducing a coarse-grained entropy, where the probability is smeared out over suitably chosen cells in phase space before the logarithm is taken. Such arbitrary procedure is avoided by Zubarev, who restricts himself to locally canonical distributions, which are then modified to represent systems in local thermodynamic equilibrium. While the modified distributions represent the thermodynamic states, the local canonical ones serve to define the entropy.

1. Fenomenologija

Med vsemi naravnimi zakoni je entropijski v pedagoškem pogledu nekaj posebnega, ker se vedno znova najdejo ljudje – tudi taki z ustreznimi

* Zapis spada v okvir zbornika *Izbrana poglavja iz statistične mehanike in termodinamike*, v katerem so objavljena predavanja s seminarja za učitelje in profesorje fizike, ki je bil 7. in 8. februarja 1997 v Ljubljani. Uredila sta ga T. Prosen in S. Zumer.

strokovnimi kvalifikacijami – ki dvomijo o njegovi veljavnosti. Vprašanje je, zakaj se dvomljivci lotevajo ravno in edinole entropijskega zakona. Ali je morda kaj narobe z načinom, kako se v šoli o njem pogovarjamo? Če je dvom upravičen, ponovna razprava ne bo odveč. Da ne bo nesporazuma: nerad se pričkam s praznoverneži, ki sploh ne zaupajo naravnim zakonom, ampak raje čarajo z astrologijo in drugimi načini vedeževanja; takim tako ali tako ni pomoči. Poskusil pa bom odgovoriti tistim, ki sicer naravnih zakonov na splošno ne zametujejo, a kljub temu sprašujejo, ali je entropijski zakon sploh kolikor toliko zanesljivo utemeljen. Opravičujem se, če bom ponovil marsikaj splošno znanega [1,2].

Do naravnih zakonov pridemo bodisi na osnovi opazovanj ali pa tako, da jih izpeljemo iz že znanih zakonov. Včasih pri tem spočetka tavamo v temi in tudi kaj uganemo, kar meritve šele kasneje potrdijo. Posebno vlogo imajo tako imenovani osnovni zakoni, ki jim pripisujemo splošno veljavo. Mednje spadajo zakoni kvantne fizike ali (v limiti) zakoni klasične mehanike in elektromagnetnega polja. Drugačen značaj imajo makroskopski zakoni, ki veljajo le za večje kose snovi in ki jih potrebujemo samo pri makroskopskem opisovanju narave. Matematik bi rekel, da veljajo šele v termodinamični limiti ($N \rightarrow \infty$); fiziki seveda niso tako resni, ker na skrivaj verjamejo, da je $10^{23} \approx \infty$.

Med makroskopske zakone spadajo poleg entropijskega še vsi fenomenološki zakoni, ki pri transportnih pojavih povezujejo gradiente s tokovi. Najbolj znani so Ohmov zakon, zakon toplotnega prevajanja, zakon viskoznosti in difuzijski zakon. Do takih zakonov so ljudje sprva prišli na osnovi opazovanj in so šele kasneje začeli razglablјati, kako bi jih izpeljali iz osnovnih zakonov. To se pravzaprav nikoli ni do konca posrečilo, čeprav ne manjka prepričljivih argumentov, ki jih fiziki na splošno brez pridržkov sprejemajo.

Medtem ko ljudje brez ugovorov zaupajo eksperimentalnim potrditvam Ohmovega in drugih fenomenoloških zakonov, se pri entropijskem nekaterim zdi, da je bolj na šibkih nogah. Dvomi izvirajo morda iz pretiranih opozoril v učbenikih, da zakon ne velja natančno in sploh ne z gotovostjo, ampak samo v povprečju ali „statistično”, kot radi pravijo bolj učeno. Natanko tako pa bi lahko govorili tudi o drugih makroskopskih zakonih, če pri tem pozabimo na termodinamično limito in upoštevamo termični šum, torej fluktuacije. Saj res: tudi Ohmov zakon ne velja natančno in sploh ne z gotovostjo, ker skozi upornik po naključju lahko uide nekaj elektronov preveč ali premalo. Vendar pri tem zakonu ljudje ne delajo komplikacij, ampak so zadovoljni s povprečjem. O šumu raje razpravljajo posebej.

Drug možen vir nesporazumov so nemara zastarele formulacije v nekdanjih učbenikih. Tam beremo, da entropijski zakon pove, da perpetuum mobile druge vrste ne more delovati. Če bi bila to vsa vsebina zakona, bi dvomljivcem lahko oprostili, saj utemeljevanje zakona z neuspehi izumiteljev, pa če jih je še toliko, res ni prepričljivo.

Dandanes raje začenjamo s širšimi trditvami. V šoli najprej razpravljamo o ireverzibilnih spremembah in poudarimo, da so pri toplotno izoliranem sistemu vselej nepreklicne [3]. Vprašamo, ali lahko najdemo količino, ki za vsako tako spremembo izraža stopnjo ireverzibilnosti. Dokončni odgovor najdemo šele, ko dopustimo tudi spremembe s prenosom toplote. Entropijski zakon pove, da obstaja za vsako snov in tudi za vsak sestavljen sistem enolična funkcija stanja, entropija $S(p, T, \dots)$, ki je aditivna (= „ekstenzivna”) in ki je takole povezana z dovedeno toploto in temperaturo:

$$dS \geq \frac{dQ}{T}. \quad (1)$$

Pri tem velja enačaja le za reverzibilne spremembe.

Ker lahko računamo samo z enačbami, ne pa z neenačbami, je entropija pravzaprav dobro definirana le za taka stanja, ki jih znamo povezati z reverzibilnimi spremembami. To so ravnovesna stanja (namreč ravnovesna v termodinamičnem pomenu besede). Kot primera, ki ga lahko vsakdo sam računsko preveri, se spomnimo entropije plina. Za N enakih delcev in konstantno toplotno kapaciteto c_p (pri stalnem tlaku) dobimo

$$S = N [c_p \ln T - k \ln p + \text{konst}]. \quad (2)$$

V analizo moramo vključiti tudi lokalno ravnovesna stanja. Od ravnovesnega se ločijo po tem, da se temperatura in drugi parametri počasi spreminjajo s krajem in časom. Zaupamo, da se za vsak majhen kos snovi entropija računa natanko tako kot za pravo ravnovesje. Pomemben razložek je, da imamo v lokalno ravnovesnem stanju toplotne in druge tokove, zaradi katerih npr. temperatura stremi k izenačenju. Taka sprememba je ireverzibilna. Če je sistem pri tem toplotno izoliran, se mu entropija večja, vse dokler ni doseženo resnično ravnovesje. Tedaj je (za izoliran sistem) entropija maksimalna in ne more več rasti.

Iz entropijskega zakona sledijo za lastnosti snovi razne omejitve in povezave, ki se dajo preveriti z meritvami. Znamenit primer je Clausius-Clapeyronova enačba, ki jo izpeljemo s tem, da primerjamo mešana druga odvoda t.i. proste energije $F = W_{\text{notr}} - TS$ za zmes pare in kapljevine. Enačba povezuje temperaturni odvod izparilnega tlaka s kvocientom izparilne entropije in ustrezne prostorninske spremembe:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta S}{\Delta V}. \quad (3)$$

Za premnoge snovi so veljavnost enačbe preverili z določevanjem izparilne toplote in funkcije $p(T)$. Vsako tako ujemanje lahko velja kot potrditev entropijskega zakona. Strojni inženirji se na Clausius-Clapeyronovo enačbo na veliko sklicujejo pri obravnavanju parnega stroja, meteorologi pa, ko razlagajo pojave v oblakih.

2. Kanonična porazdelitev

Če bi radi mikroskopsko utemeljili entropijski zakon, moramo najprej premisliti, kako naj sploh opišemo termodinamično ravnovesje. Zamislimo si večje telo, ki je potopljeno v termostat pri določenem tlaku in temperaturi. Nespametno bi si bilo predstavljati, da je tedaj telo v določenem mikroskopskem stanju, torej da imajo njegovi delci natanko določene lege in hitrosti, saj se zaradi gibanja delcev, pa tudi zaradi interakcije s termostatom mikroskopsko stanje telesa neprestano spreminja. Spremembe so nepredvidljive in kar se da neurejene, se pravi kaotične. O tem nas dodobra prepriča Brownovo gibanje.

Kaotične spremembe upravičujejo uvedbo statistične mehanike. Namesto o ostro določenih mikroskopskih stanjih se v njenem okviru pogovarjamo o verjetnostnih porazdelitvah po takih stanjih. Dogovoriti se moramo seveda, kako sploh opredelimo te vrste porazdelitve. Če se zaradi lažje razprave zadovoljimo s klasično podobo, potrebujemo fazni prostor s koordinatami (q, p) , pri čemer q zaznamuje zbirko koordinat in p vse konjugirane impulze. Pri sistemu iz N enoatomnih delcev je ta prostor $6N$ -dimenzionalen. Vzamemo koordinate $q = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, tako da so impulzi kar komponente gibalnih količin, $p = (\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N)$. Element faznega prostora ima prostornino $dq dp = dx_1 \dots dz_N dp_{x1} \dots dp_{zN}$. Vsakemu mikroskopskemu stanju sistema ustreza posamezna točka v faznem prostoru. Njeno gibanje upodablja gibanje vseh delcev sistema, kot ga narekujejo sile in Newtonov zakon. Iz tega zakona sledi Liouvilleov izrek, po katerem se prostornina v faznem prostoru ohranja. Če torej vse točke znotraj nekega dela Γ faznega prostora premaknemo v času t tako, kot vелеvajo enačbe gibanja, velja

$$\iint_{\Gamma(0)} dq dp = \iint_{\Gamma(t)} dq dp. \quad (4)$$

Lahko si predstavljamo, da točke v faznem prostoru plavajo v nekem tekočinskem toku. Po Liouvilleu je divergenca tega toka enaka nič, kakor da je namišljena tekočina nestisljiva.

V makroskopskem svetu so sile le izjemoma konservativne, to je takšne, da se dajo prikazati z gradienti potencialne energije. Šolska primera: teža telesa je enaka negativnemu gradientu njegove potencialne energije $W_{\text{pot}} = mgz$ v zemeljskem težnem polju. Po drugi strani se sila trenja ne da na tak način prikazati. Med osnovna spoznanja fizike pa spada, da so v mikroskopskem svetu vse sile konservativne, tako da se dajo vselej predstaviti na opisani (ali malo posplošeni) način. Za silo, ki deluje na delec št. 1 v sistemu iz N delcev, zapišemo $\vec{F}_1 = -\nabla_1 W_{\text{pot}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. Če ni zunanjih sil, se vsota kinetične in potencialne energije ohranja, torej (za sistem z enoatomnimi delci)

$$\frac{1}{2m} |p|^2 + W_{\text{pot}}(q) \equiv W = \text{const}. \quad (5)$$

Privoščili smo si kratico $|p|^2 = p_{x1}^2 + \dots + p_{zN}^2$. Enačba določa za vsako vrednost W celotne energije neko $(6N - 1)$ -dimenzionalno hiperploskev; te ploskve obdajajo druga drugo kakor listi čebule. Par bližnjih ploskev, ki ustreza energijskemu intervalu dW , pa določa energijsko plast. Za izoliran sistem z energijo v tem intervalu vemo, da se njegova podoba v faznem prostoru giblje znotraj plasti.

Če ne vemo, kakšno je mikroskopsko stanje sistema, si pomagamo z verjetnostno gostoto $\rho(q, p, t)$ v faznem prostoru [5]. Predstavljamo si torej, da je z verjetnostjo $\rho(q, p, t) dq dp$ stanje sistema ob trenutku t po naključju takšno, da pade ustrezna točka v faznem prostoru v element $dq dp$ pri (q, p) . Za vsakovrstne količine $J(q, p)$ potem lahko računamo verjetnostna povprečja $\bar{J} = \iint J \rho dq dp$. Odločilno vprašanje je, ali se takšno povprečje ujema z ustrezno termodinamično količino. Pritrdilen odgovor seveda lahko pričakujemo samo za smiselno izbrano funkcijo ρ .

Ko se sestavni deli sistema gibljejo, se verjetnostna gostota v faznem prostoru na splošno spreminja, podobno kot so oblaki vsak hip drugačni, kadar jih nosi veter. Zato se s časom spreminjajo tudi povprečja: $\bar{J} = \bar{J}(t)$. Nekaj posebnega pa so stacionarne verjetnostne porazdelitve, katerih gostota od časa ni odvisna. Za primerjavo si zamislimo enakomerno gosto meglo, ki ostaja tudi ob vetru nespremenjena. Namesto enakomerne megle vzamemo v faznem prostoru takšno verjetnostno gostoto, da je odvisna samo od energije, $\rho = \rho(W)$; pri tem vstavimo izraz (5). Reči hočemo: znotraj vsake tanke energijske plasti je verjetnostna gostota konstantna, od plasti do plasti pa lahko drugačna. Če je sistem prepuščen samemu sebi, se zaradi Liouvilleovega izreka taka verjetnostna gostota ne spreminja, tako kot je enakomerno gosta megla stacionarna, če je gostota zraka ves čas enaka.

Za opisovanje stanj, ki veljajo v termodinamiki kot ravnovesna, prihajajo v poštev seveda samo stacionarne verjetnostne porazdelitve, pri katerih so vsa povprečja $\bar{J}$ od časa neodvisna. Vsaka funkcija $\rho(W)$ pa za ta namen ni dobra, zato se bomo morali omejiti na tako imenovane kanonične verjetnostne gostote ρ_0 , ki pojemajo eksponentno z energijo: $\rho_0 \propto e^{-\beta W}$. Ravnovesno stanje pri določeni temperaturi in z nespremenljivim številom delcev vselej opišemo s takšno porazdelitvijo. Znamenit primer najdemo pri ozračju z enakomerno temperaturo, katerega gostota eksponento pojema z višino, torej s potencialno energijo mgz posamezne molekule v zemeljskem težnem polju.

Po navadi izrazimo kanonično verjetnostno gostoto takole:

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\beta W}, \quad (6)$$

pri čemer je normirni faktor

$$Z = \iint e^{-\beta W} dq dp \quad (7)$$

znan z imenom fazni integral. Za enoatomni plin dobimo

$$Z = \left[\left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} V \right]^N. \quad (8)$$

(Mnogi pišejo $Z = e^{-\beta F}$, ker ima F nazoren pomen. To je namreč prosta energija, ki si jo predstavljamo kot zalogo dela pri reverzibilnih izotermnih spremembah [1].)

Ko odvajamo negativni logaritem faznega integrala po β , prepoznamo v rezultatu povprečno vrednost energije:

$$-\frac{d \ln Z}{d\beta} = \frac{1}{Z} \iint W e^{-\beta W} dq dp \equiv \bar{W}. \quad (9)$$

Za plin sledi iz (8), da je $\bar{W} = \frac{3}{2} N/\beta$. S ponovnim odvajanjem izraza (9) pridemo po nekaj korakih do zaključka, da so pri velikem sistemu relativni naključni odmiki energije od navedenega povprečja majhni (velikostne stopnje $1/\sqrt{N}$), tako da se naključno ugotovljena energija W z veliko verjetnostjo precej natančno ujema z $\bar{W}$. Zato po pravici s tem verjetnostnim povprečjem identificiramo notranjo energijo, kot jo poznamo iz termodinamike. Se pravi: notranja energija sistema je povprečna vsota kinetične in potencialne energije vseh njegovih delov. Tu je mišljena potencialna energija, ki ustreza silam med delci.

Zamislimo si sedaj, da sestavimo dva neodvisna sistema, med katerima ni interakcije. Za oba privzamemo kanonični verjetnostni porazdelitvi, in sicer z istim β , torej $\rho_1 \propto e^{-\beta W_1}$ in $\rho_2 \propto e^{-\beta W_2}$. (Zakaj tako, bomo kmalu videli.) Če ni interakcije, tudi ne more biti korelacij med dogodki v enem in drugem sistemu. Verjetnostno gostoto za sestavljeni sistem dobimo zato z množenjem, $\rho_0 = \rho_1 \rho_2 \propto e^{-\beta W_1} e^{-\beta W_2} = e^{-\beta W}$. V eksponentu rezultata je zapisana skupna energija $W = W_1 + W_2$. Samo pri kanoničnih porazdelitvah se pri sestavljanju neodvisnih sistemov z enakim β oblika porazdelitve ohrani.

Lastnost parametra β , da ima pri sestavljenem sistemu enako vrednost kot v obeh delih, spominja na temperaturo. Da razkrijemo zvezo, se spomnimo na operacijsko definicijo temperature s plinskim termometrom in na znano notranjo energijo enoatomnega plina. Iz primerjave $\frac{3}{2} N/\beta = \frac{3}{2} NkT$ sledi, da je

$$\beta = \frac{1}{kT}. \quad (10)$$

Temperatura (ali pravzaprav njena recipročna vrednost) torej določa, kako hitro verjetnostna gostota v faznem prostoru z energijo sistema pojema. Čim višja je temperatura, tem bolj počasno je pojemanje – se pravi tem bolj je energija razmazana.

O entropiji sistema se je vredno pogovarjati šele, ko mu dovolimo izmenjavo energije z okolico. Izmenjava mora biti dovolj počasna, da velja kot reverzibilna, se pravi da je termodinamično stanje kljub spremembam ves čas ravnovesno. Reči hočemo: verjetnostna porazdelitev v faznem prostoru naj bo ves čas kanonična. Zahteva je smiselna, ker je gibanje točk v energijski plasti ergodično ali bolje rečeno takšno, da se vsi deli plasti čez čas med seboj premešajo. (Po zdravi pameti je neznansko malo verjetno, da bi se z nadaljnjim gibanjem porazdelitev spet odmešala.)

Izmenjava energije poteka lahko na dva načina. Prvi je z delom, ki je vedno povezano z nekim urejenim gibanjem, npr. s premikanjem bata. Drugi način je s prenosom toplote iz okolice. Toplota, to je tisti delež energije, ki se prenese z neurejenim (termičnim) gibanjem, torej z naključnimi trki delcev iz okolice ob delce sistema. Poudariti je treba, da je razločevanje med delom in toploto smiselno samo tedaj, kadar makroskopsko opisujemo sistem iz velikega števila delcev. Pri mikroskopskem opisu se razloček izgubi.

Namesto da bi si za toploto izmišljali kak zamotan izraz, zapišimo ta delež prenesene energije kar pavšalno z dQ , saj nadrobni potek tistih trkov sploh ni pomemben. Če ni drugega dela kot zaradi reverzibilnega stiskanja prostornine, velja torej

$$d\bar{W} = -p dV + dQ. \quad (11)$$

Toliko iz termodinamike. Po drugi strani si spet pomagamo s faznim integralom, ki je sedaj odvisen od V in β . Z upoštevanjem obeh parcialnih odvodov dobimo naslednji totalni diferencial:

$$-d \ln Z = -\beta p dV + \bar{W} d\beta. \quad (12)$$

Pri tem je tlak p definiran z verjetnostnim povprečjem odvoda energije po V , namreč

$$p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = -\frac{1}{Z} \int \left(\frac{\partial W}{\partial V} \right) e^{-\beta W} dq dp \equiv -\overline{\left(\frac{\partial W}{\partial V} \right)}. \quad (13)$$

Prejšnji diferencial pomaga, da eliminiramo delo $-p dV$. Dobimo

$$d(\ln Z + \beta \bar{W}) = \beta dQ = \frac{dQ}{kT}. \quad (14)$$

Na levi stoji totalni diferencial nečesa, kar je očitno enolična funkcija ravnovesnega termodinamičnega stanja, tako da mora imeti tudi desna stran to lepo lastnost. Da bomo prišli do ujemanja s termodinamično definicijo (1), pomnožimo novo funkcijo z Boltzmannovo konstanto, preden ji damo ime entropija:

$$S = k \left(\ln \frac{Z}{N!} + \beta \bar{W} \right) + \text{const.} \quad (15)$$

Zapis zahteva pojasnilo. Vzeli bomo, da je sistemu narejen iz N enakih delcev, ki se lahko gibljejo po prostornini V . Iz integracijske konstante moramo tedaj izvzeti člen $k \ln(1/N!)$, če hočemo, da je v oklepaju zapisani izraz že sam zase aditiven, se pravi pri stalni številski gostoti N/V sistema sorazmeren z N . Vendar velja to šele pri tako velikem N , da smemo logaritem fakultete aproksimirati s Stirlingovo formulo v njeni najbolj grobi obliki: $\ln(N!) \approx \ln[(N/e)^N]$. Pripomniti je še treba, da integracijske konstante na koncu izraza (15) v okviru klasične fizike ne moremo predpisati brez prisile. Čeprav ni pomembna, je ne smemo izpustiti, ker bi se potem enačba zdela, kot da velja samo za določen izbor enot. Take enačbe pa so dandanes prepovedane.

Ko primerjamo izraza (15) in (6), opazimo, da se entropija v ravnovesnem stanju linearno izraža s povprečnim logaritmom kanonične verjetnostne gostote:

$$S = -k \overline{\ln(N! \rho_0)} + \text{const.} \quad (16)$$

Za vajo se spet lotimo enoatomnega plina in potrdimo, da velja izraz (2), kjer je sedaj $c_p = \frac{5}{2} k$.

3. Gibbsova entropija

Zadnji rezultat nas zapeljuje, da bi poskusili posplošiti pojem entropije na kakršna koli stanja, tudi neravnovesna. Na videz je naloga preprosta; saj ni treba drugega, kot da v definiciji po zgornjem vzorcu uporabimo poljubno verjetnostno gostoto v faznem prostoru [4]. Tako definirana Gibbsova entropija (spet za N enakih delcev),

$$S = -k \overline{\ln(N! \rho)} + \text{const} = -k \iint \rho \ln(N! \rho) dq dp + \text{const}, \quad (17)$$

je pravzaprav samo zgled za pojem informacijske entropije, kot jo poznamo v verjetnostnem računu [5]. Edini razložek je, da tam izpuščamo faktor k in da po navadi uporabljamo logaritem z bazo 2.

Gibbsova entropija ima prijazno lastnost, da je pri dani povprečni energiji $\overline{W}$ in pri sicer nespremenjenih pogojih maksimalna, kadar je porazdelitev kanonična ($\rho = \rho_0$), torej kadar je termodinamično stanje ravnovesno. Predpisu, da naj bo $\overline{W} = \text{const}$, najlažje ustrežemo tako, da sistemu ne dovolimo nobene izmenjave energije z okolico. Že iz termodinamike vemo, da je pri takem pogoju maksimalna entropija v ravnovesju.

Dokaza navedene trditve, ki se z zvijačo izogne variacijskemu računu, ne bomo ponavljali [1]. Lepo se sliši, da je nova definicija kar se da splošna in da jo formalno lahko uporabimo tudi za sisteme z majhnim številom delcev. Vendar tedaj ni aditivnosti, tako da je takšna posplošitev jalova.

Na preprost primer naletimo pri enoatomnem plinu, za katerega vselej privzamemo, da med njegovimi delci ni zaznavnih korelacij. Verjetnosti se

zato množijo, tako da zadošča poznavanje enodelčne porazdelitvene funkcije $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$. Po navadi jo normirajo tako, da je $f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p$ povprečno število delcev v navedenem elementu enodelčnega faznega prostora. Drugače povedano: $n = \int f d^3p$ je številska gostota molekul. Verjetnostna gostota v celotnem faznem prostoru je potemtakem

$$\rho = \frac{1}{N^N} f(\vec{r}_1, \vec{p}_1, t) \cdots f(\vec{r}_N, \vec{p}_N, t). \quad (18)$$

Izraz (17) se sedaj takole poenostavi:

$$S = -kN \overline{\ln f} + \text{const} = -k \iint f \ln f d^3r d^3p + \text{const}. \quad (19)$$

Velja podobno, kot smo že povedali: pri dani povprečni energiji molekule doseže S svoj maksimum, kadar je verjetnostna gostota kanonična – ali Maxwelllova, kot pravimo pri enodelčni porazdelitvi. Zapišimo jo za primer, ko ni zunanega polja:

$$f_0(\vec{p}) = n \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\beta \frac{p^2}{2m} \right). \quad (20)$$

Ko ta zapis vstavimo v formulo (19), ponovno sledi izraz (2) za entropijo plina.

Kdor hoče pojem verjetnosti fizikalno utemeljevati, se rad sklicuje na operacijsko definicijo z namišljeno množico realizacij (ensemble). Namesto enega sistema si predstavlja veliko število kopij v različnih mikroskopskih stanjih. Taka množica bi morala seveda biti neznansko bogata, preden bi iz nje lahko razbrali vrednosti ρ , tako da podoba navsezadnje ni posebno prepričljiva. Potrebna pa tudi ni.

Komur se idejne težave glede verjetnostne gostote v faznem prostoru sistema upirajo, lahko pri plinu poskusi na drug način. Vzamemo eno samo posodo s plinom in si mislimo, da poznamo funkcijo $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$. Enodelčni fazni prostor razdelimo na primerno velike celice, recimo s prostornino $d^3r d^3p = \Delta$, in aproksimiramo gostoto v njih z dejanskim številom molekul; v i -ti celici je torej $f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t) \approx N_i/\Delta$. Če prej ne obupamo, pridemo s predrzno kombinatorično telovadbo in z izdatno zlorabo Stirlingove formule do znane Boltzmannove formule, ki izraža entropijo z logaritmom števila možnih razporeditev N delcev na izbrane celice. Pri uporabi formule pa moramo biti previdni; saj če jo razumemo dobesedno, entropija ni aditivna. Bolje je, če presedlamo na kvantno mehaniko in štejemo linearno neodvisna stacionarna stanja molekule, namesto da bi merili njen fazni prostor.

V nadaljnji razpravi pridemo do trditve, da je entropija merilo za nered. V šoli pridejo take besedne igre kar prav, čeprav se da nered neodvisno od entropije definirati samo za posebno preproste primere.

Treba je še povedati, da je Boltzmann v prejšnjem stoletju utemeljil fiziko enoatomnih plinov z nelinearno integrodiferencialno enačbo, ki se sedaj po njem imenuje [6,7,8]. Enačba določa, kako se $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ spreminja. Iz nje je Boltzmann med drugim izpeljal, da z enačbo (19) določena entropija plina narašča proti ravnovesni vrednosti, če plin prepustimo samemu sebi.

4. Paradoks ireverzibilnosti

Po Boltzmannovem uspehu se zdi, da bi morala tudi splošno definirana entropija (17) naraščati proti svoji maksimalni, to je ravnovesni vrednosti (16), če prepustimo sistem samemu sebi. Če bi kaj takega uspelo dokazati, bi si lahko domišljali, da razumemo ireverzibilne pojave. Razočarani bomo uvideli, da je domneva napačna, kajti Gibbsova entropija se pri idealno izoliranem sistemu sploh ne more spremeniti.

Mislimo si, da koordinate v faznem prostoru sistema transformiramo tako, kot velevajo enačbe gibanja. Točka $(q(0), p(0))$ se v času t premakne v $(q(t), p(t))$. Množica točk znotraj kakega dela faznega prostora po Liouvilleovem izreku (4) ohrani svojo prostornino. Uvidimo, da ostane tudi verjetnostna gostota ob vsaki gibajoči se točki nespremenjena: $\rho(q(0), p(0), 0) = \rho(q(t), p(t), t)$. Bolj preprosto povedano: substancialni časovni odvod verjetnostne gostote je nič,

$$\frac{d}{dt} \rho(q(t), p(t), t) = 0. \quad (21)$$

Pravzaprav ne bi smeli biti presenečeni, ker se nekaj podobnega dogaja z barvo pri mešanju malinovca ali testa za marmorni kolač, če difuzijo lahko zanemarimo. V faznem prostoru je zagotovo ni, ker je gibanje točk v njem deterministično. Ko se v mislih premikamo s sragami malinovca ali testa naprej, imamo znotraj vsake ves čas enako barvo – podobno, kot je v faznem prostoru ρ ves čas enak. Nobeno povprečje se zato ne more spremeniti, tudi tisto v enačbi (17) ne.

S tem smo trčili ob hudo nasprotje, ki je že dolgo znano kot paradoks ireverzibilnosti. V svetu delcev so vsi pojavi reverzibilni, ker so enačbe gibanja (po Newtonu ali Einsteinu ali Schrödingerju ali Diracu) invariantne proti obratu časa. Konstantnost Gibbsove entropije je samo posledica te invariantnosti. Po drugi strani pa dobro vemo, da v makroskopskem svetu obstajajo ali celo prevladujejo ireverzibilni pojavi. Kako naj oboje spravimo v sklad, ne da bi podvomili o veljavi osnovnih zakonov ali po drugi strani o resničnosti ireverzibilnih pojavov?

Ne bom pozabil imenitne večerne diskusije o paradoksu ireverzibilnosti, ki jo je leta 1977 organiziral N. G. van Kampen na Mednarodni letni šoli za statistično mehaniko v Jadvišinu pri Varšavi. Vsakdo je imel svoj nasvet ali predsodek, kako bi se dal paradoks razrešiti, in neverjetno veliko različnih trmastih mnenj je bilo slišati. Eni so rekli, da je treba upoštevati

vpliv okolice, drugi, da je kriva kvantna mehanika, tretji pa so se sklicevali na veliki pok. Sicer se pa tudi resni pisci pri tem problemu razhajajo. Feynmanova razprava [9] je kar pomirjujoča, medtem ko sta Landau in Lifšic [10] bolj previdna:

O tem, da prikazane preproste formulacije [o naraščanju entropije] ustrezajo realnosti, ni nobenega dvoma; saj jih potrjujejo vsa naša vsakodnevna opažanja. Vendar se pri bolj skrbnem pregledu problema o fizikalni naravi in izvoru takih zakonitosti pokažejo bistvene težave, ki jih do neke mere še do danes niso premagali.

Preden gremo dalje, moramo vprašati, kje ga je Boltzmann polomil. Saj ne more veljati za plin nekaj, kar na splošno ni res. Napaka se skriva v Boltzmannovi enačbi, ki tudi sama spada med zakone, ki resno ne sledijo iz osnovnih (razen kvečjemu v smislu nekih limitnih izrekov [8]). Privzetek o odsotnosti korelacij ni varen, ker korelacije nastajajo pri trkih, tudi če jih spočetka ni bilo.

Prvo zamisel za rešitev paradoksa, ki sta jo izdelala Gibbs in Ehrenfest [11], lahko naslonimo na prispodobo z mešanjem marmornega testa. Gibanje testa je kaotično, se pravi nenapovedljivo na daljši čas. Pri nadaljnjem mešanju se srage svetlega in temnega testa vse bolj tanjšajo in prepletajo, tako da je testo nazadnje od daleč videti enakomerno, čeprav se pod lupo neenakomernosti še ostro razločijo. Vse kaže, da smo si težave nakopali s preostrim gledanjem. Glejmo zato raje skozi motno steklo, pa se raznobarvne srage kmalu ne bodo več videle in testo se bo zdelo, da je „v grobem“ enakomerno. Se pravi: upamo, da bo v grobem porazdelitev v faznem prostoru potem kanonična. Ustrezno definiramo „grobo“ entropijo z razmazanjem verjetnosti po primerno velikih celicah faznega prostora. Če nas prispodoba z marmornim testom ne vara, mora taka entropija naraščati, dokler ni „v grobem“ doseženo ravnovesje.

Pomislekov še ni konec. V klasični fiziki nimamo nobene opore za odločitev o velikosti celic v faznem prostoru. Od te izbire je odvisno, kako hitro groba entropija raste, torej kako hudo ireverzibilen je pojav. Definicij, ki vpletajo samovoljno izbrane parametre, pa se raje ogibamo.

5. Lokalno ravnovesne porazdelitve

Previdnejšo in zato bržkone boljšo pot predlaga Zubarev [12], ki vpelje take verjetnostne porazdelitve v faznem prostoru, da ustrezajo lokalnemu termodinamičnemu ravnovesju. Ideja je kar simpatična, čeprav se z njo odpovedujemo Gibbsovi posplošitvi. To pravzaprav ni nič hudega; saj je tudi v termodinamiki pojem entropije omejen na ravnovesna in na lokalno ravnovesna stanja.

Najprej vpeljemo lokalno kanonične verjetnostne gostote, ki so v okolici vsakega kraja kanonične. S krajem in časom pa se npr. temperatura lahko

počasi spreminja, torej $\beta = \beta(\vec{r}, t)$. Poskusimo zapisati:

$$\rho_{\text{lk}} \propto \exp \left[- \sum_{i=1}^N \beta(\vec{r}_i, t) \left(\frac{p_i^2}{2m} + \dots \right) \right]. \quad (22)$$

Pikice stojijo namesto potencialne energije in dodatnih členov, ki upoštevajo spremenljivo številsko gostoto $n(\vec{r}, t)$ ter morda še hidrodinamični tok.

Lokalno kanonična porazdelitev še ni dobra za naš namen, ker pri njej zaradi izotropnosti ni tokov. Če nekaj časa počakamo, pa se porazdelitev sama od sebe spremeni v anizotropno, s tem da stečejo tokovi. Zubarev je našel analitičen izraz za takšno prilagoditev porazdelitve. Ko se anizotropni popravek le še počasi spreminja, zaupamo, da smo dobili dober opis lokalnega termodinamičnega ravnovesja. Po takem predpisu dobljena verjetnostna gostota ρ naj se imenuje lokalno ravnovesna. (Zubarev ima drugačno terminologijo.)

V kinetični teoriji plinov so popravki opisane vrste dobro znani z imenom Chapmana in Enskega [6]. V prvem približku ne prispevajo k entropiji, pač pa so odgovorni za entropijski tok. Linearno so odvisni od gradientov, če so ti dovolj majhni, tako da veljajo fenomenološki zakoni. Za vrednosti koeficientov dobimo Green-Kubove formule [13]. Z njimi računamo tokove in potem tudi gostoto entropijskega toka. V stacionarnem stanju razberemo iz divergence tega toka, koliko entropije na sekundo se rojeva na prostorninsko enoto. S tem je enolično in brez samovolje opredeljena ireverzibilnost pojava. Zubarev je te zamisli na splošno uporabil za formalno konstrukcijo lokalno ravnovesnih porazdelitev.

Da si bomo pomirili vest, si zamislimo toplotno izolirano kocko trdne snovi ($0 \leq x \leq L$, itd.), ki jo neenakomerno segrejemo. Če je na levi bolj topla kot na desni, steče toplotni tok proti desni, dokler se temperatura ne izravna. Vemo, da se pri tem entropija poveča. Kdor ima veselje z nalogami iz matematične fizike, naj naredi ves račun z naslednjim temperaturnim profilom,

$$T(x, t) = T_0 \left\{ 1 + a \cos \frac{\pi x}{L} \exp \left[- \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 D t \right] \right\}. \quad (23)$$

Najde ga kot rešitev enačbe za difuzijo toplote, $D \partial^2 T / \partial x^2 = \partial T / \partial t$, kjer je $D = \lambda / n c_p$.

Zgleda zdajle ne bomo potrebovali, ker hočemo samo zvedeti, ali se da povečanje entropije za lokalno ravnovesno porazdelitev izpeljati iz Gibbsove definicije (17). Ne da bi kaj računali, že vemo, da to ne more biti res. Saj smo ugotovili, da se pri nobenem toplotno izoliranem sistemu vrednost $\ln \rho$ ne more spreminjati. Tudi za lokalno ravnovesni ρ to drži. Vendar Zubarev ni obupal, ampak je prevalil krivdo na Gibbsovo definicijo. Domislil se je, da dobimo natanko tisto entropijo, ki jo zahteva termodinamika, če namesto

lokalno neravnovesnega ρ vstavimo ustrezni lokalno kanonični nadomestek, torej

$$S = -k \overline{\ln(N! \rho_{lk})} + \text{konst.} \quad (24)$$

Tako se torej za lokalno ravnovesna stanja definira entropija. S časom se večja, kot to določajo fenomenološki zakoni.

Nič nas ni treba biti sram, če nam je ob predrzni prilagoditvi definicije zaprlo sapo. Marsikaj v teoriji Zubareva še ni dokončno izdelano, tako da lahko počakamo, preden bomo zares zadovoljni – ali pa moramo sami kaj prispevati k razčiščenju. Občutek imamo, da se kar naprej vrtimo v začaranem krogu, čeprav nas obilica eksperimentalnih potrditev sili, da makroskopskim zakonom zaupamo. Saj res: kdo pa si drzne dvomiti o Ohmovem zakonu pri navadnem prevodniku, če je tok majhen? Ni nam sicer všeč, da zakona ne znamo z neoporečno logiko izpeljati iz osnovnih; vendar se z nazornimi prispodobami in tudi z nepopolnimi izpeljavami prepričujemo, da obstaja takšna povezava. Pri entropijskem zakonu smo si pravkar ogledali tak poskus.

Zdravnik, od katerega sem nekoč pričakoval bolj natančno napoved svoje prihodnosti, me je zavrnil, češ da medicina ni matematika. Seveda se strinjam in le dodal bi, da tudi fizika ni matematika. Na srečo še dolgo ne bo, tako da bo še veliko priložnosti za razpravljanje in nasprotovanja.

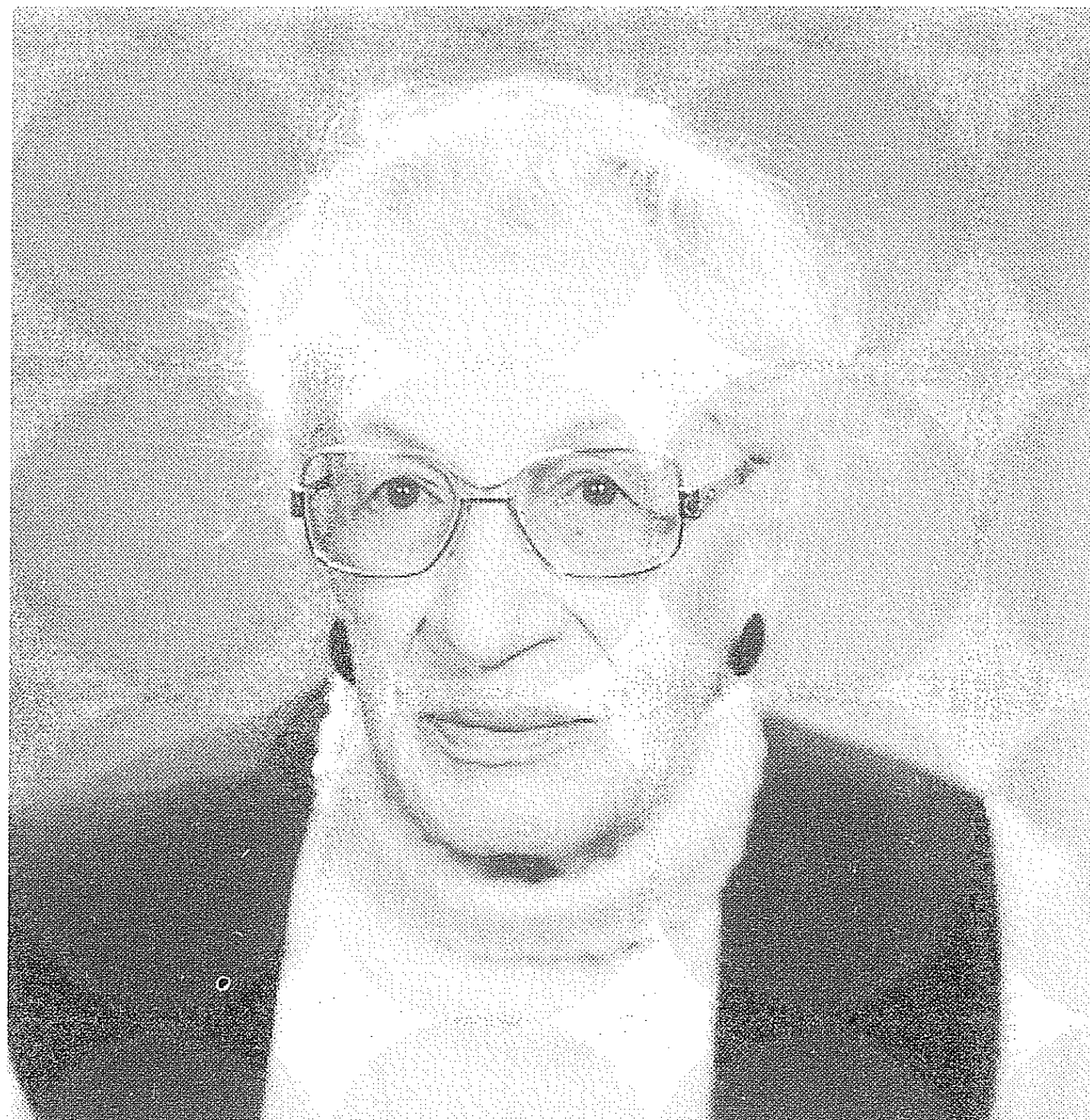
Ob pripravi rokopisa mi je Dušan Modic pomagal z vrsto nasvetov, moja Martina pa me je opozorila na nerodnosti jezika in prikazovanja. Obema lepa hvala!

LITERATURA

- [1] I. Kuščer in S. Žumer, *Toplota*, Društvo matematikov in fizikov, Ljubljana, 1987.
- [2] I. Kuščer, *Ergodijski problem v klasični statistični mehaniki*, Obz. mat. fiz. **9** (1962), 49.
- [3] I. Kuščer in A. Moljk, *Fizika, 2. del*, DZS, Ljubljana, 1992, str. 79.
- [4] A. Wehrl, *General properties of entropy*, Rev. Mod. Phys. **50** (1978), 221.
- [5] I. Kuščer in A. Kodre, *Matematika v fiziki in tehniki*, Društvo matematikov in fizikov, Ljubljana, 1994.
- [6] F. R. W. McCourt, J. J. M. Beenakker, W. E. Köhler in I. Kuščer, *Nonequilibrium Properties of Polyatomic Gases*, Oxford University Press, 1990, 1991.
- [7] H. Spohn, *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*, Springer, Berlin, 1991.
- [8] C. Cercignani, R. Illner in M. Pulvirenti, *The Mathematical Theory of Dilute Gases*, Springer, Berlin, 1994.
- [9] R. P. Feynman, R. B. Leighton in M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics, Vol. 1*. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1963 (poglavje 46).
- [10] L. D. Landau in E. M. Lifšic, *Statističeskaja fizika, čast 1 (Teoretičeskaja fizika, tom 5)*, Nauka, Moskva, 1976 (str. 45).
- [11] P. in T. Ehrenfest, *Mechanik der aus sehr zahlreichen diskreten Teilen bestehenden Systeme (Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik)*, Encyclopädie der mathematischen Wissenschaften, IV–32. Teubner, Leipzig, 1911.
- [12] D. N. Zubarev, *Neravnovesnaja statističeskaja termodinamika*, Nauka, Moskva, 1971.
- [13] I. Kuščer, *Termodinamika transportnih pojavov*, Obz. mat. fiz. **41** (1994), 65.

Gospa MARTA KLOPČIČ

Lani 21. julija je umrla v častitljivi starosti 96 let gospa Marta Klopčič, predmetna učiteljica matematike in fizike. Rodila se je v Šempetru v Savinjski dolini. Po končanem učiteljišču v Ljubljani je službovala najprej v Hajdini pri Ptuju. Ko je opravila diplomo na pedagoški fakulteti v Zagrebu, je poučevala matematiko in fiziko na meščanski šoli v Mariboru. Po končani vojni se je preselila v Ljubljano, kjer je učila na gimnaziji v Šubičevi ulici in nato na bežigrajski gimnaziji vse do upokojitve.



Ob ustanovitvi republiškega Društva matematikov, fizikov in astronomov leta 1949 je gospa Marta Klopčič pokazala živo zanimanje za strokovne načrte društva in tudi pripravljenost, da jih pomaga uresničiti. Prevezela je skrb za organizacijo strokovnih predavanj, ki naj bi predvsem vplivala na posodobljenje pouka matematike in fizike na naših šolah. Pri tem je poleg občudovanja vredne vztrajnosti in potrpežljivosti izpričala tudi nenevadno velik organizatorni dar. S svojo žlahtno osebnostjo pa ji je uspelo, da so načrtovana strokovna predavanja potekala v prijetnem ozračju in ob živahnem sodelovanju vseh udeležencev. Tako se je prvotno zamišljena Sekcija za dvig pouka in predavanja pod njenim vodstvom samodejno razvila v Aktiv matematikov in fizikov.

Ko je leta 1951 občni zbor društva izrekel gospe Klopčičevi posebno priznanje za njeno več kot uspešno uresničitev zastavljene naloge, je njena nemirna domiselnost snovala že nove oblike društvene dejavnosti. Naj omenimo le: strokovne ekskurzije, obzorna predavanja iz matematike, fizike in astronomije za širšo javnost, izobraževalne tečaje iz elementarne matematike, infinitezimalnega računa, verjetnosti in eksperimentalne fizike v sodelovanju s Centralno ljudsko univerzo, Collegium publicum za ekonometrijo in statistiko na Ekonomski fakulteti.

Strokovna društva so na Slovenskem značilni primeri združenj, ki jih generira avtentična civilna družba. Takšna združenja se ohranijo pri življenju le, če premorejo dovolj posameznikov, ki so pripravljeni za stvari splošnega družbenega pomena nesebično razdajati svoj um in srce. Dejstvo, da je Društvo matematikov, fizikov in astronomov že zelo blizu petdesetletnici svojega obsežnega delovanja, dokazuje, da mu takih „dobrih duš“ ni nikoli zmanjkovalo. Gospa Marta Klopčič je bila zagotovo ena od njih.

Niko Prijatelj

NOVE KNJIGE

Donald E. Knuth, 3:16. A-R Editions, Inc. Madison, Wisconsin 1991, 268 str.

Večina matematikov in fizikov pozna avtorja knjige z nenavadnim naslovom 3:16. To je profesor matematike in računalništva, izumitelj T_EXa, dobitnik več najvišjih nagrad in priznanj, ki se podeljujejo matematikom, trenutno profesor na Stanford University v Kaliforniji. Poleg prestižnih doktorskih naslovov univerz v Oxfordu in Parizu so mu na univerzah v Ameriki podelili več kot deset častnih doktoratov.

Večina uporabnikov T_EXa ne ve, da je D. E. Knuth človek izjemne širine, poglobljen kot mislec in učitelj, poznavalec jezikov in še marsikaj. Med drugim se amatersko ukvarja tudi s teologijo. Pripada eni od protestantskih ločin. V cerkvi kot laik vodi razrede, v katerih študirajo Sveto pismo. Del svojih komentarjev Svetega pisma je priobčil v knjižici, ki jo na kratko predstavljam.

Avtor je iz 59 knjig, ki so sestavni del Svetega pisma, izbral iz tretjega poglavja 16. verz. Sam je te verze prevedel iz hebrejskih, grških, latinskih in drugih predlog in svoje prevode primerjal z mnogimi obstoječimi prevodi v angleščino. Nato je vsakega od teh verzov na treh straneh knjige komentiral z mnogih vidikov: jezikovnega, zgodovinskega konteksta, v katerem so nastali, pomena za takratni čas, s posebnim poudarkom na teološkem pomenu verza. Vsak verz je celostransko kaligrafsko izpisan. Te risbe so izdelali svetovno znani slikarji kaligrafi.

Pri branju razlag svetopisemskih verzov se nisem mogel načuditi avtorjevi zavzetosti in genialnosti tudi na tem področju. Branje komentarjev je izreden intelektualni užitek, ne glede na versko orientacijo bralca. Kdor je v tej smeri povsem neizobražen, bo morda imel nekaj začetnih težav zaradi nepoznavanja duha in namena Svetega pisma in morebiti zaradi dolgoletne protiverske propagande.

Ko sem se z nekaj kolegi pogovarjal o tej knjigi, so nekateri zavihali nos, češ, kaj se je njemu, matematiku, treba ukvarjati s takimi stvarmi. Ta očitek je avtor tudi sam poznal, v predgovoru ga takole zavrne: „Znanstveniki dandanes redko pišejo o stvareh zunaj svojega ozkega strokovnega področja, še posebno pa se danes znanstveniku ne spodobi kaj več govoriti o verskih zadevah. Vendar čutim, da mnoge ljudi zanima, kaj moderni znanstvenik, kot sem jaz, misli o teoloških vprašanjih; razmeroma skromna literatura s tega področja me je spodbudila k pisanju pričujoče knjige. Mnogi največji matematiki preteklih dob, vključno s Pascalom, Newtonom, Eulerjem in Cauchyjem, so pisali o teologiji, zato me ni sram, da sledim njihovim stopinjam.”

Iz uvoda in epiloga h knjigi se jasno vidi, da je avtor matematik. Zahvaljujem se kolegu Borisu Horvatu, ki me je opozoril na to zanimivo delo.

Anton Suhadolc