[ИПМ им.М.В.Келдыша РАН](#) • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 25 за 2018 г.](#)

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Колесниченко А.В.

К построению неаддитивной термодинамики сложных систем на основе статистики Курадо-Тсаллиса

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Колесниченко А.В. К построению неаддитивной термодинамики сложных систем на основе статистики Курадо-Тсаллиса // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 25. 40 с. doi:**10.20948/prepr-2018-25**
URL: **http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-25**

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Российской академии наук

А.В. Колесниченко

К построению неаддитивной термодинамики сложных систем на основе статистики Курадо–Тсаллиса

Москва – 2018

Колесниченко А.В.

К построению неаддитивной термодинамики сложных систем на основе статистики Курадо-Тсаллиса.

В работе представлена логическая схема построения неэкстенсивной статистики и равновесной термодинамики на основе параметрического определения энтропии Тсаллиса. Проанализированы следствия ненормированного осреднения Курадо−Тсаллиса микроскопических физических величин в статистике Тсаллиса и его теоретическое и практическое значение при построении неаддитивной термодинамики аномальных q-систем. На основе информации различия Ратье−Каннаппана изучены спонтанные переходы между произвольными состояниями сложной системы и получена обобщённая H-теорема в неэкстенсивной статистике.

***Ключевые слова*: энтропия Тсаллиса, осреднение Курадо-Тсаллиса, равновесные термодинамические соотношения, информации различия Ратье−Каннаппана.

Aleksander Vladimirovich Kolesnichenko

To the construction of non-additive thermodynamics of complex systems on the basis of the statistics of Kurado-Tsallis.

The article presents a logical scheme for constructing non-extensive statistics and equilibrium thermodynamics, based on the parametric definition of the entropy of Tsallis. The consequences of the non-normalized averaging of the Kurado−Tsallis microscopic physical quantities in the Tsallis statistics are analyzed and its theoretical and practical significance in constructing non-additive thermodynamics of anomalous q-systems. Based on discrimination information of Rathie−Kannappan, spontaneous transitions between arbitrary states of a complex system and a generalized H-theorem in non-extensive statistics are considered.

Key words*:* entropy of Tsallis, averaging of Kurado-Tsallis, equilibrium thermodynamical relationships, discrimination information of Rathie-Kannappan.

Введение

Статистическая энтропия Больцмана–Гиббса и связанная с ней классическая статистическая механика являются чрезвычайно полезным инструментарием при изучении широкого круга простых систем. Эти физические системы, для которых, безусловно, целесообразно использовать классическую статистику и разработанные на её основе теории, можно условно охарактеризовать малым диапазоном пространственно-временных корреляций, марковостью случайных процессов (короткой памятью), аддитивностью шума, наличием интенсивного хаоса, эргодичностью динамических процессов, эвклидовостью геометрии фазового пространства, локальностью взаимодействия между элементами системы, линейностью (однородностью) уравнений Фоккера–Планка, гауссовостью вероятностных распределений. Такие системы хорошо описываются аддитивной энтропией Больцмана–Гиббса и, как правило, следуют экспоненциальному закону распределений.

Существует, однако, целый круг природных, искусственных и социальных систем, которые, в отличие от названных выше, характеризуются большой дальностью пространственно-временных корреляций, немарковостью процессов (длинной памятью), мультипликативностью шума, наличием слабого хаоса (исчезающий максимальный показатель Ляпунова), неэргодичностью динамических процессов, иерархичностью (обычно мультифрактальностью) геометрии фазового пространства, отдалённостью и глобальностью взаимодействий между элементами системы, нелинейностью (неоднородностью) уравнений Фоккера–Планка, наличием асимптотически степенных статистических распределений. Довольно широкий класс этих сложных систем (хотя далеко не всех) адекватно описывается неаддитивной статистикой, основанной на параметрической *энтропии Тсаллиса*.

История вопроса. Исследования в области механики неэкстенсивных (неаддитивных) систем приобрели в последнее время значительный интерес в связи с проявлениями неаддитивных свойств (для независимых подсистем) в аномальных физических явлениях. Это объясняется как новизной возникающих здесь общетеоретических проблем, так и важностью практических приложений (см. библиографию, представленную на сайте http:/tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm, которая постоянно обновляется). Начало систематического изучения в этом направлении связано с работой К. Тсаллиса (1988), в которой им была введена параметрическая формула статистической q-энтропии

$$S_q^T(p) = \frac{k_B}{q-1}\left(1 - \int p^q dz\right), \quad \int dz\, p = 1, \; 0 \le p < \infty.$$

С использованием аксиом теории вероятностей (Хинчин,1953, 1956), в работе (Abe, 2000) было дано аксиоматическое обоснование и доказана единственность энтропии Тсаллиса для дискретных систем. Хотя эта энтропия получила название энтропии Тсаллиса, в историческом плане появление выражения для q-энтропии можно проследить по более ранним работам (Harvda, Charvat, 1967; *Vaida*, 1968; Daroczy, 1970).

Выражение Тсаллиса не является единственным примером деформированной энтропии. Фундаментом исследований в области неэкстенсивной статистики, проводимых в настоящее время, являются нелогарифмические q-энтропии и информации различия Ратье−Каннаппана, зависящие от некоторого действительного числа q (так называемого параметра деформации) и обладающие неаддитивностью для независимых сложных систем. Для фрактальных систем это число связано с фрактальной размерностью, а для неэкстенсивных систем число q является мерой их неаддитивности.

Подробный анализ возможных типов неэкстенсивных статистик, основанных на различных обобщениях энтропии Тсаллиса, приводится, например, в работах (Landsberg, Tranah, 1980; Taneja, 1995). Предложенная ими классификация даёт четыре вида энтропий:

- классической энтропии Больцмана−Гиббса $S^{BG} = -k_B \int dz p \ln p$,
- q-энтропии Тсаллиса $S_q^T(p) = \frac{k_B}{q-1}\left(1 - \int p^q dz\right)$,
- энтропии $S_q^U = \frac{k_B}{q-1}\left[\left(\int p^q dz\right)^{-1} - 1\right]$ (Hotta, Joichi, 1999),
- энтропии Реньи $S_q^R = \frac{k_B}{1-q}\ln\left(dz \int p^q\right)$ (Renyi, 1970),

которая играет центральную роль в определении фрактальной размерности (см. Mandelbrot, 1977, 1982). Важно отметить, что диапазон применения разнообразных неэкстенсивных статистик в настоящее время постоянно расширяется, охватывая различные направления в науке, такие как космология, теория плазмы, квантовая механика и статистика, нелинейная динамика и фракталы, геофизика, биомедицина и многие другие.

В статье представлена логическая схема статистической модели неаддитивных систем, основанная на понятии q-энтропии Тсаллиса.

Как известно, большинство *простых систем*, находящихся в статистическом равновесии, следуют статистике Больцмана–Гиббса, для которой ключевыми являются следующие три положения:

(i) определение функционала энтропии $S^{BG}=-k_B\int dz\, p\ln p$

(при условии $\int dz\, p=1$ и $E=\int dz\, pH=const$ для канонического ансамбля);

(ii) экспоненциальная форма канонического распределения Гиббса

$$p=\mathrm{e}^{\{(F-H)/k_B T\}}=Z^{-1}\mathrm{e}^{\{-H/k_\mathrm{B}T\}},\text{ где } Z=\int d\boldsymbol{z}\,\mathrm{e}^{\{-H/\mathrm{k_B}T\}};$$

(iii) связь с термодинамическими потенциалами, например,

$$F\equiv -k_B T\ln Z \quad E=-k_B\partial\ln Z/\partial(T^{-1}).$$

Вместе с тем, многие сложные *аномальные системы* обнаруживают не экспоненциальные, а асимптотически *степенные статистические распределения (распределения Парето)*. Подобные степенные распределения типичны для систем, сложность которых обусловлена разделением полного статистического ансамбля на иерархическую последовательность подансамблей, соподчинённость которых и приводит к деформации статистических характеристик системы. При этом нарушается важнейшее термодинамическое свойство – аддитивность энтропии, которая для равновесных состояний в классическом случае является следствием локального взаимодействия между элементами системы. Это нарушение обусловлено ещё и с тем, что составные части в неаддитивных системах взаимодействуют глобально, чему способствует снижение симметрии системы, связанное с формированием коллективных мод интенсивных переменных, т.е. с их «подчинённостью» некоторым коллективным «эффективным» степеням свободы. Из сказанного следует, что статистические распределения переменных, характеризующих системы достаточной сложности, не могут максимизировать классическую энтропию Больцмана–Гиббса. Кроме этого, в отличие от простых *эргодических* систем (т.е. систем, элементы которых с равной вероятностью посещают все разрешённые микроскопические состояния, соотнесённые с соответствующим макроскопическим стационарным состоянием), сложные системы в большинстве случаев не только неэргодичны, но и далеки от этого состояния в некоторой конечной области фазового пространства.

Таким образом, возникает вопрос: какую энтропийную форму можно использовать для систем, которые посещают фазовое пространство более сложным образом, чем предписано эргодичностью? В связи с этим в работах (Tsallis,1988, 2009; Tsallis и др.,1998) было предложено сохраняющее основную идею Больцмана обобщение (классической статистической механики) для систем достаточной сложности, характеризующее состояние сложных систем некоторой другой «нелогарифмической» энтропией, удовлетворяющей принципу максимума. Суть предложенного обобщения касается, прежде всего, переосмысления первого из указанных выше положений статистики Больцмана−Гиббса и связана с введением новой формы энтропийного функционала, включающей так называемый показатель неаддитивности q. Именно, этот параметр характеризует целый класс различных статистик (термодинамик), соответствующих тем или иным статистически аномальным системам. Для фрактальных систем параметр q связан с фрактальной размерностью, а для неэкстенсивных − является мерой неаддитивности в свойстве псевдоаддитивности энтропии Тсаллиса (см. (17)). Согласно гипотезе Тсаллиса параметр деформации q связан с некоторыми дополнительными степенями свободы, присущими сложным системам, и должен определяться *a posteriori*.

Теория неэкстенсивных систем, основанная на энтропии Тсаллиса, в настоящее время интенсивно развивается, в основном зарубежными специалистами. Возникают многочисленные новые математические проблемы, требующие своего решения. В научной литературе доступны последовательные коллекции миниобзоров: (Tsallis, 1999; Abe, Okamoto, 2001; Grigolini и др., 2002; Kaniadakis и др., 2002, 2006; Sugiyama, 2004; Kaniadakis, Lissia, 2004; Gell-Mann, Tsallis, 2004; Swinney, Tsallis, 2004; Herrmann и др.,2004; Boon, Tsallis, 2005).

1. Основные определения, статистические характеристики и свойства энтропии Тсаллиса

В деформированной статистической механике для непрерывных величин при вероятностной нормировке

$$\int dz\, p(\boldsymbol{r}) = 1, \qquad 0 \le p < \infty \tag{1}$$

для *фазовой функции распределения* $p(\boldsymbol{r})$ (в общем случае эта функция может зависеть от времени t и от некоторого внешнего параметра a) энтропия Тсаллиса задаётся следующим функционалом

$$S_q(p) = \frac{k_B}{q-1}\left(1 - \int d\boldsymbol{z}\, p^q\right). \tag{2}$$

Здесь и далее везде область интегрирования совпадает со всем фазовым пространством и безразмерный элемент 6*N*-мерного пространства записывается в современной форме $d\boldsymbol{z}_N = (2\pi\hbar)^{-r}\prod_i^N (d\boldsymbol{q}_i d\boldsymbol{p}_i)$, где $\hbar$ − постоянная Планка, r − число степеней свободы. Энтропия Тсаллиса (2) может быть представлена также в следующих эквивалентных формах:

$$S_q(p) = -k_B\int d\boldsymbol{z}\, p^q \ln_q p = k_B\int d\boldsymbol{z}\, p \ln_q(p^{-1}) =$$

$$= k_B\langle \ln_q(p^{-1})\rangle = -k_B\langle \ln_{2-q} p\rangle = -k_B\langle \ln_q p\rangle_q, \tag{3}$$

при написании которых использовано осреднение

$$\langle A\rangle_q = \int d\boldsymbol{z}\, p^q A(\boldsymbol{r}), \tag{4}$$

с ненормированным распределением p^q для любой микроскопической физической величины $A(\boldsymbol{r})$, свойственное *статистике Курадо-Тсаллиса* (Curado, Tsallis, 1991), а также, так называемый, «деформированный логарифм»

$$\ln_q x \equiv \frac{x^{1-q}-1}{1-q} \quad (x \in \mathcal{R}^+;\ q \in \mathcal{R}), \tag{5}$$

обладающий, как легко убедиться, следующими свойствами:

$$\ln_q\left(\frac{1}{x}\right) = -\ln_{2-q} x,\ \ (x>0; \forall q);\quad \ln_q\left(\frac{1}{x}\right) = -\frac{1}{x^{1-q}}\ln_q x \quad (\forall x; \forall q). \tag{6}$$

Энтропийный индекс q (параметр деформации) в определении энтропии Тсаллиса (2) представляет собой вещественное число, принадлежащее области $q \in \mathcal{R}$. Такая деформация (в сравнении с классической статистикой) логарифмической функции в выражении для энтропии позволяет учитывать важную особенность поведения аномальных систем с длинной памятью и/или дальнодействующими взаимодействиями, когда вероятность реализации $p(\boldsymbol{r})$ больших значений состояний убывает (при $q > 1$) не экспоненциально быстро, а степенным образом. Благодаря этому статистика Тсаллиса описывает события, практически недостижимые в простых системах, характеризуемых статистикой Больцмана−Гиббса.

Легко показать, что в пределе слабой связи энтропия Тсаллиса (2) переходит в каноническую формулу классической статистики Гиббса. Действительно, в пределе $q \to 1$ имеем: $p^{q-1} = \mathrm{e}^{\{(q-1)\ln p\}} \to 1 + (q-1)\ln p$, и энтропия S_q сводится к

$$S(p) = \lim_{q \to 1} S_q(p) = -k_B \int dz (\ln p) p = S_{BG}.$$

Приведём некоторые определения и вытекающие из них основные свойства неаддитивной статистики.

Определение 1. Физический статистический ансамбль неэкстенсивных вероятностных систем реализуется двумя множествами:

а) множеством всех его состояний, описываемых фазовой плотностью распределения вероятностей $p(\boldsymbol{r}, a)$ [*)];

б) множеством микроскопических физических величин $A_j = A_j(\boldsymbol{r})$.

Определение 2. Взвешенное ненормированное среднее любой физической микроскопической величины $A(\boldsymbol{r})$ в состоянии с распределением $p(\boldsymbol{r})$ определяется (в *статистике Курадо−Тсаллиса*) соотношением (см. Havrda, Charvat,1967; Daroczy,1970; Curado, Tsallis,1991).

$$\langle A \rangle_q = \boldsymbol{E}_q\left[A(\boldsymbol{r})\right] \equiv \int dz A(\boldsymbol{r}) p^q, \quad 0 < \int p\, dz < \infty, \tag{7}$$

Определение 3. Флуктуация микроскопической величины $o(\boldsymbol{r})$ определяется выражением (Зарипов, 2004)

[*)] Здесь и далее будем считать, что распределение p удовлетворяет условию вероятностной нормировки (1).

$$\Delta_q\left[A\right]=A(\boldsymbol{r})-\boldsymbol{E}_q\left[A(\boldsymbol{r})\right]p^{1-q}, \quad \int dz\,\Delta_q\left[A\right]p^q=0. \tag{8}$$

Определение 4. Начальные и центральные моменты k-го порядка стохастической величины $A(\boldsymbol{r})$ равны

$$\alpha_{k,q}=\boldsymbol{E}_q\left[A^k\right]\equiv\int dzA^k p^q, \tag{9}$$

$$\mu_{k,q}=\boldsymbol{E}_q\left[\left(\Delta_q[A]\right)^k\right]\equiv\int dz\left(\Delta_q[A]\right)^k p^q. \tag{10}$$

При $k=2$ получим q-дисперсию

$$\mu_{2,q}=\boldsymbol{D}_q\left[A(\boldsymbol{r})\right]\equiv\int dz\left\{A(\boldsymbol{r})-\boldsymbol{E}_q\left[A(\boldsymbol{r})\right]p^{1-q}\right\}^2 p^q=$$

$$=\int dz[A(\boldsymbol{r})]^2 p^q-2\boldsymbol{E}_q\left[A(\boldsymbol{r})\right]\boldsymbol{E}\left[A(\boldsymbol{r})\right]+\left\{\boldsymbol{E}_q\left[A(\boldsymbol{r})\right]\right\}^2\int dzp^{2-q}. \tag{11}$$

Отметим, что в дискретном случае, при условии вероятностной нормировки $\sum_{i=1}^{W}p_i=1$, нужно в приведённых формулах произвести замену $\int dz\leftrightarrow\sum_{i=1}^{W}$.

В связи с **Определением 2** осреднённого значения микроскопической величины $A(\boldsymbol{r})$ отметим следующее: в неаддитивной статистике Тсаллиса возможно осреднение микроскопических физических величин по трём распределениям: p, p^q, $p^q/\int p^q dz$ (см. bibliography/ http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm). Первое осреднение соответствует статистике Тсаллиса (Tsallis,1988), второе (ненормированное) – статистике Курадо−Тсаллиса (Curado, Tsallis, 1991), наконец, третье – статистике Тсаллиса− Мендеса−Пластино (Tsallis и др., 1998). Эти способы осреднения, каждый из которых имеет, вообще говоря, свои преимущества и недостатки, определяют совершенно разные q-термодинамики, соответствующие тем или иным термодинамически аномальным системам. По этой причине вопрос об использовании того или иного способа осреднения в физических приложениях носит принципиальный характер, поскольку различия в определении средних значениях могут оказаться существенными при обработке экспериментальных данных. В связи с имеющимися значительными расхождениями в разных подходах возникает вопрос об адекватности использования разнообразных q-величин, связанных с различными способами осреднения. Получаемые при этом существенные несоответствия могут быть, по мысли ряда авторов, благополучно устранены путём использования статистики Тсаллиса–Мендеса–Пластино, когда осреднение $\boldsymbol{E}_q\left[A\right]\equiv\int dz A\mathcal{P}_q(\boldsymbol{r})$ производится по так называемому нормированному *эскортному распределению* вероятности $\mathcal{P}_q(\boldsymbol{r})\equiv p^q/\int dz\, p^q$ (см, например, Tsallis и др., 1998; Tsallis, 1999; Martinez и др., 2000).

Однако существует и иная точка зрения (которой следует автор данной работы), согласно которой единственно правильным осреднением является осреднение Курадо–Тсаллиса $\boldsymbol{E}_q\left[A(\boldsymbol{r})\right]\equiv\int dz A(\boldsymbol{r})p^q$ с ненормированным распределением p^q (см. Daroczy, 1970; Зарипов, 2002, 2006). Она обуславливается, в частности, тем, что только это распределение не приводит к переопределению понятия температуры q-системы, которая в этой статистике является интенсивным параметром, а не функционалом, как при иных определениях взвешенного среднего (другие соображения в пользу осреднения Курадо–Тсаллиса приведены в разделе 4 данной статьи). Благодаря этому в теории сложных q-систем не нарушается структура Лежандра термодинамической схемы.

Рассмотрим теперь некоторые свойства, вытекающие из Опредпления 2.

Ненормированность распределения Курадо–Тсаллиса. Для постоянной величины C имеем равенство

$$\boldsymbol{E}_q\left[C\right]=C\int p^q dz\,. \tag{12}$$

Отсюда, при $C=1$, следует ,что $\boldsymbol{E}_q\left[1\right]\equiv\langle 1\rangle_q\equiv\int p^q dz\neq 1$, что означает деформацию условия нормировки (1) с показателем q.

Положительность и выпуклость. Энтропия есть вещественный, неотрицательный и выпуклый функционал с максимумом (минимумом) при $q>0$ $(q<0)$.

$$S_q\left(p\right)>0\,, \tag{13}$$

$$S_q\left(a_1p_1+a_2p_2\right)\le a_1S_q\left(p_1\right)+a_2S_q\left(p_2\right), \qquad (14)$$

где $a_1+a_2=1$, $a_1>0, a_2>0$. Неравенство (8) есть неравенство Иенсена в теории выпуклых функций (Хартли и др., 1948).

Закон сложения микроскопических физических величин. Пусть закон сложения двух микроскопических величин для невзаимодействующих систем выражается в виде суммы $A_{12}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=A_1(\boldsymbol{r}_1)+A_2(\boldsymbol{r}_2)$. Тогда, согласно условию мультипликативности $p_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)=p_1\left(\boldsymbol{r}_1\right)p_2\left(\boldsymbol{r}_2\right)$, получим для средних величин равенство:

$$\boldsymbol{E}_q\left[A_{12}\right]=\boldsymbol{E}_q\left[A_1\right]\int d\boldsymbol{z}\,p_2^q+\boldsymbol{E}_q\left[A_2\right]\int d\boldsymbol{z}\,p_1^q. \qquad (15)$$

Если предположить, что физические величины являются неаддитивными согласно закону $A_{12}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=A_1(\boldsymbol{r}_1)+A_2(\boldsymbol{r}_2)-\varepsilon A_1(\boldsymbol{r}_1)A_2(\boldsymbol{r}_2)$ (здесь ε – постоянный множитель), то после осреднения имеем другое равенство

$$\boldsymbol{E}_q\left[A_{12}\right]=\boldsymbol{E}_q\left[A_1\right]\int d\boldsymbol{z}\,p_2^q+\boldsymbol{E}_q\left[A_2\right]\int d\boldsymbol{z}\,p_1^q-\varepsilon\boldsymbol{E}_q\left[A_1\right]\boldsymbol{E}_q\left[A_2\right]. \qquad (15^*)$$

Таким образом, в статистике Курадо−Тсаллиса имеет место неаддитивность средних величин даже при $\varepsilon=0$ в законе сложения физических величин (15^*).

Неаддитивность q-энтропии для независимых систем. Пусть состояние физической системы описывается совместным мультипликативным распределением $p_{12}=p_1p_2$ с $p_{12}=p_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)$, $p_1=p_1\left(\boldsymbol{r}_1\right)$, $p_2=p_2\left(\boldsymbol{r}_2\right)$, которое может зависеть от времени, а $\boldsymbol{r}_1$ и $\boldsymbol{r}_2$ относятся к двум независимым q-системам. Тогда общая энтропия даётся выражением

$$S_q\left(p_{12}\right)=\frac{k_B}{q-1}\left(1-\iint p_{12}^q dz_1dz_2\right), \qquad (16)$$

где условие нормировки

$$\iint p_{12}dz_1dz_2=\int p_1dz_1=\int p_2dz_2=1.$$

После подстановки распределения $p_{12} = p_1 p_2$ в (16) *получим свойство неаддитивности в статистике Тсаллиса для энтропии* двух независимых систем

$$S_q(p_{12}) = S_q(p_1) + S_q(p_2) + k_B^{-1}(1-q) S_q(p_1) S_q(p_2), \qquad (17)$$

где

$$S_q(p_1) = \frac{k_B}{q-1}\left(1 - \int p_1^q d\boldsymbol{z}_1\right), \quad S_q(p_2) = \frac{k_B}{q-1}\left(1 - \int p_2^q d\boldsymbol{z}_2\right).$$

Для случая $n \geq 2$ независимых систем формула (17) принимает более общий вид

$$S_q(p_{12\ldots n}) = \sum_{r=1}^{n} S_q(p_r) + k_B^{-1}(1-q) \sum_{r=1}^{n-1} S_q(p_r) S_q(p_n) +$$

$$+ k_B^{-1}(1-q)^2 \sum_{r=1}^{n-2} S_q(p_r) S_q(p_{n-1}) S_q(p_n) + \ldots +$$

$$+ k_B^{-(n-1)}(1-q)^{n-1} S_q(p_1) S_q(p_2) \ldots S_q(p_n). \qquad (18)$$

Равенства для q-энтропии зависимых систем. В общем случае зависимых систем имеем соотношения для распределений

$$p_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = p_1(\boldsymbol{r}_1) p_{2|1}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = p_2(\boldsymbol{r}_2) p_{1|2}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2),$$

$$p_1(\boldsymbol{r}_1) = \int d\boldsymbol{r}_2\, p_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2), \quad p_2(\boldsymbol{r}_2) = \int d\boldsymbol{r}_1\, p_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2). \qquad (19)$$

Согласно основным аксиомам Хаврда, Чарват и Дароши (Havrda, Charvat, 1967; Daroczy, 1970), обосновывавшим единственность энтропии Тсаллиса, имеет место следующее равенство для энтропий зависимых систем

$$S_q(p_{12}) = S_q(p_1) + S_q(p_2 | p_1). \qquad (20)$$

Условная энтропия с распределением $p_{2|1}$ определяется следующим образом:

$$S_q\left(p_{2|1}\right)=\frac{k_B}{q-1}\left[1-\int d\boldsymbol{z}_2\, p_{2|1}^q\left(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1\right)\right], \qquad (21)$$

и её среднее значение в (20) равно

$$S_q\left(p_2|p_1\right)=\int d\boldsymbol{z}_1\, S_q\left(p_{2|1}\right)p_1^q . \qquad (22)$$

Если $p_{2|1}=p_2$, то из (20) следует свойство псевдоаддитивности (17).

При реализации состояния с распределением p_2 получим энтропии

$$S_q\left(p_{12}\right)=S_q\left(p_2\right)+S_q\left(p_1|p_2\right), \qquad (23)$$

где

$$S_q\left(p_1|p_2\right)=\int d\boldsymbol{z}_2\, S_q\left(p_{1|2}\right)p_2^q, \quad S_q\left(p_{1|2}\right)=\frac{k_B}{q-1}\left[1-\int d\boldsymbol{z}_1\, p_{1|2}^q\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)\right].$$

Приравнивая выражения (20) и (23), имеем равенство

$$S_q\left(p_1\right)+S_q\left(p_2|p_1\right)=S_q\left(p_2\right)+S_q\left(p_1|p_2\right), \qquad (24)$$

которое по форме совпадает с соответствующим равенством статистической модели Больцмана–Гиббса.

Микроскопическая энтропия Тсаллиса. Флуктуации. Введём микроскопическую энтропию (Зарипов, 2001, 2004)

$$s_q\left(p\right)\equiv\frac{k_B}{1-q}\left(1-p^{1-q}\right). \qquad (25)$$

Тогда для её осреднённого значения S_q и флуктуации $\Delta_q[s_q]$ имеем

$$S_q(p)=\boldsymbol{E}_q\left[s_q(p)\right]\equiv\frac{k_B}{q-1}\left(1-\int p^q d\boldsymbol{z}\right), \qquad (26)$$

$$\Delta_q\left[s_q(p)\right]\equiv s_q(p)-S_q(p)p^{1-q}. \qquad (27)$$

Используя (26) и (27), можно получить выражение для функции распределения в виде

$$p(\boldsymbol{r}) = \frac{\left\{1 - \varepsilon\Delta_q[s_q]\right\}^{1/(1-q)}}{\left[1 + \varepsilon S_q)\right]^{1/(1-q)}}\,, \tag{28}$$

записанном через макроскопическую энтропию системы и флуктуацию микроскопической энтропии (здесь введено обозначение $\varepsilon \equiv k_B^{-1}(1-q)$). При учёте условия нормировки распределения $p(\boldsymbol{r})$, из (28) вытекает следующее соотношение для среднего значения q-энтропии S_q

$$\left[1 + \varepsilon S_q\right]^{1/(1-q)} = \int d\boldsymbol{z} \left\{1 - \varepsilon\Delta_q[s_q]\right\}^{1/(1-q)},$$

или

$$S_q = k_B \ln_q \int d\boldsymbol{z}\, \mathrm{e}_q^{\{-k_B^{-1}\Delta_q[s_q]\}}\,, \tag{29}$$

позволяющие находить q-энтропию Тсаллиса по известному значению флуктуации $\Delta[s_q]$ микроскопической энтропии. При написании (29) использованы формулы

$$\mathrm{e}_q^x \equiv [1 + (1-q)x]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad \text{и} \quad \mathrm{e}_q^{\ln_q x} = \ln_q \mathrm{e}_q^x = x\,.$$

При $q = 1$ из (28) и (29) следуют известные соотношения классической статистики.

Соотношение для q-флуктуации произвольной величины. Для флуктуации микроскопической величины $A(\boldsymbol{r})$

$$\Delta_q\left[A\right] = A(\boldsymbol{r}) - \boldsymbol{E}_q\left[A(\boldsymbol{r})\right]p^{1-q} \tag{30}$$

справедлива формула:

$$\varepsilon\Delta_q\left[A\right] = 1 - \left\{\frac{1 + \varepsilon \boldsymbol{E}_q\left[A\right]}{1 + \varepsilon S_q(p)}\right\} \times \left\{1 - \varepsilon\Delta_q\left[s_q(p)\right]\right\} - \varepsilon\left[s_q(p) - A\right], \tag{31}$$

которая, при $A \equiv s_q(p)$, сводится к формуле (26).

Неравенства. Энтропия Тсаллиса удовлетворяет следующим неравенствам:

$$S_q(p_{12}) \le S_q(p_1) + S_q(p_2), \quad S_q(p_2) \ge S_q(p_1|p_2);$$

$$S_q(p_1) \ge S_q(p_2|p_1), \quad (q \ge 1); \quad S_q(p) \le \frac{k_B}{q-1}\left[1 - \left(\int dz\right)^{1-q}\right], \quad (q > 0);$$

$$S_q(p) \ge \frac{k_B}{q-1}\left[1 - \left(\int dz\right)^{1-q}\right], \quad (q < 0); \quad S_q(p_1, p_2|p_3) \le S(p_1|p_2), \quad (q > 0);$$

$$S_q(p_1|p_2, p_3) \le S(p_1|p_3), \quad S_q(p_1|p_3) \le S_q(p_1|p_2) + S_q(p_2|p_1), \quad (q \ge 0);$$

$$\frac{S_q(p_1|p_3)}{S_q(p_1, p_3)} \le \frac{S_q(p_1|p_2)}{S_q(p_1, p_2)} + \frac{S_q(p_2|p_3)}{S_q(p_2, p_3)}, \quad (q \ge 1),$$

и некоторым другим, которые рассматриваются, например, в обзорах (Taneja,1989,1995,2005).

2. Деформированное каноническое распределение Гиббса и термодинамические соотношения для неаддитивных систем

Равновесные состояния сложных q-систем характеризуются распределениями, которые не меняются с течением времени. Каноническое распределение Гиббса в статистике Курадо−Тсаллиса может быть определено, как и в классическом случае, из экстремума (максимума − при $q > 1$ и минимума − при $q < 1$) q-энтропии

$$S_q(p) = k_B \frac{1 - \int dz\, p^q}{q-1} = -k_B \int dz\, p^q \ln_q p \qquad (32)$$

при выполнении следующих дополнительных условий: сохранения нормировки (1) распределения вероятности $p(\boldsymbol{r})$ и при заданном значении средней энергии

$$E_q \equiv \langle H \rangle_q = \int dz\, p^q H(\boldsymbol{r}) = const\,. \tag{33}$$

Здесь функция Гамильтона $H = H(\boldsymbol{r})$ задаётся математической моделью изучаемых физических процессов в системе.

Экстремум энтропии. Следуя методу множителей Лагранжа, найдём безусловный экстремум лагранжиана:

$$\mathscr{L}(p) = -k_B \int dz\; p^q \ln_q p - \beta \int dz\; p^q H - k_B \lambda \int dz\, p\,, \tag{34}$$

где β и λ суть множители Лагранжа. В соответствии с теоремой Лагранжа вероятное распределение p, «экстремизирующее» энтропию Тсаллиса $S_q(p)$ при указанных ограничениях, определяется из условия

$$\delta \mathscr{L}(p) = -\frac{k_B q}{q-1} \int dz\, p^{q-1} \delta p - q\beta \int dz\, p^{q-1} H \delta p - k_B \lambda \int dz\, \delta p = 0\,. \tag{35}$$

Отсюда следует *деформированное каноническое распределение Гиббса* с параметрами q, β

$$p(\boldsymbol{r}, \beta) = Z_q^{-1}(\beta) \left[1 - k_B^{-1}(1-q)\beta H(\boldsymbol{r}) \right]^{\frac{1}{1-q}}, \tag{36}$$

где

$$Z_q(\beta) \equiv \int dz \left[1 - k_B^{-1}(1-q)\beta H(\boldsymbol{r}) \right]^{\frac{1}{1-q}} \tag{37}$$

− обобщённый статистический интеграл, определяемый из условия нормировки (1); множитель Лагранжа β (обратная эффективная температура, $\beta = 1/T$) определяется из уравнения, получаемого подстановкой (36) в (33).

При условии $1 - k_B^{-1}(1-q)\beta H > 0$ и $q = 1$ из (36) и (37) следует каноническое распределение Гиббса

$$p(\boldsymbol{r},T)=Z^{-1}(T)\,\mathrm{e}^{\left\{-\frac{H(\boldsymbol{r})}{k_BT}\right\}},\quad Z(T)\equiv\int d\boldsymbol{z}\,\mathrm{e}^{\left\{-\frac{H(\boldsymbol{r})}{k_BT}\right\}} \tag{38}$$

для аддитивных систем, находящихся в термостате с температурой $T=1/\beta$.

Экспонента Тсаллиса. Распределение (36) удобно представить в классической форме Больцмана

$$p(\boldsymbol{r},\beta)=Z_q^{-1}(\beta)\left[1-k_B^{-1}(1-q)\beta H(\boldsymbol{r})\right]^{\frac{1}{1-q}}=Z_q^{-1}(\beta)\,\mathrm{e}_q^{\left\{-\frac{\beta H(\boldsymbol{r})}{k_B}\right\}}, \tag{39}$$

выражая стоящую в (39) степенную функцию $[..]^{1/1-q}$ через деформированную экспоненту Тсаллиса (q-экспоненциальную функцию), которая определяется следующим образом

$$\mathrm{e}_q^x\equiv[1+(1-q)x]_+^{\frac{1}{1-q}}=\begin{cases}0, & \textit{если}\ q<1\ \textit{и}\ x<-1/1-q;\\ [1+(1-q)x]^{1/1-q}, & \textit{если}\ q<1\ \textit{и}\ x\geq-1/1-q;\\ [1+(1-q)x]^{1/1-q}, & \textit{если}\ q>1\ \textit{и}\ x<-1/1-q,\end{cases} \tag{40}$$

где выражение, стоящее в квадратных скобках, либо положительно, либо равно нулю, $[y]_+\equiv\max(y,0)$. Легко проверить, что в пределе $q\to1$ эта функция принимает стандартный вид:

$$\mathrm{e}_1^x\equiv\lim_{q\to1+0}\mathrm{e}_q^x=\lim_{q\to1-0}\mathrm{e}_q^x=\mathrm{e}^x\qquad(\forall x). \tag{41}$$

Рассмотрим более детально приведённое выше определение функции e_q^x. Для $q<1$, экспонента Тсаллиса исчезает для $x\leq-1/(1-q)$, непрерывна и монотонно увеличивается от 0 до ∞, когда x увеличивается от $-1/(1-q)$ до

∞ [†]. Для $q>1$, q-экспоненциальная функция непрерывна и монотонно увеличивается от 0 до ∞, когда x увеличивается от $-\infty$ до $1/(1-q)$, оставаясь расходящейся для $x>1/(q-1)$. Из графиков экспоненты Тсаллиса, приведённых на Рис. 1−4, видно, что с ростом параметра деформации q- кривые функции функции e_q^x смещаются вверх.

Используя определения функций $\ln_q x$ и e_q^x, можно убедиться, что имеют место следующие соотношения:

$$\mathrm{e}_q^{\ln_q x} = \ln_q \mathrm{e}_q^x = x\,, \quad \mathrm{e}_{2-q}^{-x} = \frac{1}{\mathrm{e}_q^x}\,, \quad \mathrm{e}_{1+q}^{x}\,\mathrm{e}_{1-q}^{-x} = 1\,, \quad (\forall x; \forall q), \tag{42}$$

$$(\mathrm{e}_q^x)^a = \mathrm{e}_{1-(1-q)/a}^{ax}\,, \quad (\mathrm{e}_q^x)^q\,\mathrm{e}_{(1/q)}^{-qx} = 1\,, \quad (\forall x; \forall q)\,, \tag{43}$$

и соответственно для деформированного логарифма

$$-\ln_{2-q}(x^{-1}) = \ln_q x \quad (x>0)\,, \quad \ln_{1+q} x + \ln_{1-q}(x^{-1}) = 0 \quad (\forall x; \forall q)\,, \tag{44}$$

$$\ln_q\left(\frac{x}{y}\right) = \frac{1}{y^{1-q}}\left(\ln_q x - \ln_q y\right) \quad (\forall (x,y); \forall q)\,, \tag{45}$$

$$\ln_q\left(\frac{1}{x}\right) = -\frac{1}{x^{1-q}}\ln_q x \quad (\forall x; \forall q)\,, \tag{46}$$

так же как

$$\frac{d}{dx}\mathrm{e}_q^x = (\mathrm{e}_q^x)^q \qquad (\forall q)\,, \qquad \frac{d}{dx}\ln_q x = \frac{1}{x^q} \quad (x>0; \forall q). \tag{47}$$

Обобщённые термодинамические соотношения. Подставляя распределение (36) в (32), получим экстремальное значение q-энтропии Тсаллиса

[†] В случае $q<0$ следует позаботиться о том, чтобы исключить все состояния, вероятность которых не является строго положительной, в противном случае энтропия $S_q(p)$ будет расходиться.

$$S_q = \frac{k_B}{q-1}\left[1-\int dz \frac{Z_q^{1-q}p}{1-k_B^{-1}(1-q)\beta H(\boldsymbol{r})}\right]=$$

$$=\beta\left[-\frac{k_B\left(1-Z_q^{1-q}\right)}{\beta(1-q)}+\int dz \frac{Z_q^{1-q}pH(\boldsymbol{r})}{1-k_B^{-1}(1-q)\beta H(\boldsymbol{r})}\right]=$$

$$=\beta\left[\int dz H(\boldsymbol{r})p^q+\frac{k_B\left(1-Z_q^{1-q}\right)}{\beta(q-1)}\right]=\beta\left[E_q+\frac{k_B\left(Z_q^{1-q}-1\right)}{\beta\,(1-q)}\right]=\beta\,(E_q-F_q)\,, \quad (48)$$

где

$$F_q(\beta)=-\left(\frac{k_B}{\beta}\right)\frac{Z_q^{1-q}-1}{1-q}\equiv-\left(\frac{k_B}{\beta}\right)\ln_q Z_q \quad (49)$$

– так называемая *деформированная свободная энергия Гельмгольца*, которая, как легко проверить, при $q=1$ совпадает со свободной энергией аддитивной системы $F=-k_B T\ln Z$. Заметим, что с учётом функции F_q равновесное распределение (36) может быть записано в эквивалентном виде

$$p(\boldsymbol{r},\beta)=\left\{\left[1-k_B^{-1}(1-q)\beta H(\boldsymbol{r})\right]/\left[1-k_B^{-1}(1-q)\beta F_q\right]\right\}^{1/(1-q)}=$$

$$=\mathrm{e}_q^{\{-\beta H(\boldsymbol{r})/k_B\}}/\,\mathrm{e}_q^{-\{\beta F_q/k_B\}}=\mathrm{e}_q^{\{-\beta H/k_B\}\ominus_q\{-\beta F_q/k_B\}}, \quad (50)$$

где $\quad x\ominus_q y\equiv\dfrac{x-y}{1+(1-q)y}, \quad (x\ominus_1 y\equiv x-y, \quad x\ominus_q 0\equiv x)$.

Из (48), с учётом (49), вытекают дифференциальные термодинамические соотношения

$$\beta=\frac{\partial S_q}{\partial E_q}, \quad F_q=E_q-\frac{S_q}{\beta}=-\frac{k_B}{\beta}\ln_q Z_q, \quad E_q=-k_B\frac{\partial \ln_q Z_q}{\partial\beta}=\frac{\partial\beta F_q}{\partial\beta}, \quad (51)$$

$$C_q = -\beta \frac{\partial S_q}{\partial \beta} = -\beta^2 \frac{\partial E_q}{\partial \beta} = -\beta^2 \frac{\partial^2 F_q}{\partial \beta^2}, \qquad (51^*)$$

эквивалентные соответствующим соотношениям классической термодинамики (здесь C_q − обобщённая теплоёмкость).

Вторая вариация функционала (34) имеет вид:

$$\delta^2 \mathcal{L} = -k_B q \left\{ \int dz \left[1 - (1-q)\beta H(\boldsymbol{r}) \right] p^{q-2} \delta^2 p \right\}. \qquad (52)$$

Из (52) следует, что экстремум соответствует максимуму и минимуму рассматриваемого функционала, соответственно при $q > 0$ $\left(\delta^2 \mathcal{L} < 0\right)$ и $q < 0$ $\left(\delta^2 \mathcal{L} > 0\right)$. Таким образом, распределение (44) максимизирует или минимизирует энтропию Тсаллиса.

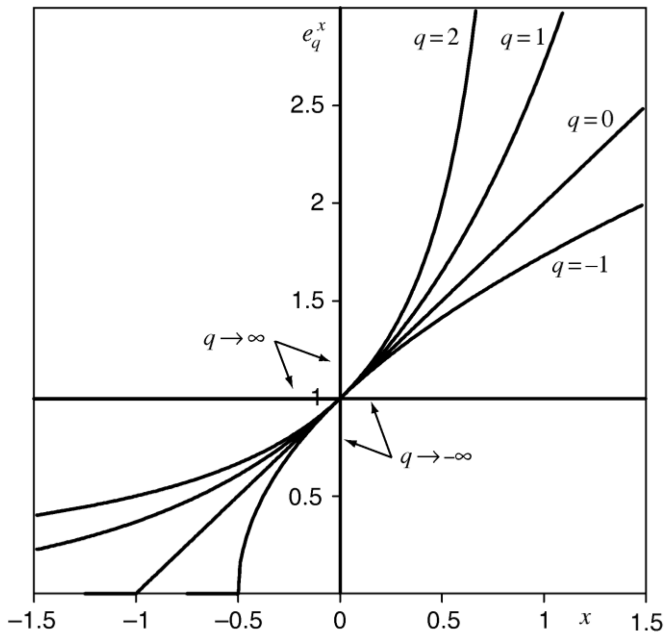

Рис.1. q - экспоненциальная функция $\exp_q x$ для типичных значений q. При $q > 1$ она определена в интервале $(-\infty, (q-1)^{-1})$; она расходится, если $x \to (q-1)^{-1}$. При $q < 1$ она определяется для $\forall x$, и обращается в нуль для всех $x < -(1-q)^{-1}$. В пределе $x \to 0$, $\exp_q x \sim 1 + x$ $\forall q$ (Tsallis, 2009).

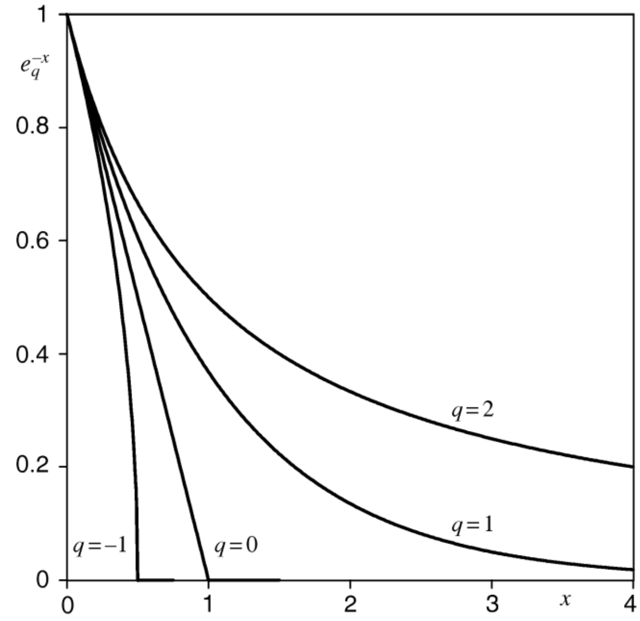

Рис.2. q - экспоненциальная функция $\exp_q(-x)$ для типичных значений q. При $q > 1$ она обращается в нуль, как$[(q-1)x]^{-1/(q-1)}$ при $x \to \infty$. При $q < 1$ она обращается в нуль при $x > (1-q)^{-1}$ (Tsallis, 2009).

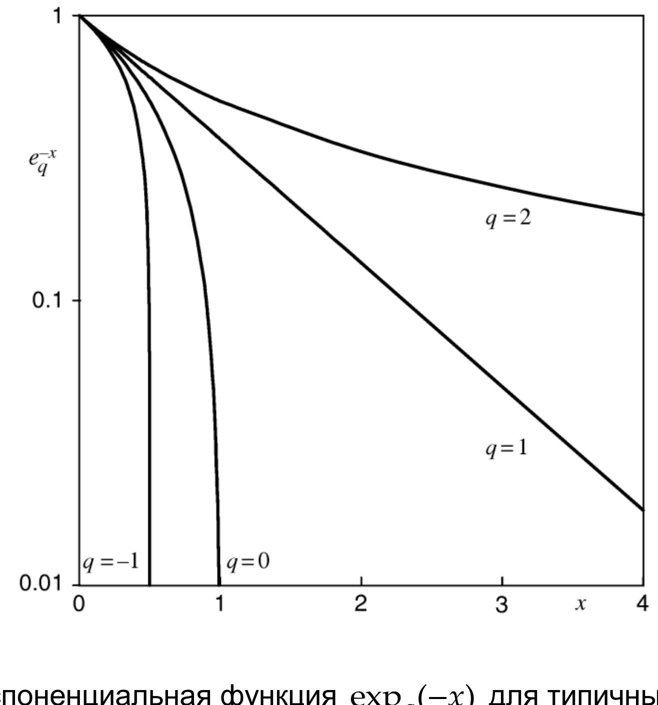

Рис.3. q - экспоненциальная функция $\exp_q(-x)$ для типичных значений q (в log линейном масштабе). Она выпуклая (вогнутая), если $q > 1$ ($q < 1$). При $q < 1$она имеет вертикальную асимптоту при $x = (1-q)^{-1}$ (Tsallis, 2009).

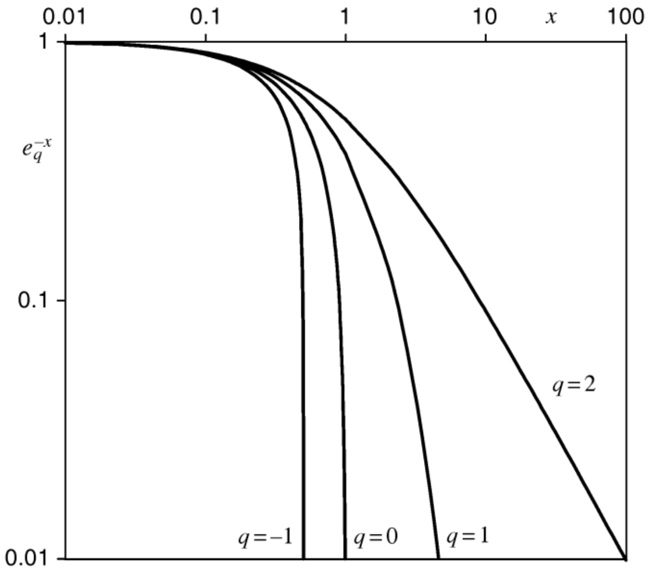

Рис.4. q - экспоненциальная функция $\exp_q(-x)$ для типичных значений q (в log- log масштабе) При $q>1$ она имеет асимптотический наклон равен $-1/(1-q)$ (Tsallis, 2009).

Равновесная микроскопическая q-энтропия и флуктуации. Рассмотрим связь между флуктуациями функции Гамильтона и микроскопической q-энтропией. Перепишем равновесное распределение (2.50)

$$p=\left\{\left[1-\varepsilon(q)\beta H(\boldsymbol{r})\right]/\left[1-\varepsilon(q)\beta F_q\right]\right\}^{1/(1-q)} \tag{53}$$

в эквивалентном виде (здесь $\varepsilon(q)\equiv k_B^{-1}(1-q)$). С учётом термодинамического соотношения $S_q=\beta(E_q-F_q)$ получим

$$p=\left\{\left[1-\varepsilon(q)\beta H(\boldsymbol{r})\right]/\left[1-\varepsilon(q)\beta E_q+\varepsilon(q)S_q\right]\right\}^{1/(1-q)}. \tag{54}$$

После возведения (53) и (54) в степень $(1-q)$ после простых преобразований легко получить следующие выражения для равновесной микроскопической q-энтропии и её флуктуаций

$$s_q(p)=\frac{\beta(H-E_q)}{1-k_B^{-1}(1-q)F_q}, \tag{55}$$

$$s_q(p) - S_q(p)p^{1-q} = \beta\left(H - E_q p^{1-q}\right), \qquad (56)$$

где

$$s_q(p) = \frac{k_B}{1-q}(1-p^{1-q}) \qquad (57)$$

− микроскопическая q-энтропия. При $q=1$ равенство (56) даёт известную взаимосвязь флуктуаций микроскопической энтропии Больцмана−Гиббса с флуктуациями функции Гамильтона

$$s(p) - \boldsymbol{E}\left[s\right] = \beta\left(H - \boldsymbol{E}\left[H\right]\right). \qquad (58)$$

Здесь p − классическое каноническое распределение Гиббса, а $s(p) \equiv -k_B \ln p$.

Заметим, что флуктуации величин $s_q(p)$ и H в (56) совпадают с определением флуктуации произвольной физической величины $A(\boldsymbol{r})$ в неэкстенсивной статистической механике в виде

$$\Delta_q\left[A\right] = A - \boldsymbol{E}_q\left[A\right]p^{1-q}, \quad \boldsymbol{E}_q\left[A\right] \equiv \int d\boldsymbol{z} A p^q . \qquad (59)$$

Соответственно, для флуктуации функции Гамильтона и микроскопической энтропии и имеем важные равенства

$$\boldsymbol{E}_q\left[\Delta_q H\right] = \int d\boldsymbol{z}\left\{H - \boldsymbol{E}_q\left[H\right]p^{1-q}\right\}p^q = 0,$$

$$\boldsymbol{E}_q\left[\Delta_q s_q(p)\right] = \int d\boldsymbol{z}\left\{s_q(p) - \boldsymbol{E}_q\left[s_q(p)\right]p^{1-q}\right\}p^q = 0 . \qquad (60).$$

3. Большое каноническое распределение Гиббса и термодинамические соотношения в q-статистике

Рассмотрим теперь равновесное состояние неэкстенсивной многокомпонентной системы, обменивающейся с окружением энергией и частицами сорта k ($k = 1, 2, \ldots, R$). Используя вариационный метод, находим соответствующее распределение. Для этого вычислим экстремум энтропии при заданных средней энергии

$$E_q = \sum_N \sum_{k=1}^{R} \int d\boldsymbol{z}_N \varepsilon_k(\boldsymbol{r}) N_k(\boldsymbol{r}) p^q = const , \qquad (61)$$

среднем числе частиц k - го сорта

$$\langle N_k \rangle_q = \sum_N \int dz_N \, p^q N_k(\boldsymbol{r}) = const\,, \tag{62}$$

и при сохранении нормировки $\sum\limits_N \int dz_N \, p(\boldsymbol{r}) = 1$. Здесь $N_k(\boldsymbol{r})$ – число частиц сорта k с энергией ε_k; $dz_N \equiv \dfrac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \prod\limits_{i=1}^{N} d\boldsymbol{q}_i d\boldsymbol{p}_i$.

Используя множители Лагранжа β, $\beta\mu_k$ (μ_k– величина, имеющая смысл химического потенциала частиц сорта α) и τ, находим безусловный экстремум функционала (удлинённой энтропии Тсаллиса)

$$\mathcal{L} = -k_B \int dz \, p^q \ln_q p + \sum_N \left\{ \beta \sum_k^R \int dz \, \varepsilon_k N_k p^q + \beta\mu_k \sum_k^R \int dz \, N_k p^q - k_B \tau \int dz \, p \right\}. \tag{63}$$

Из условия $\delta\mathcal{L} = 0$ получим уравнение

$$\left[\frac{k_B q}{1-q} - q\beta \sum_k^R N_k (\varepsilon_k - \mu_k) \right] p^{q-1} = k_B \tau\,,$$

решение которого даёт следующее нормированное q-распределение (*большое каноническое q-распределение Гиббса*)

$$p(\boldsymbol{r}) = Z_q^{-1}(\beta, \{\mu_k\}) \left[1 - k_B^{-1}(1-q)\beta \sum_k^R N_k (\varepsilon_k - \mu_k) \right]^{1/(1-q)} =$$

$$= Z_q^{-1}(\beta, \{\mu_k\}) \, \mathrm{e}_q^{\left\{ -k_B^{-1} \beta \sum\limits_k^R N_k(\boldsymbol{r}) \left[\varepsilon_k(\boldsymbol{r}) - \mu_k \right] \right\}}. \tag{64}$$

Здесь

$$Z_q = \sum_N \int dz_N \, \mathrm{e}_q^{\left\{ -k_B^{-1} \beta \sum\limits_k^R N_k(\boldsymbol{r}) \left[\varepsilon_k(\boldsymbol{r}) - \mu_k \right] \right\}} \tag{65}$$

− статистический интеграл. В пределе $q \to 1$ из (64) следует распределение для обобщённого ансамбля Гиббса классической статистики

$$p(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\left\{-k_B^{-1}\beta\sum_k^R N_k(\boldsymbol{r})\left[\varepsilon_k(\boldsymbol{r})-\mu_k\right]\right\}} / \int dz\,\mathrm{e}^{\left\{-k_B^{-1}\beta\sum_k^R N_k(\boldsymbol{r})\left[\varepsilon_k(\boldsymbol{r})-\mu_k\right]\right\}}. \tag{66}$$

Следует отметить, что в классической статистике Максвелла–Больцмана перестановка одинаковых частиц даёт одно и то же состояние, и поэтому в случае неаддитивной статистики выражение (64) необходимо переписать в виде:

$$p(\boldsymbol{r}) = \frac{\sum\limits_{n_1}\sum\limits_{n_2}\ldots\sum\limits_{n_r}\dfrac{1}{\prod\limits_{\alpha}^{r} n_\alpha!}\exp_q\left\{-k_B^{-1}\beta\sum\limits_k^R N_k(\boldsymbol{r})\left[\varepsilon_k(\boldsymbol{r})-\mu_k\right]\right\}}{\sum\limits_{n_1}\sum\limits_{n_2}\ldots\sum\limits_{n_r}\dfrac{1}{\prod\limits_{\alpha}^{r} n_\alpha!}\int dz\exp_q\left\{-k_B^{-1}\beta\sum\limits_k^R N_k(\boldsymbol{r})\left[\varepsilon_k(\boldsymbol{r})-\mu_k\right]\right\}}. \tag{67}$$

Термодинамика многокомпонентной неаддитивной среды. Подстановка распределения (64) в (3) даёт экстремальное значение энтропии Тсаллиса

$$S_q = \beta\left(E_q - \sum_k^R \mu_k \langle N_k\rangle_q\right) + k_B\frac{Z_q^{1-q}-1}{1-q}. \tag{68}$$

Если ввести деформированный термодинамический потенциал

$$\Omega_q \equiv -\left(\frac{k_B}{\beta}\right)\frac{Z_q^{1-q}-1}{1-q} = -\left(\frac{k_B}{\beta}\right)\ln_q Z_q, \tag{69}$$

то выражения (64) и (68) можно представить в виде:

$$p(\boldsymbol{r},\beta,\{\mu_k\}) = \mathrm{e}_q^{\left\{-k_B^{-1}\beta\sum_k^R N_k(\varepsilon_k-\mu_k)\right\}} / \mathrm{e}_q^{\left\{-k_B^{-1}\beta\Omega\right\}}, \tag{70}$$

$$S_q = \beta\left(E_q - \sum_k^R \mu_k \langle N_k \rangle_q - \Omega_q \right). \qquad (71)$$

При дифференцировании (71) можно получить все соотношения равновесной q-термодинамики для систем с переменным числом частиц

$$dS_q = \beta\left(dE_q - \sum_k^R \mu_k d\langle N_k \rangle_q \right),$$

$$\langle N_k \rangle_q = -\frac{\partial(\beta\Omega_q)}{\partial\mu_k}, \quad E_q - \sum_k^R \mu_k \langle N_k \rangle = \frac{\partial\left(\beta\Omega_q\right)}{\partial\beta}. \qquad (72)$$

Подчеркнём, что все введённые выше понятия и соотношения обусловлены процедурой нахождения равновесного распределения на основе принципа Джейнса максимума параметрической энтропии Тсаллиса и сохраняют применимость для весьма широкого круга аномальных явлений, описываемых неаддитивной статистической механикой.

Наконец, исследуя вторую вариацию функционала (63), находим максимальность (минимальность) энтропии при $q > 0$ $(\delta^2 \mathcal{L} < 0)$ и $q < 0$ $(\delta^2 \mathcal{L} > 0)$.

Таким образом, вариационный принцип Джейнса максимума энтропии позволяет определять равновесные распределения и для q-систем. Причём экстремум рассматриваемых функционалов зависит от знака числа q.

4. Термодинамическое равновесие двух неаддитивных систем в статистике Курадо−Тсаллиса

Рассмотрим термодинамическое равновесие двух независимых q-систем с энтропиями $S_{q1} = S_q\left(p_1\right)$ и $S_{q2} = S_q\left(p_2\right)$, представляющих собой общую замкнутую систему с постоянными значениями энтропии $S_q = S_q\left(p_{12}\right)$ при $p_{12}\left(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\right) = p_1\left(\boldsymbol{r}_1\right) p_2\left(\boldsymbol{r}_2\right)$ и энергии E_q. Согласно свойству неаддитивности (17) энтропий в статистике Тсаллиса для энтропии двух независимых систем, энтропию совокупной системы можно переписать в следующем виде:

$$S_q = S_{q1}\left[1+\varepsilon S_{q2}\right] + S_{q2}\left[1+\varepsilon S_{q1}\right] - \varepsilon S_{q1} S_{q2}, \tag{73}$$

где $k_B^{-1}(1-q) \equiv \varepsilon(q) = \varepsilon$.

Для нахождения осреднённой энергии E_q совокупной q-системы воспользуемся распределением (53)

$$p(\boldsymbol{r}) = \left\{\left[1-\varepsilon\beta H(\boldsymbol{r})\right] / \left[1-\varepsilon\beta F_q\right]\right\}^{1/(1-q)}.$$

При учёте условия мультипликативности

$$p_{12}\left(\beta H\right) = p_1\left(\beta H_1\right) p_2\left(\beta H_2\right)$$

получим равенство для совокупного гамильтониана двух независимых систем

$$H\left(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\right) = H_1\left(\boldsymbol{r}_1\right) + H_2\left(\boldsymbol{r}_2\right) - \varepsilon\beta H_1\left(\boldsymbol{r}_1\right) H_2\left(\boldsymbol{r}_2\right). \tag{74}$$

Аналогичное равенство имеет место и для свободных энергий

$$F_q = F_{q1} + F_{q2} - \varepsilon\beta F_{q1} F_{q2}. \tag{75}$$

Осреднение равенства (74) приводит к псевдоаддитивному закону для средней энергии двух независимых q-систем в статистике Курадо−Тсаллиса (сравни с (15*))

$$E_q = E_{q1}(1+\varepsilon S_{q2}) + E_{q2}(1+\varepsilon S_{q1}) - \varepsilon E_{q1} E_{q2}. \tag{76}$$

Далее варьируем (73) и (76) и получим равенства

$$\delta S_q = 0 = \delta S_{q1}\left[1+\varepsilon S_{q2}\right] + \delta S_{q2}\left[1+\varepsilon S_{q1}\right], \tag{77}$$

$$\delta E_q = 0 = \delta E_{q1}(1-\varepsilon\beta F_{q2}) + \delta E_{q2}(1-\varepsilon\beta F_{q1}) + \varepsilon(E_{q1}\delta S_{q2} + E_{q2}\delta S_{q1}), \tag{78}$$

из которых вытекает условие

$$\frac{1}{1+\varepsilon S_{q1}}\frac{\delta S_{q1}}{\delta E_{q1}}\left[1-\varepsilon\left(\beta F_{q1}+E_{q1}\frac{\delta S_{q2}}{\delta E_{q2}}\right)\right]=\frac{1}{1+\varepsilon S_{q2}}\frac{\delta S_{q2}}{\delta E_{q2}}\left[1-\varepsilon\left(\beta F_{q2}+E_{q2}\frac{\delta S_{q1}}{\delta E_{q1}}\right)\right]. \tag{79}$$

Условие (79) удовлетворяется тождественно только при выполнении равенства

$$\frac{\delta S_{q1}}{\delta E_{q1}}\equiv\frac{\delta S_{q2}}{\delta E_{q2}}\equiv\beta, \tag{80}$$

означающего равенство температур двух независимых систем при их тепловом контакте. Параметр β является интенсивной величиной и играет роль обратной температуры $\beta\equiv 1/T$.

Если $q=1$, то (53) совпадает с каноническим распределением Гиббса $p=\mathrm{e}^{\{(F-H)/k_B T\}}$ и законы композиции рассматриваемых средних и микроскопических величин становятся аддитивными.

Важный аргумент в пользу осреднения Курадо−Тсаллиса. Начиная с работы (Tsallis и др.,1998), имеет место дискуссия по методу осреднения функции Гамильтона $H=H(\boldsymbol{r})$ и, соответственно, по закону композиции осреднённых энергий двух независимых q-систем. В основном предполагается аддитивность функции Гамильтона

$$H(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=H_1(\boldsymbol{r}_1)+H_2(\boldsymbol{r}_2). \tag{81}$$

Тогда осреднение (81) нормированным *эскортным распределением Тсаллиса−Мендеса−Пластино* $\mathcal{P}(p)=p^q/\int dz\,p^q$ приводит к следующему закону аддитивности осреднённых энергий:

$$E_q=E_{q1}+E_{q2},\quad E_q=\int dz H\mathcal{P},\qquad E_{qi}=\int dz H_i\mathcal{P},\ (i=1,2). \tag{82}$$

Варьирование $\delta S_q=0$ и $\delta E_q=0$ для замкнутой общей системы с постоянными значениями энтропии и энергии приводит к равенству (77), а для осреднённых энергий (82) имеем равенство

$$\delta E_q = 0 = \delta E_{q1} + \delta E_{q2} \,. \tag{83}$$

В итоге, учитывая (77) и (83), получим соотношение

$$\frac{1}{1+k_B^{-1}\left(1-q\right)S_{q1}}\frac{\delta S_{q1}}{\delta E_{q1}} = \frac{1}{1+k_B^{-1}\left(1-q\right)S_{q2}}\frac{\delta S_{q2}}{\delta E_{q2}}\,, \tag{84}$$

из которого вытекает равенство так называемых физических температур

$$T_{ph}(p) \equiv \left[1+k_B^{-1}\left(1-q\right)S_q\right]T, \qquad \frac{\delta S_q}{\delta E_q} = \frac{1}{T} \tag{85}$$

для обеих независимых систем.

Такое переопределение эффективной температуры в статистике Тсаллиса−Мендеса−Пластино противоречит основным принципам термодинамики, где *абсолютная температура* T *является интенсивным параметром*, *а не функционалом* $T_{ph}(p)$. Поэтому для модели с мерой Тсаллиса единственно правильным осреднением, как было уже оговорено выше, является осреднение с ненормированным распределением p^q, которое, собственно, и использовалось при аксиоматическом обосновании нелогарифмической энтропии S_q в цитированных выше работах (Havrda, Charvat, 1967; Daroczy,1970).

5. Физическая информация различия Ратье−Каннаппана в статистической теории Тсаллиса

Информация различия Кульбака−Лейблера в простой стохастической сисеме может быть обобщена для q-системы (Tsallis, 1998; Borland и др.,1998). Наряду с энтропией Тсаллиса к наиболее существенным статистическим характеристикам сложной динамической q-системы относится *информация различия Ратье−Каннаппана* (Rathie, Kannappan, 1972), которая, являясь функционалом, определяет меру статистической упорядоченности в микросостояниях системы с распределением $p(\boldsymbol{r},a)$ относительно состояния с распределением $u(\boldsymbol{r},a)$ ‡).

---

‡) При написании данного раздела автор опирался на монографии (Зарипов, 2002; Tsallis, 2009).

Предположим, что система переходит от состояния $p(\boldsymbol{r},a)$ к состоянию $u(\boldsymbol{r},a)$ и статистические наблюдения ведутся относительно состояния $p(\boldsymbol{r},a)$. В теории информации q-систем подобный переход по определению характеризует *информацию различия Ратье−Каннаппана*

$$I_q\left(p:u\right)=\frac{k_B}{1-q}\left(1-\int dz p^q u^{1-q}\right)=$$

$$=-k_B\int dz p(\boldsymbol{r})\left[\ln_q\left(\frac{u(\boldsymbol{r})}{p(\boldsymbol{r})}\right)\right]=k_B\int dz p(\boldsymbol{r})\frac{\left[p(\boldsymbol{r})/u(\boldsymbol{r})\right]^{q-1}-1}{q-1}, \qquad (86)$$

которая характеризует меру статистической упорядоченности в состояниях системы с распределением $0<p\left(\boldsymbol{r},a\right)<\infty$ относительно состояния с распределением $0<u\left(\boldsymbol{r},a\right)<\infty$. В пределе $q\to 1$ из (86) вытекает информация различия Кульбака–Лейблера

$$I\left(p:u\right)=k_B\int dz\, p\ln\left(\frac{p}{u}\right), \text{ где } \int dz\, p\left(\boldsymbol{r},a\right)=\int dz\, u\left(\boldsymbol{r},a\right)=1.$$

Наиболее важные свойства функционала (2.86) подробно рассмотрены в основополагающей работе (Rathie, Kannappan, 1972), а также в монографиях (Tsallis, 2009; Зарипов, 2010). Рассмотрим здесь лишь некоторые наиболее важные свойства информации различия (86).

Выпуклость. Информация различия есть вещественный, выпуклый и положительный (отрицательный) функционал с минимумом (максимумом) при $q>0$ $\left(q<0\right)$. Покажем это. Для числа $r>0$ имеем

$$\begin{aligned}\frac{r^{q-1}-1}{q-1}&\geq 1-\frac{1}{r}, \quad \textit{если } q>0,\\ &=1-\frac{1}{r}, \quad \textit{если } q=0,\\ &\leq 1-\frac{1}{r}, \quad \textit{если } q<0.\end{aligned}$$

Следовательно, например, для $q>0$ справедливо $\dfrac{\left[p/u\right]^{q-1}-1}{q-1}\geq 1-\dfrac{u}{p}$, отсюда

$$\int dz p(\boldsymbol{r})\frac{\left[p(\boldsymbol{r})/u(\boldsymbol{r})\right]^{q-1}-1}{q-1}\geq\int dz p(\boldsymbol{r})\left[1-\frac{u(\boldsymbol{r})}{p(\boldsymbol{r})}\right]=1-1=0\,.$$

Таким образом, справедливы следующие неравенства

$$I_q\left(p:u\right)\geq 0\,,\quad \left(q>0\right);\quad I_q\left(p:u\right)=0\quad \left(q=0\right);\quad I_q\left(p:u\right)\leq 0\,,\quad \left(q<0\right),\tag{87}$$

т.е. выражение (86) удовлетворяет такому же основному свойству, что и стандартная энтропия Кульбака−Лейблера, а потому может использоваться для тех же целей. Одако в данном случае у нас есть свобода выбора параметра q, что позволяет адекватно исследовать систему, которую мы анализируем.

Справедливо также неравенство

$$I_q\left[\left(a_1p_1+a_2p_2\right):u\right]\leq a_1I_q\left(p_1:u\right)+a_2I_q\left(p_2:u\right),\tag{88}$$

где $a_1+a_2=1$ и $a_1>0\,,a_2>0$. При $p=u$ имеем равенство $I_q\left(p:p\right)=0$. Таким образом, информация различия является функцией Ляпунова.

Неаддитивность для независимых систем. Пусть состояние физической системы описывается нормированными совместными распределениями $p_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)=p_1\left(\boldsymbol{r}_1\right)p_2\left(\boldsymbol{r}_2\right)$ и $u_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)=u_1\left(\boldsymbol{r}_1\right)u_2\left(\boldsymbol{r}_2\right)$ при статистической независимости двух физических систем. Информации различия совокупной и отдельных систем определяются выражениями

$$I_q\left(p_{12}:u_{12}\right)=\frac{k_B}{1-q}\left(1-\iint dz_1dz_2p_{12}^q u_{12}^{1-q}\right),$$

$$I_q\left(p_1:u_1\right)=\frac{k_B}{1-q}\left(1-\int dz_1p_1^q u_1^{1-q}\right),\quad I_q\left(p_2:u_2\right)=\frac{k_B}{1-q}\left(1-\int dz_2p_2^q u_2^{1-q}\right),\tag{89}$$

где условия нормировки имеют вид

$$\iint dz_1dz_2p_{12}=\int dz_1p_1=\int dz_2p_2=1\,,\quad \iint dz_1dz_2u_{12}=\int dz_1u_1=\int dz_2u_2=1.$$

Отсюда для информации различия Ратье−Каннаппана имеем свойство псевдоаддитивности для независимых систем

$$I_q\left(p_{12}:u_{12}\right)=I_q\left(p_1:u_1\right)+I_q\left(p_2:u_2\right)-\varepsilon I_q\left(p_1:u_1\right)I_q\left(p_2:u_2\right), \qquad (90)$$

где параметр $\varepsilon\equiv\varepsilon(q)=k_B^{-1}(1-q)$ характеризует степень их неаддитивности. При $q=1$ из (90) следует аддитивность для информаций различия Кульбака–Лейблера модели с мерой Больцмана–Гиббса.

Микроскопическая информация различия. Флуктуация. Введём микроскопическую информацию различия

$$i_q\left(p:u\right)\equiv-\left[s_q\left(p\right)-s_q\left(u\right)\right]=\frac{k_B}{1-q}\left(p^{1-q}-u^{1-q}\right). \qquad (91)$$

Тогда флуктуация и среднее значение имеют вид

$$\Delta_q\left[i_q\left(p:u\right)\right]=i_q\left(p:u\right)-I_q\left(p:u\right)p^{1-q}, \qquad (92)$$

$$I_q\left(p:u\right)=\boldsymbol{E}_q\left[i_q\left(p:u\right)\right]=\frac{k_B}{1-q}\left(1-\int dzp^q u^{1-q}\right). \qquad (93)$$

Выразим информацию различия через флуктуацию микроскопической энтропии $\Delta_q\left[s_q\left(u\right)\right]$ и энтропию в общем виде. Для чего перепишем (91) следующим образом:

$$i_q\left(p:u\right)=-\left\{s_q\left(p\right)-S_q\left(u\right)u^{1-q}\right\}+\Delta_q\left[s_q\left(u\right)\right]. \qquad (94)$$

Осредняя (94), получим выражение

$$I_q\left(p:u\right)=\frac{-\left[S_q\left(p\right)-S_q\left(u\right)\right]+\int dz\Delta_q\left[s_q\left(u\right)\right]p^q}{1+k_B^{-1}\left(1-q\right)S_q\left(u\right)}, \qquad (95)$$

которое отличается от соответствующей формулы статистической теории аддитивных систем дополнительным множителем, зависящим от энтропии конечного состояния системы $S_q(u)$.

Выражение для флуктуации микроскопической информации различия Ратье−Каннаппана имеет вид

$$\left[1+\varepsilon S_q(u)\right]^{-1}\Delta_q\left[i_q(p:u)\right]=-\left\{\Delta_q\left[s_q(p)\right]-\Delta_q\left[s_q(u)\right]\right\}-$$

$$-\int dz\,\Delta_q\left[s_q(u)\right]p^q+\varepsilon I_q(p:u)S_q(u), \qquad (96)$$

где, в отличие от соответствующего выражения для аддитивной системы, имеем дополнительное слагаемое в виде произведения информации различия $I_q(p:u)$ и энтропии $S_q(u)$ конечного состояния системы.

Отметим, что информация различия, записанная в виде (95), имеет общий вид и может быть использована при рассмотрении самоорганизации хаотических неэкстенсивных систем.

Неравенства. Информация различия Ратье–Каннаппана удовлетворяет неравенствам

$$I_q(p_{12}:u_{12})\le I_q(p_1:u_1)+I_q(p_2:u_2);\quad I_q(p:u)\ge I(p:u),\quad (q>0); \qquad (97)$$

$$I_q(p:u)\le I(p:u),\quad (q<0);\quad I_q\left[p_1(w):u_1(w)\right]\le I_q(p:u). \qquad (98)$$

Подробные сведения об этих и других неравенствах можно найти в обзорах (Taneja, 1989, 2005).

Негэнтропийный принцип. Пусть среднее значение флуктуации микроскопической энтропии $s_q(u)$ при распределении p удовлетворяет равенству

$$\boldsymbol{E}_q\left\{\Delta_q\left[s_q(u)\right]\right\}=\int dz\left[s_q(u)-S_q(u)p^{1-q}\right]p^q=$$

$$=\int dz\,s_q(u)p^q-\int dz\,s_q(u)u^q+\varepsilon S_q(u)I_q(p:u)=0, \qquad (98)$$

что приводит, согласно (96), к значению информации различия

$$I_q\left(p:u\right)=-\frac{\left[S_q\left(p\right)-S_q\left(u\right)\right]}{1+\varepsilon S_q\left(u\right)}. \tag{99}$$

Выражение (99) также непосредственно вытекает из равенства (95).

Из (99) имеем соотношение:

$$S_q\left(p\right)=S_q\left(u\right)-I_q\left(p:u\right)-\varepsilon S_q\left(u\right)I_q\left(p:u\right), \tag{100}$$

где информация различия с точностью до множителя представлена в виде отрицательного вклада в энтропию и поэтому называется негэнтропией. Представим соотношение (100) также в следующем виде

$$\left[1+\varepsilon S_q\left(p\right)\right]=\left[1+\varepsilon S_q\left(u\right)\right]\left[1-\varepsilon I_q\left(p:u\right)\right]. \tag{101}$$

В общем случае выполняется негэнтропийный принцип

$$S_q\left(p\right)-S_q\left(u\right)+I_q\left(p:u\right)\left[1+\varepsilon S_q\left(u\right)\right]\geq 0, \quad \text{при } q>0; \tag{102}$$

$$S_q\left(p\right)-S_q\left(u\right)+I_q\left(p:u\right)\left[1+\varepsilon S_q\left(u\right)\right]<0, \quad \text{при } q<0. \tag{103}$$

Знак неравенства соответствует необратимым процессам, происходящим в физической системе.

6. Фундаментальное неравенство термодинамики физико-информационных процессов для q-систем

Пусть равновесная неаддитивная система находится в термостате с температурой $T_0=1/\beta_0$. Для определения равновесного вероятностного распределения находим безусловный экстремум лагранжиана (34). В результате получим известное нормированное равновесное распределение (36) для непрерывных величин:

$$p_0(\boldsymbol{r},\beta_0)=Z_q^{-1}(\beta_0)\left[1-\varepsilon(q)\beta_0 H(\boldsymbol{r})\right]^{1/(1-q)}, \tag{104}$$

где

$$Z_q(\beta_0)\equiv\int d\boldsymbol{z}\left[1-\varepsilon(q)\beta_0 H(\boldsymbol{r})\right]^{1/(1-q)} \tag{105}$$

− статистический интеграл.

Используя распределения (104) для термостата можно найти соответствующую равовесную энтропию (см. (48))

$$S_{q0} = \frac{k_B}{q-1}\left(1 - \int dz\, p_0^q\right) = \beta_0\left(E_{q0} - F_{q0}\right), \tag{105}$$

энергию

$$E_{q0} = \int dz H p_0^q \tag{106}$$

и свободную энергию (ср. с (48))

$$F_{q0} = -\frac{k_B}{\beta_0}\ln_q Z_q = -\frac{Z_q^{1-q} - 1}{\varepsilon(q)\beta_0} \quad \text{(откуда } Z_q^{1-q} = 1 - \varepsilon\beta_0 F_{q0}\text{)} \tag{107}$$

q-системы, находящейся в равновесном состоянии. Если продифференцировать энтропию (105), то получим следующее обобщение на q-системы известных дифференциальных соотношений равновесной термодинамики в замкнутых системах (ср. с (51)):

$$dS_q = \beta_0 dE_{q0}, \quad d\left(\beta_0 F_{q0}\right) = E_{q0} d\left(\beta_0\right). \tag{108}$$

Рассмотрим теперь спонтанный переход между произвольным состоянием системы с распределением $p = p\left(\boldsymbol{r}, t\right)$ и его равновесным состоянием с распределением $p_0 = p_0\left(\boldsymbol{r}\right)$. Подставляя (104) в выражение (86) для информации различия Ратье–Каннаппана, в результате получим

$$I_q = I_q\left(p : p_0\right) = \frac{k_B}{1-q}\left(1 - \int dz p^q p_0^{1-q}\right) = \frac{k_B}{1-q}\left\{1 - \int dz p^q \left[1 - \varepsilon\beta_0 H\right] Z_q^{q-1}\right\} =$$

$$= \frac{k_B}{1-q}\left[1 - Z^{q-1}\int dz p^q + \varepsilon\beta_0 Z^{q-1} E_q\right]. \tag{109}$$

Если использовать формулу $p_0 = \left\{ \left[1 - \varepsilon\beta_0 H(\boldsymbol{r}) \right] / \left[1 - \varepsilon\beta_0 F_{q0} \right] \right\}^{1/(1-q)}$ для равновесного распределения p_0 (см. (53)), то можно получить следующее выражение для разности энтропий

$$S_q - S_{q0} = \frac{k_B}{q-1}\left(\int dz p_0^q - \int dz p^q \right) = \frac{k_B}{q-1}\left[1 + \varepsilon\beta_0 \left(E_{q0} - F_{q0} \right) - \int dz p^q \right]. \quad (110)$$

С учётом (110) выражение (109) для информации различия легко преобразовать к виду

$$I_q\left(p : p_0\right) + \left(S_q - S_{q0}\right) Z_q^{\,q-1} = \frac{k_B}{1-q}\left\{ 1 - Z_q^{\,q-1} \int dz p^q + \varepsilon\beta_0 Z_q^{\,q-1} E_q + \right.$$

$$\left. + Z_q^{\,q-1} \int dz p^q - Z_q^{\,q-1} \left[1 + \varepsilon\beta_0 \left(E_{q0} - F_{q0} \right) \right] \right\} =$$

$$= Z_q^{\,q-1} \beta_0 \left(E_q - E_{q0} \right) + \frac{k_B}{1-q}\left\{ 1 + Z_q^{\,q-1} \left(\varepsilon\beta_0 F_{q0} - 1 \right) \right\}. \quad (111)$$

Наконец, с учётом формулы (107) для свободной энергии выражение (111) для информации различия Ратье–Каннаппана принимает следующий окончательный вид для рассматриваемого случая:

$$I_q\left(p : p_0\right) = Z_q^{\,q-1} \left[-\left(S_q - S_{q0} \right) + \frac{1}{T_0}\left(E_q - E_{q0} \right) \right] =$$

$$= \frac{1}{1 - k^{-1}(1-q)\beta_0 F_{q0}} \left[-\left(S_q - S_{q0} \right) + \frac{1}{T_0}\left(E_q - E_{q0} \right) \right], \quad (112)$$

совпадающее с известным термодинамическим выражением (69) для информации различия Кульбака–Лейблера для аддитивных систем только при $q = 1$.

***H*-теорема в статистике Тсаллиса.** Сравним значения энтропий двух состояний системы с распределениями p^q и p_0^q при условии Гиббса, т.е. при одинаковости средних энергий

$$\int dzH(\boldsymbol{r})p^q = \int dzH(\boldsymbol{r})p_0^q \,. \tag{113}$$

С учётом условия $\left(Z_q\right)^{1-q} > 0$ и свойства выпуклости (87) информации различия Ратье–Каннаппана, из (112) получим

$$I_q\left(p:p_0\right)Z_q^{\;1-q} = -\left[S_q\left(p\right) - S_q\left(p_0\right)\right] > 0, \quad \text{при } q > 0;$$

$$I_q\left(p:p_0\right)Z_q^{\;1-q} = -\left[S_q\left(p\right) - S_q\left(p_0\right)\right] < 0, \quad \text{при } q < 0. \tag{114}$$

Из неравенств (114) следует обобщённая теорема Гиббса:

(i) q-энтропия равновесного состояния максимальна $S_q\left(p_0\right) > S_q\left(p\right)$ при $q > 0$;

(ii) q-энтропия равновесного состояния минимальна $S_q\left(p_0\right) < S_q\left(p\right)$ при $q < 0$.

Из (114) также вытекает, что при увеличении энтропии $S_q\left(p\right) \to S_q\left(p_0\right)$ (при $q > 0$), положительная мера информации различия уменьшается. При уменьшении энтропии $S_q\left(p\right) \to S_q\left(p_0\right)$ (при $q < 0$), отрицательная мера информации (или *негинформация*) аналогично уменьшается. Таким образом, в этих двух случаях имеет место уменьшение статистической упорядоченности в микросостояниях неэкстенсивной системы.

Согласно свойству выпуклости (87), информация различия Ратье–Каннаппана является знакоопределенной функцией Ляпунова. Чтобы состояние полного равновесия было устойчивым необходимы следующие неравенства[§]

$$\frac{dI_q\left(p:p_0\right)Z_q^{\;1-q}}{dt} = -\frac{d}{dt}\left[S_q\left(p\right) - S_q\left(p_0\right)\right] < 0 \quad \text{при } q > 0,$$

$$\frac{dI_q\left(p:p_0\right)Z_q^{\;1-q}}{dt} = -\frac{d}{dt}\left[S_q\left(p\right) - S_q\left(p_0\right)\right] > 0 \quad \text{при } q < 0. \tag{115}$$

[§)] Напомним, что функцией Ляпунова для данной системы называется знакоопределённая функция, которая обращается в нуль в точке равновесия системы. Состояние равновесия является аттрактором, когда поизводная по времени от функции Ляпунова имеет знак, противоположный знаку самой функции.

Таким образом, при стремлении системы к равновесному состоянию во временной эволюции информация различия уменьшается. Это свидетельствует об уменьшении разупорядоченности микросостояний.

Из (115) следует закон возрастания (убывания) энтропии Тсаллиса со временем в неаддитивной статистической механике

$$\frac{dS_q(p)}{dt} > 0 \quad \text{при } q > 0; \quad \frac{dS_q(p)}{dt} < 0 \quad \text{при } q < 0, \tag{116}$$

который справедлив при приближении к состоянию полного статистического равновесия (H-теорема Больцмана). Таким образом, происходит хаотизация макроскопической системы при спонтанных переходах.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы Президиума РАН № 28 и гранта РФФИ № 18-01-00064.

Список литературы

Зарипов Р.Г. Изменения энтропии и информации различия Тсаллиса в процессах самораспада и самоорганизации неэкстенсивных систем // Физика. 2001. №11. С.24–29. (Изв. высш. учебн. заведений). (Translation: Russian Physics Journal. 2001. Vol. 44. № 11. P. 1159–1164).

Зарипов Р.Г. Самоорганизация и необратимость в неэкстенсивных системах // Казань: Фэн. 2002. 251 с.

Зарипов Р.Г. Изменение информации различия при эволюции неэкстенсивных систем в пространстве управляющих параметров // Физика. 2004.№ 6. С. 67–73. (Изв. высш. учебн. заведений). (Translation: Russian Physics Journal. 2004. V. 47. № 6. P. 647–655).

Зарипов Р.Г. Принципы неэкстенсивной статистической механики и геометрия мер беспорядка и порядка. Казань: Изд-во Казан. Гос. техн. ун-та. 2010. 404 с.

Хартли Г.Г., Литтльвуд Д.Е., Полиа Г. Неравенства. М.: ИЛ, 1948. 456 с.

Хинчин А.Я. Понятие энтропии в теории вероятностей // УМН. 1953. Т.8. № 3. с. 3-20.

Хинчин А.Я. Об основных теоремах теории информации // УМН. 1956. Т.11. №.1(67). с.17-75.

Abe S. Axioms and uniqueness theorem for Tsallis entropy // Phys. Lett A. 2000. V. 271. P. 74-79.

Abe S., Okamoto Y. Eds., “Nonextensive Statistical Mechanicsand Its Applications”. Series Lecture Notes in Physics. Springer: Verlag, Berlin, New York. 2001. ISBN 3-540-41208-5.

Boon J.P., Tsallis C. Eds. “Special issue overview Nonextensive statistical mechanics: new trends, new perspectives” // Europhys. News. 2005. V. 36. № 6. P. 183-186.

Borland L., Plastino A.R., Tsallis C. Information gain within nonextensive thermostatistics // J. Math. Phys. 1998. V.39 P. 6490-6501; [Errata: Information gain within generalized thermostatistics' [J. Math. Phys. 39, 6490 (1998)] // J. Math. Phys. 1999. V. 40. P. 2196-2196.

Curado E. M. F, Tsallis C. Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics// J. Phys. A : Mathematical and General.1991. V. 24. № 2. P. L69-72

Daroczy Z. Generalized information function// Inform. Control. 1970. V.16. P. 36–51.

Gell-Mann M., Tsallis C. Eds. “Nonextensive Entropy- Interdisciplinary Applications. Oxford University Press. 2004. 440 p.

Grigolini P., Tsallis C., West B.J. Eds., “Classical and Quantum Complexity and Nonextensive Thermodynamics” // Chaos, Solitons and Fractals. 2002. 13, № 3. P. 367.

Havrda J., Charvat F. Quantification Method of Classification Processes // Kybernetika. 1967. V. 3. P. 30–35.

Herrmann H.J., Barbosa M., Curado E.M.F. Eds. “Trends and perspectives in extensive and non-extensive statistical mechanics”// Physica A 2004. V.344, № 3/4. P. v-vi.

Hotta M., Joichi I. Composability and generalized entropy // Phys. Lett. A. 1999. V.262. P.302-309.

Kaniadakis G., Lissia M., Rapisarda A. Eds. “Non Extensive Thermodynamics and Physical Applications” // Physica A. 2002. V. 305. № 1/2 .

Kaniadakis G., Lissia M. Eds. “News and Expectations in Thermostatistics”// Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2004. V. 340. № 1. P. xv-xix.

Kaniadakis G., Carbone A., Lissia M. Eds. “News, expectations and trends in statistical physics”// Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2006. V. 365. № 1 P. xi-xi.

Landsberg P.T., Tranah D. Thermodynamics of non-extensive entropies I. // Collective Phenomena. 1980. V.3. P. 73-80.

Mandelbrot B.B. Fractals: Form, Change and Dimension. San Francisco: Freeman. 1977. 365 p.

Mandelbrot B.B. The Fractals Geometry of Nature. New York: Freeman, 1982. 460 p.

Martinez S., Nicolas F., Pennini F., Plastino A. Tsallis’entropy maximization procedure revisited // Physica A. 2000. V.286. P.489-502.

Nonextensive statistical mechanics and thermodynamics: Bibliography / http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm.

Rathie P.N., Kannappan Pl. A Directed-Divergence Function of Type β // Inform. and Contr. 1972. V. 20. P. 38–45.

Renyi A. Probability Theory. Amsterdam: North-Holland Publ. Co. 1970. 573 p.

Sugiyama M. Eds. “Introduction to the topical issue: Nonadditive entropy and nonextensive statistical mechanics”// Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2004. V.16. № 3. P. 221.

Swinney H.L., Tsallis C. Eds. “Anomalous Distributions, Nonlinear Dynamics and Nonextensivity” // Physica D: Nonlinear Phenomena. 2004. V.193. № 3. P.1-2.

Taneja I.J. On Generalized Information Measures and Their Applications. Chapter in: Advances in Electronics and Electron Physics, ed. P.W. Hawkes. London: Academic Press, 1989. V.76. P. 327–413.

Taneja I.J. New Developments in Generalized Information Measures. Chapter in: Advances in Imaging and Electron Physics, ed. P.W. Hawkes. London: Academic Press, 1995. V.91. P.37–135.

Taneja I.J. On Symmetric and Nonsymmetric Divergence Measures and Their Generalisations. Chapter in: Advances in Imaging and Electron Physics, ed. P.W. Hawkes. London: Academic Press, 2005. V.138. P.177–250.

Tsallis C*.* Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs-Statistics //J. Stat. Phys. 1988. V.52. № 1/2. P.479–487. (a regular updated bibliography is accessible at http:/tsallis. cat.cbpf.br/biblio.htm).

Tsallis C., Mendes R.S., Plastino A.R. The role of containts within generalized nonextensive statistics // Physica A. 1998. V.261. P.534–554.

Tsallis C. Generalized entropy-based criterion for consistent testing, Phys. Rev. E 1998. V. 58, 1442-1445.

Tsallis C. Nonextensive Statistic: Theoretical, Experimental and Computational Evidences and Connections // Brazilian J. Phys. 1999. V.29. № 1. P.1-35.

Tsallis C. Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics. Approaching a Complex World. New York: Springer, 2009. 382 p.

Vaida I. Axiomy α-entropie zobecneneho pravdepodobnostniho schematy // Kybernetika. 1968. V.4. P.105-111. (in Czech).

Оглавление