ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 36 за 2018 г.

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

Колесниченко А.В.

Модификация фундаментального уравнения Гиббса классической термодинамики на основе различающей информации Кульбака−Лейблера

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Колесниченко А.В. Модификация фундаментального уравнения Гиббса классической термодинамики на основе различающей информации Кульбака−Лейблера // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 36. 32 с. doi:10.20948/prepr-2018-36
URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-36

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

А.В. Колесниченко

Модификация фундаментального уравнения Гиббса классической термодинамики на основе различающей информации Кульбака−Лейблера

Москва − 2018

Колесниченко А.В.

Модификация фундаментального уравнения Гиббса классической термодинамики на основе различающей информации Кульбака−Лейблера.

В работе представлен информационно-термодинамический подход к описанию переходов между стационарными состояниями, при которых возникают упорядоченные пространственно-временные макроскопические образования (*диссипативные структуры*) в открытых динамических системах со стохастичностью, подверженных воздействию внешнего окружения. Проанализированы следствия данного подхода, при котором важную роль играет суммарное производство макроскопической энтропии системы и различающей информации Кульбака−Лейблера. Модифицировано фундаментальное термодинамическое уравнение Гиббса для физико- информационных процессов в континуальной среде, позволяющее количественно оценить границы смещения стационарных состояний стохастической системы, подверженной влиянию внешнего воздействия, и найти соответствующие критерии устойчивости такой системы.

***Ключевые слова*:** процессы перехода и самоорганизации, влияние внешнего окружения на систему, фундаментальное уравнение Гиббса, различающая информация Кульбака−Лейблера.

Aleksander Vladimirovich Kolesnichenko

Modification of the fundamental Gibbs equation of classical thermodynamics on the basis discriminating information of Kullback−Leibler.

The paper presents an information-thermodynamic approach to describing transitions between stationary states in which ordered spatial-temporal macroscopic formations (*dissipative structures*) arise in open dynamic systems under the influence of the external environment. The consequences of this approach are analyzed, in which the summary production of the macroscopic entropy of the system and the physical discriminating information of the Kullback−Leibler plays an important role. A fundamental equation of the thermodynamics of information physical processes in continuous environment is established, which makes it possible to quantify the boundaries of the displacement of stationary states of a system subject to the influence of external action and to find the corresponding stability criteria for such a system.

Key words*:* processes of transition and self-organization, influence of environment on the system, fundamental Gibbs equation, discriminating information of Kullback−Leibler.

Введение

В последнее время в связи с развитием теоретико-информационного подхода к моделированию процессов самоорганизации в открытых физических системах со стохастичностью появилась возможность объединения динамической и информационной (управляющей) частей их описания в единую неразрывную сущность, когда в условиях конкуренции информационных и физических процессов эволюционное развитие термодинамической системы в значительной мере начинает определяться и её информационными свойствами, включая информационное отношение к внешнему окружению (см., например, Зубарев, 1971; Климонтович, 1990; Зубарев и др., 2002; Зарипов, 2010). Такие системы наряду с обычным обменом энергией и негэнтропией с внешней средой, необходимыми для спонтанного формирования различных когерентных структур, получают дополнительную возможность своего усложнения и совершенствования благодаря информационному управлению. В результате этого становится возможным появление (благодаря изменениям внешних полей или управляющих параметров, характеризующих воздействие окружения) в сильно неравновесной динамической системе новых точек бифуркаций, находясь в которых система «может выбирать» между различными квазиравновесными состояниями. В частности, при достижении сверхкритических значений управляющих параметров («информаторов», по терминологии Г. Хакена) в самоорганизующихся открытых системах происходят вынужденные переходы между стационарными состояниями[*)], при которых возникают упорядоченные пространственно-временные макроскопические образования (*диссипативные структуры*), сохраняющиеся только при наличии подкачки энергии, вещества и т.п. из окружающей среды. Они соответствуют той или

[*)] В физике рассматривается эволюция системы к равновесному состоянию или стационарному (в открытых системах) состоянию. Нельзя путать равновесие, которое характеризуется равенством нулю производства энтропии σ, и стационарное состояние, при котором $\sigma \neq 0$.

иной форме когерентного поведения огромного числа частиц (молекул). Феноменологически подобный ход эволюции системы можно охарактеризовать также и как получение дополнительной (синергетической) информации от внешней среды. Конкуренция происходящих информационных и кооперативных динамических процессов в таких системах приводит к их спонтанной самоорганизации[†)], причём трмодинамическая и информационная сущности процесса эволюции могут (и должны) моделироваться в общем случае параллельно и в близком соотнесении между собой. Другими словами, при моделировании процессов перехода и самоорганизации в открытой термодинамической системе, находящейся в неравновесном контакте с окружением, необходимо принимать во внимание как физические обменные процессы (потоками энергии, вещества и т.п.) между системой и её окружением, так и обмен информационными потоками.

В мировой литературе хорошо представлены традиционные термодинамические и статистические аспекты спонтанного возникновения когерентных структур, т.е. процессов самоорганизации при необратимых процессах в нелинейных термодинамических системах (см., например, Prigogine, Defay, 1954; Гленсдорф, Пригожин, 1973; Полак, Михайлов, 1975; Николис, Пригожин, 1979; Эбелинг, 1979; Поплавский, 1981; Хакен, 1985, 1991; Климонтович, 1990,1995; Зубарев и др., 2002; Пригожин, Кондепуди, 2002; Marov, Kolesnichenko, 2013, Колесниченко, 2017). Вместе с тем, до последнего времени существовала известная ограниченность *энтропийного подхода* к изучению спонтанных и вынужденных переходов *порядок–беспорядок*, связанная с весьма формальным привлечением к данной проблематике аналитического аппарата современной теории информации. Это в высшей степени странно, если учесть, что теоретико-информационный подход также позволяет с уверенностью определять механизмы перехода и возникновения когерентных

[†)] Процесс самоорганизации традиционно определяется как самопроизвольное возникновение устойчивых когерентных пространственно-временных структур в динамических нелинейных открытых системах. При этом диссипация играет при образовании макроскопических структур конструктивную роль.

структур при микро- и макроуровневых методах описания (см. Климонтович, 1990; Зарипов, 2010; Хакен, 2014). Центральным местом является здесь существующая взаимосвязь между различающей информацией Кульбака−Лейблера и минимальной работой, совершаемой окружением над открытой термодинамической системой. Различающая информация делает возможным не только адекватно описывать процессы хаотизации и самоорганизации в классических термодинамических системах (Szilard ,1929; Бриллюэн, 1960, 1966), но и позволяет исследовать вопрос о взаимодополняемости термодинамических и информационных потоков, вводимых в рассмотрение при моделировании спонтанных и вынужденных переходов между стационарными состояниями открытых сплошных сред, находящихся вдали от термодинамического равновесия[‡)].

В связи со сказанным в данной статье в рамках концепции единого теоретико-информационного описания сделана попытка дать информационно-термодинамическое обоснование вывода модифицированного фундаментального уравнения Гиббса для неравновесных процессов в открытой системе, заключающего в себе полную термодинамическую информацию о системе. Это уравнение имеет первостепенное значение, прежде всего для неравновесной термодинамики, дающей общую основу макроскопического описания необратимых процессов. Далее показана связь информации различия Кульбака–Лейблера с минимальной работой, совершаемой внешним окружением над открытой системой, что придаёт этой информационной характеристике дополнительное термодинамическое содержание. Предложенный информационно-физический подход, несомненно, может служить эффективным средством, позволяющим с единой точки зрения исследовать как спонтанные и вынужденные переходы между стационарными состояниями системы, так и

[‡)] Связь между энтропией и информацией впервые была открыта в основополагающей работе Сциларда (Szilard, 1929). В дальнейшем в работах (Бриллюэн, 1960, 1966) был сформулирован негэнтропийный принцип информации, обобщающий второе начало термодинамики. Согласно этому принципу как энтропия, так и информация должны рассматриваться совместно и не могут трактоваться порознь.

когерентные свойства сложных систем вблизи неравновесных переходов, возникающих благодаря изменениям управляющих параметров (носителей информации), характеризующих воздействие окружения на термодинамическую систему. К сожалению, подобный подход все ещё не нашёл широкого применения среди специалистов, которые по неизвестным причинам не используют его при описании широкого круга неравновесных процессов в неисчерпаемо разнообразных сложных системах (см., например, Хакен, 2014).

1. Различающая информация Кульбака−Лейблера в классической статистической теории

Напомним вначале основные ключевые понятия статистики Больцмана−Гиббса−Шеннона, которые обычно используются при конструировании моделей ряда простых систем, фазовое пространство которых не содержит запрещённых состояний, а вероятности их заполнения изменяются плавным образом при вариации внешних условий (температуры, давления и т.п.). Рассмотрим стохастическую динамическую систему из N частиц i, характеризующихся своим положением $\boldsymbol{r}_i$ и импульсом $\boldsymbol{p}_i$. В классической механике микроскопическое состояние системы формально задаётся одной фазовой точкой

$$\boldsymbol{r} = \left\{\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{p}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_N, \boldsymbol{p}_N\right\}$$

в $6N$-мерном *фазовом пространстве* координат и импульсов.

Следуя Гиббсу, далее будем рассматривать не одну стохастическую динамическую систему, а совокупность большого числа её «копий» (статистический ансамбль), находящихся в макроскопически тождественных внешних условиях. Каждой системе, входящей в ансамбль, соответствует «точка» $\boldsymbol{r}$ в фазовом пространстве, которая движется по собственной траектории согласно уравнениям Гамильтона. Статистический ансамбль может быть задан безразмерной функцией распределения $0 < p(\boldsymbol{r}, t, a) < \infty$, так что величина $dw = p(\boldsymbol{r}, a)dz$ равна вероятности обнаружить систему ансамбля в элементе dz вблизи фазовой точки $\boldsymbol{r}$ в момент времени t. Условии нормировки для этой функции распределения имеет вид $\int p(\boldsymbol{r},a)d\boldsymbol{z}=1$. Наиболее естественный способ нормировки функции p на единицу состоит в использовании безразмерного элемента фазового объёма $d\boldsymbol{z}_N \equiv \dfrac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}}\prod_{i=1}^{N} d\boldsymbol{q}_i d\boldsymbol{p}_i$, где $\hbar$ – постоянная Планка[§)]. Здесь $d\boldsymbol{r}_i = d\boldsymbol{q}_i d\boldsymbol{p}_i$ – элемент фазового пространства i-ой частицы, движение которой по собственной траектории происходит согласно уравнениям Гамильтона

$$\frac{d\boldsymbol{q}_i(t)}{dt}=\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)}{\partial \boldsymbol{p}_i},\quad \frac{d\boldsymbol{p}_i(t)}{dt}=-\frac{\partial H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)}{\partial \boldsymbol{q}_i}\quad (i=1,2,...,N),$$

где $H=H(\boldsymbol{r},t,\{a\})$ – известный по предположению полный гамильтониан динамической системы, зависящий в общем случае от совокупности обобщённых координат a_j – внешних параметров, определяющих работу внешних полей. Если рассматриваемая нами система может обмениваться также и частицами с окружением, то соответствующий статистический ансамбль должен включать системы с различным числом частиц. В этом случае число частиц N в приведённых выше соотношениях следует рассматривать как новую дискретную переменную и условие нормировки должно записываться в виде $\sum_N \int p(\boldsymbol{r},\{a\})d\boldsymbol{z}=1$.

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

---

§) Отметим, что интегрирование по фазовому пространству с элементом объёма dz соответствует суммированию по всем различным (квазиклассическим) квантовым состояниям. Множитель $1/N!$ соответствует предположению, что тождественные частицы неразличимы в смысле квантовой механики, предельным случаем которой является классическая статистическая механика.

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

(при условии нормировки $\int dz\, p=1$ и постоянства осреднённой энергии системы $E\equiv\langle H\rangle=\int dz\, pH(\boldsymbol{r})=const$ для канонического ансамбля);

(ii) экспоненциальная форма канонического распределения Гиббса

$$p^{eq}(\boldsymbol{r},T)=\mathrm{e}^{\left\{-\left[H(\boldsymbol{r})-F\right]/k_BT\right\}}=Z^{-1}\mathrm{e}^{\left\{-H(\boldsymbol{r})/k_\mathrm{B}T\right\}},$$

где $Z=\int dz\,\mathrm{e}^{\left\{-H/k_\mathrm{B}T\right\}}$ –статистическая сумма;

(iii) связь с термодинамическими потенциалами (например, со свободной энергией системы)

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

Информация различия Кульбака–Лейблера. Наряду с энтропией Больцмана–Гиббса–Шеннона к наиболее существенным статистическим характеристикам сложной динамической системы относится информация различия Кульбака–Лейблера, которая, являясь функционалом, определяет меру статистической упорядоченности в микросостояниях системы с вероятностным распределением $p(\boldsymbol{r})$ относительно состояния с распределением $u(\boldsymbol{r})$.

Предположим, что система переходит из состояния $p(\boldsymbol{r})$ в состояние $u(\boldsymbol{r})$ и статистические наблюдения ведутся относительно состояния $p(\boldsymbol{r})$. В теории информации подобный переход по определению характеризуется *микроскопической различающей информацией*

$$i(p:u)=-\left[s(p)-s(u)\right]=k_\mathrm{B}\ln\left[p(\boldsymbol{r})/u(\boldsymbol{r})\right],$$

заданной в виде разности микроскопических энтропий $s(p)=-k_\mathrm{B}\ln p(\boldsymbol{r})$ и $s(u)=-k_\mathrm{B}\ln u(\boldsymbol{r})$. Тогда среднее значение по объёму вероятностной области определяет так называемую *различающую информацию Кульбака–Лайблера* или просто *информацию различия*

$$I\left(p:u\right)=k_{\mathrm{B}}\int dz\,p\ln\left(\frac{p}{u}\right),\quad \int dz\,p\left(\boldsymbol{r}\right)=\int dz\,u\left(\boldsymbol{r}\right)=1\,, \tag{1}$$

которая характеризует меру статистической упорядоченности в состояниях системы с распределением $0<p(\boldsymbol{r})<\infty$ относительно состояния с распределением $0<u(\boldsymbol{r})<\infty$.

Наиболее важные свойства функционала (1) подробно рассмотрены в основополагающих работах (Kullback, Leibler ,1951; Кульбак, 1967), а также в монографиях (Beck, Schlögl,1993; Зарипов, 1999). Остановимся вначале на свойстве выпуклости информации различия $I\left(p:u\right)\geq 0$, которое делает содержание экстремальных свойств энтропии и различающей информации более наглядными.

Знакоопределённость информации различия Кульбака. Теорема Гиббса. Для произвольных распределений $p(\boldsymbol{r})$ и $u(\boldsymbol{r})$ имеем:

$$I\left(p:u\right)=k_{\mathrm{B}}\int dz\;p(\boldsymbol{r})\ln\left[\frac{p(\boldsymbol{r})}{u(\boldsymbol{r})}\right]\geq 0\,, \tag{2}$$

т.е. информация различия является знакоопределённым функционалом, который достигает своего минимального значения $I_{min}=0$ при равенстве $p=u$.

Выражение (2) есть следствие очевидного неравенства $\ln\left(\frac{p}{u}\right)\geq 1-\left(\frac{u}{p}\right)$ (здесь $p>0, u>0$), в справедливости которого легко убедится, заметив, что функция $\ln x-1+1/x$ положительна и равна нулю лишь при $x=1$, а затем, положив $x\equiv p/u$. При умножении этого неравенства на p и интегрировании результата по всему фазовому пространству можно получить неравенство: $\int dz\,p\ln(p/u)\,\geq\int dz\,p\left\{1-(u/p)\right\}=0$, что и требовалось доказать.

Принцип максимума энтропии Гиббса−Шеннона. Из неравенства (2) следует *принцип максимума энтропии Больцмана−Гиббса* $S(p)$ в равновесном состоянии, согласно которому максимальная информационная энтропия означает низшую степень организованности и, соответственно, наибольшую неупорядоченность, которые возможны при заданных условиях. Действительно, если ввести энтропию равновесного состояния

$$S^{eq}(T) = -k_{\mathrm{B}} \int dz\, p^{eq}(\boldsymbol{r}) \ln\left[p^{eq}(\boldsymbol{r}) \right],$$

описываемого каноническим распределением Гиббса, и энтропию произвольного неравновесного состояния $S(t) = -k_{\mathrm{B}} \int dz\, p(\boldsymbol{r},t) \ln\left[p(\boldsymbol{r},t) \right]$, которое может зависеть от времени (текущее время в данном случае играет роль управляющего параметра), то из неравенства (2) следует

$$I\left(p : p^{eq}\right) = -(S(t) - S^{eq}) = k_B \int dz\, p(\boldsymbol{r},t) \ln\left[\frac{p(\boldsymbol{r},t)}{p^{eq}(\boldsymbol{r},T)} \right] \geq 0 \tag{3}$$

(здесь знак равенства имеет место в случае совпадения обоих распределений).

Отсюда следует *теорема Гиббса о максимуме энтропии* равновесного состояния:

$$S^{eq} \geq S. \tag{4}$$

Важно при этом подчеркнуть, что неравенство (4) справедливо лишь при условии постоянства средней энергии системы

$$E^{eq} \equiv \int dz\, H(\boldsymbol{r}) p^{eq}(\boldsymbol{r},T) = E \equiv \int dz\, H(\boldsymbol{r}) p(\boldsymbol{r},t).$$

Таким образом, энтропия максимальна для равновесного состояния (другими словами, равновесное состояние является наиболее хаотичным по сравнению с произвольным неравновесным состоянием) только в случае постоянства средней энергии системы (Климонтович, 1990, 1995).

Рассмотрим теперь некоторые другие свойства различающей информации Кульбака–Лейблера.

- **Положительность и выпуклость.** Информация различия есть вещественный, неотрицательный и выпуклый функционал (Кульбак,1967), т. е. для произвольных p и u имеем неравенства

$$I\left(p:u\right)\geq 0\,, \tag{5}$$

$$I\left[\left(a_1p_1+a_2p_2\right):\left(a_1u_1+a_2u_2\right)\right]\leq a_1I\left(p_1:u_1\right)+a_2I\left(p_2:u_2\right). \tag{6}$$

Здесь $a_1+a_2=1,\;\; a_1>0,\;\; a_2>0$ и различающие информации с нормированными распределениями

$$I\left(p_1:u_1\right)=k_B\int dz\left(\ln\frac{p_1}{u_1}\right)p_1,\quad \int p_1 dz=1, \tag{7}$$

$$I\left(p_2:u_2\right)=k_B\int dz\left(\ln\frac{p_2}{u_2}\right)p_2,\quad \int dzp_2=1. \tag{8}$$

Равенство в (5) достигается тогда и только тогда, когда $p=u$. Отсюда следует, что информация различия $I\left(p:u\right)$ является знакоопределённой функцией Ляпунова.

- **Аддитивность для независимых систем.** Пусть два состояния общей системы описываются нормированными совместными распределениями $p_{12}=p_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)$ и $u_{12}=u_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)$, которые могут зависеть от времени. Общая информация различия имеет вид

$$I\left(p_{12}:u_{12}\right)=k_B\iint dz_1dz_2\left(\ln\frac{p_{12}}{u_{12}}\right)p_{12}\,, \tag{9}$$

$$\iint dz_1dz_2p_{12}=\iint dz_1dz_2u_{12}=1\,. \tag{10}$$

В случае статистической независимости двух подсистем имеем следующие равенства $p_{12} = p_1(\boldsymbol{r}_1)p_2(\boldsymbol{r}_2)$ и $u_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = u_1(\boldsymbol{r}_1)u_2(\boldsymbol{r}_2)$. Из (9) следует свойство аддитивности для информаций различия

$$I(p_{12} : u_{12}) = I(p_1 : u_1) + I(p_2 : u_2), \tag{11}$$

где

$$I(p_1 : u_1) = k_B \int dz_1 \left(\ln \frac{p_1}{u_1} \right) p_1, \; I(p_2 : u_2) = k_B \int dz_2 \left(\ln \frac{p_2}{u_2} \right) p_2. \tag{12}$$

- **Равенство для зависимых систем.** Рассмотрим переход от состояния $p_{12} = p_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ к статистически независимому состоянию $u_{12} = u_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = p_2(\boldsymbol{r}_1)p_2(\boldsymbol{r}_2)$. Тогда свойство аддитивности выражается в терминах условной энтропии и условной информации различия. Для этого определим нормированные распределения

$$p_1(\boldsymbol{r}_1) = \int dz_2 p_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2), \quad p_2(\boldsymbol{r}_2) = \int dz_1 p_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{13}$$

и условные распределения

$$p_{2|1}(z_2 | z_1) = \frac{p_{12}(z_1, z_2)}{p_1(z_1)}, \quad p_{1|2}(z_1 | z_2) = \frac{p_{12}(z_1, z_2)}{p_2(z_2)}. \tag{14}$$

Из (9) получим равенство для зависимых систем

$$I(p_{12} : p_1 p_2) = k_B \iint dz_1 dz_2 \left(\ln \frac{p_{12}}{p_1 p_2} \right) p_{12} =$$
$$= S(p_1) + S(p_2) - S(p_{12}) = S(p_2) - \int dz_1 s(p_2 | p_1) p_1, \tag{15}$$

где условная энтропия и её среднее значение

$$s\left(p_2\middle|p_1\right)=-k_B\int dz_2\left(\ln p_{2|1}\right)p_{2|1},\quad S\left(p_2\middle|p_1\right)=-k_B\int dz_1 s\left(p_2\middle|p_1\right)p_1. \qquad (16)$$

Таким образом, информация различия равняется разности энтропии для распределения $p_2(\boldsymbol{r}_2)$ и среднего по $p_1(\boldsymbol{r}_1)$ от условной энтропии. Имеют место аналогичные выражения для другой условной энтропии

$$I\left(p_{12}:p_1p_2\right)=k_B\iint dz_1dz_2\left(\ln\frac{p_{12}}{p_1p_2}\right)p_{12}=$$

$$=S\left(p_1\right)+S\left(p_2\right)-S\left(p_{12}\right)=S\left(p_1\right)-\int dz_2 s\left(p_1\middle|p_2\right)p_2\geq 0, \qquad (17)$$

$$s\left(p_1\middle|p_2\right)=-k_B\int dz_1\left(\ln p_{1|2}\right)p_{1|2},\quad S\left(p_1\middle|p_2\right)=-k_B\int dz_2 s\left(p_1\middle|p_2\right)p_2. \qquad (18)$$

В результате справедливы равенства

$$I\left(p_{12}:p_1p_2\right)=S\left(p_1\right)-S\left(p_1\middle|p_2\right)=S\left(p_2\right)-S\left(p_2\middle|p_1\right). \qquad (19)$$

Из неравенства (17) следует известное содержание теоремы Гиббса о том, что энтропия системы не превышает суммы энтропий подсистем. При этом из распределений $p_1(\boldsymbol{r}_1)$ и $p_2(\boldsymbol{r}_2)$ невозможно восстановить p_{12}, то есть свойство факторизации или представление в виде (17) приводит к необратимости. Данное свойство связано с необратимой потерей информации о микросостояниях системы при описаниях посредством $p_1(\boldsymbol{r}_1)$ и $p_2(\boldsymbol{r}_2)$.

Наконец, в общем случае с совместными распределениями $p_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)$ и $u_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)$ при использовании распределений

$$p_1\left(\boldsymbol{r}_1\right)=\int dz_2 p_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right),\quad u_1\left(\boldsymbol{r}_1\right)=\int dz_2 u_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right), \qquad (20)$$

и условных распределений

$$p_{2|1}\left(\boldsymbol{r}_2\left|\boldsymbol{r}_1\right.\right)=\frac{p_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)}{p_1(\boldsymbol{r}_1)},\quad u_{2|1}\left(\boldsymbol{r}_2\left|\boldsymbol{r}_1\right.\right)=\frac{u_{12}\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right)}{u_1(\boldsymbol{r}_1)}, \tag{21}$$

получим следующее свойство аддитивности

$$I\left(p_{12}:u_{12}\right)=I\left(p_1:u_1\right)+\int d\boldsymbol{z}_1 p_1\, i\left(p_{2|1}:u_{2|1}\right). \tag{22}$$

Первое слагаемое в (22) есть информация различия в наблюдениях $p_1(\boldsymbol{r}_1)$ относительно $u_1(\boldsymbol{r}_1)$, а второе – среднее по $p_1(\boldsymbol{r}_1)$ от условной различающей информации

$$i\left(p_{2|1}:u_{2|1}\right)=k_B\int d\boldsymbol{z}_2 p_{2|1}\left(\ln\frac{p_{2|1}}{u_{2|1}}\right). \tag{23}$$

При $u_{12}=p_1p_2$ из (22) вытекает выражение (15).

- **Флуктуации**. Рассмотрим флуктуацию микроскопической информации различия $i\left(p{:}u\right)=-\left[s\left(p\right)-s\left(u\right)\right]=k_{\mathrm{B}}\ln(p/u)$

$$\Delta i\left(p:u\right)\equiv i\left(p:u\right)-I\left(p:u\right) \tag{24}$$

и запишем распределение в виде

$$p(\boldsymbol{r})=u(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\left\{k_B^{-1}\left[I\left(p:u\right)+\Delta i\left(p:u\right)\right]\right\}}. \tag{25}$$

При учёте условия нормировки (1) функцию распределения можно записать в виде

$$p(\boldsymbol{r})=u(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\left[k_B^{-1}\Delta i\left(p:u\right)\right]}\Big/\int d\boldsymbol{z}\, u(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\left[k_B^{-1}\Delta i\left(p:u\right)\right]}, \tag{26}$$

а информацию различия Кульбака–Лейблера так:

$$I\left(p:u\right) = k_B \ln \int dz\, u(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{\left[k_B^{-1} \Delta i\left(p:u\right)\right]} \ . \tag{27}$$

Введём флуктуации микроскопических энтропий $s(p)$ и $s(u)$

$$\Delta s(p) = s(p) - S(p)\,, \quad \Delta s(u) = s(u) - S(u) \tag{28}$$

и запишем флуктуацию микроскопической информации различия в виде

$$\Delta i\left(p:u\right) = -\left[\Delta s(p) - \Delta s(u)\right] - \boldsymbol{E}\left[\Delta s(u)\right], \tag{29}$$

где

$$\boldsymbol{E}\left[\Delta s(u)\right] \equiv \int dz\, p(\boldsymbol{r})\left[\Delta s(u)\right]. \tag{30}$$

Тогда выражения (25) и (27) примут следующий вид

$$p(\boldsymbol{r}) = \frac{u(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{\left\{-k_B^{-1}\left[\Delta s(p) - \Delta s(u)\right]\right\}}}{\int dz u(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{\left\{-k_B^{-1}\left[\Delta s(p) - \Delta s(u)\right]\right\}}}\,, \tag{31}$$

$$I\left(p:u\right) = -\left[S(p) - S(u)\right] + \boldsymbol{E}\left[\Delta s(u)\right] = \ k_B \ln\left(\frac{\int dz\, \mathrm{e}^{\left[-k_B^{-1}\Delta s(u)\right]}}{\int dz\, \mathrm{e}^{\left\{-k_B^{-1}\left[\Delta s(u) - \Delta i\left(p:u\right)\right]\right\}}}\right) =$$

$$= k_B \ln\left\{\int dz\, \mathrm{e}^{\left[-k_B^{-1}\Delta s(u)\right]} / \int dz\, \mathrm{e}^{\left\{-k_B^{-1}\left(\Delta s(u) + \boldsymbol{E}\left[\Delta s(u)\right]\right)\right\}}\right\}. \tag{32}$$

Если в системе отсутствуют флуктуации микроскопической информации различия $\left(\Delta i(p:u) = 0\right)$, то из (31) и (32) имеем

$$p = u, \quad I\left(p:u\right) = 0\,. \tag{33}$$

Таким образом, задавая значения флуктуаций микроскопической энтропии и информации различия, можно находить распределение и средние значения физических величин, наблюдаемые в макроскопическом опыте.

- **Неравенства.** Информация различия Кульбака–Лейблера удовлетворяет неравенствам (см. Кульбак, 1967)

$$I\left(p_{12}:u_{12}\right)\le I\left(p_1:u_1\right)+I\left(p_2:u_2\right),\quad I\left(p_{12}:p_3\right)\ge I\left(p_1:p_3|p_2\right),$$

$$I\left(p_{12}:p_3\right)>I\left(p_2:p_3|p_1\right),\quad I\left(p_1:p_3\right)\ge I\left(p_1:p_2\right),$$

$$I\left(p_1:p_3\right)>I\left(p_2:p_3\right),\quad I\left(p_1:p_3\right)\ge I\left(p_1:p_3|p_2\right),$$

$$I\left(p_{12}:p_3\right)>I\left(p_2:p_3\right),\ I\left(p_{12}:p_3\right)\ge I\left(p_1:p_3\right).$$

- **Негэнтропийный принцип информации Бриллюэна**. Пусть средние значения случайной микроскопической энтропии $s(u)$ для распределений p и u одинаковы. Тогда с учётом

$$S(p)\equiv\langle s(p)\rangle\equiv\boldsymbol{E}\left[s(p)\right]=-k_{\mathrm{B}}\int d\boldsymbol{z}\,p(\boldsymbol{r})\ln p(\boldsymbol{r})$$

и (1) справедливо следующее неравенство для различающей информации:

$$I\left(p:u\right)=k_{\mathrm{B}}\int d\boldsymbol{z}\,p\ln\left(p/u\right)=-S\left(p\right)+\int d\boldsymbol{z}\,p\,s(u)=$$

$$=-S(p)+\int d\boldsymbol{z}\,u\,s(u)=-S(p)+S(u)\ge 0. \tag{34}$$

Из (34) следует соотношение $I\left(p:u\right)=S(u)-S(p)$, или

$$S(p)=S(u)-I\left(p:u\right), \tag{35}$$

где различающая информация представлена в виде отрицательного вклада в энтропию и потому называется *негэнтропией Шредингера*[**)](1947). В общем случае выполняется *негэнтропийный принцип* Бриллюэна (1960,1966) $I\left(p:u\right)+S(p)-S(u)\geq 0$, где знак неравенства соответствует необратимым процессам, происходящим в рассматриваемой системе. Из (35) следует, что переход системы с энтропией $S(p)$ в состояние с большей энтропией происходит совместно с потерей информации различия $I\left(p:u\right)$ о структуре системы. Аналогично, переход от состояния $S(u)$ к состоянию с меньшей величиной $S\left(p\right)$ энтропии сопровождается увеличением различающей информации. Таким образом, только увеличение различающей информации указывает на наличие процесса самоорганизации в открытой системе. Важно также иметь в виду, что такой вывод правомерен только для тех физических систем, для которых за начало отсчёта степени их хаотичности можно принять состояние теплового равновесия (Климонтович, 1990). Итак, при переходах системы между состояниями происходит взаимное изменение мер беспорядка и порядка.

2. Фундаментальное уравнение Гиббса термодинамики информационных физических процессов

Работа, производимая внешним окружением над системой. Физическая различающаяся информация наряду с другими термодинамическими характеристиками адекватно описывает необратимые явления. Покажем, что существует связь информации различия Кульбака−Лейблера с минимальной работой, совершаемой внешним окружением над открытой термодинамической системой.

Найдём минимальную работу, совершаемую внешней средой над системой, находящейся в неравновесном контакте с окружением. Далее будем считать рассматриваемую открытую систему (далее просто «систему»), частью

[**)] Негэнтропия всегда проявляет тенденцию к убыванию.

большой замкнутой системы (система + окружение). Будем также полагать, что система находится в квазиравновесном состоянии (когда внешние параметры изменяются бесконечно медленно) при температуре T и давлении P, а в окружающей среде отсутствуют необратимые явления, и её температуру T_0, давление P_0 можно считать постоянными. При этом изменение термодинамических величин в окружении удовлетворяет термодинамическому закону $T_0\Delta S_0 = \Delta E_0 - P_0\Delta V_0$. При спонтанном переходе замкнутой системы к полному равновесию температура T и давление P системы сравниваются с величинами T_0 и P_0 (т.е. величины T_0 и P_0 являются, очевидно, температурой и давлением системы в состоянии равновесия). Тогда работа R, совершаемая окружением над системой, затрачивается на изменение полной энергии замкнутой системы, $R = \Delta E + \Delta E_0 = \Delta E + P_0\Delta V_0 + T_0\Delta S_0$. Используя условие $\Delta(V_0{+}V) = 0$ сохранения объёма системы и внешнего окружения и закон возрастания энтропии $\Delta S_0 + \Delta S \geq 0$ большой замкнутой системы, в итоге получим (Ландау, Лифшиц, 1964)

$$R \geq -T_0\Delta S + \Delta E + P_0\Delta V\,, \tag{36}$$

где знак равенства соответствует обратимым явлениям в рассматриваемой системе, а направление процесса при необратимых явлениях в ней указывается знаком неравенства. Согласно неравенству (36), величина минимальной работы, совершаемой окружающей средой над системой, определяется формулой

$$R^{min} = \Delta(E - T_0 S + P_0 V) = -T_0\left(S - S_0\right) + \left(E - E_0\right) + P_0\left(V - V_0\right) \tag{37}$$

(T_0 и P_0, как постоянные величины, могут быть внесены под знак Δ), т.е. эта минимальная работа R^{min} равна изменению величины $\tilde{G} \equiv E - T_0 S + P_0 V$, которая является *неравновесным термодинамическим потенциалом Максвел-*

ла−Гуи (здесь $R^{min} = \Delta\tilde{G} = \tilde{G} - G_0$; $G_0 = E_0 - T_0 S_0 + P_0 V_0$ − равновесная свободная энергия Гиббса). Заметимм, что именно потенциал $\tilde{G}$ был широко использован Ландау и Лифшицем (1964) для вывода условий устойчивости открытой системы, подверженной воздействию внешнего окружения.

Если в течение процесса система находится в каждый данный момент в равновесном состоянии (но, конечно, не в равновесии с внешним окружением), то формулу (37) можно написать в другом дифференциальном виде

$$\delta R^{\min} \geq \delta\tilde{G} = -T_0\delta S + \delta E + P_0\delta V \,, \qquad (38)$$

где изменение работы δR есть функция процесса, а не состояния. Знак равенства соответствует обратимым явлениям в рассматриваемой системе, а направление процесса при необратимых явлениях в ней указывается знаком неравенства. При всяком малом отклонении от равновесия изменение величины $\tilde{G}$ должно быть положительным, т.е. $\delta R^{\min} \geq -T_0\delta S + \delta E + P_0\delta V > 0$.

3. Модифицированное уравнение Гиббса для физико-информационных процессов в пространственно однородных системах.

Различающая информация Кульбака−Лейблера позволяет дать статистическую интерпретацию минимальной работы (37) (см., например, Зарипов, 1999). Рассмотрим сначала спонтанный переход открытой системы от произвольного состояния с распределением $p(\boldsymbol{r})$ к состоянию с распределением Гиббса для изобарически−изотермического ансамбля

$$p_0(\boldsymbol{r}) = \left[Z(T_0, P_0)\right]^{-1} \mathrm{e}^{\left\{-\frac{H(\boldsymbol{r}) + P_0 V(\boldsymbol{r})}{k_B T_0}\right\}},$$

которое соответствует полному равновесному контакту незамкнутой системы с окружающей средой, имеющей давление P_0 и температуру T_0. Этот переход характеризуется информацией различия Кульбака−Лейблера

$$I \equiv I\left(p:p_0\right) = k_B \int dzp \ln\left(\frac{p}{p_0}\right) = -(S-S_0) + \frac{E-E_0}{T_0} + \frac{P_0(V-V_0)}{T_0} = \frac{\tilde{G}-G_0}{T_0}, \quad (39)$$

где $\tilde{G} \equiv E - T_0 S + P_0 V$ – потенциал Максвелла–Гуи; G – свободная энергия Гиббса; $S_0 = -k_B \int dzp_0 \ln p_0$, $E_0 = \int dzp_0 H$ – соответственно равновесные энтропия S_0 и энергия E_0, а для величин S и E в (39) распределение $p_0(\boldsymbol{r})$ в этих формулах заменяется на $p(\boldsymbol{r})$. Из (37) и (39) следует, что выражение для различающей информации связано со значением минимальной работы для обратимых процессов системы равенством $I\left(p:p_0\right) = R^{\min}/T_0$, причём для бесконечно малых изменений имеем: $\delta I = \delta R^{\min}/T_0$. Из (39) следует *соотношение Гиббса термодинамики информационных физических процессов для пространственно однородных сред*

$$dI = -dS + \frac{1}{T_0}dE + \frac{P_0}{T_0}dV, \quad (40)$$

которое описывает бесконечно малые изменения известных термодинамических величин и физической различающей информации в открытых системах с постоянным числом частиц, находящихся в контакте с окружающей средой, имеющей давление P_0 и температуру T_0. Для необратимых информационных физических процессов, согласно (38), имеем $\delta I \le \delta R/T_0$, и в равенство (40), добавляется знак неравенства (Бриллюэн, 1960, 1966). Таким образом, *дифференциальное уравнение для информационных физических величин в открытых однородных системах* имеет вид:

$$dI \ge \frac{1}{T_0}d\tilde{G} = -dS + \frac{1}{T_0}dE + \frac{P_0}{T_0}dV. \quad (41)$$

Отсюда, в частности, вытекает, что для незамкнутой системы, когда не происходит изменения энергии и объёма $(dE = dV = 0)$, имеет место неравенство $dI + dS \geq 0$, которое является точным отражением *фундаментального негэнтропийного принципа Бриллюэна*, обобщающего принцип Карно–Клаузиуса о возрастании энтропии для замкнутых систем $dS \geq 0$. Из неравенства $dI + dS \geq 0$ также следует, что при необратимых процессах увеличение энтропии системы $dS \geq -dI$ больше, чем уменьшение информации различия Кульбака–Лейблера. В этом случае самопроизвольные спонтанные переходы приведут, в конечном счёте, к полному равновесному состоянию замкнутой неравновесной системы. При отсутствии изменения работы $(\delta R = 0)$, имеет место общий принцип уменьшения различающей информации $dI \leq 0$. Выполнение этого неравенства является необходимым условием устойчивости полного равновесия системы.

Распространим теперь неравенство (41) на случай спонтанного перехода между произвольным состоянием открытой системы с переменным числом частиц к равновесному состоянию внешнего окружения с обобщенным распределением Гиббса

$$p(\boldsymbol{r},\beta_0,P_0,\{\mu_{k0}\}) = \mathrm{e}^{\left\{-k_{\mathrm{B}}^{-1}\beta_0\left(H(\boldsymbol{r})+P_0V(\boldsymbol{r})-\sum\limits_{k=1}^{R}\mu_{k0}N_k(\boldsymbol{r})\right)\right\}},$$

где β_0, P_0 и μ_{k0} суть интенсивные переменные, характеризующие окружение. Тогда физическая информация различия запишется так

$$I = I\left(p : p_0\right) = k_B \int p \ln\left(\frac{p}{p_0}\right) d\boldsymbol{z} \geq$$

$$\geq -(S - S_0) + \frac{E - E_0}{T_0} + \frac{P_0(V - V_0)}{T_0} - \sum_{k=1}^{R} \frac{\mu_{k0}}{T_0}\left[\langle N_k\rangle - \langle N_k\rangle_0\right]. \tag{42}$$

Отсюда обобщение дифференциального уравнения (41) на случай необратимых бесконечно малых изменений термодинамических величин и физической различающей информации в открытой системе с переменным числом частиц (находящихся в контакте с окружением, имеющим давление P_0 и температуру T_0) принимает, согласно (42), следующий вид:

$$dI \geq -dS + \frac{1}{T_0}dE + \left(\frac{P_0}{T_0}\right)dV - \sum_{k=1}^{R}\left(\frac{\mu_{k0}}{T_0}\right)d\langle N_k\rangle. \tag{43}$$

Знак равенства соответствует обратимым процессам, а знак неравенства – характеризует необратимые явления при переходах. Неравенство (43) является исходным для определения условий устойчивости макроскопических открытых систем.

Если открытая система находится в состоянии термодинамического равновесия, для которого справедливо классическое фундаментальное тождество Гиббса $TdS = dE + PdV - \sum_{k=1}^{R}\mu_k d\langle N_k\rangle$ равновесной термодинамики, то видоизменённая форма уравнения (43)

$$dI \geq \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)dE + \left(\frac{P_0}{T_0} - \frac{P}{T}\right)dV - \sum_{k=1}^{R}\left(\frac{\mu_{k0}}{T_0} - \frac{\mu_k}{T}\right)d\langle N_k\rangle \tag{44}$$

описывает переходы при контакте рассматриваемой частично равновесной системы с равновесным внешним окружением, в котором интенсивные параметры, такие как температура T_0, давление P_0 и химические потенциалы μ_{k0}, не изменяются сколько-нибудь заметно, т.е. их можно считать постоянными.

***H*-теорема.** Рассмотрим спонтанный переход между произвольным состоянием открытой системы, описываемым распределением $p = p(\boldsymbol{r}, t)$, и состоянием полного равновесия с каноническим распределением Гиббса $p_0 = \mathrm{e}^{\left\{-\left[H(\boldsymbol{r})-F\right]/k_\mathrm{B}T_0\right\}}$. Этот переход характеризуется информацией различия Кульбака–Лейблера

$$I \equiv I\left(p:p_0\right) = k_B \int dz p \ln\left(\frac{p}{p_0}\right) \equiv -(S-S_0) + \frac{E-E_0}{T_0} \geq 0\,, \tag{45}$$

с равенством тогда и только тогда, когда $p = p_0$.

Сравним теперь значения энтропий $S(p) = -k_{\mathrm{B}} \int dz\, p \ln p$ произвольного и полного равновесного состояний системы при одинаковых средних значениях энергии $E = E_0$, что соответствует условию Гиббса (Гиббс, 1982). Информация различия Кульбака–Лейблера $I(p:p_0) = -(S-S_0) \geq 0$ является знакоопределенной функцией Ляпунова (см. (5)). Поэтому, чтобы состояние полного равновесия было устойчивым, необходимо выполнение следующего неравенства для производной:

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{d\left(S-S_0\right)}{dt} \leq 0\,. \tag{46}$$

Из (46) следует закон возрастания энтропии со временем (или убывания H-функции; $S = -k_B H$) в статистической механике

$$dS/dt \geq 0\,, \tag{47}$$

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

4. Модифицированное уравнение Гиббса для пространственно неоднородных сплошных сред

Обобщим теперь рассмотренный в предыдущем разделе метод равновесных статистических ансамблей Гиббса и теоретико-информационное описание обменных явлений между открытой пространственно однородной системой и внешним окружением на квазиравновесные статистические ансамбли и соответствующие статистические распределения, описывающие необратимую эволюцию континуальных систем, т.е. распространим уравнение (44), описывающее также переходы между частичным и полным равновесием одной рассматриваемой системы, на случай пространственно неоднородных сплошных сред.

Метод микроскопической фазовой плотности. Следует отметить, что в научной литературе существует большое число различных статистических подходов к описанию неравновесных процессов в рамках единого метода статистических ансамблей при использовании понятия неравновесной энтропии. В частности, такой подход, известный теперь как *метод неравновесного статистического оператора*, был развит Д.Н. Зубаревым в монографиях (Зубарев, 1971; Зубарев и др., 2002). Суть этого подхода заключается в том, что описание неравновесных процессов ведётся с помощью «крупноструктурных» функций распределения $f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t)$, усреднённых по малым фазовым ячейкам или по малым промежуткам времени Δt. Для кинетической стадии неравновесных процессов Δt выбирается таким, что выполняется неравенство $\tau_0 << \Delta t << \tau_{rel}$, где τ_0 – время столкновения частиц, τ_{rel} – время релаксации, в течение которого устанавливается локальное равновесие в макроскопически малых объёмах, содержащих, однако, большое число частиц. На кинетической шкале времени детали отдельных столкновений становятся несущественными и состояние газа можно описать одноточечной функцией распределения $f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t)$ в шестимерном фазовом пространстве, которую можно определить как осреднённое по ансамблю Гиббса значение динамической переменной

$$N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t)=\sum_{k=1}^{N}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}_k)\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_k)\,,\quad \int N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t)d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{p}=N\,, \tag{48}$$

представляющей собой безразмерную микроскопическую фазовую плотность в 6-мерном фазовом пространстве. Тогда первый момент случайной функции N связан с одноточечным распределением f соотношением:

$$\langle N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t)\rangle = \int d\boldsymbol{z}\, p(\boldsymbol{r},t) N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t) = f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t)\,. \tag{49}$$

Понятно, что в этом случае используется сокращённое описание системы.

Наконец, на гидродинамической стадии эволюции системы, т.е. для таких масштабов времени, что $\tau_{rel} << \Delta t << \tau_{eq}$ (здесь τ_{eq} – время установления полного теплового равновесия в системе), описание состояния системы ещё более упрощается, поскольку в макроскопически малых объёмах успевает установиться локальное равновесие. Для описания гидродинамической стадии эволюции достаточно набора макроскопических величин (таких как локальные энтропия, энергия, информация различия, концентрация частиц и т.п.), с помощью которых осуществляется сокращённое (огрублённое) описание эволюции системы. Сделаем для этого ключевое предположение, считая, что в случае стационарного неравновесного состояния системы, локальная (на единицу массы) информация различия Кульбака связана с локальными термодинамическими параметрами состояния так же, как полная информация различия I зависит от глобальных экстенсивных величин $S,\, E, V$ и $\langle N_k \rangle$.

Локально-равновесное распределение. Для определения термодинамических параметров неравновесных (локально-равновесных) состояний системы необходимо иметь соответствующий статистический ансамбль, представляющий системы в состоянии, отличном от равновесного. Для точного определения локально-равновесного ансамбля нужно определить соответствующую ему функцию распределения.

Локально-равновесное распределение иногда вводят с помощью нестрогих интуитивных соображений (Зубарев,1971). Изложим коротко эти соображения. Предположим, что за время τ_{rel} в макроскопически малом объёме ΔV вблизи пространственной координаты $\boldsymbol{x}$ установится «квазигиббсовское» распределение с местной температурой $T(\boldsymbol{x}) \equiv \beta^{-1}(\boldsymbol{x})$, давлением $P(\boldsymbol{x})$ и с химическими потенциалами $\mu_k(\boldsymbol{x})$. Тогда локально-равновесное состояние системы описывается следующим квазиравновесным статистическим распределением (см. Mori, 1958; Зубарев, 1971)

$$f(\boldsymbol{p},t)=Z^{-1}\exp\left\{-k_{\mathrm{B}}^{-1}\int d\boldsymbol{x}\left[\beta(\boldsymbol{x})\left(H(\boldsymbol{x})+PV(\boldsymbol{x})-\sum_{k=1}^{R}\mu_k(\boldsymbol{x})N_k(\boldsymbol{x})\right)\right]\right\}. \quad (50)$$

Модифицированное уравнение Гиббса для неоднородных сред. Для модификации неравенства (44) с целью использования его для неравновесных информационных физических процессов в сплошных средах рассмотрим переход между состоянием окружающей среды, описываемым квазиравновесным статистическим распределением

$$f_0(\boldsymbol{p})=Z^{-1}\exp\left\{-k_B^{-1}\int d\boldsymbol{x}\left[\beta_0\left(H(\boldsymbol{x})+P_0V(\boldsymbol{x})-\sum_{k=1}^{R}\mu_{k0}N_k(\boldsymbol{x})\right)\right]\right\} \quad (51)$$

и локально-равновесным состоянием рассматриваемой системы с распределением (50), в котором средние значения экстенсивных параметров системы $E(\boldsymbol{x},t), V(\boldsymbol{x})$ и $\langle N_k\rangle(\boldsymbol{x},t)$, а также соответствующие им интенсивные термодинамические переменные $T(\boldsymbol{x},t)$, $P(\boldsymbol{x})$ и $\mu_k(\boldsymbol{x})$ совпадают с истинными значениями макроскопически наблюдаемых параметров.

Отправной величиной является функционал физической информации различия

$$I\left(f:f_0\right)=k_B\int f\ln\left(\frac{f}{f_0}\right)d\boldsymbol{z}\ge-\left(S(\boldsymbol{x},t)-S_0\right)+$$

$$+\int d\boldsymbol{x}\left\{\frac{1}{T_0}\left(E(\boldsymbol{x},t)-E_0\right)+\frac{P_0}{T_0}\left(V(\boldsymbol{x},t)-V_0\right)-\sum_{k=1}^{R}\frac{\mu_{k0}}{T_0}\left(\langle N_k\rangle-\langle N_k\rangle_0\right)\right\}, \quad (52)$$

где для энтропий и средних значений величин $A_k(\boldsymbol{x})$ справедливы выражения

$$S(\boldsymbol{x},t)=-k_B\int f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t)\ln\left[f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t)\right]d\boldsymbol{z},$$

$$S_0 = -k_B \int f_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) \ln\left[f_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) \right] dz\,,$$

$$\langle A_k(\boldsymbol{x},t) \rangle = \int A_k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t) f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p},t) dz\,,$$

$$\langle A_k \rangle_0 = \int A_k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) f_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) dz\,.$$

Рассматривая далее бесконечно малые изменения функционала получим, в силу произвольности объёма V, следующее неравенство для вариаций

$$\delta \mathcal{I}(\boldsymbol{x}) \geq -\delta s(\boldsymbol{x}) + \sum_{k=1}^{M} \lambda_{k0}(\boldsymbol{x}) \delta \langle A_k(\boldsymbol{x}) \rangle\,, \tag{53}$$

которое, при дифференцировании по времени, приводит к следующему модифицированному *неравенству Гиббса термодинамики информационных процессов для пространственно неоднородных систем*:

$$\frac{\partial \mathcal{I}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} \geq -\frac{\partial s(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} + \sum_{k=1}^{M} \lambda_{k0} \frac{\partial}{\partial t} \langle A_k(\boldsymbol{x}) \rangle \equiv$$

$$\equiv -\frac{\partial s(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} + \frac{1}{T_0}\frac{\partial e(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} + \frac{p_0}{T_0}\frac{\partial v(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} - \sum_{k=1}^{R} \frac{\mu_{k0}}{T_0} \frac{\partial z_k(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}\,. \tag{54}$$

Уравнения (53) и (54) записаны через следующие *удельные физические величины*, рассчитанные на единицу массы системы: $\mathcal{I}(\boldsymbol{x},t)$ – физическая информация различия Кульбака–Лейблера, отнесённая к единице массы системы; $s(\boldsymbol{x},t)$ – удельная энтропия; $e(\boldsymbol{x},t)$ – удельная энергия в движущейся системе координат; $v(\boldsymbol{x},t)$ – удельный объём (или плотность $\rho(\boldsymbol{x},t) \equiv 1/v$); $n_k(\boldsymbol{x},t)$ – числовая плотность k-компоненты в единице объёма; $z_k(\boldsymbol{x},t) \equiv n_k/\varrho$ – числовая плотность α-компоненты в единице массы смеси.

Стационарные неравновесные переходы открытых континуальных системах. Рассмотрим теперь стационарные необратимые переходы в открытой континуальной системе, находящейся в неравновесном контакте с внешней средой и постоянно обменивающейся с ней потоками информации, энергии, вещества и т.п. Устойчивые стационарные состояния системы могут быть как равновесными (обратимыми), так и неравновесными (необратимыми) в зависимости от граничных условий, совместимых с внешними воздействиями. Неравновесный ансамбль может возникнуть в том случае, если, например, на равновесный ансамбль (описываемый одним из классических распределений Гиббса) начинают влиять некоторые внешние возмущения (управляющие параметры), приводящие к изменению характеристик системы, состояние которых и определяет ансамбль (таких как объём, число частиц, химический потенциал и т.п.). Для открытой континуальной системы изменение любой экстенсивной величины $Y(t)$ за время dt может быть представлено в виде суммы двух вкладов: вклада $d_e Y$, обусловленного окружением, и вклада $d_i Y$, связанного с неравновесными процессами внутри системы, т.е. $dY = d_e Y + d_i Y$; член $d_i Y$ можно выразить через скорости необратимых процессов и соответствующие термодинамические силы. Применительно к плотности энтропии $s(\boldsymbol{x},t)$ и плотности информации различия $I(\boldsymbol{x},t)$ открытой сложной системы это выражение принимает вид:

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_e + \left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_i \equiv -\rho^{-1}\nabla\cdot\boldsymbol{J}_{(s)} + \rho^{-1}\sigma[s]; \tag{55}$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} = \left(\frac{\partial I}{\partial t}\right)_e + \left(\frac{\partial I}{\partial t}\right)_i \equiv -\rho^{-1}\nabla\cdot\boldsymbol{J}_{(I)} + \rho^{-1}\sigma[I], \tag{56}$$

откуда

$$\frac{\partial I(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} + \frac{\partial s(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = \rho^{-1}\left\{\sigma[s] + \sigma[I]\right\} + \left\{\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_e I(\boldsymbol{x},t) + \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_e s(\boldsymbol{x},t)\right\}. \tag{57}$$

Здесь первые два члена суть производства величин $I(\boldsymbol{x},t)$ и $s(\boldsymbol{x},t)$, связанные с необратимыми явлениями внутри системы, а два других связаны с влиянием внешней среды.

Вклады в информацию различия величины $(\partial/\partial t)_e I$ и в энтропию величины $(\partial/\partial t)_e s$ могут быть произвольного знака и зависят от характера изменения параметров внешней среды и системы, т.е. потоки различающей информации $\boldsymbol{J}_{(\mathcal{I})}$ и энтропии $\boldsymbol{J}_{(s)}$ между системой и средой могут иметь различные значения и направления. Однако явления внутри системы накладывают на суммарное производство различающей информации и энтропии строго определённый знак

$$\left(\frac{\partial \mathcal{I}}{\partial t}\right)_i + \left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_i = \rho^{-1}\left\{\sigma[\mathcal{I}] + \sigma[s]\right\} \geq 0\,, \tag{58}$$

причём неравенство справедливо для необратимых процессов, а равенство – для обратимых процессов. Если суммарное производство величин $\mathcal{I}(\boldsymbol{x},t)$ и $s(\boldsymbol{x},t)$ превосходит суммарный поток информации различия $\boldsymbol{J}_{(\mathcal{I})}$ и энтропии $\boldsymbol{J}_{(s)}$, то $\sigma[\mathcal{I}] + \sigma[s] > \left|\nabla\cdot\boldsymbol{J}_{(s)} + \nabla\cdot\boldsymbol{J}_{(\mathcal{I})}\right| > 0$ и, согласно (57), получим неравенство $\partial\mathcal{I}/\partial t + \partial s/\partial t > 0$, которое означает, что в результате взаимодействия системы с окружением её эволюция направлена в сторону полного термодинамического равновесия. Следует также отметить, что процессы дезорганизации системы характеризуются неравенствами $\sigma[s] > 0$ и $\sigma[\mathcal{I}] < 0$, которые означают возрастание беспорядка и уменьшение порядка при необратимых переходах системы. Тогда, согласно (58), имеет место некомпенсированное увеличение энтропии $\partial_i s/\partial t > -\partial_i \mathcal{I}/\partial t$, что в итоге и приводит к полной хаотизации системы. В случае, если $\sigma[\mathcal{I}] + \sigma[s] = \nabla\cdot\boldsymbol{J}_{(s)} + \nabla\cdot\boldsymbol{J}_{(\mathcal{I})}$, то имеет место равенство $\partial\mathcal{I}/\partial t + \partial s/\partial t = 0$, которое означает, что система находится в стационарном состоянии, когда, находясь в неравновесном контакте с внешней средой, она постоянно обменивается с ней потоками энергии, вещества и т.п. Наконец, в случае если суммарные потоки энтропии и информации превосходят суммарное их производство $0 < \sigma[\mathcal{I}] + \sigma[s] < \left|\nabla\cdot\boldsymbol{J}_{(s)} + \nabla\cdot\boldsymbol{J}_{(\mathcal{I})}\right|$, то, согласно (57), получим неравенство $\partial I/\partial t+\partial s/\partial t<0$, из которого следует, что эволюция системы направлена в сторону её упорядоченности, т.е. появляется возможность образования устойчивых когерентных пространственно-временных структур.

Заключение

Предложенное в работе информационно-физическое описание процессов самоорганизации в открытых физических системах со стохастичностью открывает многообещающие средства адекватного моделирования как спонтанных переходов между стационарными состояниями системы, так и вынужденных переходов, возникающих благодаря изменениям управляющих параметров, характеризующих воздействие окружения на термодинамическую систему. Имеющаяся связь информации различия Кульбака–Лейблера с минимальной работой, совершаемой внешним окружением над открытой системой, придаёт этой информационной характеристике дополнительное термодинамическое содержание. Развитый здесь подход был использован автором в работах (Колесниченко, 2016a,b) для моделирования информационно− термодинамических процессов и необратимых переходов между квазистационарными состояниями в многокомпонентных реагирующих газовых системах, находящихся в неравновесном контакте с окружением и обменивающихся с ним как энергией, веществом и т.п., так и информацией. Соответственно, конкретная форма модифицированного фундаментального уравнения Гиббса была применена для получения различных *теорем модерации* (см. Prigogine, Defay, 1954), управляющих поведением открытых систем, выведенных из стационарного состояния внешним воздействием. В отличие от эвристического принципа смещения равновесия Ле Шателье−Брауна, доказанного для равновесных состояний, в цитируемой работе дано обобщение этого принципа на стационарные состояния. Затронутые в этой работе идеи имеют первостепенное значение для вопросов, относящихся к биологической эволюции.

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

Список литературы

Бриллюэн Л. Наука и теория информации. М.: ИЛ. 1960. 392 с.

Бриллюэн Л. Научная неопределенность и информация. М.: Мир, 1966. 272 с.

Гиббс Дж. В. Термодинамика. Статистическая механика: Избранные труды. М.: Наука. 1982. 584 с.

Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир. 1973. 280 с.

Зарипов Р.Г. Информация различия и переходы беспорядок-порядок. Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. 1999. 155 с.

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

Зубарев Д.П. Неравновесная статистическая механика. М.: Наука, 1971. 416 с.

Зубарев Д.П., Морозов В.Г., Рёпке Г. Статистическая механика неравновесных процессов. М.: Физматлит, 2002. Т.1. 431с.; Т.2. 295 с.

Климонтович Ю.Л. Турбулентное движение и структура хаоса. Новый подход к статистической теории открытых систем. М.: Наука, 1990. 320 с.

Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. Т.1. М.: ТОО «Янус», 1995. 624 с.

Колесниченко А.В. Информационно-термодинамическое обоснование принципа Ле Шателье-Брауна для химиески активных гидродинамических систем в стационарном состоянии// Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 2016a. № 85. 36 с.

Колесниченко А. В. Информационно-термодинамическая концепция формирования процессов самоорганизации в открытых системах под воздействием внешней среды// Mathematica Montisnigri. 2016b. V. 35. P. 80–106

Колесниченко А.В. Континуальные модели природных и космических сред: Проблемы термодинамического конструирования. М.: ЛЕНАНД 2017. 400 с.

Кульбак С. Теория информации и статистика. М.: Наука. 1967. 408 с.

Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука.1964.584 с.

Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир. 1979. 512 с.

Полак Л.С., Михайлов А.С. Самоорганизация в неравновесных физико-химических процессах. М.: Наука. 1975. 351 с.

Поплавский Р.П. Термодинамика информационных процессов. М.: Наука. 1981. 256 с.

Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир. 2002. 461 с.

Хакен Г. Синергетика: Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир. 1985. 420 с.

Хакен Г. Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным системам. М.: Мир. 1991. 240 с.

Хакен Г. Информация и самоорганизация: макроскопический подход к сложным системам. М.: УРСС: ЛЕНАНД. 2014. 320 с.

Шредингер Э. Что такое жизнь с точки зрения физики? М.: ИЛ. 1947. 47 с.

Эбелинг В. Образование структур при необратимых процессах. М.: Мир. 1979. 279 с.

Beck C., Schlögl F. Thermodenamics of chaotic system. Cambridge University Press. 1993. 286 p.

Kullback S., Leibler R.A. On information and sufficiency // Ann. Math. Statist. 1951. V. 22. P. 79-86.

Marov M. Ya., Kolesnichenko. A. V. Turbulence and Self-Organization. Modeling Astrophysical Objects. Springer New York Heidelberg Dordrecht London. 2013. 657 p.

Mori H. Statistical-Mechanical Theory of Transport in Fluids// Physical Review. 1958. V. 112. № 6. P. 1829-1842.

Prigogine I., Defay R.: Chemical Thermodynamics. Longmans Green and Co., London-New York-Toronto. 1954 .576 p.

Szilard L. Über die Entropieverminderung in einem thermodynamischen System bei Eingriffen intelligenter Wesen (On the reduction of entropy in a thermodynamic system by the intervention of intelligent beings)// Zeitschrift für Physik. 1929. V. 53. S. 840-856.

Оглавление