



Колесниченко А.В.

Информационно-
термодинамическая
концепция формирования
процессов самоорганизации
в открытых системах под
воздействием внешней
среды

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Колесниченко А.В. Информационно-термодинамическая концепция формирования процессов самоорганизации в открытых системах под воздействием внешней среды // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 19. 42 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-19>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

А.В. Колесниченко

**Информационно-термодинамическая
концепция формирования процессов
самоорганизации в открытых системах
под воздействием внешней среды**

Москва — 2015

Колесниченко А.В.

Информационно-термодинамическая концепция формирования процессов самоорганизации в открытых системах под воздействием внешней среды.

Рассматриваются информационно-термодинамические аспекты образования диссипативных структур при необратимых физических процессах в открытой динамической системе, находящейся в неравновесном контакте с окружающей средой и обменивающейся с ней информацией, энергией, веществом и т.п. Приводятся специфические характеристики теоретико-информационного подхода, связанного с исследованием эволюции энтропии Гиббса–Шеннона и информации различия Кульбака как во времени, так и в пространстве управляющих параметров. Теоретико-информационный подход использован при описании неравновесных явлений в сплошных средах вдали от термодинамического равновесия. Проанализированы следствия данного подхода, при котором важную роль играет суммарное локальное производство макроскопической энтропии и информации различия. Изучено влияние изменения внешних управляющих параметров на процессы самоорганизации и необратимости в открытых многокомпонентных средах.

Ключевые слова: теория информации, энтропия Гиббса–Шеннона, информация различия Кульбака, самоорганизация, термодинамика необратимых процессов.

Aleksander Vladimirovich Kolesnichenko

Informational-thermodynamic conception of processes formation of self-organization in open systems under influence of external environment.

Considered the information and thermodynamic aspects of the formation of dissipative structures in irreversible physical processes in an open dynamic system in a non-equilibrium contact with the environment and share it with energy, matter, etc. Discusses the main aspects of the information-theoretic approach, connected with investigation of the evolution of the entropy of Gibbs-Shannon and information differences of Kullback both in time and in space of control parameters. Information and thermodynamic approach used in the study of nonequilibrium phenomena in continuous media away from thermodynamic equilibrium. Analyzed the implications of this approach, in which an important role is played by the total local production of macroscopic entropy and information differences. Discusses the effect of changes in external parameters on the processes of self-organization and irreversibility in thermodynamically open multi-component systems.

Key words: information theory, entropy of Gibbs–Shannon, information differences of Kullback, self-organization, thermodynamics irreversible processes.

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 сложной системы в значительной мере начинает определяться и её информационными свойствами, включая информационное отношение к внешнему окружению [1-3]. Такие системы наряду с обычным обменом энергией и негэнтропией с внешней средой, необходимым для спонтанного формирования различных структур, получают дополнительную возможность своего усложнения и совершенствования благодаря информационному управлению. В результате этого становится возможным появление в сильно неравновесной физической системе благодаря изменениям внешних полей или управляющих параметров (характеризующих воздействие окружения) новых точек бифуркаций, в которых система в общем случае может «выбирать» между различными состояниями. В частности, при достижении сверхкритических значений управляющих параметров в самоорганизующихся открытых системах происходят вынужденные переходы между стационарными состояниями¹⁾, при которых возникают упорядоченные пространственно-временные образования (*диссипативные структуры* по терминологии И. Пригожина), сохраняющиеся только при наличии подкачки энергии, вещества и т.п. из окружающей среды. Они соответствуют той или иной форме когерентного поведения огромного числа молекул. Феноменологически подобный ход эволюции системы можно охарактеризовать также и как получение дополнительной информации от внешней среды. Конкуренция происходящих информационных и кооперативных микроскопических (динамических) процессов в таких системах приводит к их спонтанной самоорганизации²⁾, причём динамическая и информационная сущности процесса эволюции должны разрабатываться в общем случае параллельно и в близком соотношении между собой. Другими словами, при моделировании процессов самоорганизации в открытой нелинейной системе, находя-

¹⁾ В физике рассматривается эволюция к равновесному состоянию или стационарному (в открытых системах) состоянию.

²⁾ Процесс самоорганизации традиционно определяется как самопроизвольное возникновение устойчивых когерентных пространственно-временных структур в динамических нелинейных открытых системах. При этом диссипация играет при образовании структур конструктивную роль.

щейся в неравновесном контакте с окружением, необходимо принимать во внимание как физические обменные процессы (потоками энергии, вещества и т.п.) между открытой системой и её окружением, так и влияние информационных потоков.

В мировой литературе хорошо представлены традиционные термодинамические и статистические аспекты спонтанного возникновения когерентных структур, т.е. процессов самоорганизации при необратимых процессах в сложных физических системах (см., например, [1,2,4-14]). Вместе с тем, до последнего времени существовала известная ограниченность *энтропийного подхода* к изучению спонтанных и вынужденных переходов *порядок-беспорядок*, связанная с весьма поверхностным привлечением к данной проблематике аналитического аппарата современной теории информации. Это особенно удивительно, если учесть, что теоретико-информационный подход также позволяет интерпретировать механизмы возникновения когерентных структур при микро- и макроуровневых методах описания [1-3]. Центральным местом является здесь существующая взаимосвязь между информацией различия Кульбака и минимальной работой, совершаемой окружающей средой над открытой термодинамической системой. Различающая информация не только делает возможным адекватное описание процессов хаотизации и самоорганизации в классических динамических системах, но и позволяет, в частности, наиболее полно исследовать вопрос о взаимодополняемости термодинамических и информационных потоков, вводимых в рассмотрение при моделировании спонтанных и вынужденных переходов между стационарными состояниями открытых сплошных сред гидродинамического типа, находящихся вдали от термодинамического равновесия³⁾.

В связи со сказанным в данной работе в рамках концепции единого теоретико-информационного описания переходов между квазиравновесными состояниями в открытых системах представлен современный информационно-термодинамический подход к образованию диссипативных структур при необратимых физических процессах в открытых динамических системах, подверженных воздействию внешнего окружения. Рассмотрено влияние изменения внешних полей на процессы самоорганизации и деградации в открытых гидродинамических системах. Информационно-термодинамический анализ использован также при описании неравновесных явлений в многокомпонентных сплошных средах, находящихся в контакте с окружением и обменивающихся с ним как энергией, веществом и т.п., так и информацией. В работе проанализи-

³⁾ Связь между энтропией и информацией впервые была открыта в основополагающей работе Сциларда [17]. В дальнейшем в работах Бриллюэна [15,16] 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.

рованы следствия данного подхода, при которых важную роль играет суммарное локальное производство макроскопической энтропии и информации различия. Полученные результаты позволяют, в частности, в отличие от эвристического принципа наименьшего принуждения Ле-Шателье–Брауна (указывающего направление протекания процесса в открытой системе, выведенной из состояния устойчивого равновесия), количественно оценить степень смещения равновесия в химически активной многокомпонентной гидродинамической среде, подверженной влиянию внешнего воздействия.

При написании препринта автор существенно опирался на монографии [1-4,18,19]. В этом ряду особое место занимают работы Р. Зарипова [20-22], в которых впервые в мировой научной литературе было проведено совместное теоретико-информационное рассмотрение динамических и информационных процессов как в аддитивных, так и в неаддитивных системах (в рамках статистики Тсаллиса), а также широко представлены различные информационные стороны происходящих в них процессов самоорганизации и необратимости.

1. Некоторые базовые элементы формализма статистики Гиббса

Использование методов теории информации в статистической механике было введено Джейнсом в 1957 году [23], и это привело к получению множества практических результатов. В частности, если постулировать существование инвариантной меры вероятности, а затем рассматривать статистическую механику как теорию информации, то можно получить все распределения Гиббса из условия максимума информационной энтропии.

Напомним вначале некоторые ключевые понятия статистики Гиббса, которые будут использованы в дальнейшем при конструировании информационно-термодинамической модели открытой динамической системы, находящейся в неравновесном контакте с окружающей средой. Рассмотрим систему из N частиц i , характеризующихся своим положением $\mathbf{q}_i$ и импульсом $\mathbf{p}_i$. В классической механике микроскопическое состояние системы формально задается одной точкой $X = \{\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_N\}$ в $6N$ -мерном *фазовом пространстве* координат и импульсов с элементом объёма $dX = \prod_i dX_i$. Здесь $dX_i = d\mathbf{q}_i d\mathbf{p}_i$ – элемент фазового пространства i -ой частицы, движение которой определяется уравнением Гамильтона для полного гамильтониана системы $H = H(X, a)$, зависящего в общем случае от совокупности обобщенных координат $a = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ – внешних параметров, макроскопически характеризующих со-

стояние статистического равновесия рассматриваемой динамической системы (например, объём системы, напряженность внешнего магнитного поля и т.д.).

Следуя Гиббсу, далее будем рассматривать не одну данную систему, а совокупность большого числа её «копий», находящихся в макроскопически тождественных внешних условиях, т.е. будем рассматривать статистический ансамбль, представляющий в своей совокупности макроскопическое состояние системы. Каждой системе, входящей в ансамбль, соответствует точка X в фазовом пространстве, которая движется по собственной траектории согласно уравнениям Гамильтона. Статистический ансамбль может быть задан фазовой функцией распределения $f \equiv f(X, a)$, которая пропорциональна плотности вероятности распределения систем ансамбля в фазовом пространстве (эта функция всегда положительна, $0 < f(X, a) < \infty$). Такая интерпретация функции распределения означает, что $f(X, a)$ нормирована на единицу. Вводя элемент фазового объёма $d\Gamma$, имеем $\int f(X, a) d\Gamma = 1$.

Как частный случай фазовой функции распределения введём для системы, состоящей из N одинаковых частиц, *безразмерную* функцию распределения $f_N(X, a)$ так, чтобы величина $dw_N = f_N(X, a) d\Gamma_N$ была равна вероятности обнаружить систему ансамбля в элементе $d\Gamma_N$ вблизи фазовой точки X в момент времени t . Условие нормировки для такой функции распределения имеет вид $\int f_N(X, a) d\Gamma_N = 1$. Наиболее естественный способ нормировки $f_N(X, a)$ на единицу состоит в использовании безразмерного элемента $d\Gamma_N = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} dX$, где

$\hbar$ – постоянная Планка [1]. Если интересующая нас система может обмениваться также и частицами с окружением, то соответствующий статистический ансамбль должен включать системы с различными числами частиц. В этом случае число частиц N в приведённых соотношениях следует рассматривать как новую дискретную переменную и условие нормировки должно записываться в виде в $\sum_N \int f_N(X, a) d\Gamma_N = 1$

С помощью функции f могут быть вычислены любые макроскопические параметры стохастической системы⁴⁾. Пусть $\mathcal{F}(X, a)$ – какие-либо характеризующие систему микроскопические динамические переменные. Далее угловыми скобками $\langle \dots \rangle$ будем обозначать математическое ожидание, т.е. средневзвешенное осреднение любой случайной величины, в частности, формула

⁴⁾ В статистической механике предполагается, что средние по статистическому ансамблю совпадают с наблюдаемыми значениями физических величин, которые на самом деле являются средними по времени для единственной рассматриваемой системы (эргодическая гипотеза) [1].

$$\langle \mathcal{F} \rangle = \int_G \mathcal{F} f(X, a) d\Gamma$$

определяет взвешенное среднее значение динамической величины $\mathcal{F}$.

Энтропия Гиббса–Шеннона

В статистической теории открытых систем только энтропия обладает совокупностью свойств, которые позволяют использовать её в качестве количественной *меры статистической неопределённости* в микросостояниях системы [1-3]. Рассматривая произвольное состояние стохастической динамической системы частиц, введём *микроскопическую энтропию*

$$s(f) = -k_B \ln f(X, a), \quad (1)$$

которая является мерой неопределённости состояния X (заметим, что для достоверного события ($f = 1$) неопределённость равна нулю, а при $f = 0$ она равна бесконечности). Здесь k_B – постоянная Больцмана. Среднее значение микроскопической энтропии (1) по объёму фазовой области G [1]

$$\langle s \rangle \equiv S(f) = -k_B \int_G f(X, a) \ln f(X, a) d\Gamma \quad (2)$$

определяет так называемую глобальную *информационную энтропию Гиббса–Шеннона*, которая является функционалом от функции распределения $f(X, a)$. Информационную энтропию Гиббса–Шеннона S , являющуюся математическим ожиданием неопределённости в состояниях физической системы, можно интерпретировать как меру неупорядоченности системы (*статистического хаоса*) и вместе с тем как меру структурной организованности системы (или как *меру недостатка информации* о действительной структуре системы).

Экстремальность канонического распределения Гиббса.

Связь с максимумом информационной энтропии

Дж. Гиббс сформулировал принцип максимума энтропии, который позволяет сравнивать значения энтропии в различных состояниях системы. Согласно Гиббсу функция распределения в состоянии статистического равновесия зависит лишь от однозначных, аддитивных интегралов движения: энергии H , полного импульса P и полного момента количества движения M . Для построения статистических ансамблей в случае статистического равновесия системы для различных внешних условий (макроскопически определяющих ансамбль) необходимо знать, от каких интегралов движения может зависеть функция распре-

деления. Нахождение соответствующих распределений соответствует задаче на экстремум⁵⁾ энтропии (2).

Найдём сначала экстремальное распределение и энтропию для статистического ансамбля Гиббса внешне замкнутых неподвижных динамических систем, для которых возможен равновесный процесс обмена энергией с окружающей средой. Согласно [23], задача определения экстремального распределения, соответствующего экстремуму информационной энтропии (2) при заданной средней энергии $E(a) \equiv \langle H \rangle = \int f H(X, a) dX$, сводится к нахождению безусловного экстремума функционала

$$\mathcal{L} = -k_B \int f \ln f d\Gamma - \beta \int f H(X, a) d\Gamma - k_B (\lambda - 1) \int f d\Gamma, \quad (3)$$

где β и $(\lambda - 1)$ – неизвестные множители Лагранжа. Используя равенство

$$\delta \mathcal{L} = -k_B \int \delta f [\ln f + \beta H(X, a) / k_B + \lambda] d\Gamma = 0, \quad (4)$$

получим следующее экстремальное распределение с параметром β (которое соответствует *каноническому распределению Гиббса*)

$$f(\beta, X, a) = \exp\{-\beta H(X, a) / k_B\} Q^{-1}(\beta). \quad (5)$$

Здесь $Q(\beta, a) = \int \exp\{-\beta H(X, a) / k_B\} d\Gamma$ – статистический интеграл (величина, определяющая термодинамические свойства системы), обладающий следующими свойствами

$$k_B \frac{\partial \ln Q(\beta, a)}{\partial \beta} = -E(a), \quad k_B \frac{\partial [\beta^{-1} \ln Q(\beta, a)]}{\partial (1/\beta)} = S(a). \quad (6)$$

Параметр β меняется в пределах допустимых значений. В случае, когда учитываются другие интегралы движения (например, $\mathbf{P}$ или $\mathbf{M}$) распределение (5) принимает более общий вид

$$f(\beta, X) = Q^{-1} \exp\{-k_B^{-1} [\beta H - \mathbf{U} \cdot \mathbf{P} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{M}]\}, \quad (7)$$

где $\mathbf{U}$ – скорость движения системы как целого; $\boldsymbol{\omega}$ – угловая скорость её вращения. Заметим, что каноническое распределение Гиббса (5) зависит от опре-

⁵⁾ Следуя Джейнсу [23], будем считать понятия теории информации первичными и использовать их в статистической механике. Тогда, рассматривая статистическую механику как теорию информации, можно получить все распределения Гиббса из условия максимума информационной энтропии [1].

деляющих ансамбль макроскопически внешних параметров $a = \{V, N\}$, которые считаются постоянными для всех копий системы.

Для распределения (5) экстремальное значение энтропии Гиббса–Шенонна равняется

$$S^{ext}(\beta, a) = -k_B \int f \ln f d\Gamma = \beta E(a) + k_B \ln Q(\beta, a). \quad (8)$$

Если продифференцировать (8) по β и использовать выражение (6) для средней энергии $E(a)$ рассматриваемой системы, то можно получить известное уравнение квазистатической термодинамики $dS = \beta dE$, которое приводит к следующей естественной интерпретации множителя Лагранжа β :

$$\beta = 1/T \quad (9)$$

(здесь T – абсолютная температура).

Таким образом, распределение (5) совпадает с *каноническим распределением Гиббса*, которое может быть переписано в виде [1,5]

$$f(X, T, a) = \exp\left\{\left[F(a) - H(X, a)\right] / k_B T\right\}, \quad (10)$$

где $F(a) \equiv -k_B T \ln Q(T, a)$ – свободная энергия системы и

$$Q(T, a) = \int \exp\left[-H(X, a) / k_B T\right] d\Gamma \quad (11)$$

– статистический интеграл. С помощью величины $Q(T, a)$ можно найти все термодинамические равенства для канонического ансамбля Гиббса

$$\begin{aligned} dF &= -SdT, \quad E = k_B T^2 \frac{\partial \ln Q}{\partial T} = -T^2 \frac{\partial (F/T)}{\partial T}, \\ S &= k_B \ln Q + k_B T \frac{\partial \ln Q}{\partial T} = \frac{E - F}{T}, \end{aligned} \quad (12)$$

которые указывают на то, что полученные подобным образом величины S и F действительно являются энтропией и свободной энергией рассматриваемой системы. Заметим, что каноническое распределения Гиббса зависит от внешних параметров a (т.е. от объёма V и от полного числа частиц N), определяющих ансамбль макроскопически, которые считаются постоянными для всех копий системы.

Можно показать, что вторая вариация функционала (4) удовлетворяет неравенству

$$\delta^2 \mathcal{L} = -k_B \int \frac{\delta^2 f}{f} d\Gamma \leq 0, \quad (13)$$

которое указывает на то, что найденный экстремум является максимумом соответствующего функционала. Таким образом, распределения (5) максимизируют энтропию Гиббса–Шеннона (*принцип максимума энтропии Гиббса–Шеннона*). Соответствующая этому распределению максимальная информационная энтропия означает низшую степень организованности и, соответственно, наибольшую неупорядоченность, которые возможны при заданных условиях.

Большое каноническое распределение Гиббса.

Связь с максимумом информационной энтропии

Запишем теперь экстремальное значение функции распределения в открытой сложной системе в случае, когда в дополнение к условию $E(a) \equiv \langle H \rangle = \text{const}$, будут сохраняться постоянными значения каких-либо обобщённых сил $\mathcal{F}_i(X, a)$ ($i = 1, 2, \dots, n$) (в частности, когда система может обмениваться с окружением не только энергией, но и частицами). Используемая выше методика получения экстремального распределения и соответствующей энтропии приводит в случае статистического ансамбля незамкнутых систем (характеризуемого многомерным внешним параметром a) к следующему *большому каноническому распределению Гиббса* [1,5]

$$f^{ext}(X, \beta, a) = Z^{-1}(\beta, a) \exp \left[-k_B^{-1} \left\{ \beta H(X, a) + \sum_i^{n-1} a_i \mathcal{F}_i(X, a) \right\} \right], \quad (14)$$

где β – обратная температура; $a = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ – термодинамические параметры, сопряженные с обобщенными силами $\mathcal{F}_i = -\partial H(X, a) / \partial a_i$. Для статистического интеграла большого ансамбля, определяемого из условия нормировки, имеем:

$$Z(\beta, a) = \sum_N \int \exp \left\{ -k_B^{-1} \left[\beta H(X, a) + \sum_i^n a_i \mathcal{F}_i(X, a) \right] \right\} d\Gamma_N. \quad (15)$$

Статистический интеграл для большого канонического ансамбля есть функция параметров β, a_i , макроскопически определяющих ансамбль. Величина $Z(\beta, a)$ определяет термодинамические функции в состоянии неполного статистического равновесия с заданными $\langle \mathcal{F}_i \rangle$ в зависимости от $\beta, \mu_\alpha, \langle \mathcal{F}_i \rangle$. В частности, справедливы соотношения

$$E(a) = -k_B \frac{\partial \ln Z(\beta, a)}{\partial \beta}, \quad \langle \mathcal{F}_i \rangle \equiv F_i = -k_B \frac{\partial \ln Z(\beta, a)}{\partial a_i},$$

$$\langle \Delta H \Delta \mathcal{F}_j \rangle = -k_B \frac{\partial^2 \ln Z(\beta, a)}{\partial \beta \partial a_j}, \quad \langle \Delta \mathcal{F}_i \Delta \mathcal{F}_j \rangle = -k_B \frac{\partial^2 \ln Z(\beta, a)}{\partial a_i \partial a_j}, \quad (i, j = 1, 2, \dots, n), \quad (16)$$

где $F_i \equiv \langle \mathcal{F}_i \rangle$ – равновесные значения обобщённых сил, соответствующих внешним параметрам a_i ; $\Delta \mathcal{F}_i = \mathcal{F}_i - \langle \mathcal{F}_i \rangle$ – отклонение (флуктуация) случайной величины $\mathcal{F}_i$ от её среднего значения. Эти статистические характеристики являются основой для исследования устойчивости термодинамического равновесия макроскопических систем.

Соответствующее экстремальное значение энтропии Гиббса–Шеннона, зависящей от многомерного параметра a , имеет вид

$$S^{ext}(\beta, a) = -k_B \int f^{ext} \ln f^{ext} d\Gamma = \beta E + \sum_i^n a_i F_i + k_B \ln Z(\beta, a), \quad (17)$$

а её дифференциал

$$dS^{ext}(a) = \beta dE + \sum_i^n a_i dF_i \quad (18)$$

представляет собой *обобщённое соотношение Гиббса*. Если сопоставить (18) с *фундаментальным уравнением Гиббса* [10]

$$dS = \frac{1}{T} \left(dE - \sum_{\alpha=1}^K \mu_{\alpha} dN_{\alpha} + p dV + \sum_{i=1}^k \vartheta_i dF_i \right), \quad (19)$$

включающим в себя первый и второй законы термодинамики квазиравновесных систем с переменным числом частиц разного сорта, то можно найти взвешенные средние значения экстенсивных параметров системы

$$\langle \mathcal{F}_i \rangle = \{N_1, \dots, N_m, V, F_1, \dots, F_k\}$$

и соответствующие им интенсивные внешние параметры:

$$\beta = 1/T, \quad a = \{-\mu_1/T, \dots, -\mu_K/T, p/T, \vartheta_1/T, \dots, \vartheta_k/T\}.$$

Здесь $k + K + 1 = n$; μ_{α} , N_{α} – соответственно химический потенциал (на одну частицу) и число частиц α -го сорта; p – давление, а $\vartheta = \{\vartheta_1, \dots, \vartheta_k\}$ – некоторые другие интенсивные параметры, термодинамически сопряженные с обра-

тимым изменением экстенсивных величин F_i – обобщенных термодинамических сил.

При использовании преобразования Лежандра, из (18) следует термодинамическое равенство

$$d\Phi = -Ed\beta - \sum_i^n F_i da_i, \quad (20)$$

где

$$\Phi(\beta, a) = k_B \ln Z(\beta, a) = S - \beta E - \sum_i^n a_i F_i = S + k_B \beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} + k_B \sum_i^n a_i \frac{\partial \ln Z}{\partial a_i} \quad (21)$$

– функция Массье–Планка (логарифм статистического интеграла), с помощью которой многомерное равновесное распределение Гиббса (14) может быть переписано в виде

$$f(X, \beta, a) = \exp \left\{ -k_B^{-1} \left[\Phi + \beta H(X, a) + \sum_i^n a_i \mathcal{F}_i(X, a) \right] \right\},$$

(22)

а информационная энтропия так:

$$S(\beta, a) = \Phi + \beta E + \sum_i^n a_i F_i. \quad (23)$$

Функция Массье–Планка позволяет представить термодинамические соотношения для большого канонического ансамбля Гиббса в особенно симметричной форме: например, равновесные значения экстенсивных термодинамических переменных определяются из формул

$$E(\beta, a) = -\frac{\partial \Phi(\beta, a)}{\partial \beta}, \quad F_i = -\frac{\partial \Phi(\beta, a)}{\partial a_i}, \quad dS = \beta dE + \sum_i^n a_i dF_i. \quad (24)$$

Заметим, однако, что характеристическая функция Массье–Планка не обладает свойствами термодинамического потенциала⁶⁾.

Таким образом, использование экстремальных свойств информационной энтропии есть очень удобный эвристический метод для нахождения различных функций распределения. Различные ансамбли Гиббса эквивалентны в термодинамическом отношении, т.е. вычисленные с их помощью локальные термодинамические функции (не зависящие явным образом от размера системы) совпадают для больших систем в случае термодинамического предельного перехода

⁶⁾ Напомним, что признак термодинамического потенциала таков: работа, которая может быть совершена сложной системой при данных условиях сопряжения с внешним окружением, равна убыли соответствующей характеристической функции.

$V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, $n = V/N = \text{const}$ (см., например, [24]). Поэтому использование того или иного ансамбля – вопрос практического удобства.

2. Физическая информация различия Кульбака

Наряду с энтропией к наиболее существенным статистическим характеристикам сложной динамической системы относится мера информации в одном состоянии относительно другого состояния, которая выражается функционалом Кульбака [25]. Предположим, что система переходит от состояния $f(X, a)$ к состоянию $f'(X, a)$ и статистические наблюдения ведутся относительно состояния $f(X, a)$. В теории информации подобный переход по определению характеризуется *случайной (или микроскопической) информацией различия* в виде разности случайных энтропий

$$i(f, f') = -[s(f) - s(f')] = k_B \ln \frac{f(X, a)}{f'(X, a)}. \quad (25)$$

Целесообразность введения логарифма в данную формулу диктуется тем, что это придает информации свойство аддитивности. Среднее значение по объёму фазовой области G определяет так называемую *различающую информацию Кульбака* или просто *информацию различия* [25]

$$I(f : f') = k_B \int f \ln \left(\frac{f}{f'} \right) d\Gamma, \quad \int f(X, a) d\Gamma = \int f'(X, a) d\Gamma = 1, \quad (26)$$

которая характеризует меру статистической упорядоченности в состояниях системы с распределением $0 < f(X, a) < \infty$ относительно состояния с распределением $0 < f'(X, a) < \infty$.

Наиболее важные свойства функционала (26) подробно рассмотрены в основополагающих работах Кульбака [25, 26]. Здесь мы остановимся лишь на свойстве выпуклости $I(f : f') \geq 0$, которое делает содержание экстремальных свойств энтропии и различающей информации более наглядными.

Знакоопределённость информации различия. Теорема Гиббса

Для произвольных распределений f и f' имеем:

$$I(f : f') = k_B \int f(X, a) \ln \left[\frac{f(X, a)}{f'(X, a)} \right] d\Gamma \geq 0, \quad (27)$$

т.е. информация различия является знакоопределённым функционалом. Знак равенства достигается лишь при $f = f'$.

Выражение (27) есть следствие очевидного неравенства

$$\ln(f/f') \geq 1 - (f'/f), \quad (f > 0, f' > 0), \quad (28)$$

в справедливости которого легко убедиться, заметив, что функция $\ln x - 1 + 1/x$ положительна и равна нулю лишь при $x=1$, а затем, положив $x=f/f'$. При умножении этого неравенства на f и интегрировании результата по всему фазовому пространству можно получить неравенство (27). Действительно,

$$\int f \ln(f/f') d\Gamma \geq \int f \{1 - (f'/f)\} d\Gamma = 0,$$

что и требовалось доказать.

Заметим, что из неравенства (27) также следует *принцип максимума энтропии Гиббса–Шеннона* в равновесном состоянии. Действительно, если ввести энтропию равновесного состояния,

$$S_0(T, a) = -k_B \int f_0(X, a, T) \ln f_0(X, a, T) d\Gamma, \quad \int f_0(X, a, T) d\Gamma = 1,$$

описываемого каноническим распределением Гиббса (10), и энтропию произвольного неравновесного состояния

$$S(t) = -k_B \int f(X, t) \ln f(X, t) d\Gamma, \quad \int f(X, t) d\Gamma = 1$$

которое может зависеть от времени (текущее время в данном случае играет роль управляющего параметра), то из неравенства (27) следует [5]

$$S_0 - S(t) = k_B \int f(X, t) \ln \left[\frac{f(X, t)}{f_0(X, a, T)} \right] d\Gamma \geq 0 \quad (29)$$

(здесь знак равенства имеет место в случае совпадения обоих распределений). При этом важно подчеркнуть, что неравенство (29) справедливо при условии постоянства средней энергии системы $E = \int H(X) f_0(X, a, T) dX = \int H(X) f(X, t) dX$. 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 [2,5].

Неэнтропийный принцип информации Бриллюэна

Пусть средние значения случайной энтропии $s(f')$ для распределений f и f' одинаковы. Тогда, с учетом (2), (26) справедливо следующее неравенство

для различающей информации [3]

$$\begin{aligned} I(f:f') &= k_B \int_G f \ln \left(\frac{f}{f'} \right) d\Gamma = -S(f) + \int_G f s(f') d\Gamma = \\ &= -S(f) + \int_G f' s(f') d\Gamma = -S(f) + S(f') \geq 0. \end{aligned} \quad (30)$$

Из (30) следует соотношение

$$I(f:f') = S(f') - S(f),$$

или

$$S(f) = S(f') - I(f:f'), \quad (31)$$

где информация различия представлена в виде отрицательного вклада в энтропию и потому называется *негэнтропией Шредингера*⁷⁾ [27]. В общем случае выполняется *негэнтропийный принцип Бриллюэна* [15,16]

$$I(f:f') + S(f) - S(f') \geq 0, \quad (32)$$

где знак неравенства соответствует необратимым процессам, происходящим в рассматриваемой системе. Из (31) следует, что переход системы с энтропией $S(f)$ в состояние с большей энтропией $S(f')$ происходит совместно с потерей информации различия $I(f:f')$ о структуре системы. Аналогично, переход от состояния $S(f')$ к состоянию с меньшей величиной $S(f)$ энтропии сопровождается увеличением информации различия. Важно иметь в виду, что такие выводы правомерны только в тех физических системах, когда за начало отсчёта степени хаотичности можно принять состояние теплового равновесия [2]. Итак, при переходах системы между состояниями происходит взаимное изменение мер беспорядка и порядка.

Принцип минимума информации различия

Принцип минимума различающей информации играет важную роль в проверке статистических гипотез математической статистики и в теории самоорганизации. Рассмотрим переход между состояниями системы, которые описываются распределениями $f(X,a)$ и $f'(X,a)$. Рассмотрим сначала случай экстремума информации различия Кульбака при сохранении только нормировки распределения f . Согласно вариационному методу, вычислим безусловный экстремум функционала

⁷⁾ Заметим, что негэнтропия всегда проявляет тенденцию к убыванию.

$$\mathcal{L} = k_B \int f \ln \left(\frac{f}{f'} \right) d\Gamma + k_B (\lambda - 1) \int f d\Gamma, \quad (33)$$

где $(\lambda - 1)$ – неопределенный множитель Лагранжа, $f'(X, a)$ – фиксированное распределение. Из условия равенства нулю первой вариации функционала $\delta \mathcal{L} = \int \delta f (\ln f / f' + \lambda) d\Gamma = 0$ следует распределение

$$f(X, a) = f'(X, a) \exp(-\lambda). \quad (34)$$

Используем условие нормировки распределения $f(X)$ и получим наиболее вероятностное распределение

$$f(X, a) = f'(X, a). \quad (35)$$

Таким образом, различающая информация достигает своего минимального значения $I_{\min} = 0$ при равенстве (35).

Рассмотрим теперь переход между состояниями системы с распределениями $f(X, a)$ и $f'(X, a)$, когда сохраняется средневзвешенная величина

$$\langle \mathcal{F} \rangle = \int \mathcal{F}(X, a) f(X, a) d\Gamma \quad (36)$$

какой-либо случайной динамической переменной $\mathcal{F}(X)$, т.е. на функцию $f(X)$ накладывается дополнительное ограничение с тем, чтобы наиболее вероятное распределение было отлично от $f'(X)$. Нахождение этого распределения связано с определением экстремума информации различия при дополнительном равенстве (36) и условии нормировки. Находим безусловный экстремум функционала

$$\mathcal{L} = k_B \int f \ln \left(\frac{f}{f'} \right) d\Gamma - \tau k_B \int \mathcal{F} f d\Gamma + k_B (\lambda - 1) \int f d\Gamma, \quad (37)$$

где τ и $(\lambda - 1)$ – неопределенные множители Лагранжа. Из условия равенства нулю первой вариации $\delta \mathcal{L} = k_B \int \delta f [\ln(f/f') - \tau \mathcal{F} + \lambda] d\Gamma = 0$ получим распределение

$$f(X, a) = f'(X, a) \exp\{\tau \mathcal{F}(X, a)\} Z^{-1}(a, \tau), \quad (38)$$

где функция

$$Z(a, \tau) \equiv \frac{1}{\exp(-\lambda)} = \int f'(X, a) \exp\{\tau \mathcal{F}(X, a)\} dX \quad (39)$$

имеет следующие свойства

$$k_B \tau^2 \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\frac{1}{\tau} \ln Z(a, \tau) \right] = I(f:f'), \quad \frac{\partial \ln Z(a, \tau)}{\partial \tau} = -\langle \mathcal{F} \rangle. \quad (40)$$

Здесь параметр τ меняется в пределах допустимых значений.

Распределение (38) даёт следующее экстремальное значение информации различия

$$I(f:f') = k_B \int f \ln \left(\frac{f}{f'} \right) d\Gamma = k_B \tau \int f \mathcal{F} d\Gamma - k_B \ln Z(\tau) = -k_B \tau \langle \mathcal{F} \rangle - k_B \ln Z(\tau). \quad (41)$$

Из соотношений (40) следует, что величины $\langle \mathcal{F} \rangle$ и τ являются строго возрастающими функциями своих аргументов и между ними имеет место взаимно однозначное соответствие. Отметим следующие два свойства информации различия $I(f:f')$ в зависимости от значений τ и $\langle \mathcal{F} \rangle$:

- функция $I(f:f')$ является выпуклой, т.е. $I(f:f') \geq 0$, причём равенство достигается при $\tau = 0$;
- функция $I(f:f')$ монотонно возрастает при $\langle \mathcal{F} \rangle \geq \langle \mathcal{F} \rangle_{\tau=0}$ и монотонно убывает при $\langle \mathcal{F} \rangle \leq \langle \mathcal{F} \rangle_{\tau=0}$.

Вторая вариация функционала (43) имеет вид:

$$\delta^2 \mathcal{L} = k_B \int \frac{\delta^2 f}{f} d\Gamma \geq 0. \quad (42)$$

Из этого неравенства следует, что экстремум соответствует минимуму функционала. Таким образом, распределение (38) даёт минимальное значение различающей информации.

3. Информационные физические процессы в незамкнутых системах

Минимальная работа, производимая внешним окружением над системой, и информация различия

Покажем, что существует связь информации различия Кульбака с минимальной работой, совершаемой внешним окружением над термодинамической системой [3].

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

«систему»), частью 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 удовлетворяют 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 $\mathbb{R}$, совершаемая окружением над системой, затрачивается на изменение полной энергии замкнутой системы, $\mathbb{R} = \Delta E + \Delta E_0 = \Delta E + p_0\Delta V_0 + T_0\Delta S_0$. Используя условие сохранения объёма системы и внешнего окружения $\Delta(V_0 + V) = 0$ и закон возрастания энтропии $\Delta S_0 + \Delta S \geq 0$ большой замкнутой системы в итоге получим [29]

$$\mathbb{R} \geq -T_0\Delta S + \Delta E + p_0\Delta V, \quad (43)$$

где знак равенства соответствует обратимым явлениям в рассматриваемой системе, а направление процесса при необратимых явлениях в ней указывается знаком неравенства. Согласно неравенству (43), величина минимальной работы, совершаемая окружающей средой над системой, определяется формулой

$$\mathbb{R}^{\min} = \Delta(E - T_0S + p_0V) = -T_0(S - S_0) + (E - E_0) + p_0(V - V_0) \quad (44)$$

(T_0 и p_0 как постоянные величины могут быть внесены под знак Δ), т.е. эта минимальная работа равна изменению величины $\tilde{\Phi} \equiv E - T_0S + p_0V$. Заметим, что эта величина является *неравновесным термодинамическим потенциалом Максвелла–Гуи*. Именно этот потенциал был использован Ландау и Лифшицем [28] 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 со средой), то формулу (44) можно написать в другом виде

$$\delta\mathbb{R}^{\min} \geq -T_0\delta S + \delta E + p_0\delta V, \quad (45)$$

где изменение работы $\delta\mathbb{R}$ 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 $\tilde{\Phi}$ должно быть положительным, т.е. $\delta\mathbb{R}^{\min} \geq -T_0\delta S + \delta E + p_0\delta V > 0$.

Основное соотношение термодинамики информационных процессов

Методы современной теории информации, разработанные на мере Кульбака, служат естественной основой для статистической интерпретации минимальной работы (44). Рассмотрим сначала спонтанный переход рассматриваемой открытой системы от произвольного состояния с распределением $f(X)$ к состоянию с распределением Гиббса для *изобарически-изотермического ансамбля*

$$f_0(X) = [Q(T_0, p_0, N)]^{-1} \exp \left\{ -\frac{H(X) + p_0 V}{k_B T_0} \right\}, \quad (46)$$

которое соответствует полному равновесному контакту открытой системы с окружающей средой, имеющей давление p_0 и температуру T_0 .

Этот переход характеризуется информацией различия Кульбака

$$I = I(f, f_0) = k_B \int f \ln \frac{f}{f_0} d\Gamma = -(S - S_0) + \frac{E - E_0}{T_0} + \frac{p_0(V - V_0)}{T_0}, \quad (47)$$

где равновесные энтропия S_0 и энергия E_0 вычисляются по формулам

$$S_0 = S(f_0) = -k_B \int f_0(X) \ln f_0(X) d\Gamma, \quad E_0 = \int H(X) f_0(X) d\Gamma,$$

а для величин S и E в (47) распределение $f_0(X)$ в этих формулах заменяется на $f(X)$. Из (47) следует, что выражение для различающей информации связано со значением минимальной работы для обратимых процессов системы равенством $I = \mathbb{R}^{\min} / T_0$, причём для бесконечно малых изменений имеем: $\delta I = \delta \mathbb{R}^{\min} / T_0$. Отсюда следует *основное соотношение термодинамики информационных физических процессов*

$$dI = -dS + \frac{1}{T_0} dE + \frac{p_0}{T_0} dV, \quad (48)$$

описывающее изменения известных термодинамических величин и физической информации различия 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 имеем $\delta I \leq \delta \mathbb{R} / T_0$ и в равенство (48), описывающее изменения известных термодинамических величин и физической информации различия, добавляется знак нера-

венства [15,16]

$$dI \geq -dS + \frac{1}{T_0} dE + \frac{p_0}{T_0} dV. \quad (49)$$

Основное соотношение термодинамики информационных процессов для системы с переменным числом частиц

Обобщим результаты для спонтанного перехода между произвольным неравновесным состоянием открытой системы с переменным числом частиц и равновесным состоянием внешнего окружения, описываемым большим каноническим распределением Гиббса

$$f(X, a) = Q^{-1} \exp \left\{ -k_B^{-1} \left[\beta_0 H(X) + \sum_{i=1}^n a_{i0} \mathcal{F}_i(X) \right] \right\}. \quad (50)$$

Тогда физическая информация различия запишется так

$$\begin{aligned} I = I(f : f_0) &= k_B \int f \ln \frac{f}{f_0} d\Gamma = \\ &= -(S - S_0) + \frac{E - E_0}{T_0} - \sum_{\alpha=1}^K \frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} [N_{\alpha} - N_{\alpha 0}] + \frac{p_0(V - V_0)}{T_0} + \sum_{i=1}^k \vartheta_{i0} [\langle \mathcal{F}_i \rangle - \langle \mathcal{F}_i \rangle_0] \geq 0. \end{aligned} \quad (51)$$

Таким образом, обобщение дифференциального уравнения (48) для необратимых информационных физических процессов в открытой системе с переменным числом частиц, находящихся в контакте с окружением, имеющим давление p_0 и температуру T_0 , запишется, согласно (51), в следующем виде

$$\begin{aligned} 0 \leq dI &= -dS + \beta_0 dE + \sum_{k=1}^n a_{0k} d\langle \mathcal{F}_k \rangle \equiv \\ &\equiv -dS + T_0^{-1} dE - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) dN_{\alpha} + (p_0 T_0^{-1}) dV + \sum_{i=1}^k \vartheta_{i0} dF_i. \end{aligned} \quad (52)$$

Если рассматриваемая система находится в состоянии локального равновесия, для которого справедливо основное термодинамическое тождество

$$TdS = dE - \sum_{\alpha=1}^K \mu_{\alpha} dN_{\alpha} + p dV + \sum_{i=1}^k \vartheta_i dF_i,$$

то неравенство

$$dI \geq (T_0^{-1} - T^{-1})dE + (p_0 T_0^{-1} - p T^{-1})dV - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1} - \mu_{\alpha} T^{-1})dN_{\alpha} + \sum_{i=1}^k (\vartheta_{i0} - \vartheta_i)dF_i \quad (53)$$

описывает необратимые процессы при неравновесном контакте локально равновесной открытой системы с внешним окружением, в котором отсутствуют неравновесные явления, т.е. её температура T_0 , давление p_0 и химические потенциалы $\mu_{\alpha 0}$ не изменяются сколько-нибудь заметно, и, следовательно, их можно считать постоянными.

Основное соотношение термодинамики информационных процессов для пространственно неоднородных сред

Наконец, можно известным феноменологическим путем [1,3] обобщить соотношение (52), записанное для пространственно однородных систем, на случай негомогенных сплошных сред, который соответствует, в частности, гидродинамическому приближению в кинетической теории газов.

Рассмотрим переход между локально-равновесным состоянием f_0

$$f_0 = Z^{-1} \exp \left[-k_B^{-1} \int \left\{ \beta_0(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}) + \sum_i^{n-1} a_{i0}(\mathbf{x}) \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) \right\} dV \right], \quad \int f_0(\mathbf{X}, a) d\Gamma = 1 \quad (54)$$

и произвольным состоянием $f(t)$, где экстенсивные величины $H(\mathbf{x})$ и $\mathcal{F}_i(\mathbf{x})$ и интенсивные параметры $\beta_0(\mathbf{x})$ и $a_{i0}(\mathbf{x})$ зависят также от пространственных координат $\mathbf{x}$. Исходной величиной является функционал информации различия

$$\begin{aligned} I = I(f : f_0) &= k_B \int f \ln \left(\frac{f}{f_0} \right) d\Gamma = \\ &= -(S - S_0) + \int \sum_i^n a_{i0}(\mathbf{x}) [\langle \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) \rangle - \langle \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) \rangle_0] dV \geq 0, \end{aligned} \quad (55)$$

где для энтропий и средних значений имеем выражения

$$S(t) = -k_B \int f(\mathbf{X}, t) \ln f(\mathbf{X}, t) d\Gamma, \quad S_0 = -k_B \int f_0(\mathbf{X}, a, T) \ln f_0(\mathbf{X}, a, T) d\Gamma, \quad (56)$$

$$\langle \mathcal{F}_i(\mathbf{x}, t) \rangle = \int \mathcal{F}_i(\mathbf{x}, \mathbf{X}, t) f(\mathbf{X}, a) d\Gamma, \quad \langle \mathcal{F}_i(\mathbf{x}, t) \rangle_0 = \int \mathcal{F}_i(\mathbf{x}, \mathbf{X}, t) f_0(\mathbf{X}, a) d\Gamma. \quad (57)$$

Далее, рассматривая изменения функционала и определяя плотности информации различия $I(\mathbf{x})$ и энтропии $s(\mathbf{x})$, получим, в силу произвольности объема V , уравнение для вариаций

$$\delta I(\mathbf{x}) = -\delta s(\mathbf{x}) + \sum_i^n a_{i0}(\mathbf{x}) \delta \langle \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) \rangle \geq 0, \quad (58)$$

которое при дифференцировании по времени приводит к следующему основному соотношению термодинамики информационных процессов для пространственно неоднородных систем

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{\partial I(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial s(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^n a_{i0} \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathcal{F}_i(\mathbf{x}) \rangle \equiv \\ &\equiv -\frac{\partial s(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + (T_0^{-1}) \frac{\partial e(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + (p_0 T_0^{-1}) \frac{\partial v(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \frac{\partial n_{\alpha}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^k g_{i0} \frac{\partial f_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (59)$$

Здесь введены удельные величины, рассчитанные на единицу массы системы, а именно $I(\mathbf{x}, t)$ – физическая информация различия Кульбака, отнесённая к единице массы системы; $s(\mathbf{x}, t)$ – удельная энтропия; $e(\mathbf{x}, t)$ – удельная энергия в движущейся системе координат; $n_{\alpha}(\mathbf{x}, t)$ – числовая плотность α -компоненты в единице объёма; $f_i(\mathbf{x}, t)$ – обобщённая термодинамическая сила, отнесённая к единице массы.

Теорема Гиббса и H-теорема. Условия хаотизации системы

Сравним теперь значения энтропии $S(t)$ для произвольного неравновесного состояния рассматриваемой открытой системы и энтропии S_0 для полностью равновесного состояния этой системы, которое определяется большим каноническим распределением Гиббса (19) при условии Гиббса $E=E_0$, $V=V_0$ и $N_{\alpha}=N_{\alpha 0}$. Тогда, при использовании неравенства (51), в результате получим *теорему Гиббса* в виде неравенства

$$I = I(f : f_0) = -(S(t) - S_0) \geq 0, \quad (60)$$

из которого следует теорема Гиббса о максимуме энтропии равновесного состояния, $\max S = S_0 \geq S(t)$. Данный случай соответствует такой физической ситуации в термодинамике незамкнутых систем, когда в системе не происходит изменения энергии, объёма и вещества ($dE = dV = dN_{\alpha} = 0$). С другой стороны, из (60) следует, что увеличение энтропии $S(t)$ до её максимального значения S_0 в равновесии происходит совместно с потерей информации различия I , т. е. имеет место совместное увеличение статистического беспорядка (хаоса) и уменьшение статистической упорядоченности микросостояний системы.

Когда в системе не происходит изменение энергии и объёма (система внешне замкнута), то из (49) вытекает выражение негэнтропийного принципа Бриллюэна [3]

$$dI + dS \geq 0, \quad (61)$$

обобщающее принцип Карно–Клазиуса о постоянном возрастании энтропии для внешне замкнутых изолированных систем: $dS \geq 0$ [5,19]. При отсутствии изменения работы ($\delta \mathbb{R} = 0$) выполняется общий принцип уменьшения различающей информации Кульбака $dI \leq 0$ [15,16]. Таким образом, взаимное изменение энтропии и физической информации различия сопровождается потерей упорядоченности микросостояний системы. Другими словами, при необратимых явлениях увеличение энтропии $d(S_0 - S) > -dI$ больше, чем уменьшение различающей информации. Следовательно, происходит разрушение структур незамкнутой неравновесной системы, а спонтанные переходы приведут, в конце концов, к полному равновесному состоянию системы (т.е. к хаосу) с максимальным беспорядком в микросостояниях.

С другой стороны, второе начало термодинамики утверждает, что для внешне замкнутых систем существует *функционал Ляпунова* и термодинамическое равновесие S_0 является аттрактором для неравновесных состояний $S(t)$. Тогда именно информация различия Кульбака I (60), которая определяется разностью энтропий равновесного и неравновесного состояний, является «энтропийным» функционалом Ляпунова, поскольку она знакоопределена ($I \geq 0$) и обращается в нуль лишь для равновесного состояния, $S = S_0$ [2,5]. Согласно теореме Ляпунова, для того чтобы полностью равновесное состояние S_0 было устойчивым (т.е. являлось аттрактором), необходимо выполнение следующего неравенства для временной производной от информации различия

$$dI/dt = -d(S(t) - S_0)/dt \leq 0. \quad (62)$$

Из (62) следует неравенство для энтропии

$$dS(t)/dt \geq 0, \quad (63)$$

которое соответствует *H-теореме (закону временной эволюции энтропии)* для внешне замкнутой неравновесной макроскопической системы при приближении её (в результате спонтанных переходов) к состоянию полного равновесия (хаоса).

Отметим ещё раз, что при установлении результата (60) существенно, что в процессе эволюции к равновесному состоянию средняя энергия замкнутой системы сохраняется. Только при наличии этого условия информация различия Кульбака, вычисленная по формуле (51), является функционалом Ляпунова.

Стационарные необратимые процессы

До сих пор рассматривались лишь квазиравновесные процессы. Перейдём теперь к рассмотрению стационарных неравновесных (необратимых) процессов в открытых системах. Одна из основных задач теории необратимых процессов – изучение влияния на статистические ансамбли нарушающих равновесие факторов. Неравновесный ансамбль может возникнуть, например, если на рассматриваемый равновесный ансамбль (описываемый одним из распределений Гиббса) начинают влиять некоторые внешние возмущения (управляющие параметры), приводящие к изменению характеристик системы, задание которых и определяет ансамбль (такие, как объём, число частиц, химический потенциал и т.п.). Причиной этих возмущений может быть или совершаемая над системой работа, через изменение её объёма (давления), или взаимодействие с другим ансамблем (обладающим иными температурой, давлением или химическим потенциалом), или, наконец, влияние внешних полей, непосредственно воздействующих на частицы системы.

Рассмотрим случай открытой системы. Для такой системы изменение любой экстенсивной величины $\Lambda(t)$ за время dt может быть представлено в виде суммы двух вкладов: вклада $d_e \Lambda$, обусловленного внешними факторами, и вклада $d_i \Lambda$, связанного с внутренними свойствами самой системы, т.е. $d\Lambda = d_e \Lambda + d_i \Lambda$. Применительно к информации различия I и энтропии S это выражение принимает вид

$$dI = d_e I + d_i I, \quad dS = d_e S + d_i S, \quad (64)$$

откуда

$$dI + dS = (d_i I + d_i S) + (d_e I + d_e S). \quad (65)$$

Здесь первые два члена суть произведения исследуемых величин, связанные с необратимыми явлениями внутри системы, а остальные связаны с внешней средой. Вклад в информацию различия $d_e I$ и в энтропию $d_e S$ может быть произвольного знака и зависит от характера изменения параметров среды и системы. Однако на изменения внутри системы накладывается ограничение в виде

$$d_i I + d_i S = 0 \quad (\text{для обратимых процессов}); \quad (66)$$

$$d_i I + d_i S > 0 \quad (\text{для необратимых процессов}). \quad (67)$$

Процессы дезорганизации системы характеризуются неравенствами

$$d_i S > 0, \quad d_i I < 0, \quad (68)$$

которые означают возрастание беспорядка и уменьшение порядка при необратимых переходах системы. Тогда, согласно (67), имеем некомпенсированное увеличение энтропии

$$d_i S > -d_i I, \quad (69)$$

что в итоге и приводит к полной хаотизации системы.

Итак, для обратимых процессов имеем условие (66) и из (52) получаем

$$\begin{aligned} 0 &= d_i I + d_i S = dI + dS - \beta_0 dE - \sum_k^n a_{0k} d\langle \mathcal{F}_k \rangle \equiv \\ &\equiv dI + dS - \left(\frac{1}{T_0} \right) dE + \sum_{\alpha=1}^K \left(\frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} \right) dN_{\alpha} - \left(\frac{p_0}{T_0} \right) dV + \sum_i^k \vartheta_{i0} dF_i. \end{aligned} \quad (70)$$

В случае необратимых явлений из (52), согласно (67), вытекает неравенство [16]

$$0 \leq d_i I + d_i S = dI + dS - \left(\frac{1}{T_0} \right) dE + \sum_{\alpha=1}^K \left(\frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} \right) dN_{\alpha} - \left(\frac{p_0}{T_0} \right) dV + \sum_i^k \vartheta_{i0} dF_i, \quad (71)$$

являющееся исходным для определения условий устойчивости макроскопических открытых систем. Если для обменных процессов справедливо равенство

$\beta_0 dE + \sum_k^n a_{0k} d\langle \mathcal{F}_k \rangle = 0$, то из (71) имеем $dI + dS \geq 0$, что для возмущений конеч-

ной величины даёт условие устойчивости в виде $\Delta I + \Delta S < 0$. Следовательно для вариаций справедливы соотношения: $\delta I + \delta S = 0$ и $\delta^2 I + \delta^2 S < 0$, где первое равенство определяет неравновесное стационарное состояние, а второе неравенство является условием устойчивости. Если в системе не происходит изменения информации различия $dI = 0$, то из полученных выражений следуют известные критерии устойчивости Гиббса–Дюгема [4].

Дегградация и самоорганизация открытой системы под воздействием окружения

В случае вынужденных переходов открытой системы могут возникнуть процессы самоорганизации. Вынужденные переходы между состояниями меняют термодинамические параметры системы и физическую информацию различия Кульбака, изменения которой связаны с изменением упорядоченности в микросостояниях системы. Увеличение различающей информации будет свидетельствовать о наличии процесса самоорганизации в открытой системе, которая в процессе эволюции переходит через ряд стационарных состояний, последова-

тельно чередующихся при увеличении одной или нескольких величин $a = (a_1, a_2, \dots, a_l)$, выбранных в качестве управляющих параметров.

Физико-химические процессы внутри системы, находящейся под влиянием окружающей среды, накладывают на суммарное производство информации различия и энтропии (65) строго определённый знак, а информационные и термодинамические потоки между системой и средой могут иметь различные значения и направления. Здесь возможны следующие соотношения для информационных и термодинамических процессов [18]:

$$d_i(I + S) / dt > |d_e(I + S) / dt| > 0, \quad 0 < d_i(I + S) / dt < d_e(I + S) / dt \quad (72)$$

$$d_i(I + S) / dt = -d_e(I + S) / dt, \quad (73)$$

$$0 < d_i(I + S) / dt < |d_e(I + S) / dt|, \quad d_e(I + S) / dt < 0. \quad (74)$$

Для случаев (72) получим, согласно (65), неравенство

$$d(I + S) / dt > 0, \quad (75)$$

которое означает, что в результате взаимодействия системы с окружающей средой её эволюция направлена в сторону хаотизации, а в итоге, к полному термодинамическому равновесию. Это даёт основание в таком случае говорить о деградации.

Соотношение (73) определяет неравновесное стационарное состояние физической системы, для которого имеем

$$d(I + S) / dt = 0. \quad (76)$$

Указанное состояние характеризуется тем, что система, находясь в неравновесном контакте со средой, постоянно обменивается с ней потоками информации, энергии, вещества и т.п. При этом нормы степени самоорганизации и деградации сбалансированы и система не стремится к равновесию со средой. Суммарный поток информации различия и энтропии компенсируется производством этих величин внутри системы.

Ситуация, определяемая неравенствами (74), представляется наиболее интересной, поскольку суммарный отрицательный поток между системой и средой превышает по величине суммарное производство информации различия и энтропии. Это приводит, согласно (65), к неравенству

$$d(I + S) / dt < 0, \quad (77)$$

из которого следует, что эволюция системы направлена в сторону упорядоченности и появляется возможность формирования самоорганизующихся структур.

Для этого необходимы условия, при которых управляющие параметры достигают таких (закритических) значений, когда начинают выполняться неравенства (74). При этом сама физическая система должна находиться в неравновесном состоянии и обладать нелинейной внутренней динамикой, а микроскопические процессы должны проявляться в коллективных (кооперативных) явлениях.

Таким образом, неравенства (74) определяют условия для возможного формирования упорядоченных структур в сложных самоорганизующихся внешне открытых системах.

4. Термодинамика информационных процессов в открытых системах. Принцип Ле-Шателье–Брауна

Рассмотрим теперь возможное реагирование *макроскопической* системы на информационно-термодинамическое воздействие окружения. Заметим, что лишь в случае, когда возмущающие систему факторы вызваны внешними полями, они непосредственно влияют на функцию распределения, с чем и связана относительная простота изучения подобных возмущений. Ниже остановимся именно на этом случае и рассмотрим возможные обменные явления в химически активной многокомпонентной среде, находящейся в неравновесном контакте с окружением и обменивающейся с ней как энергией, веществом и т.п., так и информацией.

Исходным является соотношение (59) термодинамики информационных процессов для открытых физических систем. Сделаем для этого ключевое предположение о локальном термодинамическом равновесии системы, считая, что в физически малом элементе её объёма информация различия Кульбака на единицу массы зависит от локальных переменных так же, как полная информация различия I зависит от глобальных экстенсивных величин $S, E, \langle \mathcal{I}_k \rangle$. Разбивая теперь исходную систему на достаточно малые, но макроскопические области, в пределе бесконечно малого элемента объёма получим, что уравнение (52), описывающее неравновесные информационные физические процессы в сплошных средах, зависит также от координат $\mathbf{x}$. Записанное в сопутствующей системе координат, движущейся с центром массы элемента со скоростью $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, уравнение (59) принимает вид:

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{dI(\mathbf{x}, t)}{dt} = -\frac{ds(\mathbf{x}, t)}{dt} + \sum_{\beta=1}^{2+K} Q_{0\beta} \frac{d\lambda_{\beta}(\mathbf{x}, t)}{dt} = \\ = -\frac{ds(\mathbf{x}, t)}{dt} + \left(\frac{1}{T_0} \right) \frac{de(\mathbf{x}, t)}{dt} + \left(\frac{p_0}{T_0} \right) \frac{dv(\mathbf{x}, t)}{dt} - \sum_{\alpha=1}^K \left(\frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} \right) \frac{dz_{\alpha}(\mathbf{x}, t)}{dt}, \end{aligned} \quad (78)$$

где введены удельные величины, рассчитанные на единицу массы, а именно

$I(\mathbf{x}, t)$ – физическая информация различия Кульбака, отнесённая к единице массы системы; $s(\mathbf{x}, t)$ – удельная энтропия; $e(\mathbf{x}, t)$ – удельная внутренняя энергия в движущейся системе координат; $z_\alpha(\mathbf{x}, t) \equiv n_\alpha / Q$ – числовая плотность α -компоненты в единице массы смеси; $Q_{0\beta} = \{T_0^{-1}, p_0 T_0^{-1}, -\mu_{j0} T_0^{-1}, \dots, -\mu_{K0} T_0^{-1}\}$ – интенсивные переменные во внешней среде; $\lambda_\beta = \{e, v, z_1, \dots, z_K\}$ – экстенсивные величины, характеризующие рассматриваемую многокомпонентную систему.

Уравнения баланса

Для дальнейших целей нам понадобится общий вид уравнений баланса для различных экстенсивных величин λ_β , характеризующих состояние многокомпонентной смеси и её динамику (например, массы, внутренней энергии и т.п.). Локальное изменение какой-либо экстенсивной величины $\Lambda_k = \int_V \lambda_k(\mathbf{x}, t) dV$ (где $\lambda_k(\mathbf{x}, t)$ – плотность величины Λ_k) за единицу времени

$$\frac{\partial \Lambda_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \lambda_k(\mathbf{x}, t) dV = \int_V \frac{\partial}{\partial t} \lambda_k(\mathbf{x}, t) dV \quad (79)$$

равно разности между скоростью образования $\int_V \sigma[\lambda_k] dV$ величины Λ_k в не изменяющем своего положения (в системе координат $\mathbf{x}$) объёме жидкости V и скоростью оттока $\oint_{\partial V} (\mathbf{J}_{(\lambda_k)}^* \cdot \mathbf{n}) d\Sigma$ этой величины через поверхность $\partial\Sigma$, ограничивающую объём V . Здесь $\partial(\cdot)/\partial t$ – локальная производная Эйлера по времени; $\sigma[\lambda_k(\mathbf{x}, t)]$ – локальное производство величины Λ_k за единицу времени в единице объёма (плотность внутреннего источника, имеющего положительное и отрицательное значение); $\mathbf{J}_{(\lambda_k)}^*(\mathbf{x}, t) \equiv \lambda_k \mathbf{u} + \mathbf{J}_{(\lambda_k)}$ – полный поток величины $\lambda_k(\mathbf{x}, t)$ (равный сумме всех видов переноса λ_k через единичную поверхность), включающий конвективную часть ($\lambda_k \mathbf{u}$) и кондуктивный субстанциональный поток ($\mathbf{J}_{(\lambda_k)}$), определяющий поверхностные воздействия рассматриваемой системы на интегральную величину Λ ; $\mathbf{n}$ – нормальный единичный вектор с внешней стороны поверхности ∂V , ограничивающей объём жидкости V ; $d\Sigma$ – величина площадки на ∂V . Таким образом, интегральная форма уравнения ба-

ланса (сохранения) величины Λ имеет вид

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial \lambda_k}{\partial t} dV &= \int_V \sigma[\lambda_k] dV - \oint_{\partial V} (\lambda_k \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) d\Sigma - \oint_{\partial V} (\mathbf{J}_{(\lambda_k)} \cdot \mathbf{n}) d\Sigma = \\ &= \int_V \left\{ \sigma[\lambda_k] - \operatorname{div}(\lambda_k \mathbf{u}) - \operatorname{div} \mathbf{J}_{(\lambda_k)} \right\} dV, \end{aligned}$$

где второе равенство в правой части записано с учетом теоремы Гаусса–Остроградского. Поскольку это уравнение справедливо для любого объема V , покоящегося относительно системы координат $\mathbf{x}$, то интегральному уравнению баланса (когда подынтегральные выражения являются непрерывными функциями координат) можно придать локальную (дифференциальную) форму

$$\frac{\partial \lambda_k(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\operatorname{div} \left\{ \mathbf{J}_{(\lambda_k)}^*(\mathbf{x}, t) \right\} + \sigma[\lambda_k]. \quad (80)$$

Далее мы будем использовать операторное соотношение

$$\varrho d\lambda_k / dt = \partial(\varrho \lambda_k) / \partial t + \operatorname{div}(\varrho \lambda_k \mathbf{u}),$$

дающее связь между субстанциональным и локальным изменениями характеристики λ_k и позволяющее записать дифференциальное уравнение баланса (80) в следующей (субстанциональной) форме

$$\sigma[\lambda_k(\mathbf{x}, t)] = \varrho \frac{d\lambda_k(\mathbf{x}, t)}{dt} + \operatorname{div} \left\{ \mathbf{J}_{(\lambda_k)}(\mathbf{x}, t) \right\}. \quad (80^*)$$

Это уравнение является следствием уравнения непрерывности $\partial \varrho / \partial t + \operatorname{div}(\varrho \mathbf{u}) = 0$ и определения субстанциональной (лагранжевой) производной по времени $d\lambda_k / dt \equiv \partial \lambda_k / \partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla \lambda_k$, описывающей скорость изменения λ_k в сопутствующей системе координат, связанной с элементом среды, движущимся со скоростью $\mathbf{u}$.

Рассмотрим теперь неоднородную открытую систему, в которой могут протекать химические реакции. Записанные в явном виде уравнения баланса для удельного объема $v \equiv 1/\varrho$, плотности импульса $\varrho \mathbf{u}$, удельной (на единицу массы суммарного континуума) числовой плотности $z_\alpha \equiv n_\alpha / \rho$ компоненты α и удельной внутренней энергии смеси e , имеют вид (см., например, [14]):

$$\varrho \frac{dv}{dt} + \text{div} \mathbf{J}_v = 0 \quad (81)$$

$$\sigma[\varrho z_\alpha] \equiv \sum_{s=1}^r v_{\alpha s} \xi_s = \varrho \frac{dz_\alpha}{dt} + \text{div} \mathbf{J}_\alpha, \quad (\alpha = 1, 2, \dots, K) \quad (82)$$

$$\sigma[\varrho \mathbf{u}] \equiv -\nabla p + \varrho \sum_{\alpha=1}^K z_\alpha \mathbf{F}_\alpha = \varrho \frac{d\mathbf{u}}{dt} - \text{Div} \mathbf{P}^{dis}, \quad (83)$$

$$\sigma[\varrho e] \equiv -p \text{div} \mathbf{u} + \mathbf{P}^{dis} : \text{Grad} \mathbf{u} + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \mathbf{F}_\alpha = \varrho \frac{de}{dt} + \text{div} \mathbf{q}. \quad (84)$$

Здесь

$$\varrho = \sum_{\alpha=1}^K M_\alpha n_\alpha, \quad \varrho \mathbf{u} \equiv \sum_{\alpha=1}^K M_\alpha n_\alpha \mathbf{u}_\alpha; \quad (85)$$

n_α , M_α и $\mathbf{u}_\alpha$ – соответственно числовая плотность (на единицу объёма смеси, молекулярная масса и гидродинамическая скорость частиц сорта α); $\mathbf{J}_\alpha \equiv n_\alpha (\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u})$ – поток диффузии частиц сорта α ; $\mathbf{J}_v \equiv -\mathbf{u}$ – поток удельного объёма; $\sigma[n_\alpha] \equiv \sum_{s=1}^r v_{\alpha s} \xi_s$ – «источниковый член», представляющий собой интенсивность производства частиц (атомов и молекул) сорта α за счет химических реакций; ξ_s – скорость протекания s -ой химической реакции ($s = 1, 2, \dots, r$); $v_{\alpha s}$ – стехиометрические коэффициенты вещества сорта α в s -ой независимой химической реакции, которые положительны для продуктов реакции и отрицательны для реагентов; p – термодинамическое давление смеси; $\mathbf{P}^{dis} \equiv -\mathbf{P} + p\mathbf{I}$ – симметричный тензор вязких напряжений, связанный с процессами молекулярного переноса количества движения всех компонентов смеси; $\mathbf{I}$ – единичный тензор; $\mathbf{F}_\alpha$ – внешняя сила, действующая на одну частицу сорта α ; $\mathbf{q}$ – тепловой поток.

Заметим, что уравнения (82) линейно зависимы, поскольку справедливы следующие соотношения:

$$\sum_{\alpha=1}^K M_\alpha \mathbf{J}_\alpha = 0 \quad (1), \quad \sum_{\alpha=1}^K M_\alpha \sigma[n_\alpha] = \sum_{s=1}^r \xi_s \left[\sum_{\alpha=1}^K M_\alpha v_{\alpha s} \right] = 0 \quad (2), \quad (86)$$

причем тождество (86⁽¹⁾) является следствием определений (85) для массовой

плотности Q и гидродинамической скорости $\mathbf{u}$ полного континуума, а соотношение (86⁽²⁾) есть следствие закона сохранения массы в химических реакциях, $\sum_{\alpha} m_{\alpha} v_{\alpha s} = 0$, ($s = 1, 2, \dots, r$). В связи с этим, одно из дифференциальных уравнений (82) всегда можно исключить из рассмотрения, заменив его алгебраическим интегралом (86⁽¹⁾).

Для информации различия и энтропии, и имеем следующие уравнения баланса

$$0 \leq \sigma[s] = Q \frac{ds}{dt} + \text{div} \mathbf{J}_{(s)}, \quad (87)$$

$$0 \geq \sigma[I] = Q \frac{dI}{dt} + \text{div} \mathbf{J}_{(I)}, \quad (88)$$

где $\mathbf{J}_{(s)}$, $\mathbf{J}_{(I)}$ – субстанциональные плотности потоков энтропии и информации различия, $\sigma[s]$ и $\sigma[I]$ – локальные производства энтропии и информации различия за единицу времени в единице объёма.

Конкретные представления для величины кондуктивного потока энтропии $\mathbf{J}_{(s)}$, связанного с переносом тепла и вещества путём диффузии, и локального производства энтропии $\sigma[s]$ в уравнении (87) баланса энтропии смеси s имеют вид [14]:

$$\mathbf{J}_{(s)} \equiv \mathbf{q}(T^{-1}) - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} (\mu_{\alpha} T^{-1}), \quad (89)$$

$$\begin{aligned} 0 \leq \sigma[s] &\equiv \mathbf{q} \cdot \nabla(T^{-1}) - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \cdot \nabla(\mu_{\alpha} T^{-1}) + (T^{-1})\sigma[e] - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha} T^{-1})\sigma[\varrho z_{\alpha}] = \\ &= \mathbf{q} \cdot \nabla(T^{-1}) + T^{-1} \mathbf{P}^{dis} : \text{Grad} \mathbf{u} - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \cdot \left\{ \nabla(\mu_{\alpha} T^{-1}) - T^{-1} \mathbf{F}_{\alpha} \right\} + \sum_{s=1}^r \xi_s T^{-1} \mathcal{A}_s, \end{aligned} \quad (90)$$

где

$$\mathcal{A}_s \equiv - \sum_{\alpha=1}^K \mu_{\alpha} v_{\alpha s}, \quad (s = 1, 2, \dots, r) \quad (91)$$

– так называемое химическое сродство s -ой реакции (функция состояния системы, которая согласно де Донде является движущей силой химической реакции [10]).

Вводя приведенный поток тепла $\mathbf{J}_q \equiv \mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^K h_{\alpha} \mathbf{J}_{\alpha}$ (здесь h_{α} – парциальная

удельная энтальпия компоненты α), можно получить другое эквивалентное выражение для величины $\sigma[s]$:

$$\begin{aligned} \sigma[s] = & \mathbf{J}_q \cdot \nabla(T^{-1}) + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \left[-\nabla(\mu_\alpha T^{-1}) + h_\alpha \nabla(T^{-1}) + (T^{-1}) \mathbf{F}_\alpha \right] + \\ & + T^{-1} \mathbf{P}^{dis} : \mathbf{Gradu} + \sum_{s=1}^r \xi_s (\mathcal{A}_s T^{-1}). \end{aligned} \quad (92)$$

Заметим, что это выражение удобно по той причине, что в отличие от полного потока тепла $\mathbf{q}$, включающего тепло $\sum_{\alpha} h_{\alpha} \mathbf{J}_{\alpha}$, переносимое диффузией вследствие разницы в энтальпиях (теплосодержаниях) диффундирующих веществ, приведенный тепловой поток $\mathbf{J}_q$ есть тепло, переносимое только чистой теплопроводностью.

Далее, разобьём $\mathbf{P}^{dis}$ и $\mathbf{Gradu}$ на две части, из которых вторая обладает нулевым следом:

$$\mathbf{P}^{dis} = \pi \mathbf{I} + \overset{0}{\mathbf{P}^{dis}}, \quad (93)$$

$$\mathbf{Gradu} = 3^{-1} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u} + \overset{0}{\mathbf{Gradu}} = 3^{-1} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u} + (\overset{0}{\mathbf{Gradu}})^s + (\overset{0}{\mathbf{Gradu}})^a, \quad (94)$$

где $\pi \equiv 3^{-1} \operatorname{Sp} \mathbf{P}^{dis} = 3^{-1} \mathbf{P}^{dis} : \mathbf{I}$ – так называемое вязкое давление, а градиентный

тензор скорости $\overset{0}{\mathbf{Gradu}}$ разложен на симметрическую $(\overset{0}{\mathbf{Gradu}})^s = 2^{-1}(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})$

(тензор скорости деформации) и кососимметрическую $(\overset{0}{\mathbf{Gradu}})^a = 2^{-1}(\nabla \mathbf{u} - \nabla^T \mathbf{u})$

части. Тогда скалярное произведение тензора вязких напряжений и тензора градиента скорости $\mathbf{P}^{dis} : \mathbf{Gradu}$ можно представить так:

$$\mathbf{P}^{dis} : \mathbf{Gradu} = \overset{0}{\mathbf{P}^{dis}} : (\overset{0}{\mathbf{Gradu}})^s + \pi \operatorname{div} \mathbf{u}. \quad (95)$$

Здесь использовано то обстоятельство, что скалярное произведение симметрического и антисимметрического тензоров всегда равно нулю. Заметим, что полный вклад вязких явлений в производство энтропии оказывается разделенным на две части. Вторая часть, величина $-\pi \operatorname{div} \mathbf{u} = -\pi Q d(1/Q)/dt$, связана со скоростью изменения удельного объема и обусловлена наличием объемной (второй) вязкости сжимаемой среды.

Таким образом, производство энтропии $\sigma(s)$ в движущейся многокомпо-

нентной реагирующей газовой смеси определяется следующим набором термодинамических потоков $\mathbf{J}_q, \mathbf{J}_\alpha, \xi_s, \pi, \mathbf{P}^{dis}$ и сопряженных им термодинамических сил

$$\mathbf{X}_q \equiv -T^{-2} \nabla T = \nabla(T^{-1}); \quad \mathbf{X}_\alpha \equiv -\nabla(T^{-1} \mu_\alpha) + h_\alpha \nabla(T^{-1}) + T^{-1} \mathbf{F}_\alpha, \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N);$$

$$\mathcal{A}_s^* \equiv T^{-1} \mathcal{A}_s = -\sum_{\beta=1}^N (\mu_\beta T^{-1}) v_{\beta s}, \quad (s=1, 2, \dots, r); \quad X_\pi \equiv T^{-1} \operatorname{div} \mathbf{u};$$

$$\mathbf{S} \equiv T^{-1} (\operatorname{Grad} \mathbf{u})^s = T^{-1} \{ 2^{-1} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) - 3^{-1} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u} \}. \quad (96)$$

Здесь полярный вектор $\mathbf{X}_q$ представляет собой термодинамическую силу, обуславливающую явление теплопроводности; химическое сродство для s -ой реакции $\mathcal{A}_s^*$ является скалярной термодинамической силой, сопряженной со скоростью ξ_s химической реакции; термодинамическая сила диффузии $\mathbf{X}_\alpha$ сопряжена с плотностью потока диффузии $\mathbf{J}_\alpha$ (полярный вектор); скалярная сила вязкости X_π сопряжена с вязким давлением π (как со скалярным потоком импульса, обуславливающим явления, связанные с объемной вязкостью); тензорная (второго ранга) сила $\mathbf{S} \equiv T^{-1} (\operatorname{Grad} \mathbf{u})^s$, сопряженная с той частью тензора вязких напряжений $\mathbf{P}^{dis}$, след которой равен нулю, вызывает явление вязкого сдвига (отметим, что вязкие силы являются переменными β -типа, поскольку скорость u_j – типичный β -параметр). С помощью введенных указанным способом потоков и термодинамических сил производство энтропии $\sigma[s]$ в реагирующей газовой смеси может быть записано в следующей билинейной форме

$$0 \leq \sigma[s] = \sum_{s=1}^r \mathcal{A}_s^* \xi_s + \pi X_\pi + \mathbf{J}_q \cdot \mathbf{X}_q + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \mathbf{X}_\alpha + \mathbf{P}^{dis} : \mathbf{S} \geq 0, \quad (97)$$

отвечающей трем (скалярным, векторным и тензорным) независимым источникам неравновесных процессов в реагирующей смеси, имеющих существенно различную физическую природу. Выражение (97) позволяет конкретизировать материальные линейные соотношения (см. ниже) между потоками и термодинамическими силами для рассматриваемого здесь многокомпонентного континуума.

Материальные законы Онзагера

Как известно [4,9], в неравновесной термодинамике в качестве определяющих соотношений, которые дополняют систему гидродинамических уравнений, применяются (по крайней мере, при малом отклонении от термодинамического равновесия) феноменологические линейные соотношения необратимых процессов

$$\mathcal{J}_k(\mathbf{x}, t) = \sum_{l=1}^f L_{kl}(\mathbf{x}, t) \mathcal{X}_l(\mathbf{x}, t), \quad (k=1, 2, \dots, f), \quad (98)$$

в которых L_{kl} – скалярные кинетические коэффициенты (функции локальных параметров состояния среды), связывающие между собой потоки $\mathcal{J}_k(\mathbf{x}, t)$ и термодинамические (обобщенные) силы $\mathcal{X}_l(\mathbf{x}, t)$; f – количество независимых скалярных потоков и сил. Здесь скаляры $\mathcal{J}_k$ и $\mathcal{X}_l$ обозначают независимые скалярные термодинамические потоки и силы, а в случае векторных и тензорных процессов – все декартовы компоненты соответствующих тензорных и векторных величин, входящих в билинейные выражения (97) для производства энтропии. Диагональные (собственные) коэффициенты L_{kk} соответствуют коэффициентам, представляющим прямые эффекты (обычная диффузия, теплопроводность и т.п.), недиагональные коэффициенты $L_{kl} (k \neq j)$ (коэффициенты взаимности) описывают интерференцию между необратимыми процессами k и j и являются коэффициентами перекрестных эффектов (термическая теплопроводность, диффузионный термоэффект (*эффект Дюфора*) и т.п.). Потоки $\mathcal{J}_k$ и термодинамические силы $\mathcal{X}_l$ в законах Онзагера (98) обладают, в общем случае, различными тензорными свойствами, т.е. при преобразованиях вращения и отражения компоненты этих величин преобразуются различным образом. В результате, в силу определенных свойств симметрии рассматриваемой материальной среды, декартовы компоненты потоков будут зависеть не от всех декартовых компонент термодинамических сил, что ограничивает число отличных от нуля кинетических коэффициентов L_{kl} в (*принцип симметрии Кюри*) [9].

В изотропном случае соответствующие феноменологические уравнения в прямоугольной системе координат записываются в виде

$$\pi = l_{\pi\pi} X_{\pi} + \sum_{s=1}^r l_{\pi s} \mathcal{A}_s^*, \quad \xi_s = l_{s\pi} X_{\pi} + \sum_{m=1}^r l_{sm} \mathcal{A}_m^*, \quad (s=1, 2, \dots, r); \quad (99)$$

$$\mathbf{J}_q = L_{qq} \mathbf{X}_q + \sum_{\beta=1}^K L_{q\beta} \mathbf{X}_\beta; \quad \mathbf{J}_\alpha = L_{\alpha q} \mathbf{X}_q + \sum_{\beta=1}^K L_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\beta, \quad (\alpha=1,2,\dots,N); \quad (100)$$

$$\mathbf{P}^{dis} = L_\mu \mathbf{S} = L_\mu T^{-1} \left\{ 2^{-1} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) - 3^{-1} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u} \right\}, \quad (101)$$

причем между скалярными кинетическими коэффициентами $L_{q\alpha}$, $L_{\alpha\beta}$, l_{sv} и l_{sm} в этих соотношениях существуют следующие *соотношения симметрии Онзагера-Казимира*

$$L_{q\beta} = L_{\beta q}, \quad (\beta=1,2,\dots,N); \quad L_{\alpha\beta} = L_{\beta\alpha}, \quad (\alpha,\beta=1,2,\dots,N); \quad (102)$$

$$l_{s\pi} = -l_{\pi s}, \quad (s=1,2,\dots,r); \quad l_{sm} = l_{ms} \quad (s,m=1,2,\dots,r). \quad (103)$$

Здесь кинетические коэффициенты, описывающие перекрестные эффекты между химическими реакциями и объемной вязкостью, удовлетворяют антисимметричным соотношениям Казимира, поскольку сродство A_s является силой α -типа, а вязкая сила X_π относится к β -типу.

$$\begin{aligned} 0 \leq \sigma[s] = & \sum_{s=1}^r \sum_{m=1}^r l_{sm} \mathcal{A}_s^* \mathcal{A}_m^* + l_{\pi\pi} X_\pi^2 + L_\mu \mathbf{S} : \mathbf{S} + \\ & + L_{qq} |\mathbf{X}_q|^2 + \sum_{\beta=1}^K L_{q\beta} \mathbf{X}_\beta \cdot \mathbf{X}_q + \sum_{\alpha=1}^K L_{\alpha q} \mathbf{X}_q \cdot \mathbf{X}_\alpha + \sum_{\alpha=1}^K \sum_{\beta=1}^K L_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\beta \cdot \mathbf{X}_\alpha \geq 0 \end{aligned} \quad (104)$$

Необратимые информационные физические процессы в многокомпонентных средах, вызванные внешними возмущениями

Для получения явного вида $\mathbf{J}_{(I)}$ и $\sigma[I]$ поступим следующим образом. Подставляя соотношения (82), (84) и (87) в уравнение (78), описывающее неравновесные информационные физические процессы в сплошных средах, в результате получим

$$\begin{aligned} \varrho \frac{dI}{dt} + \varrho \frac{ds}{dt} = & \varrho \left\{ (T_0^{-1}) \frac{de}{dt} + (p_0 T_0^{-1}) \frac{dv}{dt} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \frac{dz_\alpha}{dt} \right\} = \\ & - \operatorname{div} \left\{ (T_0^{-1}) \mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \mathbf{J}_\alpha - (p_0 T_0^{-1}) \mathbf{u} \right\} + \mathbf{q} \cdot \nabla (T_0^{-1}) - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \nabla (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) + \mathbf{J}_v \cdot \nabla (p_0 T_0^{-1}) + \\ & + T_0^{-1} \sigma[\varrho e] - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \sigma[\varrho z_\alpha]. \end{aligned} \quad (105)$$

Сравнивая это выражение с суммой уравнений (87) и (88)

$$\mathcal{Q} \frac{ds}{dt} + \mathcal{Q} \frac{dI}{dt} = -div(\mathbf{J}_{(I)} + \mathbf{J}_{(s)}) + \sigma[I] + \sigma[s], \quad (106)$$

в результате получим следующие выражения для суммарного потока и производства информации различия и энтропии

$$\mathbf{J}_{(I)} + \mathbf{J}_{(s)} = (T_0^{-1})\mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \mathbf{J}_{\alpha} + (p_0 T_0^{-1}) \mathbf{J}_v, \quad (107)$$

$$\begin{aligned} 0 \leq \sigma[I] + \sigma[s] &= \\ &= T_0^{-1} \sigma[\mathcal{Q}e] - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \sigma[\mathcal{Q}z_{\alpha}] + \mathbf{q} \cdot \nabla(T_0^{-1}) - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \cdot \nabla(\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(p_0 T_0^{-1}) = \\ &= \mathbf{J}_q \cdot \mathbf{X}_{q0} + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \cdot \mathbf{X}_{\alpha 0} + \mathbf{P}^{dis} : \mathbf{S}_0 + \pi X_{\pi 0} + \sum_{s=1}^r \mathbf{A}_{s0}^* \xi_s + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(-\mathcal{Q}_2 + \mathcal{Q}_{20}) = \\ &= L_{qq} \mathbf{X}_q \cdot \mathbf{X}_{q0} + \sum_{\beta=1}^K L_{q\beta} \mathbf{X}_{\beta} \cdot \mathbf{X}_{q0} + \sum_{\alpha=1}^K L_{\alpha q} \mathbf{X}_q \cdot \mathbf{X}_{\alpha 0} + \sum_{\alpha=1}^K \sum_{\beta=1}^K L_{\alpha\beta} \mathbf{X}_{\beta} \cdot \mathbf{X}_{\alpha 0} + L_{\mu} \mathbf{S} : \mathbf{S}_0 + \\ &+ l_{\pi\pi} X_{\pi} X_{\pi 0} + \sum_{s=1}^r l_{\pi s} (\mathcal{A}_s^* X_{\pi 0} - \mathcal{A}_{s0}^* X_{\pi}) + \sum_{s=1}^r \sum_{m=1}^r l_{sm} \mathcal{A}_s^* \mathcal{A}_{m0}^* + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(-\mathcal{Q}_2 + \mathcal{Q}_{20}), \end{aligned} \quad (108)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{q0} &= \nabla(T_0^{-1}), \quad \mathbf{X}_{\alpha 0} \equiv -\nabla(T_0^{-1} \mu_{\alpha 0}) + h_{\alpha 0} \nabla(T_0^{-1}) + T_0^{-1} \mathbf{F}_{\alpha}, \quad \mathbf{S}_0 \equiv T_0^{-1} (\text{Grad} \mathbf{u})^s, \\ X_{\pi 0} &\equiv T_0^{-1} div \mathbf{u}, \quad \mathcal{A}_{s0}^* \equiv T_0^{-1} \mathcal{A}_s = - \sum_{\beta=1}^N (\mu_{\beta 0} T_0^{-1}) v_{\beta s}, \quad \nabla \mathcal{Q}_{20} \equiv \nabla(p_0 T_0^{-1}) \end{aligned} \quad (109)$$

– сопряженные термодинамические силы, действующие со стороны окружающей среды.

Подставляя в (107) и (108) выражения (89) и (90) для потока и производства энтропии, в итоге получим

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{(I)} &= -\mathbf{J}_{(s)} + (T_0^{-1})\mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \mathbf{J}_{\alpha} + (p_0 T_0^{-1}) \mathbf{J}_v = \\ &= \mathbf{q} \left\{ -(T^{-1}) + (T_0^{-1}) \right\} + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \left\{ (\mu_{\alpha} T^{-1}) - (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \right\} + \mathbf{J}_v (p_0 T_0^{-1}), \end{aligned} \quad (110)$$

$$\begin{aligned}
0 \geq \sigma[I] = & \\
= & \left\{ -(T^{-1}) + (T_0^{-1}) \right\} \sigma[\varrho e] + \sum_{\alpha=1}^K \left\{ (\mu_{\alpha} T^{-1}) - (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \right\} \sigma[\varrho z_{\alpha}] + \mathbf{q} \cdot \left\{ -\nabla(T^{-1}) + \nabla(T_0^{-1}) \right\} + \\
& + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \cdot \left\{ \nabla(\mu_{\alpha} T^{-1}) - \nabla(\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \right\} + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(p_0 T_0^{-1}), \quad (111)
\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}
0 \geq \sigma[I] = & \mathbf{J}_q \cdot (-\mathbf{X}_q + \mathbf{X}_{q0}) + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \cdot (-\mathbf{X}_{\alpha} + \mathbf{X}_{\alpha 0}) + \mathbf{P}^{dis} : (-\mathbf{S} + \mathbf{S}_0) + \\
& + \sum_{s=1}^r (-\mathcal{A}_s^* + \mathcal{A}_{s0}^*) \xi_s + \pi(-X_{\pi} + X_{\pi 0}) + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(\mathbb{Q}_{20} - \mathbb{Q}_2) = \\
= & L_{qq} \mathbf{X}_q \cdot (\mathbf{X}_{q0} - \mathbf{X}_q) + \sum_{\beta=1}^K L_{q\beta} \mathbf{X}_{\beta} \cdot (\mathbf{X}_{q0} - \mathbf{X}_q) + \sum_{\alpha=1}^K L_{\alpha q} \mathbf{X}_q \cdot (\mathbf{X}_{\alpha 0} - \mathbf{X}_{\alpha}) + \\
& + \sum_{\alpha=1}^K \sum_{\beta=1}^K L_{\alpha\beta} \mathbf{X}_{\beta} \cdot (\mathbf{X}_{\alpha 0} - \mathbf{X}_{\alpha}) + L_{\mu} \mathbf{S} : (\mathbf{S}_0 - \mathbf{S}) + l_{\pi\pi} X_{\pi} (X_{\pi 0} - X_{\pi}) + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(\mathbb{Q}_{20} - \mathbb{Q}_2) + \\
& + \sum_{s=1}^r \sum_{m=1}^r l_{sm} \mathcal{A}_s^* \cdot (\mathcal{A}_{s0}^* - \mathcal{A}_s^*) + \sum_{s=1}^r l_{\pi s} (\mathcal{A}_s^* X_{\pi 0} - \mathcal{A}_{s0}^* X_{\pi}). \quad (112)
\end{aligned}$$

Заметим, что это выражение для производства информации различия можно разбить на три части разного характера, каждая из которых, согласно общему принципу уменьшения локального производства информации Кульбака, должна быть отрицательно определенной величиной. Другими словами, в соответствии с *принципом Кюри*, необходимо, чтобы выполнялось не только суммарное условие

$$\begin{aligned}
& \text{(скаляр)} \quad \text{(вектор)} \quad \text{(тензор)} \\
\sigma[I] = & \sigma[I] + \sigma[I] + \sigma[I] \leq 0, \quad (113)
\end{aligned}$$

но и чтобы для всех не взаимодействующих друг с другом процессов различного тензорного характера производство информации было отрицательно определенной величиной (например, величина $\sigma[I] \leq 0$).

Таким образом, найдены явные выражения для субстанционального потока информации различия $\mathbf{J}_{(I)}$ и локального производства информации различия $\sigma[I]$ за единицу времени в единице объёма при необратимых информационных физических процессах, а также определено суммарное производство информа-

ции различия и энтропии, зависящее от потоков и сил со стороны окружающей среды.

Из соотношения (112) вытекает интересное следствие, что открытая неравновесная гидродинамическая система стремится к уменьшению внешнего воздействия, обусловленного термодинамическими силами X_{q0} , $X_{\alpha 0}$, S_0 , $\mathcal{A}_{s0}^*$, $X_{\pi 0}$ и ∇Q_{20} со стороны внешней среды, причем такое сопротивление системы, воз-

можное лишь при наличии потоков J_q , J_α , $\overset{0}{P}^{dis}$, ξ_s , π и $-\mathbf{u}$, получило здесь количественное подтверждение.

Неравенства (97), (108) и (112) составляют, по существу, содержание так называемого *принципа наименьшего принуждения Ле-Шателье–Брауна* подвижного равновесия, согласно которому динамическое равновесие термодинамической системы, подвергшейся воздействию внешних факторов (связанных, в частности, с изменением температуры, концентрации реагирующих веществ, давления, внешнего магнитного поля и т.п.), смещается в таком направлении, при котором эффект внешнего воздействия ослабляется (см., например, [28,29]). Поскольку система как бы внутренне сопротивляется внешнему воздействию, говорят, что она ограничивает (*модерирует*) действие возмущающего фактора⁸⁾. Этот принцип позволяет предвидеть направление течения процесса в системе, выведенной внешним воздействием из состояния устойчивого равновесия, в частности, указать направление смещения устойчивого равновесия различных технологических процессов без детального анализа условий их равновесия.

В отличие от эвристического принципа Ле-Шателье–Брауна, предложенный здесь подход позволяет найти количественные критерии противодействия системы, подверженной конечному (в общем случае) влиянию внешнего воздействия. В частности, на основе неравенства (112) (рассматриваемого для процессов одного и того же тензорного характера) автором найдены количественные характеристики степени реагирования системы на внешнее нагревание⁹⁾, которое приводит к смещению химического равновесия в сторону эндотермической реакции (сопровождаясь поглощением теплоты) и тем самым способ-

⁸⁾ Принцип смещения равновесия Ле-Шателье–Брауна, постулирующий возникновение отрицательных обратных связей при взаимодействии «система-окружающая среда», представляет собой частный случай более общего подхода к объяснению устойчивости динамических структур, известного под названием «теоремы модерации» [9].

⁹⁾ Заметим, что если прямая реакция протекает с выделением энергии (экзотермическая), то обратная реакция протекает с поглощением энергии (эндотермическая), причем тепловые эффекты обеих реакций равны по модулю, но противоположны по знаку. При установлении химического равновесия в системе наступает состояние теплового баланса.

ствуется ослаблению влияния внешнего воздействия, а также определена степень смещения химического равновесия в сторону экзотермической реакции (сопровожаемой выделением тепла) при охлаждении системы. Аналогично, этот подход позволяет оценить модерацию состава, т.е. количественно оценить в какой мере при повышении концентрации одного из исходных веществ химическое равновесие системы сдвигается в направлении образования продуктов реакции, или определить степень сдвига равновесия в направлении образования исходных веществ при повышении концентрации одного из продуктов реакции. Он также даёт возможность количественно определить меру смещения равновесия, связанного с уменьшением общего объёма системы при увеличении давления окружения и установить всю номенклатуру физико-химических процессов приводящих к увеличению объёма, которые сопутствуют уменьшению давления окружающей среды.

Вместе с тем, совершенно ясно, что в многокомпонентных средах все протекающие процессы сильно взаимосвязаны, модерация какого-либо внешнего воздействия (связанного, например, с изменением состава за счёт введения или удаления одного из компонентов) зависит от модерации других управляющих параметров (например, градиента температуры) и оказывает, в свою очередь, влияние на них. Кроме этого, существующая плотная динамическая сеть взаимодействий между явлениями переноса в рассматриваемой гидродинамической системе и её окружении многократно обогащена за счёт потоков информации. Всё это существенно затрудняет возможность количественно оценить (во всей совокупности) степень противодействия химически активной многокомпонентной системы информационно-термодинамическому воздействию окружения.

Рассмотренный здесь подход может быть распространён на другие сплошные среды, в частности, многофазные, электропроводящие и турбулентные.

Заключение

В работе рассмотрены информационно-термодинамические аспекты проблемы перехода «беспорядок-порядок» в открытых термодинамических системах. Такие системы наряду с обычным обменом энергией и негэнтропией с внешней средой, необходимым для спонтанного формирования различных структур, получают дополнительную возможность усложнения и совершенствования благодаря информационному управлению. Показано, что при адекватном описании коллективного поведения сложных динамических систем, подверженных влиянию внешнего окружения, оба аспекта – термодинамический и информационный – могут играть одинаково важную роль и должны в общем случае разрабатываться параллельно и в близком соотношении между собой. Исследования, проводимые на основе физической информации различия Кульбака как меры упорядоченности микросостояний при переходах, позволяют добиться согласованности в представлении различных вопросов самоорганизации открытых систем.

Введение в рассмотрение различающей информации не только позволяет адекватно описать процессы хаотизации и самоорганизации в классических динамических системах, но и даёт возможность исследовать проблему о взаимодополняемости термодинамических и информационных потоков при моделировании макроскопических неравновесных явлений в открытых реагирующих многокомпонентных средах гидродинамического типа. В работе проанализированы следствия данного подхода, при котором важную роль играет суммарное локальное производство макроскопической энтропии и информации различия.

Возможная в рамках предложенного подхода количественная оценка реагирования многокомпонентной химически активной системы (первоначально находившейся в устойчивом стационарном состоянии) на информационно-термодинамическое воздействие внешнего окружения чрезвычайно полезна с точки зрения практических приложений, поскольку позволяет в зависимости от потребности усилить или ослабить эффект возмущающих факторов на рассматриваемую систему.

Библиографический список

1. Зубарев Д.П. Неравновесная статистическая механика. М.: Наука, 1971. 416 с.
2. Климонтович Ю.Л. Турбулентное движение и структура хаоса. Новый подход к статистической теории открытых систем. М.: Наука, 1990. 320 с.
3. Зарипов Р.Г. Информация различия и переходы беспорядок-порядок. Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. 1999. 155 с.
4. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973. 280 с.
5. Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. Т.1. М.: ТОО «Янус», 1995. 624 с.
6. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979. 512 с.
7. Полак Л.С., Михайлов А.С. Самоорганизация в неравновесных физико-химических процессах. М.: Наука, 1975. 351 с.
8. Поплавский Р.П. Термодинамика информационных процессов. М.: Наука, 1981. 256.
9. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир. 2002. 461 с.
10. Пригожин И. Дефей Р. Химическая термодинамика.: М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2010. 533 с.
11. Хакен Г. Синергетика: Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985. 420 с.
12. Хакен Г. Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным системам. М.: Мир, 1991. 240 с.
13. Эбелинг В. Образование структур при необратимых процессах. М.: Мир, 1979. 279 с.
14. Колесниченко А.В., Маров М.Я. Турбулентность и самоорганизация. Проблемы моделирования космических и природных сред. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2014. 632 с.
15. Бриллюэн Л. Наука и теория информации. М.: ИЛ. 1960. 392 с.
16. Бриллюэн Л. Научная неопределенность и информация. М.: Мир, 1966. 272 с.
17. 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.
18. Зарипов Р.Г. Самоорганизация и необратимость в неэкстенсивных системах. Казань: Фэн, 2002. 251 с.

19. Зарипов Р.Г. Принципы неэкстенсивной статистической механики и геометрия мер беспорядка и порядка. Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. 2010. 404 с.
20. Зарипов Р.Г. Изменение информации различия Кульбака в процессе самоорганизации. I-теорема // Журн. техн. физики. 1988. Т. 58. вып. 11. С. 2247-2249.
21. Зарипов Р.Г. Изменения энтропии и информации различия Тсаллиса в процессах самораспада и самоорганизации неэкстенсивных систем// Физика. (Изв. высш. учебн. заведений). 2001. №11. С. 24–29.
22. Зарипов Р.Г. Изменение информации различия при эволюции неэкстенсивных систем в пространстве управляющих параметров// Физика. (Изв. высш. учебн. заведений). 2004. № 6. С. 67-73. (Translation: Russian Physics Journal. 2004. V. 47. № 6. P.647–655).
23. Jaynes E.T. Information theory and statistical mechanics// В сб. «Statistical Physics». Brandeis Ltctures. 1963. V.3. P.160.
24. Хилл Т. Статистическая механика М.: ИЛ. 1960. 486 с.
25. Кульбак С. Теория информации и статистика М.: Наука. 1967. 408 с.
26. Kullback S., Leibler R.A. On information and sufficiency // Ann. Math. Statist. 1951. V. 22. P. 79–86.
27. Шредингер Э. Что такое жизнь с точки зрения физики? М.: ИЛ, 1947. 147 с.
28. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука. 1964. 584 с.
29. Русинов А.И., Шульц М.М. О сокращённом принципе Ле Шателье–Брауна// Вестник ЛГУ. Серия физики и химии. 1960. № 4. С. 60-65.

Оглавление

Введение	3
1. Некоторые базовые элементы формализма статистики Гиббса	5
2. Физическая информация различия Кульбака	13
3. Информационные физические процессы в незамкнутых системах	17
4. Термодинамика информационных процессов в открытых системах. Принцип Ле-Шателье–Брауна	27
Заключение.....	40
Библиографический список.....	41