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

Препринты ИПМ • Препринт № 23 за 2018 г.

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

Колесниченко А.В.

К конструированию термодинамики неаддитивных сред на основе статистики Тсаллиса −Мендеса−Пластино

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Колесниченко А.В. К конструированию термодинамики неаддитивных сред на основе статистики Тсаллиса−Мендеса−Пластино // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 23. 28 с. doi:**10.20948/prepr-2018-23**
URL: **http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-23**

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

К конструированию термодинамики неаддитивных сред на основе статистики Тсаллиса−Мендеса−Пластино

Москва — 2018

Колесниченко А.В.

К конструированию термодинамики неаддитивных сред на основе статистики Тсаллиса−Мендеса−Пластино.

В работе проанализированы следствия эскортного осреднения Тсаллиса−Мендеса−Пластино (TMP) микроскопических динамических величин в неаддитивной статистике Тсаллиса и его формальное и практическое значение при моделировании различных q-систем. Показано, что в зависимости от способа определения средних значений динамических величин возможны различные варианты обобщённой равновесной термодинамики, и дан их сравнительный анализ. Найдены условия выполнения преобразования Лежандра при использовании понятия физической температуры. Проведено рассмотрение модифицированных термодинамических соотношений в статистике TMP. Обсуждается метод оптимизированных множителей Лагранжа, позволяющий устранить некоторые проблемы статистики TMP.

Ключевые слова: энтропия Тсаллиса**,** эскортное осреднение, физическая температура, деформированные термодинамические соотношения.

Aleksander Vladimirovich Kolesnichenko

To the construction of the thermodynamics of non-additive media on the basis of the statistics of Tsallis-Mendes-Plastino

The consequences escort of averaging of Tsallis-Mendes-Plastino (TMP) of microscopic dynamic quantities in non-additive statistics of Tsallis and its formal and practical value in modeling various q-systems are analyzed. It is shown that, depending on the method for determining the average values of dynamic quantities, various versions of generalized equilibrium thermodynamics are possible and their comparative analysis is given. Conditions are found for performing the Legendre transformation using the concept of physical temperature. The modified thermodynamic relationships in the TMP statistics are considered. The method of optimized Lagrange multipliers is discussed, which allows eliminating some problems of TMP statistics.

Key words*:* entropy of Tsallis, escort averaging, physical temperature, deformed thermodynamic relationships.

Введение

Как хорошо известно (см. Gell-Mann, Tsallis, 2004), в неаддитивной статистике Тсаллиса возможно осреднение физических величин по трём распределениям: p, p^q и $p^q/\int dzp^q$. Первый вариант определения среднего значения был предложен в работе (Tsallis, 1988) и с тех пор использовался крайне редко. При отыскании равновесного распределения $p(\boldsymbol{r})$ он сводился к учёту, помимо обычного ограничения нормировки распределения, ограничения, налагаемого на внутреннюю энергию q-системы, которая определялась соотношением $E_q^{(1)} \equiv \int dzpH(\boldsymbol{r})$, где $H = H(\boldsymbol{r}, t, \{a\})$ − известный по предположению полный гамильтониан динамической системы, зависящий в общем случае от совокупности обобщённых координат a_j − внешних параметров, определяющих работу внешних полей. В этом случае с помощью обычной техники Джейнса (Jaynes, 1963) нахождения экстремума удлинённой энтропии Тсаллиса, можно получить следующее равновесное вероятностное распределение

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

(здесь k_B − постоянная Больцмана; суперындекс (1) означает первый выбор). Несмотря на стандартный вид этого выражения, параметр β^* не является множителем Лагранжа, связанным с ограничением, накладываемым на осреднённую энергию системы. Разумеется, распределение $p^{(1)}(\boldsymbol{r}, \beta^*)$ сводится к классическому распределению Больцмана−Гиббса

$$S_{BG}(p) = -\mathrm{k_B} \int dz\, p \ln p$$

при $q \to 1$ и зависит от гамильтониана системы $H(\boldsymbol{r})$ не по экспоненте, а по степенному закону. Кстати, эти две важные особенности свойственны всем трём вариантам осреднения. Однако очень скоро стало очевидным, что подобный выбор определения среднего является неудовлетворительным при решении целого ряда математических задач, связанных с моделированием актуальных физических явлений в сложных q-системах, таких, например, как аномальная супердиффузия Леви (в этом случае второй момент, связанный с распределением Леви, расходится (Tsallis и др.,1995)).

Второй вариант, впервые предложенный в работе (Curados,Tsallis,1991) и с тех пор интенсивно разрабатываемый (см. библиографию/ http://tsallis. cat.cbpf.br/biblio.htm.), стал естественным выходом из существующих затруднений. В этом варианте ограничение на осреднённую энергию постулируется в виде

$$E_q^{(2)} = \int dz H(\boldsymbol{r}) p^q = const\,.$$

Тогда процедура определения максимума энтропии Тсаллиса

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

приводит к следующему выражению для равновесного вероятностного распределения

$$p^{(2)}(\boldsymbol{r},\beta) = \mathrm{e}_q^{\left\{-k_B^{-1}\beta H(\boldsymbol{r})\right\}} / \int dz\, \mathrm{e}_q^{\left\{-k_B^{-1}\beta H(\boldsymbol{r})\right\}},$$

которое совпадает, по внешнему виду, с результатом, полученным по первому выбору осреднения, за исключением того факта, что теперь величина $(1-q)$ играет ту роль, которую в первом варианте играла величина $(q-1)$ (т. е. $p_q^{(2)}(\beta) = p_{2-q}^{(1)}(\beta^* \to \beta)$), а параметр β, в отличие от β^*, является множителем Лагранжа, связанным с ограничением на осреднённую энергию. Распределение $p^{(2)}(\boldsymbol{r},\beta)$ учитывает отключение (*cut-off*), т.е. обнуление вероятности для уровней энергии, достаточно высоких для получения отрицательного значения аргумента функции $\mathrm{e}_q^x \equiv [1+(1-q)x]_+^{\frac{1}{1-q}}$ (см. Tsallis, 2009) для всех значений $q<1$, в то время как для первого варианта это событие имеет место для $q>1$. Кроме этого, для равновесного распределения $p^{(2)}(\boldsymbol{r},\beta)$ при всех значениях q остаётся справедливой структура Лежандра, свойственная термодинамике.

Важно подчеркнуть, что к настоящему времени в рамках второго варианта осреднения экстенсивных q-параметров в научной литературе получен целый ряд новых физических результатов и модифицировано большое число математических теорий (от H-теоремы до теории термодинамической устойчивости), известных в классической статистике. Эти достижения, успешно объясняющие различные аномалии в конкретных сложных системах, вероятно, и лежат в основе популярности данного формализма среди многих исследователей.

Вместе с тем, второй выбор осреднения приводит к трём нежелательным последствиям, которые, несомненно, являются необычными с точки зрения устоявшихся классических физических оснований (Plastino и др.,1998).

(i) Первое, не встречавшееся прежде следствие, состоит в том, что полученные на основе распределения $p^{(2)}(\boldsymbol{r},\beta)$ термодинамические результаты зависят от выбора начала отчёта энергий. На практике это не является большой проблемой, поскольку довольно дружно авторы многочисленных публикаций выбирали за начало отсчёта энергии (наименьшее собственное значение гамильтониана) нулевую точку, что, несомненно, имеет смысл. Но, по большому счёту, нужно согласиться с тем, что это следствие в некотором смысле вызывает беспокойство.

(ii) Второе необычное следствие состоит в том, что среднее значение константы отличается от самой константы, $\boldsymbol{E}_q^{(2)}\left[C\right] \equiv C\int dzp^q \neq C$. Тот факт, что нормировка $\int dzp^q \neq 1$ не равна единице, нелегко интерпретировать (если только мы не готовы принять, что энтропийная неаддитивность естественно должна приводить к потере нормы). Таким образом, несохранение нормы вызывает безусловное беспокойство.

(iii) Наконец, третье нежелательное следствие состоит в том, что для двух независимых систем, для которых справедливы условия мультипликативности $p_{12}^{(2)} = p_1^{(2)}p_2^{(2)}$ и $H\left(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\right) = H\left(\boldsymbol{r}_1\right) + H\left(\boldsymbol{r}_2\right)$, справедливо следующее псевдоаддитивное выражение (Tsallis,1994, 2009)

$$(E_q^{(2)})_{12} = E_{q1}^{(2)}(1+\varepsilon S_{q2}) + E_{q2}^{(2)}(1+\varepsilon S_{q1})$$

для осреднённых энергий (здесь введено обозначение $\varepsilon = \varepsilon(q) \equiv k_B^{-1}(1-q)$). Другими словами, первый принцип классической термодинамики (сохранение энергии) не имеет место для макроскопических энергий, даже если он справедлив для микроскопических величин q-системы. Разумеется, можно возразить, что, если мы рассматриваем неаддитивную энтропию, почему нужно считать нежелательным то же самое для макроскопической энергии? Дело в том, что энтропия представляет собой информационную величину, тогда как энергия является механической величиной. Поскольку формализм неаддитивной статистики не меняет основ механики, то указанное обстоятельство противоречит аддитивности средней энергии.

В этой статье мы рассмотрим третий способ осреднения, позволяющий избежать (одновременно) тех нежелательных последствий, которые возникают в рамках второго варианта осреднения. Этот вариант для энергетического ограничения был предложен Пластино, Мендесом и Тсаллисом в работе (Plastino и др.,1998; Tsallis, 2009).

1. Взвешенное среднее и статистические характеристики q-системы в неаддитивной статистике Тсаллиса

В этом разделе мы ограничимся выводом функции распределения для обобщённого канонического ансамбля Гиббса (поскольку вывод вероятностных распределений для других ансамблей аналогичен). Пусть среднее значение произвольной физической величины $A(\boldsymbol{r},t)$

$$\langle\langle A\rangle\rangle_q \equiv \int d\boldsymbol{z}\, A(\boldsymbol{r})\mathcal{P}^{(q)} = \frac{1}{c_q}\int d\boldsymbol{z}\, A(\boldsymbol{r})p^q = \frac{\langle A\rangle_q}{c_q} \tag{1}$$

вычисляется с помощью *нормированного эскортного распределения*

$$\mathcal{P}^{(q)}(\boldsymbol{r}) = p^q / \int d\boldsymbol{z}\, p^q \equiv p^q / c_q\,, \quad \int d\boldsymbol{z}\, \mathcal{P}^{(q)}(p) = 1\,, \tag{2}$$

где, в силу определения энтропии Тсаллиса S_q, функционал (коэффициент Тсаллиса)

$$c_q(p) \equiv \int d\boldsymbol{z}\, p^q = 1 + \frac{1-q}{k_B} S_q\,. \tag{3}$$

Заметим, что $\langle\langle 1\rangle\rangle_q \equiv \int d\boldsymbol{z}\, \mathcal{P}^{(q)} = 1$, что полностью соответствует устоявшимся представлениям классической статистики.

Каноническое распределение. Найдём экстремум энтропии Тсаллиса S_q при сохранении нормировки и заданном значении средней энергии

$$E_q^{(3)} = \int dz H(\boldsymbol{r}) \mathcal{P}^{(q)} = const\,, \quad \int dz\, \mathcal{P}^{(q)}(p) = 1\,. \tag{4}$$

Согласно вариационному принципу Джейнса, определим функционал

$$\mathcal{L} = \frac{k_B}{q-1}\left(1 - \int dz p^q\right) - \beta \int dz H \mathcal{P}^{(q)} - k_B \tau \int dz \mathcal{P}^{(q)}\,, \tag{5}$$

где β и τ являются множителями Лагранжа. Тогда и из условия

$$\delta L = -\frac{k_B q}{q-1}\int dz p^{q-1}\delta p -$$

$$-\frac{q\beta}{c_q}\left[\int dz H(\boldsymbol{r}) p^{q-1}\delta p - \frac{\int dz H(\boldsymbol{r}) p^q}{c_q}\int dz p^{q-1}\delta p\right] - k_B\tau \int dz \delta p = 0 \tag{6}$$

получим равенство $\left[\frac{k_B q}{1-q} - \frac{q\beta}{c_q}\left(H(\boldsymbol{r}) - E_q^{(3)}\right)\right] p^{q-1} = k_B \tau$, из которого следует нормированное равновесное распределение Тсаллиса−Мендеса−Пластино

$$p^{(3)}(\boldsymbol{r}, \beta_q) = \tilde{Z}_q^{-1}\left\{1 - k_B^{-1}(1-q)\beta_q\left[H(\boldsymbol{r}) - E_q^{(3)}\right]\right\}^{1/(1-q)} =$$

$$= \tilde{Z}_q^{-1}\, \mathrm{e}_q^{\left\{-k_B^{-1}\beta_q\left[H(\boldsymbol{r}) - E_q^{(3)}\right]\right\}}, \tag{7}$$

где

$$\tilde{Z}_q \equiv Z_q^{(3)} = \int dz\, \mathrm{e}_q^{\left\{-k_B^{-1}\beta_q\left[H(\boldsymbol{r}) - E_q^{(3)}\right]\right\}} \tag{8}$$

− обобщённый статистический интеграл; параметр $\beta_q \equiv \beta / c_q = \beta / \int dz p^q$ является (как будет показано ниже) обратной *физической температурой* системы, $T_{ph} \equiv 1/\beta_q$; β − множитель Лагранжа, который связан с ограничением на среднюю энергию (4) в неаддитивной статистической механике Тсаллиса.

При $1 - \varepsilon(q)\beta_q\left[H(\boldsymbol{r}) - E_q\right] < 0$ имеем $p = 0$, а при $q = 1$ из (7) и (8) получим классическое каноническое распределение Гиббса в виде

$$p(\boldsymbol{r},\beta)=\mathrm{e}^{\left\{-k_B^{-1}\beta\Delta\left[H(\boldsymbol{r})\right]\right\}}/\int d\boldsymbol{z}\,\mathrm{e}^{\left\{-k_B^{-1}\beta\Delta\left[H(\boldsymbol{r})\right]\right\}}, \tag{9}$$

где $\Delta\left\{H(\boldsymbol{r})\right\}=H(\boldsymbol{r})-\boldsymbol{E}\left[H(\boldsymbol{r})\right]$ − флуктуация функции Гамильтона.

Хотя осреднение по эскортному распределению даёт физически наблюдаемые величины (типа внутренней энергии), статистика Тсаллиса−Мендеса−Пластино не имеет особых преимуществ в сравнении со статистикой Курадо−Тсаллиса, поскольку распределение вероятности $p(\boldsymbol{r})$ (7) неявно зависит от самого распределения (самозависимость), а функционал $\beta_q=\beta/c_q(p)$, фигурирующий в распределении (7), не является обратной температурой и не сохраняет структуру Лежандра термодинамически сложных систем.

Микроскопическая энтропия. Для энтропии Тсаллиса $S_q^{(3)}$ имеем

$$S_q^{(3)}\left(p\right)=\int d\boldsymbol{z}\mathscr{P}^{(q)}s_q^{(3)}(p)=\frac{k_B c_q}{q-1}\left(1-\int d\boldsymbol{z}p^q\right), \tag{10}$$

где $s_q^3\left(p\right)$− *микроскопическая q–энтропия* (Зарипов, 2001, 2004). Из (10) вытекает выражение для микроскопической энтропии при осреднении ТМР

$$s_q^{(3)}\left(p\right)=\frac{k_B}{1-q}\left(1-p^{1-q}\right)\int d\boldsymbol{z}p^q=\frac{k_B}{1-q}\left(1-p^{1-q}\right)c_q\,. \tag{11}$$

Учитывая (10) и (11), из распределения (7) после некоторых преобразований получим связь между флуктуациями микроскопической энтропии и функции Гамильтона

$$s_q^{(3)}\left(p\right)-S_q^{(3)}\left(p\right)\cdot c_q p^{1-q}=\beta\left(H-E_q^{(3)}\right). \tag{12}$$

При $q=1$ из (12) следует известное соотношение (1.22)

$$\Delta\left[s\right]=s(p)-S=\beta\left\{H(\boldsymbol{r})-E\right\}=\beta\Delta\left[H(\boldsymbol{r})\right],$$

дающее аналогичную связь в классическом случае.

Величина $\Delta_q H = \left(H - E_q^{(3)}\right)$ в (12) есть флуктуация функции Гамильтона при рассматриваемом варианте осреднения, а величина $s_q^{(3)} - \frac{p}{\mathcal{P}} S_q^{(3)}$ в равенстве (12) не равняется флуктуации микроскопической q-энтропии. *Это обстоятельство ещё раз показывает, что подход с вариантом осреднения по эскордному распределению $\mathcal{P}$ также несовершенен, т.е. не имеет особых преимуществ в сравнении с осреднением Курадо−Тсаллиса.*

Рассмотрим теперь два простых случая энтропийной оптимизации в рамках формализма статистики Тсаллиса−Мендеса−Пластино.

Пример 1. Пусть в дополнение к условию нормировки $\int\limits_0^\infty dx\, p(x) = 1$ распределения $p(x)$ фиксировано q-среднее значение переменной x

$$\langle\langle x\rangle\rangle_q = \int\limits_0^\infty dx\, x\, \mathcal{P}^{(q)}(x) = \mathrm{X}_q^{(1)},$$

где $\mathcal{P}^{(q)}(x) = \left[p(x)\right]^q / \int\limits_0^\infty dx' \left[p(x')\right]^q$ − эскортное распределение. Теперь оптимизируем с этими ограничениями энтропию Тсаллиса S_q. Для нахождения оптимизирующего распределения найдём безусловный экстремум лагранжиана:

$$\mathcal{L}(p) = k_B \frac{\int\limits_0^\infty dx \left[p(x)\right]^q - 1}{1-q} - \alpha \int\limits_0^\infty dx\, p(x) - \beta_q^{(1)} \int\limits_0^\infty dx\, x \mathcal{P}^{(q)}(x)$$

где α и $\beta_q^{(1)}$ − множители Лагранжа. Из условия равенства нулю первой вариации функционала $\partial\mathcal{L}(p)/\partial p = 0$ следует оптимальное распределение, отвечающее экстремуму энтропии S_q

$$p(x) = \mathrm{e}_q^{-k_B^{-1}\beta_q^{(1)}\left(x - \mathrm{X}_q^{(1)}\right)} \Big/ \int\limits_0^\infty dx'\, \mathrm{e}_q^{-k_B^{-1}\beta_q^{(1)}\left(x' - \mathrm{X}_q^{(1)}\right)}$$

Для исключения множителя Лагранжа α использовано условие нормировки. Заметим, что тот факт, что параметр α можно исключить, представляет собой весьма замечательное математическое свойство.

Пример 2. Рассмотрим ещё один простой, но довольно частый случай, когда известно, что $\langle\langle x\rangle\rangle_q = 0$ и фиксировано q-среднее значение квадрата переменной x

$$\langle\langle x^2\rangle\rangle_q = \int_0^\infty dx\, x^2\, \mathcal{P}^{(q)}(x) = \mathrm{X}_q^{(2)} > 0 .$$

Для того чтобы использовать, как и прежде, метод Лагранжа для нахождения оптимизирующего распределения, запишем удлинённую энтропию в виде

$$\mathcal{L}(p) = k_B \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[p(x)\right]^q - 1}{1-q} - \alpha \int_{-\infty}^{\infty} dx\, p(x) - \beta_q^{(2)} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 \mathcal{P}^{(q)}(x) .$$

Тогда из условия равенства нулю первой вариации функционала $\mathcal{L}(p)$, получим

$$p(x) = \mathrm{e}_q^{-k_B^{-1}\beta_q^{(2)}\left(x^2 - \mathrm{X}_q^{(2)}\right)} / \int_0^\infty dx'\, \mathrm{e}_q^{-k_B^{-1}\beta_q^{(2)}\left(x'^2 - \mathrm{X}_q^{(2)}\right)} .$$

Таким образом, мы видим, что так же, как гауссианы в классической статистике глубоко связаны с энтропией Больцмана−Гиббса S_{BG}, полученные распределения, так называемые q-гауссианы, связаны с энтропией Тсаллиса S_q.

Термодинамические соотношения. Приступим теперь к главной цели настоящего введения в неэкстенсивную статистическую механику. Для квазиравновесных энтропии, свободной энергии и обобщённого статистического интеграла имеем следующие выражения

$$S_q^{(3)}\left(p\right) = \frac{k_B}{q-1} \int dz \left\{ 1 - \int dz \frac{\tilde{Z}^{1-q} p}{1 - \varepsilon\beta_q \left[H(\boldsymbol{r}) - E_q^{(3)} \right]} \right\} =$$

$$= \frac{k_B}{q-1}\left\{1-\int dz\tilde{Z}^{1-q}p\left(1+\frac{\varepsilon\beta_q\left[H(\boldsymbol{r})-E_q^{(3)}\right]}{1-\varepsilon\beta_q\left[H(\boldsymbol{r})-E_q^{(3)}\right]}\right)\right\}=$$

$$= \frac{k_B\left(1-\tilde{Z}^{1-q}\right)}{q-1}+\beta\int dz\left\{\frac{\tilde{Z}^{1-q}p\left[H(\boldsymbol{r})-E_q^{(3)}\right]/c_q}{1-\varepsilon\beta_q\left[H(\boldsymbol{r})-E_q^{(3)}\right]}\right\}=$$

$$= \frac{k_B\left(1-\tilde{Z}^{1-q}\right)}{q-1}+\beta\int dz\left[H(\boldsymbol{r})-E_q^{(3)}\right]\mathscr{P}^{(q)}=\frac{k_B\left(\tilde{Z}^{1-q}-1\right)}{1-q}, \tag{13}$$

$$F_q^{(3)}=E_q^{(3)}-\frac{1}{\beta}S_q=E_q^{(3)}-\frac{k_B\left(\tilde{Z}^{1-q}-1\right)}{\beta\left(1-q\right)}, \tag{14}$$

$$\tilde{Z}_q=\left(\int dzp^q\right)^{1/\left(1-q\right)}. \tag{15}$$

Учитывая (13), можно переписать нормированное распределение ТМР (7) в следующем виде

$$p^{(3)}(\boldsymbol{r})=\left\{\frac{1-k_B^{-1}\left(1-q\right)\beta\left[H(\boldsymbol{r})-E_q^{(3)}\right]/\int dzp^q}{\int dzp^q}\right\}^{1/\left(1-q\right)}=$$

$$=\left\{\frac{1-\varepsilon\beta_q\left[H(\boldsymbol{r})-E_q^{(3)}\right]}{1+\varepsilon S_q^{(3)}\left(p\right)}\right\}^{1/\left(1-q\right)}=\mathrm{e}_q^{\left\{-k_B^{-1}\beta_q\left[H(\boldsymbol{r})-E_q^{(3)}\right]\right\}}/\,\mathrm{e}_q^{\left\{k_B^{-1}S_q^{(3)}\right\}}. \tag{7*}$$

Дифференцируя (13), получим известные соотношения равновесной термодинамики

$$S_q=k_B\ln_q\tilde{Z}_q^{(3)},\qquad F_q^{(3)}=E_q^{(3)}-\beta^{-1}S_q^{(3)}=E_q^{(3)}-\beta^{-1}k_B\ln_q\tilde{Z}_q^{(3)},$$

$$\beta=\frac{\partial S_q^{(3)}}{\partial E_q^{(3)}}=k_B\frac{\partial\ln_q\tilde{Z}_q^{(3)}}{\partial E_q^{(3)}},\quad E_q^{(3)}=\frac{\partial(\beta F_q^{(3)})}{\partial\beta}. \tag{16}$$

Здесь важно подчеркнуть, что величина $\tilde{Z}_q^{(3)}$ определяется микроскопической энергией $H(\boldsymbol{r})$ относительно внутренней энергии $E_q^{(3)}$ системы (см.(8)). Если ввести новую величину $Z_q^{(3)}$, которая определяется микроскопической энергией $H(\boldsymbol{r})$ относительно нулевой точки,

$$\left(Z_q^{(3)}\right)^{1-q} = \left(\tilde{Z}_q^{(3)}\right)^{1-q} - (1-q)\beta E_q,$$

то соотношения равновесной термодинамики (16) принимают классическую форму

$$S_q = \beta\left(E_q^{(3)} - F_q^{(3)}\right), \quad dS_q = \beta dE_q^{(3)},$$

$$F_q^{(3)} = -\frac{k_B}{\beta}\ln_q Z_q^{(3)}, \quad E_q^{(3)} = \frac{\partial(\beta F_q^{(3)})}{\partial\beta}, \quad C_q = -\beta^2\frac{\partial E_q^{(3)}}{\partial\beta}. \qquad (17)$$

Легко показать, что эскортное осреднение приводит, в отличие от статистики Курадо−Тсаллиса, к свойству аддитивности для осреднённой энергии совокупной системы

$$\left(E_q^{(3)}\right)_{1,2} = E_{q1}^{(3)} + E_{q2}^{(3)}. \qquad (18)$$

Таким образом, третий вариант осреднения избавлен от перечисленных выше трёх проблем, которые характерны для осреднения Курадо−Тсаллиса. Кроме этого, вероятности, связанные с третьим выбором осреднения, совпадают с вероятностями, полученными со вторым, если мы используем так называемую физическую температуру $T_{ph} = \left[1 + k_B^{-1}\left(1-q\right)S_q\right]T$.

2. Модифицированная термодинамика в статистике Тсаллиса− Мендеса−Пластино

Принимая во внимание тот факт, что обычная структура основных соотношений макроскопической термодинамики существенно зависит от предположения об аддитивности энтропии, крайне важно выяснить, каким образом, в случае использования физической температуры T_{ph} должны быть модифицированы эти соотношения в статистике Тсаллиса−Мендеса−Пластино.

Термодинамическое равновесие двух независимых систем. Рассмотрим термодинамическое равновесие двух независимых систем с энтропиями $S_{q1} = S_q(p_1)$ и $S_{q2} = S_q(p_2)$, представляющих собой общую замкнутую систему с постоянным значением энтропии $S_q(p_{12})$, при условии мультипликативности $p_{12}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = p_1(\boldsymbol{r}_1) p_2(\boldsymbol{r}_2)$ и аддитивности микроскопической энергии $E_q^{(3)} = E_{q1}^{(3)} + E_{q2}^{(3)}$, где $E_{qi}^{(3)} = \int dz H_i \mathscr{P}, (i = 1, 2)$. Согласно свойству неаддитивности q-энтропии Тсаллиса, общую энтропию системы можно переписать в следующем виде

$$S_q = S_{q1}\left[1 + \varepsilon S_{q2}\right] + S_{q2}\left[1 + \varepsilon S_{q1}\right] - \varepsilon S_{q1} S_{q2}, \tag{19}$$

где $\varepsilon \equiv k_B^{-1}(1-q)$. Варьирование δS_q и $\delta E_q^{(3)}$ для совокупной замкнутой системы с постоянными значениями энтропии S_q и энергии $E_q^{(3)}$ приводит к равенству $\delta S_q = 0 = \delta S_{q1}\left[1 + \varepsilon S_{q2}\right] + \delta S_{q2}\left[1 + \varepsilon S_{q1}\right]$ для энтропии и равенству $\delta E_q^{(3)} = 0 = \delta E_{q1}^{(3)} + \delta E_{q2}^{(3)}$ для средней энергии. Объединяя их, в итоге получим уравнение

$$\frac{\delta S_{q1} / \delta E_{q1}^{(3)}}{1 + \varepsilon S_{q1}} = \frac{\delta S_{q2} / \delta E_{q2}^{(3)}}{1 + \varepsilon S_{q2}}, \tag{20}$$

или, с учётом (16),

$$\frac{\beta}{1 + \varepsilon S_{q1}} = \frac{\beta}{1 + \varepsilon S_{q2}} = \frac{\beta}{c_q} = \beta_q. \tag{21}$$

Отношение эквивалентности (21) определяет условие теплового равновесия двух q-систем и является обобщением *нулевого закона термодинамики* на неаддитивные системы. Оно показывает, что в отличие от классического случая $(q \to 1)$ физическая температура T_{ph} не является обратной величиной множителя Лагранжа, β^{-1}, но

$$T_{ph} = \frac{1}{\beta_q} \equiv \frac{c_q}{\beta} = \left(1 + \frac{1-q}{k_B} S_q\right) T = c_q T \, . \qquad (22)$$

По поводу соотношения (22) сделаем следующее замечание. В большинстве неэкстенсивных систем важную роль играют длинномасштабные пространственно-временные корреляции в фазовом или геометрическом пространстве. Это означает, в частности, что существенное значение имеет та часть внутренней энергии системы, которая связана с силовым взаимодействием отдельных её частей, а именно потенциальная энергия. В классической статистике внутренняя энергия определяется, как правило, суммой кинетических энергий всех молекул совокупной системы. В такой системе «тепловой баланс» достигается в основном за счёт теплообмена между различными её частями, т.е. «тепло» связано с передачей кинетической энергии молекулами. Таким образом, в классической системе показания термометра определяются теплом, которое он получает или теряет.

Очевидно, что физическая температура T_{ph} отвечает за «глобальный тепловой баланс» между различными частями системы и определение (21) соответствует *нулевому закону термодинамики*. Следует подчеркнуть, что глобальный энергетический баланс сильно отличается от упомянутого выше локального теплового баланса. Последний можно охарактеризовать общей температурой, измеряемой термометром, но любое измерение физической температуры T_{ph} нереально. Соотношение (21) показывает, что неизмеримость связана с коэффициентом Тсаллиса c_q, который, согласно определению (3), зависит от неаддитивного параметра q.

Таким образом, обобщённый нулевой закон q-термодинамики (21) показывает, что физическая температура в статистике Тсаллиса−Мендеса− Пластино отличается от инверсии множителя Лагранжа β. Этот факт неизбежно приводит к модификации некоторых термодинамических соотношений для неаддитивных систем. В работе (Abe и др., 2001; Abe, Okamoto, 2001), в качестве основных предпосылок, взятых за исходный пункт построения макроскопической термодинамики, выбраны первый закон термодинамики и структура преобразования Лежандра. В этом случае термодинамические соотношения, (16) и (17), полученные в рамках статистического подхода, должны быть соответствующим образом видоизменены.

Деформированные термодинамические соотношения. Аналогично температуре T_{ph} можно определить физическое давление P_q, путём исследования механического равновесия двух независимых q-систем. В этом случае энтропия совокупной системы должна максимизироваться с фиксацией общего объёма $V = V_1 + V_2 = const$. В результате будем иметь

$$\frac{\delta S_{q1} / \delta V_1}{1 + \varepsilon S_{q1}} = \frac{\delta S_{q2} / \delta V_2}{1 + \varepsilon S_{q2}} = \frac{P_{ph}}{T_{ph}}, \tag{23}$$

где P_{ph} − так называемое физическое давление, которое определяется соотношением

$$P_{ph} = \frac{T_{ph}}{1 + k_B^{-1}(1-q)S_q} \frac{\delta S_q}{\delta V} = \frac{T_{ph}}{c_q} \frac{\delta S_q}{\delta V}. \tag{24}$$

Очевидно, что физическая температура и физическое давление, определённые выше, обязательно должны привести к модификации определения термодинамической энтропии Клаузиуса.

Теперь рассмотрим структуру преобразования Лежандра. Уравнение (16) $\beta = \partial S_q / \partial E_q$ указывает на то, что β и E_q образуют пару переменных Лежандра. Это приводит к следующему определению свободной энергии Гельмгольца (*изохорно-изотермического потенциала*) (см.(15) и (16)):

$$\begin{aligned} F_q^{(3)}(\beta) &= E_q^{(3)} - \beta^{-1} S_q^{(3)} = E_q^{(3)} - \beta^{-1} k_B \ln_q \tilde{Z}_q = \\ &= E_q^{(3)} - k_B T \ln_q \left[c_q^{1/(1-q)} \right]. \end{aligned} \tag{25}$$

Это выражение, однако, неудовлетворительно с точки зрения деформированной термодинамики. Свободная энергия должна зависеть от T_{ph}, а не от переменной, β^{-1}.

В работе (Abe, 2000), которой мы далее воспользуемся, предлагается переопределить макроскопическую свободную энергию следующим образом:

$$F_q\,(T_{ph}) = E_q - k_B T_{ph} \ln \left[c_q^{1/(1-q)} \right], \tag{26}$$

что отличается от соответствующего выражения в традиционной термодинамике (здесь и далее супериндекс (3) опущен). Используя соотношения (3), (16) и (22), можно убедиться, что величина F_q на самом деле является функцией T_{phys}. Дифференцируя функцию F_q, в результате получим

$$dF_q = dE_q - \left[\frac{k_B}{(1-q)}\ln c_q\right] dT_{ph} - \frac{T_{ph}}{c_q} dS_q \,. \tag{27}$$

Если теперь использовать первый закон термодинамики

$$d'Q_q = dE_q + P_{ph} dV \,, \tag{28}$$

где Q_q − количество теплоты, подводимое к термодинамической q-системе (или отводимое от неё), то (27) можно переписать в виде

$$dF_q = d'Q_q - P_{ph} dV - \left[\frac{k_B}{(1-q)}\ln c_q\right] dT_{ph} - \frac{T_{ph}}{c_q} dS_q \,. \tag{29}$$

Отсюда следует, что определение термодинамической энтропии Клаузиуса модифицируется для неаддитивных систем следующим образом:

$$dS_q = c_q d'Q_q / T_{ph} \,. \tag{30}$$

Введём теперь в рассмотрение следующие характеристические функции: обобщённую энтальпию $H_q = E_q + P_{ph} V$ и обобщённый термодинамический потенциал $G_q = F_q + P_{ph} V$. Заметим, что все характеристические функции обладают следующим свойством: *если известна характеристическая функция, выраженная через соответствующие (свои для каждой характеристической функции) переменные, то из неё можно вычислить любую термодинамическую величину.*

В этом нетрудно убедиться. Из уравнений

$$dE_q = \frac{T_{ph}}{c_q} dS_q - P_{ph} dV, \tag{31}$$

$$dH_q = \frac{T_{ph}}{c_q} dS_q + V dP_{ph}, \tag{32}$$

$$dF_q = -\left[\frac{k_B}{(1-q)} \ln c_q \right] dT_{ph} - P_{ph} dV, \tag{33}$$

$$dG_q = -\left[\frac{k_B}{(1-q)} \ln c_q \right] dT_{ph} + V dP_{ph} \tag{34}$$

следуют обобщённые термодинамические соотношения

$$\left(\frac{\partial E_q}{\partial V} \right)_{S_q} = \left(\frac{\partial F_q}{\partial V} \right)_{T_{ph}} = -P_{ph}, \quad \left(\frac{\partial E_q}{\partial S_q} \right)_V = \left(\frac{\partial H_q}{\partial S_q} \right)_{P_{ph}} = \frac{T_{ph}}{c_q}, \tag{35}$$

$$\left(\frac{\partial H_q}{\partial P_{ph}} \right)_{S_q} = \left(\frac{\partial G_q}{\partial P_{ph}} \right)_{T_{ph}} = V, \quad \left(\frac{\partial F_q}{\partial T_{ph}} \right)_V = \left(\frac{\partial G_q}{\partial T_{ph}} \right)_{P_{ph}} = -\frac{k_B}{(1-q)} \ln c_q. \tag{36}$$

Уравнение для теплоёмкостей. Как известно, в термодинамике теплоёмкость вещества в наиболее общем виде определяется следующим образом: $C_z = T\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_z$. Здесь C_z – теплоёмкость в таком процессе, в котором сохраняется постоянным параметр z, где z – любые обобщённые координаты. Наиболее распространёнными являются изобарная теплоёмкость и изохорная теплоёмкость:

$$C_p = \frac{T_{ph}}{c_q} \left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}} \right)_{P_{ph}}, \quad C_V = \frac{T_{ph}}{c_q} \left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}} \right)_V. \tag{37}$$

Так как в соответствии с формулой $\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial y}{\partial u}\right)_z \left(\frac{\partial u)}{\partial x}\right)_z$ (справедливой для случая двух переменных, когда $y = y(x,z)$ и $u = u(x,z)$) имеем

$$\left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} = \left(\frac{\partial S_q}{\partial H_q}\right)_{P_{ph}} \left(\frac{\partial H_q}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} \text{ и } \left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}}\right)_V = \left(\frac{\partial S_q}{\partial E_q}\right)_V \left(\frac{\partial E_q}{\partial T_{ph}}\right)_V , \qquad (38)$$

а из (35) и (36) следует, что $\left(\frac{\partial S_q}{\partial H_q}\right)_{P_{ph}} = \frac{c_q}{T_{ph}}$, $\left(\frac{\partial S_q}{\partial E_q}\right)_V = \frac{c_q}{T_{ph}}$, то соотношения (37) можно записать в виде

$$C_p = \left(\frac{\partial H_q}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} , \quad C_V = \left(\frac{\partial E_q}{\partial T_{ph}}\right)_V . \qquad (39)$$

Уравнение, устанавливающее связь между теплоёмкостями C_p и C_V, может быть получено следующим образом. В соответствии с соотношением (см. Сычев,1991)

$$\left(\frac{\partial z}{\partial m}\right)_n = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial m}\right)_n + \left(\frac{\partial z)}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial m}\right)_n , \qquad (40)$$

являющимся следствием выражения для полного дифференциала функции $z = z(x,y)$, можно записать (полагая $m = x$)

$$\left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} = \left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}}\right)_V + \left(\frac{\partial S_q}{\partial V}\right)_{T_{ph}} \left(\frac{\partial V}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} . \qquad (41)$$

Отсюда, используя уравнение Максвелла $(\partial S_q/\partial V)_{T_{ph}} = (\partial P_{ph}/T_{ph})_V$, получим

$$C_p - C_V = \frac{T_{ph}}{c_q^2}\left(\frac{\partial P_{ph}}{\partial T_{ph}}\right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} . \qquad (42)$$

Это выражение можно представить в другом виде, если использовать *связку трёх производных* $\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x = -1$ (следствие соотношения (40) при $m = x,\ n = z$ (Сычев, 1991), из которой следует

$$\left(\frac{\partial P_{ph}}{\partial T_{ph}}\right)_V = -\left(\frac{\partial V}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} \left(\frac{\partial P_{ph}}{\partial V}\right)_{T_{ph}} . \tag{43}$$

С учётом (43) связь между теплоёмкостями приобретает классический вид:

$$C_p - C_V = -\frac{T_{ph}}{c_q^2}\left(\frac{\partial V}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}}^2 \Big/ \left(\frac{\partial V}{\partial P_{ph}}\right)_{T_{ph}} . \tag{44}$$

Таким образом, стандартная форма термодинамических соотношений (35) и (45) для уравнения состояния и теплоёмкости позволяет заключить, что они остаются инвариантными относительно неаддитивной модификации их классических аналогов. Подчеркнем важный факт, что температуры $T = 1/\beta$ и $T_{ph} = 1/\beta_q$ не зависят от выбора нуля энергий, и поэтому они допускают физическую интерпретацию. Заметим, что в дополнение к структуре Лежандра различные другие важные теоремы и свойства остаются q- инвариантными (см. Tsallis, 2009).

Модель классического газа. Рассмотрим теперь модель классического газа на основе неэкстенсивных термодинамических соотношений, полученных в предыдущем пункте. Для системы из N одинаковых частиц гамильтониан имеет вид $H(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}$. Используя равновесное распределение Тсаллиса−Мендеса−Пластино (7), получим

$$p(\{\boldsymbol{p}_i\},\beta) = \tilde{Z}_q^{-1}\left\{1 - k_B^{-1}(1-q)\frac{\beta}{c_q}\left[\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} - E_q\right]\right\}^{1/(1-q)} , \tag{45}$$

где

$$\tilde{Z}_q(\beta) = \sum_N \int dz_N \left\{ 1 - k_B^{-1}(1-q)\frac{\beta}{c_q}\left[\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} - E_q\right]\right\}^{1/(1-q)}, \tag{46}$$

$$E_q = \frac{1}{c_q}\sum_N \int dz_N [p(\beta)]^q \left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}\right), \tag{47}$$

$$c_q = \sum_N \int dz_N p^q = \left(\tilde{Z}_q\right)^{1-q}, \quad \beta_q \equiv \beta / c_q = 1/T_{ph}. \tag{48}$$

Далее мы ограничимся областью $0<q<1$. Подставляя распределение (45) в формулы (46)-(48), в результате вычислений получим (Abe,1999, 2000b)

$$\tilde{Z}_q(\beta) = \frac{V^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}}\left[\frac{2\pi k_B m}{(1-q)\beta_q}\right]^{3N/2} \times \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)}\left\{1+\frac{(1-q)\beta_q}{k_B}E_q\right\}^{\frac{1}{1-q}+\frac{3N}{2}}, \tag{49}$$

$$c_q = \frac{1}{\left[\tilde{Z}_q(\beta)\right]^q}\frac{V^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}}\left[\frac{2\pi k_B m}{(1-q)\beta_q}\right]^{3N/2} \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)}\left\{1+\frac{(1-q)\beta_q}{k_B}E_q\right\}^{\frac{q}{1-q}+\frac{3N}{2}}, \tag{50}$$

$$E_q = \frac{3Nk_B/2\beta}{\left[\tilde{Z}_q(\beta)\right]^q}\frac{V^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}}\left[\frac{2\pi k_B m}{(1-q)\beta_q}\right]^{\frac{3N}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)}\left\{1+\frac{(1-q)\beta_q}{k_B}E_q\right\}^{\frac{1}{1-q}+\frac{3N}{2}}, \tag{51}$$

где $\Gamma(z)$ – гамма-функция.

Используя (50) и свойство $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$ перепишем (51) в виде

$$E_q = \frac{3Nk_B}{2\beta_q}\frac{1+k_B^{-1}(1-q)\beta_q E_q}{1+(1-q)\frac{3N}{2}}, \tag{51}$$

откуда следует классическое по форме соотношение для средней энергии системы

$$E_q = \frac{3}{2}\frac{Nk_B}{\beta_q} = \frac{3}{2}Nk_B T_{ph}. \qquad (52)$$

Выражение (49) для $\tilde{Z}_q$ с учётом (50) и (52), можно переписать в виде

$$\tilde{Z}_q = \left[c_q\right]^{\frac{1}{1-q}} = \frac{V^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}}\left[\frac{2\pi k_B m}{(1-q)\beta_q}\right]^{3N/2} \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)}\left\{1+\frac{3N}{2}(1-q)\right\}^{\frac{q}{1-q}+\frac{3N}{2}} \qquad (53)$$

в полном согласии с выражением (15).

Используя формулу (39), определим изохорную теплоёмкость:

$$C_V = \left(\frac{\partial E_q}{\partial T_{ph}}\right)_V = \frac{3N}{2}k_B. \qquad (54)$$

Согласно формулам (26),(52) и (53), обобщённую свободную энергию можно переписать следующим образом:

$$F_q\,(T_{ph}) = \frac{3}{2}Nk_B T_{ph} - k_B T_{ph}\ln\tilde{Z}_q. \qquad (55)$$

Тогда, согласно (35), для физического давления имеем

$$P_{ph} = -\left(\frac{\partial F_q}{\partial V}\right)_{T_{ph}} = k_B T_{ph}\left(\frac{\partial \ln\tilde{Z}_q}{\partial V}\right)_{T_{ph}}. \qquad (56)$$

Наконец, используя формулы (22), (49) и (52), получим уравнение состояния системы

$$P_{ph} = k_B T_{ph}\left(\frac{\partial \ln\tilde{Z}_q}{\partial V}\right)_{T_{ph}} = k_B T_{ph}\frac{N}{V}. \qquad (57)$$

Таким образом, мы получили весьма нетривиальный вывод о том, что как теплоемкость, так и уравнение состояния классического газа в неэкстенсивной термодинамике Абе имеют ту же форму, что и в обычной статистической механике Гиббса.

3. Метод оптимизированных множителей Лагранжа

Правильно выбранный способ осреднения – это важный вопрос статистики Тсаллиса. Выше мы обсудили три различных метода осреднения. По мнению ряда исследователей, процедура осреднения Тсаллиса−Мендеса −Пластино (ТМП) имеет явные преимущества по сравнению с более ранними. В этом пункте мы рассмотрим новый подход к введению множителей Лагранжа, который значительно упрощает соответствующий анализ без потери лучших свойств формализма ТМП (см. Martınez и др., 2000; Abe, 2000d).

Сравнение выражений $\mathcal{L}(p) = -k_B \int dz\, p^q \ln_q p - \beta \int dz\, p^q H - k_B \lambda \int dz\, p$ и (5) для удлинённых энтропий Курадо−Тсаллиса и Тсаллиса−Мендеса− Пластино показывает, что появление избыточного множителя c_q в определении температуры $T_{ph} = c_q / \beta$ (см. (22)) обусловлено наличием сомножителя $(1/c_q)$ во втором члене (5).

С другой стороны, при вычислении средних значений

$$\langle\langle A \rangle\rangle_q \equiv \int dz\, A(\boldsymbol{r}) \mathcal{P}^{(q)} = \frac{1}{c_q} \int dz\, A(\boldsymbol{r}) p^q = \frac{\langle A \rangle_q}{c_q}$$

микроскопических величин $A(\boldsymbol{r})$ следует использовать эскортную вероятность (1), содержащую такой сомножитель. Противоречие указанных подходов снимается, если определить средние величины (1) (внутреннюю энергию) в альтернативной форме

$$\int dz\, p^q \left[A(\boldsymbol{r}) - \langle\langle A \rangle\rangle_q \right] = 0. \tag{58}$$

Формула (58) является основой *метода оптимизированных множителей* Лагранжа, в рамках которого удлинённая энтропия Тсаллиса (5) принимает вид

$$\mathcal{L} = \frac{k_B}{q-1} \int dz (p - p^q) - \alpha \int dz p - \beta \int dz\, p^q \left[H(\boldsymbol{r}) - \langle\langle H \rangle\rangle_q \right]. \tag{59}$$

Условие экстремума функционала (59) приводит к уравнению

$$\frac{k_B}{1-q}qp^{q-1}-\left\{\frac{k_B}{1-q}+\alpha+\beta qp^{q-1}\left[H(\boldsymbol{r})-\langle\langle H\rangle\rangle_q\right]\right\}=0\,, \tag{60}$$

решение которого даёт

$$p=\left\{\frac{1}{q}+\frac{1-q}{qk_B}\alpha\right\}^{-1/(1-q)}\left\{1-\beta k_B^{-1}(1-q)\left[H(\boldsymbol{r})-\langle\langle H\rangle\rangle_q\right]\right\}^{1/(1-q)}. \tag{61}$$

Определяя статистический вес и температуру выражениями

$$Z=\left(\frac{1}{q}\right)^{1/(1-q)}\left\{1+k_B^{-1}(1-q)\alpha\right\}^{1/(1-q)}=q^{-1/(1-q)}\,\mathrm{e}_q^{k_B^{-1}\alpha},\quad T=1/\beta, \tag{62}$$

приводим распределение (61) к каноническому виду

$$p=Z^{-1}\,\mathrm{e}_q^{-\left[H(\boldsymbol{r})-\langle\langle H\rangle\rangle_q\right]/k_BT}. \tag{63}$$

Поскольку эскортная вероятность (2) нормирована по определению, а температура определена стандартным образом, то можно заключить, что метод оптимизированных множителей Лагранжа сохраняет структуру Лежандра статистической теории сложных систем. Кроме этого, при таком подходе устранён основной недостаток осреднения ТМП − самозависимость (self-reference) распределения. Таким образом, единственным недостатком этого метода остаётся неаддитивность энтропии Тсаллиса.

4. Заключение

Как теперь стало понятно, статистическая механика Больцмана−Гиббса и стандартная термодинамика не являются вполне универсальными теориями, поскольку они имеют ограниченные области применимости. Это связано, в частности, с тем, что в основе статистики Больцмана−Гиббса лежит постулат о полном перемешивании потока «фазовых точек» в фазовом пространстве (гипотеза молекулярного хаоса). Это означает, что фазовое пространство не содержит запрещённых состояний и обладает обычными свойствами непрерывности, гладкости, евклидовости. При этом гипотеза перемешивания, дополненная предположением о бесконечном числе степеней свободы, приводит к экспоненциальному распределению вероятности состояний системы (из которого следует, в частности, свойство аддитивности экстенсивных термодинамических переменных), или, в случае кинетической теории, к максвелловскому распределению скоростей. Кроме этого, в основе этих наук лежит фундаментальное предположение о малости радиуса взаимодействия между отдельными элементами системы по сравнению с размерами самой системы. Поскольку в большинстве обычных систем силы между отдельными её частями короткодействующие, то каждая «молекула» чувствует лишь несколько ближайших соседей. Таким образом, аддитивность энтропии и других термодинамических параметров для равновесных или близких к равновесию систем является следствием локального взаимодействия между отдельными элементами системы.

Вместе с тем, существует широкий класс сложных систем, элементы которых взаимодействуют глобально, чему предшествует снижение симметрии системы, связанное с формированием коллективных мод интенсивных переменных. В физике и в других естественных науках, использующих методы статистической термодинамики, известны многочисленные примеры подобных систем, поведение и свойства которых являются аномальными с точки зрения классической статистики и равновесной термодинамики. Примером таких аномальных систем в астрофизике являются газопылевые астрофизические диски достаточно больших размеров, существенным признаком которых является несводимость всей системы к простой сумме её частей. Как известно, сила гравитационного притяжения между любыми телами падает с расстоянием достаточно медленно, обратно пропорционально квадрату расстояния между телами. Поэтому, например, в самогравитирующих астрофизических дисках каждая частица «чувствует» не только ближайших соседей, а всю систему целиком (т.е. всю совокупность остальных частиц). Другими словами, отдельные части дискового облака будут взаимодействовать не только на границе их соприкосновения, но и глобально всеми своими объёмами. Именно по этой причине моделирование эволюции дискового вещества на основе классической энтропии Больцмана−Гиббса не является в общем случае вполне адекватным. Это означает, что в самогравитирующих системах сильное гравитационное взаимодействие является причиной того, что дисковая система относится к числу сложных (аномальных) систем, для которых характерна слабая хаотизация фазового пространства, вследствие чего нарушается аддитивность ряда экстенсивных термодинамических параметров (в частности, энтропия в таких системах не будет аддитивной величиной) и традиционное экспоненциальное статистическое распределение вероятности состояний приобретает степенной характер.

В статье изложены некоторые элементы неэкстенсивной статистической механики и термодинамики Тсаллиса, предназначенной для описания сложных (аномальных) систем, фактические свойства которых находятся вне области применения классической статистики Больцмана–Гиббса, в частности, из-за наличия в пределах системы дальнодействующего силового взаимодействия, эффекта памяти и нелокальных корреляций, а также фрактальности геометрии фазового пространства.

Заметим, что существуют и многие другие системы, которые не могут быть описаны в рамках статистики Больцмана–Гиббса. К их числу относятся системы, которые помнят свое прошлое. Эффекты памяти также приводят к нарушению гипотезы молекулярного хаоса, поскольку движения отдельных частиц такой системы являются взаимообусловленными (т.е. сильно коррелированными). Существуют также системы, в которых имеются нелокальные корреляции, сильная взаимозависимость между всеми элементами системы. Это приводит к тому, что их не удается адекватно описать больцмановской статистикой и термодинамикой, так как последние базируются на предположении о молекулярном хаосе. Сложная пространственно-временная структура подобных систем приводит к нарушению принципа аддитивности для таких важнейших термодинамических величин, как энтропия или внутренняя энергия.

Таким образом, построение статистической механики и термодинамики сложных неэкстенсивных систем является важной проблемой как современной теоретической физики, так и смежных с ней наук. Начало систематического изучения в этом направлении исследований связано с работой К. Тсаллиса (1988), в которой им впервые была введена параметрическая формула $S_q^T(p) = \frac{k_B}{q-1}\left(1 - \int p^q dz\right)$ для статистической энтропии, предназначенная для описания поведения сложных аномальных систем. Важно, что эта формула для энтропии, во-первых, переходит в пределе слабой связи $(q \to 1)$ в каноническую формулу энтропии Больцмана–Гиббса, а во-вторых, являясь неаддитивной величиной, может промоделировать ситуацию неэкстенсивности. Энтропийный индекс q (параметр деформации) в определении энтропии $S_q^T(p)$ представляет собой вещественное число, принадлежащее области $q \in \mathcal{R}$ (часто это просто лишь подгоночный параметр).

В настоящее время теория неэкстенсивных систем существенно развивается в ускоренном ритме, при котором появляются новые идеи, позволяющие глубже понять её природу, возможности и ограничения (см. библиографию, представленную на сайте http:/tsallis.–cat.cbpf.br/biblio.htm, которая постоянно обновляется).

В представленной работе даётся логическая схема изложения принципов неаддитивной (неэкстенсивной) статистики и термодинамики, основанная на параметрическом определении энтропии Тсаллиса. Принцип максимума энтропии используется для нахождения вероятностных равновесных q-распределений, которые при больших отклонениях случайной переменной от среднего значения обладают степенной асимптотикой, соответствующей эмпирически установленным закономерностям для широкого класса объектов, к которым не применима классическая статистическая механика. Проанализированы следствия эскортного осреднения Тсаллиса−Мендеса−Пластино (TMP) микроскопических динамических величин в неаддитивной статистике Тсаллиса и его формальное и практическое значение при моделировании различных q-систем, которое в последнее время в большом количестве представлено в научной литературе. Показано, что в зависимости от способа определения средних значений динамических величин, возможны различные варианты обобщённой равновесной статистической механики и дан их сравнительный анализ. Найдены условия выполнения преобразования Лежандра при использовании понятия физической температуры. Проведено рассмотрение модифицированных термодинамических соотношений в статистике TMP. Обсуждается метод *оптимизированных множителей Лагранжа*, позволяющий устранить некоторые проблемы статистики TMP.

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

Список литературы

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

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

Сычев В.В. Дифференциальные уравнения термодинамики. М.:Высш. шк. 1991. 224 с.

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

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

Abe S. Correlation induced by Tsallis' nonextensivity // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.1999. V. 269. № 2. P. 403-409.

Abe S. Heat and generalized Clausius entropy of nonextensive systems // Eprint arXiv:cond-mat/0012115. 2000a. V.3. P.1-14.

Abe S. Erratum to: “Thermodynamic limit of a classical gas in nonextensive statistical mechanics: Negative specific heat and polytropism”. [Phys. Lett. A 263 (1999) 424-429]// Phys. Lett. A , 2000b. V. 267, № 5-6, P. 456-457.

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

Abe S. A problem with the escort distribution representation of nonextensive statistical mechanics. 2000d. arXiv:cond-mat/0006053.

Abe S., Martinez S., Pennini F., Plastino A. Nonextensive thermodynamic relations // Physics Letters A, 2001. V. 281. № 2-3, P. 126-130.

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

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

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

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

Jaynes E.T. Information theory and statistical mechanics // В сб. «Statistical Physics». Brandeis Lectures. 1963. V.3. P.160.

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

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

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

Martınez S., Nicolas F., Pennini F., Plastino A. Tsallis’ entropy maximization procedure revisited// Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2000. V. 286. № 3. P. 489-502.

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

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

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

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

Tsallis C. Nonextensive physics: a possible connection between generalized statistical mechanics and quantum groups // Phys. Lett. A. 1994. V. 195. P. 329-334.

Tsallis C., Levy S.V.F., Souza, André M.C.,Maynard R. Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of Lévy distributions in Nature// Ph.Rv.L. 1995. V.75. № 20. P.3589-3593.

Tsallis C. Introduction to nonextensive statistic mechanics. Approaching a complex world. New York: Springer. 2009. 382 p.

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

Оглавление