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

Препринты ИПМ • Препринт № 36 за 2020 г.

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

Колесниченко А.В.

Двухпараметрическая энтропия Шарма−Танеджа −Миттал как основа семейства равновесных термодинамик неэкстенсивных систем

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Колесниченко А.В. Двухпараметрическая энтропия Шарма−Танеджа−Миттал как основа семейства равновесных термодинамик неэкстенсивных систем // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 36. 35 с. http://doi.org/10.20948/prepr-2020-36
URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-36

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

Двухпараметрическая энтропия Шарма-Танеджа-Миттал как основа семейства равновесных термодинамик неэкстенсивных систем

Москва — 2020

Колесниченко А.В.

Двухпараметрическая энтропия Шарма–Танеджа–Миттал как основа семейства равновесных термодинамик неэкстенсивных систем.

Аннотация. В рамках статистической механики, основанной на двухпараметрической энтропии Шарма–Танеджа–Миттал, показано, как можно получить равновесную термодинамику неэкстенсивной системы и определить её особенности. Приведены основные математические свойства двукратно деформированных логарифма и экспоненты, а также других связанных с ними функций, которые необходимы при конструировании неэкстенсивной термостатики. Получено обобщение на неэкстенсивный случай нулевого закона термодинамики и введена так называемая физическая температура, отличная от инверсии множителя Лагранжа β. На основе макроскопической энтропии Клаузиуса, с привлечением обобщённого первого закона термодинамики и преобразования Лежандра получены новые термодинамические уравнения для неэкстенсивных систем, удовлетворительные с точки зрения макроскопической термодинамики. Кроме того, с учетом свойства выпуклости дивергенции Брэгмана показано, что для (κ,ς)-систем сохраняется принцип максимума равновесной энтропии Шарма–Танеджа–Миттал, лежандрова структура теории и H-теорема, описывающая хаотизацию системы при спонтанных переходах.

Ключевые слова: энтропия Шарма–Танеджа–Миттал, неэкстенсивная статистическая термостатика, дивергенция Брэгмана.

Aleksandr Vladimirovich Kolesnichenko

Two-parameter Sharma–Taneja –Mittal entropy as the basis of family of equilibrium thermodynamics of nonextensive systems**.**

Abstract. In the framework of statistical mechanics based on the two-parameter Sharma–Taneja–Mittal entropy, it is shown how one can obtain the equilibrium thermodynamics of nonextensive systems and determine its properties. The basic mathematical properties of the doubly deformed logarithm and exponent, as well as other related functions that are necessary for constructing non-extensive thermostatics, are presented. A generalization is obtained for the non-extensive case of the zero law of thermodynamics and the so-called physical temperature is introduced, which differs from the inversion of the Lagrange multiplier β. Based on the Clausius macroscopic entropy and using the generalized first law of thermodynamics and the Legendre transformation, new thermodynamic equations for nonextensive systems are obtained that are satisfactory from the point of view of macroscopic thermodynamics. In addition, taking into account the convexity property of the Bragmann divergence, it was shown that for (κ,ς)- systems the principle of maximum the Sharma–Taneja–Mittal equilibrium entropy is preserved, the Legendre structure of the theory and the H-theorem describing the randomization of the system during spontaneous transitions.

Keywords: Sharma–Taneja–Mittal entropy, non-extensive statistical thermodynamics, Bregmann divergence.

Введение

Как теперь стало понятно, статистическая механика Больцмана– Гиббса–Шеннона и стандартная термодинамика не являются вполне универсальными теориями, поскольку они имеют ограниченные области применимости. В физике и в теории информации, а также в других естественных науках, использующих статистические методы, известны многочисленные примеры сложных (аномальных) систем, которым присущи эффекты сильного дальнодействия, нелокальные корреляции между отдельными элементами системы, фрактальный характер фазового пространства, немарковское поведение. Сложная пространственно-временная структура этих систем приводит к нарушению принципа аддитивности для таких важнейших термодинамических величин, как энтропия или внутренняя энергия.

Исследования в области статистической механики и термодинамики неэкстенсивных (неаддитивных) систем стали в последнее время предметом значительного интереса, что объясняется как новизной возникающих здесь общетеоретических проблем, так и важностью практических приложений. Начало систематического изучения в этом направлении связано с работой К. Тсаллиса (1988), в которой был введен энтропийный функционал $S_q^T(p) := \left[1 - \int p^q \, d\Gamma\right] / (q-1)$, зависящий от параметра деформации q и обладающий неаддитивностью для совокупности независимых систем. Характерной чертой таких q-систем является асимптотический степенной закон распределения вероятностей, который не зависит от экспоненциального поведения, обусловленного распределением Больцмана–Гиббса. В научной литературе доступны многочисленные обзоры новых результатов, полученных в ходе изучения аномальных физических явлений в рамках стататистики Тсаллиса (см., например, библиографию, представленную на сайте http:/tsallis. -cat.cbpf.br/ -biblio.htm, которая постоянно обновляется).

Вместе с тем определение однопараметрической энтропии Тсаллиса (Havrda, Charvat, 1967; Daroczy, 1970; Tsallis, 1988) не является единственным примером деформированной энтропии (см. Beck, 2009)[1)]. Фундаментом исследований в области неэкстенсивной статистической механики, проводимых в настоящее время, являются многочисленные нелогарифмические энтропии, в частности, однопараметрическая энтропия Реньи

[1)] В монографии (Зарипов, 2010) на основе групповых свойств параметрических мер дана их общая классификация и получены новые глубокие результаты в применении к равновесной термодинамике неэкстенсивных систем.

$S_q^R(p) := \ln\left(\int p^q\right)/(1-q)$ (Renyi, 1961, 1970), двухпараметрическая энтропия Шарма–Миттал $S_{qr}^{SM} := \left[1-\left(\int p^q d\Gamma\right)^{(r-1)/(q-1)}\right]/(r-1)$ (Sharma, Mittal, 1975,1977), однопараметрическая каппа-энтропия Каниадакиса $S_\kappa(p) := -\left[\int\left(p^{\kappa+1}-p^{1-\kappa}\right)d\Gamma\right]/2\kappa$ (Kaniadakis, 2001, 2002, 2005), однопараметрическая энтропия Ландсберга–Ведрала $S_q^{LV} := \left[1-\left(\int p^q d\Gamma\right)^{-1}\right]/(1-q)$ (Landberg, Vedral, 1998), однопараметрическая энтропия Гаусса $S_r^G := \left[1-\left(\exp(r-1)\int p\ln(p)d\Gamma\right)\right]/(r-1)$ (Frank, Plastino, 2002), однопараметрическая энтропия Абэ $S_{q_A} := -\left[\int\left(p^{q_A}-p^{q_A^{-1}}\right)d\Gamma\right]/(q_A-q_A^{-1})$ (Abe, 1997; Beck, 2009; Canturk и др., 2018), двухпараметрическая энтропия (Шарма–Танеджа–Миттал $S_{\kappa,\varsigma}(p) := -\left[\int p^{1+\varsigma}(p^\kappa-p^{-\kappa})d\Gamma\right]/2\kappa$ (Kaniadakis и др., 2005; Scarfone, 2006) и многие другие. Диапазон применения разнообразных параметрических энтропий в настоящее время постоянно расширяется, охватывая различные направления в науке, такие как космология и космогония, теория плазмы, квантовая механика и статистика, специальная и общая теории относительности, стохастическая динамика и фракталы, геофизика, биомедицина и многие другие.

При этом важно подчеркнуть, что среди всех деформированных энтропий особый интерес представляют двухпараметрические энтропии, в частности энтропии Шарма–Миттал и Шарма–Танеджа–Миттал (ШТМ), поскольку они, позволяя получить путем манипулирования двумя параметрами деформации различные однопараметрические энтропии, являются тем самым прародителями целого семейства неэкстенсивных статистических механик неэкстенсивных систем. В частности, из энтропийного функционала Шарма–Миттал следует аддитивная энтропия Больцмана–Гиббса–Шеннона, энтропия Тсаллиса, энтропия Реньи, энтропия Ландсберга–Ведрала, энтропия Гаусса. Энтропийный функционал Шарма–Танеджа–Миттал включает в себя энтропию Тсаллиса, энтропию Абэ и энтропию Каниадакиса (см. Колесниченко, 2018). Таким образом, многие

неэкстенсивные однопараметрические энтропии могут изучаться по единообразной схеме.

В связи со сказанным основанная на энтропии (ШТМ) неэкстенсивная статистическая механика, сохраняющая математическую и гносеологическую структуру классической статистической механики и - пригодная для описания очень большого класса экспериментально наблюдаемых явлений в естественных, экономических и социальных науках, заслуживает особого внимания.

В представленной работе изложен круг вопросов, связанный с конструированием деформированной равновесной термодинамики на основе двухпараметрической энтропии (ШТМ) и дивергенции Брэгмана для аномальных неэкстенсивных систем. Проведенное исследование базируется на свойствах негиббсового канонического (κ,ς)-распределения, полученного из принципа Джейнса (Jaynes,1963) максимума (κ,ς)-энтропии при заданности усредненной внутренней энергии системы и нормировке вероятностного распределения. Показано, что все важные термодинамические характеристики системы, такие как энтропия, полная и свободная энергия могут быть выражены с использованием только равновесного распределения. Получено обобщение нулевого закона термодинамики для двух независимых неэкстенсивных систем при их тепловом контакте, вводящее в рассмотрение так называемую физическую температуру, отличающуюся от инверсии множителя Лагранжа β. Именно этот факт с неизбежностью требует модификации полученных из микроскопических статистико-механических соображений уравнений термостатики на основе макроскопической энтропии Клаузиуса. На ее основе и с учетом первого закона термодинамики и преобразования Лежандра построена макроскопическая равновесная термодинамика неэкстенсивных систем. Кроме этого, с использованием свойства выпуклости дивергенции Брэгмана изучены спонтанные переходы между стационарными состояниями сложной (κ,ς)-системы и доказаны теорема Гиббса и *H*-теорема Больцмана.

1. Основные определения и статистические свойства энтропии Шарма–Танеджа–Миттал

В деформированной двухпараметрической статистической механике Шарма–Танеджа–Миттал для непрерывных величин аномальных (κ,ς)-систем при вероятностной нормировке

$$\int p(\boldsymbol{r})d\Gamma = 1, \quad (0 \le p(\boldsymbol{r}) < \infty) \tag{1}$$

для плотности распределения $p(\boldsymbol{r})$ состояния системы в вероятностном фазовом пространстве $\boldsymbol{r} := \{\boldsymbol{q}_1, ...\boldsymbol{q}_N; \boldsymbol{p}_1, ...\boldsymbol{p}_N\}$ физического статистического ансамбля Гиббса (описывающего микроскопическое состояние рассматриваемой системы) безразмерная (κ, ς)-энтропия задаётся следующим функционалом (Kaniadakis и др., 2005; Scarfone, 2006)

$$S_{\kappa,\varsigma}(p) := -\int p^{1+\varsigma}(\boldsymbol{r}) \frac{p^{\kappa}(\boldsymbol{r}) - p^{-\kappa}(\boldsymbol{r})}{2\kappa} d\Gamma. \tag{2}$$

Здесь и далее везде область интегрирования совпадает со всем $6N$-мерным фазовым пространством, причем безразмерный элемент фазового пространства $d\Gamma$ записывается в современной форме $d\Gamma := \left\{N!h^{3N}\right\}^{-1} d\boldsymbol{r}$, где $h = 2\pi\hbar$ – постоянная Планка; энтропийные индексы κ и ς (параметры деформации) суть вещественные числа, удовлетворяющие неравенствам $|\kappa| < 1$ и $\varsigma > 0$; в общем случае распределение $p(\boldsymbol{r}, t, \theta)$ может зависеть от времени t и от некоторого параметра θ. Энтропия (2) обобщает распределения Тсаллиса и Каниадакиса посредством манипулирования двумя параметрами деформации κ и ς, тем самым определяя эти энтропии как некоторые предельные однопараметрические случаи (см., например, Колесниченко, 2019, 2020).

Энтропия (2) может быть записана также в следующих эквивалентных формах:

$$S_{\kappa,\varsigma}(p) := -\int p(\boldsymbol{r}) \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right] d\Gamma = -\left\langle \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right]\right\rangle, \tag{3}$$

при написании которых использован так называемый «деформированный» логарифм Шарма–Миттал (Sharma, Mittal, 1975, 1977)

$$\ln_{\{\kappa,\varsigma\}}(x) := \frac{x^{\varsigma+\kappa} - x^{\varsigma-\kappa}}{2\kappa} \equiv \frac{x^{\varsigma}}{\kappa} \sinh(\kappa \ln x) \quad (\forall x > 0), \tag{4}$$

а также способ получения среднего значения для каждой физической величины $\mathcal{T}_j(\boldsymbol{r})$, характеризующей микросостояние системы, а именно

$$\boldsymbol{E}(\mathcal{T}) = \langle \mathcal{T}_j(\boldsymbol{r}) \rangle := \int p(\boldsymbol{r}) \mathcal{T}_j(\boldsymbol{r}) d\Gamma, \tag{5}$$

где принята нормировка (1). Такая деформация логарифмической функции в выражении для энтропии (по сравнению с классической энтропией Больцмана–Гиббса $S_{\mathcal{BG}}(p) := -k_{\mathcal{B}} \int p \ln(p) d\Gamma$) позволяет учитывать важную особенность поведения многих аномальных систем с длинной памятью и/или дальнодействующими силовыми взаимодействиями, когда вероятность реализации $p(\boldsymbol{r})$ малых значений параметров состояния убывает (при $p(\boldsymbol{r}) \to 0^+$) не экспоненциально быстро, а степенным образом (закон Парето). Благодаря этому статистика (ШТМ) описывает события, практически недостижимые в простых системах, характеризуемых статистикой Больцмана–Гиббса (см. Scarfone, 2010).

Если $\varsigma = \pm|\kappa| = (q-1)/2$, то из определения (2) следует энтропия Тсаллиса $S_{\kappa,\varsigma}(p) \to S_{2-q} := \int \frac{p^{2-q}(\boldsymbol{r}) \ - p(\boldsymbol{r})}{q-1} d\Gamma$ (Tsallis, 1988, 2009), а при $\varsigma = 0$ –энтропия Каниадакиса $S_{\kappa} := \int \frac{p^{\kappa+1}(\boldsymbol{r}) - p^{-\kappa+1}(\boldsymbol{r})}{2\kappa} d\Gamma$ (Kaniadakis, 2001, 2002, 2005), на основе которых строятся соответствующие статистические термодинамики

Легко показать, что в пределе слабой связи ($\varsigma \to 0$ и $\kappa \to 0$) энтропия $S_{\kappa,\varsigma}$ переходит в классическую формулу $S_{\mathcal{BG}}$ статистики Гиббса. Действительно, при $\kappa \to 0$ имеем: $p^{\pm|\kappa|} = \mathrm{e}^{\pm|\kappa| \ln p} \to 1 \pm |\kappa| \ln p$, и энтропия $S_{\kappa,\varsigma}$ сводится к

$$S_{\{\kappa \to 0, \varsigma = 0\}} = \lim_{\kappa \to 0} \left\{ -\int p(\boldsymbol{r}) \frac{p(\boldsymbol{r})^{\kappa} - p(\boldsymbol{r})^{-\kappa}}{2\kappa} d\Gamma \right\} = S_{\mathcal{BG}} := -\int p(\boldsymbol{r}) p(\boldsymbol{r}) d\Gamma.$$

Функция $\ln_{\{\kappa,\varsigma\}}(x)$. Приведем теперь некоторые наиболее важные свойства деформированного логарифма $\ln_{\{\kappa,\varsigma\}}(x)$, которые широко используются в различных приложениях (см., например, Scarfone, 2002; Kaniadakis и др. 2005):

$$\ln_{0,0}(x) = \ln(x), \quad \ln_{\kappa,\varsigma}(1) = 0,, \quad \ln_{0,\varsigma}(x) = x^{\varsigma} \ln(x). \tag{6}$$

$$\ln_{\kappa,\varsigma}(x)=\ln_{-\kappa,\varsigma}(x),\quad \ln_{\kappa,\varsigma}(x)=-\ln_{\kappa,-\varsigma}\left(1/x\right),\quad (\kappa,\varsigma)\in\mathcal{R}, \tag{7}$$

$$a\ln_{\kappa,\varsigma}(x)=\ln_{\kappa/a,\varsigma/a}(x^{a}), \tag{8}$$

$$\ln_{\kappa,\varsigma}(xy)=u_{\kappa,\varsigma}(x)\ln_{\kappa,\varsigma}(y)+u_{\kappa,\varsigma}(y)\ln_{\kappa,\varsigma}(x)=$$

$$=x^{\varsigma+\kappa}\ln_{\kappa,\varsigma}(y)+y^{\varsigma+\kappa}\ln_{\kappa,\varsigma}(x)-2\kappa\ln_{\kappa,\varsigma}(x)\ln_{\kappa,\varsigma}(y). \tag{9}$$

Имеют место неравенства, характеризующие вогнутость функции $\ln_{\kappa,\varsigma}(x)$:

$$\frac{d\ln_{\kappa,\varsigma}(x)}{dx}>0,\ -|\kappa|\le\varsigma\le|\kappa|;\quad \frac{d^2\ln_{\kappa,\varsigma}(x)}{dx^2}<0,\ -|\kappa|\le\varsigma\le\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-|\kappa|\right|, \tag{10}$$

а также асимптотические соотношения, описывающие поведение деформированного логарифма по степенному закону:

$$\ln_{\kappa,\varsigma}(x)\underset{x\to0^{+}}{\sim}\frac{1}{2|\kappa|}x^{-|\kappa|+\varsigma},\quad \ln_{\kappa,\varsigma}(x)\underset{x\to+\infty}{\sim}\frac{1}{2|\kappa|}x^{|\kappa|+\varsigma}. \tag{11}$$

Для $\ln_{\{\kappa,\varsigma\}}(x)$ справедливы интегральные выражения:

$$\int_0^1\ln_{\kappa,\varsigma}(x)^{\pm1}dx=\mp\frac{1}{(1\pm\varsigma)^2-\kappa^2},\ 1\pm\varsigma>|\kappa|. \tag{12}$$

Если использовать преобразование

$$u_{\kappa,\varsigma}(x):=\frac{1}{2}\left(x^{\varsigma+\kappa}+x^{\varsigma-\kappa}\right)=-(1+\varsigma)\ln_{\kappa,\varsigma}(x)+\lambda\ln_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{x}{\alpha}\right), \tag{13}$$

где

$$\lambda:=\frac{(1+\varsigma-\kappa)^{(\varsigma+\kappa)/2\kappa}}{(1+\varsigma+\kappa)^{(\varsigma-\kappa)/2\kappa}},\quad \alpha:=\left(\frac{1+\varsigma-\kappa}{1+\varsigma+\kappa}\right)^{1/2\kappa}, \tag{14}$$

– симметричные относительно перехода $\kappa\leftrightarrow-\kappa$ параметры, для которых справедливы формулы $(1+\varsigma\pm\kappa)=\lambda\alpha^{-\varsigma\mp\kappa}$ и $\ln_{\{\kappa,\varsigma\}}\left(\frac{1}{\alpha}\right)=\frac{1}{\lambda}$, то можно соотношение (9) переписать в следующем виде:

$$\ln_{\kappa,\varsigma}(xy) = -2(1+\varsigma)\ln_{\kappa,\varsigma}(y)\ln_{\kappa,\varsigma}(x) +$$

$$+\lambda \ln_{\kappa,\varsigma}(x)\ln_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{y}{\alpha}\right) + \lambda \ln_{\kappa,\varsigma}(y)\ln_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{x}{\alpha}\right). \qquad (9^*)$$

Наконец, имеет место уравнение

$$\frac{d}{dx}\left[x\ln_{\kappa,\varsigma}(x)\right] = \lambda \ln_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{x}{\alpha}\right). \qquad (15)$$

Функция $u_{\kappa,\varsigma}(x)$**.** В соотношении (9) фигурирует важная в статистике (ШТМ) сопряженная с логарифмом (4) функция (см. Scarfone, 2006; Scarfone, Wada, 2014)

$$u_{\kappa,\varsigma}(x) := x^{\varsigma}\frac{x^{\kappa}+x^{-\kappa}}{2} = x^{\varsigma}\cosh(\kappa\ln(x)), \quad (\kappa,\varsigma)\in\mathcal{R}, \qquad (16)$$

которая, как легко проверить, обладает следующими свойствами:

$$u_{\kappa,\varsigma}(x) = u_{-\kappa,\varsigma}(x), \quad u_{\kappa,\varsigma}(x) = u_{\kappa,-\varsigma}(1/x), \quad u_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{1}{\alpha}\right) = \frac{1+\varsigma}{\lambda}. \qquad (17)$$

С учетом (13) и (14) легко получить следующие соотношения:

$$u_{\kappa,\varsigma}(x) = x^{\varsigma+\kappa} - \kappa\ln_{\kappa,\varsigma}(x) = -(1+\varsigma)\ln_{\kappa,\varsigma}(x) + \lambda\ln_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{x}{\alpha}\right), \qquad (18)$$

$$u_{\kappa,\varsigma}(xy) = u_{\kappa,\varsigma}(x)u_{\kappa,\varsigma}(y) + \kappa^2\ln_{\kappa,\varsigma}(x)\ln_{\kappa,\varsigma}(y), \qquad (19)$$

$$\frac{d}{dx}\left[xu_{\kappa,\varsigma}(x)\right] = (1+\varsigma)u_{\kappa,\varsigma}(x) + \kappa^2\ln_{\kappa,\varsigma}(x) = \lambda u_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{x}{\alpha}\right). \qquad (20)$$

Неаддитивность (κ,ς)**-энтропии для независимых систем**. Покажем теперь, что подобно энтропии Тсаллиса (см., например, Колесниченко, 2019), энтропия Шарма–Танеджа–Миттал подчиняется псевдоаддитивному закону для двух статистически независимых систем.

Рассмотрим для этого совокупную физическую (κ,ς)-систему, состоящую из двух подсистем, состояние которой описывается совместным

мультипликативным распределением $p^{(1,2)}(\boldsymbol{r}) := p^{(1)}(\boldsymbol{r}) \cdot p^{(2)}(\boldsymbol{r})$, для которого выполняются условия нормировки

$$\int\int p^{(1,2)}(\boldsymbol{r}) d\Gamma_1 d\Gamma_2 = \int p^{(1)}(\boldsymbol{r}) d\Gamma_1 = \int p^{(2)}(\boldsymbol{r}) d\Gamma_2 = 1$$

(здесь индексы (1) и (2) относятся к двум статистически независимым (κ,ς)-системам).

После подстановки распределения $p^{(1,2)}(\boldsymbol{r})$ в формулу (3) получим (при учете (9)) следующее свойство псевдоаддитивности совокупной энтропии в статистике (ШТМ) для двух независимых (κ,ς)-подсистем:

$$S_{\kappa,\varsigma}(1,2) := -\int\int p^{(1)}(\boldsymbol{r}) p^{(2)}(\boldsymbol{r}) \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p^{(1)}(\boldsymbol{r}) p^{(2)}(\boldsymbol{r})\right] d\Gamma_1 d\Gamma_2 =$$

$$= \int\int p^{(1)}(\boldsymbol{r}) p^{(2)}(\boldsymbol{r}) \left\{ \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p^{(1)}(\boldsymbol{r})\right] u_{\kappa,\varsigma}\left[p^{(2)}(\boldsymbol{r})\right] + \right.$$

$$\left. + \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p^{(2)}(\boldsymbol{r})\right] u_{\kappa,\varsigma}\left[p^{(1)}(\boldsymbol{r})\right] \right\} d\Gamma_1 d\Gamma_2 = S_{\kappa,\varsigma}(1)\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(2) + S_{\kappa,\varsigma}(2)\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1). \quad (21)$$

В равенстве (21) фигурирует чрезвычайно важная в (κ,ς)-статистике функция:

$$\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(p) := \int p(\boldsymbol{r}) u_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right] d\Gamma = -(1+\varsigma)\left\langle \ln_{\kappa,\varsigma}(p) \right\rangle + \lambda \left\langle \ln_{\kappa,\varsigma}\left(p/\alpha\right) \right\rangle. \quad (22)$$

В случае если $(\kappa,\varsigma) \to 0$, то $u_{\{0\}}(p) = 1$ и $\mathcal{I}_{\{0,0\}}\left(p\right) = \int p(\boldsymbol{r}) d\Gamma = 1$, так что из условия псевдоаддитивности (21) следует аддитивное правило для энтропии S_{BG} Больцмана–Гиббса.

Отметим, что с учетом соотношения (19) и в случае мультипликативности распределения $p^{(1,2)}$ функцию $\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1,2)$ можно представить в виде:

$$\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1,2) = \mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1)\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(2) + \kappa^2 S_{\kappa,\varsigma}(1) S_{\kappa,\varsigma}(2). \quad (23)$$

2. Экстремум (κ,ς)–энтропии и равновесные состояния

Рассмотрим сначала некоторые свойства так называемой «деформированной» экспоненты Каниадакиса.

(κ,ς)-экспонента. Поскольку (κ,ς)-логарифм является строго возрастающей функцией при $\kappa,\varsigma\in\mathcal{R}$, то он имеет обратную функцию, которая называется обратной экспонентой Каниадакиса $\exp_{\kappa,\varsigma}(x)$. Некоторые свойства этой экспоненты вытекающие из соответствующих аналитических свойств деформированного логарифма (см. Kaniadakis и др., 2004), имеют вид:

$$\ln_{\kappa,\varsigma}\left[\exp_{\kappa,\varsigma}(x)\right]=\exp_{\kappa,\varsigma}\left[\ln_{\kappa,\varsigma}(x)\right]=x, \tag{24}$$

$$\exp_{\kappa,\varsigma}(-1/2|\kappa|)=0^{+},\ \textit{когда}\ \varsigma=|\kappa|;\ \exp_{\kappa,\varsigma}(+1/2|\kappa|)=+\infty,\ \textit{когда}\ \varsigma=-|\kappa|, \tag{25}$$

$$\exp_{\kappa,\varsigma}(0)=1;\quad \exp_{\kappa,\varsigma}(-\infty)=0^{+},\quad \varsigma<|\kappa|;\quad \exp_{\kappa,\varsigma}(+\infty)=+\infty,\quad \varsigma>-|\kappa|, \tag{26}$$

$$\exp_{\kappa,\varsigma}(x)\exp_{\kappa,-\varsigma}(-x)=1;\quad \left[\exp_{\kappa,\varsigma}(x)\right]^{a}=\exp_{\kappa/a,\varsigma/a}(ax). \tag{27}$$

Кроме того, функция $\exp_{\kappa,\varsigma}(x)$ обладает свойством выпуклости:

$$\frac{d}{dx}\exp_{\kappa,\varsigma}(x)>0,\quad \frac{d^2}{dx^2}\exp_{\kappa,\varsigma}(x)>0,\quad x\in\mathbb{R},\quad \kappa^2<1. \tag{28}$$

Несомненно, одним из наиболее интересных свойств деформированной экспоненты $\exp_{\kappa,\varsigma}(x)$ является ее представление степенной асимптотикой на бесконечности:

$$\exp_{\kappa,\varsigma}(x)\underset{x\to\pm\infty}{\sim}\left|2\kappa x\right|^{1/(\varsigma\pm|\kappa|)}. \tag{29}$$

Наконец, для (κ,ς)-экспоненты справедливы следующие интегральные соотношения (см., например, Kaniadakis. 2005):

$$\int_{-\infty}^{0}\exp_{\kappa,\varsigma}(x)\,dx=\frac{1}{(1+\varsigma)^2-\kappa^2},\quad \int_{-\infty}^{0}\frac{dx}{\exp_{\{\kappa,\varsigma\}}(-x)}=\frac{1}{(1-\varsigma)^2-\kappa^2}. \tag{30}$$

Микроканоноческое равновесное распределение. Равновесные состояния сложных систем характеризуются распределениями, которые не меняются с течением времени. Рассмотрим (κ,ς)-систему, находящуюся

в термостате. Модифицированное распределение Гиббса в статистике (ШТМ) может быть получено, как и в классическом случае, из экстремума (κ,ς)-энтропии (3) при выполнении следующих дополнительных условий: заданности средней энергии системы

$$\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} := \int \varepsilon(\boldsymbol{r})\, p(\boldsymbol{r}) d\Gamma = const \tag{31}$$

и сохранения вероятностной нормировки (1) распределения $p(\boldsymbol{r})$. Здесь $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ – внутренняя энергия $\boldsymbol{r}$-го состояния системы, которая определяется математической моделью изучаемых физических процессов.

Используя стандартную в статистической механике и теории информации методологию Джейнса (Jaynes, 1963) получения равновесного распределения из вариационного принципа, введем функционал

$$\mathcal{L}(p) := -\int p(\boldsymbol{r}) \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right] d\Gamma + \beta\mu \int p(\boldsymbol{r}) d\Gamma - \beta \int \varepsilon(\boldsymbol{r}) p(\boldsymbol{r}) d\Gamma \tag{32}$$

и найдём его безусловный экстремум. Здесь β и $\beta\mu$ суть множители Лагранжа; μ – «химический потенциал». В соответствии с теоремой Лагранжа вероятностное распределение $p^{ext}(\boldsymbol{r})$, «экстремизирующее» (κ,ς)-энтропию $S_{\kappa,\varsigma}(p)$ при указанных ограничениях, определяется из условия:

$$\frac{\delta\mathcal{L}(p)}{\delta p} = -(1+\varsigma)\ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right] - u_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right] - \beta\left[\varepsilon(\boldsymbol{r}) - \mu\right] = 0. \tag{33}$$

Отсюда, с учетом (14) и (19), следует (Wada, Scarfone, 2010):

$$\lambda \ln_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{p(\boldsymbol{r})}{\alpha}\right) = -\beta\left[\varepsilon(\boldsymbol{r}) - \mu\right], \quad \left(\text{где } \lambda = \frac{(1+\varsigma-\kappa)^{\frac{\varsigma+\kappa}{2\kappa}}}{(1+\varsigma+\kappa)^{\frac{\varsigma-\kappa}{2\kappa}}}, \quad \alpha = \left(\frac{1+\varsigma-\kappa}{1+\varsigma+\kappa}\right)^{\frac{1}{2\kappa}}\right),$$

или (34)

$$p^{ext}(\boldsymbol{r},\beta) = \alpha \exp_{\kappa,\varsigma}\left\{-\frac{\beta}{\lambda}\left[\varepsilon(\boldsymbol{r}) - \mu\right]\right\}, \quad \left(\text{где } \alpha = \exp_{\kappa,-\varsigma}(-1/\lambda)\right) \tag{35}$$

– нормированное (κ,ς)-распределение в состоянии статистического равновесия системы (микроканоническое распределение Больцмана–Гиббса в статистике (ШТМ)). В пределе $\kappa,\varsigma \to 0$ (κ,ς)-распределения (35) сводzтся к

микроканоническому распределению Гиббса классической статистики (Зубарев, 1971).

Заметим, что хвост распределения (35) описывается степенной асимптотикой (это так называемый закон Парето), определяемой в силу (29) выражением

$$p^{ext}(\boldsymbol{r}) \underset{z\to\pm\infty}{\sim} \left|2\kappa\frac{z}{\lambda}\right|^{1/(\varsigma\pm|\kappa|)}, \quad (\text{где} \quad z = z(\boldsymbol{r}) := \beta\left[\varepsilon(\boldsymbol{r})-\mu\right], \tag{36}$$

которое существенно отличается от экспоненциальной асимптотики, характеризующей стандартное распределение Больцмана–Гиббса.

Найдем теперь вторую вариацию функционала (44). В результате получим

$$\delta^2\mathcal{L}(p) = -\frac{1}{p(\boldsymbol{r})}\left\{(\varsigma+\varsigma^2+\kappa^2)\ln_{\{\kappa,\varsigma\}}\left[p(\boldsymbol{r})\right] + 2\varsigma u_{\{\kappa,\varsigma\}}\left[p(\boldsymbol{r})\right]\right\} < 0.$$

Отсюда следует, что экстремум соответствует максимуму функционала $\mathcal{L}$, т.е. распределение (35) максимизирует (κ,ς)- энтропию.

3. Уравнения статистической термодинамики для неэкстенсивных (κ,ς) -систем

Приступим теперь к одной из основных целей данной работы – конструированию равновесной термодинамики, основанной на неэкстенсивной статистике (ШТМ). Используя распределение (35), получим следующее выражение:

$$(1+\varsigma)\ln_{\kappa,\varsigma}\left[p^{est}(\boldsymbol{r})\right] + u_{\kappa,\varsigma}\left[p^{est}(\boldsymbol{r})\right] + \beta\left[\varepsilon(\boldsymbol{r})-\mu\right] = 0. \tag{37}$$

Усредняя (37) с помощью равновесного распределения $p^{est}(\boldsymbol{r})$ и учитывая определения (22) и (31), в результате получим экстремальное значение (κ,ς)-энтропии

$$S^{ext}_{\kappa,\varsigma} = \frac{1}{1+\varsigma}\left[\mathcal{I}^{ext}_{\kappa,\varsigma} + \beta\left(\mathcal{E}^{ext}_{\kappa,\varsigma} - \mu\right)\right]. \tag{38}$$

Далее индекс "est" у термодинамических параметров будем опускать.

Дифференцируя выражение (3) по внутренней энергии $\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}$ и учитываяя (15) и (35), в результате получаем

$$\frac{dS_{\kappa,\varsigma}}{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}} = -\int \frac{d}{dp(\boldsymbol{r})}\left\{p(\boldsymbol{r})\ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right]\right\}\frac{dp(\boldsymbol{r})}{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}d\Gamma =$$

$$= -\lambda\int \ln_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{p(\boldsymbol{r})}{\alpha}\right)\frac{dp(\boldsymbol{r})}{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}d\Gamma = \int \beta\left[\varepsilon(\boldsymbol{r})-\mu\right]\frac{dp(\boldsymbol{r})}{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}d\Gamma\,. \tag{39}$$

С учетом (1) и (31) это равенство сводится к обобщению определения обратной температуры:

$$dS_{\kappa,\varsigma} / d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} = \beta := T^{-1}. \tag{40}$$

Первый вариант определения статистической суммы. Если определить (κ,ς)-аналог классической статистической суммы Z соотношением (Wada, Scarfone, 2010)

$$Z_{\kappa,\varsigma} := \exp_{\kappa,\varsigma}\left[\frac{1}{1+\varsigma}\left(\mathcal{I}^{ext}_{\kappa,\varsigma} - \beta(\varsigma\mathcal{E}^{ext}_{\kappa,\varsigma}+\mu)\right)\right], \tag{41}$$

то его комбинирование с выражением (38) для (κ,ς)-энтропии приводит к основному термодинамическому тождеству

$$S_{\kappa,\varsigma} = \ln_{\kappa,\varsigma}(Z_{\kappa,\varsigma}) + \beta\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} = \beta\left(\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - \mathcal{F}_{\kappa,\varsigma}\right), \tag{42}$$

где свободная энергия определена равенством

$$\beta\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma} := -\ln_{\kappa,\varsigma}(Z_{\kappa,\varsigma}). \tag{43}$$

Продифференцируем теперь логарифм $\ln_{\kappa,\varsigma}(Z_{\kappa,\varsigma})$ по параметру β. Используя определение (27) функции $\mathcal{I}_{\{\kappa\}}$, а также соотношения (9), (21) и (49), в результате будем иметь

$$\frac{d}{d\beta}\ln_{\kappa,\varsigma}(Z_{\kappa,\varsigma}) = \frac{1}{1+\varsigma}\left(\frac{d\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}}{d\beta} - \frac{d(\beta\mu)}{d\beta} - \varsigma\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - \varsigma\beta\frac{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}{d\beta}\right) =$$

$$= \frac{1}{1+\varsigma}\left(\frac{d\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}}{d\beta} - \frac{d(\beta\mu)}{d\beta} - \varsigma\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - \varsigma\beta\frac{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}{d\beta}\right), \tag{44}$$

где производная $d\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma} / d\beta$, полученная с учетом формулы (20), равна:

$$\frac{d\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}}{d\beta} = \int \frac{d}{dp}\left[p u_{\kappa,\varsigma}(p) \right] \frac{dp}{d\beta} d\Gamma = \lambda \int u_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{p(z)}{\alpha} \right) \frac{dp(z)}{d\beta} d\Gamma . \qquad (45)$$

Далее мы воспользуемся выражением

$$\lambda u_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{p(z)}{\alpha} \right) dp(z) = \varsigma z dp(z) - p(z) dz , \quad \text{где } z = z(\boldsymbol{r}) := \beta\left[\varepsilon(\boldsymbol{r}) - \mu \right], \qquad (46)$$

которое следует из следующих соотношений:

- соотношения (20), записанного в виде:

$$\lambda u_{\kappa,\varsigma}\left(\frac{p(z)}{\alpha} \right) dp(z) = \left\{ (1+\varsigma) u_{\kappa,\varsigma}\left[p(z) \right] + \kappa^2 \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(z) \right] \right\} dp(z);$$

- дифференциала от соотношения (37), преобразованного к виду:

$$\left[(1+\varsigma) u_{\{\kappa,\varsigma\}}\left[p(z) \right] + \kappa^2 \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(z) \right] \right] dp =$$

$$= -\left[(1+\varsigma)\varsigma \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(z) \right] + \varsigma u_{\{\kappa,\varsigma\}}\left[p(z) \right] \right] dp(z) - p(z) dz ;$$

- соотношения (37), записанного следующим образом:

$$\varsigma z = -(1+\varsigma)\varsigma \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p(z) \right] - \varsigma u_{\{\kappa,\varsigma\}}\left[p(z) \right].$$

С учетом формул (45) и (46) будем иметь

$$\frac{d\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}}{d\beta} = \varsigma \int z \frac{dp(z)}{d\beta} d\Gamma - \int p(z) \frac{dz}{d\beta} d\Gamma = \varsigma \frac{d}{d\beta}\left[\int z\, p(z) d\Gamma \right] - (1+\varsigma) \int p(z) \frac{dz}{d\beta} d\Gamma =$$

$$= \varsigma \frac{d}{d\beta}\left[\beta\left(\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - \mu \right) \right] - (1+\varsigma)\left(\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - \frac{d(\beta\mu)}{d\beta} \right) = \varsigma\beta \frac{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}{d\beta} - \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} + \frac{d(\beta\mu)}{d\beta} . \qquad (47)$$

Объединяя теперь (44) и (47), получим важное термодинамическое соотношение

$$\frac{d}{d\beta} \ln_{\kappa,\varsigma}(\mathrm{Z}_{\kappa,\varsigma}) = -\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} . \qquad (48)$$

Комбинирование выражений (43) и (48) приводит к связи

$$\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} = \frac{d}{d\beta}\left(\beta\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma}\right) \tag{49}$$

между свободной и внутренней энергией. Кроме этого, из (40) и (42), путем дифференцирования $\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma}$ по температуре можно получить $\{\kappa,\varsigma\}$-энтропию

$$S_{\kappa,\varsigma} = -\frac{d\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma}}{d(1/\beta)}, \tag{50}$$

сопряженную температуре $T = 1/\beta$, которая определяется равенством (40).

Таким образом, выведенные выше на основе двухпараметрической энтропии (ШТМ) уравнения статистической (κ,ς)-термодинамики принимают следующую форму:

$$\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma} = -\frac{1}{\beta}\ln_{\kappa,\varsigma}(Z_{\kappa,\varsigma}),\ \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} = \frac{d(\beta\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma})}{d\beta}\ ,\ \ dS_{\kappa,\varsigma} = \beta\, d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma},$$

$$S_{\kappa,\varsigma} = \beta\left(\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - \mathcal{F}_{\kappa,\varsigma}\right),\ \ \mathcal{S}_{\kappa,\varsigma} = -\frac{d(\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma})}{d(1/\beta)},\ \ C_{\kappa,\varsigma} = -\beta^2\frac{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}{d\beta}. \tag{51}$$

Усреднение микроскопических случайных величин. С помощью деформированного канонического распределения Гиббса (35) можно также вычислить среднее значение любой физической величины $\mathcal{T}_j(\boldsymbol{r})$, характеризующей микросостояние системы. Дифференцируя для этого логарифм статистического интеграла $Z_{\{\kappa,\varsigma\}}$ по микроскопической энергии $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ и считая при этом, что $\beta \simeq const$ в течение длительного периода времени, в результате получим:

$$\frac{d}{d\varepsilon}\ln_{\kappa,\varsigma}(\mathrm{Z}_{\kappa,\varsigma}) = \frac{1}{1+\varsigma}\left(\frac{d\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}}{d\varepsilon} - \beta\frac{d\mu}{d\varepsilon} - \varsigma\beta\frac{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}{d\varepsilon}\right). \tag{52}$$

Повторим теперь процедуру вывода соотношения (47) и для расчета производной от функции $\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}$ по $\varepsilon(\boldsymbol{r})$; тогда будем иметь:

$$\frac{d\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}}{d\varepsilon(\boldsymbol{r})} = \varsigma\beta\frac{d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}{d\varepsilon(\boldsymbol{r})} + \beta\frac{d\mu}{d\varepsilon(\boldsymbol{r})} - (1+\varsigma)\beta\, p(\boldsymbol{r}). \tag{53}$$

Комбинирование выражений (52) и (53) приводит к выражению

$$p(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{\beta}\frac{d}{d\varepsilon(\boldsymbol{r})}\ln_{\kappa,\varsigma}(\mathrm{Z}_{\kappa,\varsigma}), \tag{54}$$

позволяющему найти усредненные величины $\langle \mathcal{T}_i \rangle$

$$\langle \mathcal{T}_i \rangle \equiv \int p(\boldsymbol{r})\mathcal{T}_i(\boldsymbol{r})d\Gamma = -\frac{1}{\beta}\int \mathcal{T}_i(\boldsymbol{r})\frac{d\ln_{\kappa,\varsigma}(\mathrm{Z}_{\kappa,\varsigma})}{d\varepsilon(\boldsymbol{r})}d\Gamma = \int \mathcal{T}_i(\boldsymbol{r})\frac{d\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma}}{d\varepsilon(\boldsymbol{r})}d\Gamma. \tag{55}$$

Второй вариант определения статистической суммы. Некоторые авторы (см., например, Tsallis и др., 1998) предпочитают вводить другое определение статистической суммы, которое позволяет сконструировать с помощью микроканонического распределения (35) все термодинамические соотношения в почти классическом виде. Переопределенная статистическая сумма, заданная выражением

$$\ln_{\kappa,\varsigma}(W_{\kappa,\varsigma}) := \frac{1}{1+\varsigma}\left[\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma} + \beta\left(\mathcal{E}_{\{\kappa,\varsigma} - \mu\right)\right], \tag{56}$$

связана с $Z_{\{\kappa,\varsigma\}}$ соотношением

$$\ln_{\kappa,\varsigma}(W_{\kappa,\varsigma}) = \ln_{\kappa,\varsigma}(Z_{\kappa,\varsigma}) + \beta\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}. \tag{57}$$

С физической точки зрения разница статистических значений сумм $Z_{\kappa,\varsigma}$ и $W_{\kappa,\varsigma}$ состоит в том, что первая определяет свободную энергию $\mathcal{F}_{\kappa,\varsigma}$, а вторая – энтропию $S_{\kappa,\varsigma}$ (как это принято в класической статистической термодинамике (см. Зубарев, 1971)), величины которых являются функциями температуры T и внутренней энергии $\mathcal{E}_{\{\kappa,\varsigma}$ соответственно.

Действительно, комбинирование определения (56) с выражением (38) для (κ,ς)-энтропии приводит к выражению

$$S_{\kappa,\varsigma} = \ln_{\kappa,\varsigma}(W_{\kappa,\varsigma}). \tag{58}$$

Определим теперь деформированную свободную энергию $F'_{\kappa,\varsigma}$ выражением

$$F'_{\kappa,\varsigma} := \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - \frac{1}{\beta}\ln_{\kappa,\varsigma}(W_{\kappa,\varsigma}). \tag{59}$$

которое при $\kappa \to 0$ совпадает со свободной энергией в классической статистике $F := \mathcal{E} - \frac{1}{\beta}\ln W$. Тогда из (58) и (59) следует основное термодинамическое тождество

$$S_{\kappa,\varsigma} = \beta\left(\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - F'_{\kappa,\varsigma}\right), \tag{60}$$

с использованием которого могут быть получены и другие термодинамические соотношения.

4. Термическое равновесие двух неэкстенсивных систем в статистике Шарма–Танеджа–Миттал

Нахождение условий термического равновесия двух независимых систем требует привлечения законов композиции для энтропий и энергий. В статистической термодинамике Больцмана–Гиббса эти законы имеют свойство аддитивности. Для неэкстенсивных (κ,ς)-систем важным является свойство псевдоаддитивности (21) энтропии (ШТМ), которое в данной работе не распространяется на энергии. Это приводит, как будет показано ниже, к равенству так называемых физических температур для двух независимых (κ,ς)-систем, при сохранении усреднения физических величин нормированным распределением.

Физическая температура. Начиная с работы (Tsallis и др.,1998), имеет место дискуссия по методу усреднения микроскопической энергии любой неэкстенсивной системы, состоящей из двух статистически независимых равновесных подсистем и, соответственно, по закону композиции усреднённых энергий. В основном предполагается аддитивный закон для микроскопических энергий

$$\varepsilon_{ij}^{(1,2)} := \varepsilon_i^{(1)} + \varepsilon_j^{(2)}, \tag{61}$$

которым мы здесь воспользуемся. Тогда усреднение выражения (61) статистически равновесным (κ,ς)-распределением (35) приводит к следующему закону аддитивности усреднённых энергий:

$$\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}(1,2)=\mathcal{E}^{(1)}_{\kappa,\varsigma}+\mathcal{E}^{(2)}_{\kappa,\varsigma}, \tag{62}$$

где

$$\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}(1,2):=\boldsymbol{E}\left[\varepsilon^{(1,2)}(\boldsymbol{r})\right]=\int\varepsilon^{(1,2)}(\boldsymbol{r})p^{(1,2)}(\boldsymbol{r})d\Gamma_1 d\Gamma_2=$$

$$=\int p^{(2)}(\boldsymbol{r})d\Gamma_2\int\varepsilon^{(1)}(\boldsymbol{r})p^{(1)}(\boldsymbol{r})d\Gamma_1+\int p^{(1)}(\boldsymbol{r})d\Gamma_1\int\varepsilon^{(2)}(\boldsymbol{r})p^{(2)}(\boldsymbol{r})d\Gamma_2,$$

$$\mathcal{E}^{(1)}_{\kappa,\varsigma}:=\boldsymbol{E}\left[\varepsilon^{(1)}(\boldsymbol{r})\right]=\int\varepsilon^{(1)}(\boldsymbol{r})p^{(1)}(\boldsymbol{r})d\Gamma,\ \ \mathcal{E}^{(2)}_{\kappa,\varsigma}:=\boldsymbol{E}\left[\varepsilon^{(2)}(\boldsymbol{r})\right]=\int\varepsilon^{(2)}(\boldsymbol{r})p^{(2)}(\boldsymbol{r})d\Gamma.$$

Варьирование условия аддитивности усреднённой энергии $\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}(1,2)$ равновесной совокупной системы и условия квазиаддитивности (21) ее энтропии $S_{\kappa,\varsigma}(1,2)=S_{\kappa,\varsigma}(1)\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(2)+S_{\kappa,\varsigma}(2)\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1)$ приводит, с учетом постоянства энергии $\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}(1,2)=const$ и энтропии $S_{\kappa,\varsigma}(1,2)=const$, к равенствам:

$$\delta\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}\equiv\delta\mathcal{E}^{(1)}_{\kappa,\varsigma}=-\delta\mathcal{E}^{(2)}_{\kappa,\varsigma}, \tag{63}$$

$$S^{(1)}_{\kappa,\varsigma}\,\delta\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(2)+\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(2)\,\delta S^{(1)}_{\kappa,\varsigma}+S^{(2)}_{\kappa,\varsigma}\,\delta\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1)+\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1)\,\delta S^{(2)}_{\kappa,\varsigma}=0, \tag{64}$$

откуда следует:

$$\frac{\partial S^{(1)}_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}^{(1)}_{\kappa,\varsigma}}\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(2)+\frac{\partial\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1)}{\partial\mathcal{E}^{(1)}_{\kappa,\varsigma}}S^{(2)}_{\kappa,\varsigma}=S^{(1)}_{\kappa,\varsigma}\frac{\partial\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(2)}{\partial\mathcal{E}^{(2)}_{\kappa,\varsigma}}+\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}(1)\frac{\partial S^{(2)}_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}^{(2)}_{\kappa,\varsigma}}. \tag{65}$$

Используя (21), (23) и (38), легко получить соотношение

$$\frac{\partial\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}=\frac{\kappa^2 S_{\kappa,\varsigma}-\varsigma\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\cdot\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}, \tag{66}$$

с учетом которого равенство (65) принимает вид:

$$\left(\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}\right)_{(1,2)}\times\left\{\left(\frac{1}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}\right)_{(1)}\delta\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}-\right.$$

$$\left.-\left(\frac{1}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}\right)_{(2)}\delta\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}\right\}=0. \qquad (67)$$

Из (67) следует условие

$$\left.\frac{1}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}\right|_{(1)}=\left.\frac{1}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}\right|_{(2)}, \qquad (68)$$

(здесь $\delta S^{(r)}_{\kappa,\varsigma}/\delta\mathcal{E}^{(r)}_{\kappa,\varsigma}=\beta^{(r)}$, $(r=1,2)$), которое удовлетворяется тождественно только при равенстве так называемых физических температур двух независимых (κ,ς)-подсистем при их тепловом контакте. Физическая температура T_{ph} определяется выражением

$$\frac{1}{T_{ph}}:=\frac{1}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}}{\partial\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}=\frac{1}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{1}{T}, \qquad (69)$$

где $T=\beta^{-1}=\left(\delta S_{\kappa,\varsigma}/\delta\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}\right)^{-1}$.

Таким образом, отношение эквивалентности (68) является обобщением нулевого закона термодинамики на неэкстенсивные системы, описываемые статистикой (ШТМ). Оно показывает, что в отличие от классического случая физическая температура T_{ph} не является обратной величиной множителя Лагранжа, β^{-1}, но определяется выражением (69). В случае если $\kappa,\varsigma=0$, то $T_{ph}\equiv T$ и законы композиции всех выше приведенных микроскопических и средних и величин становятся аддитивными.

Физическое давление. Важно иметь в виду, что, по аналогии с физической температурой T_{ph}, можно ввести и физическое давление P_{qh}. Для этой цели необходимо рассмотреть две независимые находящиеся в со-

стоянии механического равновесия (κ,ς)-подсистемы, которые образуют совокупную замкнутую систему с постоянными значениями энтропии $S_{\{\kappa,\varsigma\}}(1,2)=const$, энергии $\mathcal{E}_{\{\kappa,\varsigma\}}(1,2)$ и объёма $V(1,2)=V^{(1)}+V^{(2)}=const$. В этом случае (κ,ς)-энтропия совокупной системы должна экстремизироваться с фиксацией общей энергии и объёма. В результате, после применения процедуры, аналогичной выводу T_{ph}, и при учете равенств $\delta V\equiv\delta V^{(1)}=-\delta V^{(2)}$, получим следующее отношение эквивалентности:

$$\frac{1}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}}{\partial V}\bigg|_{(1)}=\frac{1}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}}{\partial V}\bigg|_{(2)}=\frac{P_{ph}}{T_{ph}}, \tag{70}$$

которое удовлетворяется тождественно только при совпадении так называемых физических давлений $P_{ph}\big|_{(1)}=P_{ph}\big|_{(2)}$ в двух подсистемах при их механическом контакте. Здесь физическое давление P_{ph} определяется соотношением

$$P_{ph}:=\frac{T_{ph}}{\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma}-\varsigma S_{\kappa,\varsigma}}\frac{\delta S_{\kappa,\varsigma}}{\delta V}. \tag{71}$$

Таким образом, предполагая аддитивный закон энергетического и механического взаимодействия между двумя микроскопическими системами, управляемыми одной и той же неаддитивной (κ,ς)-энтропией, можно определить интенсивные макроскопические переменные (температуру и давление), отвечающие нулевому принципу термодинамики в контексте неинтенсивной статистической механики (ШТМ).

В связи с введением в рассмотрение физической температуры T_{ph} сделаем следующее общее замечание. В большинстве сложных 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 отдалённых друг от друга её частей, а именно потенциальная энергия. В классической статистической механике внутренняя энергия определяется, как

правило, суммой кинетических энергий всех молекул совокупной системы. В такой системе «тепловой баланс» достигается в основном за счёт локального теплообмена между близко расположенными (в частности, в пограничных областях) её составляющими, т.е. «тепло» связано с передачей кинетической энергии отдельными частицами системы. Поскольку физическая температура T_{ph} отвечает за «глобальный тепловой баланс» между различными частями системы, то её энергетический баланс будет сильно отличаться от локального теплового баланса. Локальный тепловой баланс описывается абсолютной температурой $T = 1/\beta$, измеряемой термометром. Однако подобное измерение физической температуры T_{ph} нереально, что связано с наличием функционала $(\mathcal{I}_{\kappa,\varsigma} - \varsigma S_{\kappa,\varsigma})$, зависящего, согласно (27), от параметров деформации κ и ς.

Важно подчеркнуть, что отношение эквивалентности (68), являющееся обобщением нулевого закона термодинамики на неэкстенсивные (κ,ς)-системы, противоречит основным принципам классической термодинамики, где абсолютная температура T (интенсивный параметр), а не функционал T_{ph} является термодинамическим параметром, характеризующим термодинамическое состояние системы при равновесии. Тот факт, что термодинамическое и механическое равновесие двух соприкасающихся систем достигается при физических температуре и давлении, неизбежно приводит при конструировании макроскопической термостатики к необходимости модификации полученных выше термодинамических соотношений (58)-(60), включая введение термодинамической энтропии Клаузиуса.

5. Макроскопическая термостатика

Следует отметить, что все выведенные выше термостатические соотношения, описывающие неэкстенсивную (κ,ς)-систему, основывались на микроскопических статистико-механических соображениях. Такой микроскопический подход крайне важен. Однако, современное состояние теории не будет полностью удовлетворительным до тех пор, пока не будет сформулирована макроскопическая термодинамика неэкстенсивных (κ,ς) -систем. Принимая во внимание тот факт, что соответствующее обобщение теории в решающей степени зависит от вида переопределенного энтро-

пийного функционала, крайне важно выяснить его воздействие на структуру макроскопических термодинамических соотношений.

В качестве основных предпосылок, взятых за исходный пункт построения модифицированной макроскопической термодинамики Шарма–Танеджа–Миттал мы, следуя работе (Abe, 2000; Abe, Okamoto, 2001; Abe и др., 2001), используем первый закон термодинамики и структуру преобразования Лежандра.

С учетом введенных выше физических температуры и давления определим макроскопическую энтропию Клаузиуса. Рассмотрим для этого структуру преобразования Лежандра. Уравнение (40) $\beta = dS_{\{\kappa,\varsigma\}}/d\mathcal{E}_{\{\kappa,\varsigma\}}$ указывает на то, что параметры β и $\mathcal{E}_{\{\kappa,\varsigma\}}$ образуют пару переменных Лежандра. Это приводит к следующему определению свободной энергии (см.(59)):

$$F'_{\kappa,\varsigma} = \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - TS_{\kappa,\varsigma} = \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - T\ln_{\kappa,\varsigma}(W_{\kappa,\varsigma}). \tag{72}$$

Это определение, однако, неудовлетворительно с точки зрения макроскопической деформированной термодинамики. Свободная энергия должна зависеть от физической температуры T_{ph}, а не от абсолютной температуры T.

Физическая свободная энергия Гельмгольца. По аналогии с подходом, предложенным в работах (Abe, 2000; Abe и др., 2001) при разработке макроскопической термостатики на основе энтропии Тсаллиса, введем физическую (κ,ς)-свободную энергию Гельмгольца соотношением

$$F_{\kappa,\varsigma} := \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - T_{ph}\ln(W_{\kappa,\varsigma}), \tag{73}$$

которое является фактически преобразованием Лежандра, связанным с другой энтропийной величиной, а именно с $\ln(W_{\kappa,\varsigma})$. Такое определение физической свободной энергии приводит к тому, что некоторые из термодинамических соотношений в том числе определяющих макроскопическую энтропию Клаузиуса, должны быть соответствующим образом модифицированы.

Используя соотношения (56), (58) и (69), можно убедиться, что переопределённая таким образом макроскопическая свободная энергия $F_{\kappa,\varsigma}$ является функцией T_{ph}. Дифференцируя $F_{\kappa,\varsigma}$, получим

$$dF_{\kappa,\varsigma} = d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} - \ln(W_{\kappa,\varsigma})dT_{ph} - T_{ph}w_{\kappa,\varsigma}dS_{\{\kappa,\varsigma\}}. \tag{74}$$

При написании (74) нами было использовано соотношение

$$d\ln(W_{\kappa,\varsigma}) = \frac{dS_{\{\kappa,\varsigma\}}}{\left[\exp_{\kappa,\varsigma}(S_{\kappa,\varsigma})\right]^{\varsigma+\kappa} + (\varsigma-\kappa)S_{\kappa,\varsigma}} \equiv w_{\kappa,\varsigma}\, dS_{\{\kappa,\varsigma\}}, \tag{75}$$

выведенное с учетом следующего выражения для дифференциала:

$$d\ln_{\{\kappa,\varsigma\}}(x) = \frac{1}{2\kappa}\left[(\varsigma+\kappa)x^{\varsigma+\kappa-1} - (\varsigma-\kappa)x^{\varsigma-\kappa-1}\right]dx =$$

$$= \left[u_{\kappa,\varsigma}(x) + \varsigma\ln_{\kappa,\varsigma}(x)\right]d\ln(x) = \left[x^{\varsigma+\kappa} + (\varsigma-\kappa)\ln_{\kappa,\varsigma}(x)\right]d\ln(x). \tag{76}$$

Заметим, что весовая функция $w_{\kappa,\varsigma}$ в частном случае статистики Каниадакиса (при $\varsigma = 0$) принимает следующий вид (см. Колесниченко, 2020):

$$w_{\kappa} = 1/\left\{\left[\exp_{\kappa}(S_{\kappa})\right]^{\kappa} - \kappa S_{\kappa}\right\} = 1/\sqrt{1+(\kappa S_{\kappa})^2}, \tag{77}$$

а для статистики Тсаллиса, когда $\varsigma = \pm|\kappa| = (q-1)/2$, параметр $w_{\kappa,\varsigma}$ принимает следующее выражение (ср. Abe, 1997, 2000)

$$w_{2-q} := 1/\left[\exp_{2-q}(S_{2-q})\right]^{q-1} = 1/\left[1+(q-1)S_{2-q}\right]. \tag{77*}$$

Энтропия Клаузиуса. Если теперь использовать первый закон термодинамики

$$d'Q_{\kappa,\varsigma} = d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} + P_{ph}dV, \tag{78}$$

где $Q_{\kappa,\varsigma}$ – количество теплоты, подводимое к (κ,ς)-системе (или отводимое от неё), то диференциальное равенство (74) можно переписать в виде

$$dF_{\kappa,\varsigma} = d'Q_{\kappa,\varsigma\}} - P_{ph}dV - \ln(W_{\kappa,\varsigma})dT_{ph} - T_{ph}w_{\kappa,\varsigma}dS_{\kappa,\varsigma}. \tag{79}$$

Отсюда следует возможность ввода макроскопической энтропии Клаузиуса $S^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma}$ для неаддитивных систем:

$$dS^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma} := \frac{d'Q_{\kappa,\varsigma}}{T_{ph}}, \quad S^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma} = \ln(W_{\kappa,\varsigma}), \tag{80}$$

где

$$dS^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma} = d\ln(W_{\kappa,\varsigma}) = w_{\kappa,\varsigma} dS_{\{\kappa,\varsigma\}} \equiv \frac{dS_{\{\kappa,\varsigma\}}}{\left[\exp_{\kappa,\varsigma}(S_{\kappa,\varsigma})\right]^{\varsigma+\kappa} + (\varsigma-\kappa)S_{\kappa,\varsigma}}.$$

Используя теперь соотношения (79) и (80) при конструировании макроскопической термостатики (κ,ς)-системы, покажем, как количество тепла и энтропия Клаузиуса влияют на термодинамические процессы. Введем с этой целью макроскопические характеристические функции: обобщённую энтальпию $H_{\kappa,\varsigma} = \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} + P_{ph}V$ и обобщенную свободную энергию Гиббса $G_{\kappa,\varsigma} = F_{\kappa,\varsigma} + P_{ph}V$. Напомним, что любые характеристические функции обладают следующим свойством: если известна характеристическая функция, выраженная через соответствующие (свои для каждой функции) параметры состояния, то с ее помощью можно вычислить все термодинамические величины. В этом нетрудно убедиться, например, из уравнений

$$d\mathcal{E}_{\kappa,\varsigma} = w_{\kappa,\varsigma} T_{ph} dS_{\kappa,\varsigma} - P_{ph}dV = T_{ph} dS^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma} - P_{ph}dV, \tag{81}$$

$$dH_{\kappa,\varsigma} = T_{ph} w_{\kappa,\varsigma} dS_{\kappa,\varsigma} + VdP_{ph} = T_{ph} dS^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma} + VdP_{ph}, \tag{82}$$

$$dF_{\kappa,\varsigma} = -P_{ph}dV - \ln W_{\kappa,\varsigma} dT_{ph} = -P_{ph}dV - S^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma} dT_{ph}, \tag{83}$$

$$dG_{\kappa,\varsigma} = -\ln W_{\kappa,\varsigma} dT_{ph} + P_{ph}dV = -S^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma} dT_{ph} + P_{ph}dV, \tag{84}$$

следствием котоых являются следующие частные производные:

$$\left(\frac{\partial \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}{\partial V}\right)_{S^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma}} = \left(\frac{\partial F_{\kappa,\varsigma}}{\partial V}\right)_{T_{ph}} = -P_{ph}, \quad \left(\frac{\partial \mathcal{E}_{\kappa,\varsigma}}{\partial S^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma}}\right)_{V} = \left(\frac{\partial H_{\kappa,\varsigma}}{\partial S^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma}}\right)_{P_{ph}} = T_{ph}, \tag{85}$$

$$\left(\frac{\partial H_{\text{к},\varsigma}}{\partial P_{ph}}\right)_{S^{\mathcal{K}}_{\text{к},\varsigma}} = \left(\frac{\partial G_{\text{к},\varsigma}}{\partial P_{ph}}\right)_{T_{ph}} = V, \quad \left(\frac{\partial F_{\text{к},\varsigma}}{\partial T_{ph}}\right)_{V} = \left(\frac{\partial G_{\text{к},\varsigma}}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} = -S^{\mathcal{K}}_{\text{к},\varsigma}. \quad (86)$$

Комбинируя (73) и (86), получим одно из важных уравнений Гиббса–Гельмгольца

a. $$F_{\text{к},\varsigma} = \mathcal{E}_{\text{к},\varsigma} + T_{ph}\left(\frac{\partial F_{\text{к},\varsigma}}{\partial T_{ph}}\right)_{V}. \quad (87)$$

Это уравнение позаволяет рассчитать свободную энергию Гельмгольца, если известна внутренняя энергия как функция физической температуры T_{ph}.

Используя определения характеристических функций $H_{\text{к},\varsigma}$ и $G_{\text{к},\varsigma}$, а также формулы (85)-(87), можно получить также два других уравнений Гиббса– Гельмгольца:

b. $$H_{\text{к},\varsigma} = \mathcal{E}_{\text{к},\varsigma} + P_{ph}\left(\frac{\partial H_{\text{к},\varsigma}}{\partial P_{ph}}\right)_{S^{\mathcal{K}}_{\text{к},\varsigma}}. \quad (88)$$

Это уравнение позволяет расчитать энтальпию, если известна внутренняя энергия как функция физического давления P_{ph}.

c. $$G_{\text{к},\varsigma} = F_{\text{к},\varsigma} + P_{ph}\left(\frac{\partial G_{\text{к},\varsigma}}{\partial P_{ph}}\right)_{T_{ph}}. \quad (89)$$

При помощи этого уравнения можно расчитать свободную энергию Гиббса из свободной энергии Гельмгольца, если последняя известна как функция физического давления P_{ph}.

Наконец, при использовании уравнения (87) можно получить выражение для изохорной теплоемкости

$$C_V = \left(\frac{\partial \mathcal{E}_{\text{к},\varsigma}}{\partial T_{ph}}\right)_{V} = T_{ph}\left(\frac{\partial^2 F_{\text{к},\varsigma}}{\partial T_{ph}^2}\right)_{V} \quad (90)$$

Таким образом, применяя обобщенную энтропию Клаузиуса к сложной неэкстенсивной системе, мы смогли найти основной набор неэкстенсивных термодинамических соотношений. Полученная стандартная форма соотношений (81)-(90) в макроскопической термостатике Шарма–Танеджа–Миттал позволяет заключить, что они остаются инвариантными относительно неаддитивной модификации их классических аналогов. Можно также убедиться в том, что в дополнение к структуре Лежандра и другие важные теоремы и термодинамические свойства остаются при этом (κ,ς)-инвариантными (см., например, Tsallis, 2009).

Кроме того, можно показать, что введенная формулой (80) макроскопическая энтропия Клаузиуса $S^{\mathcal{K}}_{\kappa,\varsigma}$ является аддитивной величиной, что находится в соответствии с аксиоматикой Каратеодори (см. Мюнстер, 2010), согласно которой экстенсивность количества тепла играет существенную роль при определении энтропии как переменной состояния (см. Abe, 2002).

6. Дивергенция Брэгмана. Обобщенная *H*-Теорема

Порожденная энтропией $S_{\kappa,\varsigma}$ дивергенция Брэгмана (см. Bregman, 1967; Cichocki, Amari, 2010)

$$D_{\kappa,\varsigma}\left[p:q\right]=S_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})\right]-S_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right]+$$

$$+\int\frac{\partial S_{\kappa,\varsigma}[q(\boldsymbol{r})]}{\partial q(\boldsymbol{r})}\left[p(\boldsymbol{r})-q(\boldsymbol{r})\right]d\Gamma\geq 0 \qquad (91)$$

относится к наиболее существенным статистическим характеристикам неэкстенсивной динамической (κ,ς)-системы (Scarfone, 2018). Являясь функционалом, она определяет меру статистической упорядоченности в микросостояниях системы с распределением $p(\boldsymbol{r})$ относительно состояния с распределением $q(\boldsymbol{r})$. Выражение (91) представляет собой функционал для двух нормированных распределений $\int p(\boldsymbol{r})d\Gamma=\int q(\boldsymbol{r})d\Gamma=1$.

Различные свойства общего вида дивергенции Брэгмана можно найти в работе (Cichocki, Amari, 2010). Здесь же мы отметим, что величина $D_{\kappa,\varsigma}(p:q)$ является вещественным, положительным, выпуклым (в первом

аргументе) функционалом. Легко видеть, что при $\varsigma = 0$, $\kappa \to 0$ эта величина переходит в так называемую информацию различия Кульбака–Лейблера (см. Кульбак, 1967; Зарипов, 2010)

$$D_{\kappa\to 0,\varsigma=0}(p:q) \Rightarrow K(p:q) := \iint p(\boldsymbol{r}) \ln\left(\frac{p(\boldsymbol{r})}{q(\boldsymbol{r})}\right) d\Gamma. \qquad (92)$$

Кроме этого, поскольку при $p = q$ имеет место равенство $D_{\kappa,\varsigma}(p:p) = 0$, то дивергенция Брэгмана является функцией Ляпунова[2)].

Максимум (κ,ς)-энтропии для равновесного распределения. Сначала придадим выражению (91) другую форму. С учетом свойства (13) для деформированного логарифма $\ln_{\kappa,\varsigma}$ получим:

$$D_{\kappa,\varsigma}\left[p:q\right] = S_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})\right] - S_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right] -$$

$$-\lambda \int \left[p(\boldsymbol{r}) - q(\boldsymbol{r})\right] \ln_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})/\alpha\right] d\Gamma \geq 0. \qquad (93$$

Пусть теперь распределение $p(\boldsymbol{r})$ является равновесным $p(\boldsymbol{r}) = p_0(\boldsymbol{r})$, для которого справедливо представление (34), которое мы запишем в виде:

$$-\lambda \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})/\alpha\right] = \beta\left[\varepsilon(\boldsymbol{r}) - \mu\right] \equiv z(\boldsymbol{r}), \qquad (94)$$

а распределение $q(\boldsymbol{r})$ соответствует произвольному состоянию системы. Кроме этого, предположим, что для обоих распределений справедливо равенство (условие Гиббса)

$$\int q(\boldsymbol{r})\, z(\boldsymbol{r}) d\Gamma = p_0(\boldsymbol{r})\, z(\boldsymbol{r}) d\Gamma, \qquad (95)$$

Покажем, что в этом случае справедливо также и равенство

$$(\varsigma+1)\int \left[p_0(\boldsymbol{r}) - q(\boldsymbol{r})\right] \ln_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right] d\Gamma = \int \left[q(\boldsymbol{r}) - p_0(\boldsymbol{r})\right] u_{\kappa,\varsigma}\left[p(\boldsymbol{r})\right] d\Gamma. \qquad (96)$$

Действительно, комбинируя (13) и (34), находим соотношение

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

$$(1+\varsigma)\ln_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]=-u_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]-z(\boldsymbol{r}), \tag{97}$$

используя которое, совместно с (95), получим (96).

С другой стороны, из определения дивергенции Брэгмана (93) и учета (1) и (31) (с заменой $p \Rightarrow q$), имеем выражение:

$$S_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})\right]:=\int q(\boldsymbol{r})\ln_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})\right]d\Gamma=-D_{\kappa,\varsigma}\left[q:p_0\right]-$$

$$+\int p_0(\boldsymbol{r})\ln_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]d\Gamma-\lambda\int\left[q(\boldsymbol{r})-p_0(\boldsymbol{r})\right]\ln_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})/\alpha\right], \tag{98}$$

которое, при учете формулы (13), принимает вид:

$$S_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})\right]:=\int q(\boldsymbol{r})\ln_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})\right]d\Gamma=-D_{\kappa,\varsigma}\left[q:p_0\right]+\int p_0(\boldsymbol{r})\ln_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]d\Gamma-$$

$$-\int\left[q(\boldsymbol{r})-p_0(\boldsymbol{r})\right]u_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]d\Gamma-(1+\varsigma)\int\left[q(\boldsymbol{r})-p_0(\boldsymbol{r})\right]\ln_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]. \tag{99}$$

Наконец, комбинируя (96) и (99), получим искомый результат (см. Scarfone, 2018)

$$S_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})\right]=S_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]-D_{\kappa,\varsigma}\left[q:p_0\right]\le S_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]. \tag{100}$$

где дивергенция Брэгмана выступает в виде отрицательного вклада в энтропию Шарма–Танеджа–Миттал и проявляется как негэнтропия. Понятие негэнтропии, т.е. изменения энтропии с обратным знаком, было предложено Э. Шредингером (1947). Из неравенства (100) следует, что энтропия $S_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]$ равновесного состояния больше, чем энтропия $S_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r})\right]$ произвольного состояния.

Теорема Гиббса и *H*-теорема. Как известно, открытая система представляет собой часть большой замкнутой системы и находится с внешним окружением в неравновесном контакте. В окружении отсутствуют неравновесные явления, и можно считать, что она находится в равновесном состоянии с распределением $p_0(\boldsymbol{r})$. Сравнивая значения энтропий при условии Гиббса (95), получим из (100) теорему Гиббса в виде неравенства

$$D_{\kappa,\varsigma}\left[q:p_0\right]=-\left\{S_{\kappa,\varsigma}\left[q(\boldsymbol{r}),t\right]-S_{\kappa,\varsigma}\left[p_0(\boldsymbol{r})\right]\right\}\ge 0. \tag{101}$$

Таким образом, увеличение энтропии системы до ее максимального значения в равновесии происходит совместно с потерей информации различия, то есть имеет место совместное увеличение статистической разупорядоченности и уменьшение статистической упорядоченности микросостояний неэкстенсивной системы.

Поскольку согласно свойству выпуклости (Cichocki, Amari, 2010) дивергенции Брэгмана $D_{\kappa,\varsigma}\left[q:p_0\right]$ является знакоопределенной функцией Ляпунова, то для того, чтобы состояние полного равновесия $p_0(\boldsymbol{r})$ было устойчивым, необходимо выполнение следующего неравенства

$$\frac{d}{dt}D_{\kappa,\varsigma}\left[p:p_0\right]=-\frac{d}{dt}\left[S_{\kappa,\varsigma}(q(\boldsymbol{r}),t)-S_{\kappa,\varsigma}(p_0(\boldsymbol{r}))\right]\leq 0. \qquad (102)$$

Таким образом, при стремлении системы к равновесному состоянию во временной эволюции дивергенция Брэгмана (информация различия) уменьшается. Из (102) следует H-теорема для открытых неравновесных неэкстенсивных (κ,ς)-систем

$$\frac{d}{dt}S_{\{\kappa\}}(q(\boldsymbol{r}),t)>0, \qquad (104)$$

которая справедлива при приближении к состоянию полного статистического равновесия. Эта теорема утверждает, что (κ,ς)-энтропия системы непрерывно растет в направлении равновесия, где энтропия становится максимальной и достигает конечного значения. Таким образом, происходит хаотизация макроскопической системы Шарма–Танеджа–Миттал при спонтанных переходах.

Заметим, что тот факт, что (κ,ς)-энтропия квазиаддитивна и энтропия совокупной системы больше, чем сумма энтропий отдельных подсистем, указывает на то, что совокупная система термодинамически более стабильна (Landsberg, Vedral, 1998).

Заключение

Исследования в области статистической механики и термодинамики неэкстенсивных систем приобрели в настоящее время значительный общетеоретический интерес в связи с проявлениями неэкстенсивных свойств во многих аномальных физических явлениях и важностью прак-

тических приложений. Диапазон применения разнообразных неэкстенсивных параметрических энтропий в настоящее время постоянно расширяется, охватывая различные направления в науке, такие как космология и космогония, квантовая механика и статистика, специальная и общая теории относительности, стохастическая динамика и фракталы, геофизика, биомедицина и многие другие. В последнее десятилетие двухпараметрическая (κ,ς)-статистика Шарма–Танеджа–Миттал привлекает все больший интерес, поскольку она обладает многими интересными свойствами (принцип максимальной энтропии, термодинамическая устойчивость, устойчивость Леша, непрерывность и т. п.). Это позволяет быть этой статистике одним из удачных обобщений статистической механики Больцмана–Гиббса особенно в контексте специальной теории относительности, и полученных распределений, которые наблюдаются в различных физических, природных и искусственных системах.

В представленной работе даётся логическая схема построения модифицированной термодинамики неэкстенсивных систем, основанная на - энтропии Шарма–Танеджа–Миттал. Найдено универсальное распределение степенного закона на основе максимизации энтропии (ШТМ) при заданных ограничениях на усредненные значения параметров системы, полученные по нормированному распределению вероятностей. Получено обобщение нулевого закона термодинамики для двух независимых неэкстенсивных систем при их тепловом контакте, вводящее в рассмотрение так называемую физическую температуру, отличающуюся от инверсии множителя Лагранжа β. Этот факт потребовал переопределения ряда термодинамических соотношений, полученных на микроскопическом уровне, при конструировании макроскопической неэкстенсивной термостатики. В качестве основных предпосылок, взятых за исходный пункт нахождения новых термодинамических соотношений, в работе выбраны первый закон термодинамики и структура преобразования Лежандра. Путем применения обобщенной энтропии Клаузиуса к рассиматриваемойаномальной системе, был получен набор основных термодинамических соотношений. Наконец, на основе, так называемой дивергенции Брэгмана была сформулирована и доказана *H*-теорема, описывающая хаотизацию микроскопической системы при спонтанных переходах.

Изложенный в работе подход позволяет моделировать, в частности, сложные космологические и космогонические среды (от галактик и аст-

рофизических дисков до космической пыли), отличительной чертой которых является наличие динамических структур с нецелой топологической размерностью (фракталов), дальнодействующего силового взаимодействия, а также эридитальности и немарковости эволюционных процессов (см. Kolesnichenko, 2020).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-01-00064.

Список литературы

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

Колесниченко. А.В. Двухпараметрический энтропийный функционал Шарма–Миттал как основа семейства обобщенных термодинамик неэкстенсивных систем // Mathematica Montisnigri. 2018. Vol XLII P.74-101.

Колесниченко А. В. Статистическая механика и термодинамика Тсаллиса неаддитивных систем. Введение в теорию и приложения. М.: ЛЕНАНД. 2019. -360 с.

Колесниченко А. В. К построению статистической термодинамики неэкстенсивных систем а основе каппа-энтропии Каниадакиса // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2020, № 17. 36 с.

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

Мюнстер А. Химическая термодинамика. Из-во: URSS. 2010. 296 с.

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

Шредингер Э. Что такое жизнь с точки зрения физики? М.: ИЛ. 1947. 147 с.

Abe S A note on the q-deformation-theoretic aspect of the generalized entropies in nonextensive physics // Physics Letters A. 1997. V.224. №6. P. 326-330.

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

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.

Abe S. Macroscopic thermodynamics based on composable nonextensive entropies // Physica A. 2002. V. 305. P. 62-68.

Beck C. Generalised information and entropy measures in physics // Contemp. Phys. 2009. V. 50. № 4. P. 495–510.

Bregman L. M. The relaxation method of finding the common point of convex sets and its application to the solution of problems in convex programming // USSR computational mathematics and mathematical physics, 1967. V. 7. № 3. P. 200-217.

Canturk B., Oikonomouy T., Bagciz G. B. The parameter space and third law of thermodynamics for the Borges Roditi, Abe and Sharma Mittal entropies // International Journal of Modern Physics B. 2018. V. 32. P. 1850274 (10 pages)

Cichocki A., Amari S. Families of Alpha-Beta- and Gamma-Divergences: Flexible and Robust Measures of Similarities // Entropy. 2010. V. 12. P. 1532-1568.

Daroczy Z. Generalized information functions // Inf. Control. 1970. V. 16. № 1. P. 36–51.

Frank T.D., Plastino A.R. Generalized thermostatics based on the Sharma-Mittal entropy and escort mean value // Eur. Phys. J. B. 2002. V. 30. P. 543–549.

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

Havrda J., Charvat F. Quantiication method of classiication processes. Concept of structural α-entropy // Kybernetika. 1967. V. 3. P. 30–35.

Kaniadakis G. H-theorem and generalized entropies within the framework of nonlinear kinetics // Phys. Lett. A. 2001. V. 288. P. 283-291.

Kaniadakis G. Statistical mechanics in the context of special relativity // Phys. Rev. E. 2002. V. 66. P. 056125.

Kaniadakis G. Statistical mechanics in the context of special relativity II. // Phys. Rev. E. 2005. V. 72. P. 036108.

Kaniadakis G., Lissia M., Scarfone A. M. Deformed logarithms and entropies // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2004. V. 340. № 1-3. P. 41-49.

Kaniadakis G., Lissia M., Scarfone A. M.. Two-parameter deformations of logarithm, exponential, and entropy: A consistent framework for generalized statistical mechanics // Phys. Rev. E. 2005. V. 71. P. 046128.

Landsberg P.T., Vedral V. Distributions and channel capacities in generalized statistical mechanics // Phys. Lett. A. 1998. V. 247. P. 211-216.

Renyi A. On measures of entropy and information // In: Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematics, Statistics and Probability. University California Press. Berkeley. 1961. V. 1. P. 547–561.

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

Scarfone A.M. Legendre structure of the thermostatistics theory based on the Sharma–Taneja–Mittal entropy // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2006. V. 365. № 1. P. 63-70.

Scarfone A.M. Intensive variables in the framework of the non-extensive thermostatistics // Physics Letters A. 2010. V. 374. № 27. P. 2701-2706.

Scarfone A. M. A Maximal Entropy Distribution Derivation of the Sharma-Taneja-Mittal Entropic Form // Open Systems & Information Dynamics. 2018. V. 25, №. 1. P. 1850002-1–1850002-11.

Sharma B. D., Mittal D. P. New nonadditive measures of entropy for discrete probability distributions // J. Math. Sci. 1975. V. 10. P. 28-40.

Sharma B. D., Mittal D. P. New non-additive measures of relative information // J. Combinatorics Information & System Sciences. 1977. V.2. № 4. P. 122-132.

Scarfone A. M., Wada T. Legendre structure of κ-thermostatistics revisited in the framework of information geometry // J. Phys. A. 2014. V. 47, P. 275002 (17 pp).

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

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

Wada T., Scarfone A. M. Finite difference and averaging operators in generalized entropies // J. Phys.: Conference Series. 2010. V. 201. P. 012005 (1-8).

Оглавление

Введение 3

1. Основные определения и статистические свойства энтропии Шарма–Танеджа–Миттал 5

2. Экстремум (κ,ς)–энтропии и равновесные состояния 10

3. Уравнения статистической термодинамики для неэкстенсивных $((\kappa,\varsigma))$ -систем 13

4. Термическое равновесие двух неэкстенсивных систем в статистике Шарма–Танеджа–Миттал 18

5. Макроскопическая термостатика 22

6. Дивергенция Бергмана. Обобщённая H -теорема 27

Заключение 30

Список литературы 32