ЖЭТФ, 2002, том 122, вып. 3 (9), стр. 513–520

ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЛЯ ПОДСИСТЕМЫ, ИСПЫТЫВАЮЩЕЙ ФЛУКТУАЦИИ ТЕМПЕРАТУРЫ

А. Г. Башкиров [*]

Институт динамики геосфер Российской академии наук
117334, Москва, Россия

А. Д. Суханов

Российский университет дружбы народов
117198, Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 февраля 2002 г.

С помощью нелинейного обобщения теории гидродинамических флуктуаций Ландау–Лифшица для простейшего случая, когда имеют место только флуктуации потока энергии и температуры, выводится функция распределения для подсистемы с флуктуирующей температурой, совпадающая с распределением Леви, которое считается одним из основных результатов так называемой неэкстенсивной статистики Тсаллиса. Показано, что эта же функция распределения получается из принципа максимума информационной энтропии, если в качестве таковой выбирается энтропия Реньи, являющаяся экстенсивной величиной. Найденную функцию распределения следует использовать вместо распределения Гиббса при построении термодинамики систем с существенными флуктуациями температуры.

PACS: 05.10.Gg, 05.20.Gg, 05.40.-a

1. ВВЕДЕНИЕ

При использовании стандартных методов статистической механики, как правило, предполагается малость среднеквадратичной флуктуации температуры системы, которая оценивается как [1]

$$\delta T/T_0 = \left(\frac{k_B}{C_V}\right)^{1/2}.$$

Это предположение оправдано, если теплоемкость системы C_V достаточно велика и температура T_0 не слишком мала. В качестве примеров, где это условие может не выполняться, назовем атомное ядро, для которого понятие температуры было успешно введено Ландау, Френкелем и Вайскопфом [2]), а также низкотемпературные системы, где $T_0 \to 0$ и одновременно $C_V \to 0$ [3]. В настоящей работе рассматриваются флуктуации температуры малой подсистемы, находящейся в термостате, и с помощью теории гидродинамических флуктуаций Ландау–Лифшица [4] выводится гамма-распределение для этих флуктуаций. Дисперсия полученного гамма-распределения зависит от C_V и дает приведенную выше оценку для δT. Далее эта функция распределения используется для усреднения по температурам канонического распределения Гиббса, что приводит к распределению Леви или q-распределению. В приложении к интерпретации ядерных столкновений подобный подход был рассмотрен в работе [5], где полученное распределение Леви объяснялось в свете так называемой неэкстенсивной статистики, основанной на вариационном принципе экстремальности информационной энтропии Тсаллиса [6]. В связи с бурным развитием неэкстенсивной статистики, охватывающей самый широкий круг проблем (от космологии до внутриядерных процессов), мы сочли необходимым остановиться вкратце на проблеме выбора формы информационной энтропии. Наиболее обоснованным является однопараметрическое семейство энтропий Реньи (или просто энтропия Реньи). Когда параметр q энтропии Реньи равен единице, то она переходит в хорошо известную энтропию Больцмана–Шеннона. Энтропия Реньи аддитивна, но при линеаризации в окрестности $q \approx 1$ она теряет аддитивность и переходит в энтропию Тсаллиса. Применение к энтропии

[*] E-mail: abas@idg.chph.ras.ru

Реньи принципа экстремальности информационной энтропии точно приводит к распределению Леви, которое получается при усреднении по температуре распределения Гиббса. Это обстоятельство позволяет по-новому взглянуть на физический смысл параметра Реньи q и самой энтропии Реньи.

2. УРАВНЕНИЕ ЛАНЖЕВЕНА ДЛЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

Здесь будет рассмотрена подсистема, являющаяся малой частью большой равновесной системы и испытывающая флуктуации как энергии, так и температуры. В этом заключается коренное отличие предлагаемого здесь подхода от традиционного в статистической физике подхода Гиббса, в котором температура задается константой, характеризующей термостат.

Для анализа флуктуаций температуры воспользуемся теорией гидродинамических флуктуаций Ландау–Лифшица, в которой к регулярным потокам массы, импульса и энергии, входящим в систему уравнений гидродинамики, добавляются соответствующие флуктуационные аналоги.

В рассматриваемом здесь случае отсутствуют потоки массы и импульса, но вследствие флуктуаций температуры должен иметь место поток энергии. Тогда уравнение сохранения плотности энергии системы $E(\mathbf{r},t)$ принимает вид

$$\frac{\partial E(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\mathrm{div}(\mathbf{q}^R(\mathbf{r},t) + \mathbf{q}^F(\mathbf{r},t)), \tag{1}$$

где $\mathbf{q}^R(\mathbf{r},t)$ описывает регулярный поток плотности энергии, а $\mathbf{q}^F(\mathbf{r},t)$ представляет флуктуации потока.

Выделим в системе подсистему с фиксированным объемом V. Это может быть как вкрапление инородного вещества или фазы, так и малая часть всей однородной системы. Проинтегрировав уравнение (1) по объему V, с помощью теоремы Гаусса–Остроградского получим уравнение сохранения для энергии этой подсистемы

$$\begin{aligned} &\frac{d\bar{E}(t)}{dt} = -Q^R(t) - Q^F(t), \\ &Q^{R,F} = \int\limits_A dA\cdot \mathbf{q}^{R,F}, \end{aligned} \tag{2}$$

где введена площадь поверхности A выделенной подсистемы.

Ограничиваясь в дальнейшем учетом флуктуаций лишь одного интенсивного параметра, температуры, представим энергию $\bar{E}(t)$ в виде $\bar{E}(t) = C_V T(t)$, где C_V — теплоемкость подсистемы. Кроме того, поток Q^R удобно записать в виде уравнения теплопередачи

$$Q^R(t) = A\kappa(T(t) - T_0), \tag{3}$$

где κ — коэффициент теплопередачи, T_0 — средняя температура системы. Тогда уравнение (2) принимает вид

$$C_V\frac{dT(t)}{dt} = -A\kappa(T(t) - T_0) - Q^F(t). \tag{4}$$

Это уравнение представляет собой уравнение Ланжевена для температуры, характеризующей выделенную часть системы и флуктуирующей под воздействием случайного потока энергии $Q^F(t)$ через границу рассматриваемой прерывной системы.

В неравновесной линейной термодинамике [7] в качестве термодинамической силы, сопряженной потоку Q^R, выступает не разность температур, а величина

$$\left(\frac{1}{k_BT_0} - \frac{1}{k_BT(t)}\right) \approx \frac{1}{k_BT_0^2}(T(t) - T_0). \tag{5}$$

Соответственно, кинетический коэффициент уравнения теплопередачи должен иметь вид $k_BT_0^2A\kappa$. Тогда, согласно теории гидродинамических флуктуаций Ландау–Лифшица, в линейном приближении по отклонению от равновесия стохастические свойства случайного потока имеют вид

$$\begin{aligned} &\langle Q_l^F(t)\rangle = 0, \\ &\langle Q_l^F(t)Q_l^F(t')\rangle = 2k_BT_0^2A\kappa\delta(t-t'). \end{aligned} \tag{6}$$

Второе из этих выражений свидетельствует о том, что в рамках линейной теории $Q_l^F \propto T_0$. Это обстоятельство подсказывает простой способ учета нелинейности путем замены $Q_l^F(t)$ на $Q^F(t) = T(t)\xi(t)$, где $\xi(t)$ случайная функция времени, удовлетворяющая соотношениям

$$\langle\xi(t)\rangle = 0, \quad \langle\xi(t)\xi(t')\rangle = 2k_BA\kappa\delta(t-t'). \tag{7}$$

В результате уравнение (4) принимает вид нелинейного стохастического уравнения Ланжевена

$$\frac{dT(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau}(T(t) - T_0) - \frac{1}{C_V}T(t)\xi(t), \tag{8}$$

где $\tau = C_V/A\kappa$.

3. ФЛУКТУАЦИИ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОДСИСТЕМЫ

Полученному стохастическому уравнению Ланжевена с δ-коррелированным шумом соответствует кинетическое уравнение Фоккера–Планка для функции распределения температуры $f(T,t)$

$$\frac{\partial f(T,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial T} W_1(T) f(T,t) + \\ + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial T^2} W_2(T) f(T,t). \quad (9)$$

Коэффициенты этого уравнения $W_1(T)$ и $W_2(T)$ выражаются через первый $\langle T(t) - T(t+\tau)\rangle$ и второй $\langle (T(t) - T(t+\tau))^2\rangle$ условные моменты стохастического уравнения (8), соответствующие некоторому фиксированному значению $T(t)$. Для линейного стохастического уравнения Ланжевена эти моменты определяются элементарно (см., например, [8]). Для нелинейных уравнений типа (8) решение этой задачи также известно и используется в различных приложениях теории случайных процессов [9]. Для рассматриваемого здесь случая коэффициенты уравнения Фоккера–Планка принимают вид

$$W_1(T) = -\frac{1}{\tau}(T - T_0) + k_B T \frac{1}{\tau^2 A\kappa}, \quad (10)$$

$$W_2(T) = 2k_B T^2 \frac{1}{\tau^2 A\kappa}. \quad (11)$$

Благодаря тому что эти коэффициенты не зависят явно от времени, существует стационарное решение уравнения (9):

$$f(T) = \frac{K}{W_2(T)} \exp\left(2\int^T \frac{W_1}{W_2} dT\right). \quad (12)$$

Постоянная K будет определена из условия нормировки, вследствие этого выбор нижнего предела интегрирования в экспоненте произволен и может быть опущен. Подставляя в (12) выражения (10) и (11), получаем

$$f(T) = \frac{K}{T} \exp\left(\frac{\tau A\kappa}{k_B}\int^T \frac{-T + T_0}{T^2} dT\right), \quad (13)$$

откуда следует

$$f(T) = K T^{-1-\gamma} \exp\left(-\frac{\gamma T_0}{T}\right), \quad (14)$$

где введена безразмерная константа $\gamma = C_V/k_B$. Отметим, что полученное стационарное решение не зависит ни от коэффициента теплообмена κ, ни от площади поверхности A. Это обстоятельство свидетельствует в пользу того, что найденное распределение может иметь бóльшую общность, чем рассмотренная модель теплопередачи.

В дальнейшем нас будет интересовать функция распределения не по температуре T, а по обратной ей величине $\beta = 1/k_B T$. С учетом соотношения

$$d\beta = -\frac{dT}{k_B T^2}$$

получаем

$$f(\beta) = K\beta^{\gamma-1} e^{-\gamma k_B T_0 \beta}. \quad (15)$$

Константу K определяем из условия нормировки, которое приводится к виду

$$K^{-1} = \int_0^\infty \beta^{\gamma-1} e^{-\gamma k_B T_0 \beta} d\beta = (\gamma k_B T_0)^{-\gamma}\Gamma(\gamma), \quad (16)$$

откуда окончательно находим

$$f(\beta) = \frac{(\gamma k_B T_0)^\gamma}{\Gamma(\gamma)} \beta^{\gamma-1} e^{-\gamma k_B T_0 \beta}. \quad (17)$$

Эту функцию можно также представить в виде распределения отношения температур $u = k_B T_0 \beta = T_0/T$:

$$f(u) = \frac{\gamma^\gamma}{\Gamma(\gamma)} u^{\gamma-1} e^{-\gamma u} \quad (18)$$

или по безразмерной величине $z = \gamma k_B T_0 \beta = \gamma T_0/T$:

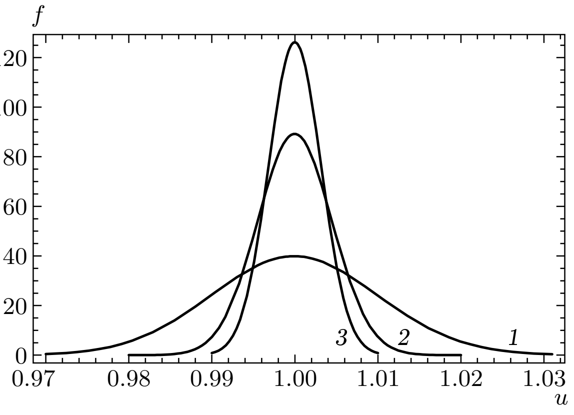
$$f(z) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} z^{\gamma-1} e^{-z}. \quad (19)$$

Таким образом, полученная функция распределения для обратной температуры подсистемы в безразмерной форме (19) представляет собой гамма-распределение. Ниже при конкретных расчетах чаще будет использоваться представление $f(\beta)$ или $f(u)$, для краткости будем их также называть гамма-распределениями.

Отметим, что если ввести среднюю энергию выделенного объема $\bar{E}_0 = C_V T_0$, то выражение для $f(\beta)$ принимает вид

$$f(\beta) = \frac{(\gamma\beta/\beta_0)^\gamma}{\beta\Gamma(\gamma)} e^{-\beta\bar{E}_0}. \quad (20)$$

По своей форме это выражение близко к распределению Гиббса, но, в отличие от последнего, отражает учет флуктуаций температуры подсистемы при фиксированной энергии $\bar{E}_0$. Как и следовало ожидать, флуктуация температуры, описываемая этим распределением, порядка $\delta T/T_0 \approx (C_V/k_B)^{-1/2}$, что



Гамма-распределение $f(u)$ отношения температур $u = T_0/T$ при различных значениях параметра $\gamma = C_V/k_B = 10^4$ (*1*), $0.5 \cdot 10^5$ (*2*), 10^5 (*3*)

совпадает с оценкой флуктуации температуры в равновесной статистической физике [1]. На рисунке приведен вид гамма-распределения $f(u)$ при $\gamma = 10^4$, $0.5{\cdot}10^5$, 10^5. Видно, что дисперсия обратной температуры подсистемы резко убывает с ростом γ. Однако малые значения γ соответствуют очень малым подсистемам. Действительно, для идеального одноатомного газа при нормальных условиях $\gamma = 3N/2$, где N — число частиц в объеме, причем согласно закону Авогадро $N \approx 0.3{\cdot}10^{20}\,V$. Тогда для выделенного объема газа с характерным размером порядка длины свободного пробега около 10^{-5} см получаем значение $\gamma = C_V/k_B = 0.5 \cdot 10^5$. Как видно из рисунка, дисперсия температуры при этом порядка 0.005, что совпадает с результатом термодинамической теории флуктуаций [1] $\delta T/T_0 = (k_B/C_V)^{1/2}$.

Значительно перспективнее выглядит применение полученных соотношений к гетерогенным системам, где размер малых частиц (например, атомного ядра [2]) может не превышать нескольких ангстрем, а также для низкотемпературных систем, когда $C_V \to 0$ при $T_0 \to 0$.

4. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОДСИСТЕМЫ

Для описания подсистемы, находящейся в контакте с большой термически равновесной системой (термостатом), в статистической физике используется каноническое распределение Гиббса (здесь и далее для краткости опускаем множитель G_i, учитывающий число состояний с энергией H_i):

$$\rho_i = Q_0^{-1} e^{-\beta H_i}, \tag{21}$$

где H_i — энергия подсистемы (индекс i может означать номер дискретного уровня энергии или совокупность значений координат и импульсов молекул подсистемы), Q — статистическая сумма или статистический интеграл. При этом обратная температура $\beta = 1/k_B T$ считается известной заданной постоянной величиной.

Выше было показано, что температура может флуктуировать. В связи с этим возникает вопрос о том, как модифицируется распределение Гиббса под влиянием флуктуаций температуры. Ответ на него можно получить путем усреднения распределения (21) с полученным в предыдущем разделе гамма-распределением для температуры T (или β).

Для дальнейшего рассмотрения удобно представить ρ_i в эквивалентной форме

$$\begin{gathered} \rho_i = Q^{-1} e^{-\beta \Delta H_i}, \quad Q = \sum_i e^{-\beta \Delta H_i}, \\ \Delta H_i = H_i - \langle H \rangle, \end{gathered} \tag{22}$$

где знак $\sum_i$ может означать как суммирование, так и интегрирование по непрерывной совокупности значений координат и импульсов.

Зависимость ρ_i от температуры определяется не только множителем β в показателе экспоненты, но и в общем случае неизвестной нам температурной зависимостью статистической суммы $Q(\beta)$ (в простейшем случае классического идеального газа $Q \propto \beta^{-3N/2}$, где N — число молекул). Поэтому воспользуемся теоремой о среднем значении, представив усредненное по β распределение Гиббса в виде

$$\bar{\rho}_i = \int_0^\infty d\beta f(\beta) \rho_i = \frac{1}{Q^*} \int_0^\infty d\beta f(\beta) e^{-\beta \Delta H_i}, \tag{23}$$

где Q^* лежит в интервале возможных вариаций $Q(\beta)$ от $Q(0)$ до $Q(\infty)$. Из условий нормировки на единицу распределений $f(\beta)$ и ρ имеем

$$\frac{1}{Q^*} \sum_i \int_0^\infty d\beta f(\beta) e^{-\beta \Delta H_i} = 1, \tag{24}$$

откуда находим

$$Q^* = \sum_i \int_0^\infty d\beta f(\beta) e^{-\beta \Delta H_i}. \tag{25}$$

Таким образом, нам достаточно вычислить лишь среднее значение экспоненты:

$$\int_0^\infty d\beta f(\beta) e^{-\beta \Delta H_i} = \frac{(\gamma k_B T_0)^\gamma}{\Gamma(\gamma)} \beta^{\gamma-1} \times$$
$$\times \int_0^\infty d\beta \beta^{\gamma-1} e^{-\beta(\gamma k_B T_0 + \Delta H_i)} =$$
$$= \left(1 + \frac{\beta_0}{\gamma} \Delta H_i\right)^{-\gamma}. \quad (26)$$

Тогда окончательно усредненное распределение Гиббса принимает вид

$$\bar{\rho}_i = \frac{\left(1 + \frac{\beta_0}{\gamma}(H_i - \langle H \rangle)\right)^{-\gamma}}{\sum\limits_i \left(1 + \frac{\beta_0}{\gamma}(H_i - \langle H \rangle)\right)^{-\gamma}}. \quad (27)$$

В пределе $\gamma \to \infty$, соответствующем большой теплоемкости выделенной подсистемы, $\bar{\rho}_i$ переходит в ρ_i.

5. ИНФОРМАЦИОННАЯ ЭНТРОПИЯ

Информационная энтропия, или просто энтропия, есть мера неопределенности в информации при статистическом (неполном) описании системы с помощью распределения вероятностей $p = \{p_i\}$, $0 \le p_i \le 1$, $i = 1, \ldots, N$. Наиболее известно представление энтропии в форме Больцмана–Шеннона

$$S_B = -\sum_i^N p_i \ln p_i. \quad (28)$$

В случае, когда индексами i помечены динамические микросостояния в гиббсовом фазовом пространстве и распределение p_i соответствует макроскопическому равновесному состоянию системы, энтропия S_B совпадает с термодинамической энтропией.

С другой стороны, распределение Гиббса обеспечивает экстремальность энтропии Больцмана–Гиббса (или Больцмана–Шеннона), что составляет содержание вариационного принципа максимума информационной энтропии (см., например, [10]), обеспечивающего единственность распределения Гиббса при соответствующих дополнительных условиях. В связи с этим возникает необходимость критического анализа основных положений этого принципа.

Рассмотрим, насколько обоснован выбор именно этой формы энтропии. Формально, информационная энтропия в форме Больцмана–Шеннона однозначно определяется четырьмя аксиомами Хинчина [11]:

1) $S(p)$ определяется лишь вероятностями p_i и не зависит ни от каких иных свойств i-х состояний.

2) $S(p)$ максимальна в случае однородного распределения вероятностей, $p_i = 1/N$.

3) $S(p)$ не меняется при увеличении числа состояний N на одно или более состояний с нулевой вероятностью, т. е. $S(p_1, \ldots, p_N) = S(p_1, \ldots, p_N, 0)$.

4) Четвертая аксиома рассматривает систему, состоящую из двух подсистем A и B, так что p_{ij} составной системы представляется в виде $p_{ij} = Q(j|i) p_i^I$, где индекс i относится к A, а индекс j — к B, $Q(j|i)$ — условная вероятность обнаружить B в состоянии j, если A находится в состоянии i. Тогда величина $S(p^{A+B})$ должна удовлетворять соотношению

$$S(p^{A+B}) = S(p^A) + \sum_i p_i^A S(Q|i),$$

где условная энтропия $S(Q|i)$ имеет вид

$$S(Q|i) = -\sum_j Q(j|i) \ln Q(j|i).$$

Именно последняя аксиома обеспечивает однозначное определение информационной энтропии в форме Больцмана–Шеннона. Отметим, что в работе Хинчина [11] в качестве обоснования такой формулировки этой аксиомы (номер 2^o в [11]) использовалось выражение для условной энтропии $S(Q|i)$, полученное путем подстановки $S(p^{A+B})$ в заранее известную формулу для энтропии Больцмана–Шеннона (28). Таким образом, аксиома 4 оказывается искусственным ограничением для выделения информационной энтропии в форме Больцмана–Шеннона. Поэтому совершенно естественно выглядит доказанная Хинчиным [11] на базе аксиом 1–4 теорема существования и единственности энтропии Больцмана–Шеннона. Мы не встречали в литературе каких-либо иных обоснований такой формулировки аксиомы 4.

Критический анализ аналогичной теоремы Шеннона, обосновывающий однозначный вывод энтропии в форме Больцмана–Шеннона, был проведен Уффинком [12]. Здесь также препятствием оказывается аксиома, относящаяся к условной энтропии.

Наиболее убедительной выглядит система аксиом Шора и Джонсона [13], приводящая к однопараметрическому семейству энтропий Реньи [14], которое для нормированного на единицу распределения $\{p_i\}$ записывается в виде

$$S_R^{(q)}(p) = \frac{1}{1-q} \ln \sum_i^N p_i^q, \quad \sum_i^N p_i = 1, \quad (29)$$

где q — произвольное положительное число (меньше нуля оно быть не может, так как среди $\{p_i\}$ могут быть нулевые значения).

Если ослабить четвертую аксиому Хинчина, ограничившись рассмотрением независимых подсистем A и B, для которых $p_{ij}^{A+B} = p_i^A p_j^B$ то четвертая аксиома примет вид

4′) $S(p) = S(p^A) + S(p^B)$.

Совокупности аксиом 1–3, 4′ удовлетворяют как энтропия Больцмана–Шеннона, так и более общая форма информационной энтропии Реньи. Нетрудно убедиться, что при $q = 1$ энтропия Реньи переходит в энтропию Больцмана–Шеннона:

$$S_R^{(q=1)}(p) = S_B(p).$$

Различные свойства энтропии Реньи обсуждаются, в частности, в монографиях [14–16].

В случае $|1 - \sum_i p_i^q| \ll 1$ (что с учетом нормировки распределения $\{p_i\}$ соответствует условию $|1 - q| \ll 1$) можно ограничиться линейным членом разложения логарифма в выражении для $S_R^{(q)}(p)$ по этой разности, и $S_R^{(q)}(p)$ переходит в

$$S_T^{(q)}(p) = -\frac{1}{1-q}\left(1 - \sum_i^N p_i^q\right). \tag{30}$$

Такая линеаризация энтропии Реньи была впервые предложена Дароши [17], а в настоящее время это выражение энтропии получило название энтропии Тсаллиса [6].

Линеаризация логарифма приводит к тому, что энтропия становится неэкстенсивной. Это ее свойство широко используется Тсаллисом и сложившейся вокруг него интернациональной научной школой для исследования разнообразных неэкстенсивных систем [5, 6, 18–20]. При этом приведенное выше ограничение $|1 - q| \ll 1$, как правило, не учитывается. Попытка [20] независимого обоснования этой формы энтропии, на наш взгляд, выглядит неубедительной, так как основывается на аксиоматическом введении такой формы для условной энтропии, которая однозначно обеспечивает получение энтропии Тсаллиса.

6. ЭКСТРЕМАЛЬНОСТЬ ЭНТРОПИИ

Согласно вариационному принципу экстремальности информационной энтропии, при статистическом (не полном с динамической точки зрения) описании системы ее функция распределения должна обеспечивать правильное значение тех немногих средних величин, которые фигурируют в статистическом описании, а в остальном быть максимально неопределенной. Такой подход в применении к равновесным термодинамическим системам (изолированным или слабо взаимодействующим с термостатом) использовался очень давно для построения равновесной статистической термодинамики (см., например, [21] или [22]), но лишь после работ Джейнса [23] он занял прочное место как принцип, обосновывающий (по крайней мере на физическом уровне строгости) использование ансамблей Гиббса при статистическом описании термодинамических систем (см., например, [10]). При этом под информационной энтропией традиционно подразумевается энтропия Больцмана–Шеннона.

Здесь принцип экстремальности информационной энтропии будет использован в отношении энтропии Реньи.

Нас интересуют распределения вероятностей $\{p_i\}$, обеспечивающие экстремальность информационной энтропии при дополнительном условии, состоящем в фиксировании среднего значения $\langle H\rangle$ случайной величины H_i. Это требование должно быть учтено при поиске условного экстремума $S_R^{(q)}(p)$ наряду с требованием нормировки p_i.

Тогда распределение вероятностей $\{p_i\}$, обеспечивающее экстремальность $S_R^{(q)}(p)$ при двух названных выше условиях, должно определяться из экстремума функционала

$$L(p) = \frac{1}{1-q}\ln\sum_i^N p_i^q - \alpha\sum_i^N H_i p_i - \Phi\sum_i p_i, \tag{31}$$

где α и Φ — лагранжевы множители. Отметим, что в пределе $q \to 1$ он переходит в хорошо известный [10] функционал; его экстремум обеспечивается каноническим распределением Гиббса, в котором $\alpha = \beta_0 = 1/k_B T_0$ — обратная температура, Φ — свободная энергия.

Прежде чем начать решение вариационной задачи на условный экстремум энтропии Реньи, сделаем одно небольшое замечание.

Наличие параметра Реньи q приводит к изменению относительных вкладов различных p_i в энтропию Реньи. Действительно, при $q > 1$ возрастает роль наибольших p_i, а при $q < 1$ — наименьших p_i. В связи с этим оказалось плодотворным введение так называемого сопровождающего распределения (escort distribution) [15, 16, 18]

$$P_i = \frac{p_i^q}{\sum\limits_i p_i^q}.$$

Далее p-распределение будем называть исходным распределением. Смысл сопровождающего распределения можно пояснить следующим образом. Если представить исходное распределение в виде $p_i = \exp(-b_i)$, то

$$P_i = \exp\left[q(\Psi - b_i)\right], \quad \Psi = -\frac{1}{q}\ln\sum_i p_i^q.$$

В этом смысле можно сказать, что переход к сопровождающему распределению подобен переходу к каноническому распределению: $1/q$ выступает в роли своего рода температуры, а Ψ — свободной энергии. Непротиворечивость этого перехода обеспечивается отчасти условием сохранения заданного среднего значения энергии $\langle H\rangle = \sum_i H_i P_i$. Детальный анализ перехода к такой форме усреднения в приложении к энтропии Тсаллиса проведен в [18]. При этом функционал (31) представляется в виде

$$L(p) = \frac{1}{1-q}\ln\sum_i^N p_i^q - \alpha\frac{\sum\limits_i H_i p_i^q}{\sum\limits_i p_i^q} - \Phi\sum_i p_i. \qquad (32)$$

Приравнивая нулю его функциональную производную, имеем

$$\frac{\delta L(p)}{\delta p_i} = \frac{q}{1-q}\frac{p_i^{q-1}}{\sum\limits_j p_j^q} - \alpha q(H_i - \langle H\rangle)\frac{p_i^{q-1}}{\sum\limits_j p_j^q} - \Phi = 0. \qquad (33)$$

Тогда из уравнения (33) следует, что

$$p_i = \left(1 - \alpha(1-q)(H_i - \langle H\rangle)\right)^{1/(1-q)} \times \left(\frac{1-q}{q}\Phi\sum_j^N p_j^q\right)^{-1/(1-q)}.$$

Из условия нормировки $\sum_i p_i = 1$ получаем

$$\left(\frac{1-q}{q}\Phi\sum_j^N p_j^q\right)^{1/(1-q)} = \sum_i^N \left(1 - \alpha(1-q)(H_i - \langle H\rangle)\right)^{1/(1-q)}$$

и, окончательно,

$$p_i = \frac{\left(1 - \beta_0(1-q)(H_i - \langle H\rangle)\right)^{1/(1-q)}}{\sum\limits_i \left(1 - \beta_0(1-q)(H_i - \langle H\rangle)\right)^{1/(1-q)}}. \qquad (34)$$

Здесь использован тот факт, что при $q \to 1$ распределение $\{p_i\}$ становится каноническим распределением Гиббса, в котором константа $\alpha = \beta_0$ является величиной, обратной температуре.

Если теперь представить γ как $\gamma = -(1-q)^{-1}$, то выражение (27) примет вид

$$\bar{\rho}_i = \frac{\left(1 - \beta_0(1-q)(H_i - \langle H\rangle)\right)^{1/(1-q)}}{\sum\limits_i \left(1 - \beta_0(1-q)(H_i - \langle H\rangle)\right)^{1/(1-q)}}. \qquad (35)$$

Полная идентичность этого выражения, полученного путем усреднения распределения Гиббса по флуктуациям температуры, с плотностью вероятности p_i (34), обеспечивающей экстремальность энтропии Реньи, позволяет по-новому взглянуть на физический смысл энтропии Реньи и параметра Реньи

$$q = 1 + \frac{1}{\gamma} = \frac{C_V + k_B}{C_V}. \qquad (36)$$

Таким образом, параметр Реньи существенно отличается от единицы лишь в том случае, если теплоемкость выделенной подсистемы одного порядка с постоянной Больцмана k_B. Термодинамика подобных систем должна строится на базе энтропии Реньи и функции распределения $\{\bar{\rho}_i\}$ или $\{p_i\}$, получившей в литературе по неэкстенсивной термодинамике название функции распределения Леви или q-распределения. Подчеркнем еще раз, что здесь эта функция распределения получена без привлечения каких-либо дополнительных соображений о неэкстенсивности рассматриваемых систем.

Отметим в заключение, что если предположить гамильтониан в форме степенной функции $H(x) = h\,x^r$, где h — константа, то для $q \neq 1$ и достаточно существенных флуктуаций x, превышающих минимальное значение

$$x_{min} \gg \left(\langle x^r\rangle + \frac{1}{\beta_0 h(q-1)}\right)^{1/r}, \qquad (37)$$

выражение (34) переходит в степенное распределение

$$p(x) \sim x^{-s}, \quad s = \frac{r}{q-1}. \qquad (38)$$

Таким образом, мы получили степенное распределение Ципфа–Парето как частную форму распределения (34), обеспечивающего экстремальность информационной энтропии Реньи при $q \neq 1$. Отметим, что, согласно выражению (37), x_{min} резко возрастает при $q \to 1$, так что интервал значений x, на котором справедливо степенное распределение, обращается в нуль.

В приложении к общим стохастическим системам, включая биологические, экономические, лингвистические и прочие, где имеет место распределение Ципфа–Парето, параметр Реньи можно считать произвольным, поскольку на эти ситуации не распространяется соотношение (36). В [24] был сформулирован вариационный принцип для q. Согласно этому принципу, предпочтительные значения q зависят от x_{min} и r и лежат в интервале от 1.5 до 3.

Авторы благодарят А. В. Витязева за полезные обсуждения рассматриваемой здесь проблематики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
2. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **7**, 819 (1937); Я. И. Френкель, *Принципы теории атомных ядер*, Изд-во АН СССР, Москва (1950); В. Вайскопф, *Статистическая теория ядерных реакций*, Изд-во иностр. лит., Москва (1952).
3. J. Wu and A. Widom, Phys. Rev. E **57**, 5178 (1998).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 2, Наука, Москва (1978).
5. G. Wilk and Z. Wlodarczyk, Phys. Rev. Lett. **84**, 2770 (2000).
6. C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988).
7. С. де Гроот, П. Мазур, *Неравновесная термодинамика*, Мир, Москва (1964).
8. С. Чандрасекар, *Стохастические проблемы в физике и астрономии*, Изд-во иностр. лит., Москва (1947).
9. С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин, *Введение в статистическую радиофизику и оптику*, Наука, Москва (1981).
10. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, Москва (1971).
11. А. Я. Хинчин, УМН **8**, вып. 3(55), 3 (1953).
12. J. Uffink, Studies in Hist. and Philos. of Mod. Phys. B **26**, 223 (1995).
13. J. E. Shore and R. W. Johnson, IEEE Trans. Inform. Theory **IT-26**, 26 (1980).
14. A. Renyi, *Probability Theory*, North-Holland, Amsterdam (1970).
15. C. Beck and F. Schlögl, *Thermodynamics of Chaotic Systems*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1993).
16. Ю. Л. Климонтович, *Статистическая теория открытых систем*, ТОО «Янус», Москва (1995).
17. Z. Daroczy, Information and Control **16**, 36 (1970).
18. C. Tsallis, R. S. Mendes, and A. R. Plastino, Physica A **261**, 534 (1998).
19. A. R. Plastino and A. Plastino, Physica A **222**, 347 (1995).
20. S. Abe, Phys. Lett. A **271**, 74 (2000).
21. Э. Шредингер, *Статистическая термодинамика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1948).
22. A. Katz, *Principles of Statistical Mechanics*, Freeman, San Francisco (1967).
23. E. T. Jaynes, Phys. Rev. **106**, 620 (1957); **108**, 171 (1957).
24. A. G. Bashkirov and A. V. Vityazev, Physica A **177**, 136 (2000).