Запропоновано альтернативний спосіб формалізації принципу максимального виробництва ентропії для аналізу широкого класу макросистем, зокрема термодинамічних. На його основі одержано рівняння динаміки таких систем. Найдено динамічний інваріант процесу еволюції. Доведено теорему про властивості замкнутої нерівноважної системи, що розвивається згідно з принципом максимальності виробництва єнтропії. Надається визначення «внутрішніго» часу системи

Ключові слова: принцип максимальності виробництва ентропії, принцип Циглера, еволюція складних систем, макросистемы

Предложен альтернативный способ формализации принципа максимального производства энтропии для анализа широкого класса макросистем, включая термодинамические. На его основе получены уравнения динамики таких систем. Найден динамический инвариант процесса эволюции. Доказана теорема о свойствах замкнутой неравновесной системы, развивающейся в соответствии с принципом максимальности производства энтропии. Дано определение «внутреннего» времени системы

Ключевые слова: принцип максимальности производства энтропии, принцип Циглера, эволюция сложных систем, макросистемы

УДК 517.956.3+519.246+519.218.7
DOI: 10.15587/1729-4061.2014.31345

ПРИНЦИП МАКСИМАЛЬНОСТИ ПРОИЗВОДСТВА ЭНТРОПИИ В ЭВОЛЮЦИИ МАКРОСИСТЕМ: НЕКОТОРЫЕ НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Н. И. Делас
Кандидат технических наук
Кафедра систем
управлення летальних аппаратов
Национальний авиационный университет
пр. Комарова, 1, г. Киев, Украина, 03680
E-mail: nikolaivad@gmail.com

1. Введение

С появлением формализма Джейнса [1] принцип *максимума энтропии* превратился в эффективный инструмент для анализа макросистем с большим количеством взаимодействующих элементов. Здесь условный максимум энтропии – выступает интегральным критерием того, что система в стадии равновесия реализует себя с наибольшей вероятностью именно в *данной* конфигурации.

Значительно реже используется другой вариационный принцип – принципа *максимума производства энтропии Циглера*. Он «заставляет» систему выбирать не только наиболее вероятное из своих возможных макросостояний, но и наиболее вероятную траекторию движения к этому макросостоянию. Сам Циглер рассматривал его, как более общую формулировку принципа максимума энтропии, «...более точную версию второго фундаментального закона термодинамики», называя ее фазовой версией [2].

По-видимому, потенциал этого принципа сегодня несколько недооценен. Он мог бы стать надежным инструментом при решении многих практических задач, связанных с изучением динамики развития сложных систем. Причем не только в термодинамике, внутри которой он был рожден, но и – в экологии, экономике, социологии, а также в инженерных приложениях. Однако для придания этому принципу прикладного характера необходимы еще некоторые усилия.

2. Краткий анализ проблемы и постановка задачи

Возможно, одной из причин меньшей популярности принципа Циглера есть некоторая путаница, связанная с наличием его «антипода» – принципа *минимума производства энтропии* Пригожина [3]. Нужно заметить, что обстоятельства проявления этих двух принципов различны, и противоречий между двумя полярными формулировками не существует. Так, если принцип Пригожина сформулирован для открытых систем, находящихся в стационарном неравновесном состоянии (в состоянии «проточного равновесия»), то принцип Циглера представляет собой более общее требование, справедливое для *нестационарных* систем, эволюционирующих к своему стационарному состоянию. Когда система эволюционирует к своему стационарному состоянию, подчиняясь принципу максимума производства энтропии, *величина максимума* приращения энтропии с каждым последующим шагом уменьшается. Минимум производства энтропии Пригожина, по-существу, означает – *минимакс* в цепочке уменьшающихся максимумов ее приращений на каждом последующем шаге эволюции. Этот минимум характерен для *стационарного неравновесного состояния*, которое в термодинамике открытых систем играет ту же роль, что и равновесное состояние для изолированных систем.

Говоря об источниках, следует, прежде всего, отметить работу самого Циглера [2]. В русскоязычной литературе наиболее заметны работы Мартюшева Л. М.

и Селезнева В. Д., например, монография [4], где приводится хороший библиографический обзор. Однако в англоязычных источниках принципу максимальности производства энтропии (maximum entropy production principle – MEPP) уделено внимания больше. Среди этих публикаций , можно выделить такие, как [5–9].

В настоящее время формализация принципа Циглера в основном опирается на феноменологические представления [5], что производная термодинамической энтропии по времени может быть выражена через некоторые обобщенные величины – сопряженные термодинамические силы X_i и потоки J_i :

$$dS/dt = \sum_i X_i J_i \ . \tag{1}$$

Решение задачи сводится к выбору значений X_i и J_i, при которых dS/dt в необратимом процессе имеет положительный максимум. Задача упрощается, при использовании линейных соотношений Онзагера [10]:

$$J_i = \sum_{k=1}^{n} L_{ik} X_k,$$

где $L_{ik} = L_{ki} \ \left(i, k = 1, 2, \ldots, n\right)$.

На практике данный подход иногда вызывает трудности из-за феноменологического характера вводимых величин, а также принятого допущения о линейном характере соотношений. Поиск альтернативного варианта формализации упомянутого принципа можно рассматривать как актуальную задачу, имеющую практическую направленность.

Терминология, используемая ниже, позволяет без обязательной привязки к неравновесной термодинамике, в недрах которой и родился принцип максимальности производства энтропии, достаточно обоснованно подойти к его более широкой трактовке, с возможностью его использования для анализа других сложных систем – экономических, экологических, социальных и т. п.

Стоит обратить внимание, что подавляющее большинство упомянутых макросистем представляют собой объекты, у которых на некотором ограниченном множестве «носителей» распределено ограниченное множество «ресурсов» [11, 12]. Между молекулами газа – распределена энергия, между галактиками – их масса, между людьми – материальные блага, между городами – их жители. Указанные термины удобно использовать для анализа некоторой абстрактной системы, которая могла бы относиться к самому широкому кругу задач.

3. Цель и задачи исследования

Цель настоящей статьи – получить уравнения эволюции некоторой универсальной неравновесной изолированной макросистемы, подчиненной принципу максимальности производства энтропии, выявить ее основные свойства.

В статье решаются такие задачи как:

а) разработка альтернативного способа формализации данного принципа, исходя из общих комбинаторных представлений;

б) формализация определения «внутрисистемного» времени;

в) вывод уравнений эволюции для функции распределения числа элементов замкнутой неравновесной системы, подчиняющейся принципу максимальности производства энтропии;

г) доказательство теоремы о свойстве указанной функции распределения*;*

д) определение динамического инварианта процесса эволюции таких систем.

4. Формализация принципа максимальности производства энтропии

В статье рассматриваются замкнутые макросистемы (без обмена «носителями» и «ресурсами» с внешней средой). Под эволюцией системы понимается процесс последовательного изменения ее промежуточных неравновесных макросостояний: от текущего – до равновесного, с максимальным значением энтропии. Предполагается, что рассматриваемый процесс эволюции протекает при неизменных ограничениях.

Схема описания процесса эволюции выбрана для наглядности дискретной и одномерной. Это не влияет на возможность ее обобщения, позволяя сосредоточиться, главным образом, на основных идеях подхода.

Вначале рассмотрим неравновесную замкнутую систему. На k-м шаге эволюции она состоит из N «носителей», среди которых неравномерно распределено количество E «ресурсов». Каждый отдельный «носитель» располагает своей индивидуальной порцией ε_i этого «ресурса». Можно построить дискретную шкалу разбиения всего диапазона ε на M равных интервалов размером $\Delta\varepsilon$ со значениями $\varepsilon_1, \ldots \varepsilon_M$ (усреднёнными в пределах интервала). По этому признаку выделится M классов, в каждом из которых на k-м шаге содержится n_i^k – «носителей», обладающих равным количеством индивидуальной доли «ресурса» ε_i, и соответственно содержится объем «ресурсов», равный $E_i^k = n_i^k \cdot \varepsilon_i$.

Иными словами, можно выделить M ячеек «фазового» пространства с координатами $\varepsilon_1, \ldots \varepsilon_M$ (рис. 1), для которых, с учетом принятых обозначений, очевидны равенства:

$$\sum_{i=1}^{M} n_i^k = N^k = N \text{ – баланс «носителей»}, \tag{2}$$

$$\sum_{i=1}^{M} E_i^k = \sum_{i=1}^{M} n_i^k \varepsilon_i = E^k = E \text{ – баланс,}$$

«ресурсов», на *k-м шаге эволюции,* (3)

где верхний индекс k – номер шага; нижний индекс i – номер ячейки.

$$= \varepsilon \ / \ \varepsilon \text{ – количество ячеек фазового пространства,} \tag{4}$$

где $\Delta\varepsilon$ – выбранный фиксированный объем ячейки.

Стоит заметить, что при решении подобных задач неопределенным часто оказывается верхний предел суммирования M, вычисляемый по формуле (4). Так, если размер ячейки фазового пространства $\Delta\varepsilon$ может быть по условию задан (например, в физике – постоянная Больцмана k), то максимальное значение «фазовой координаты» ε_M, как правило, неизвестно. Иногда ε_M устремляют в бесконечность (например, при расчете статистической суммы в распределении Максвелла [13]). Этот искусственный прием хоть и удобен в вычислительных целях, но допустим лишь для быстро убывающих экспоненциальных распределений: именно таким и является распределение Максвелла. В то же время, для распределений с «тяжелым хвостом» (например, степенных распределений с показателем q) при расчете статистической суммы устремлять ε_M в бесконечность уже нельзя – это приведет либо к слишком завышенному значению суммы, либо – к его неограниченному росту при $q \le 1$.

Очевидно, величина максимальной фазовой координаты ε_M – тоже является продуктом эволюции системы, и способ ее определения также должен носить вариационный характер. Об одном таком способе – в уже упомянутой выше статье [12].

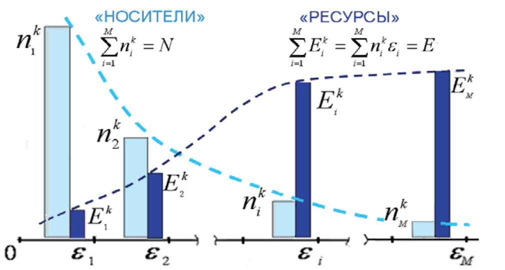

Рис. 1. Распределение «носителей» и «ресурсов» в фазовом пространстве замкнутой макросистемы на k-м шаге эволюции

Рассмотрим динамику распределения элементов внутри *замкнутой* неравновесной системы (рис. 2), находящейся на k-м шаге своего пути к равновесному состоянию $n^{\infty}(\varepsilon)$.

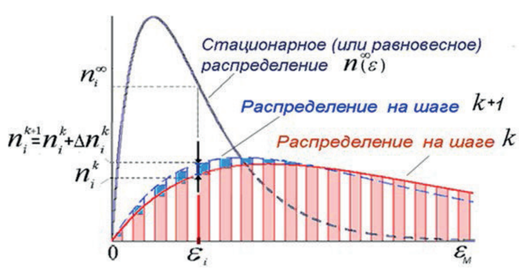

Рис. 2. Изменение количества элементов в i-й ячейке на k+1-м шаге эволюции

На $k+1$-м шаге, в i-й ячейке содержится

$$n_i^{k+1} = n_i^k + \Delta n_i^k \quad \text{– «носителей»}$$

и

$$E_i^{k+1} = E_i^k + \Delta E_i^k = E_i^k + \Delta n_i^k \cdot \varepsilon_i \quad \text{– «ресурсов».}$$

Для замкнутой системы обмен с внешней средой «носителями» и «ресурсами» отсутствует, поэтому:

$$\sum_{i=1}^{M} \Delta n_i^k = \Delta N^k = 0\,, \tag{5}$$

$$\sum_{i=1}^{M} \Delta n_i^k \cdot \varepsilon_i = \sum_{i=1}^{M} \Delta E_i^k = \Delta E^k = 0\,. \tag{6}$$

В основе вариационного энтропийного принципа лежит идея Больцмана, что система из множества доступных ей макросостояний чаще всего «выбирает» такое из них, которое может быть реализовано максимальным числом различных микросостояний. Образно говоря, реализуется такая в*нешняя* конфигурация системы, которая обладает наибольшим количеством *внутренних* комбинаторных вариантов, способных ее воспроизвести.

Мощность (кардинальное число) множества микросостояний, благоприятных данному макросостоянию – есть статистический вес W, а его логарифм – есть *энтропия Больцмана*:

$$S = \ln W. \tag{7}$$

(Обычно умножается на константу k≈1,38×$\times 10^{-23}$ Дж/град, которую выбором размерных величин можно превратить в единицу).

Используя некоторые положения теории разбиений [14] и принятые в начале статьи термины, *статистический вес* W *можно определить, как число упорядоченных разбиений* $R(n_1, n_2, ..., n_M)$ на M непересекающихся подмножеств мощности n_i, таких, что $\sum_{i=1}^{M} n_i = N$. Тут индекс $<k>$ опущен.

Число упорядоченных разбиений совпадает с общим числом перестановок, за исключением количества тривиальных перестановок внутри каждого подмножества:

$$W = R(n_1, n_2, ..., n_M) = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{M} n_i!}. \tag{8}$$

Далее, применяя к (8) формулу Стирлинга:

$$\ln m! \approx m \cdot (\ln m - 1), \tag{9}$$

можно *энтропию Больцмана* представить как:

$$S = \sum_{i=1}^{M} n_i \cdot \ln N - \sum_{i=1}^{M} (n_i \ln n_i),$$

$$\text{или } H = \frac{S}{N} = -\sum_{i=1}^{M} \left(\frac{n_i}{N} \ln \frac{n_i}{N} \right). \tag{10}$$

В соответствии с определением вероятности, основанном на непосредственном ее подсчете [15], отношение:

$$\frac{n_i}{N} = p_i \tag{11}$$

представляет собой вероятность того, что случайно обнаруженный элемент, относится к i-й ячейке распределения. Действительно, ввиду большого количества элементов макросистемы, обнаружение без повторения одного из них допустимо рассматривать, как случайное событие, имеющее M возможных исходов. Причем, для исхода с i-м номером благоприятными являются n_i равновероятных элементарных событий, из их общего числа N.

Таким образом, соотношение (10) приобретает форму энтропии Шеннона:

$$H = -\sum_{i=1}^{M} p_i \cdot \ln p_i \,. \tag{12}$$

Несмотря на то, что H носит узкое название *информационной* энтропии, как видно, выражения (10) и (12) могут быть получены из анализа достаточно общей схемы.

Можно подытожить, что энтропия Больцмана (7) и тесно связанная с ней энтропия Шеннона (выражения (11), (12)) с точностью до константы определяются, как логарифм кардинального числа класса м**и**кросостояний, воспроизводящих данное м**а**кросостояние, и не зависят от природы «носителей» и «ресурсов» рассматриваемой макросистемы. Поэтому данные формы энтропии можно рассматривать как *эквивалентные инструменты, пригодные для анализа не только термодинамических, или информационных, но и более широкого круга макросистем*.

Приращение энтропии на k-м шаге эволюции замкнутой системы можно записать, используя (10) и принятые на рис. 2 обозначения. Для двух последовательных распределений $n^k(\varepsilon)$ и $n^{k+1}(\varepsilon)$ разность энтропии равна:

$$\Delta H^k = H^{k+1} - H^k = -\sum_{i=1}^{M} \frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{N} \times \\ \times \ln \frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{N} + \sum_{i=1}^{M} \frac{n_i^k}{N} \cdot \ln \frac{n_i^k}{N} \tag{13}$$

или

$$\Delta H^k = -\sum_{i=1}^{M} \frac{\Delta n_i^k}{N} \cdot \ln \frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{N} - \sum_{i=1}^{M} \frac{n_i^k}{N} \cdot \ln \frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{n_i^k} \,. \tag{14}$$

Выбирая Δn_i^k достаточно малым, таким, что $\ln \frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{n_i^k} \approx \frac{\Delta n_i^k}{n_i^k}$, приращение энтропии на k – м шаге можно представить, как:

$$\Delta H^k = -\sum_{i=1}^{M} \frac{\Delta n_i^k}{N} \cdot \ln \frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{N} - \sum_{i=1}^{M} \frac{\Delta n_i^k}{N} \,. \tag{15}$$

Для замкнутой неравновесной системы второе слагаемое в выражении (15) равно нулю.

Контролируемый размер шага в процессе производства энтропии обычно рассматривают, как некоторый промежуток времени, за который происходит ее приращение (см. (1)). В настоящей статье, в качестве размера шага предлагается рассматривать величину параметра, который в неравновесной системе отражает порции внутренних нетривиальных перестановок. Таким параметром может быть *среднее квадратичное приращений количества элементов в ячейках фазового пространства:*

$$\bar{\Delta} n^k = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \left(\Delta n_i^k\right)^2} \,. \tag{16}$$

Формализм для принципа максимума производства энтропии излагаемый ниже, близок к идеям Джейнса, отличаясь видом анализируемого функционала и спецификой уравнений связи.

Он представляет собой процедуру определения такой функции $\Delta n^k = f(\varepsilon)$, при которой функционал $\Delta H^k\{f(\varepsilon)\}$ достигает *условного максимума на каждом контролируемом шаге* эволюции. В дискретном представлении задача эквивалентна нахождению условного максимума функции многих переменных $\Delta H^k(\Delta n_1^k,...\Delta n_M^k)$ в присутствии ограничений, задаваемых уравнениями связи. Для ее решения удобен метод множителей Лагранжа, где поиск *условного* экстремума $\Delta H^k(\Delta n_1^k,...\Delta n_M^k)$ сводится к определению *безусловного* экстремума новой функции $\Phi^k(\Delta n_1^k,...\Delta n_M^k)$, аддитивно включающей искомую функцию ΔH^k и ограничения, взвешенные множителями Лагранжа α, β, γ..., которые впоследствии определяются из уравнений связи. В задаче, сформулированной выше, ограничениями выступают условия (5), (6) и (16), тогда;

$$\Phi^k(\Delta n_1^k,...\Delta n_M^k) = \Delta H^k(\Delta n_1^k,...\Delta n_M^k) + \alpha \cdot \left(\sum_{i=1}^{M} \frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{N} - 1 \right) + ... \\ ... + \beta \cdot \left(\sum_{i=1}^{M} \frac{\left(n_i^k + \Delta n_i^k\right) \cdot \varepsilon_i}{N} - \frac{E}{N} \right) + \\ + \gamma \cdot \left(\sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \left(\frac{\Delta n_i^k}{N} \right)^2} - \left(\frac{\bar{\Delta} n^k}{N} \right) \right). \tag{17}$$

Экстремум $\Phi^k(\Delta n_1^k,...\Delta n_M^k)$ определяется из условия:

$$\frac{\partial \Phi^k}{\partial \Delta n_1^k} = 0 \,,..., \frac{\partial \Phi^k}{\partial \Delta n_M^k} = 0.$$

Тогда из (17), с учетом выражения (14), получим:

$$\ln \frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{N} = -1 + \alpha + \beta \cdot \varepsilon_i + \frac{\gamma}{M} \cdot \frac{\Delta n_i^k}{\bar{\Delta} n^k}. \tag{18}$$

Это равенство обеспечивает максимум ΔH^k, так как его вторая производная – всегда отрицательна (множитель γ, как видно из (24), всегда меньше нуля).

Следующей задачей является определение для (18) неизвестных значений α, β, γ.... Вначале определим слагаемые: $-1 + \alpha + \beta \cdot \varepsilon_i$.

Так как выражение (18) справедливо для произвольного размера шага $\bar{\Delta} n^k$, имеем право рассматривать крайний случай – когда этот размер максимален, и после исходного k-го состояния система сразу же переходит в равновесное состояние с распределением n_i^∞. Соответственно в каждой ячейке приращение $\Delta n_i^k = \delta n_i^k$, где

$$\delta n_i^k = n_i^\infty - n_i^k. \tag{19}$$

Тогда из (18), получим:

$$-1 + \alpha + \beta \cdot \varepsilon_i = \ln \frac{n_i^\infty}{N} - \frac{\gamma}{M} \cdot \frac{\delta n_i^k}{\bar{\delta} n^k}. \tag{20}$$

Среднее квадратичное $\bar{\delta}n^k$ определяется аналогично, как в формуле (16):

$$\bar{\delta}n^k = \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(\delta n_i^k\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(n_i^\infty - n_i^k\right)^2}\ . \qquad (21)$$

Равновесное распределение n_i^∞ считается известным, так как его можно заранее определить обычным способом, с использованием формализма Джейнса, через требование условного максимума энтропии для равновесного состояния. Исходное распределение n_i^k также считается известным.

Подставляя (20) в исходное равенство (18), получим выражение для приращения количества элементов в i-й ячейке, на k-м шаге эволюции изолированной системы:

$$\frac{\Delta n_i^k}{\Delta\tau^k} = \frac{\delta n_i^k}{\delta\tau^k} - N\cdot\ln\frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{n_i^\infty}, \qquad (22)$$

где приняты обозначения:

$$\Delta\tau^k = -\frac{\bar{\Delta}n^k/N}{\gamma/M},\ \delta\tau^k = -\frac{\bar{\delta}n^k/N}{\gamma/M}.$$

Множитель γ, можно определить, умножая выражение (20) на $\delta n_i^k/\bar{\delta}n^k$ и суммируя по числу M ячеек. А, так как для замкнутых систем выполняются условия (5), (6), то:

$$\sum_{i=1}^{M}\frac{\delta n_i^k}{\bar{\delta}n^k}\left(-1+\alpha+\beta\cdot\varepsilon_i\right) = \left(-1+\alpha\right)\frac{\delta N^k}{\bar{\delta}n^k} + \beta\cdot\frac{\delta E^k}{\bar{\delta}n^k} = 0,$$

следовательно,

$$\gamma = \sum_{i=1}^{M}\left(\frac{\delta n_i^k}{\bar{\delta}n^k}\ln\frac{n_i^\infty}{N}\right). \qquad (23)$$

Множитель γ, можно представить и в иной форме, аналогично умножая (18) на $\Delta n_i^k/\bar{\Delta}n^k$, и тоже, суммируя по M. Тогда, с учетом определения (14), получим:

$$\frac{\gamma}{M} = \frac{1}{\bar{\Delta}n^k}\sum_{i=1}^{M}\left(\frac{\Delta n_i^k}{N}\ln\frac{n_i^k+\Delta n_i^k}{N}\right)\frac{N}{M} = -\frac{\Delta H^k/M}{\bar{\Delta}n/N}. \qquad (24)$$

Приращение энтропии ΔH^k на k – м шаге можно получить, решив совместно равенства (23) и (24):

$$\Delta H^k = -\frac{\bar{\Delta}n^k}{\bar{\delta}n^k}\sum_{i=1}^{M}\left(\frac{\delta n_i^k}{N}\ln\frac{n_i^\infty}{N}\right). \qquad (25)$$

Безразмерное «внутрисистемное» время

Введенный в (22) параметр $\Delta\tau^k = -\frac{\bar{\Delta}n^k/N}{\gamma/M}$ отражает определенный объем необратимых внутрисистемных изменений на k-м шаге эволюции. Контролируя $\Delta\tau^k$, можно контролировать этот объем. Порции приращений $\Delta\tau^k$ можно рассматривать как интервалы, характеризующие протекание процесса эволюции, а накопленную сумму этих интервалов $\sum_k\Delta\tau^k$ – как продолжительность процесса. Это дает определенные основания рассматривать параметр $\Delta\tau^k$ как некоторое безразмерное *«внутрисистемное» время*. Используя обозначения (22), а также формулы (23) и (24), выражения для этих величин можно представить как:

$$\Delta\tau^k = \frac{\left(\bar{\Delta}n^k/N\right)^2}{\Delta H^k/M}, \qquad (26)$$

или

$$\Delta\tau^k = \frac{\bar{\Delta}n^k/N}{-\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\frac{\delta n_i^k}{\bar{\delta}n^k}\ln\frac{n_i^\infty}{N}}.$$

Аналогично определим выражение для безразмерного «внутрисистемного» времени прихода в равновесное состояние:

$$\delta\tau^k = \frac{\bar{\delta}n^k/N}{-\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\frac{\delta n_i^k}{\bar{\delta}n^k}\ln\frac{n_i^\infty}{N}}. \qquad (27)$$

Как видно из (26), интервал безразмерного внутрисистемного времени $\Delta\tau^k$ равен, образно говоря, *отношению среднего квадрата от количества внутренних нетривиальных переходов* $\left(\bar{\Delta}n^k/N\right)^2$ *к удельному объему происходящих при этом необратимых изменений, выраженных приращением энтропии* $\Delta H^k/M$.

Это в какой-то степени позволяет подойти к объяснению причины, почему в оптике «работает» принцип минимального времени Ферма. Выражение (26) подталкивает к мысли, что принцип Ферма – есть всего лишь проявление более общего принципа – принципа максимума производства энтропии.

5. Некоторые результаты, полученные на основе предложенного способа формализации

Используя предложенный способ формализации принципа максимального производства энтропии, удалось получить следующее.

Уравнение эволюции системы, выраженное через «внутрисистемное» время τ

Эволюция изолированной системы может быть описана с помощью соотношения (22). Устремляя $\bar{\Delta}n^k$ к нулю, промежуток $\Delta\tau^k$ может быть выбран сколь угодно малым: $d\tau^k = \lim_{\bar{\Delta}n^k\to 0}\Delta\tau^k$. Тогда в какой-то момент времени, который в дискретном представлении соответствует k-му шагу эволюции, выражение (22) можно представить как: $\frac{\Delta n_i^k}{\Delta\tau^k} = \frac{\delta n_i^k}{\delta\tau^k} - N\cdot\ln\frac{n_i^k}{n_i^\infty}$. Это равенство справедливо для всех значений k, следовательно – в любой момент внутрисистемного времени τ можно записать уравнение для изменения приращения числа элементов в i-й ячейке изолированной системы:

$$\frac{1}{N}\frac{dn_i(\tau)}{d\tau} = a(\tau)\cdot\frac{n_i^\infty - n_i(\tau)}{N} - \ln\frac{n_i(\tau)}{n_i^\infty}, \qquad (28)$$

где $a(\tau) = -\dfrac{N\cdot\sum_{i=1}^{M}\left(n_i^\infty - n_i(\tau)\right)\cdot\ln\dfrac{n_i^\infty}{N}}{\sum_{i=1}^{M}\left(n_i^\infty - n_i(\tau)\right)^2}$ (здесь учтены формулы (21) и (27)).

Это и есть записанное через «внутрисистемное» время уравнение эволюции замкнутой неравновесной макросистемы при условии подчинения принципу максимальности производства энтропии.

Уравнение эволюции системы, выраженное через обычное время t

Умножив выражение (22) на $\Delta\tau^k = -\dfrac{\bar{\Delta}n^k / N}{\gamma / M}$, и разделив его на промежуток общепринятого времени Δt, с учетом (23) получим:

$$\frac{\Delta n_i^k}{\Delta t} = \frac{\bar{\Delta}n^k}{\Delta t}\cdot\left(\frac{\delta n_i^k}{\bar{\delta}n^k} - \frac{\gamma}{M}\cdot\ln\frac{n_i^k + \Delta n_i^k}{n_i^\infty}\right).$$

Перейдя к терминам времени, уже можно отказаться от верхнего индекса, понимая, что $\Delta n_i^k = \Delta n_i(t)$ и $\delta n_i^k = \delta n_i(t)$. Тогда их среднеквадратичные значения (по аналогии с (16) и (21)) тоже соответственно равны:

$$\bar{\Delta}n(t) = \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(\Delta n_i(t)\right)^2} \quad \text{и}$$

$$\bar{\delta}n(t) = \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(\delta n_i(t)\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(n_i^\infty - n_i(t)\right)^2}, \qquad (29)$$

а, согласно (24): $\dfrac{\gamma}{M} = -\dfrac{\Delta H(t)/M}{\bar{\Delta}n(t)/N}$.

Отсюда предельным переходом получим *уравнение эволюции системы, выраженное через обычное время*:

$$\frac{dn_i(t)}{dt} = \alpha(t)\cdot\left(n_i^\infty - n_i(t)\right) - \frac{N}{M}\frac{dH(t)}{dt}\cdot\ln\frac{n_i(t)}{n_i^\infty}. \qquad (30)$$

Здесь введено обозначение:

$$\alpha(t) = \frac{1}{\bar{\delta}n(t)}\cdot\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\bar{\Delta}n(t)}{\Delta t} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{M}\left(\dfrac{dn_j(t)}{dt}\right)^2}{\sum_{j=1}^{M}\left(n_j^\infty - n_j(t)\right)^2}}. \qquad (31)$$

Входящее в (30) значение *производства энтропии* $\dfrac{dH(t)}{dt}$ определим, используя выражение (25), учитывая при этом обозначения (29). Тогда:

$$\frac{\Delta H(t)}{\Delta t} = -\frac{1}{\bar{\delta}n(t)}\cdot\frac{\bar{\Delta}n(t)}{\Delta t}\cdot\sum_{i=1}^{M}\left(\frac{\delta n(t)}{N}\ln\frac{n_i^\infty}{N}\right).$$

Устремляя Δt к нулю, получим удобное для практического использования *уравнение эволюции для распределения в неравновесной замкнутой системе:*

$$\frac{dn_i(t)}{dt} = \alpha(t)\cdot\left[n_i^\infty - n_i(t) + \beta(t)\cdot\left(\ln n_i^\infty - \ln n_i(t)\right)\right]. \qquad (32)$$

Здесь введено еще одно обозначение:

$$\beta(t) = \frac{N}{M}\cdot\sum_{j=1}^{M}\frac{n_j^\infty - n_j(t)}{N}\cdot\ln\frac{n_j^\infty}{N}. \qquad (33)$$

Если макросистема близка к равновесному состоянию, уравнение (32) в пределе стремится к известному линейному виду:

$$\frac{dn_i(t)}{dt} \approx c\cdot\left(n_i^\infty - n_i(t)\right),$$

имеющему экспоненциальное решение.

Примечательно, что траектория эволюции замкнутой системы целиком определяется характером исходного распределения $n_i(t)$ и характером распределения в равновесном состоянии n_i^∞. Оба эти распределения считаются известными (функция n_i^∞ может быть предварительно найдена в соответствии с формализмом Джейнса, как решение на условный максимум энтропии для равновесного состояния системы).

Таким образом, вышеприведенный способ формализации принципа максимальности производства энтропии, основанный на достаточно общих посылках, без использования феноменологических конструкций, позволяет получить уравнение эволюции (32). Оно выявляет то обстоятельство, что вдали от равновесия зависимость становится существенно нелинейной. *В этом случае значительную роль играет уже не разность величин* $n_i^\infty - n_i(t)$, *а умноженная на производство энтропии разность логарифмов:* $\ln n_i^\infty - \ln n_i(t)$.

Возможно, этот факт и объясняет природу феномена «логарифмических очков» при субъективном восприятии человеком количественных величин. Ведь известен логарифмический характер некоторых законов психики (Госсена, Вебера-Фехнера). Пожалуй, вполне правдоподобной могла бы выглядеть гипотеза, что логарифмический масштаб субъективного восприятия у человека обусловлен существенной удаленностью его психики как сложной системы от ее, образно говоря, «равновесного» состояния.

Читателю, которому интересны эти вопросы, можно рекомендовать замечательную книгу Касьянова В. А. – «Субъективный анализ» [16].

Теорема о постоянстве суммы логарифмов

Можно показать, что справедлива следующая теорема. *В изолированной (замкнутой) неравновесной системе, эволюционирующей в соответствии с принципом максимальности производства энтропии,* в *каждый момент времени* t *выполняется условие:*

$$\sum_{i=1}^{M}\ln n_i(t) = \text{const} = \sum_{i=1}^{M}\ln n_i^\infty. \qquad (34)$$

Доказательство вытекает непосредственно из соотношения (32). Суммируя обе части этого равенства по числу всех M ячеек, и учитывая, что для изолированной неравновесной системы: $\sum_{i=1}^{M} dn_i(t) = 0$,

$\sum_{i=1}^{M}\left(n_i^{\infty}-n_i(t)\right)=0$, то для любого времени t из (32) следует: $\sum_{i=1}^{M}\left(\ln n_i^{\infty}-\ln n_i(t)\right)=0$. А, значит, справедливо утверждение теоремы (29).

Таким образом, из всех возможных траекторий эволюции изолированной неравновесной системы, при условии максимальности производства энтропии, реализуется такое распределением элементов, что изменение суммы логарифмов $\sum_{i=1}^{M}\ln\frac{n_i(t)+dn_i(t)}{N}$ в ячейках с положительным приращением $dn(t)^{(\ )}$, компенсируется изменением остальной части суммы в ячейках с отрицательным приращением $dn_i(t)^{(-)}$.

Условие (29) можно трактовать также как постоянство суммы логарифмов вероятностей распределения в момент времени t:

$$\sum_{i=1}^{M}\ln p_i(t)=\text{const}.$$

Здесь $p_i(\tau)=\frac{n_i(t)}{N}$ – вероятность того, что в момент времени t взятый наугад один из N элементов системы окажется «жителем» i – й ячейки. Если $p_i(\tau)$ разделить на ширину ячейки $\Delta\varepsilon=\varepsilon_M/M$ (см. формулу (4)), впоследствии устремляя ее к нулю, получим плотность вероятности с координатой ε, в момент t:

$$f(t,\varepsilon)=\lim_{\Delta\varepsilon\to 0}\frac{p_i(t)}{\Delta\varepsilon}. \quad (35)$$

Тогда доказанная выше теорема (29) может быть сформулирована и для непрерывных распределений. *Если неравновесная замкнутая система в соответствии с принципом максимума производства энтропии движется к своему равновесному состоянию, то в любой момент времени t выполняется условие:*

$$\int_0^{\varepsilon_M}\ln f(t,\varepsilon)d\varepsilon=\text{const}=I. \quad (36)$$

Величину I можно рассматривать как *динамический инвариант* процесса эволюции системы. Его значение можно определить, имея распределение $f^{\infty}(\varepsilon)$ для равновесного состояния:

$$I=\int_0^{\varepsilon_M}\ln f^{\infty}(\varepsilon)d\varepsilon.$$

Связь с теоремой Лиувилля о сохранении фазового объема.

Из (36) следует равенство нулю производной по времени:

$$\int_0^{\varepsilon_M}\frac{1}{f(t,\varepsilon)}\left(\frac{\partial f(t,\varepsilon)}{\partial t}+\frac{\partial f(t,\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\frac{d\varepsilon}{dt}\right)d\varepsilon=0. \quad (37)$$

Множитель $\frac{1}{f(t,\varepsilon)}$ всегда положителен, поэтому равенство (37) справедливо, если выполнено требование:

$$\frac{\partial f(t,\varepsilon)}{\partial t}+\frac{\partial f(t,\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\frac{d\varepsilon}{dt}=0,$$

представляющее собой одномерную версию теоремы Лиувилля.

По условию сформулированной выше задачи рассматривалось распределение на множестве «носителей» лишь одного вида «ресурса», где ε – фазовая координата этого распределения. В общем случае на одном и том же множестве «носителей» могут быть распределены различные виды «ресурсов», каждый из которых формирует свои фазовые координаты $\mu,\nu\ldots$. Тогда, при условии взаимной независимости этих распределений, вместо уравнения (37), нужно было бы записать:

$$\int_0^{\varepsilon_M}\frac{1}{f(t,\varepsilon,\mu\ldots)}\left(\frac{\partial f(t,\varepsilon,\mu,\ldots)}{\partial t}+\frac{\partial f(t,\varepsilon,\mu,\ldots)}{\partial\varepsilon}\frac{d\varepsilon}{dt}+\frac{\partial f(t,\varepsilon,\mu,\ldots)}{\partial\mu}\frac{d\mu}{dt}+\ldots\right)d\varepsilon\cdot d\mu\ldots=0. \quad (38)$$

Учитывая, что множитель $\frac{1}{f(t,\varepsilon,\mu\ldots)}$ имеет положительный знак по определению вероятности, условие (38) выполняется, если:

$$\frac{\partial f(t,\varepsilon,\mu,\ldots)}{\partial t}+\frac{\partial f(t,\varepsilon,\mu,\ldots)}{\partial\varepsilon}\frac{d\varepsilon}{dt}+\frac{\partial f(t,\varepsilon,\mu,\ldots)}{\partial\mu}\frac{d\mu}{dt}+\ldots=0.$$

Последнее равенство, представляет собой многомерный вариант теоремы Лиувилля. Таким образом, *если неравновесная замкнутая система в соответствии с принципом максимума производства энтропии эволюционирует к своему равновесному состоянию, то в любой момент времени t выполняется условие теоремы Лиувилля о сохранении фазового объема.*

6. Выводы

Наряду с известным и хорошо формализованным принципом максимума энтропии, позволяющим рассчитать параметры равновесной системы, менее популярным для практического пользования остается принцип максимума производства энтропии Циглера, который определяет траекторию движения системы к своему равновесию. Он мог бы стать значительно более востребованным, при условии развития его формальных основ и получения удобного алгоритма применения.

В настоящей статье обосновано использование отдельных форм энтропии для анализа не только термодинамических, но и других макросистем. Построена формальная процедура прямого исчисления максимума производства энтропии на произвольном шаге эволюции. Получены соотношения для динамики распределения числа элементов замкнутой неравновесной системы, развивающейся в соответствии с принципом максимального производства энтропии. Примечательно, что траектория развития такой системы целиком определяется характером исходного распределения

$n_i(t)$, а также характером распределения в состоянии равновесия системы n_i^{∞}. Показано, что вдали от равновесного состояния определяющую роль в уравнении эволюции играет не разность этих величин, а разность их логарифмов.

Дано математическое определение «внутрисистемного» времени.

Доказана теорема, утверждающая, что для замкнутой неравновесной системы, развивающейся в соответствии с принципом максимального производства энтропии, в каждый момент времени реализуется такое распределение элементов по ячейкам фазового пространства, которое сохраняет постоянной сумму из логарифмов их количества. Приведена ее формулировка для случая непрерывных распределений. Показана связь с теоремой Лиувилля о сохранении фазового объема.

Определен динамический инвариант процесса эволюции замкнутых систем, эволюционирующих в соответствием принципа максимальности производства энтропии.

Литература

1. Jaynes, E. T. Where do we Stand on Maximum Entropy?' in The Maximum Entropy Formalism [Text] / E. T. Jaynes; R. D. Levine, M. Tribus (Ed.). – M. I. T. Press, Cambridge, 1979. – 105 p.
2. Циглер, Г. Экстремальные принципы термодинамики необратимых процессов и механика сплошной среды [Текст] / Г. Циглер. – М.: Мир, 1966. – 134 с.
3. Пригожин, И. Введение в термодинамику неравновесных процессов [Текст] / И. Пригожин. – М.: Изд-во иностр. лит., 1960. – 127 с.
4. Мартюшев, Л. М. Принцип максимальности производства энтропии в физике и смежных областях [Текст] / Л. М. Мартюшев, В. Д. Селезнев. – Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2006. – 83 с.
5. Martyushev, L. Maximum entropy production principle in physics, chemistry and biology [Text] / L. Martyushev, V. Seleznev // Physics Reports. – 2006. – Vol. 426, Issue 1. – P. 1–45. doi: 10.1016/j.physrep.2005.12.001
6. Ozawa, H. The second law of thermodynamicsand the global climate system: A review of the maximum entropy production principle [Text] / H. Ozawa, A. Ohmura, R. D. Lorenz, T. Pujol // Reviews of Geophysics. – 2003. – Vol. 41, Issue 4. – P. 1–24. doi: 10.1029/2002rg000113
7. Kleidon, A. Non-equilibrium Thermodynamics and the Production of Entropy: Life, Earth and Beyond, Springer Verlag, Heidelberg principle [Text] / A. Kleidon, R. D. Lorenz, (Eds.) // Reviews of Geophysics. – 2005. – Vol. 41. – P. 1018–1041.
8. Dewar, R. C. Maximum entropy production and the fluctuation theorem [Text] / R. C. Dewar // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2005. – Vol. 38, Issue 21. – P. L371–L381. doi: 10.1088/0305-4470/38/21/l01
9. Niven, R. K. Steady state of a dissipative flow–controlled system and the maximum entropy production principle [Text] / R. K. Niven // Physical Review E. – 2009. – Vol. 80, Issue 2. – P. 021113. doi: 10.1103/physreve.80.021113
10. Гроот, С. Неравновесная термодинаміка [Текст] / С. Д. Грот, П. Мазур. – М.: Мир, 1964. – 456 с.
11. Делас, Н. И. Предельно гиперболический закон распределения в самоорганизованных системах [Текст] / Н. И. Делас, В. А. Касьянов // Восточно-Евроропейский журнал передовых технологий. – 2012. – Т. 4, № 4 (58). – С. 13–18. – Режим доступа: http://journals.uran.ua/eejet/article/view/4901/4543
12. Делас, Н. И. Эволюция сложных систем с гиперболическим распределением [Текст] / Н. И. Делас // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2013. – Т. 3, № 4 (63). – С. 67–73. – Режим доступа: http://journals.uran.ua/eejet/article/view/14769/12571
13. Левич, В. Г. Курс теоретической физики. Т. 1 [Текст] / В. Г. Левич. – М.: «Наука», 1969. – 912 с.
14. Эндрюс, Г. Теория разбиений [Текст] / Г. Эндрюс; пер. с англ. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. – 256 с.
15. Вентцель, Е. С. Теория вероятностей [Текст] / Е. С. Вентцель. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1969. – 576 с.
16. Касьянов, В. А. Субъективный анализ [Текст] / В. А. Касьянов. – Киев: НАУ, 2007. – 512 с.