Лекция 2: Критерии упорядоченности в открытых системах. Энтропия и информация открытых систем

Энтропия Больцмана. Разряженный газ

Людвиг Больцман – кинетическое уравнение для разряженного газа – принципиальное изменение модели газа:

- Вместо N частиц газа, совершающего движение в $6N$-мерном фазовом пространстве координат и импульсов частиц – модель шестимерной сплошной среды координат и импульсов $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$
- При этом состояние газа характеризуется не набором частиц, а распределением их в шестимерной сплошной среде

Кинетическое уравнение Больцмана

Введем обозначения:

- $dx = d\mathbf{r}d\mathbf{p}$ – для бесконечно малого объема, охватывающего точки $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$
- $nf(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{p}$ – число частиц, которое в момент времени t находится в объеме $d\mathbf{r}d\mathbf{p}$
- $n = \dfrac{N}{V}$ – среднее число частиц в единице объема

Условие нормировки:

$$n \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{p} = N$$

Лекция 2: Критерии упорядоченности в открытых системах. Энтропия и информация открытых систем

Кинетическое уравнение Больцмана

- Уравнение для функции распределения f частиц разряженного газа в пространстве координат и импульсов – кинетическое уравнение (уравнение Больцмана).

$$f(\mathbf{r},\mathbf{p}) = C\exp\left(-\frac{H(\mathbf{r},\mathbf{p})}{k_B}\right) \qquad (1)$$

$$H(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \qquad (2)$$

C – находится из условия нормировки.

Энтропия Больцмана

Больцман ввел понятие энтропии неравновесного процесса:

$$S(t) = -k_B n\int \ln[nf(\mathbf{r},\mathbf{p},t)]f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)d\mathbf{r}d\mathbf{p} \qquad (3)$$

Основываясь на кинетическом уравнении, Больцман доказал Н-теорему. Она выражается неравенством:

$$\frac{dS(t)}{dt} \geq 0$$

- При временной эволюции **внешне замкнутой системы** к равновесному состоянию **энтропия возрастает** и остается неизменной при достижении равновесного состояния.
- **Энтропия является характеристикой меры степени неопределенности (хаотичности).**

Замкнутая система

Замкнутая система – система, которая изолирована от внешних тел адиабатической оболочкой.

В замкнутой системе остается постоянной при описании с помощью уравнения Больцмана не полная энергия E, а лишь ее среднее значение $\langle E\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle = const$

Внутренняя незамкнутость связанна с тем, что в теории Больцмана газ представляется в виде сплошной среды, при этом теряется информация о движении частиц на масштабах меньших $d\mathbf{r}d\mathbf{p}$ (масштабах меньших точки)

7

Функционал Ляпунова для газа Больцмана

Переформулированная Н-теорема на языке функционала Ляпунова Λ_S

$$\Lambda_S = S_0 - S(t) \qquad (4)$$

энтропия равновесного состояния

неравновесная энтропия в момент времени t

Функционал Ляпунова удовлетворяет двум противоположным неравенствам:

$$\left.\begin{aligned} \Lambda \geq 0 \\ \frac{d\Lambda}{dt} \leq 0 \end{aligned}\right\}$$

8

Функционал Ляпунова для газа Больцмана

Докажите это сами:
Подставьте в выражение (4) соотношение для энтропии (3), воспользуйтесь условием постоянства средней энергии, а также известным неравенством:

$$\ln a \geq 1 - \frac{1}{a} \qquad a = \frac{f}{f_0}$$

$$\Lambda_S = k_B \int \ln \frac{f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{f_0(\mathbf{r},\mathbf{p})} f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \geq 0 \qquad (5)$$

$$\frac{d\Lambda_S}{dt} = \frac{d}{dt}(S_0 - S(t)) \leq 0 \qquad (6)$$

Т.о., Λ_S является функционалом Ляпунова, т.к. удовлетворяет двум противоположным неравенствам.

9

Теория устойчивости Ляпунова

- Наличие такого функционала означает, что состояние равновесия является **глобально устойчивым**. Это означает, что при любом отклонении системы от равновесного состояния системы возвращается к равновесию, которому отвечает максимум энтропии, т.е. максимум степени хаотичности.
- S (энтропия) – мера хаотичности при статистическом описании процессов.
- Этот вывод был сделан Больцманом для идеального газа.
- Покажем, что этот вывод справедлив при любом взаимодействии между частицами, но лишь для равновесного состояния.

10

Энтропия и теорема Гиббса

- **1902, Гиббс «Основные принципы статистической механики»**
- Функция распределения значений полного набора переменных N частиц при заданной температуре:

$$f_N(\mathbf{X}, \mathbf{a}, T)$$

- Она определена при произвольном взаимодействии между частицами, но лишь для равновесного состояния, когда задана температура T окружающих тел и набор внешних параметров **а** (объем системы, внешнее давление и т.д.)

11

Энтропия и теорема Гиббса

Энтропия выражается через равновесное распределение Гиббса

$$f_N(\mathbf{X})$$

полного набора $\mathbf{X}$ всех координат и импульсов частиц.

В общем случае существует функция распределения полного набора переменных системы N частиц в равновесном состоянии:

$$f_N(\mathbf{X}), \int f_N(\mathbf{X}) d\mathbf{X} = 1, \mathbf{X} = \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \ldots, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \ldots$$

12

Два типа физических условий, фигурирующих в теории Гиббса:

1) **Замкнутость рассматриваемой системы**.
Задано не только полное число частиц N, но и полная энергия E всех частиц.
- *микроканоническое* распределение Гиббса $f_N(\mathbf{X}, \mathbf{a}, E)$

2) **Система в термостате с заданной температурой *T***
- *каноническое* распределение Гиббса

$$f_N(\mathbf{X}, \mathbf{a}, T) = C \exp\left(-\frac{H(\mathbf{X}, \mathbf{a})}{k_B T}\right) \qquad (7)$$

Функция Гамильтона H определяется формулой (2)
Константа C находится из условия нормировки: $\int f_N d\mathbf{X} = 1$

13

Определение энтропии Гиббса

Энтропия Гиббса определяется средним значением логарифма функции распределения:

$$S_G(\mathbf{a},T) = -k_B \int \ln[f_N(\mathbf{X},\mathbf{a},T)] f_N(\mathbf{X},\mathbf{a},T) d\mathbf{X} \quad (8)$$

Дискретный набор переменных, характеризующий состояние системы:

n – набор квантовых чисел и E_n – собственные значения энергий (собственные значения оператора Гамильтона) рассматриваемой системы.

Квантовое каноническое распределение Гиббса:

$$f_n = C \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right), \sum f_n = 1 \quad (9)$$

Энтропия:

$$S = -k_B \sum f_n \ln f_n \quad (10)$$

14

Теорема Гиббса

Замечания:

- Внутренняя энергия определяется как среднее значение функции Гамильтона:

$$U(\mathbf{a},T) = \int H(\mathbf{X},\mathbf{a}) f_N d\mathbf{X} \quad (11)$$

- В равновесном состоянии справедливо каноническое распределение Гиббса

$$f_N(\mathbf{X},\mathbf{a},T)$$

- Обозначим через $f_N(\mathbf{X},t)$ некоторое распределение (неравновесное) переменных рассматриваемой системы.
- Неравновесное распределение $f_N(\mathbf{X},t)$ нормировано на 1.

15

Теорема Гиббса

- Сравнение значений энтропий равновесного и неравновесного состояний может производится только при одинаковых значениях средних энергий $\langle H(\mathbf{X},\mathbf{a})\rangle$.
- Тем самым набор неравновесных состояний ограничен условием, что средняя энергия такая же, как и для равновесного состояния, т.е с учетом (11):

$$\int H(\mathbf{X},\mathbf{a}) f_N(\mathbf{X},\mathbf{a},T) d\mathbf{X} = \int H(\mathbf{X},\mathbf{a}) f_N(\mathbf{X},T) d\mathbf{X} \quad (12)$$

Условия нормировки равновесной и неравновесной функции распределения также одинаковы:

$$\int f_N(\mathbf{X},\mathbf{a},T) d\mathbf{X} = \int f_N(\mathbf{X},t) d\mathbf{X} = 1 \quad (13)$$

16

Теорема Гиббса

Гиббс доказал, что при одинаковых нормировках (13) и средней энергии (12) энтропия равновесного состояния $S_G(\mathbf{a}, T)$ максимальна, т. е. выполняется условие:

$$S_G(\mathbf{a}, T) - S(t) = k_B \int \ln \frac{f_N(\mathbf{X}, t)}{f_N(\mathbf{X}, \mathbf{a}, T)} f_N(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X} \geq 0 \quad (14)$$

Знак «=» означает, что распределение $f_N(\mathbf{X}, t)$ совпадает с каноническим распределением $f_N(\mathbf{X}, \mathbf{a}, T)$.
Итак, теорема Гиббса утверждает, что энтропия принимает максимальное значение для равновесного состояния.

> **Так как энтропия – мера степени неопределенности, то равновесное состояние по теореме Гиббса является самым хаотичным.**

17

Теорема Гиббса

- Отличие от результата Больцмана – в уравнении Больцмана условие постоянства энергии является естественным свойством этого уравнения.
- При доказательстве теоремы Гиббса постоянство средней энергии $U(\mathbf{a}, T)$ является дополнительным условием, ограничивающим класс «произвольных» функций $f_N(\mathbf{X}, t)$.

18

Джозайя Уиллард Гиббс

Джозайя Уиллард Гиббс (1839—1903) — американский математик, физик и физикохимик, один из создателей векторного анализа, статистической физики, математической теории термодинамики.

Гиббс родился 11 февраля 1839 года в городе Нью-Хейвен (Коннектикут), в семье профессора теологии, работавшего в Йельском университете. В дальнейшем научная жизнь Гиббса также была связана с этим университетом.

В 1858 году Гиббс окончил Йельский университет, в 1863 году получил там же степень доктора философии, а в 1871 году — должность профессора.

Уиллард был задумчив и слаб здоровьем, что отдалило его от участия в шумной общественной жизни США. Он рано потерял родителей, унаследовав с двумя старшими сестрами дом и скромное состояние. В 1866 году они посетили Европу. Три года Гиббс посещал лекции европейских учёных, перенимая их образ мыслей, и возвратился домой скорее европейцем, чем американцем. Тихо живя вместе с сёстрами, Гиббс занимался домашним хозяйством и наукой. До конца жизни он оставался холостым.

Важность трудов Гиббса сразу же отметил Максвелл, но американская наука была слишком озабочена практическими вопросами, чтобы обращать внимание на его глубокие теоретические исследования. Он не оставил в ней крупного следа и даже не стал членом Американского физического общества. Его приложение термодинамики к физическим процессам породило статистическую механику, позже применённую в квантовой физике.

В 1901 Гиббс был награжден одной из самых больших и почётных наград международного научного сообщества его времени, вручавшейся только одному ученому в год, — Медалью Копли Королевского общества Лондона, за то, что он был "первым, кто применил второй закон термодинамики для исчерпывающего рассмотрения отношений между химической, электрической и термической энергией и объёмом внешней работы."[1] Эта цитата суммирует наибольший научный вклад Гиббса.

Учёный скончался в своем доме в Нью-Хейвене 28 апреля 1903 года.

19

Информация Шеннона (#1)

Клод Шеннон «Математическая теория связи» (1948)

Два определения информации.

1) Практически совпадает с определением энтропии Больцмана **S-информация** (по Климонтовичу).
Пусть $f(\mathbf{X})$ – есть безразмерная функция распределения значений безразмерной случайной величины **X**.
S-информация $I[\mathbf{X}]$(и энтропия Больцмана $S[\mathbf{X}]$) определены формулами:

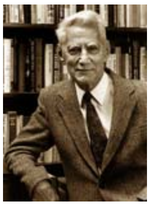
$$I[\mathbf{X}] = S[\mathbf{X}] = -\int f(\mathbf{X}) \ln f(\mathbf{X}) d\mathbf{X}, \int f(\mathbf{X}) d\mathbf{X} = 1 \qquad (15)$$

В случае дискретных переменных:

$$I[u] = S[u] = -\sum f_n \ln f_n; \sum f_n = 1 \qquad (16)$$

20

Клод Элвуд Шеннон



Клод Элвуд Шеннон (30 апреля 1916 — 24 февраля 2001) —американский математик и инженер.

Создатель теории информации, нашедшей применение в современных высокотехнологических системах связи. Шеннон внес огромный вклад в теорию вероятностных схем, теорию автоматов и теорию систем управления — области наук, тесно связанных с кибернетикой.

30-е годы: Мичиганский университет (студент, ассистент-исследователь на дифференциальном анализаторе). Статья на основе его магистерской работы 1937 года «Символический анализ реле и коммутаторов», была опубликована в 1938 году в издании Американского института инженеров-электриков (AIEE). Она стала причиной вручения Шэннону премии Американского института инженерии имени Альфреда Нобеля в 1940 году. Говард Гарднер из Гарвардского университета отозвался о работе Шэннона, как о «возможно, самой важной, а также самой известной магистерской работой столетия».

40-е годы: Шеннон работает над докторской диссертацией «Алгебра для теоретической генетики» по математике в MIT в рамках совместных биологических работ по генетике. В период с 1941 по 1956 гг. Шеннон преподает в Мичиганском университете и работает в компании Белл (Bell Labs). В лаборатории Белл Шеннон, исследуя переключающие цепи, обнаруживает новый метод их организации, который позволяет уменьшить количество контактов реле, необходимых для реализации сложных логических функций. С началом Второй мировой войны Шеннон работал над устройствами, засекавшими самолеты противника и нацеливавшими зенитные установки, также он разрабатывал криптографические системы, в том числе и правительственную связь, которая обеспечивала переговоры Черчилля и Рузвельта через океан. Как говорил сам Шеннон, работа в области криптографии подтолкнула его к созданию теории информации.

С 1950 по 1956 Шеннон занимался созданием логических машин, таким образом, продолжая начинания фон Неймана и Тьюринга. Он создал машину, которая могла играть в шахматы. В 1952 Шеннон создал обучаемую машину поиска выхода из лабиринта.

Основные работы:

Теория связи в секретных системах (1945)

Математическая теория связи (1948)

21

Информация Шеннона (#1)

Как получается формула (16)?
Рассмотрим простейший пример.

- Пусть имеется колода 32 карт. Чтобы выбрать 1 из них, существует 32 возможности. Очевидно, что если выбрана 1 карта, то уже никакой неопределенности нет.
- Тогда число 32 можно было бы считать количеством информации, заложенном в одном равновероятном выборе из 32 возможностей.
- Однако, традиционно в качестве меры неопределенности рассматривается log от числа возможностей:

Коэффициент пропорциональности

$$I = k \log_a m \qquad (17)$$

Количество информации

Число возможных выборов

(17) – формула Хартли

- $k = 1$, $a = 2$
  Стандартная возможность – выбор из двух возможностей.
- Таким образом введенная единица информации называется **битом** и является одним из символов двоичного алфавита.
- Формула Хартли с k = 1, a = 2 *фактически* характеризует число вопросов, ответы на которые позволяют выбрать одну из альтернатив.

Колода 32 карты. Сколько требуется вопросов чтобы выбрать даму пик?

• Карта красной масти?	**НЕТ**
• Трефы?	**НЕТ**
• Одна из четырех старших?	**ДА**
• Одна из двух старших?	**НЕТ**
• Дама?	**ДА**

Информация Шеннона (#1)

- Шеннон обобщил (17) на случай разновероятных событий:
- Собственное (индивидуальное) количество информации:

$$h_i = \ln \frac{1}{p_i} = -\ln p_i$$

- Однако удобно использование не h_i , а среднее значение количества информации на один символ алфавита:

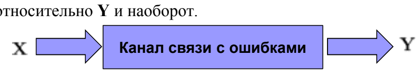
$$I = \sum_{i=1}^{m} p_i h_i = -\sum_{i=1}^{m} p_i \ln p_i$$

- Если все равновероятны, то $p_i = \frac{1}{m}$ и $I = I_{max}$. Это совпадает с формулой Хартли (17).

Информация Шеннона (#2)

2) В случае рассмотрения открытых систем более адекватным является другое определение количества информации:

Пусть имеется функция распределения двойного набора переменных *f*(**X,Y**) рассматриваемой системы. Это дает возможность для определения информации об объекте **X**. относительно **Y** и наоборот.



Теория информации: Какова вероятность того, что на выходе будет состояние **Y**, если на входе было сообщение **X**?
Мы приходим к понятию условной вероятности и условной информации.

Шеннон предлагает в этом случае определить информацию как разность безусловной (энтропия Больцмана) и условной энтропии. Это означает, что информация связана с изменением степени неопределенности задания выделенной системы.

25

Информация Шеннона (#2)

$$I[\mathbf{X},\mathbf{Y}] = S[\mathbf{X}] - S[\mathbf{X}|\,\mathbf{Y}] \qquad (18)$$

Условная энтропия определяется через соответствующую условную функцию распределения $f(\mathbf{X},\mathbf{Y}) = f[\mathbf{X}|\,\mathbf{Y}]f(\mathbf{Y})$.

$$S[\mathbf{X}|\,\mathbf{Y}] = -\int f(\mathbf{X},\mathbf{Y}) \ln f(\mathbf{X}|\,\mathbf{Y}) d\mathbf{X} d\mathbf{Y} \qquad (19)$$

Формулу (18) можно переписать в симметричном виде:

$$I[\mathbf{X},\mathbf{Y}] = I[\mathbf{Y},\mathbf{X}] = \int ln \frac{f(\mathbf{X},\mathbf{Y})}{f(\mathbf{X})f(\mathbf{Y})} f(\mathbf{X},\mathbf{Y}) d\mathbf{X} d\mathbf{Y} \geq 0 \qquad (20)$$

26

Информация Шеннона (#1)

$$I[\mathbf{X},\mathbf{Y}] = I[\mathbf{Y},\mathbf{X}] = 0 \qquad (21)$$

- Равенство нулю соответствует случаю, когда **X** и **Y** статистически независимы.
- Функция I(**X**,**Y**) называется «**корреляционной**» информацией (энтропией).
- Корреляционная информация определяет информацию о состоянии с двойным набором переменных **X** и **Y**, который определяется их статистической корреляцией.

27

Информация открытых систем. Закон сохранения суммы информации и энтропии

- Конкретизируем общий вывод Шеннона для корреляционной энтропии с целью выявления зависимости от управляющих параметров
- Простейший способ решения данной задачи состоит в следующем. Нарушим симметрию формулы Шеннона. Предположим, что функция распределения f(**Y**) набора переменных **Y** полностью характеризуется соответствующим набором первых моментов:

$$f(\mathbf{Y}) = \delta(\mathbf{Y} - \mathbf{a})$$
$$\langle \mathbf{Y} \rangle = \mathbf{a} \qquad (22)$$
$$f(\mathbf{X},\mathbf{Y}) = f[\mathbf{X}|\,\mathbf{a}]\delta(\mathbf{Y} - \mathbf{a})$$

28

- Примем набор параметров **a** (или хотя бы один из них) в качестве управляющих параметров.

$$\mathbf{a} = a$$

- Пусть величина параметра $a > 0$ и ее минимальное значение равно нулю. Тогда естественно определить безусловную энтропию равенством:

$$S[\mathbf{X}] = S(\mathbf{X}|\, a = 0) \qquad (23)$$

- В результате находим выражение для информации о совокупности **X** при заданном значении управляющих параметров a:

$$I[\mathbf{X}|\, a\,] = S[\mathbf{X}|\, a = 0] - S[\mathbf{X}|\, a\,] \equiv S[\mathbf{X}|\, a = 0] + \\ + \int f(\mathbf{X}|\, a\,) \ln f(\mathbf{X}|\, a\,) d\mathbf{X} \qquad (24)$$

29

Информация открытых систем

- Такое определение информации открытой системы не может быть использовано во всех случаях, так как в соответствии с (24) информация может быть как больше, так и меньше нуля.
- Поэтому для использования определения (24) необходимо ввести некоторые дополнительные условия обеспечивающие:

$$I \geq 0$$

что позволит использовать (24) для всех случаев.

30

Разреженный газ частиц (газ Больцмана)

- Вернемся к определению (24). По сделанному допущению управляющий параметр a может принимать только **положительные** значения и безусловная энтропия S[**X**] отвечает его нулевому значению (a = 0):

$$S[\mathbf{X}] = S[\mathbf{X}|\, a = 0] \qquad (25)$$

- Если нулевому значению управляющего параметра отвечает равновесное состояние, то для него информация равна нулю:

$$I[\mathbf{X}|\, a = 0] = 0 \qquad (26)$$

31

Разреженный газ частиц (газ Больцмана)

- Т.к. энтропия $S[\mathbf{X}|\ a = 0]$ совпадает с энтропией равновесного состояния и формула (26) автоматически следует из (24).
- Используем (24) для определения информации газа Больцмана. Роль управляющего параметра играет время t:

$$0 \le t \le \infty$$

$t = \infty$ – равновесное состояние.

- Тогда информация газа Больцмана определяется выражением:

$$I[\mathbf{r},\mathbf{p}|\,t] = \Lambda_S \overset{(4)}{=} S_0 - S(t) \overset{(5)}{=} k_B \int \ln \frac{f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{f_0(\mathbf{r},\mathbf{p})} f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (27)$$

f_0 – функция распределения для равновесного состояния.

32

Разреженный газ частиц (газ Больцмана)

- Информация – положительная величина. Это обеспечивается для газа Больцмана условием постоянства средней энергии $\langle E\rangle=const$, которое есть следствие структуры интеграла столкновений Больцмана и следовательно является естественным условием.
- $\langle E\rangle=const$ выполняется в процессе временной эволюции к равновесному состоянию.
- Из (27) следует, что в процессе временной эволюции газа Больцмана и равновесного состояния сумма энтропии и информации остается постоянной:

$$I[\mathbf{r},\mathbf{p}\,|\,t] + S(t) = S_0 = const \quad (28)$$

33

Разреженный газ частиц (газ Больцмана)

- Константа в выражении (28) определяется энтропией равновесного состояния
- Информация равновесного состояния:

$$I[\mathbf{r},\mathbf{p}\,|\,t=\infty] = \Lambda_S(t=\infty) = 0 \quad (29)$$

- Итак, для газа Больцмана положительная информация есть естественное свойство системы.
- В общем случае для выполнения $I[\mathbf{X}|\,a] \ge 0$ требуется, как уже обсуждалось выше, наложение дополнительного условия.

34

Разреженный газ частиц (газ Больцмана)

Если средняя энтропия сравниваемых состояний постоянна, то энтропия Шеннона является положительной

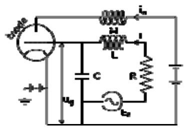
Если это условие не выполняется, то:
- для выполнения условия равенства средней энергии сравниваемых состояний необходимо провести перенормировку одного из них (Ю.Климонтович, «S-теорема»)
- определение информации через разность иных, чем энтропия, термодинамических функций

- Таким образом, из всех термодинамических функций **только энтропия – мера неопределенности (хаотичности)** при статистическом описании процессов в макроскопических системах.

35

Пример: генератор Ван-дер-Поля

$$\ddot{x} - \varepsilon(1-x^2)\dot{x} + x = 0$$



- Изменяя управляющий параметр ε, будем проводить сравнение относительности степени упорядоченности состояний по критерию «S-теорема».
- Выделим два состояния:
  - $\varepsilon = 0$ – равновесное состояние колебательного контура.
  - $\varepsilon = \varepsilon_1$ – стационарное, но не равновесное состояние.
- Характеристика выделенного состояния – энергия E колебаний
- Каждое из состояний характеризуется функциями распределения состояний f_0, f_1 и энтропиями S_0, S_1

36

Пример: генератор Ван-дер-Поля

- Ренормализация к заданному состоянию средней энергии сводится к замене температуры равновесного состояния ее эффективным значением:

$$k_B\widetilde{T} = \int E\widetilde{f}_0(E, \varepsilon = 0)dE = \int Ef_1(E, \varepsilon = \varepsilon_1)dE \qquad (30)$$

- Условие (30) является условием, обеспечивающим положительную величину информации, т.к. решение (30) удовлетворяет неравенству:

$$\widetilde{T}(\varepsilon) > T \qquad (31)$$

$$\widetilde{T}(\varepsilon = 0) = T \qquad (32)$$

- Таки образом, для выравнивания значений средней энергии состояние «0» (ε=0) следует «подогреть».

37

Пример: генератор Ван-дер-Поля

Пусть $\widetilde{S}_0$ – перенормированное значение энтропии.

$$\langle E \rangle = const \qquad (33)$$

Тогда,

$$\widetilde{S}_0 - S_1 = \int \ln \frac{f_1(E)}{\widetilde{f}_0(E)} f_1(E) dE \geq 0 \qquad (34)$$

дает относительная мера степени упорядоченности состояний генератора Ван-дер-Поля.

- Формулы (31), (32) и (34) задают алгоритм расчета степени хаотичности.
- (31) и (32) определяют правильность выбора состояния $\varepsilon = 0$ как наиболее хаотичного.
- (34) дает меру относительной степень упорядоченности.

38

Информация стационарных состояний генератора

Из формулы (24):

$$\widetilde{I}(E) = \widetilde{S}_0 - S_1 = \int \ln \frac{f_1(E)}{\widetilde{f}_0(E)} f_1(E) dE \geq 0 \qquad (35)$$

При $\varepsilon = 0$ информация равна 0.

39

Модель электрического генератора с контуром

Сравнение относительной степени упорядоченности состояний открытых систем необходимо проводить с учетом критерия «S-теорема»

Покажем, что существует разница расчета информации по формуле (24) и с учетом «*S*-теоремы»

.

$$I[\mathbf{X}|a] = S[\mathbf{X}|a=0] - S[\mathbf{X}|a]$$

Пример: Электрический генератор с контуром.

Источник шума – тепловые колебания в электрическом контуре.

По формуле Эйнштейна интенсивность шума будет равна:

$$D = \gamma k_B T \qquad (36)$$

40

Модель электрического генератора с контуром

- Полагаем, что генератор с симметричной нелинейной характеристикой
- Основные управляющие параметры:

$a = \varepsilon - \gamma$ – параметр линейного трения.

коэффициент ОС

b – параметр нелинейности.

- Стационарное состояние характеризуется функцией распределения значений энергии $f(E)$, которая зависит от ε и D (γ).

41

Модель электрического генератора с контуром

По аналогии с каноническим распределением:

$$f(E,a,D) = \exp\frac{F(a) - H_{eff}(E)}{k_B T}$$
$$H_{eff} = E - \varepsilon\left(\frac{1}{\beta} + \frac{1}{\gamma}E\right) \quad (37)$$

где β – коэффициент пропорциональности.

H_{eff} – эффективная функция Гамильтона.

$F(a)$ – свободная энергия.

(37) необходимо дополнить условием нормировки:

$$\int_0^\infty f(E,a,D)dE = 1 \quad (38)$$

42

Модель электрического генератора с контуром

Два характерных стационарных состояния:

- $\varepsilon = 0$
  (37) совпадает с равновесным распределением Больцмана f_0.
- развитая генерация ($\varepsilon \gg \gamma$)

Из (37) следует распределение Гаусса:

$$f_G = \sqrt{\frac{1}{2\pi\langle\delta E\rangle^2}}\exp\left[\frac{E-(a/b)^2}{2\langle\delta E\rangle^2}\right], \langle\delta E\rangle^2 = \frac{D}{b} \quad (39)$$

- Если известно распределение, то можно легко найти выражение S_G для S-информации (энтропии Больцмана)
- Сравнить величину S_G при переходе от равновесного состояния к режиму развитой генерации.

43

Модель электрического генератора с контуром

Уменьшение степени упорядоченности по мере развития генерации:

$$S_0 \le S_G \qquad (40)$$

S–информация в процессе развития генерации возрастает, что противоречит закону сохранения энтропии и информации:

$$I_0 \le I_G \qquad (41)$$

- Причина противоречия:

$$\langle E \rangle_0 < \langle E \rangle_G \qquad (42)$$

Расчет энтропии и «S-информации» **не могут** служить для определения относительной степени упорядоченности и информативности выделенных состояний.

44

Методы определения степени упорядоченности в открытых системах по экспериментальным данным

Для использования критерия S-теорема необходимо знать эффективную функцию Гамильтона:

- Если известна математическая модель процесса, определение функции Гамильтона H_{eff} не является принципиально сложным.
- Если адекватной математической модели не существует, то возникает проблема оценки относительной степени упорядоченности по экспериментальным наблюдаемым данным.

45

Оценка по временному ряду

- Выбираем управляющие параметры, ε. Выбирается два состояния системы при ε и ε + Δε .
- Экспериментально получаем «длинные» временные реализации:

Нормированные на «1» функции распределения

$x_0(t,\varepsilon_0), f_0(x_0,\varepsilon_0)$

$x(t,\varepsilon_0+\Delta\varepsilon), f(x,\varepsilon_0+\Delta\varepsilon)$

- Выбираем одно из состояний (например, «0») за состояние физического хаоса и определяем эффективную функцию Гамильтона:

$$H_{eff} = -\ln f_0(x_0,\varepsilon_0) \qquad (43)$$

46

Оценка по временному ряду

- Почему говорится об **эффективной** функции Гамильтона?
- Если перенормировать ее к заданному значению $\langle H_{eff} \rangle$ согласно критерию S-теоремы, то получим каноническое распределение Гиббса:

$$\tilde{f}_0(x) = \exp \frac{F_{eff}(\tilde{T} - H_{eff}(x))}{k_B \tilde{T}} \tag{44}$$

$\widetilde{T}$ – эффективная температура. Для равновесного состояния (состояния физического хаоса) $T = 1$.

Эффективная свободная энергия F_{eff} как функция $\widetilde{T}$ находится из условия нормировки функции $\tilde{f}_0$

Зависимость $\widetilde{T}$ от $\Delta\varepsilon$ находится из условия постоянства средней эффективной энергии:

$$\int H_{eff} \tilde{f}_0(x_0, \varepsilon_0) dx_0 = \int H_{eff} f(x, \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon) \tag{45}$$

47

Оценка по временному ряду

- Если решение (45) имеет вид (31)–(32), т.е.

$$\widetilde{T}(\Delta\varepsilon) \geq T$$

(«=» соответствует $\Delta\varepsilon = 0$), то выбор состояния физического хаоса оправдан.

- Относительная степень упорядоченности находится из выведенного ранее соотношения (34):

$$\widetilde{S}_0 - S_1 = \int \ln \frac{f_1(E)}{\tilde{f}_0(E)} f_1(E) dE \geq 0$$

- За начало отсчета информации I примем состояние физического хаоса: $\Delta\varepsilon = 0$, $\varepsilon = \varepsilon_0$. Тогда *избыточная* информация, возникающая при переходе к более упорядоченному состоянию с $\varepsilon = \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon$:

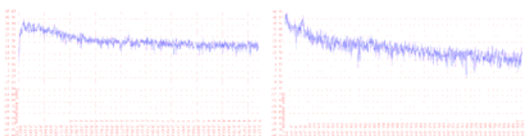
$$\tilde{I}(x) = \tilde{S}_0 - S = \int \ln \frac{f(x, \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon)}{\tilde{f}_0(x_0, \varepsilon_0)} f(x, \varepsilon + \Delta\varepsilon) dx \geq 0 \tag{46}$$

48

Определение относительной степени упорядоченности по Фурье-спектрам

- Вместо временных рядов $x(t)$ и $x_0(t)$ можно использовать соответствующие спектры:

$$F_0(\omega, \varepsilon_0), F_G(\omega, \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon) \tag{47}$$



- Введем соответствующие функции распределения значений интенсивности:

$$f_0(\omega, \varepsilon_0), f_G(\omega, \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon) \tag{48}$$

- Полагаем: «0» – более хаотическое состояние

49

Определение относительной степени упорядоченности по Фурье-спектрам

- Эффективная функция Гамильтона:

$$H_{eff}(F_0, \varepsilon_0) = -\ln f_0(F, \varepsilon_0 0) \quad (49)$$

- Перенормировка к заданному значению эффективной функции Гамильтона $\langle H_{eff}(\omega, \varepsilon_0) \rangle$

$$\int H_{eff}\tilde{f}_0(F, \varepsilon_0)dF = \int H_{eff}f(F, \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon)dF \quad (50)$$

- Перенормированная функция распределения:

$$\tilde{f}_0(F, \varepsilon_0) = \exp\frac{F_{eff}(\widetilde{T}, \varepsilon_0 - Heff(F, \varepsilon_0))}{\widetilde{T}(\Delta\varepsilon)} \quad (51)$$

50

Определение относительной степени упорядоченности по Фурье-спектрам

- Эффективная свободная энергия F_{eff} находиться из условия нормировки:

$$\int \tilde{f}_0 dF = 1 \quad (52)$$

- Тогда уравнение (50) превращается в трансцендентное уравнение для определения эффективной температуры $\widetilde{T}(\Delta\varepsilon)$
- Если решение (50) таково, что

$$\widetilde{T}(\Delta\varepsilon) \geq 1 \quad (53)$$

то выбор состояния «0» как состояния физического хаоса оправдан и соотношения (24) (или (46)) **корректно** определяют относительную степень упорядоченности.

51

Определение относительной степени хаотичности (упорядоченности) состояний открытых систем

1) Критерий «S-теорема» позволяет сравнить относительную степень упорядоченности любых состояний открытых систем непосредственно по экспериментальным данным.
2) Количественной мерой относительной степени упорядоченности является разность значений энтропий выделенных состояний, отнесенных к заданному значению средней эффективной энергии $\langle H_{eff} \rangle$ (определяется также по экспериментальным данным).
3) При этом удается определить, является ли процесс при изменении управляющих параметров процессом **самоорганизации** или **деградации**.

52

Определение относительной степени упорядоченности состояний открытых систем

- **Генератор Ван дер Поля:** нулевой коэффициент ОС ($\varepsilon = 0$) → тепловые колебания в линейном электрическом контуре (наиболее хаотическое состояние) → сравнение любого неравновесного состояния (с любым значением ε) с наиболее хаотическим равновесным состоянием.
- Возрастание степени упорядоченности может быть и не монотонным. **Любое неравновесное состояние – более упорядоченное (по «S-теореме»), чем равновесное состояние**.
- Если для рассматриваемой системы невозможно реализовать состояние теплового равновесия: при сравнении, вместо равновесного состояния, берется состояние, отвечающее «норме» хаотичности для исследуемой системы.

53

Энтропия Реньи

- Альфред Реньи: обобщение энтропии Шеннона:

$$S_\beta = -\frac{1}{\beta - 1}\ln\sum_{n=1}^{N}(p_n)^\beta; \qquad \sum_{n=1}^{N}p_n(\varepsilon) = 1 \qquad (54)$$

- β – свободный параметр энтропии Реньи.
- При $\beta \to 1$ энтропия Реньи совпадает с энтропией Шеннона
- Пусть $k = \beta - 1$, тогда:

$$\sum_{n=1}^{N}(p_n)^{k+1} = \sum_{n=1}^{N}p_n(\exp\ln p_n)^k = \sum_{n=1}^{N}p_n\exp k\ln p_n \approx$$

$$\approx \sum_{n=1}^{N}p_n(1 + k\ln p_n) \approx 1 + k\sum_{n=1}^{N}p_n\ln p_n \qquad (55)$$

54

Энтропия Реньи

- Подставляем в (54) и получаем:

$$S_{\beta=1} = -\lim_{k\to 0}\frac{1}{k}\ln(1 + k\sum_{n=1}^{N}p_n\ln p_n) = -\sum_{n=1}^{N}p_n\ln p_n = S \qquad (56)$$

$$\lim_{k\to 0}\frac{\ln(1+kA)}{k} = \lim_{k\to 0}\frac{[\ln(1+kA)]'}{[k]'} = \lim_{k\to 0}\left(\frac{1}{1+kA}A\right) =$$

$$= A = \sum_{n=1}^{N}p_n\ln p_n$$

55

Рекомендуемая литература

- *Климонтович Ю.Л.* Статистическая теория открытых систем. Т. 1. М.: Янус, 1995.
- *Стратонович Р.Л.* Нелинейная неравновесная термодинамика. М.: Наука, 1985.
- *Чернавский Д.С.* Синергетика и информация: Динамическая теория информации. М.: УРСС, 2009.
- *Трубецков Д.И., Мчедлова Е.С., Красичков Л.В.* Введение в теорию самоорганизации открытых систем. М.: Физматлит. 2002
- *Шеннон К.* Работы по теории информации и кибернетике. М.: Изд. иностр. лит., 1963.