

## **ИНФОРМАЦИОННО-ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ ФОРМИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ В ОТКРЫТЫХ СИСТЕМАХ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ**

**А.В. КОЛЕСНИЧЕНКО**

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН  
Москва, Россия  
e-mail: kolesn@keldysh.ru, web page: <http://keldysh.ru/kolesnichenko/person.htm>

**Ключевые слова:** теория информации, энтропия Гиббса–Шеннона, информация различия Кульбака, самоорганизация, термодинамика необратимых процессов.

**Аннотация.** Рассматриваются информационно-термодинамические аспекты образования диссипативных структур при необратимых физических процессах в открытой динамической системе, находящейся в неравновесном контакте с окружающей средой и обменивающейся с ней информацией, энергией, веществом и т.п. Приводятся специфические характеристики теоретико-информационного подхода, связанного с исследованием эволюции энтропии Гиббса–Шеннона и информации различия Кульбака как во времени, так и в пространстве управляющих параметров. Изучено влияние изменения внешних управляющих параметров на процессы самоорганизации и необратимости в открытых многокомпонентных средах.

## **INFORMATIONAL-THERMODYNAMIC CONCEPTION OF PROCESSES FORMATION OF SELF-ORGANIZATION IN OPEN SYSTEMS UNDER INFLUENCE OF EXTERNAL ENVIRONMENT**

**A.V. KOLESNICHENKO**

Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Science  
e-mail: kolesn@keldysh.ru, web page: <http://keldysh.ru/kolesnichenko/person.htm>

**Summary.** Considered the information and thermodynamic aspects of the formation of dissipative structures in irreversible physical processes in an open dynamic system in a non-equilibrium contact with the environment and share it with energy, matter, etc. Discusses the main aspects of the information-theoretic approach, connected with investigation of the evolution of the entropy of Gibbs-Shannon and information differences of Kullback both in time and in space of control parameters. Discusses the effect of changes in external parameters on the processes of self-organization and irreversibility in thermodynamically open multi-component systems.

**2010 Mathematics Subject Classification:** 80A20, 82B30, 94A24.

**Key words and Phrases:** Information theory, entropy of Gibbs–Shannon, information differences of Kullback, self-organization, thermodynamics irreversible processes

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в связи с развитием теоретико-информационного подхода к моделированию процессов самоорганизации в открытых физических системах со стохастичностью появилась возможность объединения динамической и информационной (управляющей) частей их описания в единую неразрывную сущность, когда в условиях конкуренции информационных и физических процессов эволюционное развитие сложной системы в значительной мере начинает определяться и её информационными свойствами, включая информационное отношение к внешнему окружению<sup>1-3</sup>. Такие системы наряду с обычным обменом энергией и негэнтропией с внешней средой, необходимым для спонтанного формирования различных структур, получают дополнительную возможность своего усложнения и совершенствования благодаря информационному управлению. В результате этого становится возможным появление в сильно неравновесной физической системе благодаря изменениям внешних полей или управляющих параметров (характеризующих воздействие окружения) новых точек бифуркаций, в которых система в общем случае может «выбирать» между различными состояниями (или фазами). В частности, при достижении сверхкритических значений управляющих параметров в самоорганизующихся открытых системах происходят вынужденные переходы между стационарными состояниями<sup>i)</sup>, при которых возникают упорядоченные пространственно-временные образования (*диссипативные структуры* по терминологии И. Пригожина), сохраняющиеся только при наличии подкачки энергии, вещества и т.п. из окружающей среды. Они соответствуют той или иной форме когерентного поведения огромного числа молекул. С другой стороны, при равномерном нагреве жидкой плёнки возникает спинодальный распад однородного вещества, состоящий в его расщеплении на различные фазы. Для того, чтобы фазовый переход не останавливался, требуется непрерывно отводить (или подводить) это тепло, либо компенсировать его совершением работы над системой<sup>4-7</sup>. Феноменологически подобный ход эволюции системы можно охарактеризовать также и как получение дополнительной информации от внешней среды. Конкуренция происходящих информационных и кооперативных микроскопических (динамических) процессов в таких системах приводит к их спонтанной самоорганизации<sup>ii)</sup>, причём динамическая и информационная сущности процесса эволюции должны разрабатываться в общем случае параллельно и в близком соотношении между собой. Другими словами, при моделировании процессов самоорганизации в открытой нелинейной системе, находящейся в неравновесном контакте с окружением, необходимо принимать во внимание как физические обменные процессы (потоками энергии, вещества и т.п.) между открытой системой и её окружением, так и обмен информационными потоками.

В мировой литературе хорошо представлены традиционные термодинамические и статистические аспекты спонтанного возникновения когерентных структур, т.е. процессов самоорганизации при необратимых процессах в сложных физических системах

<sup>i)</sup> В физике рассматривается эволюция к равновесному состоянию или стационарному (в открытых системах) состоянию.

<sup>ii)</sup> Процесс самоорганизации традиционно определяется, как самопроизвольное возникновение устойчивых когерентных пространственно-временных структур в динамических нелинейных открытых системах. При этом диссипация играет при образовании структур конструктивную роль.

(см., например, <sup>1,2,5-18</sup>). Вместе с тем, до последнего времени существовала известная ограниченность *энтропийного подхода* к изучению спонтанных и вынужденных переходов *порядок-беспорядок*, связанная с весьма поверхностным привлечением к данной проблематике аналитического аппарата современной теории информации. Это особенно удивительно, если учесть, что теоретико-информационный подход также позволяет интерпретировать механизмы возникновения когерентных структур при микро и макроуровневых методах описания <sup>1-3</sup>. Центральным местом является здесь существующая взаимосвязь между информацией различия Кульбака и минимальной работой, совершаемой окружающей средой над открытой термодинамической системой<sup>3</sup>. Различающаяся информация делает возможным не только адекватно описывать процессы хаотизации и самоорганизации в классических динамических системах<sup>19-21</sup>, но и позволяет, в частности, наиболее полно исследовать вопрос о взаимодополняемости термодинамических и информационных потоков, вводимых в рассмотрение при моделировании спонтанных и вынужденных переходах между стационарными состояниями открытых сплошных сред гидродинамического типа, находящихся вдали от термодинамического равновесия<sup>iii)</sup>.

В связи со сказанным, в данной работе в рамках концепции единого теоретико-информационного описания переходов между квазиравновесными состояниями в открытых системах, представлены специфические информационно-термодинамические аспекты образования диссипативных структур при необратимых физических процессах в открытых динамических системах, подверженных воздействию внешнего окружения. Проанализированы следствия данного подхода, при котором важную роль играет суммарное локальное производство макроскопической энтропии и информации различия. В качестве примера информационно-термодинамический подход использован при описании неравновесных явлений в многокомпонентных сплошных средах, находящихся в неравновесном контакте с окружением и обменивающихся с ним как энергией, веществом и т.п., так и информацией. В отличие от эвристического принципа наименьшего принуждения Ле Шателье–Брауна, указывающего только направление протекания физико-химического процесса в открытой гидродинамической системе (выведенной из состояния устойчивого равновесия), полученные здесь результаты позволяют количественно оценить степень смещения равновесия в химически активной многокомпонентной среде, подверженной влиянию внешнего воздействия.

При написании статьи автор существенно опирался на работы<sup>1-3,8,22-26</sup>. В этом ряду особое место занимают исследования<sup>24-26</sup>, в которых впервые в мировой научной литературе было проведено совместное теоретико-информационное рассмотрение динамических и информационных процессов, как в аддитивных, так и в неаддитивных системах (в рамках статистики Тсаллиса), а также широко представлены различные информационные стороны происходящих в них процессов самоорганизации и необратимости.

---

iii) Связь между энтропией и информацией впервые была открыта в основополагающей работе Сциларда<sup>21</sup>. В дальнейшем в работах Бриллюэна<sup>19,20</sup> был сформулирован негэнтропийный принцип информации, обобщающий второе начало термодинамики. Согласно этому принципу как энтропия, так и информация должны рассматриваться совместно и не могут трактоваться порознь.

## 2. НЕКОТОРЫЕ БАЗОВЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ФОРМАЛИЗМА СТАТИСТИКИ ГИББСА

Использование методов теории информации в статистической механике было введено Джейнсом в 1957 году<sup>26</sup>, и это привело к получению множества практических результатов. В частности, если постулировать существование инвариантной меры вероятности, а затем, рассматривать статистическую механику как теорию информации, то можно получить все распределения Гиббса из условия максимума информационной энтропии.

Напомним вначале некоторые ключевые понятия статистики Гиббса, которые будут использованы далее при конструировании информационно-термодинамической модели открытой динамической системы, находящейся в неравновесном контакте с окружающей средой. Рассмотрим систему из  $N$  частиц  $i$ , характеризующихся своим положением  $\mathbf{q}_i$  и импульсом  $\mathbf{p}_i$ . В классической механике микроскопическое состояние такой системы формально задаётся одной точкой  $\mathbf{X} = \{\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_N\}$  в  $6N$ -мерном фазовом пространстве координат и импульсов с элементом объёма  $d\mathbf{X} = \prod_i^N d\mathbf{X}_i$ . Здесь  $d\mathbf{X}_i = d\mathbf{q}_i d\mathbf{p}_i$  – элемент фазового пространства  $i$ -ой частицы,

движение которой определяется уравнением Гамильтона для полного гамильтониана системы  $H = H(\mathbf{X}, a)$ , зависящего в общем случае от совокупности обобщённых координат  $a = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$  – внешних параметров (таких, например, как объём системы, напряжённость внешнего магнитного поля и т.д.), макроскопически характеризующих состояние статистического равновесия динамической системы.

Следуя Гиббсу, далее будем рассматривать не одну исследуемую систему, а совокупность большого числа её «копий» (статистический ансамбль), находящихся в макроскопически тождественных внешних условиях. Каждой системе, входящей в ансамбль, соответствует точка  $\mathbf{X}$  в фазовом пространстве, которая движется по собственной траектории согласно уравнениям Гамильтона. Статистический ансамбль может быть задан фазовой функцией распределения  $0 < f(\mathbf{X}, a) < \infty$ , которая пропорциональна плотности вероятности распределения систем ансамбля в фазовом пространстве. Такая интерпретация функции распределения означает, что  $f(\mathbf{X}, a)$  нормирована на единицу. Вводя элемент фазового объёма  $d\Gamma$ , имеем  $\int f(\mathbf{X}, a) d\Gamma = 1$ .

Как частный случай фазовой функции распределения, введём для системы, состоящей из  $N$  одинаковых частиц, безразмерную функцию распределения  $f_N(\mathbf{X}, a)$  так, чтобы величина  $dw_N = f_N(\mathbf{X}, a) d\Gamma_N$  была равна вероятности обнаружить систему ансамбля в элементе  $d\Gamma_N$  вблизи фазовой точки  $\mathbf{X}$  в момент времени  $t$ . Условие нормировки для такой функции распределения имеет вид  $\int f_N(\mathbf{X}, a) d\Gamma_N = 1$ . Наиболее естественный способ нормировки  $f_N(\mathbf{X}, a)$  на единицу состоит в использовании безразмерного

элемента  $d\Gamma_N = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} d\mathbf{X}$ , где  $\hbar$  – постоянная Планка<sup>1</sup>. Если рассматриваемая

система может обмениваться также и частицами с окружением, то соответствующий статистический ансамбль должен включать системы с различными числами частиц. В этом случае число частиц  $N$  в приведённых соотношениях следует считать новой дискретной переменной и условие нормировки должно быть записано в виде  $\sum_N \int f_N(\mathbf{X}, a) d\Gamma_N = 1$ . С помощью функции  $f$  могут быть вычислены любые макроскопические параметры стохастической системы<sup>iv)</sup>. Пусть  $T(\mathbf{X}, a)$  – какая-либо характеризующая систему микроскопическая динамическая переменная. Далее угловыми скобками  $\langle \dots \rangle$  будем обозначать математическое ожидание, тогда средневзвешенное среднее величины  $T(\mathbf{X}, a)$  равно:  $\langle T \rangle = \int T f(\mathbf{X}, a) d\Gamma$

*Энтропия Гиббса–Шеннона.*

В статистической теории открытых систем только энтропия обладает совокупностью свойств, которые позволяют использовать её в качестве количественной *меры статистической неопределённости* в микросостояниях системы<sup>1-3</sup>. Рассматривая произвольное состояние стохастической динамической системы частиц, введём *микроскопическую энтропию*  $s(f) = -k_B \ln f(\mathbf{X}, a)$ , которая является мерой неопределённости состояния  $\mathbf{X}$  (заметим, что для достоверного события ( $f = 1$ ) неопределённость равна нулю, а при  $f = 0$  она равна бесконечности). Здесь  $k_B$  – постоянная Больцмана. Среднее значение микроскопической энтропии  $s(f)$  по объёму фазовой области

$$\langle s \rangle \equiv S(f) = -k_B \int f(\mathbf{X}, a) \ln f(\mathbf{X}, a) d\Gamma \quad (1)$$

определяет так называемую глобальную *информационную энтропию Гиббса–Шеннона*, которая является функционалом от функции распределения  $f(\mathbf{X}, a)$ . Информационную энтропию Гиббса–Шеннона  $S$ , являющуюся математическим ожиданием неопределённости в состояниях физической системы, обычно интерпретируют как меру неупорядоченности системы (*статистического хаоса*) и вместе с тем как меру структурной организованности системы (или как *меру недостатка информации* о действительной структуре системы).

*Экстремальность канонического распределения Гиббса. Связь с максимумом информационной энтропии.*

Дж. Гиббс сформулировал принцип максимума энтропии, который позволяет сравнивать значения энтропии в различных состояниях системы. Согласно Гиббсу функция распределения в состоянии статистического равновесия зависит лишь от однозначных, аддитивных интегралов движения: энергии  $H$ , полного импульса  $\mathbf{P}$  и полного момента количества движения  $\mathbf{M}$ . Для построения статистических ансамблей в случае статистического равновесия системы для различных внешних условий

---

<sup>iv)</sup> В статистической механике предполагается, что средние по статистическому ансамблю совпадают с наблюдаемыми значениями физических величин, которые на самом деле являются средними по времени для единственной рассматриваемой системы (эргодическая гипотеза<sup>1</sup>).

(макроскопически определяющих ансамбль) необходимо знать, от каких интегралов движения может зависеть функция распределения.

Нахождение соответствующих распределений соответствует задаче на экстремум<sup>в)</sup> энтропии (1). В качестве примера этой методики определим экстремальное распределение и энтропию для статистического ансамбля Гиббса внешне замкнутых неподвижных динамических систем, для которых возможен равновесный процесс обмена энергией с окружающей средой. Согласно<sup>27</sup>, задача определения экстремального распределения, соответствующего экстремуму информационной энтропии (1) при заданной средней энергии  $E(a) \equiv \langle H \rangle = \int f H(\mathbf{X}, a) d\Gamma$ , сводится к нахождению безусловного экстремума функционала

$$L = -k_B \int f \ln f d\Gamma - \beta \int f H(\mathbf{X}, a) d\Gamma - k_B (\lambda - 1) \int f d\Gamma, \quad (2)$$

где  $\beta$  и  $(\lambda - 1)$  – неизвестные множители Лагранжа. Используя равенство

$$\delta L = -k_B \int \delta f [\ln f + \beta H(\mathbf{X}, a) / k_B + \lambda] d\Gamma = 0,$$

получим следующее экстремальное распределение с параметром  $\beta$  (которое соответствует каноническому распределению Гиббса)

$$f(\beta, \mathbf{X}, a) = \exp\{-\beta H(\mathbf{X}, a) / k_B\} Q^{-1}(\beta). \quad (3)$$

Здесь  $Q(\beta, a) = \int \exp\{-\beta H(\mathbf{X}, a) / k_B\} d\Gamma$  – статистический интеграл (величина, определяющая термодинамические свойства системы), обладающий следующими свой-

ствами:  $k_B \frac{\partial \ln Q(\beta, a)}{\partial \beta} = -E(a)$ ,  $k_B \frac{\partial [\beta^{-1} \ln Q(\beta, a)]}{\partial (1/\beta)} = S(a)$ ; здесь параметр  $\beta$  меняется в

пределах допустимых значений. Заметим, что каноническое распределение Гиббса (3) зависит от определяющих ансамбль макроскопически внешних параметров  $a = \{V, N\}$ , которые считаются постоянными для всех копий системы.

Для распределения (3) экстремальное значение энтропии Гиббса–Шенонна определяется соотношением

$$S^{ext}(\beta, a) = -k_B \int f \ln f d\Gamma = \beta E(a) + k_B \ln Q(\beta, a). \quad (4)$$

Если продифференцировать (4) по  $\beta$  и использовать приведённое выражение для средней энергии  $E(a)$  рассматриваемой системы, то можно получить известное уравнение квазистатической термодинамики  $dS = \beta dE$ , из которого вытекает следующая интерпретация множителя Лагранжа:  $\beta = 1/T$ , где  $T$  – абсолютная температура.

<sup>в)</sup> Следуя Джейнсу<sup>27</sup>, будем считать понятия теории информации первичными и использовать их в статистической механике. Тогда, рассматривая статистическую механику как теорию информации, можно получить все распределения Гиббса из условия максимума информационной энтропии<sup>1</sup>.

Таким образом, распределение (3) совпадает с *каноническим распределением Гиббса*, которое может быть переписано в виде<sup>1-3,8,9</sup>

$$f(\mathbf{X}, T, a) = \exp\left\{\left[F(a) - H(\mathbf{X}, a)\right] / k_B T\right\}, \quad (5)$$

где  $F(a) \equiv -k_B T \ln Q(T, a)$  – свободная энергия системы;  $Q = \int \exp\left[-\frac{H(\mathbf{X}, a)}{k_B T}\right] d\Gamma$  – статистический интеграл. Как известно, с помощью величины  $Q(T, a)$  можно найти все термодинамические равенства для канонического ансамбля Гиббса.

Можно показать, что вторая вариация функционала (2) удовлетворяет неравенству  $\delta^2 L = -k_B \int \frac{\delta^2 f}{f} d\Gamma \leq 0$ , из которого следует, что найденный экстремум является максимумом соответствующего функционала. Таким образом, распределения (3) максимизируют энтропию Гиббса–Шеннона (*принцип максимума энтропии Гиббса–Шеннона*). Соответствующая этому распределению максимальная информационная энтропия означает низшую степень организованности и, соответственно, наибольшую неупорядоченность, которые возможны при заданных условиях.

*Большое каноническое распределение Гиббса. Связь с максимумом информационной энтропии.*

Запишем теперь экстремальное значение функции распределения в открытой сложной системе в случае, когда в дополнение к условию  $E(a) \equiv \langle H \rangle = \text{const}$ , будут сохраняться постоянными значения каких-либо обобщённых сил  $T_i(\mathbf{X}, a)$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Используемая выше методика получения экстремального распределения и соответствующей энтропии приводит в случае статистического ансамбля незамкнутых систем (характеризуемого многомерным внешним параметром  $a$ ) к следующему *большому каноническому распределению Гиббса*<sup>1,9</sup>

$$f^{ext}(\mathbf{X}, \beta, a) = Z^{-1}(\beta, a) \exp\left[-k_B^{-1} \left\{ \beta H(\mathbf{X}, a) + \sum_i^{n-1} a_i T_i(\mathbf{X}, a) \right\}\right], \quad (6)$$

где  $\beta$  – обратная температура;  $a = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$  – термодинамические параметры, сопряжённые с обобщёнными силами  $T_i = -\partial H(\mathbf{X}, a) / \partial a_i$ . Для статистического интеграла большого ансамбля, определяемого из условия нормировки, имеем:

$$Z(\beta, a) = \sum_N \int \exp\left\{-k_B^{-1} \left[ \beta H(\mathbf{X}, a) + \sum_i^n a_i T_i(\mathbf{X}, a) \right]\right\} d\Gamma_N.$$

Статистический интеграл для большого канонического ансамбля есть функция параметров  $\beta, a_i$ , макроскопически определяющих ансамбль. Величина  $Z(\beta, a)$  определяет

термодинамические функции в состоянии неполного статистического равновесия с заданными  $\langle T_i \rangle$  в зависимости от  $\beta$ ,  $\mu_\alpha$ ,  $\langle T_i \rangle$ .

Соответствующее экстремальное значение энтропии Гиббса–Шеннона, зависящей от многомерного параметра  $a$ , имеет вид

$$S^{ext}(\beta, a) = -k_B \int f^{ext} \ln f^{ext} d\Gamma = \beta E + \sum_i^n a_i F_i + k_B \ln Z(\beta, a),$$

а её дифференциал

$$dS^{ext}(a) = \beta dE + \sum_i^n a_i dF_i \quad (7)$$

представляет собой *обобщённое соотношение Гиббса*. Если сопоставить (7) с *фундаментальным уравнением Гиббса*<sup>10</sup>

$$dS = \frac{1}{T} \left( dE - \sum_\alpha^K \mu_\alpha dN_\alpha + p dV + \sum_{i=1}^k \vartheta_i dF_i \right), \quad (8)$$

включающим в себя первый и второй законы термодинамики квазиравновесных систем с переменным числом частиц разного сорта, то можно найти средневзвешенные значения экстенсивных параметров системы  $\langle T_i \rangle = \{N_1, \dots, N_m, V, F_1, \dots, F_k\}$  и соответствующие им интенсивные внешние параметры:  $\beta = 1/T$ ,  $a = \left\{ -\frac{\mu_1}{T}, \dots, -\frac{\mu_K}{T}, \frac{p}{T}, \frac{\vartheta_1}{T}, \dots, \frac{\vartheta_k}{T} \right\}$ .

Здесь  $k + K + 1 = n$ ;  $\mu_\alpha$ ,  $N_\alpha$  – соответственно химический потенциал (на одну частицу) и число частиц  $\alpha$ -го сорта;  $p$  – давление, а  $\vartheta = \{\vartheta_1, \dots, \vartheta_k\}$  – некоторые другие интенсивные параметры, термодинамически сопряжённые с обратимым изменением экстенсивных величин  $F$  – обобщённых термодинамических сил.

При использовании преобразования Лежандра, из (7) следует термодинамическое равенство  $d\Phi(\beta, a) = -E d\beta - \sum_i^n F_i da_i$ , где  $\Phi = k_B \ln Z = S - \beta E - \sum_i^n a_i F_i = S + k_B \beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} + k_B \sum_i^n a_i \frac{\partial \ln Z}{\partial a_i}$  – функция Массье–Планка, с помощью которой многомерное равновесное распределение Гиббса (6) может быть переписано в виде

$$f(\mathbf{X}, \beta, a) = \exp \left\{ -k_B^{-1} \left[ \Phi + \beta H(\mathbf{X}, a) + \sum_i^n a_i T_i(\mathbf{X}, a) \right] \right\},$$

а информационная энтропия так:  $S(\beta, a) = \Phi + \beta E + \sum_i^n a_i F_i$ . Функция Массье–Планка позволяет представить термодинамические соотношения для большого канонического ансамбля Гиббса в особенно симметричной форме: например, равновесные значения экстенсивных термодинамических переменных определяются из формул:



$$E(\beta, a) = -\frac{\partial \Phi(\beta, a)}{\partial \beta}, \quad F_i = -\frac{\partial \Phi(\beta, a)}{\partial a_i}, \quad dS = \beta dE + \sum_i^n a_i dF_i.$$

Таким образом, использование экстремальных свойств информационной энтропии является очень удобным эвристическим методом нахождения различных функций распределения. Известно, что различные ансамбли Гиббса эквивалентны в термодинамическом отношении, т.е. вычисленные с их помощью локальные термодинамические функции (не зависящие явным образом от размера системы) совпадают для больших систем в случае термодинамического предельного перехода  $V \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty, n = V/N = const$  (см., например,<sup>28</sup>).

### 3. ФИЗИЧЕСКАЯ ИНФОРМАЦИЯ РАЗЛИЧИЯ КУЛЬБАКА

Наряду с энтропией к наиболее существенным статистическим характеристикам сложной динамической системы относится мера информации в одном состоянии относительно другого состояния, которая выражается функционалом Кульбака<sup>29</sup>. Предположим, что система переходит от состояния  $f(\mathbf{X}, a)$  к состоянию  $f'(\mathbf{X}, a)$  и статистические наблюдения ведутся относительно состояния  $f(\mathbf{X}, a)$ . В теории информации подобный переход по определению характеризуется *микроскопической информацией различия* в виде разности случайных энтропий

$$i(f, f') = -[s(f) - s(f')] = k_B \ln [f(\mathbf{X}, a) / f'(\mathbf{X}, a)].$$

Целесообразность введения логарифма в данную формулу диктуется тем, что это придаёт информации свойство аддитивности. Среднее значение по объёму фазовой области определяет так называемую *различающую информацию Кульбака* или просто *информацию различия*<sup>29</sup>

$$I(f : f') = k_B \int f \ln \left( \frac{f}{f'} \right) d\Gamma, \quad \int f(\mathbf{X}, a) d\Gamma = \int f'(\mathbf{X}, a) d\Gamma = 1, \quad (9)$$

которая характеризует меру статистической упорядоченности в состояниях системы с распределением  $0 < f(\mathbf{X}, a) < \infty$  относительно состояния с  $0 < f'(\mathbf{X}, a) < \infty$ .

Наиболее важные свойства функционала (9) подробно рассмотрены в основополагающих работах Кульбака<sup>29,30</sup>. Здесь мы остановимся лишь на свойстве выпуклости  $I(f : f') \geq 0$ , которое делает содержание экстремальных свойств энтропии и различающей информации более наглядными.

*Знакоопределённость информации различия. Теорема Гиббса*

Для произвольных распределений  $f$  и  $f'$  имеем:

$$I(f : f') = k_B \int f(\mathbf{X}, a) \ln \left[ \frac{f(\mathbf{X}, a)}{f'(\mathbf{X}, a)} \right] d\Gamma \geq 0, \quad (10)$$

т.е. информация различия является знакоопределённым функционалом. Знак равенства достигается лишь при  $f = f'$ .

Выражение (10) есть следствие очевидного неравенства  $\ln(f/f') \geq 1 - (f'/f)$  (здесь  $f > 0, f' > 0$ ), в справедливости которого легко убедиться, заметив, что функция  $\ln x - 1 + 1/x$  положительна и равна нулю лишь при  $x = 1$ , а затем, положив  $x = f/f'$ . При умножении этого неравенства на  $f$  и интегрировании результата по всему фазовому пространству, можно получить неравенство (16). В самом деле,  $\int f \ln(f/f') d\Gamma \geq \int f \{1 - (f'/f)\} d\Gamma = 0$ , что и требовалось доказать.

Заметим, что из неравенства (10) также следует *принцип максимума энтропии Гиббса–Шеннона* в равновесном состоянии. Действительно, если ввести энтропию равновесного состояния,  $S_0(T, a) = -k_B \int f_0(\mathbf{X}, a, T) \ln[f_0(\mathbf{X}, a, T)] d\Gamma$ , описываемого

каноническим распределением Гиббса (5), и энтропию произвольного неравновесного состояния  $S(t) = -k_B \int f(\mathbf{X}, t) \ln[f(\mathbf{X}, t)] d\Gamma$ , которое может зависеть от времени (текущее

время в данном случае играет роль управляющего параметра), то из неравенства (10) следует<sup>5</sup>

$$S_0 - S(t) = k_B \int f(\mathbf{X}, t) \ln \left[ \frac{f(\mathbf{X}, t)}{f_0(\mathbf{X}, a, T)} \right] d\Gamma \geq 0 \quad (11)$$

(здесь знак равенства имеет место в случае совпадения обеих распределений). При этом важно подчеркнуть, что неравенство (11) справедливо при условии постоянства средней энергии системы  $E = \int H(\mathbf{X}) f_0(\mathbf{X}, a, T) d\Gamma = \int H(\mathbf{X}) f(\mathbf{X}, t) d\Gamma$ . Таким образом, энтропия максимальна для равновесного состояния (другими словами, равновесное состояние является наиболее хаотичным по сравнению с произвольным неравновесным состоянием) только в случае постоянства средней энергии<sup>2,5</sup>.

*Негэнтропийный принцип информации Бриллюэна.*

Пусть средние значения случайной энтропии  $s(f')$  для распределений  $f$  и  $f'$  одинаковы. Тогда, с учётом (1), (9) справедливо следующее неравенство для различающей информации<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} I(f : f') &= k_B \int f \ln \left( \frac{f}{f'} \right) d\Gamma = -S(f) + \int f s(f') d\Gamma = \\ &= -S(f) + \int f' s(f') d\Gamma = -S(f) + S(f') \geq 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Из (12) следует соотношение  $I(f : f') = S(f') - S(f)$ , или<sup>27</sup>

$$S(f) = S(f') - I(f : f'), \quad (13)$$

где информация различия представлена в виде отрицательного вклада в энтропию и по-

тому называется *негэнтропией Шредингера*<sup>vi)</sup>. В общем случае выполняется *негэнтропийный принцип Бриллюэна*<sup>19,20</sup>  $I(f:f') + S(f) - S(f') \geq 0$ , где знак неравенства соответствует необратимым процессам, происходящим в рассматриваемой системе. Из (13) следует, что переход системы с энтропией  $S(f)$  в состояние с большей энтропией  $S(f')$  происходит совместно с потерей информации различия  $I(f:f')$  о структуре системы. Аналогично, переход от состояния  $S(f')$  к состоянию с меньшей величиной  $S(f)$  энтропии сопровождается увеличением информации различия. Важно иметь в виду, что такие выводы правомерны только в тех физических системах, когда за начало отсчёта степени хаотичности можно принять состояние теплового равновесия<sup>2</sup>. Итак, при переходах системы между состояниями происходит взаимное изменение мер беспорядка и порядка.

*Принцип минимума информации различия.*

Принцип минимума различающей информации играет важную роль в проверке статистических гипотез математической статистики и в теории самоорганизации. Рассмотрим переход между состояниями системы, которые описываются распределениями  $f(\mathbf{X}, a)$  и  $f'(\mathbf{X}, a)$ . Найдём экстремум информации различия Кульбака при сохранении только нормировки распределения  $f$ . Согласно вариационному методу, вычислим безусловный экстремум функционала  $L = k_B \int f \ln \left( \frac{f}{f'} \right) d\Gamma + k_B (\lambda - 1) \int f d\Gamma$ , где  $(\lambda - 1)$  – неопределённый множитель Лагранжа,  $f'(\mathbf{X}, a)$  – фиксированное распределение. Из условия равенства нулю первой вариации функционала  $\delta L = \int \delta f (\ln f/f' + \lambda) d\Gamma = 0$  следует распределение  $f(\mathbf{X}, a) = f'(\mathbf{X}, a) \exp(-\lambda)$ . Используем условие нормировки распределения  $f(\mathbf{X})$  и получим наиболее вероятностное распределение

$$f(\mathbf{X}, a) = f'(\mathbf{X}, a). \quad (14)$$

Таким образом, различающая информация достигает своего минимального значения  $I_{\min} = 0$  при равенстве (14).

Рассмотрим теперь переход между состояниями системы с распределениями  $f(\mathbf{X}, a)$  и  $f'(\mathbf{X}, a)$ , когда сохраняется средневзвешенная величина

$$\langle T \rangle = \int T(\mathbf{X}, a) f(\mathbf{X}, a) d\Gamma \quad (15)$$

какой-либо случайной динамической переменной  $T(\mathbf{X})$ , т.е. на функцию  $f(\mathbf{X})$  накладывается дополнительное ограничение с тем, чтобы наиболее вероятное

<sup>vi)</sup> Заметим, что негэнтропия всегда проявляет тенденцию к убыванию.

распределение было отлично от  $f'(\mathbf{X})$ . Нахождение этого распределения связано с определением экстремума информации различия при дополнительном равенстве (15) и условии нормировки. Находим безусловный экстремум функционала

$$L = k_B \int f \ln \left( \frac{f}{f'} \right) d\Gamma - \tau k_B \int T f d\Gamma + k_B (\lambda - 1) \int f d\Gamma, \quad (16)$$

где  $\tau$  и  $(\lambda - 1)$  – неопределённые множители Лагранжа. Из условия равенства нулю первой вариации получим распределение

$$f(\mathbf{X}, a) = f'(\mathbf{X}, a) \exp \{ \tau T(\mathbf{X}, a) \} Z^{-1}(a, \tau), \quad (17)$$

где функция  $Z(a, \tau) \equiv \frac{1}{\exp(-\lambda)} = \int f'(\mathbf{X}, a) \exp \{ \tau T(\mathbf{X}, a) \} d\Gamma$  имеет следующие свойства

$$k_B \tau^2 \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ \frac{1}{\tau} \ln Z(a, \tau) \right] = I(f : f'), \quad \frac{\partial \ln Z(a, \tau)}{\partial \tau} = -\langle T \rangle. \quad (18)$$

Здесь параметр  $\tau$  меняется в пределах допустимых значений.

Распределение (17) даёт следующее экстремальные значения информации различия

$$I(f : f') = k_B \int f \ln \left( \frac{f}{f'} \right) d\Gamma = k_B \tau \int f T d\Gamma - k_B \ln Z(\tau) = -k_B \tau \langle T \rangle - k_B \ln Z(\tau).$$

Из соотношений (18) следует, что величины  $\langle T \rangle$  и  $\tau$  являются строго возрастающими функциями своих аргументов и между ними имеет место взаимно однозначное соответствие<sup>24</sup>.

Вторая вариация функционала (16) имеет вид:  $\delta^2 L = k_B \int \frac{\delta^2 f}{f} d\Gamma \geq 0$ . Из этого неравенства следует, что экстремум соответствует минимуму функционала. Таким образом, распределение (17) даёт минимально значение различающей информации.

#### 4. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В НЕЗАМКНУТЫХ СИСТЕМАХ

*Минимальная работа, производимая внешним окружением над системой,  
и информация различия*

Покажем, что существует связь информации различия Кульбака с минимальной работой, совершаемой внешним окружением над термодинамической системой<sup>3,32</sup>. Найдём минимальную работу, совершаемую внешней средой над рассматриваемой открытой системой, находящейся в неравновесном контакте с окружением. Далее будем считать рассматриваемую открытую систему (далее просто «систему»), частью большой замкнутой системы (система + окружение). Будем также полагать, что система находит-

ся в квазиравновесном состоянии (когда внешние параметры изменяются бесконечно медленно) при температуре  $T$  и давлении  $p$ , а в окружающей среде отсутствуют необратимые явления и её температуру  $T_0$ , давление  $p_0$  можно считать постоянными. При этом изменение термодинамических величин в окружении удовлетворяют термодинамическому закону  $T_0\Delta S_0 = \Delta E_0 - p_0\Delta V_0$ . При спонтанном переходе замкнутой системы к полному равновесию температура  $T$  и давление  $p$  системы сравниваются с величинами  $T_0$  и  $p_0$  (т.е. величины  $T_0$  и  $p_0$  являются, очевидно, температурой и давлением системы в состоянии равновесия). Тогда работа  $R$ , совершаемая окружением над системой, затрачивается на изменение полной энергии замкнутой системы,  $R = \Delta E + \Delta E_0 = \Delta E + p_0\Delta V_0 + T_0\Delta S_0$ . Используя условие сохранения объёма системы и внешнего окружения  $\Delta(V_0+V) = 0$  и закон возрастания энтропии  $\Delta S_0 + \Delta S \geq 0$  большой замкнутой системы в итоге получим<sup>3,32</sup>

$$R \geq -T_0\Delta S + \Delta E + p_0\Delta V. \quad (19)$$

где знак равенства соответствует обратимым явлениям в рассматриваемой системе, а направление процесса при необратимых явлениях в ней указывается знаком неравенства. Согласно неравенству (19), величина минимальной работы, совершаемая окружающей средой над системой, определяется формулой

$$R^{\min} = \Delta(E - T_0S + p_0V) = -T_0(S - S_0) + (E - E_0) + p_0(V - V_0) \quad (20)$$

( $T_0$  и  $p_0$  как постоянные величины могут быть внесены под знак  $\Delta$ ), т.е. эта минимальная работа равна изменению величины  $\tilde{\Phi} \equiv E - T_0S + p_0V$ . Заметим, что эта величина является *неравновесным термодинамическим потенциалом Максвелла–Гуи*. Именно потенциал  $\tilde{\Phi}$  был использован Ландау и Лифшицем<sup>32</sup> для вывода условий устойчивости открытой системы, подверженной воздействию внешнего окружения.

Если в течение процесса система находится в каждый данный момент в равновесном состоянии (но, конечно, не в равновесии со средой), то формулу (29) можно написать в другом виде  $\delta R^{\min} \geq -T_0\delta S + \delta E + p_0\delta V$ , где изменение работы  $\delta R$  есть функция процесса, а не состояния. Знак равенства соответствует обратимым явлениям в рассматриваемой системе, а направление процесса при необратимых явлениях в ней указывается знаком неравенства. При всяком малом отклонении от равновесия изменение величины  $\tilde{\Phi}$  должно быть положительным, т.е.  $\delta R^{\min} \geq -T_0\delta S + \delta E + p_0\delta V > 0$ .

#### *Основное соотношение термодинамики информационных процессов*

Методы современной теории информации, разработанные на мере Кульбака, служат естественной основой для статистической интерпретации минимальной работы. Рассмотрим сначала спонтанный переход рассматриваемой открытой системы от произвольного состояния с распределением  $f(\mathbf{X})$  к состоянию с распределением Гиббса для изобарически-изотермического ансамбля

$$f_0(\mathbf{X}) = [Q(T_0, p_0, N)]^{-1} \exp \left\{ -\frac{H(\mathbf{X}) + p_0 V}{k_B T_0} \right\},$$

которое соответствует полному равновесному контакту открытой системы с окружающей средой, имеющей давление  $p_0$  и температуру  $T_0$ .

Этот переход характеризуется информацией различия Кульбака

$$I = I(f : f_0) = k_B \int f \ln \left( \frac{f}{f_0} \right) d\Gamma = -(S - S_0) + \frac{E - E_0}{T_0} + \frac{p_0(V - V_0)}{T_0} \quad (21)$$

где равновесные энтропия  $S_0$  и энергия  $E_0$  вычисляются по формулам

$$S_0 = S(f_0) = -k_B \int f_0(\mathbf{X}) \ln f_0(\mathbf{X}) d\Gamma, \quad E_0 = \int H(\mathbf{X}) f_0(\mathbf{X}) d\Gamma,$$

а для величин  $S$  и  $E$  в (21) распределение  $f_0(\mathbf{X})$  в этих формулах заменяется на  $f(\mathbf{X})$ . Из (21) следует, что выражение для различающей информации связано со значением минимальной работы для обратимых процессов системы равенством  $I = R^{\min} / T_0$ , причём для бесконечно малых изменений имеем:  $\delta I = \delta R^{\min} / T_0$ . Отсюда следует основное соотношение термодинамики информационных физических процессов

$$dI = -dS + \frac{1}{T_0} dE + \frac{p_0}{T_0} dV, \quad (22)$$

описывающее изменения известных термодинамических величин и физической информации различия в открытых системах с постоянным числом частиц, находящихся в контакте с окружающей средой, имеющей давление  $p_0$  и температуру  $T_0$ .

Для необратимых информационных процессов имеем  $\delta I \leq \delta R / T_0$  и в равенство (22), добавляется знак неравенства<sup>15,16</sup>:  $dI \geq -dS + \frac{1}{T_0} dE + \frac{p_0}{T_0} dV$ .

*Основное соотношение термодинамики информационных процессов для системы с переменным числом частиц*

Обобщим результаты для спонтанного перехода между произвольным неравновесным состоянием открытой системы с переменным числом частиц и равновесным состоянием внешнего окружения, описываемым большим каноническим распределением Гиббса  $f(\mathbf{X}, a) = Q^{-1} \exp \left\{ -k_B^{-1} \left[ \beta_0 H(\mathbf{X}) + \sum_{i=1}^n a_{i0} T_i(\mathbf{X}) \right] \right\}$ . Тогда физическая информация различия запишется так

$$I = I(f : f_0) = k_B \int f \ln \left( \frac{f}{f_0} \right) d\Gamma + (S - S_0) - \frac{E - E_0}{T_0} =$$

$$= -\sum_{\alpha=1}^K \frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} [N_{\alpha} - N_{\alpha 0}] + \frac{p_0(V - V_0)}{T_0} + \sum_{i=1}^k \mathfrak{G}_{i0} [\langle F_i \rangle - \langle F_i \rangle_0] \geq 0. \quad (23)$$

Таким образом, обобщение дифференциального уравнения (22) для необратимых информационных физических процессов в открытой системе с переменным числом частиц, находящихся в контакте с окружение, имеющим давление  $p_0$  и температуру  $T_0$ , запишется, согласно (23) в следующем виде

$$\begin{aligned} 0 \leq dI &= -dS + \beta_0 dE + \sum_{k=1}^n a_{0k} d\langle T_k \rangle \equiv \\ &\equiv -dS + T_0^{-1} dE - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) dN_{\alpha} + (p_0 T_0^{-1}) dV + \sum_{i=1}^k \mathfrak{G}_{i0} dF_i. \end{aligned} \quad (24)$$

Если рассматриваемая система находится в состоянии локального равновесия, для которого справедливо основное термодинамическое тождество  $TdS = dE - \sum_{\alpha=1}^K \mu_{\alpha} dN_{\alpha} + pdV + \sum_{i=1}^k \mathfrak{G}_i dF_i$ , то неравенство

$$dI \geq \left( \frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) dE + \left( \frac{p_0}{T_0} - \frac{p}{T} \right) dV - \sum_{\alpha=1}^K \left( \frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} - \frac{\mu_{\alpha}}{T} \right) dN_{\alpha} + \sum_{i=1}^k (\mathfrak{G}_{i0} - \mathfrak{G}_i) dF_i \quad (25)$$

описывает необратимые процессы при неравновесном контакте локально равновесной открытой системы с внешним окружением, в котором отсутствуют неравновесные явления, т.е. её температура  $T_0$ , давление  $p_0$  и химические потенциалы  $\mu_{\alpha 0}$  не изменяются сколько-нибудь заметно и, следовательно, их можно считать постоянными.

*Основное соотношение термодинамики информационных процессов для пространственно неоднородных сред*

Наконец, можно известным феноменологическим путём<sup>1,3</sup> обобщить соотношение (24), записанное для пространственно однородных систем, на случай негомогенных сплошных сред, который соответствует, в частности, гидродинамическому приближению в кинетической теории газов. Рассмотрим переход между локально-равновесным состоянием  $f_0 = Z^{-1} \exp \left[ -k_B^{-1} \int \left\{ \beta_0(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}) + \sum_i^{n-1} a_{i0}(\mathbf{x}) T_i(\mathbf{x}) \right\} dV \right]$ , ( $\int f_0(\mathbf{X}, a) d\Gamma = 1$ ) и произвольным состоянием  $f(t)$ , где экстенсивные величины  $H(\mathbf{x})$  и  $T_i(\mathbf{x})$  и интенсивные параметры  $\beta_0(\mathbf{x})$  и  $a_{i0}(\mathbf{x})$  зависят также от пространственных координат  $\mathbf{x}$ . Исходной величиной является функционал информации различия

$$I(f : f_0) = k_B \int f \ln(f/f_0) d\Gamma = -(S - S_0) + \int \sum_i^n a_{i0}(\mathbf{x}) [\langle F_i(\mathbf{x}) \rangle - \langle F_i(\mathbf{x}) \rangle_0] dV \geq 0,$$

где для энтропий и средних значений имеем выражения

$$S(t) = -k_B \int f(\mathbf{X}, t) \ln [f(\mathbf{X}, t)] d\Gamma, \quad S_0 = -k_B \int f_0(\mathbf{X}, a, T) \ln [f_0(\mathbf{X}, a, T)] d\Gamma,$$

$$\langle F_i(\mathbf{x}, t) \rangle = \int F_i(\mathbf{x}, \mathbf{X}, t) f(\mathbf{X}, a) d\Gamma, \quad \langle F_i(\mathbf{x}, t) \rangle_0 = \int F_i(\mathbf{x}, \mathbf{X}, t) f_0(\mathbf{X}, a) d\Gamma.$$

Далее, рассматривая изменения функционала и определяя плотности информации различия  $I(\mathbf{x})$  и энтропии  $s(\mathbf{x})$ , получим, в силу произвольности объёма  $V$ , уравнение

для вариаций  $\delta I(\mathbf{x}) = -\delta s(\mathbf{x}) + \sum_i^n a_{i0}(\mathbf{x}) \delta \langle F_i(\mathbf{x}) \rangle \geq 0$ , которое, при дифференцировании по времени, приводит к следующему *основному соотношению термодинамики информационных процессов для пространственно неоднородных систем*

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{\partial I(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial s(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^n a_{i0} \frac{\partial}{\partial t} \langle F_i(\mathbf{x}) \rangle \equiv \\ &\equiv -\frac{\partial s(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \left( \frac{1}{T_0} \right) \frac{\partial e(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \left( \frac{p_0}{T_0} \right) \frac{\partial v(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \sum_{\alpha=1}^K \left( \frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} \right) \frac{\partial n_{\alpha}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^k g_{i0} \frac{\partial f_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь введены удельные величины, рассчитанные на единицу массы системы, а именно  $I(\mathbf{x}, t)$  – физическая информация различия Кульбака, отнесённая к единице массы системы;  $s(\mathbf{x}, t)$  – удельная энтропия;  $e(\mathbf{x}, t)$  – удельная энергия в движущейся системе координат;  $n_{\alpha}(\mathbf{x}, t)$  – числовая плотность  $\alpha$ -компоненты в единице объёма;  $f_i(\mathbf{x}, t)$  – обобщённая термодинамическая сила, отнесённая к единице массы.

## 5. ТЕРМОДИНАМИКА ИНФОРМАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ОТКРЫТЫХ СПЛОШНЫХ СРЕДАХ

### *Стационарные необратимые процессы*

Рассмотрим теперь стационарные неравновесные (необратимые) процессы в открытых системах. Неравновесный ансамбль может возникнуть, например, если на равновесный ансамбль (описываемый одним из распределений Гиббса) начинают влиять некоторые внешние возмущения (управляющие параметры), приводящие к изменению характеристик системы, задание которых и определяет ансамбль (таких, как объём, число частиц, химический потенциал и т.п.).

Проанализируем случай открытой системы. Для такой системы изменение любой экстенсивной величины  $\Lambda(t)$  за время  $dt$  может быть представлено в виде суммы двух вкладов: вклада  $d_e \Lambda$ , обусловленного внешними факторами, и вклада  $d_i \Lambda$ , связанного с внутренними свойствами самой системы, т.е.  $d \Lambda = d_e \Lambda + d_i \Lambda$ . Применительно к информации различия  $I$  и энтропии  $S$  это выражение принимает вид



$$dI = d_e I + d_i I, \quad dS = d_e S + d_i S, \quad (27)$$

Откуда  $dI + dS = (d_i I + d_i S) + (d_e I + d_e S)$ . Здесь первые два члена есть производства исследуемых величин, связанные с необратимыми явлениями внутри системы, а остальные связаны с внешней средой. Вклад в информацию различия  $d_e I$  и в энтропию  $d_e S$  может быть произвольного знака и зависит от характера изменения параметров среды и системы. Однако на изменения внутри системы накладывается ограничение в виде

$$d_i I + d_i S = 0 \quad (\text{для обратимых процессов}); \quad (28)$$

$$d_i I + d_i S > 0 \quad (\text{для необратимых процессов}). \quad (29)$$

Процессы дезорганизации системы характеризуются неравенствами  $d_i S > 0$ ,  $d_i I < 0$ , которые означают возрастание беспорядка и уменьшение порядка при необратимых переходах системы. Тогда, согласно (29), имеем некомпенсированное увеличение энтропии  $d_i S > -d_i I$ , что в итоге и приводит к полной хаотизации системы.

Итак, для обратимых процессов имеем условие (28) и из (24) получаем

$$\begin{aligned} 0 = d_i I + d_i S &= dI + dS - \beta_0 dE - \sum_k^n a_{0k} d\langle T_k \rangle \equiv \\ &\equiv dI + dS - \left( \frac{1}{T_0} \right) dE + \sum_{\alpha=1}^K \left( \frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} \right) dN_{\alpha} - \left( \frac{p_0}{T_0} \right) dV + \sum_i^k \vartheta_{i0} dF_i. \end{aligned}$$

В случае необратимых явлений из (24), согласно (29), вытекает неравенство<sup>20</sup>

$$\begin{aligned} 0 \leq d_i I + d_i S &= dI + dS - \beta_0 dE - \sum_k^n a_{0k} d\langle T_k \rangle \equiv \\ &\equiv dI + dS - \left( \frac{1}{T_0} \right) dE + \sum_{\alpha=1}^K \left( \frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0} \right) dN_{\alpha} - \left( \frac{p_0}{T_0} \right) dV + \sum_i^k \vartheta_{i0} dF_i, \end{aligned} \quad (30)$$

являющееся исходным для определения условий устойчивости макроскопических открытых систем. Если для обменных процессов справедливо равенство  $\beta_0 dE + \sum_k^n a_{0k} d\langle T_k \rangle = 0$ , то из (30) имеем  $dI + dS \geq 0$ , что для возмущений конечной величины даёт условие устойчивости в виде  $\Delta I + \Delta S < 0$ . Следовательно, для вариаций справедливы соотношения:  $\delta I + \delta S = 0$  и  $\delta^2 I + \delta^2 S < 0$ , где первое равенство определяет неравновесное стационарное состояние, а второе неравенство является условием устойчивости. Если в системе не происходит изменения информации различия  $dI = 0$ , то из полученных выражений следуют известные критерии устойчивости Гиббса–Дюгема<sup>8</sup>.

*Реагирование системы на информационно-термодинамическое воздействие окружения.*

Если возмущающие факторы вызваны внешними полями, то они непосредственно влияют на функцию распределения системы. Ниже остановимся именно на этом случае и рассмотрим возможные обменные явления в химически активной многокомпонентной среде, находящейся в неравновесном контакте с окружением и обменивающейся с ней как энергией, веществом и т.п., так и информацией.

Исходным является соотношение (26) термодинамики информационных процессов для открытых физических систем. Сделаем для этого ключевое предположение о локальном термодинамическом равновесии системы, считая, что в физически малом элементе её объёма информация различия Кульбака на единицу массы зависит от локальных переменных так же, как полная информация различия  $I$  зависит от глобальных экстенсивных величин  $S, E, \langle T_k \rangle$ . Разбивая теперь исходную систему на достаточно малые, но макроскопические области, в пределе бесконечно малого элемента объёма получим, что уравнение (24), описывающее неравновесные информационные физические процессы в сплошных средах, зависит также от координат  $\mathbf{x}$ . Записанное в сопутствующей системе координат, движущейся с центром массы элемента со скоростью  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ , уравнение (26) принимает вид:

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{dI(\mathbf{x}, t)}{dt} &= -\frac{ds(\mathbf{x}, t)}{dt} + \sum_{\beta=1}^{2+K} Q_{0\beta} \frac{d\lambda_{\beta}(\mathbf{x}, t)}{dt} = \\ &= -\frac{ds(\mathbf{x}, t)}{dt} + \left(\frac{1}{T_0}\right) \frac{de(\mathbf{x}, t)}{dt} + \left(\frac{p_0}{T_0}\right) \frac{dv(\mathbf{x}, t)}{dt} - \sum_{\alpha=1}^K \left(\frac{\mu_{\alpha 0}}{T_0}\right) \frac{dz_{\alpha}(\mathbf{x}, t)}{dt} \end{aligned} \quad (31)$$

где введены удельные величины, рассчитанные на единицу массы, а именно  $I(\mathbf{x}, t)$  – физическая информация различия Кульбака, отнесённая к единице массы системы;  $s(\mathbf{x}, t)$  – удельная энтропия;  $e(\mathbf{x}, t)$  – удельная внутренняя энергия в движущейся системе координат;  $z(\mathbf{x}, t) \equiv n/\rho$  – числовая плотность  $\alpha$ -компоненты в единице массы смеси;  $Q_{0\beta} = \{T_0^{-1}, p_0 T_0^{-1}, -\mu_{10} T_0^{-1}, \dots, -\mu_{K0} T_0^{-1}\}$  – интенсивные переменные во внешней среде;  $\lambda_{\beta} = \{e, v, z_1, \dots, z_K\}$  – экстенсивные величины, характеризующие рассматриваемую многокомпонентную систему.

Используем теперь уравнения баланса  $\frac{\partial(\rho\lambda_k)}{\partial t} = -div\{\mathbf{J}_{(\lambda_k)}^*(\mathbf{x}, t)\} + \sigma[\lambda_k]$  для различных экстенсивных величин  $\lambda_{\beta}$ , характеризующих состояние многокомпонентной смеси и её динамику (например, массы, внутренней энергии и т.п.). Здесь  $\partial(\cdot)/\partial t$  – локальная производная Эйлера по времени;  $\sigma[\lambda_k(\mathbf{x}, t)]$  – плотность внутреннего источника величины  $\lambda_k(\mathbf{x}, t)$  за единицу времени в единице объёма;  $\mathbf{J}_{(\lambda_k)}^*(\mathbf{x}, t) \equiv \rho\lambda_k \mathbf{u} + \mathbf{J}_{(\lambda_k)}$  – полный поток, включающий конвективную часть  $\lambda_k \mathbf{u}$  и кондуктивный субстанцио-

нальный поток  $\mathbf{J}_{(\lambda_k)}$  величины  $\lambda_k$ .

Отметим, что операторное соотношение  $\rho d\lambda_k/dt = \partial(\rho\lambda_k)/\partial t + \text{div}(\rho\lambda_k\mathbf{u})$ , дающее связь между субстанциональным и локальным изменениями характеристики  $\lambda_k$ , позволяет записать дифференциальное уравнение баланса в следующей (субстанциональной) форме

$$\sigma[\lambda_k(\mathbf{x}, t)] = \rho \frac{d\lambda_k(\mathbf{x}, t)}{dt} + \text{div}\{\mathbf{J}_{(\lambda_k)}(\mathbf{x}, t)\}. \quad (32)$$

Это уравнение является следствием уравнения неразрывности  $\partial\rho/\partial t + \text{div}(\rho\mathbf{u}) = 0$  и определения субстанциональной производной по времени  $d\lambda_k/dt \equiv \partial\lambda_k/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla\lambda_k$ , описывающей скорость изменения  $\lambda_k$  в сопутствующей системе координат, связанной с элементом среды, движущимся со скоростью  $\mathbf{u}$ .

Далее, в качестве конкретного примера континуальной среды, рассмотрим неоднородную открытую системы, в которой могут протекать химические реакции. Записанные в явном виде уравнения баланса для удельного объёма  $v \equiv 1/\rho$ , плотности импульса  $\rho\mathbf{u}$ , удельной (на единицу массы суммарного континуума) числовой плотности  $z_\alpha \equiv n_\alpha/\rho$  компоненты  $\alpha$  и удельной внутренней энергии смеси  $e$ , имеют вид (см., например, <sup>18</sup>):

$$\rho dv/dt + \text{div}\mathbf{J}_v = 0 \quad (33)$$

$$\sigma[\rho z_\alpha] \equiv \sum_{s=1}^r v_{\alpha s} \xi_s = \rho dz_\alpha/dt + \text{div}\mathbf{J}_\alpha, \quad (\alpha = 1, 2, \dots, K) \quad (34)$$

$$\sigma[\rho\mathbf{u}] \equiv -\nabla p + \rho \sum_{\alpha=1}^K z_\alpha \mathbf{F}_\alpha = \rho d\mathbf{u}/dt - \text{Div}\mathbf{P}^{dis}, \quad (35)$$

$$\sigma[\rho e] \equiv -p \text{div}\mathbf{u} + \mathbf{P}^{dis} : \text{Grad}\mathbf{u} + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \mathbf{F}_\alpha = \rho de/dt + \text{div}\mathbf{q}. \quad (36)$$

Здесь  $\rho = \sum_{\alpha=1}^K M_\alpha n_\alpha$ ,  $\rho\mathbf{u} \equiv \sum_{\alpha=1}^K M_\alpha n_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ ;  $n_\alpha$ ,  $M_\alpha$  и  $\mathbf{u}_\alpha$  – соответственно числовая плотность (на единицу объёма смеси), молекулярная масса и гидродинамическая скорость частиц сорта  $\alpha$ ;  $\mathbf{J}_\alpha \equiv n_\alpha(\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u})$  – поток диффузии частиц сорта  $\alpha$ ;  $\mathbf{J}_v \equiv -\mathbf{u}$  – поток удельного объёма;  $\sigma[n_\alpha] \equiv \sum_{s=1}^r v_{\alpha s} \xi_s$  – «источниковый член», представляющий собой интенсивность производства частиц сорта  $\alpha$  за счёт химических реакций;  $\xi_s$  – скорость протекания  $s$ -ой химической реакции ( $s = 1, 2, \dots, r$ );  $v_{\alpha s}$  – стехиометрические коэффициенты вещества сорта  $\alpha$  в  $s$ -ой независимой химической реакции, которые положительны для продуктов реакции и отрицательны для реагентов;

$p$  – термодинамическое давление смеси;  $\mathbf{P}^{dis} \equiv -\mathbf{P} + p\mathbf{I}$  – симметричный тензор вязких напряжений, связанный с процессами молекулярного переноса количества движения всех компонентов смеси;  $\mathbf{q}$  – тепловой поток;  $\mathbf{I}$  – единичный тензор;  $\mathbf{F}_\alpha$  – внешняя сила, действующая на одну частицу сорта  $\alpha$ .

Для информации различия и энтропии имеем следующие уравнения баланса

$$0 \leq \sigma[s] = \rho ds / dt + \text{div} \mathbf{J}_{(s)}, \quad (37)$$

$$0 \geq \sigma[I] = \rho dI / dt + \text{div} \mathbf{J}_{(I)}, \quad (38)$$

где  $\mathbf{J}_{(s)}$ ,  $\mathbf{J}_{(I)}$ ,  $\sigma[s]$ ,  $\sigma[I]$  – соответственно субстанциональные плотности потоков и локальные производства (за единицу времени в единице объёма) энтропии и информации различия

Конкретные представления для величин  $\mathbf{J}_{(s)}$  и  $\sigma[s]$  в уравнении (37) баланса энтропии смеси  $s$  имеют вид (см., например,<sup>18</sup>):

$$\mathbf{J}_{(s)} \equiv \mathbf{q}(T^{-1}) - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha (\mu_\alpha T^{-1}), \quad (39)$$

$$\begin{aligned} 0 \leq \sigma[s] &\equiv \mathbf{q} \cdot \nabla(T^{-1}) - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \nabla(\mu_\alpha T^{-1}) + (T^{-1})\sigma[e] - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_\alpha T^{-1})\sigma[\rho z_\alpha] = \\ &= \mathbf{q} \cdot \nabla(T^{-1}) + T^{-1} \mathbf{P}^{dis} : \text{Gradu} - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \left\{ \nabla(\mu_\alpha T^{-1}) - T^{-1} \mathbf{F}_\alpha \right\} + \sum_{s=1}^r \xi_s T^{-1} \mathbf{A}_s, \end{aligned} \quad (40)$$

где  $\mathbf{A}_s \equiv -\sum_{\alpha=1}^K \mu_\alpha \nu_{\alpha s}$ , ( $s = 1, 2, \dots, r$ ) – химическое сродство  $s$ -ой реакции (функция состояния системы, которая согласно де Донде является движущей силой химической реакции<sup>14</sup>).

Используя приведённый поток тепла  $\mathbf{J}_q \equiv \mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^K h_\alpha \mathbf{J}_\alpha$  (здесь  $h_\alpha$  – парциальная удельная энтальпия компоненты  $\alpha$ ), получим более удобное для дальнейшего представление величины  $\sigma[s]$ :

$$\begin{aligned} \sigma[s] &= \mathbf{J}_q \cdot \nabla(T^{-1}) + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \left[ -\nabla(\mu_\alpha T^{-1}) + h_\alpha \nabla(T^{-1}) + (T^{-1}) \mathbf{F}_\alpha \right] + \\ &+ T^{-1} \mathbf{P}^{dis} : \text{Gradu} + \sum_{s=1}^r \xi_s (\mathbf{A}_s T^{-1}). \end{aligned} \quad (41)$$

Разобьём теперь  $\mathbf{P}^{dis}$  и  $\text{Gradu}$  на две части, из которых вторая обладает нулевым сле-

дом:  $\mathbf{P}^{dis} = \pi \mathbf{I} + \mathbf{P}^{dis}$ ,  $Grad \mathbf{u} = 3^{-1} \mathbf{I} div \mathbf{u} + Grad \mathbf{u} = 3^{-1} \mathbf{I} div \mathbf{u} + (Grad \mathbf{u})^s + (Grad \mathbf{u})^a$ . Здесь  $\pi \equiv 3^{-1} Sp \mathbf{P}^{dis} = 3^{-1} \mathbf{P}^{dis} : \mathbf{I}$  – вязкое давление, а градиентный тензор скорости  $Grad \mathbf{u}$  разложен на симметрическую  $(Grad \mathbf{u})^s = 2^{-1} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})$  (тензор скорости деформации) и кососимметрическую  $(Grad \mathbf{u})^a = 2^{-1} (\nabla \mathbf{u} - \nabla^T \mathbf{u})$  части. Тогда выражение  $\mathbf{P}^{dis} : Grad \mathbf{u}$  в (41) можно записать в виде:  $\mathbf{P}^{dis} : Grad \mathbf{u} = \mathbf{P}^{dis} : (Grad \mathbf{u})^s + \pi div \mathbf{u}$ .

Таким образом, производство энтропии  $\sigma_{(s)}$  в реагирующей газовой смеси определяется следующим набором термодинамических потоков  $\mathbf{J}_q$ ,  $\mathbf{J}_\alpha$ ,  $\xi_s$ ,  $\pi$ ,  $\mathbf{P}^{dis}$  и сопряжённых им термодинамических сил:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_q &\equiv \nabla(T^{-1}); & \mathbf{X}_\alpha &\equiv -\nabla(T^{-1}\mu_\alpha) + h_\alpha \nabla(T^{-1}) + T^{-1} \mathbf{F}_\alpha; \\ \mathbf{A}_s^* &\equiv T^{-1} \mathbf{A}_s = -\sum_{\beta=1}^N (\mu_\beta T^{-1}) \nu_{\beta s} \quad (s=1, 2, \dots, r); & X_\pi &\equiv T^{-1} div \mathbf{u}; \\ \mathbf{S} &\equiv T^{-1} (Grad \mathbf{u})^s = T^{-1} \left\{ 2^{-1} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) - 3^{-1} \mathbf{I} div \mathbf{u} \right\}. \end{aligned}$$

С помощью этих величин производство энтропии  $\sigma[s]$  в реагирующей газовой смеси может быть переписано в следующей билинейной форме

$$0 \leq \sigma[s] = \sum_{s=1}^r \mathbf{A}_s^* \xi_s + \pi X_\pi + \mathbf{J}_q \cdot \mathbf{X}_q + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \mathbf{X}_\alpha + \mathbf{P}^{dis} : \mathbf{S} \geq 0, \quad (42)$$

отвечающей трём независимым источникам неравновесных процессов в реагирующей смеси, имеющих существенно различную физическую природу (скалярную, векторную и тензорную). Выражение (42) позволяет конкретизировать определяющие соотношения между потоками и термодинамическими силами для рассматриваемого здесь многокомпонентного континуума.

### Линейные феноменологические законы

Как известно, в неравновесной термодинамике<sup>8,13</sup> в качестве определяющих соотношений, которые дополняют систему гидродинамических уравнений, применяются феноменологические линейные соотношения Онзагера необратимых процессов. В изотропном случае соответствующие феноменологические уравнения в прямоугольной системе координат записываются в виде

$$\pi = l_{\pi\pi} X_\pi + \sum_{s=1}^r l_{\pi s} \mathbf{A}_s^*, \quad \xi_s = l_{s\pi} X_\pi + \sum_{m=1}^r l_{sm} \mathbf{A}_m^*, \quad (s=1, 2, \dots, r);$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_q &= L_{qq}\mathbf{X}_q + \sum_{\beta=1}^K L_{q\beta}\mathbf{X}_\beta; \quad \mathbf{J}_\alpha = L_{\alpha q}\mathbf{X}_q + \sum_{\beta=1}^K L_{\alpha\beta}\mathbf{X}_\beta, \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N); \\ \mathbf{P}^{dis} &= L_\mu \mathbf{S} = L_\mu T^{-1} \left\{ 2^{-1}(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) - 3^{-1} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u} \right\}, \end{aligned} \quad (43)$$

причём между скалярными кинетическими коэффициентами в этих соотношениях существуют следующие *соотношения симметрии*:  $L_{q\beta} = L_{\beta q}$  ( $\beta = 1, 2, \dots, N$ );  $L_{\alpha\beta} = L_{\beta\alpha}$  ( $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N$ );  $l_{s\pi} = -l_{\pi s}$  ( $s = 1, 2, \dots, r$ );  $l_{sm} = l_{ms}$  ( $s, m = 1, 2, \dots, r$ ).

Подставляя (43) в (42), в результате получим

$$\begin{aligned} 0 \leq \sigma[s] &= \sum_{s=1}^r \sum_{m=1}^r l_{sm} \mathbf{A}_s^* \mathbf{A}_m^* + l_{\pi\pi} X_\pi^2 + \\ &+ L_\mu \mathbf{S} : \mathbf{S} + L_{qq} |\mathbf{X}_q|^2 + \sum_{\beta=1}^K L_{q\beta} \mathbf{X}_\beta \cdot \mathbf{X}_q + \sum_{\alpha=1}^K L_{\alpha q} \mathbf{X}_q \cdot \mathbf{X}_\alpha + \sum_{\alpha=1}^K \sum_{\beta=1}^K L_{\alpha\beta} \mathbf{X}_\beta \cdot \mathbf{X}_\alpha \geq 0. \end{aligned}$$

## 6. КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ФОРМУЛИРОВКА ПРИНЦИПА

### ЛЕ-ШАТЕЛЬЕ-БРАУНА

*Необратимые информационные физические процессы в многокомпонентных средах, вызванные внешними возмущениями.*

Для получения явного вида величин  $\mathbf{J}_{(I)}$  и  $\sigma[I]$  поступим следующим образом. Подставляя соотношения (34), (36) и (37) в основное соотношение термодинамики информационных процессов (31), в результате будем иметь

$$\begin{aligned} \rho \frac{dI}{dt} + \rho \frac{ds}{dt} &= \rho \left\{ (T_0^{-1}) \frac{de}{dt} + (p_0 T_0^{-1}) \frac{dv}{dt} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \frac{dz_\alpha}{dt} \right\} = \\ &- \operatorname{div} \left\{ (T_0^{-1}) \mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \mathbf{J}_\alpha - (p_0 T_0^{-1}) \mathbf{u} \right\} + \mathbf{q} \cdot \nabla (T_0^{-1}) - \\ &- \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_\alpha \cdot \nabla (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) + \mathbf{J}_v \cdot \nabla (p_0 T_0^{-1}) + T_0^{-1} \sigma[\rho e] - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \sigma[\rho z_\alpha]. \end{aligned} \quad (44)$$

Сопоставляя это выражение с суммой уравнений (37) и (38)

$$\rho \frac{ds}{dt} + \rho \frac{dI}{dt} = - \operatorname{div} (\mathbf{J}_{(I)} + \mathbf{J}_{(s)}) + \sigma[I] + \sigma[s],$$

в результате получим следующие выражения для суммарного потока и производства информации различия и энтропии

$$\mathbf{J}_{(I)} + \mathbf{J}_{(s)} = (T_0^{-1})\mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \mathbf{J}_{\alpha} + (p_0 T_0^{-1}) \mathbf{J}_v, \quad (45)$$

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sigma[I] + \sigma[s] = \\ &= T_0^{-1} \sigma[\rho e] - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \sigma[\rho z_{\alpha}] + \mathbf{q} \cdot \nabla(T_0^{-1}) - \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \cdot \nabla(\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(p_0 T_0^{-1}) = \\ &= L_{qq} \mathbf{X}_q \cdot \mathbf{X}_{q0} + \sum_{\beta=1}^K L_{q\beta} \mathbf{X}_{\beta} \cdot \mathbf{X}_{q0} + \sum_{\alpha=1}^K L_{\alpha q} \mathbf{X}_q \cdot \mathbf{X}_{\alpha 0} + \sum_{\alpha=1}^K \sum_{\beta=1}^K L_{\alpha\beta} \mathbf{X}_{\beta} \cdot \mathbf{X}_{\alpha 0} + L_{\mu} \mathbf{S} : \mathbf{S}_0 + l_{\pi\pi} X_{\pi} X_{\pi 0} \\ &\quad + \sum_{s=1}^r l_{\pi s} (\mathbf{A}_s^* X_{\pi 0} - \mathbf{A}_{s0}^* X_{\pi}) + \sum_{s=1}^r \sum_{m=1}^r l_{sm} \mathbf{A}_s^* \mathbf{A}_{m0}^* + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(-Q_2 + Q_{20}), \end{aligned} \quad (46)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{q0} &= \nabla(T_0^{-1}), \quad \mathbf{X}_{\alpha 0} \equiv -\nabla(T_0^{-1} \mu_{\alpha 0}) + h_{\alpha 0} \nabla(T_0^{-1}) + T_0^{-1} \mathbf{F}_{\alpha}, \quad \mathbf{S}_0 \equiv T_0^{-1} (\text{Grad} \mathbf{u})^s, \\ X_{\pi 0} &\equiv T_0^{-1} \text{div} \mathbf{u}, \quad \mathbf{A}_{s0}^* = -\sum_{\beta=1}^N (\mu_{\beta 0} T_0^{-1}) \mathbf{v}_{\beta s}, \quad \nabla Q_{20} \equiv \nabla(p_0 T_0^{-1}) \end{aligned}$$

– сопряжённые термодинамические силы, действующие со стороны окружающей среды. Подставляя теперь в (45) и (46) выражения (39) и (40) для потока и производства энтропии, в итоге получим

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{(I)} &= -\mathbf{J}_{(s)} + (T_0^{-1})\mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^K (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \mathbf{J}_{\alpha} + (p_0 T_0^{-1}) \mathbf{J}_v = \\ &= \mathbf{q} \left\{ -(T^{-1}) + (T_0^{-1}) \right\} + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \left\{ (\mu_{\alpha} T^{-1}) - (\mu_{\alpha 0} T_0^{-1}) \right\} + \mathbf{J}_v (p_0 T_0^{-1}), \\ 0 &\geq \sigma[I] = \mathbf{J}_q \cdot (-\mathbf{X}_q + \mathbf{X}_{q0}) + \sum_{\alpha=1}^K \mathbf{J}_{\alpha} \cdot (-\mathbf{X}_{\alpha} + \mathbf{X}_{\alpha 0}) + \mathbf{P}^{dis} : (-\mathbf{S} + \mathbf{S}_0) + \\ &\quad + \sum_{s=1}^r (-\mathbf{A}_s^* + \mathbf{A}_{s0}^*) \xi_s + \pi (-X_{\pi} + X_{\pi 0}) + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(Q_{20} - Q_2) = \\ &= L_{qq} \mathbf{X}_q \cdot (\mathbf{X}_{q0} - \mathbf{X}_q) + \sum_{\beta=1}^K L_{q\beta} \mathbf{X}_{\beta} \cdot (\mathbf{X}_{q0} - \mathbf{X}_q) + \sum_{\alpha=1}^K L_{\alpha q} \mathbf{X}_q \cdot (\mathbf{X}_{\alpha 0} - \mathbf{X}_{\alpha}) + \\ &\quad + \sum_{\alpha=1}^K \sum_{\beta=1}^K L_{\alpha\beta} \mathbf{X}_{\beta} \cdot (\mathbf{X}_{\alpha 0} - \mathbf{X}_{\alpha}) + L_{\mu} \mathbf{S} : (\mathbf{S}_0 - \mathbf{S}) + l_{\pi\pi} X_{\pi} (X_{\pi 0} - X_{\pi}) + \mathbf{J}_v \cdot \nabla(Q_{20} - Q_2) + \\ &\quad + \sum_{s=1}^r \sum_{m=1}^r l_{sm} \mathbf{A}_s^* \cdot (\mathbf{A}_{s0}^* - \mathbf{A}_s^*) + \sum_{s=1}^r l_{\pi s} (\mathbf{A}_s^* X_{\pi 0} - \mathbf{A}_{s0}^* X_{\pi}). \end{aligned} \quad (48)$$

Отметим, что выражение (48) для производства информации различия можно разбить на три части разного характера, каждая из которых, согласно общему принципу

уменьшения локального производства информации Кульбака, должна быть отрицательно определённой величиной. Другими словами, по аналогии с *принципом Кюри* термодинамики необратимых процессов, необходимо, чтобы выполнялось не только суммарное условие

$$\sigma[I] = \overbrace{\sigma[I]}^{(\text{скаляр})} + \overbrace{\sigma[I]}^{(\text{вектор})} + \overbrace{\sigma[I]}^{(\text{тензор})} \leq 0,$$

но и чтобы для всех не взаимодействующих друг с другом процессов различного тензорного характера производство информации было отрицательно определённой величиной.

Таким образом, найдены явные выражения для субстанционального потока информации различия  $\mathbf{J}_{(I)}$  и локального производства информации различия  $\sigma[I]$  за единицу времени в единице объёма при необратимых информационных физических процессах, а также определено суммарное производство информации различия и энтропии, зависящее от потоков и сил со стороны окружающей среды. Из соотношения (48) вытекает интересное следствие, что открытая неравновесная гидродинамическая система стремится к уменьшению внешнего воздействия, обусловленного термодинамическими силами  $\mathbf{X}_{q0}$ ,  $\mathbf{X}_{\alpha 0}$ ,  $\mathbf{S}_0$ ,  $\mathbf{A}_{s0}^*$ ,  $X_{\pi 0}$  и  $\nabla Q_{20}$  со стороны внешней среды, причём такое сопротивление системы, возможное лишь при наличие потоков  $\mathbf{J}_q$ ,  $\mathbf{J}_\alpha$ ,  $\mathbf{P}^{dis}$ ,  $\xi_s$ ,  $\pi$  и  $-\mathbf{u}$ , получило здесь количественное подтверждение.

Неравенства (42), (46) и (48) составляют, по существу, содержание так называемого *принципа наименьшего принуждения Ле Шателье–Брауна* подвижного равновесия, согласно которому динамическое равновесие термодинамической системы, подвергшейся воздействию внешних факторов (связанных, в частности, с изменением температуры, концентрации реагирующих веществ, давления, внешнего магнитного поля и т.п.), смещается в таком направлении, при котором эффект внешнего воздействия ослабляется (см., например,<sup>32,33</sup>). Поскольку система как бы внутренне сопротивляется внешнему воздействию, говорят, что она ограничивает (*модерирует*) действие возмущающего фактора<sup>vii)</sup>. Этот принцип позволяет предвидеть направление течения процесса в системе, выведенной внешним воздействием из состояния устойчивого равновесия, в частности, указать направление смещения устойчивого равновесия различных технологических процессов без детального анализа условий их равновесия<sup>32</sup>.

Вместе с тем, в отличие от эвристического (качественного) принципа Ле Шателье–Брауна, предложенный здесь подход позволяет найти *количественные*

vii) Эвристический принцип смещения равновесия Ле Шателье–Брауна, постулирующий возникновение отрицательных обратных связей при взаимодействии «система-окружающая среда», представляет собой частный случай более общего подхода к объяснению устойчивости динамических структур, известного под названием «теоремы модерации»<sup>13,14</sup>.



*критерии* противодействия системы, подверженной конечному влиянию внешнего воздействия. В частности, на основе неравенства (48) (рассматриваемого для процессов одного и того же тензорного характера) можно определить количественные характеристики степени реагирования системы на внешнее нагревание, которое приводит к смещению химического равновесия в сторону эндотермической реакции (сопровожаемой поглощением теплоты) и тем самым способствует ослаблению влияния внешнего воздействия, а также определить степень смещения химического равновесия в сторону экзотермической реакции (сопровожаемой выделением тепла) при охлаждении системы. Аналогично, этот подход позволяет количественно определить меру смещения равновесия, связанного с уменьшением общего объема системы при увеличении давления окружения, и установить всю номенклатуру физико-химических процессов приводящих к увеличению объема, которые сопутствуют уменьшению давления окружающей среды.

Вместе с тем, совершенно ясно, что в многокомпонентных химически реагирующих средах все протекающие процессы сильно взаимозависимы, модерация какого-либо внешнего воздействия (связанного, например, с изменением состава за счёт введения или удаления одного из компонентов) зависит от модерации других управляющих параметров (например, градиента температуры) и оказывает, в свою очередь, влияние на них. Кроме этого, существующая плотная динамическая сеть взаимодействий между процессами тепло- и массопереноса и химической кинетики в многокомпонентной гидродинамической системе и её окружении многократно обогащена за счёт потоков информации. В общем случае это может существенно затруднить количественное определение степени противодействия подобной среды информационно-термодинамическому воздействию окружения.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Предложена информационно-термодинамическая концепция перехода «беспорядок-порядок» в открытых термодинамических системах. Такие системы наряду с обычным обменом энергией и негэнтропией с внешней средой, необходимым для спонтанного формирования различных диссипативных структур, получают дополнительную возможность усложнения и совершенствования благодаря информационному управлению. Основанное на физической информации различия Кульбака рассмотрение открытых динамических систем позволило добиться согласованности в представлении различных вопросов их самоорганизации.

Теоретико-информационный подход использован здесь также и для описания неравновесных явлений в сплошных средах вдали от термодинамического равновесия. Проанализированы следствия данного подхода, при котором важную роль играет суммарное локальное производство макроскопической энтропии и информации различия. Возможная в рамках рассмотренной методологии количественная оценка реагирования многокомпонентной химически активной системы (первоначально находившейся в устойчивом стационарном состоянии) на информационно-

термодинамическое воздействие внешнего окружения (количественная формулировка принципа Ле Шателье–Брауна) чрезвычайно полезна с точки зрения практических приложений, поскольку позволяет в зависимости от потребности наметить пути усиления или ослабления эффекта возмущающих факторов на рассматриваемую систему. Отметим, что данный подход может быть распространён и на некоторые другие сплошные среды, в частности, многофазные<sup>34,35</sup>, электропроводящие и турбулентные<sup>18,36</sup>.

## REFERENCES

- [1] Zubarev D.P. *Neravnovesnaya statisticheskaya mekhanika*. Nauka, Moscow, (1971).
- [2] Klimantovich Yu.L. *Turbulentnoe dvizhenie i struktura khaosa. Novyi podkhod k statisticheskoi teorii otkrytykh system*. Nauka, Moscow, (1990).
- [3] Zaripov R. G. *Printsipy neekstensivnoi statisticheskoi mekhaniki i geometriya mer besporyadka I poryadka*. Izdatel'stvo Kazanskogo Gosudarstvennogo Tekhnologicheskogo Universiteta, (2010).
- [4] Anisimov S.I., Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Nishihara K., Oparin A.M. and Petrov Yu.V., “Destruction of a solid film under the action of ultrashort laser pulse”, *JETP Lett.*, **77**, 606-610 (2003).
- [5] Mazhukin V.I. and Shapranov A.V., Molekuliarno-dinamicheskoe modelirovanie processov nagreva i plavleniya metallov. I. Model' i Vychislitel'nyi algoritm, *M.V. Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Preprint* **31** (2012) (In Russian).
- [6] Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Perezhigin V.E., “Mathematical modeling of thermophysical properties, heating and melting processes of metal with the molecular dynamics method”, *Mathematica Montisnigri*, **24**, 4766, (2012) (In Russian).
- [7] Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Samokhin A.A., Ivochkin A.Yu.. “Mathematical modeling of non-equilibrium phase transition in rapidly heated thin liquid film”, *Mathematica Montisnigri*, **27**, 65-90 (2013).
- [8] Glensdorf P., Prigozhin I. *Termodinamicheskaya teoriya struktury, ustoichivosti i fluktuatsii*. Mir, Moscow, (1973)
- [9] Klimantovich Yu.L. *Statisticheskaya teoriya otkrytykh system*. T.1. Moscow, TOO “Yanus”, (1995).
- [10] Nikolas G., Prigozhin I. *Samoorganizatsiya v neravnovesnykh sistemakh*. Mir, Moscow, (1979).
- [11] Polak L.S., Mikhailov A.S. *Samoorganizatsiya v neravnovesnykh fiziko-khimicheskikh protsesakh*. Nauka, Moscow, (1975).
- [12] Poplavskii R.P. *Termodinamika informatsionnykh protsesov*. Nauka, Moscow, (1981).
- [13] Prigozhin I., Kondepudi D. *Sovremennaya termodinamika. Ot teplovykh dvigatelei do dissipativnykh struktur*. Mir, Moscow, (2002).
- [14] Prigogine, I., Defay, R. *Chemical Thermodynamics*. Longmans Green and Co., London-New-York-Toronto, (1954).
- [15] Khaken G. *Sinergetika: Ierarkhii neustoichivostei v samoorganizuyushchikhsya sistemakh i ustroystvakh*. Mir, Moscow, (1985).
- [16] Khaken G. *Informatsiya i samoorganizatsiya. Makroskopicheskii podkhod k slozhnym sistemam*. Mir, Moscow, (1991).
- [17] Ebeling V. *Obrazovanie syруктур pri neobratimyykh protsessakh*. Mir, Moscow, (1979).

- [18] Marov. M.Ya, Kolesnichenko. A.V. *Turbulence and Self-Organization. Modeling Astrophysical Objects*. Springer New York- Heidelberg -Dordrecht- London, (2013).
- [19] Brilliyen L. *Nauka i teoriya informatsii*. Inostrannaya Literatura, Moscow, (1960).
- [20] Brilliyen L. *Nauchnaya neopredelennost' i informatsiya*. Mir, Moscow, (1966).
- [21] Szilard L. «Über die Entropieverminderung in einem thermodynamischen System bei Eingriffen intelligenter Wesen (On the reduction of entropy in a thermodynamic system by the intervention of intelligent beings)». *Zeitschrift für Physik*. **53**, 840-856 (1929).
- [22] Zaripov R.G. *Samoorganizatsiya i neobratimost' v neekstensivnykh sistemakh*. Izdatel'stvo "Fen", Kazan, (2002).
- [23] Zaripov R.G. «Izmenenie entropii i informatsii razlichiya Kul'baka pri evolyutsii v pronstranstve upravlyayushchikh parametrov». *Fizika (Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy)*, **2**, 90-94 (1995).
- [24] Zaripov R.G. «Izmenenie informazii razlichiya Kul'baka v prosesse samoorganizatsii. I-Teorema». *Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki*. **58**(11), 2247-2249 (1988).
- [25] Zaripov R.G. «Izmenenie entropii i informazii razlichiya Tsallisa v protsesakh samoraspada i samoorganizatsii neekstensivnykh system», *Fizika (Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy)* **11**, 24–29 (2001).
- [26] Zaripov R.G. «Change information of difference at evolution of not extensive systems in space of operating parametres». *Russian Physics Journal*, **47**(6), 647–655 (2004).
- [27] Jaynes E.T. «Information theory and statistical mechanics». In book: «*Statistical Physics*». *Brandeis Lectures*, **3**, 160 (1963).
- [28] Khill T. *Statisticheskaya mekhanika*. Inostrannaya Literatura, Moscow, (1960).
- [29] Kullback S. *Teoriya informatsii i statistika*. Nauka, Moscow, (1967).
- [30] Kullback S., Leibler R.A. «On information and sufficiency», *Ann. Math. Statist.* **22**, 79-86 (1951).
- [31] Shredenger E. *Chto takoe zhizn' s tochki zreniya fiziki?* Inostrannaya Literatura, Moscow, (1947).
- [32] Landau L.D., Lifshits E.M. *Statisticheskaya fizika*. Nauka, Moscow, (1964).
- [33] Rusinov A.I., Shul'ts M.M. «O sokrashchyennom printsipe le Shatel'e–Brauna». *Vestnik Leningradskogo Gosudarstvennogo Universiteta. Siriya fiziki i khimii*, **4**, 60-65 (1960).
- [34] Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Samokhin A.A., Mazhukin A.V. Koroleva O.N., “Visualization and analysis of the results of molecular-dynamic modeling of intensive evaporation of liquid in the near-critical region”, *Scientific Visualization*, **6** (4), 72-95, (2014).
- [35] Mazhukin V.I., Shapranov A. V., Koroleva O.N., Rudenko A.V.”Molecular dynamics simulation of critical point parameters for silicon”, *Mathematica Montisnigri*, **31**, 66-77 (2014).
- [36] Marov M.Ya. and Kolesnichenko A.V., “Chaotic and ordered structures in the developed turbulence”. In: “*Astrophysical disks: Collective and stochastic phenomena*” (eds.: A.M. Fridman and M.Ya. Marov), Springer, 23-54 (2006).

Received December, 10 2015