

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Обобщенное распределение Максвелла в формализме энтропии Тсаллиса

Т. Н. Бакиев,¹ Д. В. Накашидзе,² А. М. Савченко,^{2,а} К. М. Семенов^{2,б}¹ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», факультет математики
Россия, 119048, Москва, ул. Усачева, д. 6² Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

Поступила в редакцию 02.05.2022, после доработки 01.06.2022, принята к публикации 02.06.2022.

В работе рассмотрен формализм статистической механики, основанный на функционале неаддитивной энтропии Тсаллиса. В случае степенного гамильтониана общего вида с произвольным числом степеней свободы на основе распределения Тсаллиса получены среднее значение энергии и обобщенное распределение Максвелла (распределение Максвелла–Тсаллиса). Предложенный способ расчета интегралов в данном формализме упрощает вычисление моментов высоких порядков для случайных величин такой системы. На основе условия сходимости рассматриваемых интегралов показано, что нижняя граница изменения параметра q связана с числом частиц в системе. Рассчитаны характеристики статистических систем, описываемых распределением Максвелла–Тсаллиса: средний модуль скорости, среднеквадратичная и наиболее вероятная скорости атомов газа. Показано, что система, описываемая данным распределением, должна иметь ненулевые корреляции между скоростями и энергиями частиц и что классическое распределение Максвелла является частным случаем предложенного обобщенного распределения.

Ключевые слова: энтропия Тсаллиса, распределение Тсаллиса, распределение Максвелла, средняя энергия, степенное распределение.

УДК: 536.758. PACS: 05.20.-y, 05.70.-a, 05.90.+m.

ВВЕДЕНИЕ

Энтропия Больцмана–Гиббса–Шеннона [1] широко применяется в теории информации и равновесной статистической физике. Для набора из W дискретных макроскопических состояний она задается как

$$S_{BGS} = -k_B \sum_{i=1}^W \rho_i \ln \rho_i, \quad (1)$$

при

$$\sum_{i=1}^W \rho_i = 1, \quad (2)$$

где S_{BGS} — энтропия, ρ_i — вероятности реализаций микросостояний, а k_B — положительная константа, полагаемая равной постоянной Больцмана.

Однако ограничения применимости данного вида энтропии для неаддитивных и экстенсивных систем [2], а также критика аксиоматики данного вида энтропии [3] поднимают вопрос о поиске альтернатив, одной из которых является энтропия Реньи [4],[5], связанная с рассмотрением сложных аддитивных систем, а также энтропия Тсаллиса [6],[7], по своему построению претендующая на описание неаддитивных систем.

Энтропия Реньи используется в областях, связанных с обработкой изображений [8], количественной оценкой нейронной активности [9] или анализом информационных потоков в финансовых данных [10].

На основе формализма Тсаллиса выполнено множество работ, связанных, в частности, с энтропией

черных дыр [11], точечными дефектами в моделях тепловой конвекции [12], сегментацией медицинских изображений [13] и обобщенной релаксацией спиновых стекол [14].

В настоящей работе рассмотрено теоретическое исследование распределения по скоростям для степенного гамильтониана в статистике Тсаллиса. В частности было получено и распределение по скоростям частиц свободного одноатомного идеального газа, оценено влияние параметра q и числа частиц на распределение; рассчитаны средняя энергия, среднеквадратичная, средняя и наиболее вероятная скорости такой системы, а также ковариации энергий и скоростей.

1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТСАЛЛИСА

Рассмотрим статистическую систему с реализацией W микросостояний с вероятностями $\rho = \{\rho_i\}_{i=1}^W$. Функционал энтропии Тсаллиса такой системы определяется следующим образом [6]

$$S^{(T)}(\rho) = \frac{1}{1-q} \left(\sum_{i=1}^W \rho_i^q - 1 \right). \quad (3)$$

Используя подход Джейнса [15], получим распределение Тсаллиса, соответствующее введенному функционалу энтропии. Фиксируя условие нормировки $\sum_{i=1}^W \rho_i = 1$ и определяя среднюю энергию системы как $U = \sum_{i=1}^W H_i \rho_i$, имеем функционал:

$$L_T(\rho) = \frac{1}{1-q} \left(\sum_{i=1}^W \rho_i^q - 1 \right) - \alpha_L \sum_{i=1}^W \rho_i - \beta_L \sum_{i=1}^W H_i \rho_i, \quad (4)$$

^а E-mail: a.m.savchenko@gmail.com

^б E-mail: semenovkm@protonmail.com

где α_L и β_L — множители Лагранжа. Решая задачу максимизации функционала, получаем

$$\rho_i^{(T)} = \frac{1}{Z_T} \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* (H_i - U) \right)^{\frac{1}{q-1}}, \quad (5)$$

где

$$Z^{(T)} = \sum_{i=1}^W \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* (H_i - U) \right)^{\frac{1}{q-1}} \quad (6)$$

и

$$\beta^* = \frac{\beta_L}{\sum_{i=1}^W (\rho_i^{(T)})^q}. \quad (7)$$

Заметим, что в случае классических систем с непрерывным спектром допустимых значений энергии распределение Тсаллиса представимо в виде функции плотности вероятности:

$$\rho^{(T)} = \frac{1}{Z_T} \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* (H(r, p) - U) \right)^{\frac{1}{q-1}}, \quad (8)$$

$$Z^{(T)} = \int_X \sum_{i=1}^W \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* (H(r, p) - U) \right)^{\frac{1}{q-1}} d\Gamma, \quad (9)$$

где X — объем в фазовом пространстве, занимаемый системой, $r = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ — координаты частиц, $p = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ — импульсы частиц, N — число

частиц, $d\Gamma$ — элемент интегрирования по фазовому пространству:

$$d\Gamma = \frac{1}{N!} \prod_{i=1}^N \gamma_i \frac{d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\gamma^N}{N!} \prod_{i=1}^N \frac{d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (10)$$

где под γ_i подразумевается число внутренних, не подверженных классическому переходу, степеней свободы частицы с номером i , $\gamma^N = \prod_{i=1}^N \gamma_i$, а $N!$ — число перестановок тождественных частиц.

Тем самым функция $\rho^{(T)}$ удовлетворяет равенствам

$$\int_X \rho^{(T)} d\Gamma = 1, \quad (11)$$

$$U = \int_X \rho^{(T)} H d\Gamma. \quad (12)$$

2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЭНТРОПИИ ТСАЛЛИСА И ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ МНОЖИТЕЛЯ β^*

Для распределения Тсаллиса можно получить полезное выражение, называемое q -формулой (см. Приложение 1):

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^W \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* (H_i - U) \right)^{\frac{1}{q-1}} &= \\ &= \sum_{i=1}^W \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* (H_i - U) \right)^{\frac{q}{q-1}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Аналогичная формула также справедлива и для статистики Реньи, как подробнее показано в [16].

Используя (13), выразим энтропию Тсаллиса через статистическую сумму $Z^{(T)}$:

$$S^{(T)} = \frac{1}{1-q} \left(Z^{(T)-q} \sum_{i=1}^W \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* (H_i - U) \right)^{\frac{q}{q-1}} - 1 \right) = \frac{1}{1-q} \left(Z^{(T)1-q} - 1 \right). \quad (14)$$

Рассмотрим систему, состояние которой определяется набором параметров (U, X, N) , где $x = (V, a)$, U — средняя энергия, N — число частиц, V — объем системы, a — воздействующие на систему внешние

поля. Тогда уровни энергии H_i зависят от параметров x и N . Из (6) следует, что $Z^{(T)} = Z^{(T)}(U, x, N)$, а значит, $S^{(T)} = S^{(T)}(U, x, N)$ согласно зависимости (14). Запишем полный дифференциал энтропии

$$dS^{(T)} = \left(\frac{\partial S^{(T)}}{\partial U} \right)_{x,N} dU + \left(\frac{\partial S^{(T)}}{\partial x} \right)_{U,N} dx + \left(\frac{\partial S^{(T)}}{\partial N} \right)_{x,U} dN. \quad (15)$$

Рассмотрим каждую частную производную отдельно с использованием выражения (13):

$$\left(\frac{\partial S^{(T)}}{\partial U} \right)_{x,N} = Z^{(T)1-q} \left[\beta^* \sum_{i=1}^W p_i - \left(\frac{\partial \beta^*}{\partial U} \right)_{x,N} \left(\sum_{i=1}^W p_i H_i - U \right) \right] = Z^{(T)1-q} \beta^*; \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S^{(T)}}{\partial x}\right)_{U,N} &= Z^{(T)1-q} \left[\beta^* \sum_{i=1}^W p_i \left(-\frac{\partial H_i}{\partial x}\right)_{U,N} - \left(\frac{\partial \beta^*}{\partial x}\right)_{U,N} \left(\sum_{i=1}^W p_i H_i - U\right) \right] = \\ &= Z^{(T)1-q} \beta^* \sum_{i=1}^W p_i \left(-\frac{\partial H_i}{\partial x}\right)_{U,N}. \end{aligned} \quad (17)$$

Введем обобщенную силу:

$$X_i = - \left(\frac{\partial H_i}{\partial x}\right)_{U,N}. \quad (18)$$

Тогда

$$\left(\frac{\partial S^{(T)}}{\partial x}\right)_{U,N} = Z^{(T)1-q} \beta^* \sum_{i=1}^W p_i X_i = Z^{(T)1-q} \beta^* X, \quad (19)$$

где X — средняя обобщенная сила. Аналогично

$$\left(\frac{\partial S^{(T)}}{\partial N}\right)_{x,U} = Z^{(T)1-q} \beta^* \sum_{i=1}^W p_i \left(-\frac{\partial H_i}{\partial N}\right)_{x,U}. \quad (20)$$

Учтем, что минимальный шаг по N равен единице, следовательно, производная в правой части означает изменение уровня энергии H_i при добавлении одной частицы в изолированной системе, в процессе которого она не получает тепла и не совершает работу. Поэтому

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^W p_i \left(\frac{\partial H_i}{\partial N}\right)_{x,U} &= \sum_{i=1}^W p_i \left(\frac{H_i(N+1) - H_i(N)}{1}\right) = \\ &= \frac{\partial U}{\partial N}_{\delta Q=0, \delta W=0} = \mu, \end{aligned} \quad (21)$$

где μ — химический потенциал.

$$\left(\frac{\partial S^{(T)}}{\partial N}\right)_{x,U} = -Z^{(T)1-q} \beta^* \mu. \quad (22)$$

Таким образом, полный дифференциал энтропии Тсаллиса в переменных (U, x, N) имеет вид

$$dS^{(T)} = Z^{(T)1-q} \beta^* (dU + X dx - \mu dN). \quad (23)$$

Замечая, что $X dx$ — производимая системой работа, а также учитывая первое начало термодинамики, мы приходим к выражению

$$dS^{(T)} = Z^{(T)1-q} \beta^* \delta Q, \quad (24)$$

где δQ — количество теплоты, получаемое системой. Согласно второму началу термодинамики интегрирующий множитель в правой части уравнения (24) равен обратной температуре системы, поэтому

$$\beta^* = \frac{Z^{(T)q-1}}{\theta}. \quad (25)$$

Следовательно, β^* связана с температурой θ через статистическую сумму в степени, зависящей от q . В следующем разделе мы получим явный вид зависимости для степенного гамильтониана.

3. СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ ЭНЕРГИИ СИСТЕМЫ СО СТЕПЕННЫМ ГАМИЛЬТОНИАНОМ

Рассмотрим систему с гамильтонианом вида

$$H = \sum_{n=1}^N C_n x_n^k, \quad (26)$$

в котором $C_n \in \mathbb{R}, k > 0, x_n \in [0, \infty) \forall n = \overline{1, N}$. Это многочастичное обобщение модельного степенного гамильтониана одной переменной [17].

Средняя энергия, согласно (12), имеет вид:

$$U = \frac{1}{Z} \int_0^\infty \frac{\sum_{n=1}^N C_n x_n^k dx_1 dx_2 \dots dx_N}{\left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* \left(\sum_{n=1}^N C_n x_n^k - U\right)\right)^{\frac{1}{1-q}}} \quad (27)$$

при

$$Z = \int_0^\infty \frac{dx_1 dx_2 \dots dx_N}{\left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* \left(\sum_{n=1}^N C_n x_n^k - U\right)\right)^{\frac{1}{1-q}}}. \quad (28)$$

Для взятия интегралов подобного вида используем соотношение [18]

$$\int_0^\infty \frac{x^{\mu-1} dx}{(a + bx^\nu)^\lambda} = \frac{1}{\nu a^\lambda} \left(\frac{a}{b}\right)^{\frac{\mu}{\nu}} \frac{\Gamma(\frac{\mu}{\nu}) \Gamma(\lambda - \frac{\mu}{\nu})}{\Gamma(\lambda)} \quad (29)$$

с условиями сходимости

$$\begin{cases} 0 < \frac{\mu}{\nu} < \lambda, \\ \lambda > 1. \end{cases} \quad (30)$$

Расчет статистического интеграла (28) с использованием (29) приводит к выражению

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{\Gamma(\frac{1}{k})}{k}\right)^N \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \frac{1}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \beta^* U\right)^{\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}}} \times \\ &\quad \times \prod_{n=1}^N \left(\frac{1}{\frac{1-q}{q} \beta^* C_n}\right)^{\frac{1}{k}}, \end{aligned} \quad (31)$$

с условиями сходимости для параметра q :

$$1 - \frac{k}{N+k-1} < q < 1. \quad (32)$$

Рассмотрим выражение для средней энергии (27) как сумму независимых интегралов:

$$U = \sum_{m=1}^N \frac{1}{Z} \int_0^\infty \frac{C_m x_m^k dx_1 dx_2 \dots dx_N}{\left(a + b \sum_n C_n x_n^k\right)^{\frac{1}{1-q}}} = \sum_{m=1}^N I_m, \quad (33)$$

где для I_m получаем:

$$I_m = \frac{1 - \beta^* U^{\frac{1-q}{q}}}{k \beta^* \frac{1-q}{q} \left(\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k} - 1 \right)} \quad (34)$$

с финальными условиями на параметр q

$$1 - \frac{k}{k+N} < q < 1. \quad (35)$$

Таким образом, итоговое выражение для энергии имеет вид

$$U = \frac{N}{k} \frac{1}{\beta^*}. \quad (36)$$

Для определения энергии через термодинамическую температуру подставим (25) в полученное выше выражение, тогда:

$$U = \frac{N}{k} \theta x, \quad (37)$$

где $x = (Z^{(T)})^{1-q}$.

Учитывая соотношение (37), а также подставив выражение (7) в (31), получим (см. Приложение 2):

$$U = \frac{N}{k} C^{(y)} \theta^{1+y}, \quad (38)$$

где y и C_y — параметры, зависящие только от q , N , C_n и k :

$$y = \frac{N}{k} \cdot \frac{1}{\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}} = \frac{1}{\frac{k}{N} \frac{1}{1-q} - 1} \quad (39)$$

и

$$C^{(y)} = \frac{1}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{N}{k}\right)} \times \left[\left(\frac{\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)}{k}\right)^N \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \left(\frac{1}{q}\right)^{\frac{N}{k}} \times \prod_{n=1}^N \left(\frac{1}{C_n}\right)^{\frac{1}{k}} \right]^{y \frac{k}{N}}. \quad (40)$$

В дальнейшем будет показано, что

$$\lim_{q \rightarrow 1} y = 0, \quad (41)$$

$$\lim_{q \rightarrow 1} C^{(y)} = 1. \quad (42)$$

Полезным следствием полученных соотношений является явная зависимость β^* от θ :

$$\beta^* = \frac{1}{C^{(y)} \theta^{1+y}} = \frac{\beta^{1+y}}{C^{(y)}}, \quad (43)$$

где $\beta = 1/\theta$ — обратная термодинамическая температура.

Отметим, что вид статистического интеграла (31) и среднего значения энергии рассматриваемой системы (36) совпадает с результатами, следующими из энтропии и распределения Реньи [16] с точностью до замены $\beta^* \rightarrow \beta$. На рис. 1 проиллюстрировано поведение отношения $\frac{\beta^*}{\beta}$ от q при разных N , что показывает степень удаленности статистики Тсаллиса от Реньи для таких систем при росте числа частиц N или уменьшении q .

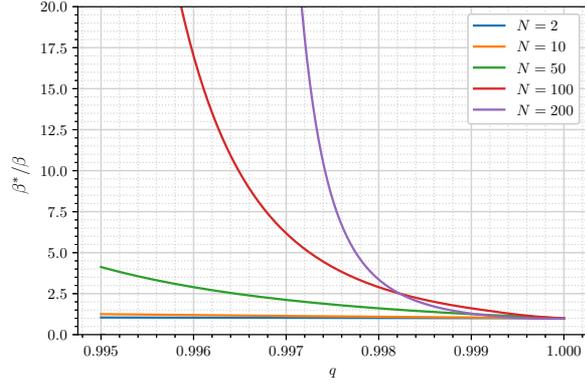


Рис. 1. Зависимость $\frac{\beta^*}{\beta}$ от q при разных N с $C_n = 0.5$, $k = 2$

4. ОБОБЩЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МАКСВЕЛЛА

Рассмотрим трехмерный идеальный одноатомный газ N частиц. Гамильтониан такой системы является частным случаем степенного гамильтониала (26):

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}. \quad (44)$$

Предполагается, что все молекулы имеют одинаковую массу m ; $\mathbf{p}_i = (p_{ix}, p_{iy}, p_{iz})$ — вектор импульса частицы под номером i . Заметим, что, несмотря на возможность проекции импульса принимать отрицательные значения, $p_i^2 = \mathbf{p}_i^2 = (p_{ix}^2, p_{iy}^2, p_{iz}^2)$ и функция Гамильтона (44) симметрична, что позволяет избежать интегрирования в отрицательных областях путем удвоения значения интеграла по положительной части вещественной оси, либо приравниванием его к нулю в случае усреднения нечетных функций.

Среднее значение энергии данного гамильтониана равно:

$$U = \frac{3N}{2} \cdot \frac{1}{\beta^*} = \frac{N}{k} C^{(y)} \theta^{1+y}, \quad (45)$$

где

$$y = \frac{1}{\frac{2}{3N} \frac{1}{1-q} - 1}, \quad (46)$$

а параметр $C^{(y)}$ после ряда преобразований выглядит так:

$$C^{(y)} = \frac{\left(\frac{\pi m}{2} \frac{q}{1-q}\right)^y}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2}\right)} \cdot \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \right]^{y \frac{2}{3N}}. \quad (47)$$

Вероятность того, что система находится в элементарном объеме с координатами (r, p) в $6N$ -мерном фазовом пространстве, где $r = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$, $p = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$:

$$\rho^{(T)} d\Gamma = \frac{1}{Z^{(T)}} \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^* \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} - \frac{3N}{2} \frac{1}{\beta^*} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}} \times \frac{\gamma^N}{N!} \prod_{i=1}^N \frac{dr_i dp_i}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (48)$$

откуда получаем распределение Тсаллиса для идеального газа:

$$\rho^{(T)} = \frac{1}{Z_T} \frac{\gamma^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \times \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \beta^* \frac{p_i^2}{2m} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}, \quad (49)$$

где

$$Z^{(T)} = \frac{\gamma^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \times \iint \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \beta^* \frac{p_i^2}{2m} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}} \prod_{i=1}^N dr_i dp_i. \quad (50)$$

Легко заметить, что распределение факторизуется на координатную и импульсную части, что делает возможным переход от общего распределения Тсаллиса для идеального газа к обобщенному распределению Максвелла по импульсам. Для этого достаточно проинтегрировать выражения по координатной части фазового пространства:

$$\rho_M^{(T)} = \int \rho^{(T)} \prod_{i=1}^N dr_i = \rho^{(T)} V^N, \quad (51)$$

$$Z^{(T)} = \frac{2^{3N} (\gamma V)^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \times \int_0^\infty \int_0^\infty \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \beta^* \frac{p_i^2}{2m} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}} \prod_{i=1}^N dp_i. \quad (52)$$

Воспользуемся полученным выражением для Z (31):

$$Z^{(T)} = \left(\frac{1}{\beta^*} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{(2\pi m)^{\frac{3N}{2}}}{(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{(\gamma V)^N}{N!} \left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2} \right)^{\frac{3N}{2}} \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2} \right)^{\frac{1}{q-1}}. \quad (53)$$

Тем самым мы приходим к выражению для обобщенного распределения Максвелла или распределения Максвелла–Тсаллиса по импульсам молекул:

$$\rho_{M_p}^{(T)} = \left(\frac{\beta^*}{2\pi m} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \beta^* \frac{p_i^2}{2m} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}}{C^{(T)}}, \quad (54)$$

где

$$C^{(T)} = \left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \times \left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2} \right)^{\frac{1}{q-1}} \quad (55)$$

и (учитывая (35)):

$$1 - \frac{2}{3N+2} < q < 1. \quad (56)$$

Функция $\rho_{M_p}^{(T)}$ удовлетворяет условию нормировки:

$$\int \rho_{M_p}^{(T)} \prod_{i=1}^N dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} = 1. \quad (57)$$

Полученное обобщенное распределение Максвелла легко переписать с термодинамической температурой θ . Для этого достаточно учесть зависимость β^* от температуры (43):

$$\rho_{M_p}^{(T)} = \left(\frac{1}{2\pi m C^{(y)} \theta^{1+y}} \right)^{\frac{3N}{2}} \times \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m C^{(y)} \theta^{1+y}} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}}{C^{(T)}}. \quad (58)$$

Заметим, что, в отличие от классического распределения Максвелла, которое можно записать для одной частицы путем факторизации экспоненты, данный обобщенный вариант распределения Максвелла записывается сразу для всей системы и включает количество частиц в качестве параметра распределения и условия на q . Поэтому для получения распределения Максвелла–Тсаллиса для одной частицы необходимо произвести интегрирование по импульсам остальных частиц, что будет реализовано в следующем разделе настоящей статьи.

Также запишем обобщенное распределение Максвелла по скоростям. Для этого достаточно рассмотреть соотношение:

$$\rho_{M_p}^{(T)}(p) \prod_{i=1}^N dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} = \rho_{M_v}^{(T)}(v) \prod_{i=1}^N dv_{ix} dv_{iy} dv_{iz}, \quad (59)$$

где $p = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ и $v = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$ — импульсы и скорости частиц. Учитывая классическое определение импульса частиц $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$,

$$\prod_{i=1}^N dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} = m^{3N} \prod_{i=1}^N dv_{ix} dv_{iy} dv_{iz}. \quad (60)$$

Таким образом,

$$\rho_{M_v}^{(T)} = \left(\frac{\beta^*}{2\pi m} \right)^{\frac{3N}{2}} \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \beta^* \frac{mv_i^2}{2} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}}{C^{(T)}} \quad (61)$$

или

$$\rho_{M_v}^{(T)} = \left(\frac{1}{2\pi m C^{(y)} \theta^{1+y}} \right)^{\frac{3N}{2}} \times \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2}{2 C^{(y)} \theta^{1+y}} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}}{C^{(T)}}, \quad (62)$$

для которого также выполняется условие на q (56) и нормировка

$$\int \rho_{M_v}^{(T)} \prod_{i=1}^N dv_{ix} dv_{iy} dv_{iz} = 1. \quad (63)$$

Аналогично переходу от (54) к (61) получим распределение по модулям скоростей. Для этого необходимо перейти из декартовых координат к сферическим. Для каждой из частиц системы $(v_{j_x}, v_{j_y}, v_{j_z}) \rightarrow (v_j, \vartheta_j, \varphi_j)$, где v_j — модель скорости j -й частицы, а $\vartheta_j \in [0, \pi]$, $\varphi_j \in [0, 2\pi]$ — углы в сферической системе координат. Тогда элементы интегрирования примут вид:

$$dv_{j_x} dv_{j_y} dv_{j_z} \rightarrow v_j^2 dv_j d\Omega_j(\vartheta_j, \varphi_j). \quad (64)$$

Так как $\rho_{M_v}^{(T)}$ не зависит от углов, интегрирование по полным телесным углам дает $(4\pi)^N$. Собирая все множители, запишем полученный вид распределения Максвелла–Тсаллиса по модулям скоростей:

$$\rho_{M_v}^{(T)} = \left(\prod_{n=1}^N 4\pi v_n^2 \right) \left(\frac{\beta^*}{2\pi m} \right)^{\frac{3N}{2}} \times \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \beta^* \frac{mv_i^2}{2} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}}{C^{(T)}} \quad (65)$$

или

$$\rho_{M_v}^{(T)} = \left(\prod_{n=1}^N 4\pi v_n^2 \right) \left(\frac{1}{2\pi m C^{(y)} \theta^{1+y}} \right)^{\frac{3N}{2}} \times \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2}{2C^{(y)} \theta^{1+y}} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1}}}{C^{(T)}} \quad (66)$$

с нормировкой

$$\int \rho_{M_v}^{(T)} \prod_{i=1}^N dv_i = 1. \quad (67)$$

5. ОДНОЧАСТИЧНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МАКСВЕЛЛА–ТСАЛЛИСА

Получим обобщенное распределение Максвелла для одной из N частиц рассматриваемой системы. Для этого необходимо проинтегрировать (54) по импульсам остальных $N - 1$ частиц. Тем самым для некоторой частицы с номером j

$$\rho_M^{(T)}(\mathbf{p}_j) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \rho_M^{(T)} \prod_{i \neq j} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz} = 2^{3(N-1)} \int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} \rho_M^{(T)} \prod_{i \neq j} dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz}. \quad (68)$$

Используя интеграл (29), имеем

$$\rho_{MT}(\mathbf{p}_j) = \left(\frac{\beta^*}{2\pi m} \right)^{3/2} \left(\frac{1-q}{q} \right)^{3/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)} \times \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\beta^* \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2} - \frac{3}{2}}}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2} \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2}}}. \quad (69)$$

Полученное одночастичное распределение не зависит от направления вектора импульса, откуда следует, что распределения по проекциям импульса частицы будут идентичны. Чтобы получить распределение по некоторой из проекций вектора импульса, необходимо проинтегрировать по остальным двум проекциям вектора импульса. Таким образом, используя интеграл (29), получим

$$\rho_M^{(T)}(p_{j\alpha}) = \left(\frac{\beta^*}{2\pi m} \right)^{1/2} \left(\frac{1-q}{q} \right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)} \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\beta^* \frac{p_{j\alpha}^2}{2m} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2} - \frac{1}{2}}}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2} \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2}}}, \quad (70)$$

где $\alpha = (x, y, z)$.

Для записи одночастичного распределения по скоростям достаточно использовать определение импульса, а также однозначное соответствие вероятностей вида

$$\rho_M^{(T)}(\mathbf{p}_j) dp_{j_x} dp_{j_y} dp_{j_z} = \rho_M^{(T)}(\mathbf{v}_j) dv_{j_x} dv_{j_y} dv_{j_z} \quad (71)$$

и $dp_{j_x} dp_{j_y} dp_{j_z} = m^3 dv_{j_x} dv_{j_y} dv_{j_z}$. Тогда одночастичное распределение по вектору скорости примет вид:

$$\rho_M^{(T)}(\mathbf{v}_j) = \left(\frac{m\beta^*}{2\pi} \right)^{3/2} \left(\frac{1-q}{q} \right)^{3/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)} \frac{\left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\beta^* \frac{m\mathbf{v}_j^2}{2} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2} - \frac{3}{2}}}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2} \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2}}}. \quad (72)$$

Аналогично из (70) для проекции вектора скорости

$$\rho_M^{(T)}(v_{j\alpha}) = \left(\frac{m\beta^*}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{1-q}{q}\right)^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\beta^* \frac{mv_{j\alpha}^2}{2} - \frac{3N}{2}\right)\right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2} - \frac{1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right) \left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2}\right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2}}}. \quad (73)$$

Так как распределение (69) не зависит от направления вектора импульса, то (72) зависит лишь от модуля скорости частиц. Выразим эту зависимость в явном виде. Для этого выполним переход от декартовых координат к сферическим. После интегрирования по телесному углу ϑ выражение для плотности вероятности перейдет в распределение по модулю скорости частицы системы:

$$\rho_M^{(T)}(v_j) = 4\pi v^2 \left(\frac{m\beta^*}{2\pi}\right)^{3/2} \left(\frac{1-q}{q}\right)^{3/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} + \frac{3}{2}\right) \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\beta^* \frac{mv_j^2}{2} - \frac{3N}{2}\right)\right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2} - \frac{3}{2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right) \left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2}\right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2}}}. \quad (74)$$

С учетом (43),

$$\rho_M^{(T)}(v_j) = 4\pi v^2 \left(\frac{m\beta^{1+y}}{2\pi C(y)}\right)^{3/2} \left(\frac{1-q}{q}\right)^{3/2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3(N-1)}{2}\right) \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\frac{\beta^{1+y}}{C(y)} \frac{mv_j^2}{2} - \frac{3N}{2}\right)\right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3(N-1)}{2}}}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right) \left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2}\right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2}}}, \quad (75)$$

где $\beta = 1/\theta$ — обратная термодинамическая температура.

На рис. 2 и рис. 3 представлено поведение функции (75) при различных параметрах q и N .

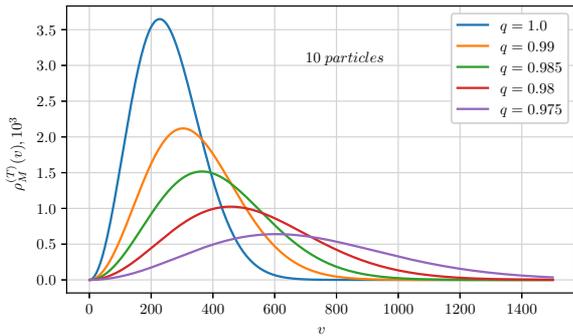


Рис. 2. Распределение по модулям скоростей частиц одноатомного кислорода при температуре 300 К при различных значениях параметра q , $N = 10$

Полученные распределения являются многочастичной альтернативой q -распределения по скоростям, предложенного в [19]:

$$F(v_x) = A_{q'}(m, q', \theta) \left[1 - (1 - q') \frac{1}{2} \beta m v_x^2\right]^{1/(1-q')}, \quad (76)$$

где $q' = 2 - q$ — переобозначенный параметр, $\beta = \beta(q, \theta)$ — константа, содержащая информацию о температуре системы. Примерами систем, скорости элементов которых описываются подобным распределением, являются клетки в биологическом морфогенезе [20] и клетки гидры [21]. Также q -модифицированное распределение Максвелла с определенной точностью описывает скорости вращения звезд в скоплении Плеяды (рис. 4, [22]).

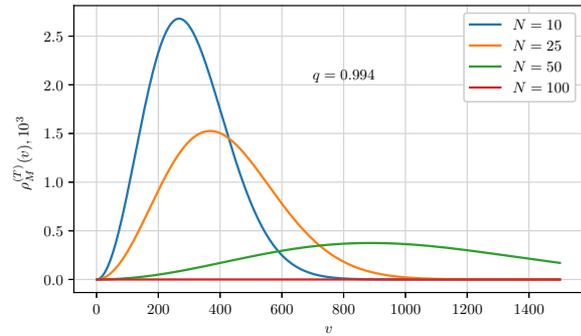


Рис. 3. Распределение по модулям скоростей частиц одноатомного кислорода при температуре 300 К при различном количестве частиц N , $q = 0.994$

6. ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МАКСВЕЛЛА–ТСАЛЛИСА

Получим выражение для среднеквадратичной скорости молекул идеального газа в статистике Максвелла–Тсаллиса. Из (45) и определения средней энергии частиц

$$U = \sum_{n=1}^N \frac{m \langle v_{n\alpha}^2 \rangle}{2} = \frac{3N}{2} \frac{1}{\beta^*}, \quad (77)$$

где $\alpha = x, y, z$, получаем

$$\frac{m \langle v_{n\alpha}^2 \rangle}{2} = \frac{3}{2} \frac{1}{\beta^*}. \quad (78)$$

Так как правая часть не зависит от номера частицы n , то в левой части его тоже можно опустить. Следовательно,

$$\langle v_n^2 \rangle = \langle v_{nx}^2 + v_{ny}^2 + v_{nz}^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle = \frac{3}{\beta^* m}. \quad (79)$$

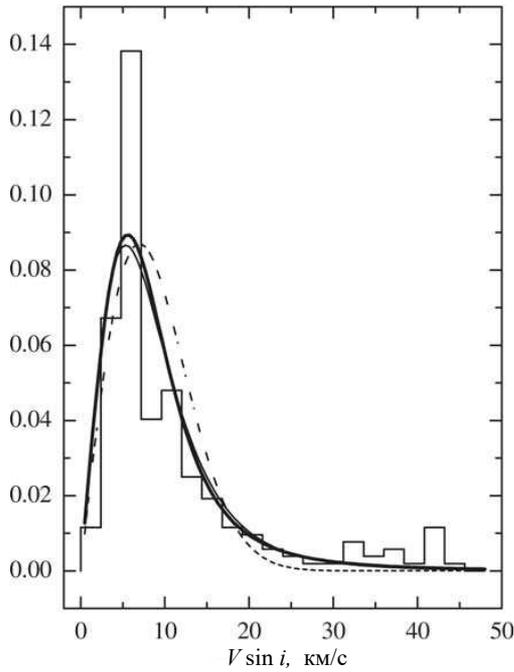


Рис. 4. Наблюдаемое распределение (гистограмма) вращения звезд в скоплении Плеяды [22]. Кривые представляют собой приближения с помощью распределений Максвелла (пунктирная линия), Каниадакиса (толстая линия) и Тсаллиса (тонкая линия, (76) с $q' = 1.334^{+0.038}_{-0.055}$) соответственно

Это выражение также справедливо для любой частицы n . Таким образом, среднеквадратичная скорость молекулы идеального газа равна

$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3}{\beta^* m}} = \sqrt{\frac{3\theta}{m}} \sqrt{C^{(y)}\theta y}. \quad (80)$$

Здесь и далее учтено выражение (43).

Вычислим средний модуль скорости молекул через одночастичное распределение по модулю скорости

$$\langle v \rangle = \int_0^{\infty} v \rho_M^{(T)}(v) dv. \quad (81)$$

Для этого удобно обратиться к (74) и интегралу (29). После ряда очевидных преобразований получаем:

$$\langle v \rangle = \int_0^{\infty} v \rho_M^{(T)}(v) dv = \sqrt{\frac{8\theta}{\pi m}} \sqrt{C^{(y)}\theta y} \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)} \cdot \sqrt{\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2}}. \quad (82)$$

Теперь найдем наиболее вероятную скорость молекул идеального газа v_p . Это значение обеспечивает экстремум функции $\rho_M^{(T)}(v)$:

$$\left. \frac{\partial \rho_M^{(T)}(v)}{\partial v} \right|_{v_p} = 0 \quad (83)$$

Отбросив все не зависящие от скоростей множители, запишем производную в явном виде:

$$0 = \frac{\partial}{\partial v} \left(v^2 \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\beta^* \frac{mv^2}{2} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3(N-1)}{2}} \right) \Big|_{v_p} = 2v_p \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\beta^* \frac{mv_p^2}{2} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3(N-1)}{2}} + v_p^2 \frac{1-q}{q} \beta^* m v_p \left(\frac{1}{q-1} + \frac{3(N-1)}{2} \right) \cdot \left(1 + \frac{1-q}{q} \left(\beta^* \frac{mv_p^2}{2} - \frac{3N}{2} \right) \right)^{\frac{1}{q-1} + \frac{3(N-1)}{2} - 1}, \quad (84)$$

откуда, выражая v_p , получаем следующее выражение:

$$v_p = \sqrt{\frac{2}{m\beta^*}} \cdot \sqrt{\frac{\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2}}{\frac{q}{1-q} - \frac{3(N-1)}{2}}} = \sqrt{\frac{2\theta}{m}} \sqrt{C^{(y)}\theta y} \cdot \sqrt{\frac{\frac{q}{q-1} + \frac{3N}{2}}{\frac{q}{q-1} + \frac{3(N-1)}{2}}}. \quad (85)$$

Как было отмечено ранее, полученное распределение (58) в общем случае не может быть представлено в виде произведения независимых распределений по импульсам (следовательно, (62) — по скоростям) отдельных молекул. Естественным образом возникает предположение о ненулевых корреляциях между скоростями частиц в такой системе. Поэтому важно вычислить ковариацию модулей скоростей молекул идеального газа в случае статистики Максвелла–Тсаллиса. Для этого рассмотрим среднее значение произведения модулей скоростей частиц n и k , используя распределение по модулям скоростей (65)

и интеграл (29):

$$\begin{aligned} \langle v_n v_k \rangle &= \int v_n v_k \rho_M^{(T)}(v) \prod_{i=1}^N dv_i = \\ &= \frac{(4\pi)^N \left(\frac{\beta^*}{2\pi m}\right)^{\frac{3N}{2}}}{\left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)^{\frac{3N}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2}\right)^{\frac{1}{q-1}}} \left(1 - \frac{3N}{2} \frac{1-q}{q}\right)^{\left(\frac{1}{q-1} + \frac{3N}{2} + 1\right)} \times \\ &\quad \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} - 1\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \left(\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{2\left(\frac{1-q}{q} \frac{\beta^* m}{2}\right)^{\frac{3}{2}}}\right)^N \left(\frac{\Gamma(2)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}\right)^2 \left(\frac{q}{q-1} \frac{2}{\beta^* m}\right), \end{aligned} \quad (86)$$

откуда после ряда преобразований получаем

$$\langle v_n v_k \rangle = \frac{8}{\pi \beta^* m} = \frac{8\theta}{\pi m} C^{(y)} \theta^y. \quad (87)$$

С учетом (82) ковариация принимает вид

$$\text{cov}(v_n v_k) = \langle v_n v_k \rangle - \langle v \rangle^2 = \frac{8\theta}{\pi m} C^{(y)} \theta^y \left(1 - \left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2}\right) \cdot \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}\right]^2\right). \quad (88)$$

Аналогичным способом получим выражение для ковариации энергий двух частиц идеального газа:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_n \varepsilon_k \rangle &= \int \frac{mv_n^2}{2} \cdot \frac{mv_k^2}{2} \cdot \rho_M^{(T)}(v) \prod_{i=1}^N dv_i = \\ &= \left(\frac{3}{2\beta^*}\right)^2 \cdot \frac{\left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}{\left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2} - 1\right)}. \end{aligned} \quad (89)$$

Ковариация между энергиями

$$\begin{aligned} \text{cov}(\varepsilon_n \varepsilon_k) &= \langle \varepsilon_n \varepsilon_k \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2 = \\ &= \langle \varepsilon_n \varepsilon_k \rangle - \frac{m \langle v^2 \rangle}{2} = \frac{3\theta}{2} C^{(y)} \theta^y \cdot \frac{1}{\left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2} - 1\right)}. \end{aligned} \quad (90)$$

Таким образом, наше предположение о ненулевых ковариациях между скоростями и энергиями частиц идеального газа в статистике Максвелла–Тсаллиса подтвердилось.

Рассмотрим также связь между центральными моментами проекции скорости второго и четвертого порядков. Из этой связи можно получить обобщение известного свойства связи второго и четвертого моментов случайной величины в гауссовых распределениях. Из (79)

$$\langle v_\alpha^2 \rangle = \frac{\theta}{m} C^{(y)} \theta^y = \frac{1}{\beta^* m}, \quad \alpha = x, y, z. \quad (91)$$

Для получения $\langle v_\alpha^4 \rangle$ воспользуемся (29) и (73):

$$\langle v_\alpha^4 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} v_\alpha^4 \rho_M^{(T)}(v_\alpha) dv_\alpha = 2 \int_0^{+\infty} v_\alpha^4 \rho_M^{(T)}(v_\alpha) dv_\alpha. \quad (92)$$

Путем преобразований получим

$$\langle v_\alpha^4 \rangle = \frac{\left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}{\left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2} - 1\right)} \frac{3}{(\beta^* m)^2} = 3Q \langle v_\alpha^2 \rangle^2, \quad (93)$$

где Q — фактор, характеризующий степень отклонения распределения Максвелла–Тсаллиса от гауссовской формы. Как можно заметить, данный множитель наиболее далек от единицы при

$$\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2} \approx 1, \quad (94)$$

что соответствует минимально возможному значению q из условия (56).

7. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МАКСВЕЛЛА КАК ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МАКСВЕЛЛА–ТСАЛЛИСА

В оригинальной работе Тсаллиса [6] был показан переход энтропии (3) к энтропии Гиббса при $q \rightarrow 1$, откуда можно сделать вывод, что распределение Гиббса является предельным случаем распределения Тсаллиса. В таком случае распределение Максвелла–Тсаллиса должно переходить в распределение Максвелла в том же пределе по параметру q .

В настоящем разделе будет показана процедура предельного перехода для полученных распределений и характеристик системы.

Рассмотрим функцию, называемую q -экспонентой (такая конструкция явным образом присутствует в (58)):

$$e_q^{-x} \equiv \left(1 - \frac{q-1}{q} \cdot x\right)^{\frac{1}{q-1}} = \left(1 + \frac{1-q}{q} \cdot x\right)^{\frac{1}{q-1}}. \quad (95)$$

При $q \rightarrow 1$ она переходит в классическую экспоненту с помощью второго замечательного предела:

$$\lim_{q \rightarrow 1} e_q^{-x} = \lim_{q \rightarrow 1} \frac{\left(1 - \frac{q-1}{q} \cdot x\right)^{\frac{q}{q-1}}}{\left(1 - \frac{q-1}{q} \cdot x\right)} = e^{-x}. \quad (96)$$

Также изучим поведение $C^{(T)}$ (55) при $q \rightarrow 1$. С учетом (95)

$$C^{(T)} = \left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)^{\frac{3N}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} e_q^{\frac{3N}{2}}. \quad (97)$$

Заметим, что при q , близких к 1, аргументы Γ -функций стремятся к бесконечности, что позволяет применить формулу Стирлинга

$$\Gamma[\kappa + 1] \approx \sqrt{2\pi\kappa} \left(\frac{\kappa}{e}\right)^\kappa. \quad (98)$$

Тогда (обозначив $\frac{1}{1-q}$ как $\chi + 1$) имеем

$$\frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \approx \sqrt{\frac{\chi - \frac{3N}{2}}{\chi}} \cdot \left(\frac{\chi - \frac{3N}{2}}{\chi}\right)^\chi \times \left(\chi - \frac{3N}{2}\right)^{-\frac{3N}{2}} e^{\frac{3N}{2}}, \quad (99)$$

$$\chi = \frac{1}{1-q} - 1 = \frac{q}{1-q}. \quad (100)$$

Учитывая, что при $q \rightarrow 1$ $\chi \rightarrow \infty$, и применяя второй замечательный предел и (96), получим

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 1} C^{(T)} &= \\ &= e^{\frac{3N}{2}} \lim_{\chi \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\chi - \frac{3N}{2}}{\chi}} \cdot \left(\frac{\chi - \frac{3N}{2}}{\chi}\right)^\chi e^{\frac{3N}{2}} = e^{\frac{3N}{2}}. \end{aligned} \quad (101)$$

Также рассмотрим y (46) и $C^{(y)}$ (47). Очевидно, что

$$\lim_{q \rightarrow 1} y = \lim_{\chi \rightarrow \infty} \frac{1}{\frac{2}{3N}(\chi + 1) - 1} = 0. \quad (102)$$

Используя для $C^{(y)}$ (99) и

$$\lim_{\chi \rightarrow \pm\infty} (a\chi + b)^{1/(c\chi + d)} = \lim_{\chi \rightarrow \pm\infty} e^{\frac{\ln(a\chi + b)}{c\chi + d}} = e^0 = 1, \quad (103)$$

где a, b, c, d — постоянные, получаем

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 1} C^{(y)} &= \lim_{\chi \rightarrow \infty} \frac{\left(\frac{\pi m}{2} \chi\right)^y}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{3N}{2}\right)} \times \\ &\times \left[\sqrt{\frac{\chi - \frac{3N}{2}}{\chi}} \right]^{y \frac{2}{3N}} \left(\chi - \frac{3N}{2}\right)^{-y} = 1. \end{aligned} \quad (104)$$

Следовательно,

$$\lim_{q \rightarrow 1} \beta^* = \lim_{q \rightarrow 1} \frac{\beta^{1+y}}{C^{(y)}} = \beta = \frac{1}{\theta}. \quad (105)$$

Таким образом, учитывая (96) и доказанные равенства (101) и (105), получаем предельный переход:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \rho_{M_p}^{(T)} = \left(\frac{1}{2\pi m \theta}\right)^{\frac{3N}{2}} e^{-\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m\theta}}, \quad (106)$$

откуда напрямую следует, что

$$\lim_{q \rightarrow 1} \rho_{M_v}^{(T)} = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{3N/2} e^{-\sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2}{2\theta}}, \quad (107)$$

$$\lim_{q \rightarrow 1} \rho_{M_V}^{(T)} = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{3N/2} \prod_{i=1}^N 4\pi v_i^2 e^{-\frac{mv_i^2}{2\theta}}. \quad (108)$$

Аналогично можно убедиться, что и другие кинетические характеристики статистической системы при $q \rightarrow 1$ принимают максвелловский вид (применяя второй замечательный предел, формулу Стирлинга (98) и ранее полученные выражения для y и $C^{(y)}$).

$$\lim_{q \rightarrow 1} \langle v \rangle = \sqrt{\frac{8\theta}{\pi m}} = \langle v \rangle^{(M)}, \quad (109)$$

$$\lim_{q \rightarrow 1} v_p = \sqrt{\frac{2\theta}{m}} = v_p^{(M)}. \quad (110)$$

На рис. 5 и рис. 6 представлены графики зависимости функций $\langle v \rangle / \langle v \rangle^{(M)}$ и $v_p / v_p^{(M)}$ от параметра q при разных значениях N . Разница в поведении функций заметна только в случае малого числа частиц.

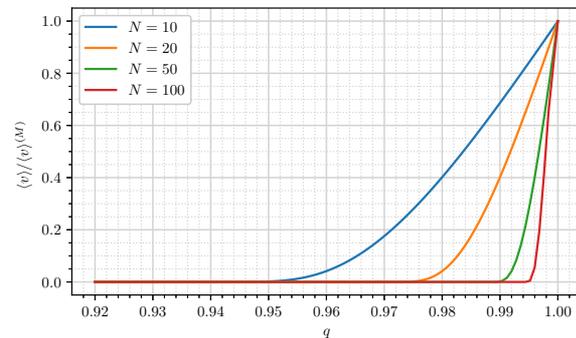


Рис. 5. Зависимость отклонения средней скорости в статистике Максвелла–Тсаллиса относительно случая Максвелла $\langle v \rangle / \langle v \rangle^{(M)}$ от q при разных N

Таким же образом ковариации модулей скоростей частиц и кинетических энергий также стремятся к нулю:

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 1} \text{cov}(v_n v_k) &= \lim_{q \rightarrow 1} \frac{8\theta}{\pi m} C^{(y)} \theta^y \left(1 - \left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2}\right) \times \right. \\ &\times \left. \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{3N}{2}\right)} \right]^2 \right) = 0, \end{aligned} \quad (111)$$

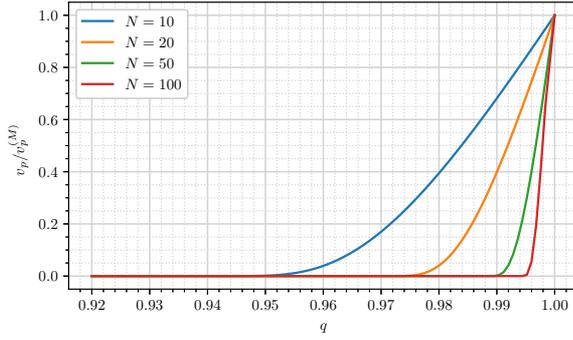


Рис. 6. Зависимость отклонения наиболее вероятной скорости в статистике Максвелла–Тсаллиса относительно случая Максвелла $v_p/v_p^{(M)}$ от q при разных N

$$\lim_{q \rightarrow 1} \text{cov}(\varepsilon_n \varepsilon_k) = \lim_{q \rightarrow 1} \frac{3\theta}{2} C^{(y)} \theta^y \cdot \frac{1}{\left(\frac{q}{1-q} - \frac{3N}{2} - 1\right)} = 0. \quad (112)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе было получено обобщенное распределение Максвелла по скоростям в формализме Тсаллиса. Тем самым нам удалось расширить вид данного распределения на многочастичные неаддитивные системы. Мы продемонстрировали характеристики статистических систем, описываемых распределением Максвелла–Тсаллиса: среднюю энергию системы, средний модуль скорости частиц, среднеквадратичную и наиболее вероятную скорости атомов газа.

В ходе работы было приведено термодинамическое описание энтропии Тсаллиса и связь энтропии и распределения с термодинамической температурой системы, а также получено несколько полезных соотношений, в частности q -формула и выражение энтропии через статистическую сумму распределения Тсаллиса, сыгравшие важную роль в установлении данной связи.

Из условия сходимости рассматриваемых интегралов установлены ограничения на параметр распределения q для модельного гамильтониана $H = \sum_n C_n x_n^k$, частным случаем которого является модель одноатомного идеального газа.

Также были получены ковариации скоростей и энергий частиц в статистике Тсаллиса, связанные с q -деформацией. При стремлении параметра q к единице они исчезают. Показано, что все полученные результаты переходят в известные выражения и характеристики распределения Максвелла.

В пункте 5 был приведен ряд экспериментов, описываемых распределением Тсаллиса по скоростям. Данные работы свидетельствуют о применимости статистики Тсаллиса к широкому кругу явлений и подчеркивают пользу полученного распределения Максвелла–Тсаллиса для будущих экспериментов в неклассической статистической физике.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение 1. q -формула

Рассмотрим определение средней энергии U :

$$U = \sum_{i=1}^W \rho_i H_i. \quad (113)$$

С другой стороны, в силу нормировки распределения $\sum_{i=1}^W \rho_i = 1$,

$$U = \sum_{i=1}^W \rho_i U. \quad (114)$$

Эта два соотношения приводят к равенству

$$\sum_{i=1}^W (H_i - U) \rho_i = 0. \quad (115)$$

Умножив обе части равенства на $\beta^*(1-q)/q$ (полагая его отличным от 0) и прибавив $Z^{(T)}$, записанную в явном виде, получим q -формулу:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^W \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^*(H_i - U)\right)^{\frac{1}{q-1}} &= \\ &= \sum_{i=1}^W \left(1 + \frac{1-q}{q} \beta^*(H_i - U)\right)^{\frac{q}{q-1}}. \end{aligned} \quad (116)$$

Приложение 2. Средняя энергия системы со степенным гамильтонианом через термодинамическую температуру

$$U = \frac{N}{k} \theta x, \quad (117)$$

где $x = (Z^{(T)})^{1-q}$.

$$Z^{(T)} = A \cdot \frac{x^{\frac{N}{k}}}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{U}{\theta x}\right)^{\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}}} = x^{\frac{1}{1-q}}, \quad (118)$$

$$x = A^{\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}} + \frac{1-q}{q} \frac{U}{\theta} = \frac{U}{\theta} \frac{k}{N}, \quad (119)$$

где

$$\begin{aligned} A = \theta^{\frac{N}{k}} \cdot \left[\left(\frac{\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)}{k}\right)^N \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \left(\frac{1}{q}\right)^{\frac{N}{k}} \times \right. \\ \left. \times \prod_{n=1}^N \left(\frac{1}{C_n}\right)^{\frac{1}{k}} \right]. \end{aligned} \quad (120)$$

Таким образом, для средней энергии системы имеем:

$$U = \frac{A^{\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}}}{\left(\frac{k}{N} - \frac{1-q}{q}\right)} \theta = \frac{N}{k} \theta \cdot \frac{A^{\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}}}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{N}{k}\right)} \quad (121)$$

или

$$U = \frac{N}{k} C^{(y)} \theta^{1+y}, \quad (122)$$

где y и C_y — параметры, зависящие только от q , N , C_n и k

$$y = \frac{N}{k} \cdot \frac{1}{\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}} = \frac{1}{\frac{k}{N} \frac{1}{1-q} - 1} \quad (123)$$

и

$$C^{(y)} = \frac{1}{\left(1 - \frac{1-q}{q} \frac{N}{k}\right)} \cdot \left[\left(\frac{\Gamma\left(\frac{1}{k}\right)}{k}\right)^N \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-q} - \frac{N}{k}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)} \times \right. \\ \left. \times \left(\frac{1}{\frac{1-q}{q}}\right)^{\frac{N}{k}} \prod_{n=1}^N \left(\frac{1}{C_n}\right)^{\frac{1}{k}} \right]^{y \frac{k}{N}}. \quad (124)$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shannon C. E. // Bell Syst. Techn. J. 1948. **27**. P. 379. P. 623.
2. Caruso F., Tsallis C. // Phys. Rev. E 2008. **78**, 021102.
3. Башкиров А. Г. // ТМФ. 2006. **149**. P. 299.
4. Renyi A. et al. // Proc. Fourth Berkeley Symp. on Math. Statist. and Prob. 1961. **1**. P. 547.
5. Renyi A. // Probability theory. North-Holland, 1970.
6. Tsallis C. // J. Stat. Phys. 1988. **52**. P. 479.
7. Tsallis C. Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics. Springer, Berlin. 2009.
8. Ma B., Gorman J.D., Michel O.J.J. Image Registration with Minimum Spanning Tree Algorithm // Proceedings of the 2000 International Conference on Image Processing, ICIP 2000, Vancouver, BC, Canada. 2000.
9. Paninski L. // Neural Comput. 2003. **15**. P. 6.
10. Jizba P., Kleinert H., Shefaat M. // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2012. **391**. P. 10.
11. Tsallis C., Cirto L. J. L. // Eur. Phys. J. C 2013. **73**, 2487.
12. Daniels K.E., Beck C., Bodenschatz E. // Physica D 2004. **193**. P. 208-217.
13. Weili S., Yu M., Zhanfang C. Research of automatic medical image segmentation algorithm based on Tsallis entropy and improved PCNN // Proceedings of the 2009 IEEE International Conference on Mechatronics and Automation. 2009.
14. Pickup R.M., Cywinsky R., Pappas C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2009. **102**.
15. Kesavan H.K. Jaynes' maximum entropy principle. Encyclopedia of optimization. 2008. **7**.
16. Бакиев Т.Н., Накашидзе Д.В., Савченко А.М. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2020. № 6. С. 45. (Bakiev T. N., Nakashidze D. V., Savchenko A. M. // Mosc. Univ. Phys. Bull. 2020. **75**, N 6. P. 559.)
17. Bashkirov A.G. // Phys. Rev. Lett. 2004. **93**, N 13. P. 130601.
18. Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M. Tables of Integrals, Sums, Series and Products, 5th ed. Academic Press, 1994.
19. Silva Jr. R. et al. // Phys. Lett. A 1998. **249**. P. 401-408.
20. Shao-Zhen Lin, Peng-Cheng Chen, Liu-Yuan Guan et al. // Adv. Biosys. 2020. **8**, 2000065.
21. Arpita Upadhyaya, Jean-Paul Rieu, James A. Glazier, Yasuji Sawada // Elsevier 2001. **293**. P. 549.
22. Carvalho J.C. et al. // EPL 2008. **84**, 59001.

Generalized Maxwell Distribution in the Tsallis Entropy Formalism

T. N. Bakiev¹, D. V. Nakashidze², A. M. Savchenko^{2a}, K. M. Semenov^{2b}

¹Faculty of Mathematics, HSE University, Moscow 119048, Russia

²Department of Quantum Statistics and Field Theory, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University Moscow 119991, Russia

E-mail: ^aa.m.savchenko@gmail.com, ^bsemenovkm@protonmail.com

A formalism of statistical mechanics based on the nonadditive Tsallis entropy functional is considered. The mean energy value and the generalized Maxwell distribution (Maxwell–Tsallis distribution) are obtained on the basis of the Tsallis distribution for a general power-law Hamiltonian with an arbitrary number of degrees of freedom. This method of calculating integrals in the formalism simplifies the calculation of high-order moments for random variables of such a system. Based on the condition for convergence of the integrals, it is shown that the lower limit of the change in the q parameter is related to the number of particles in the system. The characteristics of statistical systems described by the Maxwell–Tsallis distribution (mean absolute value of velocity, mean square velocity, and the most probable velocity of gas atoms) are calculated. It is shown that the system described by this distribution must have nonzero correlations between velocities and energies of particles and the classical Maxwell distribution is a special case of the proposed generalized distribution.

Keywords: Tsallis entropy, Tsallis distribution, Maxwell distribution, average energy, power law distribution.

PACS: 05.20.-y, 05.70.-a, 05.90.+m.

Received 2 May 2022.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2022. **77**, No. 5. Pp. 728–740.

Сведения об авторах

1. Бакиев Тимур Наилевич — магистр; e-mail: tnbakiev@edu.hse.ru.
2. Накашидзе Дмитрий Викторович — студент магистратуры; e-mail: nakashidze.dv16@physics.msu.ru.
3. Савченко Александр Максимович — доктор физ.-мат. наук, профессор; e-mail: a.m.savchenko@gmail.com.
4. Семенов Константин Михайлович — аспирант; e-mail: semenovkm@icloud.com.