

- [4] А г р и к о в Ю.М., А н т р о п о в А.М., И в а н о в В.В. и др. В кн.: Первая всесоюзн. конф. Физические и физико-химические основы микроэлектроники. М.: АН СССР, 1978, с. 249-250.
- [5] Л у ф т Б.Д. Физико-химические методы обработки поверхности полупроводников. М.: Радио и связь, 1982. 137 с.
- [6] К о r n f e l d M.I. - Journal of Physics D, 1976, v. 9, N 8, p. 1183-1192.
- [7] А н о х и н В.З., Д ы н н и к А.П., З а в а л и ш и н А.А. и др. - Электронная техника, сер. Микроэлектроника, 1986, в. 4 (120), с. 45-48.
- [8] М а р т ы н о в В.В. - Зарубежная электронная техника, 1986, в. 12, с. 3-50.
- [9] К и с е л е в В.Ф., К р ы л о в О.В. Электронные явления в адсорбции и катализе на полупроводниках и диэлектриках. М.: Наука, 1979. 234 с.
- [10] Л е в а н ю к А.П. Пирозлектрики. В кн.: Физический энциклопедический словарь. М.: Сов. энциклопедия, 1984. 944 с.
- [11] К р ы л о в О.В., К и с л ю к М.У., Ш у б Б.Р. и др. - Кинетика и катализ, 1972, т. 13, с. 598-609.
- [12] Н е в о л и н В.К., Ш е р м е р г о р Т.Д. - Письма в ЖТФ, 1975, т. 1, в. 15, с. 722-724.
- [13] Ж д а н о в В.П., П а в л и ч е к Я., К н о р з. - Поверхность. Физика, химия и механика, 1986, № 10, с. 41-46.

Поступило в Редакцию
26 ноября 1987 г.

Письма в ЖТФ, том 14, вып. 7

12 апреля 1988 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРАВНИТЕЛЬНОЙ СТЕПЕНИ
УПОРЯДОЧЕННОСТИ СОСТОЯНИЙ ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ
НА ОСНОВЕ \mathcal{S} -ТЕОРЕМЫ
ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ

Ю.Л. К л и м о н т о в и ч

Критерий относительной степени упорядоченности состояний открытых систем на основе сравнения значений энтропии Больцмана-Гиббса-Шеннона при заданном значении средней эффективной энергии - "функции Гамильтона" (\mathcal{S} -теорема) был введен в работах [1, 2] на примерах развития генерации в системе Ван дер Поля и перехода от ламинарного к стационарному турбулентному течению. Обзор первых результатов дан в [3]. В [4] приведено общее доказательство \mathcal{S} -теоремы.

Цель настоящей работы - демонстрация возможности использования критерия, основанного на \mathcal{S} -теореме, непосредственно по

реализациям, найденным из эксперимента, для различных внутренних параметров системы $X(t, \alpha)$ и без использования информации о структуре „функции Гамильтона“. Здесь $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ – набор управляющих параметров. Возможный выбор управляющих параметров чрезвычайно широк. Это – обратная связь и накачка в генераторах, начальные условия в мультистабильных системах, „медленное“ время при наличии квазистационарных состояний, числа Рейнольдса, Тейлора и Рэлея в гидродинамике, лекарственные и физикотерапевтические воздействия в медицине и т. д. Очень широк и выбор внутренних параметров, по реализациям которых и производится оценка сравнительной степени упорядоченности. Отсутствие необходимости в дополнительной информации о структуре „функции Гамильтона“ открывает новые возможности использования рассматриваемого критерия непосредственно по экспериментальным данным, т. е. без каких-либо математических моделей системы. При доказательстве S -теоремы в [4] произвольное стационарное распределение $f(X, \alpha)$ представлялось в виде канонического распределения Гиббса со свободной энергией F и эффективной температурой D :

$$f(X, \alpha) = \exp \frac{F(\alpha, D) - H(X, \alpha)}{D}, \quad \int f(X, \alpha) dX = 1. \quad (1)$$

Состояние при $\alpha = \alpha_0$ принимается за состояние „физического хаоса“. С ним сравнивается состояние при значениях управляющих параметров

$$\alpha = \alpha_0 + \Delta \alpha_i, \quad \Delta \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2)$$

При $\alpha = \alpha_0$ из (1) следует распределение $f_0(X, \alpha_0)$ для состояния физического хаоса с „функцией Гамильтона“ $H_0(X, \alpha_0)$.

При увеличении $\Delta \alpha$ среднее значение $\langle H_{\xi} \rangle$ в общем случае не сохраняется, поэтому разность энтропий S_0, S , определяемых распределениями f_0, f , не может служить мерой относительной степени упорядоченности состояний с параметрами $\alpha = \alpha_0$ и $\alpha = \alpha_0 + \Delta \alpha$. Вместо f_0 надо использовать перенормированное к заданному значению усредненной функции Гамильтона H_0 распределение \tilde{f}_0 и соответствующую энтропию \tilde{S}_0 . Функция \tilde{f}_0 представляется в виде

$$\tilde{f}_0 = \exp \frac{\tilde{F}_0 - H_0}{\tilde{D}(\Delta \alpha)}, \quad \int \tilde{f}_0 dX = 1, \quad \tilde{D} \Big|_{\Delta \alpha = 0} = D. \quad (3)$$

Зависимость $\tilde{F}(\tilde{D})$ следует из условия нормировки, а зависимость перенормированной „температуры“ \tilde{D} от $\Delta \alpha$ из уравнения

$$\int H_0(X, \alpha_0) \tilde{f}_0 dx = \int H_0(X, \alpha_0) f(X, \alpha_{\xi}) dX. \quad (4)$$

Тогда разность энтропий [4]

$$\tilde{S}_0 - S = \int \tilde{f}_0 (\gamma e^{\tilde{D}} - e^{\tilde{D}} + 1) dX \geq 0 \quad (5)$$

определяет увеличение относительной степени упорядоченности при переходе от состояния „физического хаоса“ $\alpha = \alpha_0$ в состояние $\alpha = \alpha_0 + \Delta\alpha$. Функция η в (5) определяется выражением

$$\eta = \frac{F - H(X, \alpha)}{D} = \frac{\tilde{F}_0 - H_0(X, \alpha_0)}{\tilde{D}(\Delta\alpha)}. \quad (6)$$

Для приложений удобна и другая форма записи результата (5):

$$\tilde{S}_0 - S = \int \ln \frac{f(X, \alpha)}{\tilde{f}_0} \cdot f(X, \alpha) dX \geq 0. \quad (7)$$

Таким образом, если управляющие параметры выбраны правильно, то по мере увеличения $\Delta\alpha$ энтропия уменьшается и имеет место процесс самоорганизации.

Информация о структуре „функции Гамильтона“ в распределении (1) в работах [1, 2] следовала из структуры стационарного решения уравнения Фоккера–Планка и из структуры распределения для состояния локального равновесия. Во многих случаях, однако, когда нет явных математических моделей системы, информация о структуре „функции Гамильтона“ отсутствует.

В связи с этим возникает вопрос о практическом использовании S -теоремы без представления функций распределения f , f_0 в виде (1). Покажем, что такая возможность заложена в приведенных выше результатах.

Вместо (1) рассмотрим соответствующее распределение при $D=1$ и $F=0$. Тогда „функция Гамильтона“ в (1) определяется непосредственно по распределению

$$H(X, \alpha) = -\ln f(X, \alpha) \quad \text{и} \quad H_0 = -\ln f_0. \quad (8)$$

Результаты (5–7) остаются справедливыми и при $D=1$, $F=0$. Выражение для функции η существенно упрощается, а функция $\tilde{D}(\Delta\alpha)$ такова, что $\tilde{D}|_{\Delta\alpha=0} = 1$.

Дополнительное условие (4), необходимое для определения функции $\tilde{D}(\Delta\alpha)$, принимает теперь вид

$$\int \ln f_0(X, \alpha_0) \tilde{f}_0 dX = \int \ln f_0(X, \alpha_0) \cdot f(X, \alpha) dX. \quad (9)$$

Таким образом, задается среднее по распределениям \tilde{f}_0 , f значений функции $\ln f_0$. В виде „канонического распределения Гиббса“ представляется теперь лишь перенормированное распределение \tilde{f}_0 . Для определения в нем „функции Гамильтона“ $H_0(X, \alpha_0)$ нет необходимости в дополнительной информации, так как, согласно (8), она определяется распределением f_0 .

Таким образом, критерий относительной степени упорядоченности состояний по полученным из эксперимента реализациям $X(t, \alpha)$ сводится к последовательности действий: 1. Выбираются управля-

ющие параметры a ; 2. По достаточно длинным реализациям $X(t, a)$ находятся стационарные распределения $f(X, a)$; 3. По уравнению (9) определяется функция $\tilde{D}(\Delta a)$. Тем самым находится перенормированное распределение \tilde{f}_0 ; 4. По формуле (8) или (6) определяется разность энтропий $\tilde{S}_0 - S$ при любых выбранных значениях $a = a_0$, $a = a_0 + \Delta a$.

Если $\tilde{S}_0 > S$, то выбор управляющих параметров a сделан правильно, и при переходе от состояния со значением $a = a_0$ к состоянию со значением $a = a_0 + \Delta a$ степень упорядоченности возрастает и, следовательно, происходит процесс самоорганизации.

В противном случае для нахождения более упорядоченных состояний надо изменить выбор управляющих параметров.

При наличии нескольких управляющих параметров по рассмотренному критерию возможен поиск наиболее упорядоченного состояния в пространстве управляющих параметров. Это может быть сделано, как уже отмечалось, по экспериментальным данным без использования математической модели системы.

Л и т е р а т у р а

- [1] К л и м о н т о в и ч Ю.Л. - Письма в ЖТФ, 1983, т. 9, с. 109.
- [2] К л и м о н т о в и ч Ю.Л. - Письма в ЖТФ, 1984, т. 10, с. 80.
- [3] E b e l i n g W., K l i m o n t o v i c h Yu.L. Selforganization and Turbulence in Liquids. - Leipzig, Teubner, 1984.
- [4] K l i m o n t o v i c h Yu.L. - Z. Phys. B, 1987, v. 66, p. 125.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
27 января 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 14, вып. 7

12 апреля 1988 г.

АБСОЛЮТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ ИМПУЛЬСНЫХ ПОТОКОВ
ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
И КАЛИБРОВКА ДЕТЕКТОРОВ В ОБЛАСТИ
ЭНЕРГИЙ ФОТОНОВ $E_\gamma \approx 1$ кэВ

С.В. Б о б а ш е в, Г.С. В о л к о в, А.В. Г о л у б е в,
В.И. З а й ц е в, В.Я. Ц а р ф и н, Л.А. Ш м а е н о к

В исследованиях высокотемпературной интерциальной плазмы важное место занимают абсолютные спектрально-селективные измерения потоков мягкого рентгеновского излучения в килоэлектронвольтовой области энергий квантов. Решение этой задачи в значи-