Modern Physics 现代物理, 2014, 4, 81-85
Published Online September 2014 in Hans. http://www.hanspub.org/journal/mp
http://dx.doi.org/10.12677/mp.2014.45010

The Eighth Statistical Distribution of Monatomic Ideal Gas Based on Incomplete Shannon Entropy

Yaya Li, Yaya Hu

College of Yinchuan Energy, Yongning
Email: ningxiaycnyliya@163.com

Received: Jul. 3rd, 2014; revised: Jul. 14th, 2014; accepted: Jul. 22nd, 2014

Abstract

In this paper, the incomplete statistics theories were introduced according to the principle of maximum entropy. The eighth statistical distribution was deduced, and the thermodynamic quantities of monatomic ideal gas were calculated. When $q = 1$, the results were the same as the results of other distributions.

Keywords

Incomplete Statistics, Thermodynamic Quantities, Principle of Maximum Entropy, Completely Open System, Statistical Distribution

基于非完整Shannon熵的第八种统计分布研究单原子理想气体

李亚亚，胡娅娅

银川能源学院，永宁
Email: ningxiaycnyliya@163.com

收稿日期：2014年7月3日；修回日期：2014年7月14日；录用日期：2014年7月22日

摘　要

本文简要介绍了非完整统计思想，根据最大熵原理，推导了第八种统计分布，并计算了单原子理想气体的热力学量。在$q = 1$时，其结果与其他分布是相同的。

关键词

非完整统计，热力学量，最大熵原理，完全开放系统，统计分布

1. 引言

由 L. Boltzmann 和 J.W. Gibbs 等人建立起来的的传统统计力学(现在通常称为 B-G 统计力学或广延统计力学)在指导生产、生活实践活动中，得到了广泛而成功的应用。不仅提高了社会劳动效率，而且促进了社会经济的发展。但是，科学发展表明，任何理论都不是永恒不变的，都随着科学技术的进步而不断发展，当然，广延统计热力学也不例外。由于广延统计力学是实际问题的抽象，它抓住了统计物理研究对象(由大量微观粒子组成的系统)的主要矛盾——统计规律性，因此它在很多地方获得了大量的成功，但它忽略的次要矛盾，有时变为主要矛盾，成为它解决不了的问题。这表现为它的基本假设或默认上[1]：

(1) 孤立系统的等概率假设；

(2) 广延量假设；

(3) 好函数默认(态函数、态参量连续，各阶可微、可导)。

等概率假设实质是忽略时间关联；广延量假设是忽略空间关联；好函数默认导致研究相变困难。所以，广延统计力学在处理诸如包含长程相互作用[2]或有记忆效应的一些物理系统[3]时，面临了困难。鉴于此，1988 年巴西物理学家 C. Tsallis 提出了非广延熵[4]，其表达式 $S_q = k\dfrac{1-\sum_{i=1}^{W} P_i^q}{q-1}$，$(q \in R)$。其中 k 是玻尔兹曼常量，P_i 为系统的第 i 个微观态出现的概率，q 为非广延参数，W 表示系统可能出现的微观状态数目。此后在许多物理学家的共同努力下，建立起来了非广延统计力学，解决了一些广延统计力学解决不了的问题，如自引力系统，纯电子等离子体中的二维涡流等[5]。“非广延统计热力学”是一门新兴的学科，“非广延”一词是针对“广延”而来的。“广延”一词的意思即一个热力学系统的广延量(如熵、内能、体积等)可以由构成它的小系统所对应的量简单相加而得。在非广延统计中，原来属于可简单相加的物理量不再符合这一法则。非广延统计力学是广延统计力学的延伸和拓展，使得研究结果更加接近真实世界[5]。目前，非广延统计物理发展的分支除了有 Tsallis 统计，还有非完整统计，q-变形统计，卡帕统计，超统计等等。本文在介绍非完整统计的基础上，基于非完整 Shannon 熵推导了完全开放系统的统计分布，并用该分布研究理想气体。

2. 非完整统计简介

2001 年 Q.A. Wang 提出了非完整统计[6] [7]，考虑到系统内粒子与粒子之间相互作用的复杂性等其它因素的影响，无法准确统计可能出现的微观态，导致统计信息不完整，即不能精确得到概率分布函数和配分函数。在统计物理中，如果利用哈密顿正则方程(经典系统)或薛定谔方程(量子系统)，能精确解得系统的微观状态或对应的概率，说明系统信息统计完全，这时就称为完整统计。所对应的概率分布为$\{p_i\}$，

p_i 表示第 i 个微观状态的概率， $i=1,2,3,\cdots,w$ 。如果不能精确解得系统的微观状态或对应的概率，这时统计信息就不完整，所对应的概率分布为 $\{p_i'\}$ ， p_i' 表示第 i 个微观状态的概率， $i=1,2,3,\cdots,v$ 。其中 v 可能大于 w ， v 也可能小于 w 。把这时的概率分布就称为非完整概率分布。

对完整统计分布，其归一化条件为： $\sum_i^w p_i=1$ 。物理量 O 的统计平均值为 $\langle O\rangle=\sum_i^w p_i O_i$ 。对非完整统计分布则为： $\sum_i^v p_i=Q\neq 1$ 。做非线性变化： $\sum_i^v \frac{p_i}{Q}=\sum_i^v p_i^q$ ，便可得归一化条件： $\sum_i^v p_i^q=1$ 。因为 $p_i\in[0,1]$ ，所以 $q\in[0,+\infty]$ 。于是，物理量 O 的统计平均值可设为： $\langle O\rangle=\sum_i^v p_i^q O_i$ 。

基于完整统计的 Shannon 熵： $S=-k\sum_{i=1}^w p_i \ln p_i$ ，便可得到在非完整统计框架下的非完整 Shannon 熵为：

$$S_q=-k\sum_{i=1}^v p_i^q \ln p_i \tag{1}$$

上式中， k 是玻尔兹曼常数。当 $q=1$ 时，就回到广延统计力学。

3. 第八种统计系统和由非完整 Shannon 熵推导第八种统计分布

在统计系综中，根据系统与外界的关系，将统计分布分别称为：零分布(微正则分布)，即粒子数 N 和能量 E 及体积 V 都不变的系统； N 分布，即 N 可变化，而 E 和 V 不变的系统； E 分布(正则分布)，即 E 可变化，而 N 和 V 不变的系统； V 分布，即 V 可变化，而 N 和 E 不变的系统； N - E 分布(巨正则分布)，即 N 和 E 可变化，而 V 不变的系统； N - V 分布，即 N 和 V 可变化，而 E 不变的系统； E - V 分布，即 E 和 V 可变化，而 N 不变的系统。上述这七种统计分布可以计算热力学量，且热力学等价[8]。还有，若粒子数 N 和能量 E 及体积 V 都可变化的系统就是完全开放系统(或第八种统计系统)，其分布称之为 N - E - V 分布(或第八种统计分布)。不管是广延统计力学，还是非广延统计力学，主要研究微正则系统，正则系综，巨正则系统，很少研究完全开放系统，其原因是缺少完全开放系统的概率分布。完全开放系统是自然界最普遍的系统，而其他系统仅仅是完全开放系统的特殊情况，所以有必要研究完全开放系统。下面介绍第八种统计分布的概率函数及热力学公式和涨落公式。

考虑系统和源之间既有力的和热的相互作用，又有粒子的交换。系统在源的作用下，各微观态的粒子数 N_i ，能量 E_i 和体积 V_i 可能不同，以 P_i 表示系统微观态的概率，我们取：

$$\sum_{i=1}^v p_i^q N_i=N \tag{2}$$

$$\sum_{i=1}^v p_i^q E_i=E \tag{3}$$

$$\sum_{i=1}^v p_i^q V_i=V \tag{4}$$

$$\sum_i^v p_i^q=1 \tag{5}$$

在系统和源达到平衡后，相应的平均值 N ， E ， V 都是一定的。根据非完整统计思想，式子(2)，(3)，(4)，(5)可能具有不同的 q 值，为了计算的方便性，这里假定它们相同的条件下，根据最大熵原理，我们所求的统计分布应使非完整 Shannon 熵在约束下取极值。引入 Lagrange 函数：

$$F=-\frac{S_q}{k}+\gamma\left(\sum_{i=1}^{v}p_i^q-1\right)+\alpha\left(\sum_{i=1}^{v}p_i^q N_i-N\right)+\beta\left(\sum_{i=1}^{v}p_i^q E_i-E\right)+\kappa\left(\sum_{i=1}^{v}p_i^q V_i-V\right) \tag{6}$$

求条件极值，$\frac{\partial F}{\partial p_i}=0$ 得：

$$p_i=\frac{\exp\left(-\alpha N_i-\beta E_i-\kappa V_i\right)}{Z_q\left(\alpha,\beta,\kappa\right)} \tag{7}$$

$$Z_q\left(\alpha,\beta,\kappa\right)=\left[\sum_{i=1}^{v}\exp\left(-\alpha qN_i-\beta qE_i-\kappa qV_i\right)\right]^{1/q} \tag{8}$$

其中α，β，κ，γ是 Lagrange 乘子。(7)、(8)分别为N-E-V分布的概率分布函数和配分函数。将(7)带入(2)，并应用(3)，(4)，(5)，(8)式得：

$$S_q=k\left[\alpha N+\beta E+\kappa V+\ln Z_q\left(\alpha,\beta,\kappa\right)\right] \tag{9}$$

对(9)式求偏导，

$$\left(\frac{\partial S_q}{\partial N}\right)_{E,V}=k\alpha=-\frac{\mu}{T}\quad \left(\frac{\partial S_q}{\partial E}\right)_{N,V}=k\beta=\frac{1}{T}\quad \left(\frac{\partial S_q}{\partial V}\right)_{N,E}=k\kappa=\frac{P}{T} \tag{10}$$

结合开系热力学基本方程$T\mathrm{d}S=-\mu\mathrm{d}N+\mathrm{d}U+P\mathrm{d}V$，可得：

$$\alpha=-\frac{\mu}{kT}\quad \beta=\frac{1}{kT}\quad \kappa=\frac{P}{kT} \tag{11}$$

则系统的平均热力学公式：

$$N=-\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln Z_q\left(\alpha,\beta,\kappa\right) \tag{12}$$

$$E=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_q\left(\alpha,\beta,\kappa\right) \tag{13}$$

$$V=-\frac{\partial}{\partial\kappa}\ln Z_q\left(\alpha,\beta,\kappa\right) \tag{14}$$

其中，μ为化学势，T为绝对温度，P为压强，k玻尔兹曼常数。很显然，当$q=1$时，就回到广延统计力学。

还有，系统的涨落公式为：

$$\frac{\overline{N_i^2}-N^2}{N^2}=\frac{1}{qN^2Z_q^2}\left[Z_q\frac{\partial^2 Z_q}{\partial\alpha^2}-\left(\frac{\partial Z_q}{\partial\alpha}\right)^2\right]$$

$$\frac{\overline{E_i^2}-E^2}{E^2}=\frac{1}{qE^2Z_q^2}\left[Z_q\frac{\partial^2 Z_q}{\partial\beta^2}-\left(\frac{\partial Z_q}{\partial\beta}\right)^2\right]$$

$$\frac{\overline{V_i^2}-V^2}{V^2}=\frac{1}{qV^2Z_q^2}\left[Z_q\frac{\partial^2 Z_q}{\partial\kappa^2}-\left(\frac{\partial Z_q}{\partial\kappa}\right)^2\right]$$

4. 用第八种统计分布研究单原子理想气体

对于单原子理想气体，式(8)的求和可由积分取代，变为

$$Z_q(\alpha,\beta,\kappa)=\left[\sum_i^v \exp\left(-\alpha qN_i-\beta qE_i-\kappa qV_i\right)\right]^{1/q}=\left[\sum_{N=0}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-\alpha qN}}{h^{3N}N!}\int \mathrm{e}^{-\kappa qV}\mathrm{d}V\int \mathrm{e}^{-\beta qE}\frac{\partial^2\Gamma}{\partial V\partial E}\mathrm{d}E\right]^{1/q} \quad (15)$$

将单原子理想气体的能量(仅动能) $E=\sum_{j=1}^{N}\frac{p_{jx}^2+p_{jy}^2+p_{jz}^2}{2m}$ 和在系统相空间等能面所包围的相体积 $\Gamma(E,V)=V^N(2\pi mE)^{3N/2}/(3N/2)!$ 代入上式，得

$$Z_q(\alpha,\beta,\kappa)=\left\{\sum_{N=0}^{\infty}\left[\left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\alpha q}(\beta q)^{-3/2}(\kappa q)^{-1}\right]^N\right\}^{1/q}=\left\{\sum_{N=0}^{\infty}x^N\right\}^{1/q} \quad (16)$$

式(16)中的 x 为

$$x=\left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\alpha q}(\beta q)^{-3/2}(\kappa q)^{-1} \quad (17)$$

当 $x<1$ 时，上式收敛。得

$$Z_q(\alpha,\beta,\kappa)=\left(\frac{1}{1-x}\right)^{1/q} \quad (18)$$

将式(18)代入式(12-14)，可得单原子理想气体的热力学量：

$$N=\frac{x}{1-x},\quad E=\frac{3N}{2\beta}=\frac{3NkT}{2},\quad V=\frac{N}{\kappa}=\frac{NkT}{P},\quad S=kN(\alpha+5/2)$$

在 $q=1$ 时，单原子理想气体的热力学量与其他分布计算的结果相同的[9] [10]。同时，基于非完整 Shannon 熵的第八种统计分布的配分函数也存在收敛与发散的临界点，也就是说，第八种统计分布也可以解释临界现象，但对于具有相互作用的真实气体，非广延参数因数 q 究竟是根据系统的性质人为调节还是确定的，以及考虑到相互作用的复杂性，利用刚性球模型是否能够得到新的结果，还有待进一步讨论。

致　谢

在本文的写作过程中，得到导师李鹤龄教授的思想启发，在此一并表示感谢！

项目基金

银川能源学院科研资助项目(2013-KY-Y-23)。

参考文献 (References)

[1] 李鹤龄，宋金国，雷润洁 (2010) 非广延统计力学与完全开放系统的统计分布. *大学物理*, **5**, 22.

[2] Saslaw, W.C. (1985) Gravitational physics of stellar and galactic systems. Cambridge University Press, Cambridge, 217.

[3] Gamero, L.G., Plastino, A. and Torres, M.E. (1997) Wavelet analysis and nonlinear dynamics in a nonextensive setting. *Physica A*, **246**, 487-509.

[4] Tsallis, C. (1988) Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics. *Journal of Statistical Physics*, **52**, 479-487.

[5] 欧聪杰 (2006) 非广延统计物理中的四个基本问题与广义量子气体的热力学性质. 厦门大学物理系，福建.

[6] Wang, Q.A. (2001) Incomplete statistics and nonextensive generalizations of statistical mechanics. *Chaos*, *Solitons and Fractals*, **12**, 1431-1437.

[7] 李亚亚，胡娅娅 (2013) 非完整统计在完全开放系统中的概率分布. *大理学院学报*, **4**, 34.

[8] 李鹤龄 (2005) 第八种统计分布与涨落. *宁夏大学学报*(*自然科学版*), **3**, 240-242.

[9] 张奎，李鹤龄 (1999) 统计热力学. 宁夏人民出版社，银川.

[10] 李鹤龄 (2010) 由完全开放系统的统计分布研究几个热力学系. *大学物理*, **9**, 13.