arXiv:2301.05485v1 [math.DS] 13 Jan 2023

从实验约束下的平衡统计物理到宏观端口哈密顿系统

Judy Najnudel、Thomas Hélie、David Roze、Rémy Müller

S3AM 团队，*STMS* 实验室（*UMR 9912*），*IRCAM-CNRS-SU*，伊戈尔·斯特拉文斯基广场 *1* 号，*75004* 巴黎，法国

摘要

本文旨在搭建一座桥梁，连接物质的微观描述与其宏观尺度上的端口哈密顿（PH）描述。物质具有内能，由环境中的大量快速相互作用粒子组成。环境被假定为缓慢变化，并通过对宏观量（如能量、粒子数等）的实验约束来建模，这些宏观量分为两类：不发生涨落的量和发生涨落的量。本文分多个步骤详细阐述推导 PH 宏观定律的方法，并以两个典型案例（理想气体、伊辛铁磁体）加以说明。本文重新审视平衡统计物理，重点关注这种分类。首先，利用玻尔兹曼原理给出物质的统计定律。该原理定义了一种宏观平衡，其特征是一个标量值——熵，以及由各项约束所产生的热力学量。随后推导端口哈密顿系统。哈密顿量（宏观能量）表示为宏观状态（熵以及与涨落类相关的宏观量）的函数。端口（流变量/努力变量）以保守的方式关联状态的时间导数与哈密顿量梯度。该开放系统定义了支配标准热力学量的可逆定律。最后，本文提出一种策略，在给定宏观耗散定律的情况下，将此 PH 系统扩展为不可逆的保守系统。

关键词：平衡统计物理、宏观端口哈密顿系统、统计熵、实验条件

1. 引言

宏观系统（尺寸为 10^{-2} 米或更大）由物质构成，也就是说，由数十亿个微观粒子（尺寸为 10^{-9} 米或更小）构成，这些粒子共同决定了系统的行为。然而，研究单个粒子无法让我们了解宏观系统，正如追踪一个人的轨迹不足以预测人群的移动一样。可是，求解包含数十亿个变量的完备方程组，既过于复杂，也无关紧要：在足够大的尺度上，个体行为并不重要。事实上，人们通常并不关心杯中水分子的具体轨迹，而是关心它们占据的体积，上预印本提交至 *Physica D*，*2023*年*1*月*16*日

平均值。同样，人们关心的不只是当天天气预报，还关心全球趋势。

平均值和趋势属于统计学的范畴，统计学旨在用较少的变量描述复杂系统。因此，在给定某些实验条件的情况下，统计物理学（SP）通过计算复杂系统（快速）涨落的平均值，推导出（较慢的）宏观量。Ludwig Boltzmann 在 1877 [1] 中引入了用于描述系统向热力学平衡过渡的统计论证。这一框架能够预测温度、熵产生和相变等宏观热力学现象 [2]。

热力学已在端口哈密顿系统（PHS）的背景下得到广泛研究，其建模与控制也同样如此（例如参见 [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]）。然而，如何从具有众多自由度的复杂系统中恰当地推导出宏观热力学端口哈密顿系统，却鲜少得到探讨。事实上，在此类模型降阶中，系统表征的选择绝非无关紧要，必须谨慎处理 [10, 11]。本文提出一系列系统化步骤，以便从可用统计物理学描述的系统出发，构建一个简化但基于物理原理的结构化宏观端口哈密顿系统。

请注意，在本文的研究范围内，我们仅讨论平衡态统计物理（SP），也就是说，在给定某些实验条件的情况下，确定处于热力学平衡的系统的平均量。这与研究系统动力学并不矛盾，前提是假设热力学弛豫（即达到热力学平衡的过程）无限快于实验条件的变化率。基于这一假设，宏观轨迹可理解为一系列热力学平衡态。

本文结构如下。第2节通过选择（i）一种特定的粒子表示方式，以及（ii）一组用于计算宏观量的表征函数，对系统微观构型的描述进行形式化。第3节探讨宏观层面的实验条件及其对系统构型空间的影响。第4节针对微观构型引入随机描述。随后，第5节根据玻尔兹曼原理，确定系统处于热力学平衡时的条件概率分布，并据此将相关宏观变量推导为该概率分布的期望值。第6节引入端口，并阐明它们与这些宏观变量之间的关系，从而得到宏观端口哈密顿系统模型。最后，第7节总结了根据微观描述推导宏观端口哈密顿系统模型的实际步骤。此外，还介绍了如何根据额外的宏观耗散定律推导出保守不可逆端口哈密顿系统模型。

所有步骤将在以下各节中详细说明，并汇总于图 1。

2. 系统的微观态

2.1. 粒子表征（$p \in \mathbb{P}$）

为了描述微观层面的系统，必须以适当的方式描述系统中的每个粒子。根据所研究的系统，可以选择用粒子的位置、动量、电荷、磁矩等来表示粒子。

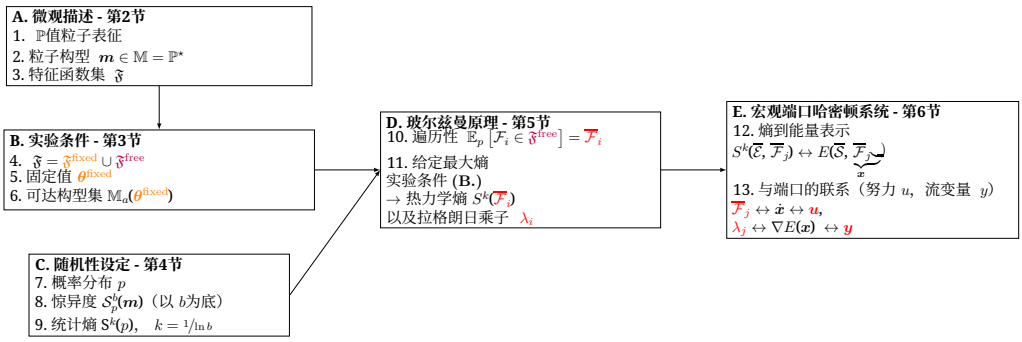


图1：从平衡统计物理到宏观端口哈密顿系统（PHS）：方法回顾，并标出每一步中引入的主要数学对象。

定义 1 (粒子集 $\mathbb{P}$)。 给定一种用于编码粒子状态的表示方式，我们将其所有可能取值的集合记为 $\mathbb{P}$ 。

示例 1 （以位置和动量表示的粒子）。 对于选择用其空间位置 $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3$ 和动量 $\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^3$ 表示的粒子（例如气体中的粒子），粒子集定义为 $\mathbb{P} = \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$。

示例 2 （以磁矩表示的粒子）。 对于选择用其磁矩 $s \in \{-1, 1\}$ 表示的粒子（例如伊辛模型中的粒子 *[12, 13],* ），粒子集定义为 $\mathbb{P} = \{-1, 1\}$。

2.2. 构型空间（$\boldsymbol{m} \in \mathbb{M}$）

由于 $\mathbb{P}$ 中的一个元素表示一个粒子的状态，表示粒子构型的一种自然方式是将 $\mathbb{P}$ 中的元素串接起来。类比形式语言理论 [14], ，特定的粒子构型被选定为编码成字母表 $\mathbb{P}$ 上的一个词（其他选择见注释 1）。

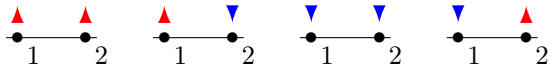
定义 2 (编码空间 $\mathbb{W}$)。 我们将 $\mathbb{W} := \mathbb{P}^\star$ 表示为可编码构型的空间（简称编码空间），其中 $\star$是克莱尼算子，定义如下

$$\mathbb{P} = \{\epsilon\}, \qquad \mathbb{P}^{i+1} = \left\{p_1 \cdot p_2 \mid (p_1, p_2) \in \mathbb{P}^i \times \mathbb{P}\right\} \quad \forall i \geq 0, \tag{1a}$$

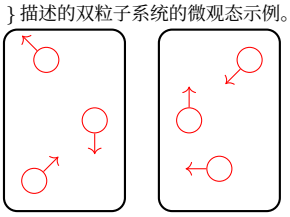
$$\mathbb{P}^\star = \bigcup_{i \geq 0} \mathbb{P}^i, \tag{1b}$$

其中 ϵ 为空构型，$\cdot$ 表示连接运算。

性质 1 ($\mathbb{W}$ 是一个幺半群)。 根据构造，编码空间 $\mathbb{W}$ 是一个幺半群（见定义 *(3)*），其结合二元运算为$\cdot$（连接），单位元为 ϵ（空构型）。



(a) 由自旋 $s \in \{-1$（蓝色）和 1（红色）$\}$ 描述的双粒子系统的微观态示例。



(b) 由其位置（圆圈）和动量（箭头）描述的三粒子系统的微观态示例。

图 2：不同系统的微观态示例。

定义 3 (幺半群)。 若集合 $\mathbb{S}$ 配备了结合二元运算 $\cdot : \mathbb{S} \times \mathbb{S} \mapsto \mathbb{S}$ 和单位元 ϵ，并且对于所有 $(s_1, s_2, s_3) \in \mathbb{S}^3$，以下性质均成立，则称其为幺半群。

1. $s_1 \cdot (s_2 \cdot s_3) = (s_1 \cdot s_2) \cdot s_3$,
2. $\epsilon \cdot s_1 = s_1 \cdot \epsilon = s_1$.

基于所选的表示方式，某些构型可能在物理上不可容许[1]，因此我们引入如下微观状态集合。

定义 4 （可容许构型集 $\mathbb{M}$ 和微观态 $\boldsymbol{m} \in \mathbb{M}$）。我们将 $\mathbb{M} \subseteq \mathbb{W}$ 表示为同时属于可编码构型且物理上可容许的构型集合。元素 $\boldsymbol{m} \in \mathbb{M}$ 称为系统的微观态。

下文中，我们选择 $\mathbb{M} = \mathbb{W}$（其解释见注释 1(i)，包含 $\mathbb{M} \neq \mathbb{W}$ 的示例见 (ii-iii)）。图 2a 展示了由自旋描述的粒子系统的微观态示例，图 2b 展示了由位置和动量描述的粒子系统。

性质 2 ($\mathbb{M}$ 可测)。有序对 $\big(\mathbb{M}, \mathcal{P}(\mathbb{M})\big)$ 其中 $\mathcal{P}(\mathbb{M})$ 表示 $\mathbb{M}$ 的幂集，是一个可测空间，也就是说，它满足

1. $\mathbb{M} \in \mathcal{P}(\mathbb{M})$,2. $\mathcal{P}(\mathbb{M})$ 对补集封闭：$\mathbb{M} \backslash \mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathbb{M}) \quad \forall \mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathbb{M})$,3. $\mathcal{P}(\mathbb{M})$ 对可数并封闭：$\bigcup_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}_i \in \mathcal{P}(\mathbb{M}) \, \forall \mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2, \ldots \in \mathcal{P}(\mathbb{M})$。

如上所述，集合 $\mathbb{M}$ 也可以定义在由连接以外的算子生成的编码空间上。以下注释 1 中列出了一些示例。

[1]例如，如果所选表示为每个粒子指定一个唯一标签，那么多个粒子共享同一标签的构型便是不允许的（更多详情请参见注释 1(iii)）。

注释 1（组合结构及其解释示例）。 幺半群 $\mathbb{W}$ 为编码微观构型提供了一种简单而自然的方式，即选择一种具有优先级且可区分的粒子表示（见下文规范 *(i)*）。不过，也可以通过采用任何适当的粒子组合学来处理构型编码，并可选择其他规范（例如，详见 *[15, §I.2]*，其中介绍了下文提到的算子 Seq、Mset、Pset 等）：

(i) 带优先级的可区分性。 词 $p_i \cdot p_{i-1} \cdot \cdots \cdot p_1 \in \mathbb{P}^i \subset \mathbb{W}$ 可以解释为描述编号为 $n = 1, \ldots, i$的粒子的状态值 $p_n \in \mathbb{P}$。从这个意义上说，定义 *2* 编码了一种粒子彼此可区分 、且对所涉及粒子具有优先顺序 的物理学（粒子 *1* 可以单独编码，粒子 *2* 只有在涉及粒子 *1* 时才能编码，依此类推）。从组合学的角度看，编码空间$\mathbb{W} = \mathbb{P}^\star$ 对应于序列构造，也记作 *[15]*中的$\mathrm{Seq}(\mathbb{P})$ 。

(ii) 不可区分性。 描述粒子不可区分 的物理学的一种自然编码，是由所有 $\mathbb{P}$有限集组成的多重集 $\mathbb{W}_{(\mathrm{ii})} = \mathrm{Mset}(\mathbb{P})$ （元素之间的顺序不计），其中允许元素任意有限次重复。可容许构型集 $\mathbb{M}_{(\mathrm{ii})}$ 的示例包括 $\mathbb{W}_{(\mathrm{ii})}$，或幂集 $\mathrm{Pset}(\mathbb{P}) \subset \mathrm{Mset}(\mathbb{P})$ （不允许重复），适用于所考虑的物理学禁止同一微观态中的两个粒子被相同的状态值激发的情形。

(iii) 无优先级的可区分性。 除 *(i)* 之外，另一种为可区分粒子编码构型的方法，是给每个粒子添加一个独特的标签，例如其编号 $n \in \mathbb{L} \subseteq \mathbb{N}$。此时，编码空间可以是幂集 $\mathbb{W}_{(\mathrm{iii})} = \mathrm{Pset}(\mathbb{P}_{labeled})$，其中带标签粒子的集合 $\mathbb{P}_{labeled}$ 是笛卡尔积 $\mathbb{L} \times \mathbb{P}$。禁止粒子多重出现或复制的可容许构型集，是 $\mathbb{W}_{(\mathrm{iii})}$ 的子集 $\mathbb{M}_{(iii)}$ ；其中所有元素都使每个标签 $n \in \mathbb{L}$ 的出现次数为 *0* 或 *1*。

(iv) 复杂结构。 更一般地，编码空间可以由复杂元素构成，其结构包含序列、环（例如芳香分子）、树等，以及依据精确的组合规范将它们组合起来的结构（参见 *[15, I.2.3]*。

2.3. 表征函数 *($\mathcal{F}_i \in \mathfrak{F}$)*

为了在微观层面刻画该系统，可以为其配备$\mathbb{M}$ 个由 $i \in \mathbb{I}$标记的有限表征函数集 $\mathcal{F}_i$: $\mathbb{M} \to \mathbb{F}_i$。

定义 5（广延性）。 若函数 $\mathcal{F}_i$ 满足 $\mathbb{F}_i$ 是一个 $\mathbb{R}^+$-半模（见定义 *6*），且其满足

$$\boldsymbol{m}_3 = \boldsymbol{m}_1 \cdot \boldsymbol{m}_2 \Rightarrow \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m}_3) = \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m}_1) + \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m}_2) \quad \forall (\boldsymbol{m}_1, \boldsymbol{m}_2, \boldsymbol{m}_3) \in \mathbb{M}^3. \tag{2}$$

定义 6 ($\mathbb{R}^+$-半模)。若对于所有$(r_1,\ r_2) \in \mathbb{R}^{+2}$和$(s_1,\ s_2) \in \mathbb{S}^2$，以下性质均成立，则集合 $\mathbb{S}$ 是一个 $\mathbb{R}^+$-半模

1. $r_1 \, (s_1 + s_2) = r_1 \, s_1 + r_2 \, s_2$,

2. $(r_1 + r_2)\, s_1 = r_1\, s_1 + r_2\, s_1$,
3. $(r_1\, r_2)\, s_1 = r_1\, (r_2\, s_1)$，4.
$1\, s_1 = s_1$，5. $0\, s_1 = 0$。

例 1（续）。对于由 N 个相同的非相互作用粒子组成的气体，函数$\mathcal{F}_e$： $\mathbb{M} \mapsto \mathbb{R}^+$ 定义为

$$\mathcal{F}_e : \boldsymbol{m} \longmapsto \mathcal{F}_e(\boldsymbol{m}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left\|\boldsymbol{p}^i(\boldsymbol{m})\right\|^2}{2\, m} \tag{3}$$

给出系统处于微观态 $\boldsymbol{m}$ 时的能量，其中 $\boldsymbol{p}^i$（$\boldsymbol{m}$） 是粒子i的动量，而 m 是单个粒子的质量。它满足式（*2*）中定义的广延性。

例 2（续）。在伊辛模型中，函数 $\mathcal{F}_e$： $\mathbb{M} \mapsto \mathbb{R}$ 定义为

$$\mathcal{F}_e : \boldsymbol{m} \longmapsto \mathcal{F}_e(\boldsymbol{m}) = -\frac{1}{2}\, \boldsymbol{m}^\intercal\, \boldsymbol{J}_{\mathrm{ex}}\, \boldsymbol{m} \tag{4}$$

给出系统处于微观态 $\boldsymbol{m}$ 时的能量，其中每个系数 $\boldsymbol{J}_{\mathrm{ex}i,\ j}$ 表示原子 i 与原子 j之间的交换能。它不满足式（*2*）中定义的广延性。

例 3。函数 $\mathcal{F}_n$： $\mathbb{M} \mapsto \mathbb{N}^+$ 定义为

$$\mathcal{F}_n : \boldsymbol{m} \longmapsto \mathcal{F}_n(\boldsymbol{m}) \tag{5}$$

其中， $\mathcal{F}_n$（$\boldsymbol{m}$） 是系统在微观态 $\boldsymbol{m}$ 下的粒子数，且该函数具有广延性。

例4。定义函数 $\mathcal{F}_r$

$$\mathcal{F}_r(\boldsymbol{m}) = \left(\boldsymbol{r}^i\right)_{1 \le i \le \mathcal{F}_n(\boldsymbol{m})}, \tag{6}$$

其中， $\boldsymbol{r}^i \in \mathbb{R}^3$ 是粒子 i 的位置，给出了系统处于微观态 $\boldsymbol{m}$ 时所有粒子位置的集合。它不是广延量。

例5。定义函数 $\mathcal{F}_v$： $\mathbb{M} \mapsto \mathbb{R}^+$

$$\mathcal{F}_v : \boldsymbol{m} \longmapsto \mathcal{F}_v(\boldsymbol{m}) \tag{7}$$

其中， $\mathcal{F}_v(\boldsymbol{m})$ 是系统处于微观态 $\boldsymbol{m}$ 时所占据的体积。此类函数 $\mathcal{F}_v$ 的选取并不唯一（见下文注释*2*）。在此，我们建议将 $\mathcal{F}_v(\boldsymbol{m})$定义为包围微观态 $\boldsymbol{m}$中所有粒子位置、同时考虑容器几何形状及其自由度的最小包围体积。例如，对于底面固定、由可沿轴 z 自由移动的活塞封闭的圆柱形容器，我们可以将体积定义为

$$\mathcal{F}_v(\boldsymbol{m}) = A \times h(\boldsymbol{m}), \quad \textit{with } h(\boldsymbol{m}) = \max\{r_z^i \,|\, \boldsymbol{r}^i \in \mathcal{F}_r(\boldsymbol{m})\}. \tag{8}$$

此函数不满足式（*2*）中定义的广延性。

备注 2（体积）。体积的数学概念化是一个颇具挑战性的问题[2]。在 *SP* 的语境下，体积的物理概念化也是一个问题：

(i) 一种可能的选择是粒子所占据的体积，例如由所有粒子位置的三维单纯形包络所界定的体积，

(ii) 另一种选择是考虑容器的体积，粒子可以在其中运动。

情况 *(i)* 允许定义一个表征函数 $\mathcal{F}_v$，因为体积与微观态有着内在联系。在 *(ii)* 中，微观态并不包含容器体积的信息：与容器边界接触的粒子集合甚至可能为空。这一信息属于“实验约束”（将在下文第*3*节介绍）。另请注意，例*5*对应于介于 *(i)* 和 *(ii)* 之间的混合描述。

In the following, we denote $\mathfrak{F} = \{\mathcal{F}_i\}_{i\in\mathbb{I}}$ the set of characterizing functions on $\mathbb{M}$.

3. 实验条件与可达微观状态（$\mathbf{m} \in \mathbb{M}_a$）

实验条件可能会约束表征函数，使其取值与这些实验条件相容。因此，在实验条件下，构型空间被限制为一个由可达微观状态构成的集合 $\mathbb{M}_a \subset \mathbb{M}$。

定义 7（可达微观状态集合 $\mathbb{M}_a$）。记 $\mathbb{I}^{\text{fixed}} \subseteq \mathbb{I}$ 为受到实验约束的表征函数标签集合。由于这些约束，函数 $\mathcal{F}_i$, $i \in \mathbb{I}^{\text{fixed}}$ 只能在 $\mathbb{F}_i^{\text{fixed}} \subseteq \mathbb{F}_i$中取允许值。

记 $\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}} := \left(\mathbb{F}_i^{\text{fixed}}\right)_{i\in\mathbb{I}^{\text{fixed}}}$。可达微观状态集合 $\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)$ 为

$$\mathbb{M}_{\text{a}}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right) = \left\{\boldsymbol{m} \in \mathbb{M} \mid \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m}) \in \mathbb{F}_i^{\text{fixed}} \quad \forall i \in \mathbb{I}^{\text{fixed}}\right\}. \tag{9}$$

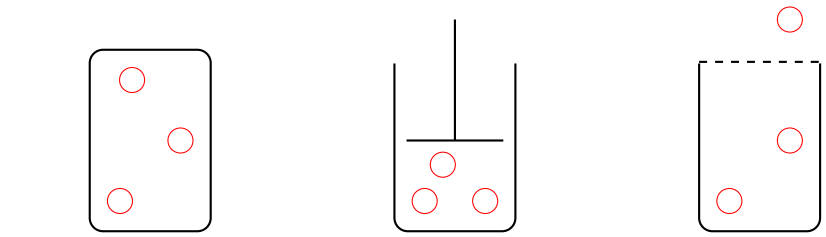
请注意，$\mathbb{I}^{\text{fixed}} = \mathbb{I}$ 相对于所选的表征函数定义了一个孤立系统。

例 1（续）。考虑封闭容器中的 N 个粒子组成的气体。系统无法与环境交换粒子，因此粒子数 $\mathcal{F}_n(\boldsymbol{m})$ 固定为 N。记 $\mathbb{F}_n^{\text{fixed}} = \{N\}$。可达微观状态集合为 $\mathbb{M}_a(N) = \left\{\boldsymbol{m} \in \mathbb{M} \mid \mathcal{F}_n(\boldsymbol{m}) \in \mathbb{F}_n^{\text{fixed}}\right\}$。

例 1（续）。考虑一个由 N 个粒子组成的气体，它们处于一个占据空间 $\Pi \subset \mathbb{R}^3$ 的封闭容器中。记 $\mathbb{F}_n^{\text{fixed}} = \{N\}$ 和 $\mathbb{F}_r^{\text{fixed}} = \Pi^N$，可达微观状态的集合为 $\mathbb{M}_a(N, \Pi) = \left\{\boldsymbol{m} \in \mathbb{M} \mid \mathcal{F}_n(\boldsymbol{m}) \in \mathbb{F}_n^{\text{fixed}}, \mathcal{F}_r(\boldsymbol{m}) \in \mathbb{F}_r^{\text{fixed}}\right\}$。注意，对 $\mathbb{F}_r^{\text{fixed}}$ 的约束对应于注释 *2* 中的情况（*ii*），此时容器由 Π 描述。

图 3 展示了其他实验条件的示例。

[2]在 [17, 第 3 章，第 3]，页中，Grothendieck 提到，（在大多数教科书中）对于长度（曲线的长度）、面积（曲面的面积）、体积（立体的体积）这些概念，缺少任何“严谨的”定义。



(a) 粒子数固定且体积固定。　(b) 粒子数固定。　(c) 体积固定。

图3：容器中气体的实验条件示例。

中间点。在这一步，物理学通过以下内容进行描述：$\mathbb{M}$（对物理粒子的微观表述，即微观态），$\mathbb{M}_a \subseteq \mathbb{M}$（在固定的宏观实验约束下可访问的微观态），$\mathfrak{F}$（与可在宏观尺度上观测到的量的联系）。这不足以推导出宏观尺度上的自主物理定律。这个问题可通过以下方式解决：(i) 用一个新的函数补全 $\mathfrak{F}$，即惊异度，该函数由随机描述推导得出，并由此产生熵；(ii) 应用玻尔兹曼提出的基本原理 [1]，推导出具有物理意义的微观状态概率。

接下来的章节将重新审视这一方法，重点关注宏观量与外部环境中同类量进行信息交流的倾向。为此，我们假设，所有未被实验条件明确固定的表征函数仍可依赖于微观态 $\boldsymbol{m}$，并将 $\mathbb{I}^{\text{free}} := \mathbb{I} \backslash \mathbb{I}^{\text{fixed}}$ 记作未被实验条件固定的表征函数标签集合。

4. 随机表征与不确定性度量

4.1. 微观状态随机描述

系统会在一个可访问微观态与另一个之间涨落。在宏观层面，通常认为不可能以确定性方式预测这些涨落：SP采用随机框架对其进行随机描述。事实上，由命题（2）可知，$\left(\mathbb{M}, \mathcal{P}(\mathbb{M})\right)$ 是可测的，因此 $\left(\mathbb{M}_a, \text{Tr}\left(\mathcal{P}(\mathbb{M})\right)_{\mathbb{M}_a}\right)$ 也是可测的，其中$\text{Tr}\left(\mathcal{P}(\mathbb{M})\right)_{\mathbb{M}_a}$ 表示 $\mathcal{P}(\mathbb{M})$在 $\mathbb{M}_a$ [18]上的迹。假设 $\mathbb{M}_a$ 是可数的，且分布 p 是离散的[3]，，我们便可定义概率分布 $p\left(. \,|\, \boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right) : \mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right) \mapsto [0,1]$，下文简称为 p，它为每个微观态 $\boldsymbol{m} \in \mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)$ 赋予概率 $p(\boldsymbol{m})$，表示该微观态是系统实际微观态的概率（第5节中的玻尔兹曼原理将提供一种确定该概率的方法）。

随机量 $\mathcal{F}(\boldsymbol{m})$ 的平均值由其期望值 $\mathbb{E}_p[\mathcal{F}]$ 给出，定义为

$$\mathbb{E}_p[\mathcal{F}] = \sum_{\boldsymbol{m} \in \mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} p(\boldsymbol{m})\, \mathcal{F}(\boldsymbol{m}). \tag{10}$$

[3]也可扩展到连续可测空间，方法类似：将求和替换为关于勒贝格测度的积分，并在（10）中使用分布。

4.2. 统计熵

给定某种信息单位基底 $b > 1$，概率为 $p(\boldsymbol{m})$ 的微观态 $\boldsymbol{m}$ 的惊异度 $\mathcal{S}_p^b(\boldsymbol{m})$ 定义为

$$\mathcal{S}_p^b(\boldsymbol{m}) = \log_b \frac{1}{p(\boldsymbol{m})} \quad \text{with } \log_b = \frac{1}{\ln(b)} \ln . \tag{11}$$

惊异度，或称信息量，用于量化微观态$\boldsymbol{m}$ 出现时令人惊讶的程度。例如，如果某个微观态 $\boldsymbol{m}$ 确定就是系统的状态，那么它的概率为 1，惊异度为 0。

当两个独立事件 $\boldsymbol{m}_1$ 和 $\boldsymbol{m}_2$ 的概率满足

$$p\left(\boldsymbol{m}_1 \cdot \boldsymbol{m}_2\right) = p(\boldsymbol{m}_1)\, p(\boldsymbol{m}_2), \tag{12}$$

惊异度函数 $\mathcal{S}_p^b$ 满足式 (2) 中定义的广延性。

惊异度使我们能够定义概率分布 p 和基底 b上平均信息缺失程度的度量，即统计熵 $\mathsf{S}_b(p)$ [19]，其定义如下：

$$\mathsf{S}_b(p) = \mathbb{E}_p[\mathcal{S}_p^b]. \tag{13}$$

统计熵可以解释为：为了确切知道实际的微观态，“每个问题有 b 个可能答案时，平均需要问多少个问题”。

示例 6。 考虑连续抛掷一枚硬币两次的结果。每次抛掷后，硬币可能呈现正面或反面，因此共有 $2 \times 2 = 4$ 种可能结果（图 *4*）。如果所有结果的概率都相同，至少需要回答两个各有两种可能答案的问题，才能确定确切结果：

1. 第一次抛掷后，硬币呈现的是正面还是反面？ 2. 第二次抛掷后，硬币呈现的是正面还是反面？

p_1 $\boldsymbol{m} \mapsto p_1\, \boldsymbol{m}$ $_b\, p_1 \;=$: ()

实际上，在式 *(13)* 中取 $= \frac{1}{4}$ 和 $b = 2$，可得 $\mathsf{S}() \log_2 \frac{1}{4} = 2$。

然而，如果概率分布不是均匀的，有些结果比其他结果更有可能，因此不确定性较低，熵也同样较低。例如，对于概率分布 p_2，结果 *(A)* 的概率为 $1\ 2$，结果 *(B)* 的概率为 $1\ 4$，结果 *(C)* 和 *(D)* 的概率均为 $1\ 8$，熵变为 $\mathsf{S}_b(p_2) = 1.75 < \mathsf{S}_b(p_1) = 2$。

在信息论中，统计熵与信息的最优编码有关。假设你长时间重复例（6）中的抛硬币实验，并希望将每次结果都记录在计算机上。对于分布为p_1的两次抛掷序列，编码一个结果至少需要两个比特；而对于分布为 p_2，结果 (A) 可用一个比特编码，结果 (B) 可用两个比特编码，结果 (C) 和 (D) 则各需三个比特，平均而言即为 $1 \times \frac{1}{2} + 2 \times \frac{1}{4} + 6 \times \frac{1}{8} = 1.75$ 比特。出现频率最高的结果占用的编码空间最少；反过来，结果 (C) 和 (D) 占用的编码空间相对较大，这由它们出现频率较低这一点所弥补。总的来说，利用分布 p_2 所蕴含的信息可以降低编码成本。这一原理是摩尔斯电码（以及更广义的无损熵编码，例如霍夫曼编码 [20]）的基础：像“e”或“i”这样极常见的字母所需的点，远少于“j”或“q”这样不常见的字母。



图4：抛掷两次硬币可能出现的结果。

为简洁起见，统计熵在下文记作

$$\mathsf{S}^k(p) := \mathsf{S}_{b=\exp(1/k)}(p) = -k \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}})} p(\boldsymbol{m}) \ln p(\boldsymbol{m}), \tag{14}$$

对于所有在 $\mathbb{M}_a(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}})$上定义的 p 。

注3 (随机结构)。 根据注释 *1*，涉及基于复杂规范的组合结构的微观态（例如分子和化学反应过程）需要借助专门工具处理随机结构（参见例如 *[15,part.C]*），这超出了本文的讨论范围。

5. 平衡态下的微观状态概率分布与配分函数

5.1. 热力学平衡

当系统的统计特性不再随时间演化时，该系统便处于热力学平衡状态。此时，遍历假设 指出，在“足够长”的时间段 t内，系统会遍历所有可达微观状态。假设可以通过 $\mathcal{M}:\mathbb{R}^+\mapsto\mathbb{M}_a$在时刻 τ 测量微观态 $\boldsymbol{m}$ ，这意味着在热力学平衡时，某个量 $\overline{\mathcal{F}}_i$ 的时间平均值与其期望值 $\mathbb{E}_p[\mathcal{F}_i]$相等：

$$\overline{\mathcal{F}}_i := \lim_{t\to+\infty} \frac{1}{t}\int_0^t \left(\mathcal{F}_i\circ\mathcal{M}\right)(\tau)\,\mathrm{d}\tau = \mathbb{E}_p[\mathcal{F}_i]. \tag{15}$$

因此，对于给定的均值集合 $\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}$ $(\overline{\mathcal{F}}_i)_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}$，遍历假设可转化为一组假设 $\mathrm{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)$ ，定义如下：

$$\mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right) = \left(\mathbb{E}_p[\mathcal{F}_i] = \overline{\mathcal{F}}_i\right)_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}. \tag{16}$$

尽管这一假设仍存在争议 [21] （尤其是“足够长”的定义），但它是平衡统计物理的基础，我们在下文中假定其成立。

5.2. 玻尔兹曼原理：热力学平衡时的最大熵（回顾）

根据定义，处于平衡状态的系统不会演化。变化意味着新信息，因此处于平衡状态的系统所提供的信息最少。由于统计熵衡量的是信息的缺乏，因此可知，平衡时熵最大：这就是玻尔兹曼原理。

因此，热力学平衡时的微观态概率分布$p^\star$ 为

$$
\begin{aligned}
p^\star &= \arg\max_p \mathsf{S}^k(p) \;\; \text{subject to} \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} p(\boldsymbol{m}) = 1 \\
&= \arg\max_{p,\lambda} \mathsf{S}^k(p) + \lambda \left(\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} p(\boldsymbol{m}) - 1 \right),
\end{aligned} \tag{17}
$$

其中第二行使用拉格朗日乘子 λ 指定约束。

5.3. 宏观外部环境中的玻尔兹曼原理

允许发生涨落的宏观量（$\mathcal{F}_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}(\boldsymbol{m})$）容易与外部环境进行交换（例如交换粒子、能量等）。假设系统具有遍历性，且宏观与微观时间尺度之比趋于无穷大，这意味着这些发生涨落的量的期望值（值为 $\overline{\mathcal{F}}_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}$）可以随时间变化（在较慢的宏观尺度上），同时热力学平衡得以满足（在较快的微观尺度上），并不断更新（在较慢的宏观尺度上）。

作为本文的一项主要步骤，我们通过推导条件概率 $p^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right)$，解决这一问题。该条件概率在给定宏观量 $\boldsymbol{\theta}^{\text{free}} = (\overline{\mathcal{F}}_i)_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}$ 的约束下使熵最大化（玻尔兹曼原理），即，

$$
\begin{aligned}
p^\star =& \arg\max_p \mathsf{S}^k(p) \;\; \text{subject to} \begin{cases} \displaystyle\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} p(\boldsymbol{m}) = 1, \\ \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right), \end{cases} \\
=& \arg\max_{p,\lambda_0,\lambda_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}} \mathsf{S}^k(p) + \lambda_0 \left(\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} p(\boldsymbol{m}) - 1 \right) \\
&+ \sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \lambda_i \left(\mathbb{E}_p[\mathcal{F}_i] - \overline{\mathcal{F}}_i \right),
\end{aligned} \tag{18}
$$

其中 $\mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)$ 考虑了实验条件（参见式（16））。

请注意，根据定义，如果数值$\overline{\mathcal{F}}_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}$ 是按照概率（17）计算的 $\mathcal{F}_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}$ 的期望值，那么该概率会自然地还原式（17）中的概率。

定理 1. 设 $\boldsymbol{\theta}^{\text{free}} := \left(\overline{\mathcal{F}}_i\right)_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \in \bigtimes_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \mathbb{F}_i$，其中 $\bigtimes_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \mathbb{F}_i$ 表示$(\mathbb{F}_i)_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}$的笛卡尔积。

那么，对于所有 $\boldsymbol{m} \in \mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)$,

$$
p^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right) = \frac{\exp\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \lambda_i \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k}\right)}{\mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right)}, \tag{19a}
$$

其中

$$\mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right) := \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} \exp\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \lambda_i\, \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k}\right) \tag{19b}$$

是系统的配分函数，并且对所有 $i \in \mathbb{I}^{\text{free}}$、 λ_i 均满足

$$\frac{\partial}{\partial\lambda_i}\, k\, \ln \mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right) = \overline{\mathcal{F}}_i. \tag{19c}$$

证明见附录 A。

定义 8（热力学熵）。 热力学熵 $S^k\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)$ 定义为平衡状态下给定 $\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}$的概率分布的统计熵:

$$S^k\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right) = \mathsf{S}^k\left(p^\star\left(\cdot \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right)\right). \tag{20}$$

性质 3。 热力学熵函数 S^k 是 $k\ln$的勒让德变换 $\mathcal{Z}$ 并且有

$$S^k\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right) = k\, \ln \mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right) - \sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \lambda_i\, \overline{\mathcal{F}}_i. \tag{21}$$

证明。

$$\begin{aligned}
S^k\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right) &\overset{(a)}{=} \mathsf{S}^k\left(p^\star\left(\cdot \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right)\right) \\
&\overset{(b)}{=} -k \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} p^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right) \ln p^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right) \\
&\overset{(c)}{=} -k \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} p^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right) \ln\left(\frac{\exp\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \lambda_i\, \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k}\right)}{\mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right)}\right) \\
&= -k \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)} p^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right)\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \lambda_i\, \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k} - \ln \mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right)\right) \\
&\overset{(d)}{=} -\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}} \lambda_i\, \overline{\mathcal{F}}_i + k\, \ln \mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right),
\end{aligned}$$

利用 (a) 式 (20)、(b) 式 (14)、(c) 式 (19a) 以及 (d) 式 (10)–(15)。

我们推导得出， S^k 是 $k\ln\mathcal{Z}$ 的勒让德变换（另见 [22]）。 □

性质 4。 由命题 *(3)* 可知，对于所有 $i \in \mathbb{I}^{\text{free}}$，拉格朗日乘子 λ_i 是热力学熵函数关于平均 $\overline{\mathcal{F}}_i$ 的导数

$$\lambda_i = -\frac{\partial S^k}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right). \tag{22}$$

例7。 特别地，这定义了系统温度 T、化学势 μ 和压强 P，如下

$$\frac{1}{T} := \frac{\partial S^k}{\partial \overline{\mathcal{F}}_e}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right), \qquad \frac{\mu}{T} := -\frac{\partial S^k}{\partial \overline{\mathcal{F}}_n}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right), \qquad \frac{P}{T} := \frac{\partial S^k}{\partial \overline{\mathcal{F}}_v}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right). \tag{23}$$

绝热过程。 对于经历绝热过程（与环境没有热交换）的系统，惊异度与 $\boldsymbol{m}$ 无关，因此

$$\mathcal{S}^b_{p^\star}(\boldsymbol{m}) = S \quad \forall \boldsymbol{m}. \tag{24}$$

这意味着，对于此类系统，所有微观状态的概率都相同

$$p^\star(\boldsymbol{m}) = \frac{1}{\Omega}, \quad \text{with } \Omega = \text{card}\left(\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)\right). \tag{25}$$

由式 (19a) 可知，对于此类系统，有

$$\sum_{i \in \mathbb{I}^{\text{free}}} \lambda_i \, \mathcal{F}_i(\boldsymbol{m}) = C, \tag{26}$$

其中 C 与 $\boldsymbol{m}$无关。

例8。 特别地，只能与环境交换体积的系统满足 $\mathcal{F}_e(\boldsymbol{m}) + P\,\mathcal{F}_v(\boldsymbol{m}) = C$，其中 C 与 $\boldsymbol{m}$无关。

5.4. 玻尔兹曼常数的确定

为确保统计熵在平衡时确实与热力学熵一致，常数 k 必须取为玻尔兹曼常数[4] $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J.K^{-1}。事实上，考虑一个由 N 个非相互作用原子组成、体积为 V、温度为 T 的理想气体，并以这些原子的位置和动量表示。其配分函数 $\mathcal{Z}$ 为

$$\mathcal{Z}(T \,|\, N, V) = V^N \left(\frac{2\,\pi\, m\, k\, T}{h^2}\right)^{3\,N/2}, \tag{27}$$

其中，m 表示一个原子的质量，h 为普朗克常数。根据命题（3），热力学熵 $S^k(\overline{\mathcal{F}}_e, N, V)$ 为

$$S^k(\overline{\mathcal{F}}_e, N, V) = k\, \ln \mathcal{Z}(T \,|\, N, V) + \frac{\overline{\mathcal{F}}_e}{T}. \tag{28}$$

此外，根据公式（23），压强 P 为

$$P = T\, \frac{\partial S^k}{\partial V}(\overline{\mathcal{F}}_e, N, V) = \frac{N\, k\, T}{V}. \tag{29}$$

因此，k 必须与 k_B 等同，才能验证理想气体定律 $P\,V = N\, k_B\, T$。

[4]请注意，根据定义（14），若选择单位 USI 参考量 $k_0 = 1$J.K^{-1} 作为单位信息量，该值对应的问题数底数为 $b_B = \exp(k_0/k_B) \approx \exp(10^{23}/1.38)$。这意味着，$10^{3.147e+22} \approx 2^{9.4736e+21}$ 解释 J.K 需要约 10^{22} 比特（针对一种气体）。 $+1$ -1

6. 最终 PHS 模型

开放系统的宏观描述可以通过使用熵、能量、质量等变化的平衡方程来实现。端口哈密顿系统为这类物理描述提供了合适的框架。本节采用一种标准表述（见第6.1节回顾）来探讨这一问题，其中能量表示为熵和状态变量的函数：这需要先对 S关于 E求逆：$(E, \dots) \mapsto S(E, \dots)$，从而引入哈密顿量 $H = E$：$(S, \dots) \mapsto H(S, \dots)$。请注意，这一求逆是一个技术步骤；若考虑 [23] 中的接触形式（另见 [24] 中的替代性 GENERIC表述），则可以避免这一步而继续使用熵函数。

6.1. 端口哈密顿系统回顾

PHS 形式体系为多物理系统的建模提供了统一的框架，因为它将能量视为一种普遍通用的媒介。事实上，任何物理系统都可以划分为若干部分，这些部分通过能量交换彼此相互作用。

文献 [25, 26] 中提供了对 PHS 的详细介绍。本文采用一种适用于多物理系统的微分代数表述 [27, 28]。这种表述可将动力系统表示为由以下部分构成的网络：

1. 状态为 $\boldsymbol{x}$ 、能量为 $E(\boldsymbol{x})$ 的储能元件；2. 由努力变量定律 $z:\ \boldsymbol{w} \mapsto z(\boldsymbol{w})$ 描述的无源无记忆元件，例如，其耗散功率 $P_{\mathrm{d}} = z(\boldsymbol{w})^{\intercal}\, \boldsymbol{w}$ 对所有流变量 $\boldsymbol{w}$ 均为非负；3. 传递流出 功率 $P_{\mathrm{ext}} = \boldsymbol{u}^{\intercal} \boldsymbol{y}$ 的连接端口，其中 $\boldsymbol{u}$ 为输入，$\boldsymbol{y}$ 为输出。

系统流变量 $\boldsymbol{f}$ 和努力变量 $\boldsymbol{e}$ 通过一个（可能依赖于 $\boldsymbol{x}$的）反对称互联矩阵 $\boldsymbol{S} = -\boldsymbol{S}^{\intercal}$耦合，因此

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{x}} \\ \boldsymbol{w} \\ \boldsymbol{y} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{f}} = \boldsymbol{S} \underbrace{\begin{bmatrix} \nabla E(\boldsymbol{x}) \\ z(\boldsymbol{w}) \\ \boldsymbol{u} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{e}}. \tag{30}$$

此类系统满足功率平衡

$$P_{\mathrm{s}} + P_{\mathrm{d}} + P_{\mathrm{ext}} = 0 \tag{31}$$

其中 $P_{\mathrm{s}} = \nabla E(\boldsymbol{x})^{\intercal}\, \dot{\boldsymbol{x}}$ 表示储存功率。

证明。

$$P_{\mathrm{s}} + P_{\mathrm{d}} + P_{\mathrm{ext}} = \nabla E(\boldsymbol{x})^{\intercal}\, \dot{\boldsymbol{x}} + z\left(\boldsymbol{w}\right)^{\intercal}\, \boldsymbol{w} + \boldsymbol{u}^{\intercal}\, \boldsymbol{y} = \boldsymbol{e}^{\intercal} \boldsymbol{f} = \boldsymbol{e}^{\intercal} \boldsymbol{S} \boldsymbol{e} = (\boldsymbol{e}^{\intercal} \boldsymbol{S} \boldsymbol{e})^{\intercal} = -\boldsymbol{e}^{\intercal} \boldsymbol{S} \boldsymbol{e} = 0$$

这是由于 $\boldsymbol{S}$的反对称性。 □

请注意，本文对所有组件（包括外部源）均采用被动符号约定（也称为受体约定）。这意味着，当流变量进入组件 [29]时，其定义为正。

6.2. 宏观状态与能量

在前面的章节中，我们推导出了热力学熵关于能量和其他宏观变量的函数关系。为了得到类似公式（30）的端口哈密顿表述，我们选择改为将能量表示为热力学熵和其他宏观变量的函数。

记 $\overline{\mathcal{S}} := S^k\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)$，并记 $\boldsymbol{\theta}^x := \boldsymbol{\theta}^{\text{free}} \backslash \overline{\mathcal{F}}_e$ 为除能量之外的宏观量集合，其对应的标签集合为 $\mathbb{I}^x$。我们将（广延）宏观状态 $\boldsymbol{x}$ 定义为

$$\boldsymbol{x} = \left[\overline{\mathcal{S}}, \boldsymbol{\theta}^x\right]^{\mathsf{T}}, \tag{32}$$

这样，流变量 $\dot{\boldsymbol{x}}$ 表示广延量随时间的变化。假设熵函数 S^k 关于 $\overline{\mathcal{F}_e}$ 可逆，我们将宏观能量函数 E 定义为

$$E : \boldsymbol{x} \longmapsto E\left(S^k(\overline{\mathcal{F}}_e, \boldsymbol{\theta}^x), \boldsymbol{\theta}^x\right) = \overline{\mathcal{F}}_e, \tag{33}$$

这样，努力 ∇E 表示强度量。否则，可通过式 (21) 和接触形式 [23, 8] 隐式定义宏观能量函数。

备注：能量函数 E 应为一次齐次函数，从而对所有 γ 均满足

$$E(\gamma\, \boldsymbol{x}) = \gamma\, E(\boldsymbol{x}). \tag{34}$$

6.3. 与端口的联系

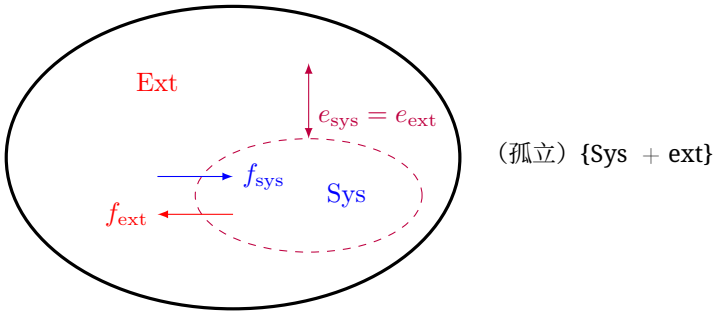


图 5：系统及其环境的流变量 f 和努力变量 e。所考虑的系统及其环境整体构成一个孤立系统。

环境作用于系统流变量，使得在热力学平衡状态下，各流变量达到平衡，并且努力变量在系统接口处共享（图 5）：

$$\frac{\partial E^{\text{sys}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{sys}}} = \frac{\partial E^{\text{ext}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{ext}}} \quad \forall i \in \mathbb{I}^x. \tag{35}$$

（证明见附录 B）。

采用公式（30）的记号，并结合公式（22），我们得到表1中流变量、努力变量与外部端口之间的关系。

表1：端口变量及其关系。

状态 $\boldsymbol{x}$	$\left[\overline{\mathcal{S}}, \overline{\mathcal{F}}_i\right]$	$\boldsymbol{u} + \dot{\boldsymbol{x}} = 0$
努力 $\nabla E(\boldsymbol{x})$	$[T, T\,\lambda_i]$	$\boldsymbol{y} = \nabla E(\boldsymbol{x})$

6.4. 保守可逆端口哈密顿系统

记 σ_{ext} 为流出的熵流，可得开放系统的保守 PHS 互联矩阵为

$$
\begin{array}{cc|ccc|ccc}
 & & \multicolumn{3}{c|}{\nabla E(\boldsymbol{x})} & \multicolumn{3}{c}{\boldsymbol{u}} \\
 & & T & \mu & -P & \sigma_{\text{ext}} & \dot{N}_{\text{ext}} & \dot{V}_{\text{ext}} \\
\hline
\dot{\boldsymbol{x}} & \dot{\overline{\mathcal{S}}} & . & . & . & -1 & . & . \\
 & \dot{\overline{\mathcal{F}}}_n & . & . & . & . & -1 & . \\
 & \dot{\overline{\mathcal{F}}}_v & . & . & . & . & . & -1 \\
\hline
\boldsymbol{y} & T_{\text{ext}} & 1 & . & . & . & . & . \\
 & \mu_{\text{ext}} & . & 1 & . & . & . & . \\
 & -P_{\text{ext}} & . & . & 1 & . & . & .
\end{array}
. \tag{36}
$$

7. 方法总结及向不可逆系统推广的路径

本节首先总结如何在实验情境下，根据物质的微观描述推导出可逆保守宏观端口哈密顿系统的主要步骤。其次，在给定耗散定律的情况下，提出一种将这一建模过程完善为宏观不可逆保守形式的方法。

7.1. 可逆保守宏观端口哈密顿系统

总之，宏观 PHS 可通过以下步骤从微观描述中建立：

1. **微观状态表示** 定义 $\mathbb{P}, \mathbb{W} = \mathbb{P}^{\star}$ 和 $\mathbb{M} \subseteq \mathbb{W}$，并配备表征函数 $\mathfrak{F} = \{\mathcal{F}_i : \mathbb{M} \mapsto \mathbb{F}_i\}_{i \in \mathbb{I}^{\circ}}$
2. **实验条件与可达微观状态**
   (a) 将 $\mathfrak{F} = \mathfrak{F}^{\text{fixed}} \cup \mathfrak{F}^{\text{free}}$ 划分为函数集合 $\mathfrak{F}^{\text{fixed}}$ 及其补集 $\mathfrak{F}^{\text{free}}$；其中，这些函数的取值受实验的物理约束，对应的指标集合分别为 $\mathbb{I}^{\text{fixed}}$ 和 $\mathbb{I}^{\text{free}}$。(b) 将函数 $\mathfrak{F}^{\text{fixed}}$的实验可容许值集合记为 $\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}} \subset \times_{i \in \mathbb{I}^{\text{fixed}}} \mathbb{F}_i$ 。(c) 将相应的可容许微观状态集合记为 $\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)$ 。

3. **随机描述** 对于所有概率分布 $p : \mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right) \longmapsto [0, 1]$,
   (a) 推导惊异度 $\mathcal{S}_p^b : \boldsymbol{m} \in \mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right) \longmapsto \log^b{}_p\, \boldsymbol{m}() \in \mathbb{R}^+$。(b) 推导统计熵函数 S^k： $p \longmapsto \mathbb{E}_p\left[\mathcal{S}^{b=\exp(1/k)p}\right] \in [0, \Omega]$。

4. **热力学平衡下遍历系统的玻尔兹曼原理**

(a) 引入 $\boldsymbol{\theta}^{\text{free}} := \left(\overline{\mathcal{F}_i}\right)_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}$ 在 $\mathfrak{F}^{\text{free}}$ 宏观尺度上观测到的函数值。(b) 根据定理 1 定义 $p^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathrm{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right)$。(c) 定义热力学熵函数 $S^k : \boldsymbol{\theta}^{\text{free}} \mapsto \mathrm{S}^k\left(p^\star\left(. \mid \mathrm{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right)\right)$。

对于常见的实验约束（即对 $\mathfrak{F} = \left\{\mathcal{F}_e、\ \mathcal{F}_n、\ \mathcal{F}_v、\ \mathcal{S}_p^b\right\}$ 的约束），我们得到表2中的结果（另见 [30]）。

请注意，如果 $\overline{\mathcal{F}}_e \mapsto S^k(\overline{\mathcal{F}}_e, \ldots)$ 及其反函数没有解析解（注意，$\dfrac{\partial S^k}{\partial \overline{\mathcal{F}}_e}$ 是单调的），则可以采用近似策略（示例见 [31] ）。

	Example
	Gas in an isolated tank
	Gas in a closed tank with a piston, thermally insulated
	Gas in a porous tank, thermally insulated
	Gas in a porous tank with a piston, thermally insulated
	Gas in a closed tank, in contact with a thermostat
	Gas in a closed tank with a piston, in contact with a thermostat
	Gas in a porous tank, in contact with a thermostat
	Gas in a porous tank with a piston, in contact with a thermostat

7.2. 根据宏观耗散定律构建不可逆保守宏观端口哈密顿系统

系统 (36) 描述了宏观尺度上的某些保守可逆物理。在某些情况下，可以观察到耗散现象，而相关定律仅在这一尺度上已知。

在本部分中，我们假设此类耗散现象由以下内容描述

(i) 一种流到努力映射定律

$$z_{\mathrm{d}} : \boldsymbol{f}_{\mathrm{d}} \mapsto \boldsymbol{e}_{\mathrm{d}} = z_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{f}_{\mathrm{d}}) \ \text{ such that for all } \boldsymbol{f}_{\mathrm{d}}, \ z_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{f}_{\mathrm{d}})^{\intercal}\boldsymbol{f}_{\mathrm{d}} =: P_{\mathrm{d}} \geq 0, \tag{37}$$

(ii) 按照下列矩阵与保守部分互连

$$\begin{array}{cc|cc|c|cc} & & \nabla E(\boldsymbol{x}) & & z(\boldsymbol{w}) & \multicolumn{2}{c}{\boldsymbol{u}} \\ & & T & \boldsymbol{e}_{\mathrm{s}} & \boldsymbol{e}_{\mathrm{d}} & \sigma_{\mathrm{ext}} & \boldsymbol{e}_{\mathrm{ext}} \\ \hline \dot{\boldsymbol{x}} & \dot{\overline{S}} & . & . & . & -1 & . \\ & \boldsymbol{f}_{\mathrm{s}} & . & \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{x}} & -\boldsymbol{K} & . & -\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{x}} \\ \hline \boldsymbol{w} & \boldsymbol{f}_{\mathrm{d}} & . & \boldsymbol{K}^{\intercal} & \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{w}} & . & -\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{w}} \\ \hline \boldsymbol{y} & T_{\mathrm{ext}} & 1 & . & . & . & . \\ & \boldsymbol{f}_{\mathrm{ext}} & . & \boldsymbol{G}_{\boldsymbol{x}}^{\intercal} & \boldsymbol{G}_{\boldsymbol{w}}^{\intercal} & . & \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{y}} \end{array}, \tag{38}$$

(iii) 耗散功率 P_{d} 完全转化为熵率

$$\sigma_{\mathrm{i}} = {}^{P_{\mathrm{d}}}\!/_{T_{\mathrm{d}}} \geq 0 \ \text{ where } T_{\mathrm{d}} > 0, \tag{39}$$

表示该现象发生时的瞬时宏观温度。 σ_{i} 为正，体现了耗散的不可逆性。

由 z_{d}，我们构造出满足以下定律的不可逆热力学转换器

$$z : \boldsymbol{w} = \left[\boldsymbol{f}_{\mathrm{d}}^{\intercal}, T_{\mathrm{d}}\right]^{\intercal} \longmapsto \left[z_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{f}_{\mathrm{d}})^{\intercal}, \underbrace{-z_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{f}_{\mathrm{d}})^{\intercal}\boldsymbol{f}_{\mathrm{d}}/T_{\mathrm{d}}}_{-\sigma_{\mathrm{i}}}\right]^{\intercal} \tag{40}$$

其中 $-\sigma_{\mathrm{i}} \leq 0$ 表示流入转换器的熵率。

该定律是守恒的，因为 $z(\boldsymbol{w})^{\intercal}\boldsymbol{w} = 0$。由于不可逆性（$\sigma_{\mathrm{i}} \geq 0$），它自然满足热力学第二定律。

最后，根据 (iii)，不可逆保守热力学宏观端口哈密顿系统可表示为

$$\begin{array}{cc|cc|c|cc} & & \nabla E(\boldsymbol{x}) & & z(\boldsymbol{w}) & & \boldsymbol{u} \\ & & T & \boldsymbol{e}_{\mathrm{s}} & -\sigma_i & \boldsymbol{e}_{\mathrm{d}} & \sigma_{\mathrm{ext}} & \boldsymbol{e}_{\mathrm{ext}} \\ \hline \dot{\boldsymbol{x}} & \dot{\overline{S}} & . & . & -1 & . & -1 & . \\ & \boldsymbol{f}_{\mathrm{s}} & . & \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{x}} & . & -\boldsymbol{K} & . & -\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{x}} \\ \hline \boldsymbol{w} & T_{\mathrm{d}} & 1 & . & . & . & . & . \\ & \boldsymbol{f}_{\mathrm{d}} & . & \boldsymbol{K}^{\intercal} & . & \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{w}} & . & -\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{w}} \\ \hline \boldsymbol{y} & T_{\mathrm{ext}} & 1 & . & . & . & . & . \\ & \boldsymbol{f}_{\mathrm{ext}} & . & \boldsymbol{G}_{\boldsymbol{x}}^{\intercal} & . & \boldsymbol{G}_{\boldsymbol{w}}^{\intercal} & . & \boldsymbol{J}_{\boldsymbol{y}} \end{array}. \tag{41}$$

8. 结论

本文重新审视了平衡 SP，旨在将具有大量自由度的复杂系统建模为变量数量较少的宏观 PHS。

从选择粒子的描述方式和特设的表征函数出发，我们回顾了如何根据给定的实验条件推导平衡时粒子构型的概率。最终可以看出，宏观变量是所选表征函数在该概率下的期望值，而热力学熵则是这些宏观变量的函数。若从一开始就将能量选为表征函数，那么宏观能量也可以表示为热力学熵及其他宏观变量的函数。通过 PHS 形式体系，实验条件被表示为作用于系统的输入流，因此产生的输出是系统共同承受的努力。借助这种表述，环境的外在性及其通过能量和熵交换与系统发生的相互作用都得以明确呈现。

因此，我们为守恒开放系统提出了两种 PHS 表述：一种是可逆的（没有熵产生），另一种是不可逆的（存在熵产生）。

一个直接的思路是将这项工作扩展到非平衡 SP [24]，使宏观轨迹不再只是平衡态的连续序列，并且实验条件可以更快地变化。

附录 A. 定理 1 的证明

证明。 为求解式 (18)，我们引入拉格朗日乘子 λ_0 和 $\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}} := (\lambda_i)_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}$，并对由下式定义的拉格朗日函数 L 进行优化： [32]

$$\mathsf{L}:\left(p,\ \lambda_0,\ \boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right)\longmapsto \mathsf{S}^k(p)+\lambda_0\left(\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)}p(\boldsymbol{m})-1\right)+\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}\lambda_i\left(\mathbb{E}_p[\mathcal{F}_i]-\overline{\mathcal{F}}_i\right). \tag{A.1}$$

优化 L 的必要条件是求解 $^{\delta}\mathsf{L}_{\overline{\delta p}}=0$，其中 δ 表示泛函导数。由式 (A.1)-(14)-(10),

$$\frac{\delta\mathsf{L}}{\delta p}=0\Rightarrow\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)}\left(-k\left(\ln p(\boldsymbol{m})+1\right)+\lambda_0+\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}\lambda_i\,\mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})\right)=0.$$

特别地，当 p 满足

$$\begin{aligned}&-k\left(\ln p(\boldsymbol{m})+1\right)+\lambda_0+\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}\lambda_i\,\mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})=0\quad\forall\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)\\ \Rightarrow&p(\boldsymbol{m})=\exp\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}\lambda_i\,\mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k}\right)\exp\left(\frac{\lambda_0}{k}-1\right)\quad\forall\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right).\end{aligned}$$

第二个必要条件是求解 $\partial\mathsf{L}_{\overline{\partial\lambda_0}}=0$，将其与第一个条件结合，可得

$$\frac{\partial\mathsf{L}}{\partial\lambda_0}=0\Rightarrow\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)}p(\boldsymbol{m})=1\Rightarrow\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)}\exp\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}\lambda_i\,\mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k}\right)=\exp\left(1-\frac{\lambda_0}{k}\right),$$

因此，对所有 $\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)$，$p^{\star}(\boldsymbol{m})$ 具有如下形式

$$\widehat{p}^{\star}\left(\boldsymbol{m}\mid\mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right),\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right)=\frac{\exp\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}\lambda_i\mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k}\right)}{\mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right)}, \tag{A.2}$$

$$\text{with }\mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right):=\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)}\exp\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}\lambda_i\,\mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k}\right). \tag{A.3}$$

第三个必要条件是对所有 $i\in\mathbb{I}^{\text{free}}$ 求解 $\partial\mathsf{L}_{\overline{\partial\lambda_i}}=0$，结合式 (A.3) 可得

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathsf{L}}{\partial\lambda_i}=0\Rightarrow&\mathbb{E}_p[\mathcal{F}_i]=\overline{\mathcal{F}}_i\\ \Rightarrow&\frac{\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{M}_a\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{fixed}}\right)}\mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})\exp\left(\frac{\sum_{i\in\mathbb{I}^{\text{free}}}\lambda_i\,\mathcal{F}_i(\boldsymbol{m})}{k}\right)}{\mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right)}=\overline{\mathcal{F}}_i\\ \Rightarrow&\frac{\partial}{\partial\lambda_i}\,k\,\ln\mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right)=\overline{\mathcal{F}}_i.\end{aligned}$$

由此可得，最优分布 $p^\star$ 为

$$p^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right)\right) = \widehat{p}^\star\left(\boldsymbol{m} \mid \mathsf{H}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}\right), \boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right),$$

$$\text{with } \boldsymbol{\lambda}^{\text{free}} \text{ such that } \frac{\partial}{\partial \lambda_i} k \ln \mathcal{Z}\left(\boldsymbol{\lambda}^{\text{free}}\right) = \overline{\mathcal{F}}_i \quad \forall i \in \mathbb{I}^{\text{free}}.$$

□

附录 B. 系统接口处功率相等的证明

证明。 考虑由所研究的系统及其环境构成的孤立的 总系统。对于所有 $i \in \mathbb{I}^{\text{free}}$，有

$$\overline{\mathcal{F}}_i^{\text{total}} = \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{sys}} + \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{ext}}.$$

熵是广延量，因此，

$$S^k_{\text{total}}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}_{\text{total}}\right) = S^k_{\text{sys}}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}_{\text{sys}}\right) + S^k_{\text{ext}}\left(\boldsymbol{\theta}^{\text{free}}_{\text{ext}}\right). \tag{B.1}$$

总系统是孤立的，因此总熵相对于任意变量都达到最大值，所以对于所有 $i \in \mathbb{I}^{\text{free}}$，

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial S^k_{\text{total}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{sys}}} = 0 \\
\Rightarrow &\frac{\partial S^k_{\text{sys}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{sys}}} + \frac{\partial S^k_{\text{ext}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{sys}}} = 0 \\
\Rightarrow &\frac{\partial S^k_{\text{sys}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{sys}}} - \frac{\partial S^k_{\text{ext}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{ext}}} = 0 \\
\Rightarrow &\lambda_i^{\text{sys}} - \lambda_i^{\text{ext}} = 0.
\end{aligned}$$

此外，对于所有 $i \in \mathbb{I}^x$

$$\frac{\partial E}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i} = T\,\lambda_i,$$

因为

$$\begin{aligned}
&S^k\left(E(\overline{\mathcal{S}}, \overline{\mathcal{F}}_i), \overline{\mathcal{F}}_i\right) = \overline{\mathcal{S}} \\
\Rightarrow &\frac{\partial S^k}{\partial \overline{\mathcal{F}}_e}\frac{\partial E}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i} + \frac{\partial S^k}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i} = 0 \\
\Rightarrow &\frac{1}{T}\frac{\partial E}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i} - \lambda_i = 0.
\end{aligned}$$

我们推导得出 $\frac{\partial E^{\text{sys}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{sys}}} = \frac{\partial E^{\text{ext}}}{\partial \overline{\mathcal{F}}_i^{\text{ext}}} \quad \forall i \in \mathbb{I}^x$。 □

致谢

作者谨向 Bernhard Maschke 致谢，感谢他提出的意见和富有帮助的讨论。

参考文献

[1] L. Boltzmann，《关于力学热理论第二定律与概率论之间的关系，以及关于热平衡定律的关系》，Kk Hof-und Staatsdruckerei，1877年。[2] P. T. Landsberg，《热力学与统计力学》，Courier Corporation，2014年。[3] D. Eberard，B. Maschke，《扩展至不可逆系统的端口哈密顿系统：以热传导为例》，IFAC Proceedings Volumes 37 (13) (2004) 243–248。[4] D. Eberard，B. Maschke，A. van der Schaft，《将哈密顿系统扩展至热力学相空间：迈向非可逆过程的几何》，Rep. Math. Phys. 60 (2) (2007) 175–198。[5] H. Ramirez，B. Maschke，D. Sbarbaro，《不可逆端口哈密顿系统：不可逆过程的一般表述及其在连续搅拌釜式反应器中的应用》，Chem. Eng. Sci. 89 (2013) 223–234。[6] J.-C. Delvenne，H. Sandberg，《端口哈密顿系统的有限时间热力学》，Physica D 267 (2014) 123–132。[7] H. Ramirez，Y. Le Gorrec，B. Maschke，F. Couenne，《不可逆过程的基于无源性的控制：一种端口哈密顿方法》，Automatica 64 (2016) 105–111。[8] A. Van Der Schaft，《重访经典热力学：系统与控制视角》，IEEE Control Systems Magazine 41 (5) (2021) 32–60。[9] A. van der Schaft，《经典热力学的刘维尔几何》，Journal of Geometry and Physics 170 (2021) 104365。[10] A. N. Gorban，N. K. Kazantzis，I. G. Kevrekidis，H. C. Öttinger，C. Theodoropoulos，《多尺度现象的模型降阶与粗粒化方法》，Springer，2006年。[11] H. C. Öttinger，《系统化粗粒化："非平衡统计力学的四点经验与一项警示"》，MRS bulletin 32 (11) (2007) 936–940。[12] E. Ising，《对铁磁性理论的贡献》，Zeitschrift für Physik 31 (1) (1925) 253–258。[13] J. Strecka，M. Jascur，《伊辛模型及类伊辛模型简述：平均场、有效场与精确结果》，arXiv预印本 arXiv:1511.03031 (2015)。[14] J. E. Hopcroft，R. Motwani，J. D. Ullman，《自动机理论、语言与计算导论》，Acm Sigact News 32 (1) (2001) 60–65。[15] P. Flajolet，R. Sedgewick，《解析组合学》，剑桥大学出版社，2009年。[16] A. Liechtenstein，M. Katsnelson，V. Gubanov，《铁磁金属中的交换相互作用与自旋波刚度》，Journal of Physics F: Metal Physics 14 (7) (1984) L125。[17] A. Grothendieck，《收获与播种》（《反思与关于一位数学家往事的见证》），Gallimard（2022），1986年。[18] D. Plachky，《有限集、有限代数及可数生成型 σ-代数的理想论刻画》，Mathematica Slovaca 51 (3) (2001) 301–311。[19] R. M. Gray，《熵与信息论》，Springer，2011年。[20] D. E. Knuth，《动态霍夫曼编码》，Journal of algorithms 6 (2) (1985) 163–180。[21] A. Patrascioiu，《遍历假说：数学与物理学中的一个复杂问题》，Los Alamos Science 15 (1987) 263–279。[22] R. K. Zia，E. F. Redish，S. R. McKay，《理解勒让德变换》，American Journal of Physics 77 (7) (2009) 614–622。[23] A. Van der Schaft，B. Maschke，《热力学过程的几何》，Entropy 20 (12) (2018) 925。[24] H. C. Öttinger，《超越平衡热力学》，John Wiley & Sons，2005年。[25] V. Duindam，A. Macchelli，S. Stramigioli，H. Bruyninckx，《复杂物理系统的建模与控制：端口哈密顿方法》，Springer Science & Business Media，2009年。[26] A. J. van der Schaft，D. Jeltsema 等，《端口哈密顿系统理论：入门概述》，Foundations and Trends in Systems a nd Control 1 (2-3) (2014) 173–378。[27] A. Falaize，T. Hélie，《模拟音频电路的无源性保证仿真：一种端口哈密顿方法》，Applied Sciences 6 (10) (2016) 273。[28] R. Müller，《非线性音频电路的连续时间功率平衡仿真：实时处理框架与混叠抑制》，博士论文，索邦大学（2021年）。

[29] T. A. Bigelow, 《电路中的功率与能量》，载于《电路、系统与电机》，Springer，2020年，第105–121页。[30] H. Graben，J. R. Ray, 《绝热系综的统一处理》，《物理评论A》43 (8) (1991) 4100。[31] J. Najnudel，T. Hélie，D. Roze，R. Müller, 《从统计物理学到宏观端口哈密顿系统：路线图》，载于第七届拉格朗日与哈密顿非线性控制方法IFAC研讨会，2021年。[32] E. T. Jaynes, 《最大熵方法的理论依据》，《IEEE汇刊》70 (9) (1982) 939–952。