СЛОЖНОСТЬ СИСТЕМЫ И ЭНТРОПИЯ

Войтеховский Ю.Л.

Геологический институт КНЦ РАН, Анапты, woyt@geoksc.apatity.ru

Сложность системы

Исследуя весьма различные геологические системы (минералы и их ассоциации, горные породы и руды, геологические тела и формации), геолог закономерно – через представление об их иерархическом устройстве – приходит к необходимости количественного выражения их сложности. Сегодня для этого широко используется категория энтропии. В минералогии одним из первых её систематически применил Н.П. Юшкин, раскопавший в старых фолиантах «закон агрегации минеральных индивидов» К.Ф. Науманна [5, с. 20]

Три открытия энтропии

Энтропия введена в термодинамику Р. Клаузиусом в 1865 г. как приращение теплоты в системе при данной абсолютной температуре. Её не удалось выразить в рамках статистической механики, то есть через столкновения молекул. Л. Больцман в 1872 г. предложил её неожиданную (и не принятую современниками) интерпретацию через «термодинамическую вероятность» – число микросостояний системы, отвечающих одному макросостоянию. Термодинамически закрытая система должна изменяться от менее вероятного к более вероятному состоянию с ростом энтропии. Из этих условий он вывел формулу $S = -k \ln W$, где S – энтропия, k – постоянная Больцмана, W – термодинамическая вероятность. К. Шеннон [2, 7, 8] независимо нашёл формулу $H = -\sum p_i \log p_i$ в теории информации. А.А. Юшкевич [3] сообщает, что Э. Альфен [6] получил её в популяционной статистике ещё в 1939-1940 гг., но своевременной публикации помешала война. Н.П. Юшкин использовал энтропию в обеих интерпретациях – термодинамической [4, с. 125-135] и информационной [4, с. 168-185].

Рис. 1. График энтропии H (в найтах, т.к. использованы десятичные логарифмы).

В геологических публикациях энтропия чаще всего используется как шкала сложности системы без осознанного принятия аксиоматики К. Шеннона или Э. Альфена. Но тогда следует хотя бы понимать особенности этой шкалы. График функции H для двух (арки с $H_{\max} = \lg 2$) и трёх (поверхность с $H_{\max} = \lg 3$) вероятностей показан над барицентрической диаграммой $p_1 + p_2 + p_3 = 1$ на рис. 1. Легко видеть, что небольшие изменения вероятностей p_i в углах диаграммы вызывают быстрые изменения H (ножки купола крутые), а те же изменения p_i в центре диаграммы не изменяют H столь сильно (купол пологий). Таким образом, энтропия H как шкала ведёт себя существенно по-разному в разных областях поля вероятностей. В общем случае H достигает максимума $\lg n$ в центре поля вероятностей, когда все $p_i = 1/n$, и минимума 0 в углах поля вероятностей, когда одна вероятность $p_i = 1$ (остальные 0).

Система – одна, энтропии – разные

Из общей теории систем следует, что их сложность определяется не столько разнообразием элементов, сколько разнообразием связей. Последнее лишь потенциально ограничено разнообразием элементов и допускает вариации. Поэтому при описании сложности систем необходимо характеризовать оба аспекта. Покажем, как они связаны для 4- ... 9-вершинных выпуклых полиэдров (всего 2907), интерпретируемых как 4- ... 9-атомные кластеры [1].

Определим H_s как шенноновскую энтропию, где p_i – частоты (вероятности) вершин полиэдра (атомов кластера), взятого в комбинаторном приближении, в различных позициях его точечной группы симметрии (т.г.с.). Аналогично определим H_v , где p_i – частоты вершин полиэдра с различными валентностями. Результаты расчётов даны на рис. 2: H_s и H_v не связаны жёстко с порядком группы автоморфизмов выпуклого n -вершинника. Лишь в первом приближении можно указать, что с ростом симметрии обе энтропии уменьшаются. Диапазоны их изменений и соотношения определены утверждениями 1-3.

Утверждение 1. $0 \leq H_s \leq \lg n$.

Доказательство. $H_{\min} = 0$ в целом достигается для правильных и полуправильных n -вершинников, а также бесконечных серий призм и антипризм (чётные $n \geq 4$). $H_{\max} = \lg n$ достигается для комбинаторно асимметричных выпуклых n -вершинников ($n \geq 7$). Для фиксированного n границы H_s колеблются между указанными абсолютными пределами.

Утверждение 2. $0 \leq H_v < \lg n$.

Доказательство. $H_{\min} = 0$ достигается для правильных и полуправильных n -вершинников, а также бесконечных серий призм и антипризм (чётные $n \geq 4$). Покажем, что нет n -вершинников, у которых все вершины имели бы разные валентности. Верно даже более сильное утверждение: у любого выпуклого n -вершинника есть по меньшей мере 4, или 3 и 2, или 3 пары вершин с одинаковыми валентностями.

Допустим, что есть выпуклый полиэдр с разноименными гранями. Рассмотрим его диаграмму Шлегеля на k -угольную грань с наибольшим числом рёбер. Построим её корону, не допуская повторов. После присоединения $(k-1)$ -, $(k-2)$ - ... 4- и 3-угольной граней свободными останутся 3 ребра. Таким образом, исходное допущение ошибочно. К свободным рёбрам будут присоединены 3 одноименных, 2 и 1 или 3 разноименные грани. Поскольку все возможные (3- ... k -угольные) грани уже использованы, то на полиэдре окажутся 4, или 3 и 2, или 3 пары одноименных граней.

Допустим, что не все k -3 типа граней представлены в короне. После того, как по одной грани каждого типа присоединены к базальной грани, свободными останутся более чем 3 ребра. Для заполнения короны придётся выбрать более чем 3 грани из меньшего, чем ранее $(k-3)$, числа вариантов. Эти причины не могут уменьшить разнообразие граней в короне. Наконец, в силу дуальности, любой выпуклый n -вершинник имеет 4, или 3 и 2, или 3 пары вершин с одинаковыми валентностями. В общем виде оценка не может быть улучшена. Предельные случаи: тетраэдр, 3-гональная дипирамида и 6-вершинник с т.г.с. $mm2$.

Утверждение 3. $H_v \leq H_s$ для любого выпуклого n -вершинника, т.е. для любого n и т.г.с.

Доказательство. Для всех выпуклых 4- ... 9-вершинников утверждение проверено непосредственно. $H_v < H_s$ главным образом для n -вершинников с низкой симметрией, $H_s = H_v$ главным образом для n -вершинников с высокой симметрией, область перехода охватывает n -вершинники с порядками групп автоморфизмов от 2 до 12 (рис. 2). Рассмотрим произвольный n -вершинник. Вершины, эквивалентные по т.г.с., имеют равные валентности. Но различны ли валентности вершин, не эквивалентных по т.г.с.? $H_s = H_v$, если они различны, и $H_s > H_v$, если нет. Уменьшение разнообразия валентностей вершин приводит к уменьшению H_v по сравнению с H_s согласно общим свойствам статистической энтропии $H = -\sum p_i \log p_i$. Дадим схему доказательства.

Для любого класса выпуклых n -вершинников упорядочим последовательности чисел вершин с различными валентностями согласно алгоритму: ... p ... q ... $(H_1) \rightarrow$... $p-1$... $q+1$... (H_2) , где $1 \leq p \leq q$, и покажем, что всегда $H_1 > H_2$. По сути, нужно сравнить по два слагаемых в разложениях H_1 и H_2 и доказать:

$$-(p/n) \ln (p/n) - (q/n) \ln (q/n) > -[(p-1)/n] \ln [(p-1)/n] - [(q+1)/n] \ln [(q+1)/n] .$$

Если $p \rightarrow 1$, то $[(p-1)/n] \ln [(p-1)/n] \rightarrow 0$ и для $p = 1$ очевидно $(q+1) (1+1/q)^q > 1$. Для $2 \leq p \leq q$ следует доказать $p^p / (p-1)^{p-1} < (q+1)^{q+1} / q^q = f(q)$. Рассмотрим $f(q)$ как непрерывную функцию и най-

Рис. 2. Энтропии H_s (вверху) и H_v (внизу) для выпуклых 4- ... 6- (А, всего 10), 7- (В, 34), 8- (С, 257) и 9-вершинников (D, 2606) в зависимости от порядков групп автоморфизмов (a.g.o.).

дём логарифмическую производную: $df/dq = \ln(1+1/q) \times (q+1)^{q+1} / q^q > 0$. То есть, $f(q)$ растёт с аргументом $q = p, p+1, p+2, etc$. Покажем, что неравенство верно даже для минимального аргумента $q = p$, то есть $p^p / (p-1)^{p-1} < (p+1)^{p+1} / p^p$, в другой форме $1 < (p+1)^{p+1} (p-1)^{p-1} / p^{2p} = f(p)$. Рассмотрим $f(p)$ как непрерывную функцию и найдём логарифмическую производную: $df/dp = \ln(1-1/p^2) \times (p+1)^{p+1} (p-1)^{p-1} / p^{2p} < 0$. То есть, $f(p)$ уменьшается с ростом аргумента $p = 2, 3, 4, etc$. Действительно, $f(2) = 1,6875$, $f(3) = 1,404...$, $f(4) = 1,287...$, $f(5) = 1,223...$, $f(6) = 1,182...$. Но если $p \rightarrow \infty$, то

$$\lim f(p) = \lim (p+1)^{p+1} (p-1)^{p-1} / p^{2p} = \lim (1+1/p)^p (1-1/p)^p [1+2/(p-1)] = e \times e^{-1} \times 1 = 1.$$

Итак, $f(p) \rightarrow 1$ сверху, т.е. $f(p) > 1$ для любого p . Таким образом, $H_1 > H_2$ для любого $1 \leq p \leq q$ и n , что и требовалось доказать.

Выводы

Так как всякая система характеризуется разнообразием элементов и их отношений, то при описании её сложности необходимо характеризовать оба аспекта.

На примере 4- ... 9-атомных выпуклых кластеров показано, что две фундаментальные энтропии связаны между собой. Это логично, так как разнообразие отношений потенциально ограничено разнообразием элементов.

Связь симметрии и (топологической, структурной, конфигурационной) энтропии атомных систем имеет место лишь в форме весьма грубого тренда: чем выше симметрия, тем ниже энтропия.

Работа выполнена в рамках темы НИР ГИ КНЦ РАН № 0231-2015-0001.

Литература

1. Войтеховский Ю.Л., Степенчиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. Кн. 4. Выпуклые полиэдры. Т. 1. 4- ... 12-эдры. Апатиты: КНЦ РАН, 2008. 833 с. (Доступно на сайте ГИ ФИЦ КНЦ РАН).
2. Шеннон К. Работы по теории информации и кибернетике. М.: Иностр. лит., 1963. 832 с.
3. Юшкевич А.А. К истории понятий энтропии и информации: об одном предвосхищении идей К. Шеннона // Историко-математические исследования. Вып. 19. М.: Наука, 1974. С. 167-176.
4. Юшкин Н.П. Теория и методы минералогии: избранные проблемы. Л.: Наука, 1977. 291 с.
5. Юшкин Н.П. История минералогии и эволюция фундаментальных минералогических идей. Препр. 102. Сыктывкар: Коми фил. АН СССР, 1984. 52 с.
6. Halphen E. L'analyse intrinsèque des distributions de probabilité // Publ. Inst. Stat. Uni. Paris. 1957. V. 6. N 2. P. 77-159.
7. Shannon C.E. The mathematical theory of communication // Bell Syst. Tech. J. 1948. V. 27. P. 379-423, 623-656.
8. Shannon C.E., Weaver W. The Mathematical Theory of Communication. Urbana: Uni. Illinois Press, 1949. 117 p.