

Док. хим. наук. профессор

Бекман Игорь Николаевич

ИДЕИ ПОРЯДКА И БЕСПОРЯДКА В ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Материалы к семинару "Физическая химия: *Quo vadis*"?

Аннотация

Проведён критический анализ современного состояния физической химии в сфере описания плохо организованных систем и переходов типа порядок $\leftrightarrow$ беспорядок. Основное внимание уделено проблеме совмещения в рамках одного методического подхода различных способов диагностики разупорядоченных структур: видов энтропии (термодинамическая, статистическая и информационная энтропии, КС-энтропия Колмогорова-Синяя, энтропия Реньи и энтропия Цаллиса и др.); элементов геометрии фракталов, скейлинга; статистических распределений Леви - Парето и дифференциальных уравнений с дробными производными. Продемонстрированы преимущества использования энтропии Кульбака-Лейблера для количественного описания непрерывного перехода от полуволнового дифференциального уравнения в частных производных (порядок) к диффузионному уравнению (беспорядок). Приведены примеры использования комплексного подхода для характеристики порядка, беспорядка и непорядка в термодинамике, диффузионной кинетике, геохимии и метеорологии. Обсуждены перспективы использования новых идей физической химии в диагностике гетерогенных материалов и геологических сред. Обращено внимание научного сообщества на необходимость подготовки и издания учебников по физической химии и информатике, включающих методы описания сложных систем и детерминированного хаоса.

*Только дурак нуждается в порядке
- гений господствует над хаосом.*

*Если беспорядок на столе
означает беспорядок в голове,
то что тогда означает пустой стол?*

*Вы думаете, все так просто?
Да, все просто. Но совсем не так.
А. Эйнштейн*

Введение

В Москве в одном из институтов Академии Наук работает семинар под названием: "Физическая химия: *Quo vadis*"?

Quo vadis, Domine? («Куда ты идёшь, Господи?», «Камо грядеши») — фраза, сказанная апостолом Петром Иисусу Христу.

Камо грядеши, Господи? — старославянский перевод фразы, сказанной апостолом Петром Иисусу Христу, когда апостол во время гонений императора Нерона на христиан покидал Рим. Ранее апостол Пётр сказал эту фразу Иисусу Христу на Тайней вечере. В Риме существует церковь Домине Кво-Вадис, расположенная на месте, где Пётр встретил Христа, к которому обратился с вопросом: «Куда Ты идёшь, Господи?» (*Quo vadis, Domine?*). Услышав ответ: «За то, что ты оставил Мой народ (почти все христиане в Риме были убиты по приказу императора после великого пожара), Я иду в Рим на второе распятие» (*Quoniam relinqui populum Meum, Romam vado iterum crucifigi*), Апостол попросил разрешения у Господа идти с Ним (*Domine, tecum veniam*). После прибытия в Рим Пётр был распят вниз головой, приняв мученическую смерть. В переносном смысле фраза Камо грядеши? является предложением (в форме вопроса), задуматься, правильно ли человек живёт, туда ли идёт в своей жизни, верны ли его жизненные цели, ценности и т.п. Используется также в прямом смысле, как шутливо-торжественная форма вопроса о конечной цели чьего-либо движения.

Если бы мне лет десять назад задали вопрос куда идёт физическая химия, я бы пожал плечами, поскольку ответ очевиден: в тупик! Точнее, она застряла в тупике, где тихо сидит. По учебникам физической химии, по которым мы учились в 60-тых годах прошлого века, учатся и современные студенты. Однако, после издания моего учебника "Математика диффузии" и написания мной же учебника "Информация, информатика и информационные технологии", оказалось, что физическая химия преодолела рецессию и начала развиваться, т.е. куда-то двигаться. Осталось только выяснить: куда?

Одно из перспективных направлений современной эволюции науки базируется на разработке идей порядка, беспорядка и неупорядоченности, хаоса и детерминированного (динамического) хаоса. В сфере физической химии это касается термодинамики, диффузионной кинетики и квантовой химии, а так же химии твёрдого тела и материаловедения. Понятие частично упорядоченных систем широко используется в таких науках, как информатика, физическая статистика, химия твёрдого тела, материаловедение, миграция в природных и техногенных средах, транспортные процессы в живых организмах, космофизика, синергетика, социология и разнообразные сложные системы.

Описание превращений порядок $\leftrightarrow$ беспорядок ведут с использованием таких понятий, как энтропия (термодинамическая энтропия Клаузиуса-Больцмана-Планка-Гиббса, информационная энтропия Шеннона, метрическая энтропия Колмогорова-Синяя, эпсилон-энтропия Колмогорова, квантовая энтропия фон Неймана, энтропия Цаллиса, энтропия Реньи и другие), геометрия фракталов, распределения Леви-Парето, статистика аномальной диффузии, а также дифференциальные уравнения с дробными частными производными, зависящими от величины показателей фрактала. Важным достижением явилось использование энтропии (расстояния) Кульбака-Лейблера для количественного описания (в рамках уравнений в с пространственно дробными производными) непрерывного перехода от полуволевого уравнения в частных производных (полный порядок) к диффузионному уравнению (полный неупорядоченность).

В последнее время был достигнут некоторый прогресс в описании неупорядоченных систем и структур. В физической химии возникла некая эйфория, появились даже публикации под бодрым названием: "Революция в термодинамике".

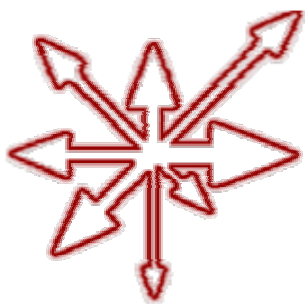
Насколько серьёзны эти прорывы? Это – мелкие достижения, в локальных областях, или базовые принципы, которые требуют серьёзной модернизации учебников по физической химии, информатике и математической статистике? Объединятся ли эти прорывы в единый фронт? Возможно ли создание общего критерия частично упорядоченного хаоса, или мы так и будем пользоваться десятком критериев, каждый из которых справедлив только в какой-то своей области?

Следует обратить внимание на тот факт, что физическая химия развивается не только, как фундаментальная наука, прогресс в ней стимулируется требованиями эксперимента. Практика нуждается в описании структурных переходов (фазовых, изофазовых и др.) в наноматериалах, в аморфных и стеклообразных телах (включая неорганические стёкла, полимеры, металлические стёкла, спиновые стёкла, керамика). Если раньше усилия были сосредоточены на описании переходов порядок-беспорядок (например, превращение кристалла с объёмцентрированной решёткой в кристалл с гранецентрированной решёткой, или превращения кристалл-аморфное тело и обратно (аморфизация твёрдого тела, кристаллизация стекла и т.п.), то теперь в исследования вовлечены переходы типа аморфное состояние 1 → аморфное состояние 2 → аморфное состояние 3. Трудности исследования таких состояний заключаются в том, что традиционные методы исследования твёрдых тел, такие, как рентгеноструктурный анализ и электронная микроскопия оказываются бесполезными. Исследования ведутся методами дефектоскопии, например, методом диффузионно-структурного анализа.

Замечание. Описание сильно неупорядоченных систем важно, естественно, не только в физической химии. Например, любая революция в России, не есть переход одного типа порядка в другой, а смена одного вида бардака на другой.

В данном обзоре будут рассмотренные классические и современные методы описания порядка и беспорядка применительно к термодинамике и диффузионной кинетике. Способы описания детерминированного хаоса и сложных систем, т.е. синергетика, будут рассмотрены в отдельной работе.

1. Порядок, беспорядок и хаос



Хаос рождает жизнь, а порядок рождает привычку.

Генри Брукс-Адамс

Хаос и порядок так тесно связаны между собой, что их невозможно разделить.

Дипак Чопра. Путь волшебника

В мире есть порядок и упорядоченные в той или иной степени системы и структуры, есть беспорядок, есть хаос, т.е. беспорядок в абсолют.

Структура — определённая взаимосвязь, взаиморасположение составных частей, строение, устройство чего-либо. Структура — совокупность связей между частями объекта. Это тип организации элементов и совокупность отношений между элементами системы. Система может быть либо высокоорганизованной (обладать развитой и сложной структурой), либо менее организованной (простая структура), либо хаотической (её элементы распределены случайно и, в среднем, однородно).

Система - множество элементов, находящихся в отношениях и связях друг с другом, которое образует определённую целостность, единство. Потребность в использовании термина «система» возникает в тех случаях, когда нужно подчеркнуть, что что-то является большим, сложным, не полностью сразу понятным, при этом целым, единым. В отличие от понятий «множество», «совокупность» понятие системы подчёркивает упорядоченность, целостность, наличие закономерностей построения, функционирования и развития.

Сложная система — система, состоящая из множества взаимодействующих составляющих (подсистем), вследствие чего сложная система приобретает новые свойства, которые отсутствуют на подсистемном уровне и не могут быть сведены к свойствам подсистемного уровня.

Порядок и хаос — это и противоположные, и взаимодополняющие понятия. Здесь имеет место единство противоположностей, равновесие или неравновесие между которыми определяет направление и темп развития или деградации структур в рассматриваемой системе.

Важно понимать, что есть детерминированный хаос, т.е. бардак, локально упорядоченный во времени и/или в пространстве, со случайными процессами, которые частично предопределены и даже закономерны. Но не слишком!

Рассмотрим особенности порядка-беспорядка (и процессов их перехода друг в друга) в конкретных науках, социальных и политических процессах.

Начнём с порядка. Казалось бы с этим просто:

Порядок – гармоничное, ожидаемое, предсказуемое состояние или расположение чего-либо.

Упорядоченность – характеристика структуры, обозначающая степень взаимной согласованности её элементов.

Для физиков-химиков это, например, упорядоченное в пространстве расположение атомов или молекул, или развитие по спирали. В кристаллах порядок может быть ближним и дальним.

Но в обществе всё сложнее:

Анархия – мать порядка, хаос - порядка отец.

"Свобода не дочь, а мать порядка!" – сказал как-то П. Ж. Прудон – теоретик революции. И был прав, ибо, как вы создадите из одного порядка другой (хотелось бы – более совершенный) порядок, не сотворив предварительно сильный беспорядок? Ведь свободы в беспорядке гораздо больше, чем в порядке: помимо законных, установившихся путей появляются новые, неведомые дороги, ведущие к непредсказуемым последствиям.

Анархия - отсутствие в обществе централизованной насильственной власти. Это самоуправление во всех сферах жизни общества, при котором достигается максимально возможная степень свободы для каждого народа, территории, коллектива, для каждой отдельной личности.

Анархия – это невозможность расширения прав одной личности за счёт другой. В отличие от демократии, принципом которой, является подчинение меньшинства большинству, выявляемое путем голосования, анархия предоставляет любому меньшинству жить так, как вздумается, если оно при этом не ущемляет свободу других. Поэтому лозунг "Анархия – мать порядка" означает, что анархия должна стать матерью будущего общественного порядка. Порядок будет основываться не на принудительном подчинении всех и каждого единой насильственной власти, а на добровольных взаимовыгодных соглашениях между отдельными лицами и группами на принципе добровольной кооперации всех членов общества, при которой возникающие конфликты решаются третейским судом.

Беспорядок (кавардак, кутерьма, хаос, бардак) – отсутствие порядка.

Помимо беспорядка возможен ещё непорядок

Непорядок – нарушение должного порядка. (Жене кажется, что в моей комнате книги валяются в полном беспорядке. Это не так, поскольку я точно знаю где что находится. После того, как она аккуратно расставит книги наступает с её точки зрения полный порядок, но с моей – полный непорядок, т.к. теперь я ничего найти не могу!

Непорядок вовсе не означает беспорядок. В непорядке главное – отсутствие должного порядка. Пример: В больницах принято мыть пол каждый день. Если санитарка этого не сделала, то не смотря на то, что пол в полном порядке, это непорядок. В физическую химию термин непорядок ещё предстоит внедрить.

У порядка мало синонимов (возможно потому, что он редок) а у беспорядка – много: беспорядок, безалаберщина, беспутица, бестолковщина, бестолочь, неустройство, неурядица, нескладица, несогласие, ад, содом, разгром, столпотворение (вавилонское), светопреставление, кавардак, каша, путаница, разноголосица, разногласие, расстройство, замешательство, ералаш, передрыга, пертурбация, кутерьма, катавасия, сумятица, сутолока, базар, шабаш, кагал, хаос.

Вот хаосом и займёмся.

Хаос – категория космогонии, первичное состояние Вселенной, бесформенная совокупность материи и пространства. В обыденном смысле хаос понимают как беспорядок, неразбериху, смешение.

Понятие хаоса возникло от названия в древнегреческой мифологии изначального состояния мира, некой «разверзшейся бездны» (а не беспорядочного состояния), из которой возникли первые божества. Лишь в раннехристианские времена этому слову стали приписывать значение беспорядка.

Хаос (в математике) – аperiодическое детерминированное поведение динамической системы, очень чувствительное к начальным условиям. Бесконечно малое возмущение граничных условий для

хаотической динамической системы приводит к конечному изменению траектории в фазовом пространстве.

Хаос (в биржевой торговле) – подразумевают поступающую новую информацию, которая влияет на действия торговцев.

Всё это – очень умно и излишне сложно. Пока нам хватит идеи, что **хаос – предельный случай беспорядка: всё в нём правит случай.**



Рис. 1. От хаоса к порядку (и обратно).

Замечание. В физиологии встречается как «хороший» хаос, так и «плохой». Автору этих заметок нравится любой.

В природе существует как переход порядок→хаос, так и его противоположность хаос→порядок. В изолированных системах (но не всегда) идет процесс перевода порядка в хаос. В открытых системах, через которые проходят созидательные потоки энергии, могут идти процессы самоорганизации и на фоне хаоса рождается порядок. Существует и альтернативное мнение утверждающее, что порядок рождается только из предшествующего порядка.

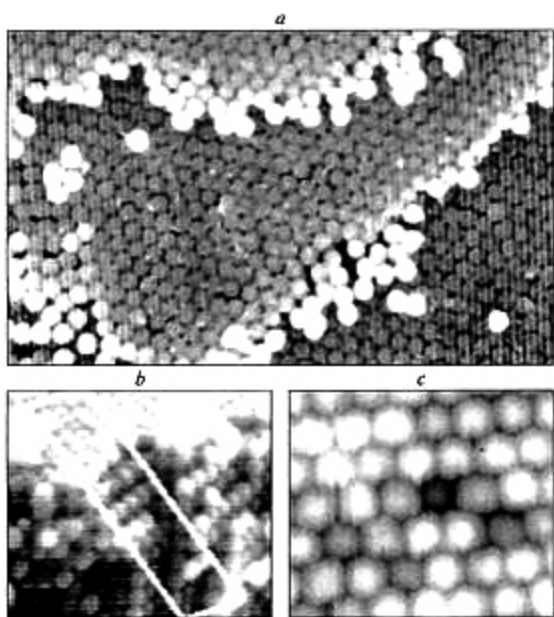
Итак, в реальном мире есть две крайности: порядок и хаос. Порядок: чёткая, подчиняющаяся определенному порядку смена событий в окружающем нас пространстве и во времени – движение планет, вращение Земли, появление кометы Галлея на горизонте, размеренный стук маятника, поезда, идущие по расписанию. Это с одной стороны. А с другой: хаотическое метание шарика в рулетке, броуновское движение частицы под случайными ударами «соседей», беспорядочные вихри турбулентности, образующиеся при течении жидкости с достаточно большой скоростью, поезда, идущие, когда хотят и куда хотят.

А что между крайностями? А между крайностями – детерминированный хаос, т.е. хаос всё же как-то упорядоченный. Хотя бы локально и случайно.

Примерами подобных систем являются атмосфера, турбулентные потоки, некоторые виды аритмий сердца, биологические популяции, общество, как система коммуникаций и его подсистемы: экономические, политические и другие социальные системы, частично кристаллические полимеры и

др. Важно, что поведение такой системы кажется случайным, хотя оно определяется детерминированными законами.

Рис. 2. Примеры частично упорядоченных структур.



Детерминированный хаос – абстрактное математическое понятие, обозначающее детерминированный процесс в детерминированной нелинейной системе, обусловленный свойством данной системы проявлять неустойчивость, чувствительную зависимость динамики системы от малых возмущений. Идеи детерминированного хаоса используются для характеристики сложных систем (в синергетике).

Принцип детерминизма гласит: если мы знаем текущее состояние какой-либо системы в природе, мы можем применить наше знание законов природы для предсказания будущего поведения этой системы. Пример: классическая ньютоновская «механическая»

Вселенная, в которой положение планет походит на движение стрелок многострелочных часов. Здесь будущее предсказывается однозначно. Однако, в природе есть системы, полностью детерминистические в ньютоновском смысле, но их будущее принципиально нельзя рассчитать. Это явление известно как детерминистический хаос, или теория хаоса. Пример детерминистического хаоса – вода горных потоков. Если бросить в эту речку два листика, один за другим, то ниже по течению они, вероятнее всего, окажутся далеко друг от друга. В системе, подобной этой, небольшое

различие в начальных условиях приводит к большому расхождению на выходе. Можем мы предсказать результат бильярдной игры? Нет! Даже задача с бильярдным шаром, отскакивающим от бортов на совершенно ровном столе, растворяется в неопределенности вследствие неточностей в измерении угла, под которым шар приближается к борту в самом начале.

Хотя универсального определения математического хаоса не существует, всё же считается, что любой вид хаоса обладает свойством непредсказуемости: развитие процесса сильно зависит от начальных условий. Хаос не склонен к случайному поведению. Математический хаос — характерная черта именно детерминированных динамических систем. По этому наблюдаемые в состоянии хаоса флуктуации только кажутся случайными — их значения полностью предопределены входными параметрами. К сожалению, на практике начальные условия точно не известны. Ошибки, пусть и ничтожные, всегда имеют место при измерении входных параметров. То, что кажется на случайным результатом на выходе динамической системы, обусловлено большими ошибками, которые могут появиться, когда система ведет себя хаотично. Так, Лоренц показал, что даже небольшие ошибки в параметрах погодных условий приводят к непредсказуемым предсказаниям погоды в будущем.

Важным частным случаем детерминированного (частично упорядоченного) хаоса является динамический хаос, возникающий в сложных структурах. Динамический хаос состоит из трёх частей: 1) существенная зависимость от начальных условий; 2) условие перемешивания (транзитивность); 3) регулярность (плотность периодических точек). Этот тип хаоса мы рассмотрим в отдельном эссе.

Степень неупорядоченности конкретной системы можно определить различными методами. Коротко остановимся на некоторых из них.

2. Виды энтропий

Для количественного измерения хаотичности (неупорядоченности) некоторой системы в физике и математике (теории информации, математической статистике) часто используется понятие энтропии, которая одновременно характеризует информационную ёмкость системы.

Для понимания роли энтропии, напомним четыре начала термодинамики:

1. Первое начало термодинамики (Ю.Р. Майер, Дж. Джоуль, Г. Гельмгольц – 1842) представляет закон сохранения и превращения энергии в применении к термодинамическим системам. Утверждает, что количество теплоты, полученное системой, идёт на изменение её внутренней энергии и совершение работы против внешних сил. Точнее: изменение внутренней энергии системы при переходе её из одного состояния в другое равно сумме работы внешних сил и количества теплоты, переданного системе и не зависит от способа, которым осуществляется этот переход
2. Второе начало термодинамики (С. Карно, У. Томсон, Р. Клаузиус, 1824) устанавливает наличие в природе фундаментальной асимметрии, т.е. однонаправленности всех происходящих в ней самопроизвольных процессов. Накладывает ограничения на направление термодинамических процессов, запрещая самопроизвольную передачу тепла от менее нагретых тел к более нагретым (невозможен круговой процесс, единственным результатом которого было бы производство работы за счет охлаждения теплового резервуара). Вводит такую важную характеристику системы как энтропия (в виде закона неубывания энтропии).
3. Третье начало термодинамики (В. Нернст, 1906) накладывает ограничения на процессы в макроскопических системах в окрестности абсолютного нуля температур. Утверждает недостижимость абсолютного нуля температур за конечное число шагов. Приращение энтропии (как на меру беспорядка в системе) при абсолютном нуле температуры стремится к конечному пределу, не зависящему от того, в каком равновесном состоянии находится система.
0. Нулевое начало термодинамики (1931) постулирует сам факт возможности установления термодинамического равновесия между разными телами при определённых условиях. Утверждает, что вне зависимости от начального состояния изолированной системы в конце концов в ней установится термодинамическое равновесие, а также что все части системы при достижении термодинамического равновесия будут иметь одинаковую температуру. Вводит и определяет понятие температуры. Устанавливает принцип, согласно которому замкнутая система независимо от начального состояния в конце концов приходит к состоянию термодинамического и самостоятельно выйти из него не может.

Впервые энтропия была введена в термодинамике (энтропия Клаузиуса). Но в настоящее время их имеется великое множество, между которыми имеется некоторая связь. Вот некоторые из них:

Энтропия Клаузиуса

Энтропия Кельвина

Энтропия Гаусса

Энтропия Больцмана

Энтропия Планка

Квантовая энтропия фон Неймана

Энтропия Шеннона

Энтропия Хартли

Энтропия Хинчина

Энтропия Мака

Энтропия Колмогорова (К - энтропия)

Энтропия Крылова-Колмогорова-Синая (КС-энтропия)

Относительная энтропия Кульбаха-Лейблера

Энтропия Цсаллиса (q-энтропия)

Энтропия Реньи (α -энтропия)

Это далеко не все энтропии.

В настоящее время энтропии применяются в различных дисциплинах:

Термодинамическая энтропия — термодинамическая функция, характеризующая меру необратимой диссипации энергии в ней (*энтропия - функция состояния (Клаузиус) и мера беспорядка (Больцман)*).

Информационная энтропия мера неопределённости источника сообщений, определяемая вероятностями появления тех или иных символов при их передаче (энтропия – *мера достоверности информации, передаваемой по каналу связи (Шеннон)*).

Дифференциальная энтропия — энтропия для непрерывных распределений.

Энтропия динамической системы (хаоса): в теории динамических систем мера хаотичности в поведении траекторий системы (К-энтропия и ϵ -энтропия Колмогорова), не использует понятие вероятности, используется, например, в анализе географической карты.

Энтропия отражения — часть информации о дискретной системе, которая не воспроизводится при отражении системы через совокупность своих частей.

Энтропия в теории управления — мера неопределённости состояния или поведения системы в данных условиях.

Энтропия в рациональной термодинамике выражается через внутреннюю энергию и температуру, которые рассматривают как основные неопределяемые переменные теории.

Квантовая энтропия

Экономическая энтропия (экологическая экономика)

Корреляционная энтропия

Min-энтропия

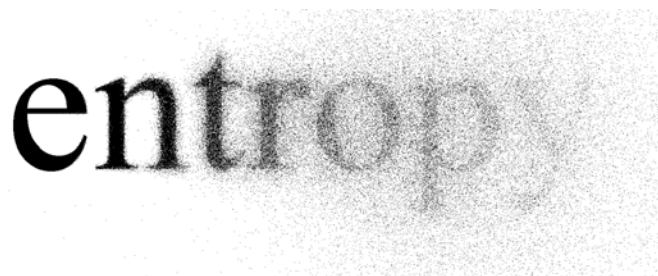
Культурная энтропия

Энтропия – децентрализованная пиринговая сеть (устойчива к цензуре)

Энтропия в биологической экологии

И много где ещё.

3. Энтропия в классической термодинамике



Понятие энтропии определяется как взаимосвязь системы, в которой прирост энтропии зависит от отношения температуры системы к значению абсолютного нуля. Оно показывает значение отработанной (потерянной) энергии.

В термодинамике энтропия выражает количество тепловой энергии, пригодной для совершения работы: чем энергии меньше, тем выше энтропия. Извлечь энергию из системы

можно только путем перевода ее в менее упорядоченное состояние.

Энтропия качественно отличается от других термодинамических величин: таких как давление, объём или внутренняя энергия, потому что является свойством не системы, а того, как мы эту систему рассматриваем.

ЭНТРОПИЯ (ἐντροπία – поворот, превращение) – функция состояния термодинамической системы, характеризующая направление протекания самопроизвольных процессов в этой системе и являющаяся мерой их необратимости.

ЭНТРОПИЯ - часть внутренней энергии замкнутой системы или энергетической совокупности Вселенной, которая не может быть использована, в частности не может перейти или быть преобразована в механическую работу.

ЭНТРОПИЯ - понятие, впервые введённое в термодинамике для определения меры необратимого рассеяния энергии.

Единица измерения энтропии в системе СИ [Дж/моль·град], такая же, как у теплоёмкости, газовой постоянной, R и постоянной Больцмана, k_B . Под энтропийной единицей (э. е.) обычно подразумевают [кал/моль-кельвин]. При этом $1 \text{ кал кг}^{-1}\text{°C} = 4,1868 \cdot 10^3 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$. Вне термодинамики используют безразмерную энтропию. Так как значение энтропии зависит от множества сопутствующих условий, было введено понятие «стандартная энтропия». Обычно значения стандартной энтропии рассматривают при условиях давления в одну атмосферу и температуры в 25 градусов Цельсия. При повышении температуры данный показатель растёт. Вне термодинамики используют безразмерную энтропию: термодинамическую энтропию делят на газовую постоянную, или на постоянную Больцмана, или теплоёмкость.

Понятие энтропии введено в 1865 Р. Клаузиусом для характеристики процессов превращения энергии. Ему было известно, что тепло никогда полностью не переходит в механическую работу, преобразуясь в другие виды энергии. Энтропия определяет меру необратимого рассеивания энергии, а также меру отклонения реального процесса от идеального. Определённая как сумма приведённых теплот, она является функцией состояния и остаётся постоянной при замкнутых обратимых процессах, тогда как в необратимых — её изменение всегда положительно. Поэтому все необратимые процессы, происходящие в природе, сопровождаются уменьшением механической энергии, что в конечном итоге приведёт к «тепловой смерти». Однако Вселенная – не замкнутая система, так что тепловая смерть ей не грозит.

Замечание 1. В некоторых учебниках по термодинамике утверждается, что выпускники физических и химических университетов не понимают, что такое энтропия, в других – что энтропию мало кто понимают, и, наконец, в третьих – энтропию вообще никто не понимает. Последнее утверждение является истинным. Что такое энтропия никто не знает и не понимает, т.к. понимать тут нечего: в понятии энтропия никакого физического смысла нет, это нечто типа теплорода, флогистона, эфира, т.е. что-то внешне умное, полезное для спекуляций, но за которым ничего реального не стоит и от чего при случае можно безболезненно отказаться. Энтропия вводится, чтобы зафиксировать печальный факт, что при превращении тепла в работу, часть энергии куда-то делась и полезную работу не совершила. Куда она пропала никто не знает. Никакой физики-химии здесь нет. *Это история мужика, который получил 1000 рубл зарплаты, на 200 купил бутылку водки, а пришёл домой - денег нет. Где он гулял, с кем общался, с кем пил - не помнит. Факт только, что деньги были, а теперь нет. Энтропия приключилась! Так жене и надо объяснить. Ибо против науки не попрёшь...* Измерив количество тепла, объём сосуда, давления газа в нём, мы рассчитаем некую величину, которую назовём энтропией. Но, если объём и прочие параметры мы можем ощутить и измерить, то энтропия не дана нам в ощущениях. а есть только манипуляция с математическими формулами, модное увлечение современных физиков. Это как чёрные дыры, нейтронные звёзды, тёмная материя, разбегающаяся Вселенная, потепление климата, то – чего нет в материальном мире, но что так приятно обсуждать и моделировать. Можно утешиться тем, что мы до сих пор не знаем, что такое время, а пользуемся им. Слабое утешение. Энтропия – разница между идеалом и реальностью, это величина усушки и утряски. Больше ничего ценного о ней сказать нельзя, хотя формул наворотить, конечно, можно много.

Замечание 2. Физический смысл энтропии неизвестен. Согласно Британской энциклопедии: "Полезность понятия энтропии ограничена тем, что оно не соответствует непосредственно какому-либо поддающемуся измерению физическому свойству, а является просто математической функцией, с помощью которой определяется абсолютная температура. Клаузиусу предлагали заменить энтропию на теплород, или новый теплород, но он использовал звучный термин и не прогадал, особенно, когда применил его к глобальным космологическим проблемам. Но смысла в "энтропии" ничуть не больше, чем в "теплороде".

Внятного определения термодинамической энтропии не существует. Единственно, что можно сказать: S – функция состояния термодинамической системы.

Замечание. Определение: энтропия – функция состояния термодинамической системы, напоминает утверждение, что доцент Иванов – млекопитающий. Это действительно так и есть, и это отделяет его, от класса пресмыкающихся. Беда только в том, что помимо Иванова есть и другие виды млекопитающих. Так и здесь: да, энтропия – функция состояния термодинамической системы, вот только функций состояния несколько сотен, и редко какая из них энтропия.

Поскольку не родился ещё человек, способный дать строгое определение термодинамической энтропии, то в термодинамику вводится не сама энтропия, а её изменение.

Замечание. Это напоминает ситуацию: поскольку я не знаю ничего о расстоянии между двумя пунктами, то буду рассуждать о скорости движения, т.е. о производной по времени. Ну, а потом, возьму интеграл для интереса. Хотя, что есть расстояние, как не знал, так и не знаю.

Клаузиус определил изменение энтропии термодинамической системы при обратимом процессе как отношение изменения общего количества тепла, полученного системой, находящейся в равновесии, ΔQ к величине абсолютной температуры, T :

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T} \quad (1)$$

Данное равенство относится к изменению энтропии, не определяя полностью саму энтропию.

Формула (1) применима только для изотермического процесса (происходящего при постоянной температуре). В случае произвольного квазистатического процесса изменение энтропии:

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \quad (2)$$

где dS – приращение (дифференциал) энтропии, а δQ – бесконечно малое приращение количества теплоты.

Понятие энтропии было введено в термодинамике для анализа процессов преобразования энергии как термодинамическая функция состояния системы, S , малое изменение которой, dS , в равновесном процессе равно отношению количеству теплоты, dQ , сообщённого системе или отведённого от неё, к термодинамической температуре, T , системы. Традиционно в термодинамике она определяется как интеграл приращения тепла, соотнесенный к определенному уровню температуры, T :

$$S = \left(\frac{1}{k} \right) \int \frac{dQ}{T} \quad (3)$$

где k – некоторая константа.

Энтропией называется функция S состояния системы, дифференциал которой в элементарном обратимом процессе равен отношению бесконечно малого количества тепла, сообщённого системе к абсолютной температуре последней: $dS = \delta Q / T$. Энтропия как функция системы не объясняет, какое её состояние она описывает. Это «что-то», которое при нагревании системы $dS > 0$, а при охлаждении $dS < 0$. Основное соотношение термодинамики: $dS \geq \delta Q / T$, где знак равенства относится к обратимым процессам, а знак неравенства – к необратимым. Это и есть формулировка второго закона термодинамики: «*в замкнутой системе энтропия не может убывать, а лишь возрастает, пока не достигнет максимума*».

При изотермических процессах изменение энтропии равно отношению сообщенной системе теплоты к абсолютной температуре. Например, изменение энтропии при испарении жидкости равно отношению теплоты испарения к температуре испарения при условии равновесия жидкости с её насыщенным паром.

Замечание. Термодинамическое определение применимо только к квазистатическим процессам (состоящим из непрерывно следующих друг за другом состояний равновесия).

Энтропия определена вплоть до произвольной аддитивной постоянной. Начало отсчёта энтропии не определено (произвольно).

Абсолютное значение энтропии позволяет установить Третье начало термодинамики (теорема Нернста): при стремлении абсолютной температуры к нулю разность ΔS для любого вещества стремится к нулю независимо от внешних параметров. Поэтому энтропию всех веществ при

абсолютном нуле температуры можно принять равной нулю (Планк, 1911). За начальную точку отсчёта энтропии принимают $S_0=0$ при $T=0$.

Поскольку энтропия является функцией состояния, в левой части равенства стоит её полный дифференциал. Напротив, количество теплоты является функцией процесса, в котором эта теплота была передана, поэтому δQ считать полным дифференциалом нельзя.

Поскольку величина dS является полным дифференциалом, то её интегрирование по любому произвольно выбранному пути дает разность между значениями энтропии в начальном (A) и конечном (B) состояниях. Интегральное определение энтропии (для обратимых процессов):

$$\int_A^B dS = S_B - S_A = \int_A^B \frac{\delta Q}{T} \quad (4)$$

Теплота не является функцией состояния, поэтому интеграл от δQ зависит от выбранного пути перехода между состояниями A и B .

При необратимых процессах в адиабатически изолированной системе энтропия может только возрастать.

$$S_B - S_A > \int_A^B \frac{\delta Q}{T} \quad (5)$$

При использовании понятия энтропии следует учитывать, что

- невозможен процесс перехода теплоты от тела с более низкой температурой к телу с более высокой (Клаузиус);
- невозможен процесс, результатом которого было бы совершение работы за счет теплоты, взятой от одного какого-то тела. Нельзя создать вечный двигатель (не позволяет энтропия замкнутой системы, (Томсон).
- энтропия не может уменьшаться в замкнутых системах, т.е. в тех, что не получают внешней энергетической подпитки (Больцман).

Энтропия обладает следующими свойствами:

1. $S(t)$ - экстенсивная функция состояния (зависит от массы)

Функция состояния — в термодинамике некая функция, зависящая от нескольких независимых параметров, которые однозначно определяют состояние термодинамической системы. Значение термодинамической функции состояния зависит только от состояния термодинамической системы и не зависит от того, как система пришла в это состояние. Частным случаем функций состояний являются термодинамические потенциалы.

Экстенсивные параметры – параметры, зависящие от количества вещества системы и суммируются при объединении систем (объём, масса, энергия, площадь и т.д.).

Интенсивные параметры – параметры, не зависящие от количества вещества и выравниваются при объединении систем (температура, давление, концентрация, плотность, поверхностное натяжение).

2. Для замкнутой системы $S(t)$ является монотонно возрастающей функцией времени, достигающей максимума в тепловом равновесии.

3. Для обратимых (квазистационарных) процессов выполняется основное термодинамическое соотношение (фундаментальное уравнение Гиббса):

$$dU = TdS - PdV + \sum_j \mu_j dN_j \quad (6)$$

где U – внутренняя энергия, P – давление, V – объём, μ – химический потенциал, N – число частиц.

Энтропия определяет характер процессов в адиабатической системе: возможны только такие процессы, при которых энтропия либо остаётся неизменной (обратимые процессы), либо возрастает (необратимые процессы). При этом не обязательно, чтобы возрастала энтропия каждого из тел, участвующего в процессе. Увеличивается общая сумма энтропии тел, в которых процесс вызвал изменения.

Поскольку энтропия показывает, в какую сторону будет двигаться процесс в физическом отношении, то энтропию иногда воспринимают как стрелу времени.

Закон неубывания энтропии: В изолированной системе энтропия не уменьшается. Если в некоторый момент времени замкнутая система находится в неравновесном макроскопическом состоянии, то в последующие моменты времени наиболее вероятным следствием будет монотонное возрастание её энтропии. Если в некоторый момент времени энтропия замкнутой системы отлична от

максимальной, то в последующие моменты энтропия не убывает – увеличивается или в предельном случае остается постоянной.

При условии постоянства энергии энтропия системы максимальна, когда все части системы имеют одинаковую температуру – вариационный принцип максимальности энтропии в состоянии равновесия. Энтропия – монотонная выпуклая функция энергии, достигающая максимума в состоянии термодинамического равновесия; состояние системы, принятое за начало шкалы отсчёта энергии, есть одновременно состояние для начальных точек отсчёта температуры и энтропии.

Сообщаемое системе количество теплоты равно сумме приращения внутренней энергии dU и совершаемой системой работы PdV , где P – давление, V – объём системы. Тогда дифференциальное определение принимает вид

$$dS = \frac{1}{T}(dU + PdV) \quad (7)$$

откуда следует, что при выборе в качестве независимых переменных внутренней энергии U и объёма V частные производные связаны с абсолютной температурой и давлением соотношениями:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_U = \frac{1}{T} \quad (8)$$

Количественное описание термодинамических процессов проводится с помощью термодинамических величин.

Внутренняя энергия – полная энергия частиц, составляющих данное вещество – складывается из кинетической и потенциальной энергий. Кинетическая энергия – энергия поступательного, колебательного и вращательного движения частиц; потенциальная энергия обусловлена силами притяжения и отталкивания, действующими между частицами. Внутренняя энергия зависит от состояния вещества.

Пусть A – работа, совершаемая системой при переходе из состояния 1 в состояние 2, при поглощении из внешней среды теплоты Q . При этом внутренняя энергия уменьшится на величину A , возрастёт на величину Q и в конечном состоянии будет равна

$$U_2 = U_1 + Q - A \quad (9)$$

где U_1 и U_2 – внутренняя энергия системы в начальном (1) и в конечном (2) состоянии

$$\Delta U = U_2 - U_1 = Q - A \quad (10)$$

Это уравнение выражает закон сохранения энергии, согласно которому изменение внутренней энергии не зависит от способа проведения процесса, а определяется только начальным и конечным состоянием системы. Однако какая часть энергии пойдёт на совершение работы, а какая превратится в теплоту – зависит от способа проведения процесса: соотношения между работой и теплотой может быть различным. Если объём системы не меняется, то $\Delta U = Q_v$, где Q_v – теплота, поглощённая системой в условиях постоянного объёма.

В случае химической реакции, протекающей без изменения объёма системы, изменение внутренней энергии равно взятому с обратным знаком тепловому эффекту этой реакции.

При постоянном давлении и при условии, что в ходе процесса совершается только работа расширения ($A = P\Delta V$) изменение энтальпии

$$\Delta H = \Delta U + P\Delta V \quad (11a)$$

или

$$\Delta U = \Delta H - P\Delta V \quad (11b)$$

В этих условиях

$$\Delta H = Q_p \quad (12)$$

где Q_p – теплота, поглощённая системой при постоянном давлении.

В случае химической реакции изменение энтальпии равно взятому с обратным знаком тепловому эффекту реакции, проведенной при постоянной температуре и постоянном давлении.

Замечание. Энтальпия, как и внутренняя энергия, характеризует энергетическое состояние вещества, но включает энергию, затрачиваемую на преодоление внешнего давления, т.е. на работу расширения. Подобно внутренней энергии, энтальпия определяется состоянием системы и не зависит от того, каким путём это состояние достигнуто. В случае газов различие между ΔU и ΔH в ходе того или иного процесса может быть значительным. В случае систем, не содержащих газов, изменения внутренней энергии и энтальпии, сопровождающие процесс, могут быть значительными.

Термодинамическому равновесию адиабатической системы соответствует состояние с максимумом энтропии. Энтропия может иметь не один, а несколько максимумов, при этом система будет иметь несколько состояний равновесия. Равновесие, которому соответствует наибольший максимум энтропии называется абсолютно устойчивым (стабильным). Из условия максимальности энтропии адиабатические системы в состоянии равновесия вытекает важное следствие: температура всех частей системы в состоянии равновесия одинакова.

Производство энтропии всегда положительно и согласно теореме Онсагера выражается квадратичной формой от градиентов термодинамических параметров (температуры, гидродинамической скорости или концентраций компонентов смеси) с коэффициентами, называемыми кинетическими.

Термодинамика Гиббса использует энтропию в качестве независимой термодинамической переменной, а температура вводится как функция внутренней энергии и энтропии.

Свободная энергия Гиббса, G , – величина, показывающая изменение энергии в ходе химической реакции и определяющая принципиальную возможность протекания химической реакции; её можно понимать как полную химическую энергию системы:

$$G=U+PV-TS \quad (13)$$

где U — внутренняя энергия, P — давление, V — объём, T — абсолютная температура, S — энтропия.

Здесь TS - потерянная энергия, т.е. энергия, которая не пошла на совершение полезной работы.

Дифференциал энергии Гиббса для системы с постоянным числом частиц, выраженный в собственных переменных — через давление p и температуру T :

$$dG=-SdT+VdP$$

Для системы с переменным числом частиц этот дифференциал записывается так:

$$dG=-SdT+VdP+\mu dN.$$

Здесь μ — химический потенциал, который можно определить как энергию, которую необходимо затратить, чтобы добавить в систему ещё одну частицу.

Связь с термодинамической устойчивостью системы

$$TdS \geq dU+PdV$$

$$\text{При } P=\text{const}, T=\text{const. } d(U+PV-TS) \leq 0, d(G) \leq 0.$$

В системе при постоянных температуре и давлении энергия Гиббса достигает минимального значения.

Знак и абсолютное значение ΔS важны для суждения о влиянии температуры на химическое равновесие. Возможны самопроизвольные экзотермические процессы ($\Delta G < 0$, $\Delta H < 0$), протекающие с уменьшением энтропии ($\Delta S < 0$). Такие процессы распространены при растворении (например, комплексообразование).

Подобно внутренней энергии и энтальпии, энтропия зависит только от состояния системы. Но, в отличие от этих двух функций, связь изменения энтропии с теплотой зависит от способа проведения процесса - от его скорости.

Энергия Гиббса, G , для изотермических реакций

$$G=H-ST \quad (14)$$

Если реакция осуществляется при постоянном давлении и температуре (такой процесс называется изобарно-изотермическим), то изменение энергии Гиббса

$$\Delta G=\Delta H-T\Delta S \text{ или } \Delta H=\Delta G+T\Delta S \quad (15)$$

При обратимом и изотермическом проведении процесса ΔG равно по абсолютной величине, но обратно по знаку максимальной полезной работе, которую система производит в данном процессе

$$\Delta G=-A_{\text{макс}} \quad (16)$$

Полезной работой называется вся производимая в ходе процесса работа за вычетом работы расширения $P\Delta V$.

Энтропия величина аддитивная, т. е. энтропия термодинамической системы равна сумме энтропий всех её частей. Аддитивность энтропии позволяет распространить это понятие на термодинамические системы любой сложности. Энтропия величина полуограниченная. Она ограничена снизу, т. е. для каждой термодинамической системы существует состояние с наименьшей энтропией. (Температура величина полуограниченная: нуль и бесконечность допустимы в качестве пределов).

При изучении энтропии используются некоторые постулаты.

1) **Постулат Планка:** Для любой термодинамической системы состояния с наименьшей энтропией и наименьшей температурой совпадают. С приближением температуры к абсолютному нулю энтропия перестаёт зависеть от температуры и приближается к определённому постоянному значению, которое можно положить равным нулю и принять за начало отсчёта энтропии, устранив тем самым произвол в выборе постоянной интегрирования для энтропии.

2) **Постулат Тиссы:** внутренняя энергия ограничена и эта граница соответствует абсолютному нулю температуры. Состояние системы при абсолютном нуле температуры, когда все термодинамические величины, характеризующие равновесное состояние, перестают зависеть от температуры, наилучшим образом подходит в качестве стандартного состояния начала отсчёта основных термодинамических величин.

3) **Постулат Гиббса:** энтропия изолированной системы в состоянии термодинамического равновесия имеет максимальное значение, т. е. для равновесия изолированной системы необходимо и достаточно, чтобы при всех возможных (не нарушающих постоянства внутренней энергии, обобщённых координат и масс компонентов) изменениях её состояния вариация энтропии ΔS системы не была положительной:

В любом равновесном изотермическом процессе с нулевой работой энергия расходуется на увеличение энтропии системы и выделяется при уменьшении энтропии.

В условиях постоянства температуры и давления реакции протекают самопроизвольно в сторону уменьшения энергии Гиббса, т.е. самопроизвольно могут протекать только те реакции, за счёт энергии которых можно совершать полезную работу.

Химический потенциал для системы с одним типом частиц есть отношение энергии Гиббса к числу молей вещества n в системе:

$$\mu = \frac{G}{n} \quad (17)$$

Некоторое количество теплоты расходуется на увеличение энтропии $T\Delta S$, эта часть энергии потеряна для совершения полезной работы (рассеивается в окружающую среду в виде тепла) - связанная энергия. Другая часть теплоты ΔG может быть использована для совершения работы, поэтому энергию Гиббса называют свободной энергией.

Характер изменения энергии Гиббса позволяет судить о принципиальной возможности осуществления процесса. При $\Delta G < 0$ процесс может протекать — самопроизвольный процесс, при $\Delta G > 0$ процесс протекать не может — несамопроизвольный процесс (иными словами, если энергия Гиббса в исходном состоянии системы больше, чем в конечном, то процесс принципиально может протекать, если наоборот — то не может). Если же $\Delta G = 0$, то система находится в состоянии химического равновесия.

Замечание. Здесь речь идёт исключительно о принципиальной возможности протекания реакции. В реальных же условиях реакция может не начинаться даже при соблюдении неравенства $\Delta G < 0$ (по кинетическим причинам).

Абсолютную энтропию химического соединения определяют экспериментально, главным образом калориметрическим методом, исходя из соотношения:

$$S_T^0 = \int_{T=0K}^T \frac{C_p}{T} dT \quad (18)$$

где C_p - теплоёмкость при постоянном давлении.

Абсолютная энтропия вещества или процесса — изменение доступной энергии при теплопередаче при данной температуре.

Теория Гиббса имеет дело с многокомпонентными гетерогенными системами с переменными массами и составами, химическими превращениями и фазовыми переходами. Гиббс исходит из понятия энергии и принципа возрастания энтропии, а его система изложения представляет собой логическую структуру, изначально рассматривающую массу как термодинамическую переменную и основанную на следующих утверждениях: внутренняя энергия однородной термодинамической системы есть функция энтропии, объёма и масс составляющих веществ. Это — следствие фундаментального уравнения Гиббса. Внутренняя энергия термодинамической системы и её независимые переменные — величины аддитивные; в состоянии равновесия при неизменности

внутренней энергии, объёма и масс составляющих веществ энтропия системы максимальна. Это – **принцип равновесия Гиббса**.

Замечание. В подходе Клаузиуса – Каратеодори термодинамическую систему рассматривают как чёрный ящик; меняя внешние переменные, характеризующие окружающую среду, и наблюдая за поведением изучаемой системы, делают выводы о внутренних переменных системы. В теории Гиббса в центре внимания находится собственно термодинамическая система и её переменные.

Гиббс исходил из понятия энергии и принципа возрастания энтропии, причём рассматривал массу как термодинамическую переменную. Он утверждал, что внутренняя энергия однородной термодинамической системы есть функция энтропии, объёма и масс составляющих веществ.

Внутренняя энергия термодинамической системы и её независимые переменные – величины аддитивные. В состоянии равновесия при неизменности внутренней энергии, объёма и масс составляющих веществ энтропия системы максимальна. Это – **принцип равновесия Гиббса** (одна из составляющих второго начала термодинамики).

Самопроизвольное протекание изобарно-изотермического процесса определяется двумя факторами: энтальпийным, связанным с уменьшением энтальпии системы (ΔH), и энтропийным $T\Delta S$, обусловленным увеличением беспорядка в системе вследствие роста её энтропии. Разность этих термодинамических факторов является функцией состояния системы, называемой изобарно-изотермическим потенциалом или свободной энергией Гиббса (G , кДж)

Изменение свободной энергии Гиббса ΔG в ходе химической реакции связано с её константой равновесия K_p :

$$\Delta G = -RT \ln K_p \quad (19)$$

где K_p — равновесная константа по давлению (только в атмосферах),

Любая реакция может быть рассмотрена как обратимая (даже если на практике она таковой не является). При этом константа равновесия определяется как

$$K = \frac{k_1}{k_{-1}} \quad (20)$$

где k_1 — константа скорости прямой реакции, k_{-1} — константа скорости обратной реакции.

4. Энтропия в статистической физике

В статистической физике энтропия – мера вероятности осуществления какого-либо макроскопического состояния. Макросостояние системы тем более вероятно, чем большим числом микросостояний оно может осуществиться. Характеризовать состояние системы удобнее не самой величиной данного макросостояния, а величиной, пропорциональной её логарифму. Эта величина называется энтропией.

В статистической физике энтропия выражает неопределенность микроскопического состояния системы: чем больше микроскопических состояний системы соответствуют данному макроскопическому состоянию, тем выше термодинамическая вероятность и энтропии последнего. Система с маловероятной структурой, предоставленная самой себе, развивается в сторону наиболее вероятной структуры, т.е. в сторону возрастания энтропии. Это, однако, относится только к замкнутым системам.

Дифференциальная энтропия, S , связана с числом, W , равновесных микроскопических состояний, которыми можно реализовать данное макроскопическое состояние системы, уравнением (М. Планк)

$$S = k \cdot \log W, \quad (21)$$

где k – коэффициент пропорциональности (постоянная Больцмана, $k_B = 1,381 \cdot 10^{-16}$ эрг/К = $1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К), W - статистический вес данного равновесного состояния, т.е. число возможных микросостояний (способов), с помощью которых можно составить данное макроскопическое состояние.

Замечание. Формулу $S = k \cdot \log W$ часто называют формулой Больцмана. Это не так: в работах Больцмана такой формулы нет, хотя она выбита на памятнике на его могиле. Но это формула Планка! В 1877 Больцман опубликовал работу "Об отношении между вторым началом термодинамики и теорией вероятности". В ней он утверждал: энтропия системы S есть мера вероятности W реализации её

состояния; возрастание энтропии системы обусловлено её переходом из менее вероятного состояния в более вероятное; эволюция замкнутой системы осуществляется в направлении наиболее вероятного распределения энергии по отдельным подсистемам. Однако, как математически выражается связь между энтропией и вероятностью он не знал. Эту связь четверть века спустя (1900) установил Планк, он же назвал её постоянной Больцмана и рассчитал её величину ($k=1,346 \cdot 10^{-16}$ эрг/град). Планк сам написал свою формулу на установленном им памятнике Больцману на его могиле. (Больцман покончил с собой в Италии, как самоубийцу его хоронить в католической стране не стали, а переправили тело в протестантскую Вену. Когда Планк посетил венское кладбище, то обнаружил, что могила Больцмана исчезла. После долгих поисков в архиве и на месте, он примерно установил местонахождение захоронения и на свои деньги установил бюст Больцмана и написал на нём свою формулу (без указания основания логарифма)).

W экспоненциально увеличивается с ростом S .

Безразмерная энтропия

$$S_{\text{без}} = \lg W \quad (22)$$

Принцип Больцмана-Планка возрастания энтропии: процессы передачи тепла в замкнутой системе происходят от менее вероятного к более вероятному её состоянию. Без дополнительного притока энергии в систему её наиболее вероятное конечное состояние есть состояние покоя.

В отличие от термодинамики статистическая физика рассматривает особый класс процессов - флуктуации, при которых система переходит из более вероятного состояния в менее вероятное, и её энтропия уменьшается. Наличие флуктуаций показывает, что закон возрастания энтропии выполняется только в среднем для достаточно большого промежутка времени.

Энтропия является функцией состояния, т. е. не зависит от способа достижения этого состояния, а определяется параметрами этого состояния. Так как W может быть только натуральным числом (1, 2, 3, ...), то энтропия Больцмана должна быть **неотрицательной** (свойство логарифма).

В статистической термодинамике формулу энтропии Гиббса записывают а виде

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i \quad (23)$$

Эта формула используется для вычисления статистической механической энтропии термодинамической системы; суммирование ведётся по всем возможным состояниям системы (обычно по $6N$ -мерным точкам, если система состоит из N частиц); множитель k_B отражает два факта: выбор основания логарифма и выбор температурной шкалы.

Замечание. формула энтропии Шеннона математически и концептуально эквивалентна (1); формула энтропии фон Неймана — немного более общий путь вычисления той же самой величины. Формула энтропии Больцмана следует из (1) при определенных ограничительных условиях на нестатистические зависимости между состояниями системы.

Энтропия - показатель случайности или неупорядоченности строения физической системы: чем меньше элементы системы подчинены какому-либо порядку, тем выше энтропия.

Энтропия Гиббса имеет более общий характер, чем энтропия Больцмана. При пренебрежении корреляциями между частицами теория Гиббса упрощается до теории Больцмана.

В каком-то смысле, энтропию можно рассматривать как на меру беспорядка в системе (энтропия, как стремление к хаосу). Это обусловлено тем, что «упорядоченными» системами считаются системы, имеющие очень малую возможность конфигурирования, тогда как «беспорядочные» системы имеют очень много возможных состояний. Поэтому энтропия - число микросостояний на данное макросостояние. Например, в случае идеального газа наиболее вероятным состоянием, соответствующим максимуму энтропии, есть равномерное распределение молекул. При этом реализуется и максимальный «беспорядок», так как реализуются максимальные возможности конфигурирования. Всё же энтропия не столько мера беспорядка, а сколько мера вероятности протекания самопроизвольного процесса в изолированной термодинамической системе. Процесс же наиболее вероятен тогда, когда все молекулы вещества, или элементы системы занимают или займут в результате процесса **равное** (одинаковое) энергетическое состояние, при этом станет невозможен никакой дальнейший процесс (система термодинамически устойчива). Такое состояние не всегда совпадает с наибольшим беспорядком (хаосом) и напротив хаос сам по себе не является устойчивым состоянием: он несёт потенцию - либо достижения ещё большего хаоса либо увеличения энтальпии то есть порядка в системе. В неизолированных (закрытых), а тем более открытых системах понятие энтропии несколько условно. Это функция, зависящая от краевых начальных и граничных условий, без которых, эта функция – есть фикция. Энтропия – мера экстенсивности термодинамической

системы при данном интенсивном факторе которым выступает температура, произведение энтропии на **изменение** температуры и есть изменение энергии системы. Энтропия может и не меняться тогда как энергия системы изменяться будет. При изотермических процессах составляющая энергии системы, в которую входит энтропия, равна нулю.

Энтропия характеризует структуру системы с точки зрения распределения энергии в объёме внутри и вокруг системы, отражая меру связи и взаимодействия частиц системы. Она пропорциональна отношению упорядоченной (структурной, потенциальной) энергии, обеспечивающей целостность и неизменность системы, к хаотической энергии теплового движения частиц. Упорядоченная энергия – энергия направленного движения вещества, энергия сжатия от давления и потенциальная энергия вещества в гравитационном и электромагнитных полях. Под необратимыми подразумеваются процессы, сопровождающиеся возрастанием энтропии всей замкнутой системы. Процессы, которые были бы их повторениями в обратном порядке – не могут происходить, так как при этом энтропия должна была бы уменьшиться. Обратимыми же называют процессы, при которых термодинамическая энтропия замкнутой системы остается постоянной. (Энтропия отдельных частей системы при этом не обязательно будет постоянной.)

Утверждение Томсона Невозможен процесс, результатом которого было бы совершение работы за счет теплоты, взятой от одного какого-то тела. Физически невозможно сконструировать вечный двигатель. Не позволит энтропия замкнутой системы.

Утверждение Больцмана Энтропия не может уменьшаться в замкнутых системах, то есть в тех, что не получают внешней энергетической подпитки.

Применение понятия термодинамической энтропии совершенно неправомерно в двух случаях:

- когда смешивают различные понимания беспорядка, и энтропия становится мерой беспорядка вообще;
- когда понятие энтропии применяется для систем, не являющихся термодинамическими.

Например при кристаллизации переохлаждённой жидкости образование структур из «хаотичной» жидкости (увеличение порядка) идёт параллельно с увеличением энтропии (ростом беспорядка).

Замечание. Из вероятностной трактовки энтропии в статистической физике выводятся основные равновесные распределения: каноническое распределение Гиббса, которое соответствует максимальному значению информационной энтропии при заданной средней энергии, и большое каноническое распределение Гиббса – при заданных средней энергии и среднем числе частиц в системе.

Энтропия Гиббса - аддитивная безразмерная величина:

$$S_G(t) = - \sum_n W_n(t) \ln W_n(t). \quad (24)$$

Из неравенства $0 \leq W_n(t) \leq 1$ следует, что $S_G(t) \geq 0$. Только в частном случае, когда статистический оператор описывает чистое квантовое состояние, мы имеем $S_G(t) = 0$.

Вероятность состояния W определяется как отношение числа микросостояний K , благоприятных данному макросостоянию, к полному числу возможных микросостояний L : $W = K/L$.

5. Информационная энтропия (энтропия Шеннона)

Л. Больцман, давая статистико-физическое определение энтропии, в 1877 году заметил, что энтропия характеризует недостающую информацию о системе. То есть, энтропия есть мера нашего незнания о системе. Таким образом, Больцман был первым, кто разглядел информационный смысл энтропии. И только спустя 80 лет теоретико-информационная трактовка энтропии стала общепринятой. Оказалось, что энтропия - информативный параметр, количественно характеризующий состояние системы. Информационная энтропия была положена в основание новой науки - информатики.

Наука информатика состоит из четырех основных частей.

- физическая информация (виды: термодинамическая – в стиле Клаузиуса-Кельвина и статистическая – в стиле Больцмана-Гиббса-Планка-Эйнштейна, равновесная и неравновесная);

– техническая информация (передача информации по линиям связи (например, радио + азбука Морзе); её описание ведётся различными способами: комбинаторным, вероятностным и алгоритмическим; в стиле Фриша-Хартли-Шеннона-фон Неймана-Винера, Колмогорова и др.);

– компьютерная информация (перемещение и хранение информации в компьютере; языки программирования и алгоритмы, компьютерные науки во всём их разнообразии);

– смысловая информация (семантическая информация и дезинформация, СМИ; "одна баба сказала", способы передачи, переработки, хранения и защиты сообщения; базы данных и знаний).

Принято считать, что понятие «информация» – первичное и неопределяемое понятие (как, например «точка» в геометрии, «множество» в математике, время и т.п.). Определение информации дал Н. Винер «Кибернетика»: Информация – это информация, а не материя (вещество) и не энергия. Информация есть информация и ничто другое. И этого достаточно! Нельзя сказать, что это определение очень информативно.

Информация: осведомление, разъяснение, изложение; сведения (сообщения, данные) независимо от формы их представления; абстрактное понятие, имеющее множество значений, в зависимости от контекста.

По российскому ГОСТу 7.0-99: *Информация – сведения, воспринимаемые человеком и/или специальными устройствами как отражение фактов материального или духовного мира в процессе коммуникации.*

Информация – характеристика степени зависимости некоторых переменных, но зато предельно общая характеристика. Ее можно сравнить с корреляцией, но если корреляция характеризует лишь **линейную** связь переменных, то информация характеризует **любую** связь. Даже, если связь неизвестна, то это не мешает рассчитывать информацию и количественно сравнивать между собой разнотипные зависимости. Однако невозможно, зная количество информации, написать уравнение связи переменных.

Замечание. Под информацией Шеннон понимал сигналы нужные, полезные для получателя. Неполезные сигналы, с точки зрения Шеннона, это шум, помехи. Если сигнал на выходе канала связи является точной копией сигнала на входе то энтропия отсутствует. Отсутствие шума означает максимум информации. Энтропия и информация взаимосвязаны: $H+Y=1$, где H – энтропия, Y – информация. Этот вывод количественно был обоснован Бриллюэном.

По Шеннону информация – это убыль энтропии в результате приёма сообщений. Это уменьшение энтропии при получении сообщений:

$$Y = H_1 - H_2. \quad (25)$$

Энтропия (в теории информации) - мера неопределённости какого-либо опыта (испытания, сообщения источника), который может иметь различные исходы, а значит, и количество информации. Другой интерпретацией этого понятия является информационная ёмкость системы. Энтропия означает меру неупорядоченности системы; чем меньше элементы системы подчинены какому-либо порядку, тем выше энтропия.

Энтропия — это то, как много информации вам не известно о системе.

В теории информации энтропия рассматривается как мера недостатка информации в системе. В кибернетике при помощи понятий энтропии и неэнтропии выражают меру организованности системы. Будучи справедливой применительно к системам, подчиняющимся статистическим закономерностям, эта мера, однако, требует большой осторожности при переносе на биологические, языковые и социальные системы. Энтропия информационной системы возрастает по мере увеличения числа случайных ошибок при передаче сообщений.

Замечание. Создатель понятия энтропия в информации Клод Шеннон собирался назвать эту величину информацией. Однако, Джон фон Нейман предложил термин энтропия, объяснив, что никто не понимает и никогда не поймёт, что такое энтропия, поэтому у Шеннона в спорах будет преимущество. Нейман оказался прав.

Ныне понятие энтропии – базисное понятие теории информации. Энтропия – мера неопределённости некоторой ситуации. Это мера рассеяния, подобная дисперсии. Но если дисперсия является адекватной мерой рассеяния лишь для специальных распределений вероятностей случайных величин (а именно – для двухмоментных распределений, в частности, для гауссова распределения), то энтропия не зависит от типа распределения. С другой стороны, энтропия вводится так, чтобы обладать, кроме универсальности и другими желательными свойствами. Так, если некий опыт имеет n равновероятных исходов, а другой опыт m равновероятных исходов, то

составной опыт имеет nm таких исходов. Если мы вводим меру неопределенности f , то естественно потребовать, чтобы она была такова, чтобы 1) неопределенность росла с ростом числа возможных исходов, а 2) неопределенность составного опыта была равна просто сумме неопределенности отдельных опытов, иначе говоря, мера неопределенности была аддитивной: $f(nm)=f(n)+f(m)$. Именно такая удобная мера неопределенности была введена К. Шенноном:

Энтропия Шеннона **дискретной случайной величины**, ξ , которая может принимать значения $x_1, x_2, \dots, x_n$, равна величине

$$H(\xi) = E[I(\xi)] = -\sum_{i=1}^N p(x_i) \log p(x_i); \sum_{k=1}^N p_k = 1 \quad (26)$$

где X – дискретная случайная величина с диапазоном изменчивости N ; $P(X_i)$ – вероятность i -го уровня X , $\log$ может быть натуральным (используется в математической статистике) или десятичным, но в информатике основанием является 2; $I(\xi)$ — информационное содержание (само-информация) случайной величины ξ , содержащаяся в ξ ; а $p(x_i)$ — вероятность i -го значения ξ (функция вероятности случайной величины ξ).

Замечание. В общем случае выбор основания логарифма – лишь вопрос масштаба, поскольку энтропия безразмерна. Обычно используют двоичные логарифмы, тогда энтропия и информация измеряются в битах. Это удобно тем, что выбор между двумя равновероятными уровнями X_i (как в двоичном) сигнале характеризуется неопределенностью 1 *бит*. В популярной литературе иногда пользуются десятичными логарифмами и единицей энтропии является *дит*. В физике удобнее пользоваться натуральными логарифмами и единицей энтропии является *нат*. Возможная величина энтропии заключена в пределах $0 \leq H(X) \leq \log N$. Нижняя грань соответствует вырожденному распределению, когда неопределенность величины X отсутствует. В вариационном ряду это соответствует $X_j = \text{const}$. Верхняя граница соответствует равномерному распределению, т.е. все N значений X_i встречаются с равной вероятностью. В вариационном ряду это может соответствовать, в частности, линейному тренду $X_j = ar_j$.

Энтропия Шеннона (информационная энтропия) — мера неопределенности (непредсказуемости), связанной со случайной величиной; определяет количество информации, содержащейся в сообщении (в битах на символ); неопределенность появления какого-либо символа первичного алфавита, минимальная длина сообщения, необходимая для передачи информации; абсолютный предел наиболее возможного сжатия без потерь любого сообщения; мера среднего информационного содержания случайной величины, которое наблюдатель (получатель сообщения) теряет, когда ему неизвестно значение (исход) случайной величины. При отсутствии информационных потерь энтропия численно равна количеству информации на символ передаваемого сообщения.

Энтропия – количество информации, приходящейся на одно элементарное сообщение источника, вырабатывающего статистически независимые сообщения. Кратчайшее представление, необходимое для передачи сообщения — это энтропия Шеннона в битах на символ, умноженная на число символов в исходном сообщении.

Энтропия Шеннона количественно характеризует произвольное распределение какого-либо параметра системы — энергии, скорости, числа атомов в разных состояниях возбуждения и др. Если в системе происходят какие-либо изменения, то меняются распределения ее параметров. Соответственно, изменяется и величина энтропии. В этом смысле энтропия Шеннона является функцией состояния системы, так как количественно характеризует меру неопределенности значений параметров.

На основе представлений об информационной энтропии можно вывести все равновесные статистические распределения.

Возможны два типа энтропии Шеннона: первая – энтропия на амплитудном покрытии; вторая – энтропия на пространственном или временном покрытии.

Сообщения описываются множеством величин $x_1, x_2, \dots, x_n$, которые могут быть, например, словами какого-либо языка, и соответствующих вероятностей $p_1, p_2, \dots, p_n$ появления величин $x_1, x_2, \dots, x_n$ в сообщении.

Значение. $H_u = 0$, если какое-либо из $p_k=1$, а остальные — нулю, т.е. неопределенность в информации отсутствует. Энтропия принимает наибольшее значение, когда p_k равны между собой и неопределенность в информации максимальна. Информационная энтропия, как и термодинамическая, обладает свойством аддитивности (энтропия нескольких сообщений равна сумме энтропий отдельных сообщений). К.Э. Шеннон показал, что энтропия источника информации определяет критическое значение скорости «помехоустойчивой» передачи информации по конкретном канале связи. Из

вероятностной трактовки информационной энтропии могут быть выведены основные распределения статистической физики: каноническое Гиббса распределения, которое соответствует максимальному значению информационной энтропии при заданной средней энергии, и большое каноническое распределение Гиббса — при заданных средней энергии и числа частиц в системе.

Энтропия Больцмана — частный случай обобщенной энтропии Шеннона. Между термодинамической энтропией, статистической энтропией Больцмана и информационной энтропией имеется определённая аналогия.

Свойства информационной энтропии:

- Непрерывность. Её мера непрерывна: изменение значения одной из вероятностей на очень маленькую величину изменяет энтропию также на маленькую величину.
- Симметрия: мера не меняется, если исходы x_i переупорядочены, то $H_n(p_1, p_2, \dots) = H_n(p_2, p_1, \dots)$ и т.д.
- Максимум: мера максимальна, если все исходы одинаково вероятны (неопределённость является самой высокой, когда все возможные события равновероятны).

$$H_n(p_1, \dots, p_n) \leq H_n\left(\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right) \quad (27)$$

Для равновероятных событий энтропия должна увеличиваться с увеличением их числа:

$$H_n\left(\underbrace{\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}}_n\right) < H_{n+1}\left(\underbrace{\frac{1}{n+1}, \dots, \frac{1}{n+1}}_{n+1}\right). \quad (28)$$

- Аддитивность: количество энтропии не зависит от того, как система событий разделена на части (подсистемы).

Дифференциальная энтропия — формальное обобщение понятия информационной энтропии Шеннона для случая непрерывной случайной величины. В теории информации интерпретируется как средняя информация непрерывного источника.

Информационная энтропия **непрерывной одномерной случайной величины** x с функцией распределения $f(x)$:

$$H(X) = - \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \log_2 f(x) dx \text{ бит}; \quad \int f(x) dx = 1 \quad (29)$$

где $f(x)$ — плотность распределения сигнала непрерывного источника как случайной величины.

Дифференциальная энтропия неинвариантна к преобразованию координат случайной величины и не имеет самостоятельного смысла. Если случайная величина имеет размерность, то функционал дифференциальной энтропии будет некорректен с точки зрения размерности (поскольку под знаком логарифма оказывается размерная величина). Однако разность дифференциальных энтропий двух случайных величин, распределенных на одном интервале, является безразмерной величиной и совпадает с разностью их энтропий (энтропия любой непрерывной случайной величины бесконечна).

Условная дифференциальная энтропия величины при заданной величине :

$$H(X | Y = y) = - \int_{-\infty}^{+\infty} f_{X|Y}(x) \log_2 f_{X|Y}(x) dx \quad (30)$$

Безусловная и условная дифференциальные энтропии могут быть как положительными, так и отрицательными величинами, а также могут быть равны бесконечности.

Для дифференциальной энтропии справедливы равенства, аналогичные для энтропии дискретного источника:

$$\begin{aligned} H(X) &\geq H(Y|X) \text{ (для независимых источников — равенство)} \\ H(X, Y) &= H(X) + H(Y|X) = H(Y) + H(X|Y) \end{aligned} \quad (31)$$

Энтропия биномиального распределения

$$H(X) = - \sum_{m=0}^n C_n^m p^m q^{n-m} \log(C_n^m p^m q^{n-m}) = - \sum_{m=1}^n C_n^m p^m q^{n-m} \log C_n^m - n(p \log p + q \log q) \quad (32)$$

Дифференциальная энтропия распределений с определенной фиксированной дисперсией σ^2 максимальна в случае гауссова распределения плотности вероятности сигнала непрерывного источника как случайной величины (нормальное распределение):

$$H(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}} \cdot \log \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}} dx = \log(\sigma\sqrt{2\pi e}) \quad (33)$$

При натуральном логарифме для распределения Гаусса:

$$H(X) = \frac{1}{2} \frac{\ln(2\pi\sigma^2 e)}{\ln 2} \text{ бит} \quad (34a)$$

Для равномерного распределения:

$$H(X) = \frac{\ln(2\sqrt{3}\sigma)}{\ln 2} \text{ бит} \quad (34б)$$

Для распределения Лапласа

$$H(X) = \frac{\ln(\sqrt{2}\sigma e)}{\ln 2} \text{ бит} \quad (34в)$$

Пример: Энтропия английского текста лежит между 1.0 и 1.5 битами на букву.

Замечание. В энтропийных единицах плата за полученные сведения невелика: каждый бит (бит-минимальная единица измерения информации) стоит всего $2,5 \cdot 10^{-24}$ калорий на градус.

Мы рассмотрели три варианта введения понятия энтропия. В термодинамике - это функция состояния (Клаузиус) и мера беспорядка (Больцман). В теории информации – мера достоверности передаваемой по каналу связи информации (Шеннон). Сходство S и H в том, что стремление к равновероятности (однородности) состояний системы увеличивает обе энтропии. Но в энтропии Больцмана нет верхнего предела S : чем больше W , тем выше S . У Шеннона $H_{max}=1$.

1. Энтропия Больцмана является мерой беспорядка, хаотичности, однородности молекулярных систем.
2. Энтропия Клаузиуса пропорциональна количеству связанной энергии, находящейся в системе, которую нельзя превратить в работу.
3. Энтропия Шеннона количественно характеризует достоверность передаваемого сигнала и используется для расчета количества информации.

Замечание. Широкая популярность формул типа $S \sim k \sum p \log(p)$ в разных областях связана с особой ролью степенных законов в природе. Для таких случаев выражение $p \log(p)$ является удобной аддитивной мерой. Удобной в плане нашего восприятия количества чего бы то ни было — информации, хаоса, нелокальности, интенсивности света звезды и так далее. Ведь наши органы чувств работают по логарифмическому закону Вебера–Фехнера: интенсивность ощущения пропорциональна логарифму интенсивности стимула. С этой точки зрения, энтропия, выражаемая формулой типа $S \sim p \sum \log(p)$ — удобная для нашего восприятия абстрактная аддитивная мера. Ее физический смысл зависит от того, что именно мы оцениваем, то есть тем, на каких данных и как мы определяем аргумент p — плотность вероятности. Основание логарифмов несущественно и выбирается из соображений удобства для той или иной задачи.

6. Негоэнтропия

Величина, противоположная энтропии, именуется негэнтропией или, реже, экстропией.

Негэнтропия — термин, образованный добавлением отрицательной приставки нег- к понятию энтропия, и обозначающий его противоположность. Она означает меру упорядоченности и организованности системы или качество имеющейся в системе энергии.

В силу второго начала термодинамики, энтропия S_i замкнутой системы не может уменьшаться» (закон неубывания энтропии). Математически это можно записать так: $dS_i \geq 0$, индекс i обозначает внутреннюю энтропию, соответствующую замкнутой системе. В открытой системе возможны потоки тепла как из системы, так и внутрь неё. В случае наличия потока тепла в систему приходит количество тепла δQ_1 при температуре T_1 и уходит количество тепла δQ_2 при температуре T_2 . Приращение энтропии, связанное с данными тепловыми потоками, равно:

$$dS_0 = \frac{\delta Q_1}{T_1} - \frac{\delta Q_2}{T_2} \quad (35)$$

В стационарных системах обычно $\delta Q_1 = \delta Q_2$, $T_1 > T_2$ так что $dS_0 < 0$. Поскольку здесь изменение энтропии отрицательно, то часто употребляют выражение «приток негэнтропии», вместо оттока энтропии из системы. Негэнтропия определяется таким образом как обратная величина энтропии. Суммарное изменение энтропии открытой системы будет равно:

$$dS = dS_i + dS_0 \quad (36)$$

Если всё время $dS > 0$, то рост внутренней энтропии не компенсируется притоком внешней негэнтропии, система движется к ближайшему состоянию равновесия. При $dS = 0$ имеет место стационарный процесс с неизменной общей энтропией. В этом случае в системе осуществляется некоторая внутренняя работа с генерацией внутренней энтропии, которая преобразует, например, температуру T_1 внешнего потока тепла в температуру T_2 уходящего из системы потока тепла.

Впервые понятие «отрицательной энтропии» предложил в 1943 Э.Шредингер в книге «Что такое жизнь?». Он объяснил, как живая система экспортирует энтропию, чтобы поддержать свою собственную энтропию на низком уровне: живая система импортирует негэнтропию для самосохранения. Живой организм непрерывно увеличивает свою энтропию, или, иначе, производит положительную энтропию и, таким образом, приближается к опасному состоянию максимальной энтропии, представляющему собой смерть. Он может избежать этого состояния, то есть оставаться живым, только постоянно извлекая из окружающей его среды отрицательную энтропию. Отрицательная энтропия — это то, чем организм питается. В метаболизме удастся освободиться от всей той энтропии, которую он вынужден производить, пока жив.

7. Энтропии Колмогорова

А.Н. Колмогоров превратил техническую теорию информации Шеннона в полноценную науку, однако строил её на другой аксиоматике, чем Шеннон.

Энтропия А.Н. Колмогорова (К-энтропия, 1954) - характеристика хаотического движения в фазовом пространстве произвольной размерности.

Колмогоров, используя предельное распределение вероятности, имеющее плотность $f(x)$, распространил понятие энтропии на эргодические случайные процессы.

Эргодичность — свойство некоторой динамической системы, состоящее в том, что в процессе эволюции почти каждое состояние с определённой вероятностью проходит вблизи любого другого состояния системы. Система, в которой фазовые средние совпадают с временными, называется эргодической. При достаточном времени наблюдения такие системы можно описывать статистическими методами. Для эргодических систем математическое ожидание по временным рядам должно совпадать с математическим ожиданием по пространственным рядам.

Примером стационарного случайного процесса является броуновское движение. Пусть u — вектор положения броуновской частицы. Реализацией случайного процесса является временная последовательность значений параметра $u(t)$. Выборка i из данной реализации есть некий конечный фрагмент данной реализации, или некая конечная последовательность значений параметра $u_i(t)$. Случайный процесс называется эргодическим, если среднее по времени от значений выборок

процесса $M\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u_i(t)\right)$ стремится к его математическому ожиданию реализации $Mu(t)$, которое не

зависит от t в силу стационарности процесса. В таких процессах $\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T u(t) dt = Mu(t) = const$

Разобьём пространство параметра u на ϵ ячейки, а время t пусть тоже изменяется дискретно так, что $tn = ndt$. Пусть теперь $f(u_i(t_n))$ — вероятность данной выборки $u_i(t_n)$, т.е. совместная вероятность того, что в момент времени t_0 броуновская частица находилась в ϵ ячейке с номером 0, в ячейке 1 — в момент времени $t_1 = t_0 + dt, \dots, t_n = t_0 + ndt$.

К-энтропия (мера априорной неопределённости положения броуновской частицы) определяется как средняя скорость потери информации

$$S_K(n) = -\sum_{i=0}^n f(u_i(t_n)) \ln(f(u_i(t_n))) \quad (37)$$

Разность энтропий $(S_K(n+1)-S_K(n))$ есть потерянная информация о положении частицы на интервале dt . Скорость потери информации на всем интервале ndt равна

$$\frac{S_K(n) - S_K(0)}{ndt} \quad (38)$$

К-Энтропия определяется как предельное значение этой оценки при заданном начальном значении ($S_K(0) = 0$):

$$S_{K \lim} = \lim_{dt \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S_K(n)}{ndt} \quad (39)$$

S_K – мера хаоса: она равна нулю для регулярного движения, бесконечна для случайных систем, положительна и постоянна для систем с детерминированным хаосом.

К-энтропия – мера "памяти" системы, т.е. мера скорости "забывания" начальных условий и мера хаотичности системы. Для чисто случайного процесса прошлые значения u_i никак не связаны и не несут никакой информации о настоящем и будущем (даже ближайшем) в значениях u . В этом случае все значения u_i равновероятны и $f(u_i) = 1/n$. Откуда $S_K(n) = \ln(n)$. Тогда, учитывая, что $ndt = \text{const}$ при предельном переходе, получаем, что для процесса «без памяти», $S_K \rightarrow \infty$. В случае регулярного движения, когда $S_K \rightarrow 0$, можно предсказать любые будущие значения $u(t)$. Таким образом, чем меньше S_K , тем более детерминированной является система. Напротив, высокие значения S_K говорят о высокой стохастичности системы, короткой «памяти» и, соответственно, плохой прогнозируемости ее будущих состояний. Роль К-энтропии для нелинейных систем похожа на роль, которую играет автокорреляционная функция для линейных систем. К-энтропия связана с показателями Ляпунова, характеризующими устойчивость динамической системы. Энтропия Колмогорова определяет среднее время, на которое можно предсказать состояние системы с динамическим хаосом.

Энтропия Крылова-Колмогорова-Синя (КС-энтропия) используется для определения является ли исследуемый режим хаотическим или регулярным.

Пусть имеется динамическая система, которая задаётся обыкновенными уравнениями:

$$\dot{x} = f(x), \quad x(0) = x_0 \quad (40)$$

где x – N -мерный вектор состояний.

Выберем в фазовом пространстве в начальный момент $t=0$ две близкие фазовые точки x_1 и x_2 , проведём из них траектории ($x_1(t)$ и $x_2(t)$) и проследим, как при эволюции системы (40) будет изменяться расстояние $d(t) = |x_2(t) - x_1(t)|$ между этими точками.

Если динамика системы (40) является хаотической, то $d(t)$ с течением времени будет экспоненциально возрастать, причём при больших временах:

$$d(t) \approx d(0)e^{kt}. \quad (41)$$

Средняя скорость экспоненциального расхождения траекторий:

$$k \approx \frac{\ln\left(\frac{d(t)}{d(0)}\right)}{t} \quad (42)$$

Однако так не может продолжаться вечно: при финитном движении $d(t)$ не может всегда увеличиваться. В самом деле, при финитности движения (а только такое движение мы и рассматриваем) $d(t)$ не может увеличиваться всегда. Поэтому при больших t величина (129) в любом случае независимо от режима — хаотического или регулярного — будет близка к нулю. Однако чем меньше мы выберем начальное расстояние $d(0) = |\xi(0)|$, тем дольше можно следить за возрастанием $d(t)$, т. е. в течение большего промежутка времени величина $d(t)$, согласно (129), не достигнет максимального значения. Следовательно, в формуле (129) необходимо положить $d(0) \rightarrow 0$ и $t \rightarrow \infty$:

$$S_{KS} = \lim_{\substack{d(0) \rightarrow 0 \\ t \rightarrow \infty}} \frac{\ln\left[\frac{d(t)}{d(0)}\right]}{t} \quad (43)$$

Величина S_{KS} называется **энтропией Колмогорова-Синя** или **КС-энтропией**. Используя КС-энтропию, можно определить, каким является исследуемый режим движения – хаотическим или

регулярным. В частности, если динамика системы является периодической или квазипериодической, то с течением времени расстояние $d(t)$ не возрастает и КС-энтропия равна нулю ($=0$). При наличии в системе устойчивой неподвижной точки $d(t) \rightarrow 0$ и $S_{KS} < 0$. В случае хаотической динамики системы КС-энтропия всегда положительна ($S_{KS} > 0$).

КС-энтропия — величина размерная ($[S_{KS}] = \text{с}^{-1}$) и по существу является не только качественной, но и количественной характеристикой режима движения: величина, обратная энтропии (при условии $S_{KS} > 0$), определяет характерное время перемешивания $t_{mix} = S_{KS}^{-1}$ в системе; по прошествии промежутка времени $t \gg t_{mix}$ начальная область Ω_0 расплывается по всей энергетически доступной гиперповерхности (в отсутствие диссипации или по предельному подмножеству фазового пространства — странному аттрактору (для диссипативных динамических систем); при $t \gg t_{mix}$ описание системы может быть только вероятностным. Однако на малых временах $t \ll t_{mix}$ поведение системы можно предсказать с достаточной точностью (не превышающей, естественно, точность задания начального положения фазовой точки). КС-энтропия — важная характеристика динамической системы; она используется как критерий хаотичности движения.

Эпсилон-энтропия (ε-энтропия) — термин, введенный Колмогоровым для характеристики классов функций. Он определяет меру сложности функции, минимальное количество знаков, необходимое для задания функции с точностью ε . Минимальное количество информации содержащейся в сообщении $z(t)$ относительно $u(t)$, при котором они еще оказываются эквивалентными, принято называть эпсилон-энтропией, $H_\varepsilon(u)$.

ε-Энтропия величины X — минимальное количество информации в одной случайной величины Y относительно другой X , при котором удовлетворяется заданное требование к верности воспроизведения величины X .

$$H_z(X) = \min_{w(x/y)} I(X, Y), \quad M[(x - y)^2] \leq \varepsilon^2. \quad (44)$$

В случае Гауссова источника сигнала при наличии шума

$$H_\varepsilon = \frac{1}{2} \log \frac{\sigma_c^2}{\sigma_\varepsilon^2}, \quad (45)$$

где σ_c^2 — дисперсия (мощность) сигнала, σ_ε^2 — дисперсия шума воспроизведения.

8. Энтропия Кульбака-Лернера

Относительная энтропия (другие названия: кросс-энтропия, расхождение, информационная дивергенция, потеря информации, различающая информация, информационный выигрыш расстояние Кульбака-Лейблера, *Kullback–Leibler divergence*) — в теории информации несимметричная мера (не метрическая) удаленности друг от друга двух вероятностных распределений.

Строится она на основе энтропии Шеннона $H(X) = -\sum_x p(x) \log p(x)$. Напомним, что энтропия

$H(X)$ — неопределённость (самоинформация) простой случайной переменной.

Расстояние (расхождение) К льбака—Л йблера — это неотрицательнозначный функционал, являющийся несимметричной мерой удаленности друг от друга двух вероятностных распределений. Обычно одно из сравниваемых распределений — это «истинное» или постулируемое априори распределение (распределение P), второе — предполагаемое (проверяемое), являющееся приближением первого (распределение Q). Значение дивергенции является безразмерной величиной. Данная мера расстояния интерпретируется как величина потерь информации при замене истинного распределения P на распределение Q . Расстояние Кульбака-Лейблера от Q до P обозначается $D_{KL}(P||Q)$, это, другими словами, количество оставшейся информации, когда Q было использовано для приближения P . Данная мера расстояния Q .

Расстояние Кульбака-Лейблера — информационный выигрыш, достигнутый, если P использовано вместо Q . Это также называют относительной энтропией P относительно Q , обозначается $H(P|Q)$.

Если массивы X и Y дискретны (дискретные вероятностные распределения), то энтропия Кульбака-Лейблера (или расстояние между двумя плотностями распределения вероятностей $p(x)$ и $q(x)$) определяется как

$$D_{KL}(p \parallel q) = \sum_{x \in X} p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} \quad (46)$$

$$I(X : Y) = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} = S\{p(x, y) \parallel p(x)p(y)\}. \quad (46)$$

Замечание. Нет общепринятого обозначения энтропии (расстояния) Кульбака-Лейблера: её записывают как $S(p \parallel q)$, $H(p, q)$, $D(p \parallel q)$ или D_{KL} .

Раскрытие неопределённостей: $0 \log \frac{0}{0} = 0 \log \frac{0}{q}$ и $p \log \frac{1}{0} = \infty$.

D_{KL} - математическое ожидание логарифмической разности между вероятностями p и q , где математическое ожидание берётся, используя вероятности p . Оно определено, только если $q(i)=0 \Leftrightarrow p(i)=0$, для всех i (абсолютно непрерывных). Всякий раз, когда $p(i)=0$,

Относительная энтропия удовлетворяет *неравенству Гиббса*: $D_{KL}(P \parallel Q) \geq 0$, в котором равенство выполняется только если распределения P и Q совпадают. Следует понимать, что хотя эта величина называется расстоянием, она не является в общем случае метрикой в пространстве распределений, $D_{KL}(P \parallel Q) \neq D_{KL}(Q \parallel P)$.

Если P и Q – распределения непрерывных случайных величин, то расстояние Кульбака-Лейблера определено как интеграл:

$$D_{KL}(p \parallel q) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} dx, \quad (48)$$

где p и q – плотности P и Q .

Расстояние Кульбака-Лейблера всегда неотрицательно, оно равно нулю тогда и только тогда, когда $q(x)=p(x)$.

$$D_{KL}(q \parallel p) = \int_{-\infty}^{\infty} q(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} dx, \quad (49)$$

Важно, что KL -дивергенция не симметрична: $D_{KL}(P \parallel Q) \neq D_{KL}(Q \parallel P)$. Эта энтропия строго определена для непрерывных распределений, и инвариантна к замене переменных, аддитивно для независимых распределений аналогично энтропии Шеннона.

Энтропия Кульбака – мера различия двух сравниваемых распределений. Она используется для сравнения двух распределений вероятностей, заданных на том же домене (например, алфавите). Это важный физический параметр открытых неравновесных термодинамических систем, поскольку чем больше энтропия Кульбака, тем больше эксергия; она же применяется как мера в квантовой теории информации, квантовой механике, компьютерной графике, или экологии, с целью сравнения динамических систем и моделей Маркова, для оценки их сложности (термодинамической глубины).

Обобщением энтропии Кульбака-Лейблера является энтропия Цаллиса, вводимая в рамках неэкстенсивной термодинамики. Для равномерного распределения относительная энтропия Цаллиса сводится к отрицательной энтропии Цаллиса $S_q(p)$. Обе относительные энтропии, Кульбака-Лейблера и относительная энтропия Цаллиса полезны для нахождения приближенных решений, зависящих от времени уравнений диффузии (и уравнений Фоккера-Планка) с дробными производными. В пределе $q \rightarrow 1$ относительная энтропия Цаллиса становится энтропией Кульбака-Лейблера.

В случае непрерывных распределений $\Phi(x)$ и $G(x)$:

$$D_{KL} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x) \cdot \ln \left(\frac{\Phi(x)}{G(x)} \right) dx. \quad (50)$$

Относительная энтропия - оценка "информационного расстояния" между распределениями $\Phi(x)$ и $G(x)$.

Если $\Phi(x)=G(x)$, то расстояние равно 0. Расстояние Кульбака-Лейблера – мера потерь информации об оригинальном распределении $\Phi(x)$, если мы его представляем распределением $G(x)$. Выражение расстояния Кульбака-Лейблера корректно с точки зрения размерностей: аргумент логарифма – безразмерная величина. Кроме того, расстояние Кульбака-Лейблера не может быть

отрицательной величиной. И, наконец, оно не зависит от масштаба наблюдений. Пример. Попробуем заменить распределение $\Phi(x)$ на $2\Phi(2x)$, а $G(x)$ на $2G(2x)$ (это соответствует сжатию распределения плотности вероятности в два раза по оси X , приводящему к снижению дифференциальной энтропии (на $\ln 2$)). Тогда

$$\int_{-\infty}^{\infty} 2\Phi(2x) \cdot \ln\left(\frac{2\Phi(2x)}{2G(2x)}\right) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(y) \ln\left(\frac{\Phi(y)}{G(y)}\right) dy, \text{ где } y=2x. \quad (51)$$

Расстояние Кульбака-Лейблера при этой операции не изменилось.

Взаимная (совместная) энтропия двух дискретных случайных переменными X и Y ($p(x,y)$ – значение их совместного распределения вероятности при (x,y)) записывается как

$$H(X,Y) = -E_{p(x,y)}[\log p(X,Y)] = -\sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x,y) \log p(x,y) \quad (52)$$

Совместная энтропия представляет количество информации, необходимое в среднем для установления значения двух дискретных распределений. Совместная энтропия – количество информации в двух (или более) случайных переменных.

Согласно определению, если задана случайная переменная X , то взаимная энтропия (conditional entropy) Y (среднее по X) равна

$$H(Y|X) = -E_{p(x)}[H(Y|X=x)] = -E_{p(x,y)}[\log p(Y|X)] \quad (53)$$

Здесь важно учитывать, что $H(X|Y) \neq H(Y|X)$.

Согласно цепному правилу $H(X,Y) = H(X) + H(Y|X)$, поэтому $H(X,Y) = H(X|Z) + H(Y|XZ)$.

Сокращение неопределённости взаимной информации определяется относительной энтропией $I(X;Y) = H(X) - H(X|Y)$. Соотношения между взаимной информацией и энтропией $I(X;Y) = H(X) - H(X|Y)$; $I(X;Y) = H(Y) - H(Y|X)$; $I(X;Y) = H(X) + H(Y) - H(X,Y)$; $I(X;Y) = I(Y;X)$ (симметрия); $I(X;X) = H(X)$ (самоинформация).

Условная энтропия $H(X|Y)$ – энтропия одного случайного переменного условна от знания другой. Здесь – количество информации в одной случайной величины, задаваемая другой.

Перекры́стная энтропия между двумя распределениями вероятностей измеряет среднее число бит, необходимых для опознания события из набора возможностей, если используемая **распределение вероятностей q , вместо «истинного» распределения p .**

Перекры́стная энтропия для двух распределений и над одним и тем же вероятностным пространством:

$$H(p,q) = E_p[-\log q] = H(p) + D_{KL}(p||q), \quad (54)$$

где $H(p)$ – энтропия p и $D_{KL}(p||q)$ - расстояние Кульбака-Лейблера от q до p (относительная энтропия).

$$\text{Для дискретного и } H(p,q) = -\sum_x p(x) \log q(x) \quad \text{Для непрерывного} \quad (55a)$$

$$\text{распределения: } H(p,q) = -\int_x p(x) \log q(x) dx \quad (55b)$$

Запись как для перекры́стной энтропии, так и для совместной энтропии. Минимизация перекры́стной энтропии используется в оптимизации и для оценки вероятностей редких событий.

В приложениях, P , как правило, представляет собой "истинное" распределение данных, наблюдений или точно рассчитанной теоретического распределения, в то время как Q обычно представляет собой теорию, модель, описание, или приближение P . Минимизация Кульбака-Лейблера часто используется для приближения сложного распределения $p(x)$ более простым $q(x)$. Пусть $p(x)$ – синее распределение, а $q(x)$ – красное. Слева показан результат минимизации $KL(p||q)$ по $q(x)$, а справа – результат минимизации $KL(q||p)$ по $q(x)$. Чётко проявляется асимметричность: $KL(p||q) \neq KL(q||p)$.

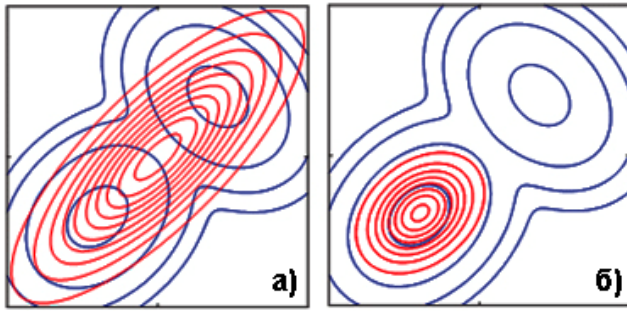


Рис. 3. Приближение сложного распределения более простым.

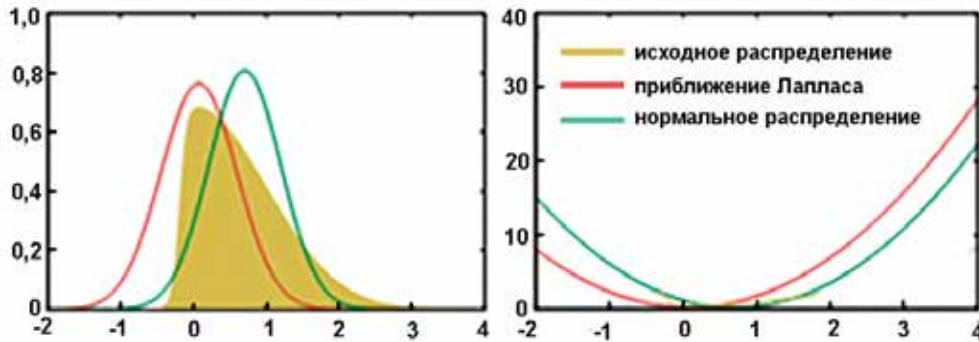


Рис. 4. Аппроксимация исходного распределения различными приближениями.

На рис. дан пример аппроксимации одного статистического распределения другим. Продемонстрированы различия между экспериментальным и подгоночным распределениями.

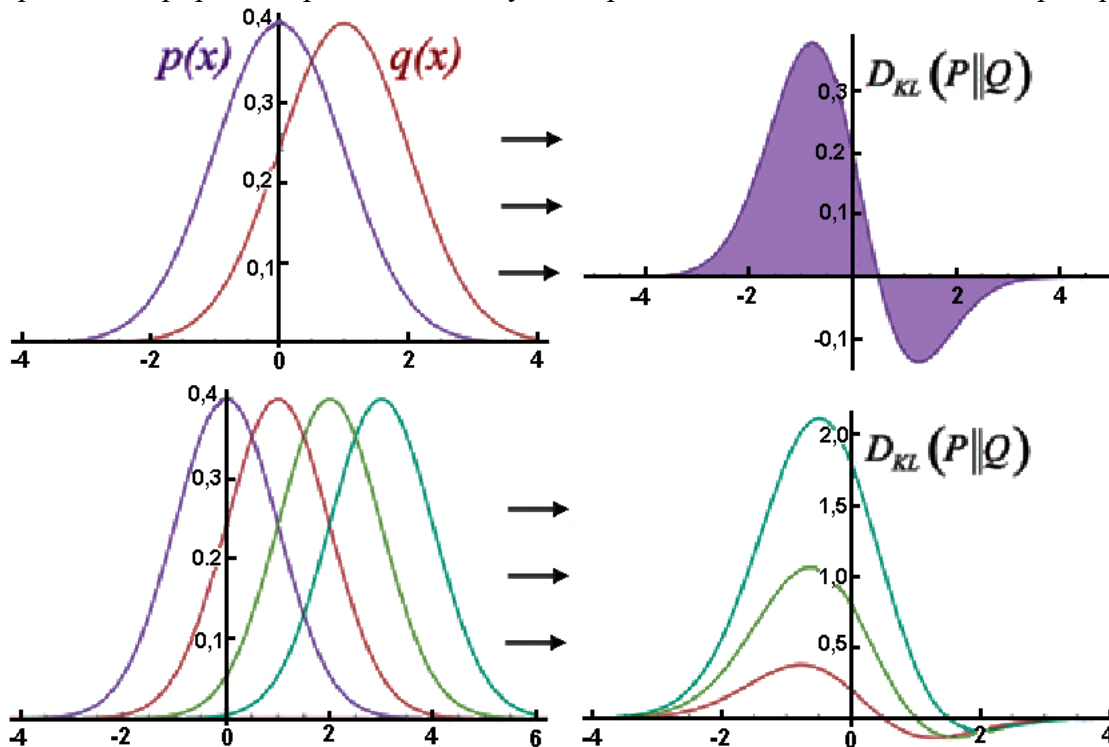


Рис. 5. Иллюстрация дивергенции Кульбака-Лейблера (KL) для двух нормальных распределений (гауссианов). Хорошо заметна асимметрия KL-дивергенции.

Рассмотрим задачу аппроксимации распределения $p(x)$ с помощью распределения $q(x)$. Будем искать приближение двумя способами:

$$1. \quad KL(q \parallel p) \rightarrow \min_q \quad (56a)$$

$$2. \quad KL(p \parallel q) \rightarrow \min_q \quad (56б)$$

В первом случае аппроксимация ищется в области высоких значений q . Поэтому итоговое распределение, как правило, хорошо приближает распределение $p(x)$ только на подмножестве носителя $p(x)$ (см. рис. 6, слева). Во втором случае аппроксимация ищется сразу для всего носителя распределения $p(x)$ (см. рис. 6, справа).

Для случайной переменной $X=\{0,1\}$ предполагает два распределения $f(x)$ с $f(0)=1-r$, $f(1)=r$ и $g(0)=1-s$, $g(1)=s$;

$$D(f \parallel g) = (1-r) \log \frac{1-r}{1-s} + r \log \frac{r}{s} \quad (57a)$$

$$D(g \parallel f) = (1-s) \log \frac{1-s}{1-r} + s \log \frac{s}{r} \quad (57b)$$

Если $r=s$ то $D(f \parallel g)=D(g \parallel f)=0$, и $r=1/2$ и $s=1/4$, то

$$D(f \parallel g) = \frac{1}{2} \log \frac{\frac{1}{2}}{\frac{3}{4}} + \frac{1}{2} \log \frac{\frac{1}{2}}{\frac{1}{4}} = 0,2075$$

$$D(g \parallel f) = \frac{1}{4} \log \frac{\frac{3}{4}}{\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \log \frac{\frac{1}{4}}{\frac{1}{2}} = 0,1887$$

Энтропию Кульбака-Леблера используют также для приближения двумодального распределения $p(x)$ с помощью одномодального распределения $q(x)$.

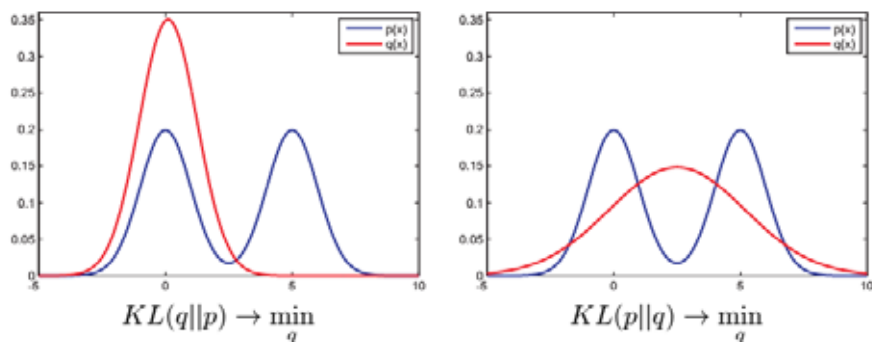


Рис. 7. Приближение двумодального распределения $p(x)$ с помощью одномодального распределения $q(x)$.

9. Тсаллис (Цаллис) энтропия (Революция в термодинамике)

Энтропия Цаллиса – обобщение стандартной энтропии Больцмана-Гиббса.

Как уже упоминалось, основные свойства термодинамической энтропии: экстенсивность и аддитивность энтропии

$$S(A+B) = S(A) + S(B). \quad (58)$$

Экстенсивная величина – такая характеристика системы, которая растет с увеличением размеров системы. Если система состоит из двух независимых подсистем А и В, то энтропию всей системы можно получить сложением энтропий подсистем

Аддитивность — свойство величин, состоящее в том, что значение величины, соответствующее целому объекту, равно сумме значений величин, соответствующих его частям, в некотором классе возможных разбиений объекта на части.

В статистической физике показывается, что энтропия является аддитивной величиной и принимает максимальное значение в состоянии равновесия.

Это справедливо, если силы между частями системы являются короткодействующими: каждая молекула чувствует лишь несколько ближайших соседей.

Однако, существуют системы, которые не могут быть описаны больцмановской термодинамикой. Прежде всего это системы с сильными корреляциями, с сильными и дальнедействующими взаимодействиями между всеми частями системы, с эффектами памяти (система помнит свое прошлое – эволюция системы в данный момент времени зависит не только от параметров системы в этот конкретный момент времени, но и от ее параметров некоторое время назад). Типичным примером являются квазичастицы и фоновые колебания в кристалле. В этих

случаях предположение молекулярного хаоса, лежащее в основе больцмановского выражения для энтропии, не выполняется.

Константино Тсаллис (*Constantino Tsallis*, грек из Бразилии, в русской литературе называется Цаллис) в 1988 в рамках статистической термодинамики предложил обобщение энтропии Больцмана-Гиббса на случай неаддитивных систем. Его гипотеза базируется на предположении, что сильное взаимодействие в термодинамически аномальной системе приводит к новым степеням свободы, к совершенно иной статистической физике не-больцмановского типа, т.е. *отдельные частицы с больцмановской статистикой + сильное взаимодействие => новые степени свободы с небольцмановской статистикой + отсутствие взаимодействия*. Эта гипотеза не доказана, но оказалась полезной для ряда приложений.

Цаллис теоретическим обоснованием своей гипотезы особенно не заморачивался. Он просто взял стандартное выражение для энтропии, а логарифм заменил на степенную функцию

$$\ln(x) \rightarrow \log_q(x) = \frac{x^{1-q} - 1}{1-q} \quad (59)$$

с неким числовым параметром q (действительное число, энтропийный индекс, мера неэкстенсивности системы).

Цаллис подбирал формулу для энтропии, которая переходила бы в стандартную формулу в пределе слабой связи и описывала неэкстенсивные системы. Физический смысл ей придали намного позже.

q -Энтропия Цаллиса (дискретный случай) задаётся формулой:

$$S_q = -\sum_i p_i^q \ln_q(p_i) = -\frac{k \left(1 - \sum_i p_i^q\right)}{q-1} = -k \left[D_q \sum_i p_i^x \right]_{x=1} ; \sum_i p_i = 1, \quad (60)$$

где D_q , q -производная по x . S_q можно сравнить со стандартной энтропией $S = -\lim_{x \rightarrow 1} \frac{d}{dx} \sum_i p_i^x$. k – размерная константа, если размерность существенна для понимания задачи.

При $q \rightarrow 1$ – достигается энтропия Больцмана $S_{BG} = -k \sum_i p_i \ln p_i$ и $S(AB) = S(A) + S(B)$.

Величина q ничем не ограничена и может принимать значения от минус бесконечности до плюс бесконечности, однако некоторые ограничения возникают в некоторых конкретных задачах. При использовании энтропии Цаллиса в информатике, константа k отбрасывается и q -энтропия становится безразмерной.

В случае непрерывного распределения

$$S_p(p) = \frac{1}{q-1} \left\{ 1 - \int [p(x)]^q dx \right\} \quad (61)$$

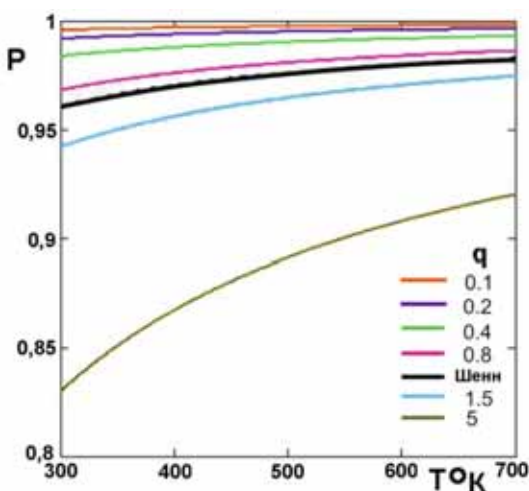
где $p(x)$ – функция плотности вероятности.

q -Энтропия – неэкстенсивная функция. Здесь

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q)S_q(A)S_q(B) \quad (62)$$

Параметр $|1-q|$ – мера неэкстенсивности системы.

Замечание. Тот факт, что Цаллис взял степенную функцию "с потолка", никак не обосновав свой подход (почему бы не взять полином или ещё что-то не менее умное?!), помешало внедрению подобных идей в физическую химию. Неаддитивность энтропии также рассматривалась не как достоинство, а как крупный недостаток новой теории. Однако, удалось найти несколько примеров, в которых q -энтропия довольно хорошо работает (например, при описании супердиффузии). Кроме того, степенная функция спадает существенно медленнее, чем экспонента, что позволяет совместить q -энтропию с распределениями Леви-Паррето и геометрией фракталом. Обстоятельство, обеспечивающее перспективность идей Цаллиса в физической химии и информатике, особенно при описании аномальной диффузии. Оказалось, что подход



Цаллиса даёт некое обобщение термодинамики, статистической физики и физической кинетики.

Рис. 7. Зависимость распределения частиц по энергиям от абсолютной температуры при различных значениях параметра q ; уравнение Гиббса (пунктир) и распределения Цаллиса. Энергия активации 100 кДж/моль, Газовая постоянная $R=8,314$ Дж/(моль К), Интервал температур 300 – 700К, Интервал q 0.01 – 10.

Переход от логарифмической к степенной функции, переводит распределение частиц по энергиям Гиббса

$$p(E) \sim \exp(-E/kT) \quad (63)$$

в энергетическое распределение Цаллиса

$$p(E) \propto \left[1 + (1-q) \cdot \left(-\frac{E}{kT} \right) \right]^{\frac{q}{1-q}} \quad (64)$$

Теперь при больших значениях энергии. При $q>1$ имеет место степенное, а не экспоненциальное падение вероятности в ростом энергии, при $q<1$ существует максимально возможная энергия $E_{\text{макс}}$ (обрезка распределения), при $q=1$ – распределение Больцмана.

Неаддитивность энтропии Цаллиса позволяет построить новую термодинамику и новую статистическую теорию, способные просто и корректно описывать системы с длинной памятью, а также системы, в которых каждый элемент взаимодействует не только с ближайшим соседом или несколькими ближайшими соседями, но и со всей системой в целом или ее частями. Типичным примером таких систем являются гравитирующие системы: звездные скопления, газопылевые комплексы, галактики. Энтропия Цаллиса нашла применение при описании продольных (электростатических) волн в бесстолкновительной плазме, развитой турбулентности, сильно квантово запутанных систем, эволюции сложных сетей, термостатики сильно шунтированного движения взаимодействующих частиц, а также диффузионной кинетики. В системах, чувствительных к начальным условиям производства энтропии идёт на грани хаоса.

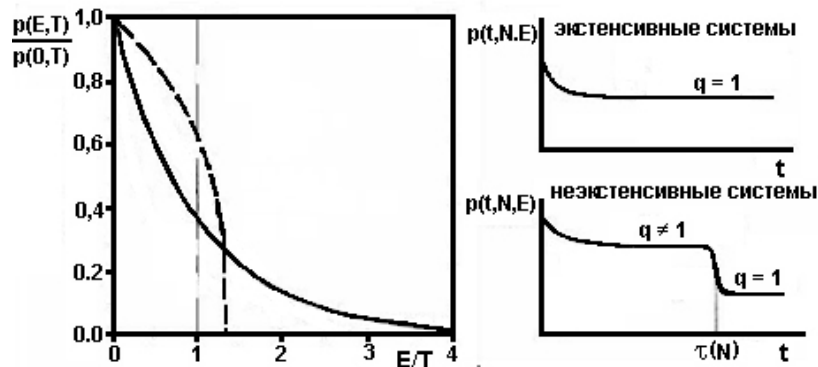


Рис. 8. Распределение частиц по энергии в термостатике Цаллиса и эволюция системы с памятью во времени.

Энтропия Цаллиса была успешно применена для решения некоторых практически важных задач.

При изучении эволюции самогравитирующего газа было обнаружено, что распределение по скоростям спиральных галактик в скоплениях резко обрывается при 500 км/сек. Аналогичные эффекты предсказывает и термостатистика Цаллиса. Флуктуации магнитного поля в солнечном ветре позволили вычислить q -триплет (или триплет Цаллиса). Продольные (электростатические) волны в бесстолкновительной плазме имеют не максвелловское распределение - спадание при больших скоростях идёт по степенному закону, что позволило обрабатывать результаты по термостатистике Цаллиса. В её рамках было получено распределение скоростей в ведомой диссипативной пылевой плазмы. Термостатистика постепенно находит применение при изучении эволюции сложных сетей, т.е. систем, состоящих из большого числа узлов, которые могут определенным образом взаимодействовать друг с другом (например, фондовые биржи, компьютерные сети и т.д.). Везде, где важное значение имеет явление "дальнодействия" – каждый узел сети может взаимодействовать не только с несколькими ближайшими соседями, но и со многими удаленными узлами, число которых, к тому же, может меняться со временем. Именно такими случаями и занимается статистика Цаллиса. С помощью этой статистики была интерпретирована релаксация спиновых стёкол. Распределение,

характеризующий движение холодных атомов в диссипативных оптических решетках, предсказано в 2003, а наблюдалась в 2006. Эта статистика нашла применение в обработке результатов, зарегистрированных детекторами на ускорителе ЦЕРНа в экспериментах и изучению столкновений высокоэнергетических частиц.

Статистика Цаллиса используется для описания процессов, чувствительным к начальным условиям, в которых производство энтропии идёт на грани хаоса, прежде всего это сильно запутанные квантовые системы, термодинамика и сильно шунтированное движение взаимодействующих частиц. Она позволила получить нелинейные обобщения уравнений Шредингера, Клейна-Гордона и Дирака.

Возможно самое перспективное направление использования энтропии Цаллиса – интерпретация явлений аномальной диффузии, в частности – супердиффузия, в рамках которой с использованием пространственно дробных уравнений в частных производных осуществляется непрерывный переход от полного порядка (полуволновое уравнение) к полному беспорядку (диффузионное уравнение). Такой переход можно осуществить изменением параметра q в выражении для энтропии Цаллиса.

10. Энтропия Реньи

Как уже упоминалось, в классическая термодинамика базируется на распределении Гиббса.

Распределение (каноническое) Гиббса – распределение состояний макроскопической термодинамической системы частиц, находящейся в тепловом равновесии с термостатом (окружающей средой).

В классическом случае плотность распределения можно представить в виде:

$$p_i^{(G)} = \frac{e^{-\beta_0 H_i}}{Z_G} \quad (65)$$

где $\beta_0 = \frac{1}{k_B T_0}$, k_B – постоянная Больцмана, T_0 – термодинамическая температура, Z_G – интеграл

состояния, гамильтониан состояния системы $H = \{H_i\}$. Среднее значение энергии $U = \langle H \rangle_p \equiv \sum_i^W H_i p_i$,

W – число состояний системы, p_i – вероятности.

Подстановка распределения Гиббса в информационную энтропию Гиббса-Шеннона S_G даёт термодинамическую энтропию термостатики Гиббса

$$\tilde{S}^{(G)} = k_B S^{(G)}(p^{(G)}) = k_B \ln \sum_i^W e^{-\beta \Delta H_i}. \quad (66)$$

Однако такой подход справедлив только для простых систем. При изучении сложных физических систем и явлений (например, фрактальных и самоорганизующихся структур, турбулентности), а также различных социальных и биологических систем было обнаруживается, что распределение Гиббса не обеспечивает согласия с наблюдаемыми явлениями. В частности, оно не совместимо со степенным распределением, характерным для подобных систем. Развитие информационного подхода к описанию существенно неравновесных систем, включающих самоорганизацию структур, привело к введению понятия энтропии **Реньи**, и ее линеаризованной форме – энтропии Хаварда–Чарвата–**Цаллиса**. Энтропия Реньи – обобщение энтропии Шеннона. Реньи ввел свою энтропию на основе чисто формальных рассуждений. Он искал наиболее общий класс энтропий, удовлетворяющих требованию аддитивности для статистически независимых событий, получаемых в форме обобщенных средних Колмогорова–Нагумо и был совместим с аксиомами вероятности.

В теории информации энтропия Реньи, (обобщение энтропии Шеннона), является одним из семейства функционалов для количественного разнообразия неопределенности или случайности системы.

В теории информации энтропия Реньи обобщает энтропию Хартли, энтропию Шеннона, энтропию столкновений и *Min*-энтропию.

В 1960 г. венгерский математик Альфред Реньи предложил своё обобщение энтропии. Он вводит энтропию как α – момент меры ε -разбиения (покрытия).

Энтропия Реньи порядка α

$$S_{\alpha} = \frac{1}{1-\alpha} \log_2 \left(\sum_i^{N(\varepsilon)} p_i^{\alpha} \right), \quad \sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i = 1, \quad \alpha \geq 0, \quad \alpha \neq 1 \quad (67)$$

Здесь $p_i = N_i/N(\varepsilon)$, N_i – число элементов системы, приходящихся на i -элемент ε -разбиения, $N(\varepsilon)$ – полное число элементов заданного ε покрытия, p_i – появление вероятностей событий $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ и $\log$ по основанию 2. Если все вероятности одинаковые, тогда все распределения энтропии Реньи равны, $S_{\alpha}(X) = \log n$. В противном случае, энтропии слабо уменьшаются при увеличении от α .

При записи энтропии Реньи логарифмическая функция была деформирована таким образом, чтобы при больших значениях энергии состояний вероятность их реализаций спадала не экспоненциально быстро, а степенным образом (медленнее), как это реализуется в законе Парето.

Константа α может принимать любые значения, однако смысл энтропии Реньи при этом меняется. Более высокие значения α , стремясь к бесконечности, дают энтропию Реньи, которая в большей степени определена через рассмотрение только самых высоких вероятностей событий. Более низкие значения α , стремящиеся к нулю, дают энтропию Реньи, которая в большей степени взвешивает все возможные события более равномерно, независимо от их вероятностей. Промежуточный случай $\alpha=1$ дает энтропию Шеннона, которая обладает особыми свойствами. При $\alpha=0$ максимально возможная энтропия Шеннона, $\log(N)$.

В информатике α -энтропию Реньи записывают в виде (энтропия Реньи порядка α , где $\alpha \geq 0$, $\alpha \neq 1$)

$$S_{\alpha}(p) = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[\sum_{i=1}^n p_i^{\alpha} \right] = -\frac{1}{\alpha-1} \log_2 \langle p^{\alpha-1} \rangle; \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1, \quad \alpha \in (-\infty, \infty) \quad (68)$$

где p_i – появление вероятностей событий $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ и $\log$ по основанию 2 (для счёта в битах).

Содержание информации распределения вероятности в дискретном случае

$$I_{\alpha}(p) = \frac{1}{\alpha-1} - \sum_{i=1}^N \frac{p_i^{\alpha}}{\alpha-1} \quad (69)$$

Оно переходит в информацию Шеннона при $\alpha \rightarrow 1$.

Рис. 9. Зависимость энтропии случайной величины от вероятности при различных значениях α

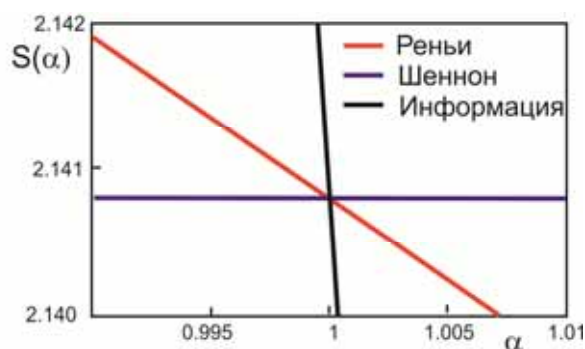
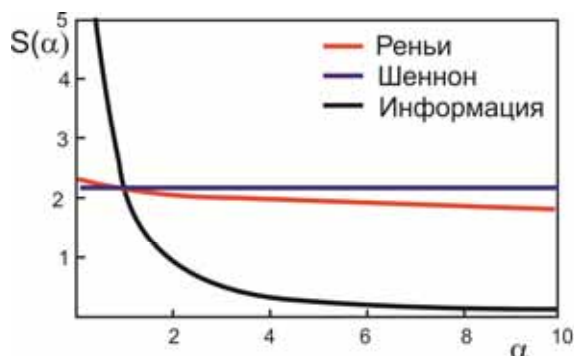
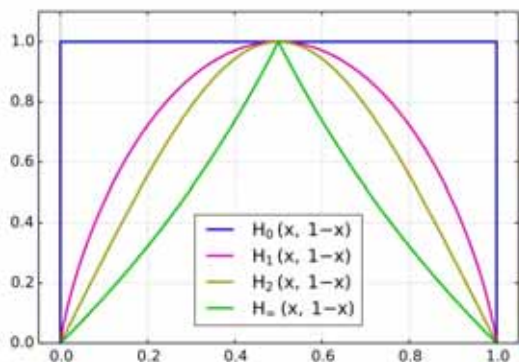


Рис. 10. Различные меры энтропии меры для выборки из однородных вероятностей с $N = 10$. Энтропия Реньи и информации стремятся к энтропии Шеннона при $\alpha \rightarrow 1$. Правая изображение представляет собой увеличенный вид точки пересечения кривых, представленной на левой картинке.

Если вероятности $p_i = \frac{1}{n}$, то все энтропии Реньи (для любого α) равны, $S_{\alpha}(x) = \log n$. Иначе α -энтропия слабо уменьшается при росте α .

Энтропия Реньи не отрицательна ($S_R(X) \geq 0$), $S_\alpha(0,1) = S_\alpha(1,0)$, для $\alpha \leq 1$ энтропия Реньи вогнута, для $\alpha > 1$ $S_\alpha(X)$ не чисто выпукла и не чисто вогнута: теряет вогнутость при $\alpha > \alpha^* > 1$, где α^* зависит от N и подчиняется соотношению

$$\alpha^* \leq 1 + \frac{\ln(4)}{\ln(N-1)}. \text{ Так как } \frac{\alpha-1}{\alpha} S_\alpha(X) \leq \frac{\beta-1}{\beta} S_\beta(X) \text{ для } \alpha \leq \beta, (\alpha-1)S_\alpha(x) \text{ вогнутая функция } X,$$

$S_\alpha(X)$ - ограниченная, непрерывная и не увеличивающаяся функция α , энтропии Реньи для различных α коррелируют, как следствие простой, но очень точно оценённой энтропии Шеннона $S_S(X)$ любая массовая функция вероятности

$$S_{\alpha 2}(X) \leq S_S(X) \leq \ln N + 1/N - \exp(-S_{\alpha 2}(X)) \quad (70)$$

$S_{\alpha 2}(X)$ с $z = \alpha + jw$ аналитична на всей комплексной площади за исключением отрицательной действительной оси.

Энтропия Реньи переходит в энтропию Больцмана при любых α в случае равновероятности распределения p .

При $\alpha \rightarrow 0$ энтропия Реньи (обычно называется энтропией Хартли), взвешивает возможные события более равномерно, менее зависимо от их вероятностей; при $\alpha = 0$ достигается максимально возможная энтропия $= \log(N)$ независимо от распределения (лишь бы $p_i \neq 0$): $S_{\alpha 0}(X) = \log N = \log |X|$ (логарифм мощности множества X называется энтропией Хартли множества X).

При $\alpha = 1$ – энтропия Шеннона (с точностью до основания логарифмов, т.е. постоянного

$$S_{\alpha 1}(X) = - \sum_{i=1}^N p_i \log p_i$$

множителя):

При $\alpha \rightarrow 1$ – энтропия взвешивает события более равномерно, менее зависимо от их вероятностей; при $\alpha = 1$ – термостатика Гиббса.

$$S_{\alpha 2} = - \log \left(\sum_{i=1}^{N(e)} p_i^2 \right) = - \log P(X=Y)$$

При $\alpha = 2$, – энтропия столкновений; X и Y – независимые и идентичные распределения. Квадратичная энтропия довольно широко используется в физике, обработке сигналов и экономике.

При $\alpha \rightarrow \infty$ энтропия определяется лишь самыми высокими вероятностями событий; существует предел $S_{\alpha \infty}(X) = \min_i (-\log p_i) = \left(\max_i \log p_i \right) = -\log \max_i p_i$ – Мин-энтропия (наименьшее

значение S_α). Мин-энтропия $S_{\alpha \infty}$ - наибольшее действительное число b такое, что все события происходят с вероятностью 2^{-b} . Это наименьшая мера энтропии в семействе Реньи энтропий и обеспечивает наилучший способ измерения информационного содержания дискретной случайной величины. В частности, мин-энтропия никогда не превышает энтропию Шеннона. Мин-энтропия имеет важные приложения для экстракторов случайностей в сфере теоретической информатики: Экстракторы способны извлекать хаотичность из случайных источников с большой мин-энтропией; там, где большой энтропии Шеннона не хватает для решения этой задачи.

При $|1-\alpha| = |\eta| < 1$ S_α переходит в энтропию Цаллиса S_q , т.е. в отличие от обобщённой энтропии Реньи, в случае двух статистически независимых систем, обладающих W_1 и W_2 -состояниями, соответственно, полная энтропия $S(W_1 W_2) \neq S(W_1) + S(W_2)$ – энтропия не аддитивна.

Неравенство между различными значениями α :

$$\log N = S_{\alpha 0} \geq S_{\alpha 1} \geq S_{\alpha 2} \geq S_{\alpha \infty} \quad (71)$$

При $\alpha > 1$ выполняется неравенство в противоположном направлении. В частности, $S_{\alpha \infty} < S_{\alpha 2} < 2S_{\alpha \infty}$. Энтропия Шеннона S_1 может быть сколь угодно высокой для величины случайной переменной X с фиксированной мин-энтропией.

Неравенства можно представить в виде

$$\log \sum_{i=1}^n p_i^2 \geq \log \sup_i p_i^2 = 2 \log \sup_i p_i \quad (72a)$$

$$\log \sum_{i=1}^n p_i^2 < \log \sup_i p_i \left(\sum_{i=1}^n p_i \right) = \log \sup_i p_i \quad (72b)$$

$$S_{\alpha 1}(x) \geq S_{\alpha 2}(x), \text{ т.к. } \sum_{i=1}^M p_i \log p_i \leq \log \sum_{i=1}^M p_i^2 \quad (72b)$$

sup - супремум (лат. Supremum) — точная верхняя грань.

Спектр расхождения (дивергенции) Реньи обобщает расхождения Кульбака-Лейблера.

Расхождение Реньи действительно является дивергенцией. Это просто означает, что $D\{\alpha\}(P|Q)$ больше или равно нулю, а нуль достигается только при $P=Q$. Для любых фиксированных распределений P и Q , расхождение Реньи убывает в зависимости от его порядка α , и оно непрерывно на множестве α , для которых она конечна. Как и расхождение Кульбака-Лейблера, расхождение Реньи не является отрицательным для $\alpha>0$.

Случай $\alpha=1$ является особенным. Значение $\alpha=1$, приводящее к энтропии Шеннона и дивергенции Кульбака-Лернера, является специальным, поскольку только при $\alpha=1$ цепное правило условной вероятности выполняется точно, что позволяет выделить переменные P и Q из совместного распределения вероятностей.

Расхождение Реньи порядка α (α -дивергенция), где $\alpha>0$, распределения P от распределения Q определяется:

$$D_{\alpha}(P||Q)=\frac{1}{\alpha-1}\log\left(\sum_{i=1}^n\frac{p_i^{\alpha}}{q_i^{\alpha-1}}\right) \quad (73)$$

при $0<\alpha<\infty$ и $\beta\neq 1$. Так определённое расхождение принимает неотрицательные значения и является неубывающей функцией α . В частном случае при $\alpha=1$ это преобразование определяется по формуле

$$D_{\alpha}(p,q)=\frac{1}{\alpha-1}\ln\sum_{i=1}^np_i^{\alpha}q_i^{1-\alpha} \quad (74)$$

называется расхождением Кульбака-Лейблера.

Расхождение Реньи (α -расхождение) используют, например, для сравнения изображений.

Мы можем определить дивергенцию Реньи для некоторых значений $\alpha=0, 1, \infty$, переходя к пределам. Так, предел $\alpha\rightarrow 1$ даёт дивергенцию Кульбака-Лейблера.

S_{α} – не увеличивается с ростом α , что можно доказать дифференцированием

$$-\frac{dH_{\alpha}}{d\alpha}=\frac{1}{(1-\alpha)^2}\sum_{i=1}^nz_i\log\left(\frac{z_i}{p_i}\right), \text{ где } z_i=\frac{p_i^{\alpha}}{\sum_{j=1}^np_j^{\alpha}}. \quad (75)$$

Дифференциал пропорционален дивергенции Кульбака-Лернера, которая всегда не отрицательна. Это расхождение также известно как α -дивергенция.

Энтропию Реньи первого порядка называют информационной энтропией, а энтропию Реньи второго порядка – корреляционной энтропией.

Для непрерывного распределения случайной величины

$$S_{\alpha}(X)=\frac{1}{1-\alpha}\log\int p^{\alpha}(x)dx \quad (76)$$

и для квадратичной энтропии

$$S_{\alpha 2}(X)=\log\int p^2(x)dx$$

Заметим, что квадратичная энтропия не является положительной, она может быть произвольно большой отрицательной.

Реньи предложил меру дивергенции, отличную от Кульбака-Лернера

$$D_{\alpha}(f|g)=\frac{1}{\alpha-1}\log\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)^{\alpha-1}dx \quad (77)$$

Термостатистика Реньи является обобщением, включающим в себя термостатистику Гиббса как частный случай, соответствующий значению $\alpha=1$ параметра Реньи. В отличие от энтропии Гиббса–Шеннона, α -энтропия возрастает с увеличением отклонения распределения от распределения Гиббса (с ростом параметра порядка $\eta=1-\alpha$) и достигает своего максимума при максимально возможном значении $\eta_{\max}$; при этом распределение Реньи становится степенным распределением. Переход от распределения Гиббса, описывающего состояние динамического хаоса, к степенным распределениям Реньи, характерным для упорядоченных самоорганизованных систем, соответствует возрастанию “параметра порядка” η от нулевого значения при $q=1$ до $\eta_{\max}=1-q_{\min}$. При этом энтропия Гиббса–Шеннона переходит в энтропию Реньи.

Переход от обычной термостатистики Гиббса к термостатистике Реньи носит характер фазового перехода упорядочения (переход от менее к более упорядоченному состоянию) с параметром порядка η – энтропийный фазовый переход. Можно показать, что, по крайней мере в случае степенного гамильтониана, энтропия Реньи максимальна при наибольшем возможном значении параметра порядка η (при этом распределение Реньи становится степенным распределением), в то время как обычная энтропия максимальна при $\eta=0$ и убывает с ростом η . Поэтому, если в качестве статистического определения энтропии выбрать не выражение Гиббса–Шеннона, а более общую форму Реньи, то эволюция системы в более упорядоченные состояния (самоорганизация), сопровождаемая ростом термодинамической энтропии, становится предпочтительнее деградации.

При $\eta=0$ (точка фазового перехода) производная энтропии по параметру порядка η испытывает скачок – фазовый переход в более упорядоченное состояние с параметром порядка $\eta \neq 0$: естественная эволюция в направлении самоорганизации. В результате энтропийного фазового перехода система переходит в более упорядоченное состояние. В частности, если параметр порядка представляет собой приращение температуры, то этот скачок соответствует скачку теплоемкости, характерном для фазовых переходов второго рода. Здесь мы имеем дело с переходом от термостатистики Гиббса к термостатистике Реньи, соответствующей не нулевым значениям параметра порядка η . В отличие от обычного фазового перехода, условия реализации которого определяются только температурой перехода, условия реализации энтропийного перехода, по-видимому, определяются по-своему для каждой конкретной системы. Например, порог возникновения турбулентности как упорядоченной структуры определяется критическим числом Рейнольдса, а появление ячеек Бенара при тепловой конвекции – критическим числом Рэлея.

Замечание. В термостатистике Реньи в соответствии со вторым началом термодинамики (принципом возрастания энтропии) эволюция систем в упорядоченной фазе с параметром порядка $\eta > 0$ ($\alpha < 1$) идёт в направлении самоорганизации, т.е. роста $\eta \rightarrow \eta_{\max}$. Необоснованное применение энтропии Гиббса–Шеннона (т.е. частного случая энтропии Реньи с $\eta=0$) к подобным системам предсказывает противоположное направление эволюции к состоянию “тепловой смерти”, $\eta \rightarrow 0$.

Социальные, экономические и биологические системы реализуются, как правило, в упорядоченной самоорганизованной форме, в связи с чем для них характерны именно степенные и близкие к ним распределения, но не распределение Гиббса.

Зависящая от α термодинамическая энтропия в термостатистике Реньи определяется как энтропия Реньи для распределения Реньи. Максимум максиморум этой энтропии достигается при наименьшем $q=q_{\min}$, т.е. при наибольшем возможном значении параметра порядка η . Распределение Реньи при таком η переходит в степенное распределение, характерное для сложных систем. Переход от обычной термостатистики Гиббса к термостатистике Реньи носит характер фазового перехода упорядочения с параметром порядка η . Как только система перейдёт в это новое фазовое состояние термостатистики Реньи, в ней будет спонтанно развиваться самоорганизация более упорядоченного состояния, сопровождаемая ростом термодинамической энтропии. Такое поведение энтропии устраняет противоречие между вторым законом термодинамики и эволюцией системы в сторону самоорганизации.

Энтропии Реньи играют важную роль в экологии и статистике, определяя индексы разнообразия. Энтропия Реньи также важна в квантовой информации, она может быть использована в качестве меры сложности. В цепочке Гейзенберга XU энтропия Реньи была рассчитана в терминах модульных функций, зависящих от α . Они также приводят к спектру показателей фрактальной размерности.

Энтропии Реньи играют важную роль в экологии и статистике как индексы разнообразия. Энтропия Реньи также важна в квантовой информации, она может быть использована в качестве меры сложности. В цепочке Гейзенберга XU энтропия Реньи была рассчитана в терминах модулярных функций, зависящих от α . Они также приводят к спектру показателей фрактальной размерности.

Распределение Реньи отличается от распределения Гиббса и может быть представлено в виде:

$$p_i^{(R)} = \frac{1}{Z_\alpha^{(R)}} \left(1 - \beta \frac{\alpha-1}{\alpha} \Delta H_i \right)^{\frac{1}{\alpha-1}} \quad (78)$$

$$Z_{\alpha}^{(R)} = \sum_i^W \left(1 - \beta \frac{\alpha-1}{\alpha} \Delta H_i \right)^{\frac{1}{\alpha-1}}, \quad (79)$$

где $\Delta H_i = H_i - U$.

При $\alpha \rightarrow 1$ распределение $\{p_i^G\}$ переходит в каноническое распределение Гиббса, а

$$\beta \rightarrow \beta_0 = \frac{1}{k_B T_0}. \quad (80)$$

Физическая температура в термостатистике Реньи совпадает с обычной термодинамической температурой T_0 .

Важным достижением Реньи является установление формулы связи между энтропией и континуумом мультифрактальных размерностей, что позволило достаточно просто решать проблемы фрактальной параметризации как конструктивных фракталов, так и природных структур. Этот тип энтропии используется для создания индексов разнообразия в экологии и статистике, как мера сложности в квантовой информации, при расчёте спектра показателей фрактальной размерности, при анализе адронных систем, при описании дробной диффузии, многофрактальных систем, турбулентности, при анализе землетрясений.

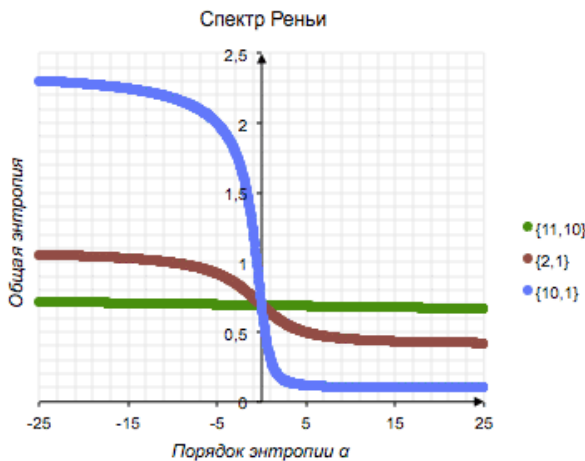


Рис. 11. Спектры Реньи для двухкомпонентной системы с различной массой.

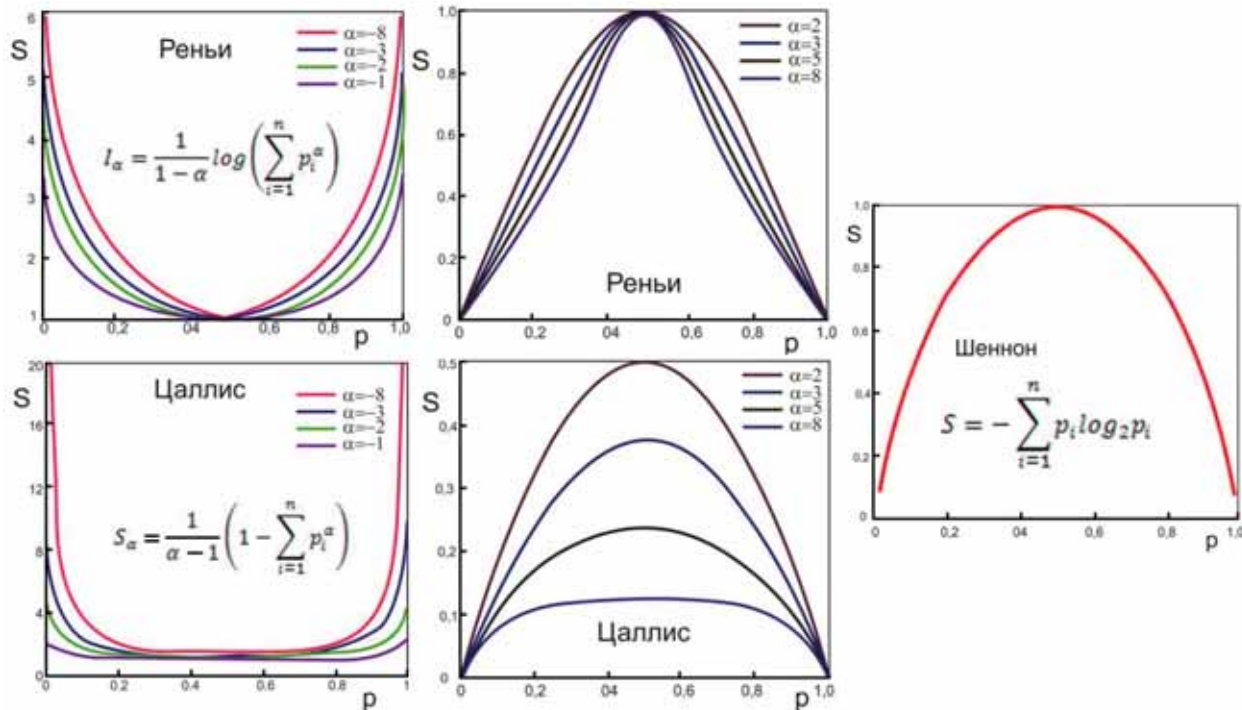


Рис. 12. Сравнение зависимостей энтропий Шеннона, Цаллиса и Реньи от вероятности события при различных значениях параметра α (как положительных, так и отрицательных).

Таким образом, переход от обычной термостатистики Гиббса к термостатистике Реньи носит характер фазового перехода упорядочения с параметром порядка η . Как только система перейдет в это новое фазовое состояние термостатистики Реньи, в ней начинает спонтанно развиваться самоорганизация более упорядоченного состояния, сопровождаемая ростом термодинамической энтропии.

При исследовании множества объектов вводится понятие спектра Реньи. Пусть имеется неоднородное множество объектов (т. е. такое, в каком они имеют разные массы) и посмотрим, как

ведёт себя общая энтропия Реньи этого множества при изменении порядка α . На рис. 12 даны примеры для множеств из двух компонентов с различными массами. Спектры имеют характерную форму, которая зависит от степени неоднородности множества: чем больше разница между крупнейшим объектом и малейшим из них, тем выше и отчетливее ступенька при переходе от отрицательных значений α к положительным. При очень больших значениях α общая энтропия Реньи стабилизируется у уровня, который равен частной шенноновской энтропии крупнейшего объекта множества. Наоборот, при стремлении α к минус бесконечности, общая энтропия стремится к уровню частной шенноновской энтропии малейшего объекта множества.

11. Энтропия и фракталы

Фрактал — математическое множество, обладающее свойством самоподобия (имеет ту же форму, что и одна или более частей) и имеющее дробную метрическую размерность (в смысле Минковского или Хаусдорфа), либо метрическую размерность, отличную от топологической, поэтому их следует отличать от прочих геометрических фигур, ограниченных конечным числом звеньев.

У понятия фрактал нет строгого определения. Поэтому слово «фрактал» не является математическим термином. Обычно так называют геометрическую фигуру, которая удовлетворяет одному или нескольким из следующих свойств:

- обладает сложной структурой (присутствуют мелкие детали при любом увеличении);
- является (приблизительно) самоподобной;
- обладает дробной хаусдорфовой (фрактальной) размерностью, которая больше топологической;
- может быть построена рекурсивными процедурами (рекурсивная – процедура, которая повторяет (вызывает) сама себя).

В рамках геометрии фракталов отношение площади поверхности фигуры к её объёму представляется в виде степенной функции

$$\frac{S_s}{V} \propto a^{-d_f} \quad (81)$$

где $0 \leq d_f \leq 3$ – показатель фрактала - дробное число, зависящее от развитости рельефа и размерности пространства лежащее где-то между 0 и 3.

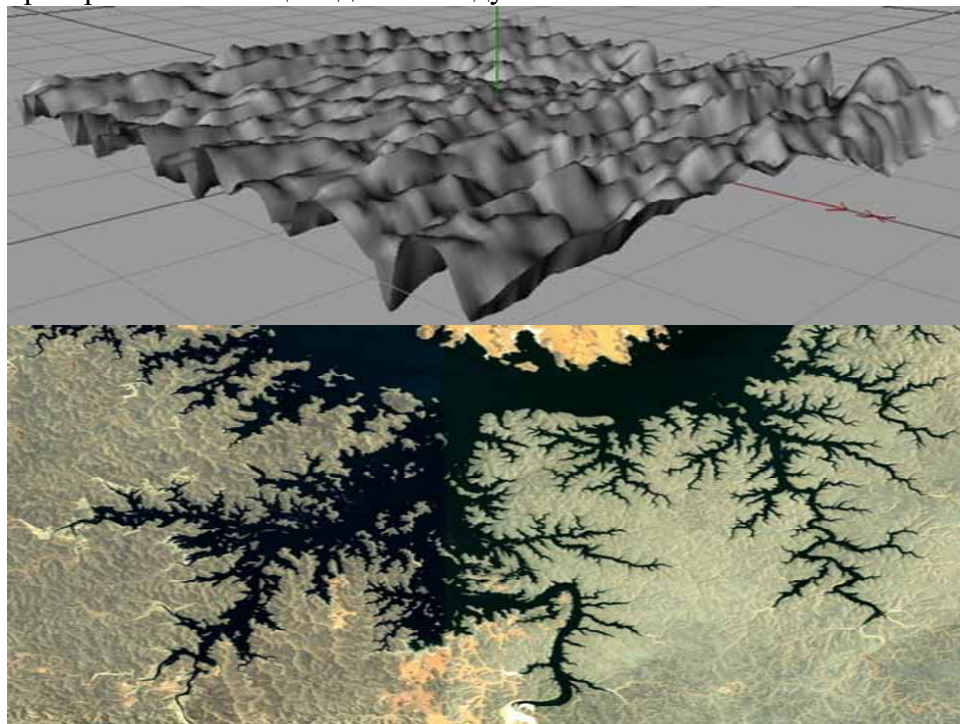


Рис.13. Фрактальная поверхность (вверху) и фрактальная пористость (внизу).

Математические фракталы обладают странными чертами: они имеют бесконечную длину, непрерывны, способны заполнить плоскость, но ни в одной точке не имеют производной. Так, прямая линия имеет размерность 1, а значительно более извилистая линия морского берега от 1.15 до 1.25. Фрактальная размерность непрерывно меняется, и, в принципе, может быть любой, однако пока

не удалось сделать эту характеристику уникальной и использовать её для идентификации фракталов. Очень многие, совершенно разные фракталы имеют одинаковую размерность.

Основной характеристикой фрактального объекта является его размерность. Фрактальная размерность, как правило, является неотрицательным нецелым числом, отражающим, некоторым образом, геометрическую сложность объекта.

Обычно под показателем фрактала понимают размерность Хаусдорфа.

Проиллюстрируем расчёт фрактальной размерности Хаусдорфа на простом примере. Пусть имеется квадрат со стороной, равной единице. Разобьём его на n равных квадратов со стороной a . Тогда размерность объекта

$$d_0 = \frac{\log n}{\log\left(\frac{1}{a}\right)} \quad (82)$$

Если все вероятности равны ($p_i = \frac{1}{n(a)}$), то энтропия достигает максимального значения и

$$d_1 = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\log_2 N(a)}{\log_2\left(\frac{1}{a}\right)}, \quad (83)$$

где N – минимальное число элементов размера a , необходимое для покрытия рассматриваемого множества.

Это выражение с точностью до основания логарифмов совпадает с формулой для размерности Хаусдорфа: $d_1 = d_0$. Она иногда называется информационной размерностью. В теории динамических систем этот предел называют фрактальной размерностью или ёмкостью аттрактора.

Пусть относительное число пар точек, расстояние между которыми не больше a , задаётся функцией $C(a)$. Если предел

$$d_2 = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\ln C(a)}{\ln\left(\frac{1}{a}\right)} \quad (84)$$

существует, то его значение d_2 называется корреляционной зависимостью.

Хаусдорфова размерность d_0 — характеризует «пористость» или плотность объекта, т.е. то, как объект заполняет собою пространство вложения. Эта важная характеристика любого объекта. Например, для стандартного канторова множества размерность Хаусдорфа равна $\ln 2 / \ln 3$, в то время как топологическая размерность равна 0.

Размерность фрактала может быть найдена разными способами в зависимости от конкретной задачи. Обычно фрактальную размерность какого либо образования измеряют косвенно — по наклону зависимости $\ln(S) = F(\ln(d))$, где S — измеряемое значение (длина, площадь, объём и т.д.), d - шаг измерения или размер сканирующего окна.

Информационная размерность d_1 играет важную роль в анализе нелинейных динамических систем, особенно при описании потери информации в ходе эволюции хаотических систем. В этом плане она связана с показателями Ляпунова и энтропией Колмогорова. Однако она важна и в других приложениях, так как является важным количественным параметром системы, характеризующим меру его хаотичности. Если со временем система изменяется и эти процессы влекут за собой существенные вариации ее информационной размерности, то это говорит о том что эти процессы могут быть связаны с ростом или диссипацией неравновесных структур, то есть переходам типа хаос ↔ порядок. Информационная размерность позволяет количественно отслеживать направление и темп эволюционных процессов, таких как самоорганизация в среде структур разных уровней или, напротив, распад организованных структур и общая хаотизация.

Корреляционная размерность d_2 определяется корреляциями между элементами, составляющими среду, т.е. вероятностью найти на расстоянии a от данного элемента множества один или несколько элементов того же множества. Эта размерность одновременно является мерой иерархического сгущивания, то есть характеризует упорядоченность внутренней структуры объекта. Ее теоретическая значимость обусловлена тесной связью с корреляционными функциями, которые определяют все физические особенности рассматриваемой среды.

Рассмотренные здесь фрактальные размерности – полезные параметры, позволяющие количественно характеризовать направление и темп процессов самоорганизации в среде и корреляционные связи между ее элементами.

Фракталы бывают абстрактными или природными структурами. В математических фракталах имеет место бесконечная масштабная иерархия самоподобных фигур, в природных объектах иерархия конечна. В реальных природных системах обнаруживаются не только пространственные, но и временные структуры. Как правило, пространственная и временная организации настолько взаимосвязаны, что обычно говорят о пространственно-временных структурах. Временные структуры обычно изучаются путём анализа временных рядов данных наблюдений, пространственные, как правило, — путём анализа двумерных изображений.

Помимо обычных фракталом, в природе встречаются мультифракталы.

Мультифрактал — комплексный фрактал. Строится не одним алгоритмом построения, а несколькими последовательно сменяющимися друг друга, каждый из них генерирует паттерн со своей фрактальной размерностью.

В рамках конструктивных фракталов мультифрактал можно определить как «нагруженный» фрактал, в котором каждому элементу a_i ставится в соответствие некий «вес» или вероятность p_i . Для количественного описания мультифракталов рассчитывается спектр размерностей, соответствующих особенностям данного мультифрактала. Понятие мультифрактала применимо как к математическим, так и природным фракталам. Признаком мультифрактальности для природных объектов является обнаружение различного скейленгового поведения на разных масштабах или наличие мультифрактального спектра размерностей.

Мультифрактал описывается обобщённой фрактальной размерностью Реньи.

Рассмотрим самоподобное множество, порождённое сегментами одинаковой длины с одним показателем скейлинга – размерность Хаусдорфа. Далее к каждому отрезку множества a_i припишем свой собственный вес p_i . Тогда энтропия Реньи

$$S_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left(\sum_i^{N(\varepsilon)} p_i^\alpha \right), \quad \sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i = 1 \quad (85)$$

Показатель фрактала вводится как предел

$$d_\alpha = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{S_\alpha(a)}{\log\left(\frac{1}{a}\right)} = \frac{1}{\alpha-1} \frac{\log\left(\sum_{i=1}^N p_i^\alpha\right)}{\log\left(\frac{1}{a}\right)} \quad (86)$$

где $S_\alpha(a)$ - энтропия Реньи.

Таким образом, мультифракталы можно описать обобщёнными фрактальными размерностями Реньи, d_α . Всю совокупность величин d_α изучаемого объекта называют спектром размерностей Реньи данного объекта. Теперь при исследовании объекта вводят вероятностную меру p_i и вычисляют энтропию Реньи, что в свою очередь позволяет находить весь мультифрактальный спектр размерностей Реньи и физически адекватно интерпретировать получаемые результаты.

Фрактальная размерность есть мера того, насколько сложной является самоподобная фигура. Грубо говоря, это мера того, сколько «физических» или «конечных» точек содержится в том или ином множестве. Фрактальная геометрия предполагает, что длина может иметь как целый, так и дробный показатель степени (фрактальная размерность). Фрактальные объекты обладают свойством самоподобия: конкретная морфологическая ситуация повторяется на разных масштабах. Фрактальная размерность представляет меру скорости добавления дополнительных деталей при переходе от одного масштаба к следующему. Поэтому, фрактальную размерность можно рассматривать и как некий квантор сложности.

Стохастическое самоподобие – одно из основных свойств природных объектов. Практически единственным надёжным методом исследования структурных характеристик таких объектов является энтропийный подход. Вычисление последовательности энтропий Реньи и применение метода огрублённых покрытий позволяет найти не только мультифрактальный спектр таких объектов, но и определить интервалы масштабы, в которых обнаруживаются различные скейлинговые параметр. Анализ таких структурных свойств представляет особый интерес, т.к.

свидетельствует о параллельном существовании в системе нескольких структурообразующих процессов.

В принципе, энтропия и фракталы – противоположные понятия: энтропия свидетельствует о беспорядке в структуре. (мера хаоса, показывающая как далеко система находится от упорядоченного, структурированного состояния и как близко – к полностью хаотичному, бесструктурному, однородному виду), а фрактал указывает на некоторый порядок в ней (особенно, если это упорядоченная, самоподобная и масштабоинвариантная структура). Но в реальности энтропия и фрактал оказываются взаимосвязанными понятиями. Энтропия – мера хаоса, но одновременно – мера структурной организованности систем, ибо максимальная энтропия конкретной системы соответствует низшей степени ее структурной организованности (наибольшая хаотичность и неупорядоченность), низкая энтропия, напротив, соответствует высокой структурной упорядоченности.

Теории фракталов и хаоса – родственные математические теории, нацеленные на описание структуры нерегулярностей реального мира. Оба этих направления, благодаря компьютерному моделированию и визуализации, обладают высокой наглядностью. Однако, если в хаосе геометрия подчинена динамике, она обслуживает и делает её наглядной, то во фракталах геометрическая визуализация является основной. Странные аттракторы хаоса оказались фракталами. Они естественным образом возникают при изучении динамических систем. Важно, что фракталы определяют структуру хаоса. Фракталы – язык, дающий описание форм хаоса, они позволяют анализировать его тонкую структуру хаоса и даже обнаружить в нём проявления порядка.

Энтропия – мера хаотичности и одновременно – мера недостающей информации о состоянии системы – с другой. Информация также характеризует степень упорядоченности структуры; структура без информации немыслима, равно как и наоборот – невозможна информация сама по себе – без носителя, структуры; информация является универсальной, первичной категорией и везде присутствует в виде структур. Поэтому, энтропия как мера хаотичности и мультифрактальность как мера структурной упорядоченности являются взаимно дополняющими понятиями.

Комплекс энтропия-фрактал-информация позволяет осуществить довольно полную диагностику сильно разупорядоченных систем: временных рядов, возникающих в результате функционирования какой-либо сложной системы, сигналы в системах связи, изображения. Энтропийно-фрактальный анализ нашёл применение в космогонии, в анализе природных объектов (например, рельефа местности), в изучении таких техногенных объектов, как наноструктуры, функциональные и конструкционные материалы и в анализе живых организмов. Энтропийный подход дал универсальный ключ как для расчетов мультифрактальных спектров размерностей систем, так и для осмысления и интерпретации результатов их фрактального анализа.

Понятие фрактала оказывается связанным с понятием хаоса. Особенно это заметно в динамике сложных систем. Если термин фрактал относится к некоторой статично геометрической конфигурации и размерности – мгновенный снимок структуры, то хаос – термин динамики, используемый для описания явлений, подобных турбулентному поведению погоды. В этом смысле хаос противоположен фракталу: хаос описывает состояние крайней непредсказуемости, возникшей в динамической системе, в то время как фрактальность описывает крайнюю иррегулярность или изрезанность, присущую геометрической конфигурации. Тем не менее, взаимосвязь между фракталом и динамической системой возможна. Она возникает в связи с тем, что некоторые фракталы (например, аттрактор систем итерированных функций) порождают хаос. Хаос – некоторое свойство детерминированных динамических систем, например, систем итерированных отображений. Случайные процессы способны генерировать фракталы. Но стохастичность отлична от детерминированного хаоса. Это совершенно другое явление.

Система итерируемых функций (СИФ, Iterated functions system) – простое средство получения фрактальных структур.

Результат применения систем итерированных функций, называемый аттрактором, всегда является фракталом. Это может быть либо компакт, включая интервал или квадрат.

12. Статистическое описание классической диффузии

Как известно, классическое броуновское движение трактуется как чисто случайный процесс, как эволюция системы без памяти.

В случае диффузии неких частиц в идеальном газе других частиц, причём концентрация первых не очень велика, то их движение рассматривается как серия случайных смещений. При этом считается, что все точки пространства одинаковы для рассматриваемых частиц и частица, находящаяся в центре окружности, может в следующий момент времени оказаться равновероятно в любой точке этой окружности. Каждая отдельная частица движется независимо от остальных частиц, причём движения одной и той же частицы в разные промежутки времени независимы друг от друга, по крайней мере до тех пор, пока эти промежутки не становятся слишком малыми.

При реализации механизма случайного блуждания средний квадрат расстояния точки нахождения в момент времени t от точки начала блуждания (дисперсия распределения) зависит от времени по закону:

$$\sigma^2 = \langle r^2 \rangle = at, \quad (87)$$

где a – константа, зависящая от коэффициента диффузии и размерности пространства.

Обычно это выражение представляют как соотношение Эйнштейна-Смолуховского:

$$\langle r^2 \rangle \sim Dt, \quad (88)$$

согласно которому средний квадрат смещения частицы линейно зависит от времени t . Здесь D – коэффициент диффузии, t — время диффузии.

13. Порядок и беспорядок в диффузии

Способы описания порядка-беспорядка важны не только в термодинамике, но и в диффузионной кинетике.

Отдельное смещение пропорционально корню из времени:

$$r \propto at^{\frac{1}{2}} = a\sqrt{t} \quad (89)$$

т.е. расстояние, которое преодолевает блуждающая частица за время t , – случайная величина, кратная $\sqrt{t}$.

В случае классической диффузии решение уравнения для 2-го закона Фика при нулевых граничных условиях и бесконечной среде) представляет собой нормально распределение концентрации диффузанта, дисперсия которого равна $2D$, а коэффициент диффузии

$$D = \frac{\langle [r(t)]^2 \rangle}{2t}. \quad (90)$$

Соотношение Эйнштейна выполняется в евклидовом пространстве любой размерности. Распределение величин диффузионных скачков является гауссовым, поэтому при аппроксимации классического блуждания прибегают к суммированию гауссовых случайных величин. При выходе из какой-либо точки эта траектория за сколь угодно малое время с вероятностью 1 бесконечно много раз возвращается в исходную точку; с течением времени t броуновская траектория обходит все точки пространства с вероятностью 1; рассматриваемая на фиксированном отрезке $[0, t]$, эта траектория имеет тенденцию достигать экстремальных значений вблизи концевых точек. Производная процесса – белый шум.

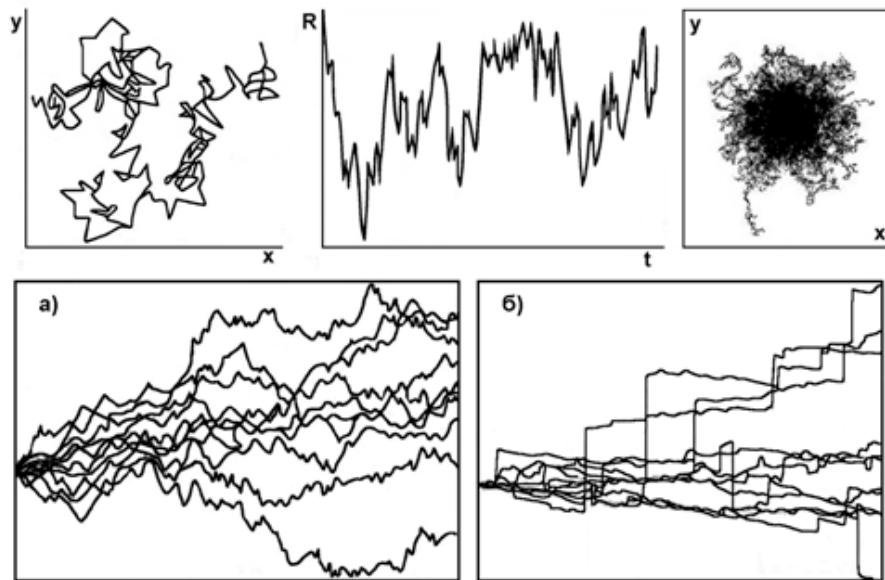


Рис.14. Случайные блуждания и полёты Леви.

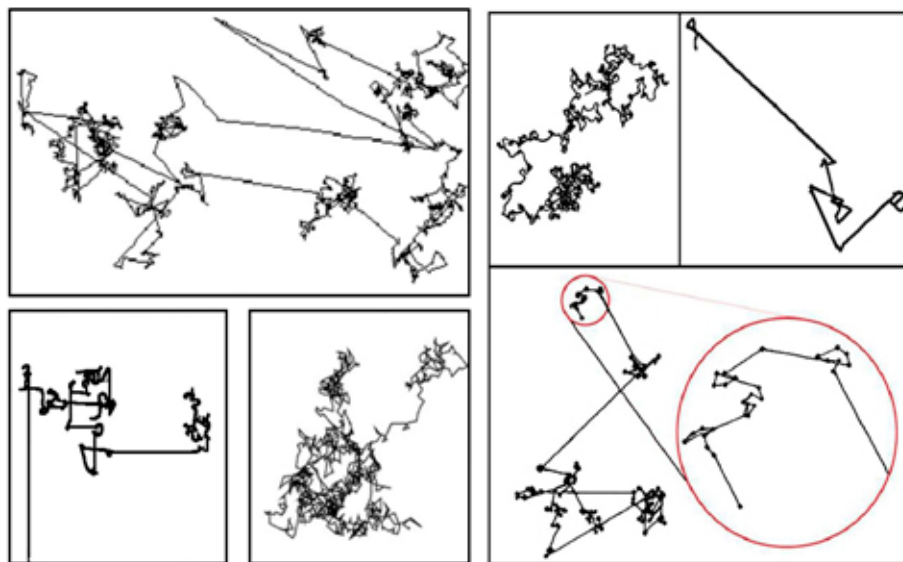


Рис.15. Образование кластеров в процессе аномальной диффузии.

Н.Винер доказал, что траектории броуновского движения почти везде непрерывны, но нигде не дифференцируемы. Поэтому броуновское движение называют винеровским процессом.

Винеровский процесс — математическая модель броуновского движения частицы в жидкости с непрерывным временем; однородный гауссов процесс с независимыми приращениями. Описывает броуновское движение частицы, совершающей беспорядочные перемещения под влиянием ударов молекул жидкости. Дисперсия σ^2 зависит от массы частицы и вязкости жидкости.

Винеровский процесс однороден во времени (правила случайной игры не меняются во время игры) и по пространству, а в ряде случаев к тому же пространственно-симметричен. **Система без памяти** — миграция зависит только от времени, и никак не зависит от предыдущего поведения системы, как это и предполагается в однородном марковском процессе: будущее процесса не зависит от прошлого при известном настоящем. Процесс классической диффузии масштабно инвариантен (самоподобен) и, следовательно, **носит фрактальный характер**. Показатель фрактала одномерной диффузии $d_f=1,5$. Фрактальная размерность двумерного броуновского движения равна $d_f=2,5$. Можно моделировать реалистичный горный ландшафт с небольшой фрактальной размерностью $d_f=2,2$ ($H_f=0,8$). Фрактальная размерность береговой линии (линии уровня) двумерного броуновского движения $=d_f-1=1,5$.

Как одномерное, так и двумерное броуновское движение недифференцируемы. Классическое броуновское движение — модель марковских случайных фракталов, для которых условная вероятность того, что $X(t_1)$ ($t_1 < t_2$), зависит только от t_1 и t_2 , а не от поведения $X(t)$ при $t < t_1$.

К броуновскому движению предъявляются два требования:

— оно должно быть автомодельным $u(x) = t^{-\gamma} u(xt^{-\gamma}, 1)$;

— должно иметь конечную дисперсию $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 u(x, t) dx < \infty$

При относительно больших временах, u изменяется как корень квадратный от времени; а распределение u по координате характеризуется быстрым экспоненциальным спаданием при росте x .

Распределение величин диффузионных скачков является гауссовым: расплывание диффузионного пакета по закону $t^{1/2}$ с экспоненциальным затуханием на бесконечности (**экспоненциальный хвост**).

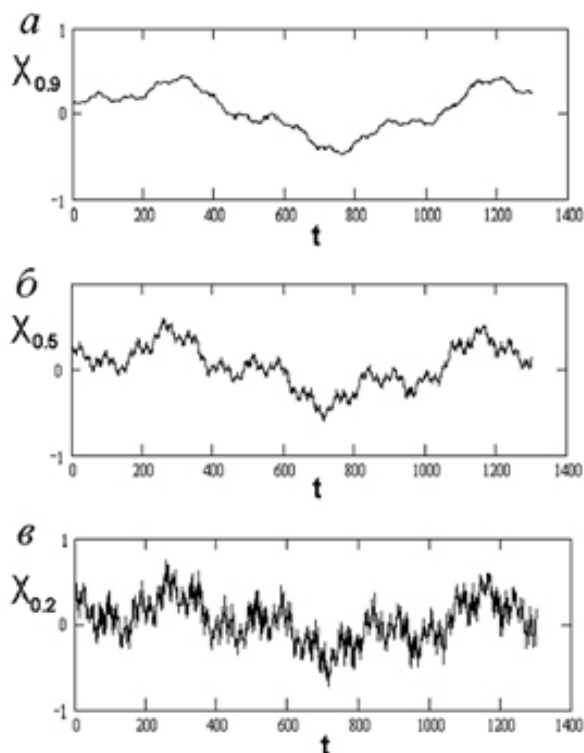
Траекториями винеровского процесса являются непрерывные, нигде не дифференцируемые линии: диффузионный путь — бесконечно изломанную, без единого плавного участка линию. Длина участка такой траектории между двумя любыми, даже близко расположенными на ней точками, бесконечна, и, следовательно, бесконечна скорость движения такой частицы. В реальных физических процессах таких траекторий не бывает, поэтому приходится искать другие подходы, некоторые из которых реализуются в моделях аномальной диффузии, фрактальной диффузии и диффузии по фракталам.

14. Фрактальное броуновское движение

Как уже упоминалось, классическое броуновское движение — процесс без памяти. Однако, математическое моделирование показало, что броуновские частицы в ходе миграции часто оказывают существенное влияние друг на друга, что свидетельствует о наличии «памяти» у броуновской частицы, или, другими словами, зависимость её статистических характеристик в будущем от всей предыстории её поведения в прошлом. Данный факт не учитывался в теории Эйнштейна-Смолуховского.

Одним из процессов, обладающих некоторой памятью является фрактальное броуновское движение (ФБД) с памятью — немарковский процесс, в котором гауссов характер расплывания диффузионного пакета по-прежнему сохраняется. Математический аппарат ФДБ используется, например, при описании турбулентной диффузии. Процесс броуновского движения частицы в вязкой среде, тоже относится к классу немарковских процессов.

Фрактальное блуждание — блуждание, при котором пробеги частицы имеют то же распределение, что и интервалы между атомами рассматриваемой среды, но независимы друг от друга (даже и в том случае, когда блуждающая частица меняет направление).



Введём обозначения: d — размерность евклидова пространства; d_f — фрактальная размерность структуры, по которой происходит диффузия; d_w — длина (размерность) случайного скачка — количественная характеристика миграции частиц по фрактальной структуре; d_s — спектральная размерность (интегрированная плотность состояний, $N(r) \sim r^{d_s/2}$).

Рис. 16. Траектории блуждания частицы при различных значениях параметра Хёрста. Графики функции Вейерштрасса: $Hf=0,9(a)$, $0,5(б)$ и $0,2(в)$.

Фрактальность означает самоподобие, при котором на разных масштабах временной ряд сохраняет свою структуру. Для доказательства самоподобия ряда рассчитывают показатель H_f , $0 < H_f < 1$, параметр Хёрста, определяющий закон возрастания размеров диффузионного пакета. Этот показатель одновременно является и фрактальной размерностью траектории аномального процесса. Он представляет собой меру самоподобия стохастического процесса и характеризует тип памяти процесса (**память временная**).

нелокальность память, немарковость, **эредитарность**).

Фрактальное броуновское движение характеризуют параметром Хёрста H_f , $0 < H_f < 1$. Фрактальное движение не является марковским процессом, за исключением случая $H_f = 0,5$. Как и в случае классического броуновского движения, ФБД недифференцируемо. Приращения ФБД обладают свойством статистического самоподобия.

Эредитарность — свойство системы или процесса сохранять память о своем прошлом. Свойством эредитарности обладают такие системы, в которых учитывается не только настоящее состояние системы или ближайшее предыдущее состояние, т. е. начальные значения параметров состояния системы, а также некоторые производные по времени, но также и все предыдущие состояния, в которых находилась данная система. В этом случае, состояние эредитарной системы зависит от предыдущей истории системы, то есть можно сказать, что система обладает памятью. Примером эредитарной системы является вещества обладающие вязкоупругими свойствами.

С помощью параметра Хёрста проводят различие между случайными процессами с независимыми приращениями (при $H_f = 0,5$, случайный ряд, классическая диффузия) — память отсутствует (приращения не зависят от предыстории), со статистически зависимыми значениями, обнаруживающими персистентное поведение ($0,5 \leq H_f < 1,5$, супердиффузия) — долговременная память, и со статистически зависимыми значениями, показывающими антиперсистентное поведение ($0 \leq H_f < 0,5$, возврат к среднему, субдиффузия) — кратковременная память. При $H_f > 1$ — суббаллистический процесс — ускорение движения частиц вдоль траекторий. Реализация одномерного ФБД с параметром H_f имеет фрактальную размерность $d_f = 2 - H_f$, двумерного $d_f = 3 - H_f$. Параметр H_f находят из закона дисперсии

$$\log \sigma_{rms}(\Delta X) = c + H \log |\Delta|, \quad (91)$$

где σ_{rms} — стандартное среднеквадратичное отклонение приращений ΔX , соответствующих интервалу Δt , c — константа.

Параметр H_f отражает степень изрезанности графика: при малых $H_f \approx 0$ — большая размерность — график сильно изрезан, а при больших $H_f \approx 1$ — плавный (но не гладким).

Показатель Херста обычно используется как характеристика временных рядов; он выступает как мера **персистентности** — склонности процесса к трендам (в отличие от классического блуждания).

Персистентность — способность состояния существовать дольше, чем процесс, создавший его.

Антиперсистентность — стремление постоянно возвращаться к исходной точке; в диффузии следствием является более медленное (чем у броуновских аналогов) рассеяние.

Экспонента Хёрста, показатель Хёрста, H_f — мера, используемая в анализе временных рядов (характеризует гладкость фрактального временного ряда), обладающих долговременной памятью. H_f уменьшается, когда задержка между двумя одинаковыми парами значений во временном ряду увеличивается. Последовательности, для которых $H_f > 0,5$, сохраняют имеющуюся тенденцию: возрастание в прошлом приводит к возрастанию в дальнейшем. При значении $H_f = 0,5$ явной тенденции не выражено, а при меньших значениях любая тенденция стремится смениться противоположной. Значения показателя Хёрста природных процессов группируются вблизи значений 0,72—0,73.

Трендоустойчивость поведения растёт с при $H_f \rightarrow 1$, т.е. к стопроцентной корреляции. При $H_f > 0,5$, направленная в определённую сторону динамика процесса в прошлом, вероятнее всего, повлечёт продолжение движения в том же направлении. Если $H_f < 0,5$, то процесс изменит направленность (ряд будет убывать); при больших временах вероятность спадает по степенному закону. $H_f = 0,5$ ($d_f = 2$) означает неопределенность (процесс не проявляет персистентности, приращения независимы, корреляция отсутствует, марковский процесс, настоящее никоим образом не определяет будущее, белый шум) — классическое броуновское движение, при больших временах вероятность спадает по экспоненциальному закону. Чем ближе H_f к 0,5, тем менее выражен тренд временного ряда. Значения показателя $0,5 < H_f < 1$ соответствуют персистентному движению, с долговременной временной положительной автокорреляцией, временные ряды имеют фрактальные свойства ($1 < d_f < 2$); при больших временах вероятность спадает по степенному закону. Значения $0 < H_f < 0,5$ соответствуют антиперсистентному движению (розовый шум). При $H_f > 1$ ($d_f > 2$) возможна долговременная (бесконечно долгая) персистентность и возникновение непериодических циклов.

Так как распределение вероятности фрактального броуновского движения можно оценить используя нормальное распределение, то верхний и нижний пределы броуновского движения можно найти, используя обратную функцию нормального распределения.

Приращения ФБД называются фрактальным гауссовым шумом, дисперсия которого $\sigma^2 = D\tau^2 H_f$. Важно, что нормальный закон распределения, которым обладают реализации ФБД, не содержит тяжёлых хвостов, характерных для распределений большинства фрактальных процессов.

В рассматриваемой здесь модели зависимость от времени ширины диффузионного пакета существенно отличается от классической (растёт со временем не по линейному закону). Поскольку сам пакет сохраняет при этом гауссову форму, такой тип диффузии называют **аномальной диффузией Гаусса**.

Дисперсия *pdf* случайного блуждания в общем виде

$$\sigma^2 = \langle r^2 \rangle \propto t^{2\nu} \quad (92)$$

где $\nu = H_f$ ($0 < H_f < 1$), H_f — параметр Хёрста, $0 < H_f \leq 1$.

Зависимость смещения отдельной частицы от времени (размывание диффузионного пакета):

$$r \propto t^\nu \quad (93)$$

Для различных механизмов диффузии, параметр Хёрста имеет разные значения:

$H_f = 0,5$ — чисто случайный процесс (в миграции — классическая (фииковская) диффузия), соответствует случайным изменениям состояний системы, происходящим с некоторым характерным масштабом δr величин элементарных скачков при переходе системы между смежными состояниями и характерной длительностью δt пребывания системы в каждом из состояний), гауссова форма диффузионного пакета, $r \propto \sqrt{t}$; $H_f > 0,5$, $0,5 < H_f \leq 1$ — ускоряющийся процесс, персистентное поведение (супердиффузия, диффузия Леви, полёты Леви, диффузия протекает быстрее классической диффузии, фрактальная диффузия; изменение состояний системы стохастически перемежаются скачками аномальной величины по сравнению с δr , при тех же характерных длительностях δt); если $H_f = 1$ — супербаллистический процесс, описывается распределением Коши, у которого дисперсия бесконечна. Обычно при супердиффузии $H_f \leq 1$, но в случае сложных процессов, например, при зависимости коэффициента диффузии от координаты, значение H_f может быть выше единицы. Важным примером является турбулентная диффузия, в которой диффузионное облако расплывается по закону $t^{1,5}$. $H_f < 0,5$, $0 \leq H_f < 0,5$ — замедляющийся процесс, антиперсистентное поведение (субдиффузия, протекающая медленнее классической, реализуется в сильно разупорядоченных, дефектных, пористых средах, диффузия по фракталам); изменения состояний стохастически перемежаются скачками с аномально длительным, значительно превосходящим δt временем пребывания в некоторых состояниях (острова стабильности) при тех же характерных величинах δr скачков).

Замечание. Фрактальное уравнение диффузии описывает растянутый гауссовский процесс, в то время как дробное уравнение диффузии отражает процесс Леви. Хотя обе модели приводят к степенному спаду хвостов, скорость спадания в этих двух моделях различна.

Рассмотрим миграцию по фрактальной среде перколяционного типа. Обозначим d_χ — хаусдорфову размерность геодезической линии на фрактальном множестве F .

$$d_\chi = (2 + \chi)/2, \quad (94)$$

где χ — индекс связности фрактального множества F , описывает класс фрактальных множеств, отождествленных между собой посредством гомеоморфных отображений, $\chi = 2(d_\chi - 1)$.

Индекс связности χ равен нулю для гладких множеств, включая евклидовы пространства при $d \geq 1$. При $d \geq 2$ значение χ определяется топологией пустот, образуемых множеством F . При этом важно, являются ли пустоты внутренними или внешними. Для фрактальных кластеров без внутренних пустот $\chi = 0$. Пусть d_s — спектральная фрактальная размерность фрактального множества F есть отношение хаусдорфовой размерности $d_f(F)$ к минимальной хаусдорфовой размерности d_0 путей, соединяющих образы точек $P_1 \in F$ и $P_2 \in F$, находящихся в общем положении, при всевозможных гомеоморфизмах f , переводящих фрактал F во фрактал F' .

$$d_s = \frac{d_f}{d_0} = \frac{2d_f}{2 + \chi} \quad (95)$$

Спектральная фрактальная размерность d_s определяет меру фрактального множества по отношению к минимальной мере путей, позволяющих обойти внутренние пустоты в F . Величина d_s смешанная характеристика фрактала, учитывающая как свойства вложения в евклидово пространство, так и внутреннее устройство фрактального множества.

Поскольку $d_\chi \leq d_f$, то $d_s \geq 1$. Для линейно связанных фракталов

$$d_f \geq d_\theta = \frac{2+\chi}{2} \geq 1, \quad d_s \geq 1 \quad (96)$$

Так как $d_f \geq d_s$, то для непрерывных самоафинных фрактальных кривых без самопересечений $\chi=0$, $d_\chi=d_f \geq 1$. Для линейно несвязанных фрактальных множеств имеет место соотношение

$$d_f < d_\theta = \frac{2+\chi}{2} < 1, \quad d_s < 1, \quad (97)$$

откуда $d_f < d_\chi$. Спектральная размерность d_s определяет число взаимно ортогональных направлений на фрактальном множестве F (эффективное дробное число степеней свободы на фрактальной геометрии).

Математическое моделирование показало, что спектральная размерность стягивающегося размерного множества на пороге протекания перколяционной среды $c \approx 1,327$, поэтому для всех $2 \leq d \leq 5$ $d_s = c \approx 1,327 \dots$. Теорема об универсальном значении позволяет рассматривать параметр $c \approx 1,327 \dots$ в качестве фундаментальной топологической константы, характеризующей геометрию перколяционного перехода в низких размерностях $2 \leq d \leq 5$. Постоянная протекания (c , константа перколяции) определяет минимальное дробное число степеней свободы, необходимое частице для достижения бесконечно удалённой точки при случайных блужданиях в эвклидовом пространстве, размерность которого лежит в интервале от 2 до 5. Множество точек, пройденное частицей, образует при этом перколирующую фрактальную сеть размерностью $d_s = c \approx 1,327 \dots$

Среднеквадратичное смещение при диффузии по фракталам

$$r(t) \propto t^{\frac{1}{2+\chi}}, \quad (98)$$

где $\chi = \chi[F]$ — индекс связности множества F .

Среднеквадратичное удаления частицы от начала координат растёт с t как

$$\langle r^2(t) \rangle = 2Dt^{2\nu} \quad (99)$$

нормированная постоянная D имеет смысл обобщённого коэффициента переноса, а показатель степени при t равен

$$2\nu = \frac{d_s}{d_f}; \quad \nu = H_f = \frac{1}{2+\chi} \quad (100)$$

Показатель 2ν — обратная хаусдорфова размерность геодезических линий на F , а именно $\nu = 1/2d_\chi$. Значение ν подчиняется сугубо индексу связности множества F и не зависит от хаусдорфовой размерности d_f . Величина ν — инвариант, параметр, характеризующий топологию пустот в F .

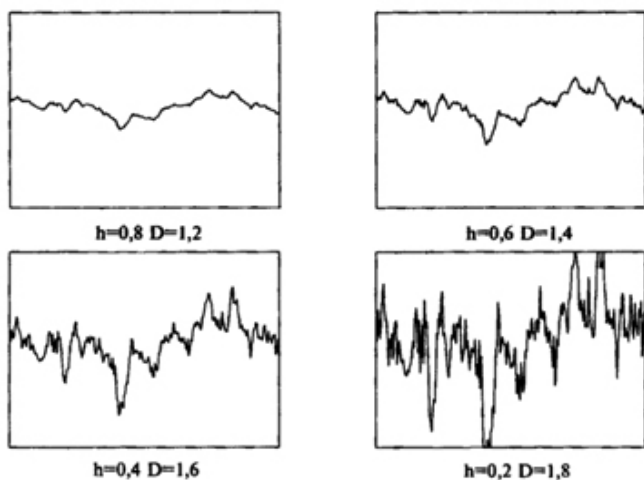
Таким образом, поведение процесса переноса на самоподобных фрактальных множествах регулируется топологическим инвариантом этого множества.

Множество F при $\chi > 0$ с необходимостью содержит внутренние пустоты, на огибание которых частица тратит значительную часть времени. Причиной задержек могут стать многократные — циклические — обходы пустот, а также блокировка частиц во внутренних тупиках. Поскольку при положительных $\chi > 0$ множество F по определению линейно связное, абсолютно все точки, лежащие на F , доступны для частиц. Пробираясь вглубь F , частица имеет шанс заблудиться в сложных переходах, обрамляющих внутренние пустоты, и в конце концов вернуться к началу своего путешествия. Никакого долгосрочного вклада в среднеквадратическое смещение $\langle r^2(t) \rangle$ такое путешествие не даст. В результате рост $\langle r^2(t) \rangle$ отстаёт от динамического времени t , что приводит к отклонению показателя ν от 1 в меньшую сторону, $\nu < 0,5$. Напротив, при $\chi < 0$ распространение частиц по F ограничено компонентами связности, при этом собственно о явлениях переноса можно говорить лишь в контексте асимптотически линейно связанных множеств, для которых хаусдорфова размерность $d_f \geq 1$. (При $d_f < 1$ множество F всюду разрывно, а понятие среднеквадратического смещения $\langle r^2(t) \rangle$ теряет естественный смысл). Асимптотически линейно связанные фракталы сочетают в себе свойства связности и несвязности; их можно представить как несвязный набор линейно связанных подмножеств. Поскольку хаусдорфова размерность каждого такого подмножества не может быть меньше 1, у частиц есть право свободно мигрировать вдоль F , оставаясь в пределах своей компоненты связности. Покидать выбранную компоненту им запрещено ввиду общей

несвязности фрактала: $\chi < 0$. Последнее условие ограничивает возможности частиц поблуждать в пространстве, и им приходится в целом более дисциплинированно удаляться от своего начального положения. На микроскопическом уровне процесс выглядит скорее как баллистический, чем диффузионный, при этом рост $\langle r^2(t) \rangle$ опережает время t , а показатель степени $\nu > 0,5$.

Рис. 17. Реализации фрактального броуновского движения при различных значениях параметра $H_f=0,2; 0,4; 0,6$ и $0,8$.

В турбулентном процессе величина $\nu=H_f$ определяет фрактальную размерность траекторий частиц в области турбулентности: $d_w=1/H_f$ ($d_w \geq 1$), где $d_w=2+\chi$. Последнее выражение устанавливает зависимость между динамическими (d_w) и структурными (χ) характеристиками процессов переноса в средах с фрактальной геометрией. Поскольку динамические траектории линейно связаны, величина d_w не может быть меньше 1. В интерпретации классической физики перенос возможен лишь на множествах, индекс связности которых $\chi \geq -1$. В зависимости от величины θ значение $d_w=2+\chi$ может превосходить размерность пространства вложения ($d=2$ для процессов переноса на плоскости). Объяснение заключается в существовании у динамической траектории (множественных) точек самопересечения, вклад которых в d_w пропорционален их кратности. При нулевой связности $\chi=0$



процесс переноса становится диффузионным: $\langle r^2(t) \rangle = 2D \cdot t^1$. Среднеквадратичное смещение частиц растёт в этом случае линейно со временем; параметры $\nu=H_f=0,5$, $d_w=2$. Последнее из равенств показывает, что мощности диффузионных траекторий достаточно для всюду плотного покрытия плоскости — свойство кривых Пеано. В евклидовых пространствах процесс предполагает гауссовы приращения величины $r(t)$.

Коротко остановимся на роли энтропии в диффузии. Броуновское движение, классический диффузионный процесс, максимизирует энтропию Больцмана-Гиббса. В обобщённом броуновском движении максимизируется скорее

энтропия Цаллиса, чем энтропия Больцмана-Гиббса. Напомним, что неаддитивная α -энтропия Цаллиса предложена как альтернатива классической энтропии для неэргодических систем). Этот процесс управляется броуновской мерой со случайным коэффициентом диффузии. Распределение этого коэффициента получается как функция α для $1 < \alpha < 3$. Такой подход применяется для описания транспорта в пористых средах.

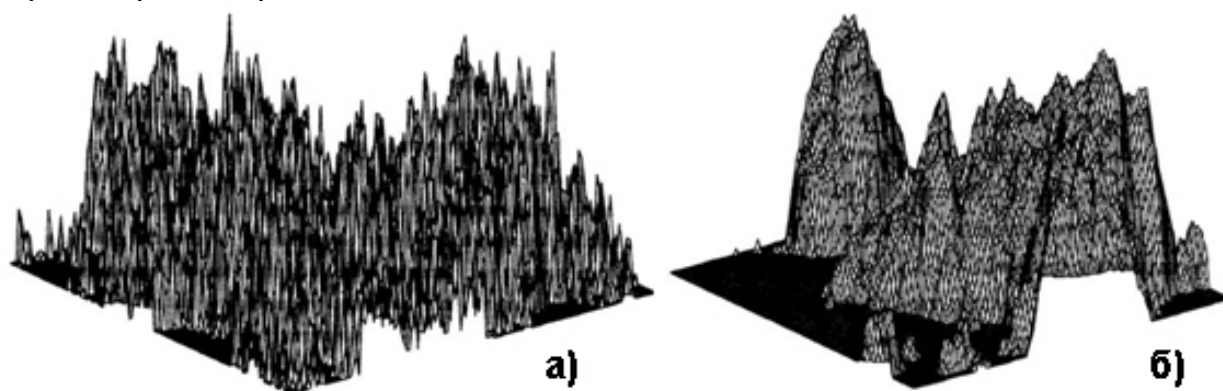


Рис. 18. Двумерная фрактальная диффузия: а - $H_f=0,2$; б - $H_f=0,8$.

Эргодичность — специальное свойство некоторых динамических систем, состоящее в том, что в процессе эволюции почти каждое состояние с определённой вероятностью проходит вблизи любого другого состояния системы. Преимущество эргодических динамических систем в том, что при достаточном времени наблюдения такие системы можно описывать статистическими методами. Например, температура газа — это мера средней энергии молекулы. Эргодическая система - система, в которой фазовые средние (математическое ожидание по пространственным рядам) совпадают с временными. Для определения параметров системы можно долго наблюдать за поведением одного её элемента, а можно за очень короткое время рассмотреть все её элементы (или достаточно много

элементов). В обоих случаях получатся одинаковые результаты, если система обладает свойством эргодичности. Эргодический случайный процесс - процесс, в котором среднее по времени, полученное усреднением на достаточно большом, в пределе бесконечном, интервале по единственной реализации, сходится с вероятностью единица к соответствующей вероятностной характеристике, полученной усреднением по множеству реализаций. Долгосрочное предсказание эргодических систем невозможно — небольшая ошибка измерений приведёт к серьёзному расхождению реальной траектории с предсказанной.

15. Распределения Леви-Парето и их применение в диффузии

В рамках классического механизма диффузии, распространение диффузанта в ходе броуновского движения в бесконечной однородной среде описывается нормальным (гауссовым) распределением, у которого все статистические моменты (в том числе — математическое ожидание и дисперсия) конечны. Однако, обнаруженные к настоящему времени многочисленные отклонения от классической диффузии (большой и несимметричный разброс данных, тяжёлые хвосты распределений, острые вершины и т.п.) требуют привлечения для своего описания более широкого класса распределений. Было обнаружено, что лучшее описание процессов аномальной диффузии даёт использование устойчивых распределений, в которых математическое ожидание не определено, а дисперсия бесконечна. Примером является устойчивое скошенное распределение Леви, описывающее широкий класс распределений, устойчивых к суммированию, но способных в некоторых случаях иметь тяжёлые хвосты и быть несимметричными.

Замечание. Крылья статистического распределения принято называть "хвостами", которые могут быть обычными (значение вероятности быстро убывает по экспоненциальному закону; пример: распределение Гаусса), но могут быть тяжёлыми (медленное спадание по степенному закону). Обычно имеется ввиду правый хвост распределения, но распределение может иметь тяжёлый левый хвост, или оба тяжёлых хвоста. К тяжёлохвостным распределениям относятся распределения Парето, логнормальное (хвост спадает медленнее, чем по экспоненте, но быстрее, чем по степенному закону), Леви, Вейбула, логгамма, логкоши и др. Распределение с толстым хвостом — это распределение вероятностей, обладающее большей асимметрией или островершинностью, чем распределение Гаусса.

Плотность вероятности при $x \rightarrow \infty$ изменяется по закону $p_x \propto x^{-(1+\alpha)}$, $\alpha > 0$, где α — параметр распределения Леви. Толстое распределение, в отличие от нормального, отклоняется от среднего на пять и больше стандартных отклонений (правило 5-сигм), и имеет меньшее максимальное значение (повышенная вероятность редких событий). Толстые распределения (все устойчивые распределения, за исключением нормального распределения) имеют "неопределённую сигму" (дисперсия не ограничена).

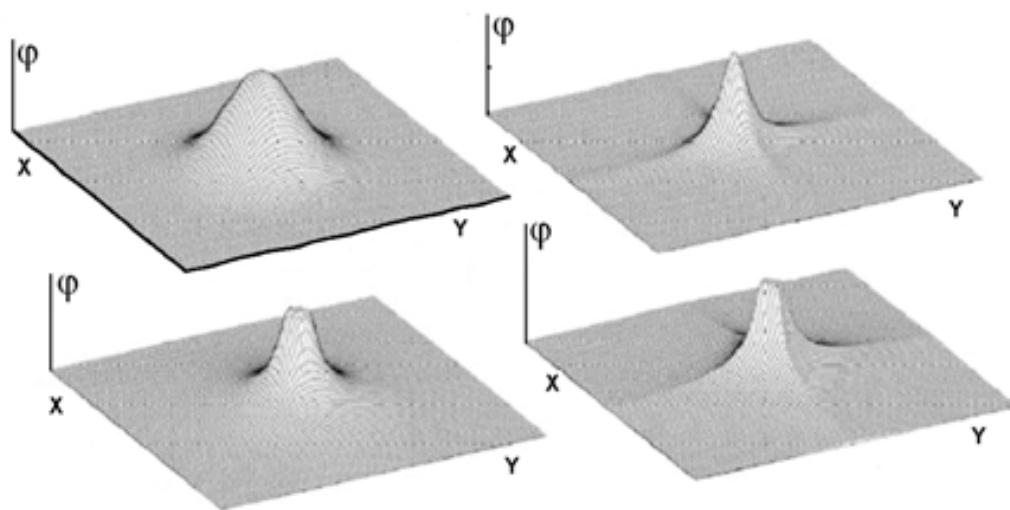


Рис. 19. Функции плотностей распределений Леви.

Устойчивое распределение — предел по распределению сумм независимых случайных величин. Например, линейная комбинация двух случайных выборок описывается тем же распределением с поправкой на среднее и на масштабирование. Семейство устойчивых распределений называют альфа-устойчивыми распределениями Леви.

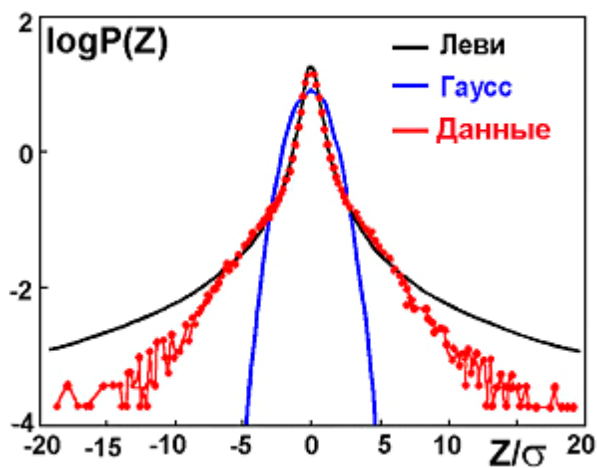


Рис. 20. Диффузия из точечного источника и её аппроксимация распределением Гаусса и Леви.

Замечание. Важность устойчивых распределений обусловлена тем, что они – "аттракторы" нормированных сумм независимых и одинаково распределённых случайных величин. Согласно классической центральной предельной теореме нормированной суммы множества случайных величин, каждая из которых имеет конечную дисперсию, стремится к нормальному распределению при росте числа переменных. Если у распределений дисперсии бесконечны, то их суммы стремятся к устойчивому распределению.

Случайная переменная X устойчива, если четыре реальных параметра α (параметр устойчивости), θ (параметр асимметрии), γ (параметр масштабирования), δ (параметр сдвига) такие, что их характеристическая функция имеет каноническую форму.

Устойчивые распределения вероятностей образуют семейство непрерывных распределений, управляемых четырьмя параметрами:

– $\alpha \in (0, 2]$ – характеристическая экспонента (параметр устойчивости), определяющий асимптотику распределения при $\alpha < 2$ (задаёт степенной закон убывания хвостов, т.е. высоту хвостов); максимальное возможное значение $\alpha = 2$, при этом возникает нормальное распределение, для которого $\gamma = \alpha^2/2$). Параметр α обратно пропорционален параметру Хёрста, т.е. $\alpha = 1/H_f$.

– $\theta \in [-1, 1]$ – параметр асимметрии (скошенность), определяющая степень асимметрии распределения: при $\theta = 0$ распределение симметрично, например, распределение Гаусса); θ имеет разные знаки для $\alpha \neq 1$ и $\alpha = 1$.



Рис. 21. Диффузия из точечного источника при различных механизмах случайного блуждания.

Параметры α и θ задают форму распределения.

Замечание. В математической статистике параметр асимметрии (*skewness*) принято обозначать β , однако при рассмотрении уравнений с дробными производными, производную по координате также обозначают β . При совместном использовании этих двух

теорий возникает изрядная путаница. Поэтому в данной книге скошенность распределения обозначена буквой θ .

– $\gamma \in [0, \infty)$ – мера дисперсии (ширины) распределения, горизонтальный масштаб распределения, $\gamma \geq 0$ (в распределении Гаусса $\sigma^2 = 2\gamma^2$);

– $\delta \mu \in \mathbb{R}(-\infty, \infty)$ – параметр местоположения (локализации, сдвига), в некоторых конкретных ситуациях совпадающий со средним значением (математическое ожидание, μ), медианой или модой.

Дополнительный параметр n – номер способа выбора параметров (часто применяются два способа параметризации, так что $n = 0$ или 1). В параметризациях $n = 0$ и $n = 1$ параметры α , θ , γ одинаковы. Различаются только величины параметра локализации δ^* . Параметр n используют как индекс. Характеристические функции всегда существуют, тогда как плотности распределений в аналитической форме известны лишь для распределений: Леви, Коши и Гаусса.

Дифференциальное распределение плотности вероятности (*pdf*) обычно аналитически не выражается (за исключением некоторых частных случаев при определённых значениях параметров). Интегральное распределение плотности вероятности (*cdf*) (за исключением некоторых случаев) не определено. Среднее μ определено при $\alpha > 1$, а в остальных случаях нет, медиана равна μ при $\theta = 0$, в других случаях аналитически не выражается. Дисперсия равна $2\gamma^2$, в остальных случаях бесконечна. Параметр асимметрии $\theta = 0$ при $\alpha = 2$, в других случаях неопределён. Радиус кривизны в моде (островершинность) равен 0 при $\alpha = 2$, в остальных случаях неопределён. Энтропия аналитически не выражается за исключением нескольких случаев). Все устойчивые распределения бесконечно

делимы, за исключением нормального распределения ($\alpha=2$) стабильные распределения островершинны и имеют тяжёлые хвосты. Устойчивое распределение может быть представлено в виде ряда Тейлора.

Устойчивые распределения определяются интервалом значений параметра $0 < \alpha \leq 2$, причём при $\alpha=2$, $\theta=0$, $\mu=0$, дисперсия $\sigma^2=1$, имеем распределение Гаусса (нормальное распределение, $H_f=0,5$), а при $\alpha=1$, $\theta=0$ – распределение Коши, с масштабным параметром γ и параметром сдвига μ ; при $\alpha=1/2$ и $\theta=1$ распределение сводится к распределению Леви с параметром масштаба γ и параметром сдвига μ ; при $\alpha=1$ и $\beta=1$ имеем распределение Ландау; при $\alpha=3/2$ и $\theta=0$ — распределение Хольцмарка с параметрами масштаба γ сдвига $\delta\mu$; при $\alpha \rightarrow 0$ и $\gamma \rightarrow 0$ распределение переходит в дельта-функцию Дирака $\delta(x-\mu)$. Если дисперсия приращений координат становится бесконечной, то в одномерном случае функция распределения смещений может быть только степенной и определяться двумя параметрами: α , и θ . При $\alpha < 1$ функция распределения приращений координат блуждающей частицы имеет не только бесконечную дисперсию, но и бесконечно большую среднюю величину. И хотя невозможно найти устойчивые средние для каждой из частиц в отдельности, средние значения плотности частиц в заданной точке пространства остаются устойчивыми переменными и имеют привычный физический смысл.

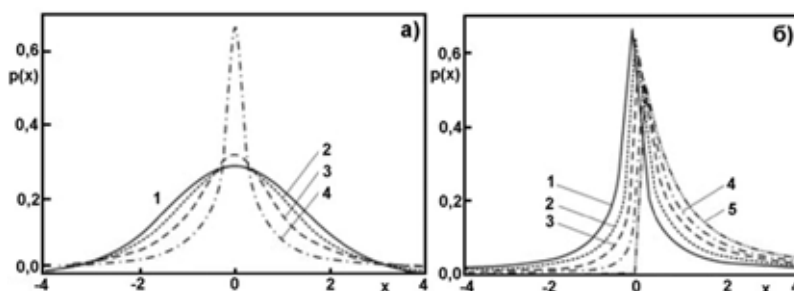


Рис. 22. Плотности устойчивых распределений: а – симметричные α -стабильные распределения, $\theta=1$, $\gamma=1$, $\delta=0$: $\alpha=2,0$ (1), 1,5 (2), 1,0 (3), 0,5 (4); б – несимметричные распределения с одинаковым масштабным фактором, $\alpha=0,5$ (1), $\gamma=1$, $\delta=0$: $\theta=0,0$ (1), 0,25 (2), 0,50 (3), 0,75 (4), 1,0 (5).

Рис. 23. Фрактальность случайных блужданий.



среднее (математическое ожидание); при $\alpha < 2$ асимметрия, как третий центральный момент, не определена (распределения вообще не имеют моментов выше первого). В случае $\theta=0$ характеристическая функция растянута в экспоненту; при $\alpha < 1$ и $\theta=1$ интервал параметров $[\delta, \infty]$. Аналитических выражений для плотностей распределения вероятности не существует (за исключение трёх случаев); среднее (и медиана) μ имеет смысл, только при $\theta=0$, в других случаях аналитически не выражается; мода $=\mu$, если $\theta=0$, в противном случае аналитически не выражается; дисперсия $\sigma^2=2\gamma^2$, если $\alpha=2$, в противном случае бесконечна; асимметрия $\theta=0$ при $\alpha=2$, в противном случае не определена; эксцесс $=0$ при $\alpha=2$, в противном случае не определён. Свойство всех стабильных распределений: для любого α стабильное pdf — одномодально и имеет колоколообразную форму; их n -ная производная имеет n нулей.

Следующие устойчивые плотности распределений представляются в элементарных функциях: – распределение Гаусса ($\alpha=2$, $\theta=0$), $N(\mu, \sigma^2)=S(2,0,\sigma/\sqrt{2}, \mu)$, все моменты конечны, среднее (параметр сдвига) μ , дисперсия $\sigma^2=2\gamma^2$;

$$p(x,2,D)=L_2^0(x)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad -\infty < x < +\infty \quad (101)$$

– распределение Коши ($\alpha=1$, $\theta=0$), $C(\gamma,\mu)=S(1,0,\gamma,\mu)$, дробные моменты порядка меньше 1, параметр сдвига μ , параметр масштабирования γ :

$$p(x,1,D)=L_1^0(x)=\frac{Dt}{\pi(D^2t^2+x^2)} \quad -\infty < x < \infty \quad (102)$$

– распределение Леви-Смирнова $\alpha=1/2$, $\theta=-1/2$, $x\geq 0$;

– α -распределение Леви с $\alpha=1/2$, $\theta=1$, Lévy (γ,μ)= $S(0,5,1,\gamma,\mu)$, Леви распределение, параметр сдвига μ , параметр масштабирования γ ;

– распределение Ландау с $\alpha=1$ и $\theta=1$;

– распределение Хольцмарка $\alpha=3/2$ и $\theta=0$ параметр сдвига μ , параметр масштабирования γ .

Симметричное распределение Леви-Парето — распределение вероятности с характеристической функцией

$$\varphi_\alpha(s)=e^{-\Gamma|s|^\alpha} \quad (103)$$

с параметром $\Gamma>0$ и показателем α ($0<\alpha<2$).

Известно и асимметричное распределение Леви с $|\theta|\leq 1$.

Замечание. распределения Леви–Парето играют среди степенных законов такую же роль, как нормальное распределение — среди распределений с конечной дисперсией: к ним сходятся распределения сумм независимо одинаково распределённых случайных величин при подходящей нормировке (обобщённая центральная предельная теорема).

Распределения Леви для $\alpha=1$ имеют вид:

$0<|\theta|<1$:

$$L_1^\theta(x)=\frac{1}{\pi}\frac{\cos(\theta\pi/2)}{[x+\sin(\theta\pi/2)]^2+[\cos(\theta\pi/2)]^2}, \quad -\infty < x < +\infty \quad (104a)$$

$\theta=\pm 1$:

$$L_1^\pm(x)=\delta(x\pm 1), \quad -\infty < x < +\infty \quad (104b)$$

Сходящиеся разложения

$0<\alpha<1$, $|\theta|\leq\alpha$:

$$L_\alpha^\theta=\frac{1}{\pi x}\sum_{n=1}^{\infty}(-x^{-\alpha})^n\frac{\Gamma(1+n\alpha)}{n!}\sin\left[\frac{n\pi}{2}(\theta-\alpha)\right], \quad x>0; \quad (105)$$

$1<\alpha\leq 2$, $|\theta|\leq 2-\alpha$:

$$L_\alpha^\theta=\frac{1}{\pi x}\sum_{n=1}^{\infty}(-x)^n\frac{\Gamma(1+n/\alpha)}{n!}\sin\left[\frac{n\pi}{2\alpha}(\theta-\alpha)\right], \quad x>0; \quad (106)$$

При $0<\alpha\leq 2$, $\beta=1$ имеет место пространственно дробная диффузия.

Определение законов распределения дается в терминах характеристических функций, т.к. за исключением нескольких значений параметров устойчивые распределения не имеют представимых в элементарных функциях плотностей и функций распределения, исключениями являются гауссово распределение, Коши и α -распределение Леви. Отсутствие моментов у всех распределений Леви-Парето значительно усложняет работу с ними.

Явный вид функции плотности вероятности симметричных распределений Леви–Парето известен только при $\alpha=1$ (распределение Коши). При $\alpha=2$ получается распределение Гаусса. Вполне асимметричное ($\theta=1$) распределение Леви–Парето при $\alpha=1/2$ имеет функцию плотности вероятности:

$$p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha^3}}e^{-\frac{1}{2x}} \quad (x>0) \quad (107)$$

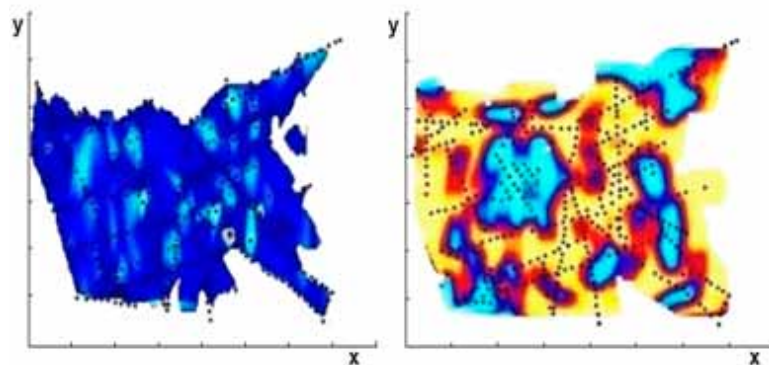


Рис. 24. К анализу детерминированного хаоса.

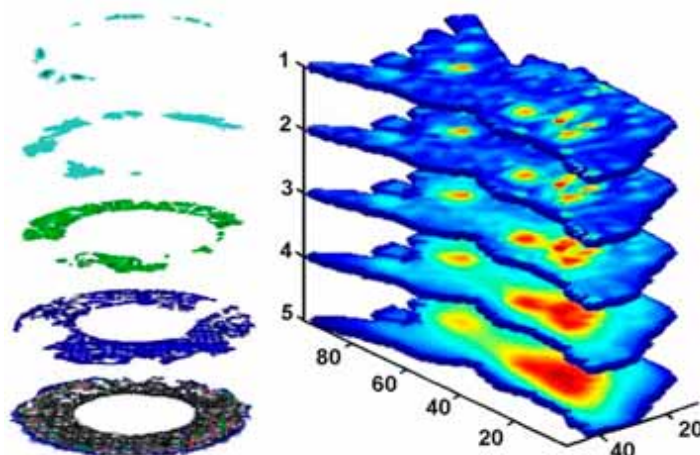


Рис. 25. Экстраполяция концентрационных полей при поиске полезных ископаемых.

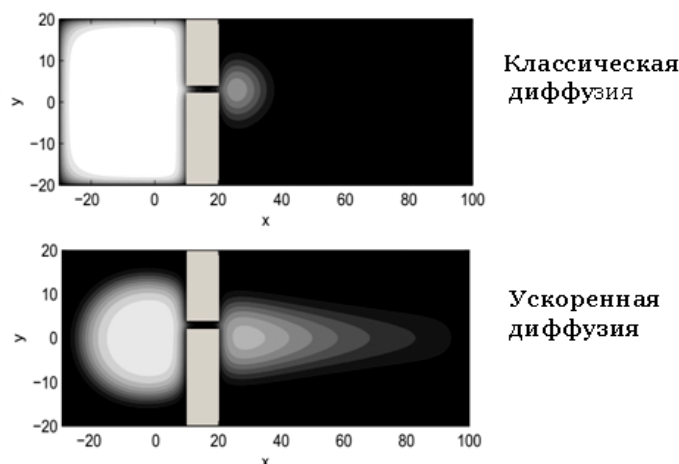


Рис. 26. Диффузия радиоактивных веществ их хранилища радиоактивных отходов.

Характерным свойством масштабно-инвариантного распределения $p(x)$ является "тяжесть" (толщина, ширина) хвоста, выражающаяся в медленном (степенном) убывании $p(x) \sim |x|^{-\alpha}$ при $x \rightarrow \infty$ ($0 < \alpha < 2$) по сравнению с быстрым (экспоненциальным) для плотности распределения Гаусса $p_G(x) \sim \exp(-x^2/2\sigma^2)$, т.е. вероятность больших флуктуаций (отклонений значения x от среднего значения) для устойчивых распределений не является пренебрежимо малой, как это имеет место для распределений $p(x)$ с конечным σ . Чем меньше α , тем тяжелее хвост. Основное свойство случайной величины с тяжёлым хвостом состоит в том, что она проявляет высокую изменчивость: выборка из такой случайной величины представляет собой большей частью относительно небольшие значения, однако также содержит и достаточное количество очень больших значений. **У распределения Коши** степенной "хвост" x^{-2} , у распределения Леви хвост: $x^{-(1+\alpha)}$. Примерами распределений с тяжёлыми хвостами являются распределения Парето, Коши, Леви и логарифмически нормальное распределение.

Анализ спадания "хвоста" распределения при больших значениях переменной показал, что при $1 < \beta < 1$ левое и правое крыло являются тяжёлыми и асимптотически описываются степенными законами:

$$S(x | \alpha, \theta, \gamma, \delta; 0) \propto \alpha \gamma^\alpha c_\alpha (1 + \theta) x^{-(\alpha+1)}, x \rightarrow \infty, \alpha \in (0, 2), \theta \in [1, -1]; \quad (108a)$$

$$S(-x | \alpha, \theta, \gamma, \delta; 0) \propto \alpha \gamma^\alpha c_\alpha (1 - \theta) x^{-(\alpha+1)}, x \rightarrow \infty, \alpha \in (0, 2), \theta \in [1, -1], \quad (108b)$$

где $c_\alpha = \sin\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) \frac{\Gamma(\alpha)}{\pi}$ константа, $\Gamma(\alpha)$ – гамма-функция.

Гамма-функция Эйлера определяется с помощью интеграла

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt \quad (109)$$

В полностью асимметричных случаях $\theta=1$ правое крыло и $\theta=-1$ левое крыло ведут себя различно. Для $\alpha \in (0, 1)$ распределение определено только для области $0 \leq x < \infty$, у него нет крыла при $x \rightarrow -\infty$.

Случайный процесс $X(t)$ с параметрами $0 < \alpha \leq 2$, $-1 \leq \theta \leq 1$ называется устойчивым симметричным (относительно μ) α -распределением Леви.

Процесс Леви (L-процесс) – однородный процесс с автомодельным одномерным распределением

$$p(x, t) = t^{-\frac{1}{\alpha}} g^{(\alpha)}\left(x t^{\frac{1}{\alpha}}\right), \quad (110)$$

где $g^{(\alpha)}(x)$ – плотность распределения.

Замечание. Законы Гаусса и Леви принадлежат к общему классу устойчивых распределений вероятностей, которые характеризуются индексом α ($0 < \alpha \leq 2$) — индекс устойчивости, характерный показатель. Для Гаусса равен $\alpha=2$, а для закона Леви $\alpha=0,5$.

α -Распределение Леви – непрерывное распределение вероятности для неотрицательной случайной переменной. Это одно из немногих устойчивых распределений; имеет функцию плотности вероятности, выраженную аналитически; закон элементарного прыжка не даёт всех конечных моментов, но обладает нормировкой. Форма распределения Леви в явном виде известна только для двух значений α : при $\alpha=1$ распределение Коши, а при $\alpha=2$ – распределение Гаусса. Обладает свойством масштабной инвариантности, для него характерно наличие медленно спадающей асимптотики (тяжёлого хвоста): сходится к степенному закону для больших значений x ; имеет место значительное количество больших флуктуаций, способных возникнуть посредством одного прыжка.

Функция плотности вероятности **симметричного распределения Леви** $x \in [\mu, \infty)$ по области $x \geq \mu$ и $\gamma > 0$ имеет вид:

$$f(x; \mu, \gamma) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} \frac{e^{-\frac{\gamma}{2(x-\mu)}}}{(x-\mu)^{\frac{3}{2}}}. \quad (111)$$

Интегральное распределение:

$$F(x; \mu, \gamma) = \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{\gamma}{2(x-\mu)}}\right) \quad (112)$$

где $\operatorname{erfc}(z)$ – дополнительная функция ошибок.

Важное свойство стандартной формы распределения Леви:

$$f(x; \mu, \gamma) dx = f(y; 0, 1) dy \quad (113)$$

где $y = (x - \mu) / \gamma$

Среднее равно ∞ , медиана $\frac{\gamma}{2(\operatorname{erfc}^{-1}(1/2))^2}$ для $\mu=0$, мода $\frac{\gamma}{3}$ для $\mu=0$, дисперсия ∞ , показатели

асимметрии и островершинности в моде не определены, энтропия $\frac{1 + 3k_e + \ln(16\pi\gamma^2)}{2}$, где k_e – константа Эйлера.

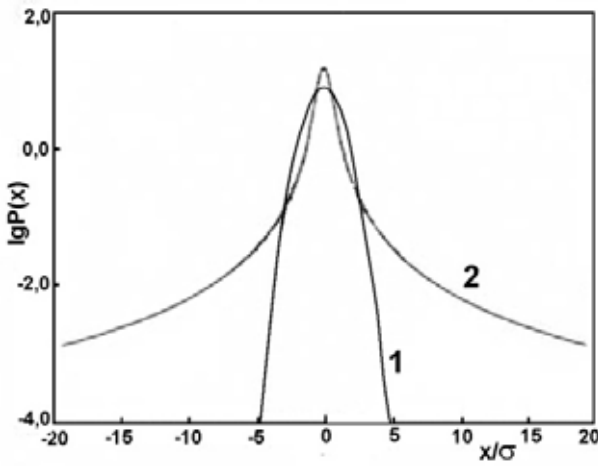


Рис. 27. Нормальное распределение (1) и распределение Леви (2). По абсциссе – величина флуктуации в единицах дисперсии, по ординате – логарифмический масштаб.

Характеристическая функция $\varphi(t; \delta, \gamma) = e^{i\delta t - \sqrt{2i\gamma}|t|}$ записывается в форме устойчивого распределения с $\alpha=1/2$ и $\beta=1$:

$$\varphi(t; \delta, \gamma) = e^{i\delta t - |t|^{1/2}} (1 - i \operatorname{sign}(t)). \quad (114)$$

При $\delta=0$, n -ый статистический момент распределения Леви:

$$m_n \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\gamma}{2x}} x^n}{x^{\frac{3}{2}}} dx$$

(115)

Интеграл расходится для всех $n>0$ так что моментов у распределения Леви не существует! Поэтому при работе с α -распределением Леви нельзя использовать математическое ожидание и дисперсию (переходят к усечённым распределениям).

Моменты генерирующей функции тогда определяются как

$$M(t; \gamma) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\gamma}{2x} + tx}}{x^{\frac{3}{2}}} dx. \quad (116)$$

Они расходятся при $t>0$ и, следовательно, не определены в районе нуля, так что функция, генерирующая моменты, не определена.

Среднее равно бесконечности; медиана $0,5\gamma \cdot (\operatorname{erfc}^{-1}(0,5))^2$ для $\delta=0$; мода $\gamma/3$ для $\delta=0$; дисперсия ∞ ; асимметрия и крутизна в моде не определены; энтропия $0,5\{1 + 3\gamma_e + \ln(16\pi\gamma^2)\}$, где γ_e – константа Эйлера.

Как у всех устойчивые распределений, кроме нормального, крылья функции плотности вероятности ведут себя как тяжёлые хвосты, падая по степенному закону:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x; \delta, \gamma) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} \frac{1}{x^{\frac{3}{2}}}. \quad (117)$$

При $\alpha<2$ ширина диффузионного пакета растёт со временем быстрее, чем $\sqrt{t}$, а именно, пропорционально $t^{1/\alpha}$ – стохастическая модель супердиффузии.

Распределения Леви используются для описания двух типов случайных блужданий: 1) случайных блужданий с непрерывным распределением временных интервалов и 2) случайных блужданий в пространствах нецелой размерности (фрактальных пространствах).

В теории вероятностей, **процесс Леви** — случайный процесс с независимыми, стационарными приращениями. Это — непрерывный во времени аналог случайного блуждания, однородный процесс с автомодельным распределением

$$p(x, t) = t^{-1/2} g^{(\alpha)}(xt^{-1/\alpha}), \quad (118)$$

где $\alpha=1/H_f$, $g(x, \alpha) \propto r^{-1-\alpha}$.

Переход от процесса Винера к процессу Леви осуществляется заменой условия конечности дисперсии требованием автомодельности. Ширина диффузионного пакета при $\alpha<2$ растёт со временем быстрее чем $\sqrt{t}$, а именно, пропорционально $t^{1/\alpha}$. При этом форма его описывается устойчивым распределением с показателем α . Эта стохастическая модель применима к описанию ускоренной диффузии.

Усечённое распределение Леви (усечение хвостов) вводится для лучшего соответствия теории с экспериментом, в основном для предотвращения ситуации, когда первый и/или второй моменты бесконечны. В усечённом распределении закон, управляющий скачками частицы тот же, что и в распределении Леви, но значения математического ожидания и дисперсии конечны, а более

высоких моментов не существует. Моменты существуют у усечённых устойчивых распределений, полученных различными способами облегчения хвостов исходной параметризации (в терминах плотности, в терминах спектрального разложения характеристической функции или меры безгранично делимого распределения). Модификации теряют свойство устойчивости, но большинство из них являются безгранично делимыми и, значит, могут быть обоснованно использованы в статистическом анализе диффузионных скачков.

Поскольку функции распределения и плотности для этих распределений не существуют в явном виде, то для повышения эффективности вычислений необходимо использовать специально адаптированные под конкретную модель и распределение алгоритмы численной аппроксимации, основанные главным образом на применении алгоритма быстрого преобразования Фурье в дискретном варианте.

Усечённые блуждания Леви похожи на обычные блуждания Леви для небольших амплитуд флуктуаций. До определенного значения флуктуации график усечённого распределения Леви совпадает с графиком обычного распределения Леви, но при больших флуктуациях опускается ниже (усекается) на 1–2 порядка величины. Статистическое распределение имеет как минимум второй момент, а в области малых флуктуаций оно ведёт себя как гауссово распределение.

16. Статистическое описание аномальной диффузии

В настоящее время экспериментально и теоретически обнаружено, что помимо классической диффузии имеет место ещё два типа диффузии: **суб-диффузия** (замедленная диффузия) и **супер-диффузия** (ускоренная диффузия).

Как уже упоминалось, основной закон классического броуновского движения в однородной среде предсказывает гауссову форму диффузионного пакета (и его расплывание по закону $t^{1/2}$). Однако в 1926 г. было обнаружено, что в условиях турбулентной среды диффузионный пакет расплывается по закону $t^{\frac{3}{2}} = t\sqrt{t}$, т.е. значительно быстрее, чем при классической диффузии. Позднее отклонения от классических законов миграции были найдены и в других системах.

$$\langle \vec{r}^2 \rangle = 2D \cdot t^m \quad (119)$$

где D – коэффициент диффузии; t – время.

При $m=1$ – имеет место классическая диффузия; если m – дробное или целое число $m \neq 1$ – аномальная диффузия; m – зависит от показателя фрактала d_f : $m=f(d_f)$. В неоднородной среде $m=2(3-d_f)$. Субдиффузия: $0 \leq m < 1$; супердиффузия: $1 < m \leq 2$; супербаллистический процесс: $m > 2$.

Класс явлений, в которых средний квадрат смещений не является линейной функцией от времени, а описывается степенным законом был назван *аномальной диффузией*, которая может быть двух типов — супердиффузия (ускоренное блуждание) и субдиффузия (замедленное блуждание).

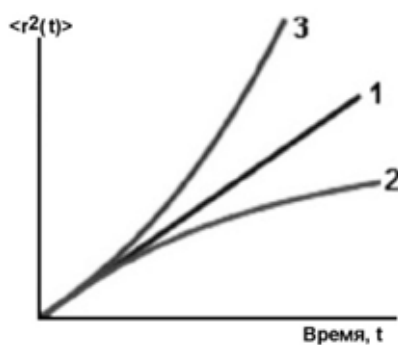


Рис. 28. Средний квадрат смещения $\langle r^2(t) \rangle$ для различных типов диффузии: 1 – нормальная диффузия; 2 – субдиффузия; 3 – супердиффузия.

Замечание. При описании диффузионных процессов значения α находятся в интервале $0 < \beta < 1$, при $\beta=1$ имеем классическое уравнение теплопроводности параболического типа; в интервале $1 < \beta < 2$ имеет место переход от диффузионного уравнения к волновому, т.е. происходит перемещение по детерминированному хаосу (частичноупорядоченным системам) от идеального беспорядка к идеальному порядку), при $\beta=2$ имеем волновое уравнение гиперболического типа.

Если миграция подчиняется распределению Леви, то плотность распределения расстояний, пройденных частицей при больших r уменьшается по степенному закону (а не по экспоненте, как это имеет место при распределении Гаусса):

$$p(r) \sim |r|^{-(d+\alpha)} \text{ при } |r| \rightarrow \infty, \quad (120)$$

где d — размерность пространства, $0 < \alpha < 2$.

При $\alpha=1$ имеем d -мерное распределение Коши (дисперсия бесконечна).

$$p(r, \alpha) \propto r^{-d-\alpha} \quad (121)$$

В случае одномерной диффузии

$$p(r) \propto r^{-1-\alpha} \quad (122)$$

Дисперсия распределения определяется выражением

$$\sigma^2 = \langle r^2 \rangle \propto t^{2\nu} = t^{\frac{2\beta}{\alpha}}, \quad (123)$$

где $\nu = H_f$ ($0 < \nu < 1$), $\nu = \beta/\alpha$, α — параметр распределения Леви и одновременно **степень производной по пространству** в уравнении диффузии, β — **степень производной по времени** в уравнении диффузии.

Ширина диффузионного пакета растёт пропорционально $t^\nu = t^{\beta/\alpha}$. При $\beta < 2\alpha$ — субдиффузионный процесс, при $\beta > 2\alpha$ — супердиффузионный, при $\beta = 2\alpha$ — нормальный режим и при $\beta = \alpha$, $\alpha < 2$ — квазинормальный режим.

если $\alpha = 2$ то $\langle r^2 \rangle \propto t^\beta$

если $\beta = 1$, то $\langle r^2 \rangle \propto t^{2/\alpha}$

Дисперсия конечна при $\alpha = 2$ и бесконечна при $\alpha \neq 2$ при любом β . Ширина диффузионного пакета растёт пропорционально $t^{\beta/\alpha}$. При $\beta < 2\alpha$ имеет место субдиффузионный режим, при $\beta > 2\alpha$ супердиффузионный, при $\beta = 2\alpha$ — нормальный режим, а при $\alpha < 2$ — квазинормальный режим. Траектории подчиненного Леви-движения характеризуется скачками (разрывами) не только вдоль координатных осей, но и вдоль оси времени, застревая в ловушках. Распределение времени пребывания в них имеет не экспоненциальный, а обратно-степенной вид, что свидетельствует о немарковском процессе (процессе с памятью).

Дисперсия конечна при $\alpha = 2$ и бесконечна при $\alpha \neq 2$ при любом β . Ширина диффузионного пакета растёт пропорционально $t^{\beta/\alpha}$. При $\beta < 2\alpha$ имеет место субдиффузионный режим, при $\beta > 2\alpha$ супердиффузионный, при $\beta = 2\alpha$ — нормальный режим, а при $\alpha < 2$ — квазинормальный режим. Траектории подчиненного Леви-движения характеризуется скачками (разрывами) не только вдоль координатных осей, но и вдоль оси времени, застревая в ловушках. Распределение времени пребывания в них имеет не экспоненциальный, а обратно-степенной вид, что свидетельствует о немарковском процессе (процессе с памятью). При $\alpha = 2$, $\beta = 1$ обобщённое уравнение диффузии описывает движение Броуна, а при $\alpha < 1$, $\beta = 1$ — движение Леви, отличающееся от броуновского многочисленными разрывами траектории вдоль оси x . До тех пор производная по x имела целый (второй) порядок разрыва, разрывов не было (существовали только изломы), порядок производной стал дробным — появились разрывы. Распределение скачков координаты в этих разрывах степенное, поэтому разрывы видны на разных масштабах. Процесс, в котором диффузионный пакет расширяется быстрее, чем в нормальном случае, т.е. пропорционально t^ν с $\nu > 0,5$, принадлежит классу супердиффузионных. Превращение первой производной ($\beta = 1$) производной по времени в дробную ($\beta < 1$) наделяет траекторию разрывами вдоль оси времени (частица замирает: время идёт, а она не движется). При $\alpha < 1$, $\beta < 1$ вместо траектории имеют место сгустки точек — кластеры, разделённые между собой областями перелётов и пребывания в ловушках. Распределение времени пребывания в ловушке в асимптотике приобретает вид распределения Леви. Параметр α ($1 < \alpha < 2$) связан с фрактальной структурой среды. Для сред с фрактальной размерностью $1 < d_f < 2$ $\alpha \approx 2 - d_f$. Конкуренция между фрактальностью среды и её памятью и определяет конкретный тип аномальной диффузии.

С физической точки зрения, определённая таким образом дисперсия характеризует объём пространства, который посетила частица при своём блуждании. При $\nu = 0,5$ — классическая (гауссова) миграция, дисперсия конечна, при $\nu \neq 0,5$ — дисперсия бесконечна.

Помимо распределения длин скачков, вводится распределение времён полёта частицы. В случае постоянной скорости случайного блуждания с вероятностью совершения полёта длиной l при условии, что полет был длительностью t , плотность вероятности того, что время полёта частицы равна t , имеем

$$\psi(t) \propto t^{-1-\alpha} \quad (124)$$

Вид формул для расчёта зависимостей дисперсии распределения по временам зависит от параметра α :

$$\langle r^2(t) \rangle \propto \begin{cases} t^2 & 0 < \alpha < 1 \\ t^2 / \ln t & \alpha = 1 \\ t^{3-\alpha} & 1 < \alpha < 2 \\ t \ln t & \alpha = 2 \\ t & \alpha > 2 \end{cases} \quad (125)$$

В первом случае среднее время полёта t бесконечно, во втором имеем логарифмическое расхождение, в третьем случае — среднее время конечно, в четвёртом — логарифмически расходится t^2 , в последнем случае среднее t^2 конечно. Возможны и другие зависимости.

Для инерционного пробега турбулентного потока для частицы движущейся со скоростью $v \sim R^{1/3}$ на расстояние R , зависимости дисперсий распределений пройденных расстояний от времени при некоторых значениях параметра α имеют вид

$$\langle R^2(t) \rangle \propto \begin{cases} t^3 & \alpha < 1/3 \\ t^2 + \frac{3}{2}(1-\alpha) & 1/3 < \alpha < 5/3 \\ t & \alpha > 5/3 \end{cases} \quad (126)$$

Очевидно, что более большие пробеги имеют частицы, обладающие большой энергией, и, следовательно, большей скоростью.

Распределения Леви-Парето используются для описания полетов Леви.

Полет Леви — случайное блуждание (марковский статистический процесс), в котором длина скачка изменяется ступенчато, миграция изотропна, направление скачков изменяется случайным образом, а распределение вероятностей — частный случай распределения Парето — характеризуется тяжёлыми хвостами (спад по степенному закону $t^{-1-\alpha}$, $0 < \alpha < 2$). Определяется как скачок в пространстве с размерностью больше 1, причём скачок осуществляется изотропно в случайных направлениях.

Полёт Леви — инструмент описания аномальных стохастических процессов. Дисперсия бесконечна (возможны скачки большой длины), длины скачков самоподобны на всех уровнях (короткие скачки перемежаются длинными полётами, а средняя длина скачка зависит от фрактальности системы ($\alpha = d_f$, для классического блуждания $d_f = 2$). Термин полёт Леви иногда распространяют и на случайное блуждание происходящее на дискретной сетке, а не в непрерывном пространстве. Плотности вероятности для полётов Леви моделируют, используя обобщённое уравнение Фоккера-Планка с дробной производной по координате.

Особенности движения Леви:

- дисперсия пространственного распределения бесконечна и не может служить характеристикой ширины диффузионного пакета;
- ширина диффузионного пакета (определяемая, например, по ширине на полувысоте или медианой) растёт со временем пропорционально $t^{1/2}$ — быстрее, чем в случае классической диффузии.
- траектории частиц характеризуются разрывами первого рода (полётами Леви);

Эти признаки позволяют отнести Леви-движение к **супердиффузии**. Большие скачки обусловлены наличием больших пустот во всех масштабах, что дает основание говорить о фрактальной структуре среды.

Понятие полетов Леви используют в теории хаоса, при моделировании случайных или псевдослучайных природных явлений (например, полёта альбатроса, сочетающего длинные и короткие траектории). Примеры включают в себя анализ данных о землетрясениях, финансовая математика, криптография, анализ сигналов, турбулентное движение, а также множество применений в астрономии, биологии и физике. Отсутствие второго момента распределения Леви предполагает неограниченность флуктуаций. В природе таких флуктуаций нет; для интерпретации реальных случайных процессов используют усеченные распределения Леви. Блуждание в потенциальном ландшафте даёт усеченное распределение Леви.

17. Уравнения диффузии с дробными производными

Детальное изучение процессов случайного блуждания обнаружило многочисленные отклонения экспериментальных распределений от нормального. Для адекватного описания реальных процессов пришлось обратиться к широкому классу устойчивых распределений (включающих как частный случай распределение Гаусса), в том числе — к распределению Леви. Работа с устойчивыми распределениями немедленно потребовала модернизации диффузионных уравнений (Фоккера-Планка и Фика), которая состояла в замене первой производной по времени на производную β , а вторую производную по координате на α (α и β могут быть, как дробными, так и целыми; они связаны с показателем ν в дисперсии случайного блуждания, параметрами распределения Леви и показателем фрактала). Такой подход позволил учесть нелокальность в пространстве и эффекты памяти при временной эволюции системы.

Комбинированное уравнение, учитывающее, как классическую, так и аномальную диффузию, записывается в виде

$$\frac{\partial^\beta u}{\partial t^\beta} = -D_\alpha (-\Delta)^{\alpha/2} u(x, t) \quad (127)$$

Здесь размерность каждого слагаемого $L^{-3}T^\beta$, а параметр D_α , имеющий размерность $L^\alpha T^\beta$, является коэффициентом диффузии только при $\alpha=2, \beta=1$.

Решение приведённого выше уравнения ищется в виде

$$u(x, t) = t^{-\frac{d}{2}} g(xt^{-\frac{1}{\alpha}}, \alpha), \quad (128)$$

где при $r \rightarrow \infty$, $g(x, \alpha) \propto r^{-d-\alpha}$, d — размерность пространства.

При одномерной диффузии

$$p(x, t) = t^{-1/2} g^{(\alpha)}(xt^{-1/\alpha}) \text{ и } g(x, \alpha) \propto r^{-1-\alpha} \quad (129)$$

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial^{2\alpha/2}}{\partial (x^2)^{\alpha/2}} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \quad (130)$$

В случае одномерной диффузии

$$\frac{\partial^\beta u}{\partial t^\beta} = D_\alpha \frac{\partial^\alpha u}{\partial x^\alpha}, \quad \alpha \in (0, 2], \beta \in (0, 2], -\infty < x < +\infty \quad (131)$$

где α совпадает с индексом стабильности α в распределении Леви, и $\beta = \alpha\nu$ — порядки производных (как целые, так и дробные).

Размерность каждого слагаемого в этом уравнении $L^{-3}T^\beta$, а параметр D_α , имеющий размерность $L^{-\alpha}T^\beta$, является коэффициентом диффузии только при $\alpha=2, \beta=1$.

Это уравнение способно воспроизвести основные аспекты аномального переноса, включая негауссовый автомоделный характер *pdf* перемещения частиц и аномальное масштабирование. В большинстве случаев оно не может быть решено точно; его решают численно или анализируют различного типа асимптотики. Уравнение решают при различных начальных и граничных условиях. Эти решения определяются реальными параметрами α, θ, β , которые всегда ограничены как $0 < \alpha \leq 2$, $|\theta| \leq \min\{\alpha, 2-\alpha\}$, $0 < \beta \leq 2$. $\nu = \beta/\alpha$, поэтому в случае $\alpha=2$ при $\nu=0,5, \beta=1$ имеем параболическое (диффузионное), а при $\nu=1, \beta=2$ — гиперболическое (волновое) уравнение.

Здесь производная по координате — пространственная производная Рисса-Феллера порядка $\alpha \in (0, 2]$ и асимметрией (*skewness*) θ ; а дробная производная по времени порядка $\beta \in (0, 2]$ (в смысле Капуто или Римана-Лиувилля). Эти дробные производные есть интегро-дифференциальные операторы.

Решения обсуждаемого уравнения трудоемки и требуют большого объёма выкладок. Небольшой объём учебника не позволяет привести их здесь. Всё же укажем, что решение задачи Коши может быть представлено в виде

$$G_{\alpha, \beta}^\theta(x, t) = t^{-\nu} K_{\alpha, \beta}^\theta(x/t^\nu), \quad (132)$$

где $\nu = \beta/\alpha$, $K_{\alpha, \beta}^\theta$ — редуцированная функция Грина, выражаемая через *pdf* Леви.

Частные случаи уравнения диффузии с дробными пространственно-временными производными:

$\alpha=2, \beta=1$ — классическая диффузия, дисперсия конечна;

$0 < \alpha \leq 2, \beta = 1$ — пространственно-дробная диффузия;
 $\alpha = 2, 0 < \beta \leq 2, \beta \neq 1$ — время-дробная диффузия;
 $0 < \alpha = \beta \leq 2$ — нейтрально-дробная диффузия;
 Дисперсия при $\alpha \neq 2$ бесконечна при любых β .

18. Феноменологическое описание нормальной и аномальной диффузии

В модели случайного блуждания частиц (классическая диффузия) среда однородна, а её стохастические свойства проявляются в выборе функции распределения приращений координат блуждающей частицы. Если они происходят через одинаковые промежутки времени и функция приращений имеет конечную дисперсию, изменение со временем плотности пространственного распределения частиц описывается дифференциальное уравнение 2-го порядка (закон Фика):

$$\frac{\partial p(x)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \quad (133)$$

где $p(x, t)dx$ — вероятность того, что блуждающая частица в момент времени t окажется в элементе dx рассматриваемого пространства ($p(x, t)$ — плотность распределения).

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{x-\mu}{2\sigma^2}\right\}, \quad (134)$$

где μ — первый начальный момент распределения (математическое ожидание, среднее арифметическое).

Нормальные распределения образуют масштабно-сдвиговое семейство. При этом параметром масштаба является $1/\sigma$, а параметром сдвига, μ/σ .

Отметим три особенности этого решения:

— оно однородно:

$$p(x, t^1 + t^2) = \int p(x - x', t^1) p(x', t^2) dx', \quad (135)$$

— автомодельно:

$$p(x, t) = t^{-\frac{d}{\alpha}} g\left(xt^{\frac{1}{\alpha}}\right), \alpha > 2 \quad (136)$$

— обладает конечной дисперсией: $\sigma^2 = M_2 = \int |x|^2 p(x, t) dx < \infty$ (и вообще всеми статистическими моментами закона прыжка).

Распределение величин диффузионных скачков является гауссовым: расплывание диффузионного пакета по закону $t^{1/2}$ с экспоненциальным затуханием на бесконечности (экспоненциальные хвосты).

Таким образом, броуновское движение — однородный процесс с переходной плотностью $p(x, t)$, являющейся фундаментальным решением параболического дифференциального уравнения.

Для описания процессов аномальной диффузии предложено несколько подходов, использующих переменные коэффициенты диффузии, корреляции дробного порядка, дробные лапласианы, скачкообразные блуждания, обобщения уравнений Ланжевена, Фоккера—Планка и др. Наилучшие результаты дали уравнения дробных производных.

Рассмотрим теперь особенности использования уравнений с дробными производными для описания основных режимов диффузии: субдиффузии и супердиффузии.

Детальное изучение процессов случайного блуждания обнаружило многочисленные отклонения экспериментальных распределений от нормального. Для адекватного описания реальных процессов пришлось обратиться к широкому классу устойчивых распределений (включающих как частный случай распределение Гаусса), в том числе — к распределению Леви. Работа с устойчивыми распределениями немедленно потребовала модернизации диффузионных уравнений (Фоккера—Планка и Фика), которая состояла в замене первой производной по времени на производную β , а вторую производную по координате на α (α и β могут быть, как дробными, так и целыми; они связаны с показателем ν в дисперсии случайного блуждания, параметрами распределения Леви и

показателем фрактала). Такой подход позволил учесть нелокальность в пространстве и эффекты памяти при временной эволюции системы.

Математические модели процессов аномальной диффузии подразделяются на два вида: "*continuous time random walks*" (CTRW) и модели, построенные на основе математического аппарата дробного интегродифференцирования. Математические модели процессов с аномальным режимом строятся на базе уравнения по времени и/или по пространству. В зависимости от характера процесса используют дробные производные Римана-Лиувилля либо дробные производные Герасимова-Капуто.

Рассмотрим применение дифференциальных уравнений с дробными производными для описания процессов аномальной диффузии.

Комбинированное уравнение, учитывающее, как классическую, так и аномальную диффузию, записывается в виде

$$\frac{\partial^\beta u}{\partial t^\beta} = -D_\alpha (-\Delta)^{\alpha/2} u(x, t) \quad (137)$$

Здесь размерность каждого слагаемого $L^{-3}T^\beta$, а параметр D_α , имеющий размерность $L^\alpha T^\beta$, является коэффициентом диффузии только при $\alpha=2, \beta=1$.

Решение приведённого выше уравнения ищется в виде

$$u(x, t) = t^{-\frac{d}{2}} g(xt^{-\frac{1}{\alpha}}, \alpha), \quad (138)$$

где при $r \rightarrow \infty$, $g(x, \alpha) \propto r^{-d-\alpha}$, d — размерность пространства.

При одномерной диффузии

$$p(x, t) = t^{-1/2} g^{(\alpha)}(xt^{-1/\alpha}) \text{ и } g(x, \alpha) \propto r^{-1-\alpha} \quad (139)$$

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial^{2\alpha/2}}{\partial (x^2)^{\alpha/2}} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \quad (140)$$

В случае одномерной диффузии

$$\frac{\partial^\beta u}{\partial t^\beta} = D_\alpha \frac{\partial^\alpha u}{\partial x^\alpha}, \quad \alpha \in (0, 2], \beta \in (0, 2], -\infty < x < +\infty \quad (141)$$

где α совпадает с индексом стабильности α в распределении Леви, и $\beta = \alpha \nu$ — порядки производных (как целые, так и дробные).

Размерность каждого слагаемого в этом уравнении $L^{-3}T^\beta$, а параметр D_α , имеющий размерность $L^{-\alpha}T^\beta$, является коэффициентом диффузии только при $\alpha=2, \beta=1$.

Это уравнение способно воспроизвести основные аспекты аномального переноса, включая негауссовый автомодельный характер *pdf* перемещения частиц и аномальное масштабирование. В большинстве случаев оно не может быть решено точно; его решают численно или анализируют различного типа асимптотики. Уравнение решают при различных начальных и граничных условиях. Эти решения определяются реальными параметрами α, θ, β , которые всегда ограничены как $0 < \alpha \leq 2$, $|\theta| \leq \min\{\alpha, 2-\alpha\}$, $0 < \beta \leq 2$. $\nu = \beta/\alpha$, поэтому в случае $\alpha=2$ при $\nu=0,5, \beta=1$ имеем параболическое (диффузионное), а при $\nu=1, \beta=2$ — гиперболическое (волновое) уравнение.

Здесь производная по координате — пространственная производная Рисса-Феллера порядка $\alpha \in (0, 2]$ и асимметрией (*skewness*) θ ; а дробная производная по времени порядка $\beta \in (0, 2]$ (в смысле Капуто или Римана-Лиувилля). Эти дробные производные есть интегро-дифференциальные операторы.

Решение задачи Коши может быть представлено в виде

$$G_{\alpha, \beta}^\theta(x, t) = t^{-\nu} K_{\alpha, \beta}^\theta(x/t^\nu), \quad (142)$$

где $\nu = \beta/\alpha$, $K_{\alpha, \beta}^\theta$ — редуцированная функция Грина, выражаемая через *pdf* Леви.

Частные случаи уравнения диффузии с дробными пространственно-временными производными:

$\alpha=2, \beta=1$ — классическая диффузия, дисперсия конечна;

$0 < \alpha \leq 2, \beta=1$ — пространственно-дробная диффузия;

$\alpha=2, 0 < \beta \leq 2, \beta \neq 1$ — время-дробная диффузия;

$0 < \alpha = \beta \leq 2$ — нейтрально-дробная диффузия;

Дисперсия при $\alpha \neq 2$ бесконечна при любых β .

Замечание. Решение нейтрального дробного уравнения можно интерпретировать как затухающую волну с постоянной скоростью распространения, т.е. наследуются некоторые черты волнового уравнения (например, постоянная фазовая скорость затухающих волн). С другой стороны, первое фундаментальное решение одномерного нейтрального дробного уравнения — свободно развивающийся во времени и пространстве процесс, т.е. диффузия (особенно заметная по скорости производства энтропии). Имеет место дуализм между волновым и диффузионным распространением фронтов.

Полученные решения демонстрируют, что ширина диффузионного пакета растет пропорционально $t^{\nu} = t^{\beta/\alpha}$. При $\beta < 2\alpha$ — субдиффузионный процесс, при $\beta > 2\alpha$ — супердиффузионный, при $\beta = 2\alpha$ — нормальный режим и при $\beta = \alpha$, $\alpha < 2$ — квазинормальный режим.

В классической модели диффузии дисперсия длины пробега является конечной величиной, что означает наличие в среде характерного масштаба. Если приращения координат происходят через одинаковые промежутки времени и функция приращений имеет конечную дисперсию, изменение со временем плотности пространственного распределения частиц описывается классическим уравнением диффузии, а крылья распределения спадают по экспоненциальному закону.

Как уже упоминалось, в классической диффузии закон прыжка достаточно прост — частица способна совершить прыжок в любую точку некоторого объёма, причём величина скачка фиксирована: частица перемещается с одного местоположения в соседнее. При супердиффузии прыжок может быть большим: частица пролетает несколько смежных местоположений. Возможны и ситуации, когда длина скачка равна нулю (частица в ловушке) — субдиффузия.

Замечание. Решение нейтрального дробного уравнения можно интерпретировать как затухающую волну с постоянной скоростью распространения, т.е. наследуются некоторые черты волнового уравнения (например, постоянная фазовая скорость затухающих волн). С другой стороны, первое фундаментальное решение одномерного нейтрального дробного уравнения — свободно развивающийся во времени и пространстве процесс, т.е. диффузия (особенно заметная по скорости производства энтропии). Имеет место дуализм между волновым и диффузионным распространением фронтов.

Появление в уравнении диффузии двух новых параметров — дробных порядков пространственной (α) и временной (β) производных — значительно расширило семейство решений диффузионного уравнения, сохранив формально его вид. Важнейшим качеством новых решений — степенной закон их асимптотик. Интегродифференциальный характер дробных производных операторов позволяет описать пространственно-временные нелокальные процессы переноса, в которых поток в данной точке зависит не только от поведения функции в окрестности рассматриваемой точки x , но и от принимаемых ею значений на всем исследуемом интервале значений x , т.е. зависит глобально от пространственного распределения частиц и от предыстории транспортного процесса.

Замечание. При описании диффузионных процессов значения α находятся в интервале $0 < \beta < 1$, при $\beta = 1$ имеем классическое уравнение теплопроводности параболического типа; в интервале $1 < \beta < 2$ имеет место переход от диффузионного уравнения к волновому, т.е. происходит перемещение по детерминированному хаосу (частичноупорядоченным системам) от идеального беспорядка к идеальному порядку), при $\beta = 2$ имеем волновое уравнение гиперболического типа.

Замечание 1. Уравнения дробного порядка как по времени, так и по координате используются для учёта эффектов памяти. Память и пространственные корреляции существенны для объектов, обладающих сложной пространственной структурой и многофазным составом. К таким системам относятся среды с фрактальной структурой, для которых характерно наличие развитой межфазной границы. Здесь не выполняется принцип локальной равновесности и необходимо привлекать дробные размерности, имеющие свойства самоподобия. Учёт эффектов памяти (временная нелокальность) и пространственных корреляций (пространственная нелокальность) приводит к появлению в дифференциальных уравнениях интегрального оператора, ядро которого несёт информацию о природе нелокальности. При этом возможны режимы супердиффузии и субдиффузии, связанные соответственно с прыжковым механизмом переноса и наличием ловушек в среде. Влияния нелокальности по времени и нелокальности по координате на распределение концентрации качественно отличаются. Нелокальность по времени влияет на распределение концентрации в начальное время, а нелокальность по пространству влияет на асимптотическое поведение распределения концентрации при больших временах. Учёт нелокальности по времени приводит к смещению максимума распределения концентрации в область меньших значений координаты.

При $\alpha=2$, $\beta=1$ обобщённое уравнение диффузии описывает движение Броуна, а при $\alpha<1$, $\beta=1$ — движение Леви, отличающееся от броуновского многочисленными разрывами траектории вдоль оси x . До тех пор производная по x имела целый (второй) порядок разрыва, разрывов не было (существовали только изломы), порядок производной стал дробным — появились разрывы. Распределение скачков координаты в этих разрывах степенное, поэтому разрывы видны на разных масштабах.

Появление в уравнении диффузии двух новых параметров — дробных порядков пространственной (α) и временной (β) производных — значительно расширило семейство решений диффузионного уравнения, сохранив формально его вид. Важнейшим качеством новых решений — степенной закон их асимптотик. Интегродифференциальный характер дробных производных операторов позволяет описать пространственно-временные нелокальные процессы переноса, в которых поток в данной точке зависит не только от поведения функции в окрестности рассматриваемой точки x , но и от принимаемых ею значений на всем исследуемом интервале значений x , т.е. зависит глобально от пространственного распределения частиц и от предыстории транспортного процесса.

Замечание 1. Уравнения дробного порядка как по времени, так и по координате используются для учёта эффектов памяти. Память и пространственные корреляции существенны для объектов, обладающих сложной пространственной структурой и многофазным составом. К таким системам относятся среды с фрактальной структурой, для которых характерно наличие развитой межфазной границы. Здесь не выполняется принцип локальной равновесности и необходимо привлекать дробные размерности, имеющие свойства самоподобия. Учёт эффектов памяти (временная нелокальность) и пространственных корреляций (пространственная нелокальность) приводит к появлению в дифференциальных уравнениях интегрального оператора, ядро которого несёт информацию о природе нелокальности. При этом возможны режимы супердиффузии и субдиффузии, связанные соответственно с прыжковым механизмом переноса и наличием ловушек в среде. Влияния нелокальности по времени и нелокальности по координате на распределение концентрации качественно отличаются. Нелокальность по времени влияет на распределение концентрации в начальное время, а нелокальность по пространству влияет на асимптотическое поведение распределения концентрации при больших временах. Учёт нелокальности по времени приводит к смещению максимума распределения концентрации в область меньших значений координаты.

При показателях производных $\beta<1, \alpha<1$ вместо траектории возникают сгустки точек — кластеры, разделенные между собой областями перелётов и пребывания в ловушках. С уменьшением β *pdf* становятся всё более узкими и высокими в центральной части и в то же время всё большая доля вероятности перемещается из промежуточной области в хвосты. При $\beta=1$ имеем *pdf* Коши. На больших расстояниях *pdf* убывает степенным образом.

19. Аномальная диффузия

19.1 Субдиффузия (диффузия по фракталам)

Субдиффузия протекает намного медленнее классической диффузии, поскольку диффузانت захватывается ловушками (дефектами, турбулентными вихрями, адсорбционно- или химически активными центрами), уходит в боковые, тупиковые пути, и на некоторое время или навсегда выводится из миграционного процесса. Наоборот, супердиффузия осуществляется со скоростями, существенно превышающими классическую диффузию. Этот режим наблюдается, если в системе есть облегчённые пути (например, трещины) или присутствуют процессы случайной или направленной адвекции (увлечение диффузанта потоками флюидов).

В более развитой модели случайных прыжков случайное блуждание непрерывно во времени: временные интервалы между двумя скачками более не фиксированы; теперь они подчиняются функции распределения вероятностей. Полная модель предполагает две таких функции: одна для временных интервалов (или времён "ожиданий", т.е. времен между двумя скачками подряд), другая — для длины прыжка. Пока эти плотности вероятностей являются гауссовыми, формула Эйнштейна-Смолуховского остаётся в силе: квадратный корень из времени выполняется. Однако возможны другие виды плотностей распределения, например, степенное распределение временных интервалов.

Во многих ситуациях скачки частицы не независимы во времени, они подвержены автокорреляции; вероятность наступления крайних событий выше, чем ожидалась при нормальном распределении. Для описания подобных ситуаций используются распределения вероятностей, которые имеют более высокий «пик» (как следствие автокорреляции) и более «высокие хвосты» (вследствие частоты крайних значений). Здесь особенно полезны семейства распределений, которые характеризуются несколькими параметрами, например, устойчивые распределения. Выражение для вероятности скачков при числе скачков, стремящихся к бесконечности, зависит от «радиуса действия» этого распределения вероятности: если у него «короткий» шаг, то наблюдается нормальная диффузия Гаусса (броуновское движение). Если же диффузионный скачок «длинный» – то получаем аномальную диффузию Леви («длинные перелёты», фрактальные кластеры, супердиффузию т.п.).

Субдиффузия – случайные блуждания, при которых скорость роста среднеквадратичного смещения частиц с течением времени не остается постоянной, как у обычной диффузии, а монотонно уменьшается и, в конце концов, перестает зависеть от времени.

Усечённые распределения Леви описывают «субдиффузию», замедленную по сравнению с классическим движением (частице при усечённых блужданиях Леви требуется больше времени для достижения возросшего критического значения, чем в случае классической диффузии). При субдиффузии наличие ловушек приводит к расходимости среднего времени ожидания скачков, благодаря чему последние приобретают дискретный характер в пространстве и происходит замедление процесса переноса ($\alpha > 2$). Его убыстрение в процессе супердиффузии связано с тем, что частица в дискретные моменты времени совершает скачки произвольной длины, характеризующиеся расходящимся среднеквадратичным смещением $\langle r^2 \rangle \rightarrow \infty$.

Для описания процессов субдиффузии используют интегро-дифференциальное уравнение, с производной по времени дробного порядка, β , которая зависит от фрактальной размерности среды. Процесс субдиффузии нелокален по времени, а фрактальная среда, в которой он происходит, — среда с памятью.

Замечание. Уравнения с дробными производными по времени, в частности, описывают диффузию по структурам, содержащим сеть ветвящихся каналов. Структура каналов может быть различной и порождаться определённой фрактальной структурой среды. Такие процессы квалифицируют как процессы с памятью.

Известно два класса субдиффузионных процессов: стационарные и нестационарные. В ходе стационарной субдиффузии подвижность частиц не изменяется. Замедление диффузии — следствие отрицательных корреляций скорости, которые обусловлены либо наличием пространственных ограничений, либо взаимодействиями с окружающей средой. Нестационарная субдиффузия – это результат снижения со временем подвижности частиц, которое объясняется наличием разного рода ловушек. **Нестационарная субдиффузия** – результат снижения со временем подвижности частиц, из-за наличия процессов захвата молекул диффузанта ловушками. Модель случайных барьеров, описывающая стационарную субдиффузию, и модель случайных ловушек, описывающая нестационарную субдиффузию, при соответствующих значениях параметров дают одну и ту же функцию распределения. Субдиффузия – это **диффузия по фракталам** (пример – проницаемость перколяционных структур).

В отличие от диффузии в однородной среде случайное блуждание на фракталах чувствительно к мерности пространства. В плоскости все транспортные пути сильно продублированы, в то время как в трёхмерном пространстве пути имеют одножильный характер. Изменение характера диффузии обусловлено сложной геометрией путей (извилистость, тупики, ловушки). В случае блужданий на фракталах супердиффузионного режима не возникает, т.к. в режиме фрактальной диффузии блуждающая частица после вылета с точки старта всегда может уйти на большое расстояние, тогда как в случае блуждания на фрактале она оказывается запертой между соседними кластерами, совершая между ними большое число переходов. При автотомельной субдиффузии наличие ловушек приводит к расходимости среднего времени ожидания скачков $\langle t \rangle = \infty$, благодаря чему последние приобретают дискретный характер в пространстве, происходит замедление процесса переноса и в конце концов миграция перестаёт зависеть от времени. Если аномальная диффузия имеет смешанное происхождение, то участки нелинейных зависимостей для её стационарной и нестационарной составляющих могут не совпадать. В некоторых случаях они могут вообще не перекрываться.

Если в сплошной среде средний квадрат расстояния, на которое удаляется от исходной точки случайно блуждающая частица, пропорционален времени, то во фрактальной среде случайно блуждающая частица удаляется от места старта медленнее, так как далеко не все направления для неё доступны: извилистый канал выбирает из множества направлений лишь малое подмножество разрешенных направлений. Средний квадрат расстояния для фрактальной среды пропорционален дробной степени времени, показатель которой связан с фрактальной размерностью среды. Множество препятствий (узких мест, крутых поворотов и тупиков) затрудняют продвижение частиц и замедляют диффузию. Отсюда и дробные показатели. В ветвящихся фрактальных структурах (типичным примером является гребешковая структура, в которой к проводящей оси перпендикулярно прикреплены уходящие на бесконечность ребра) реализуются сверхмедленные процессы переноса. К ним относятся системы, содержащие в себе каналы, входящие в состав ветвящейся фрактальной структуры: кластеры дефектов или областей сильного разупорядочения, перколяционные и пористые среды. В уравнениях, используемых для описания субдиффузии, показатель дробной производной по времени соответствует доли каналов (ветвей), открытых для миграции.

Разные причины приводят к замедлению диффузии: статический или динамический беспорядок, вязкоупругость и др. Типичным примером субдиффузии является процесс диффузии радона во фрактальной пористой среде, протекающий медленнее обычного режима диффузии, т.к. грунт обладает сложной топологией каналов между пораами. Каналы изгибаются, сильно изрезаны, иногда разрываются, поэтому процесс переноса радона замедляется.

Субдиффузия проявляется себя в процессах замедленной латеральной диффузии белков и липидов по биослою плазматических мембран, диффузия ионов через каналы и вдоль мембраны нервных клеток. Процессы аномальной диффузии (субдиффузия, супердиффузия, прыжковая диффузия) обнаружены в наноструктурах такими методами, как метод флуоресцентной корреляционной спектроскопии (*FCS*), восстановление флуоресценции после фотообесцвечивания (*FRAP*), определение траекторий отдельных частиц (*SPT*) и др.

19.2 Супердиффузия

Процесс, в котором диффузионный пакет расширяется быстрее, чем в нормальном случае, т.е. пропорционально t^{ν} ($\nu = \beta/\alpha$) с $\nu > 0,5$, принадлежит классу супердиффузионных. Превращение первой производной ($\beta=1$) производной по времени в дробную ($\beta < 1$) наделяет траекторию разрывами вдоль оси времени (частица замирает: время идёт, а она не движется). При $\alpha < 1$, $\beta < 1$ вместо траектории имеют место сгустки точек – кластеры, разделённые между собой областями перелётов и пребывания в ловушках. Распределение времени пребывания в ловушке в асимптотике приобретает вид распределения Леви. Параметр α ($1 < \alpha < 2$) связан с фрактальной структурой среды. Для сред с фрактальной размерностью $1 < d_f < 2$ $\alpha \approx 2 - d_f$. Конкуренция между фрактальностью среды и её памятью и определяет конкретный тип аномальной диффузии.

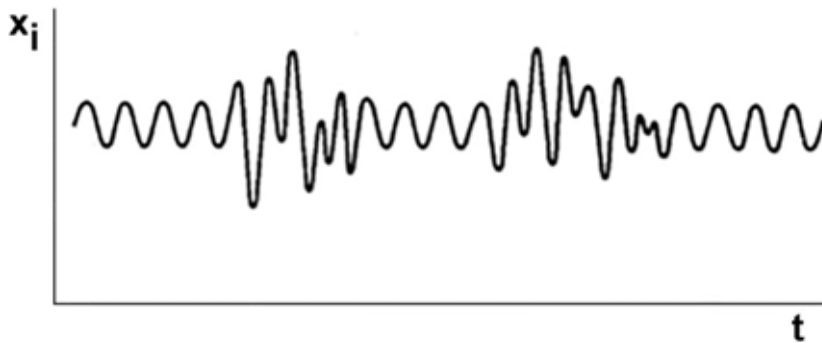
Супердиффузия ($\nu > 0,5$) - диффузия со скоростями намного большими, чем при классической миграции.

При супердиффузии частица в дискретные моменты времени совершает скачки произвольной длины, характеризуемые расходящимся среднеквадратичным смещением $\langle r^2 \rangle = \infty$; миграция со временем ускоряется и может стать бесконечно большой; последовательные положения блуждающей частицы образуют кластерную структуру, представляющую фрактальное множество, размерность которого связана с параметром ν . Поскольку фрактал образуется в результате иерархического построения, то поведение стохастической системы определяется не только смещением частицы в пространстве, но и намного более медленной эволюцией кластеров её последовательных положений.

Супердиффузия – это фрактальная диффузия.

При супердиффузии частица в дискретные моменты времени совершает скачки произвольной длины, характеризуемые расходящимся среднеквадратичным смещением $\langle r^2 \rangle = \infty$; миграция со временем ускоряется и может стать бесконечно большой; диффузионный фронт распространяется в пространстве быстрее, чем при классической диффузии, причём возможно явное проявление асимметрии процесса. Кластеры разделены большими расстояниями, которые соответствуют

стабильным участкам. Особенность траекторий в том, что точки, группирующиеся в кластеры, образуют стохастические фракталы. Кластер в свою очередь состоит из кластеров меньшего масштаба, и так далее. Поскольку фрактал образуется в результате иерархического построения, то поведение стохастической системы определяется не только смещением частицы в прямом пространстве, но и намного более медленной эволюцией кластеров. Плотность вероятности нахождения частицы в заданной точке пространства медленно убывает с расстоянием от точки старта, так что для частицы становятся вероятными "дальние" скачки (полёты Леви). На пути к стационарному распределению обнаруживается пороговое явление, состоящее в резком переходе от одного режима диффузии к другому: на смену диффузии с экспоненциальным фронтом и



непрерывными траекториями частицы приходит степенной фронт с разрывными траекториями (полётами) этой частицы.

Рис. 30. Случайные процессы с перемежаемостью (ловушки и полёты Леви).

Распределение блужданий Леви имеет медленно спадающую асимптотику и значительное количество

больших флуктуаций. Если для гауссова распределения доля флуктуаций, превосходящих 10 дисперсий, равна $2\text{erfc}(10) \approx 10^{-42}$, то количество флуктуаций, превосходящих среднее в 10 раз, например, для $\alpha=1$ равно 0.1, т.е. в 10^{41} раз больше. Коэффициент α характеризует неоднородность среды, в которой происходит перенос вещества, показатель асимметрии — анизотропность этой среды. Даже небольшое отклонение параметра α ($1 < \alpha \leq 2$) от значения $\alpha=2$ (закон Фика) резко уменьшает время, требуемое для уменьшения концентрации частиц. Последовательные положения блуждающей частицы образуют кластерную структуру, представляющую фрактальное множество, размерность которого связана со степенным показателем (β -фрактальная размерность множества кластеров).

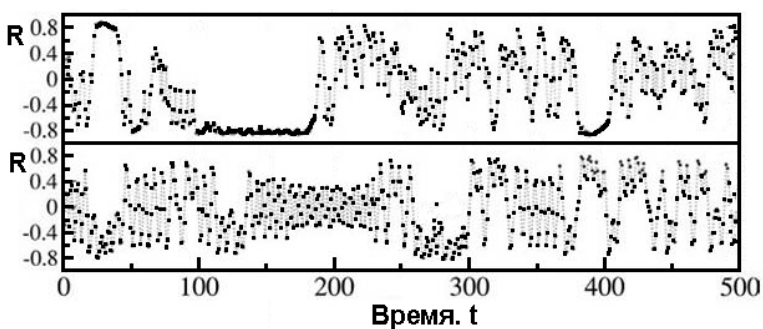


Рис. 29. Типичная временная зависимость динамических переменных x_i при переходе к хаосу через перемежаемость.

Супердиффузия осуществляется со скоростями, существенно превышающими классическую диффузию. Этот режим наблюдается, если в системе есть облегчённые пути (например, трещины) или присутствуют процессы случайной или направленной адвекции (увлечение

диффузанта потоками флюидов). Примерами супердиффузии ($\alpha > 1$) являются турбулентные среды (газ, жидкость, плазма ($\alpha=1,5-1,7$)), хаотические структуры, финансовые рынки, движение фуража ($\alpha=1,7$), процессы адвекции и др.

Возможен переход от субдиффузии ($\beta < 1$) через нормальную диффузию ($\beta=1$) к супердиффузии ($\beta > 1$). Тип аномальной диффузии определяют по показателю $\nu = \beta/\alpha$ в законе расширения пакета $r \sim t^\nu$ — субдиффузия при $\nu < 0,5$. Процесс с $\nu = 0,5$, $\beta \neq 2$ лучше называть квазинормальной диффузией, поскольку форма диффузионного пакета в этом случае отличается от нормальной. Для сред с фрактальной размерностью $1 < d_f < 2\beta \approx 2 - d_f$. Часто изменение параметра α компенсируется изменением коэффициента диффузии. С изменением β меняется и размерность коэффициента диффузии, однако невозможно оценить это изменение количественно. Форма пакета отличается от нормальной и лишь при $\beta=2$, $\alpha=1$ совпадает с ней (квазинормальная диффузия становится нормальной). В случае $\alpha < \beta-1$ пакет расплывается медленнее нормального (субдиффузионный режим), а в случае $\alpha > \beta-1$ — быстрее (супердиффузия). Во всех остальных случаях условие $\beta < 1$ порождает супердиффузию.

20. Фрактальность временных рядов

При супердиффузии на всех масштабах наблюдаются пустоты попеременно со сгущениями, т.е. **переमेжаемость**.

Перемежаемость – вид стохастических колебаний, при которых сигнал, развивающийся во времени почти периодически (ламинарные фазы движения), случайным образом сменяется короткими турбулентными вспышками.

Рис. 31. Случайные процессы и перемежаемость.

Перемежаемость ведёт к хаотическому движению. При таком движении всплески хаотического поведения чередуются (перемежаются) с участками, на которых происходят почти периодические колебания.

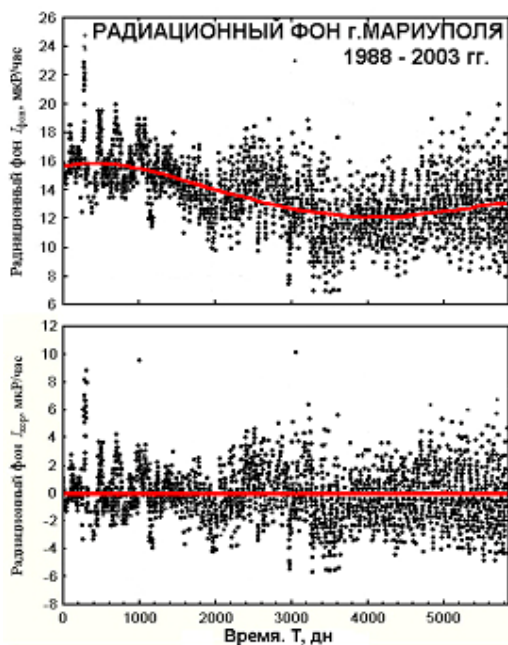
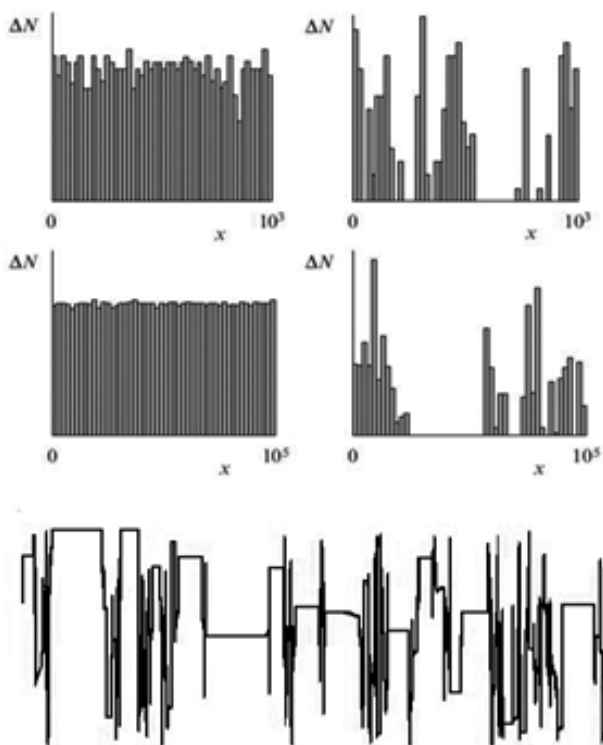
При перемежаемости, в каком бы масштабе не наблюдать распределение точек по оси, оно выглядит прерывистым. Области сгущения сменяются (перемежаются) пустотами. Это – стохастический фрактал с фрактальной размерностью, которая совпадает с порядком дробной производной в дифференциальном уравнении, описывающем диффузию. В больших масштабах распределение точек выглядит однородным. Такие свойства интерпретируются как фрактальность среды (наличие больших пустот на всех масштабах) и память частицы (вероятность покинуть ловушку в

единицу времени зависит от того, когда частица в неё попала). В режиме перемежаемости движение состоит из точек относительной неподвижности, фиксаций, и быстрых скачков по пространству. Такая динамика относится к механизму *розового* "взрывного" шума, в котором периоды стабильности сменяются этапами частой смены амплитуды. Траектория образует отчётливые кластеры, группы, которые соответствуют "взрывным" периодам во фликкер-шуме.

Рис. 32. Флуктуации радиационного фона: а - исходный массив; б - после вычитания базовой линии.

Кластеры разделены обширными дистанциями, которые соответствуют стабильным участкам шума. Особенность траекторий в том, что точки, группирующиеся в кластеры, образуют стохастические фракталы. Кластер в свою очередь состоит из кластеров меньшего масштаба, и так далее. Распределение блужданий Леви имеет медленно спадающую асимптотику и значительное количество больших флуктуаций. Если для гауссова распределения доля флуктуаций, превосходящих 10 дисперсий, равна $2\text{erfc}(10) \approx 10^{-42}$, то количество флуктуаций, превосходящих среднее в 10 раз, например, для $\beta=1$ равно 0,1, т.е. в 10^{41} раз больше.

К анализу временных рядов произвольной природы можно подойти путем их энтропийной и/или фрактальной параметризации. Примером энтропийной параметризации является расчёт энтропии Колмогорова, которая изначально вводилась для анализа стохастических временных рядов, порождаемых динамическими системами. Такие ряды, как правило, получают из решений нелинейных динамических уравнений, и, как следствие, они являются гладкими, непрерывными и, соответственно, могут быть практически бесконечными; в идеале они избавлены от случайных шумов, то есть они представляют динамический хаос в чистом виде.



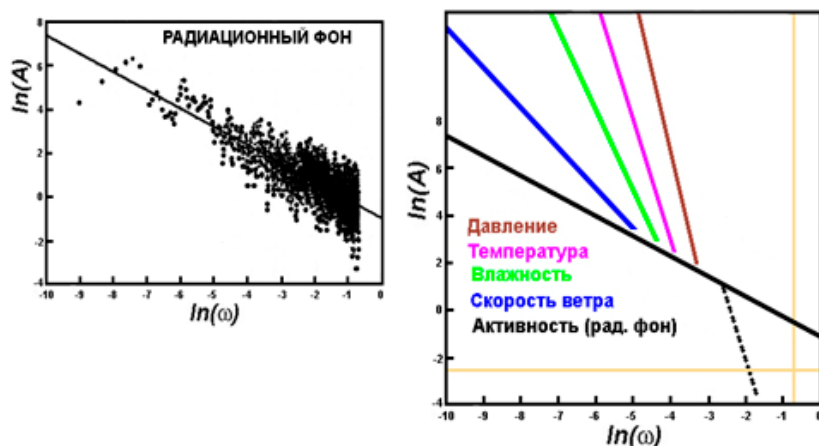


Рис. 33. Фликкер спектроскопия радиационного фона и метеорологических параметров.

Заключение

В настоящей работе мы рассмотрели различные способы измерения степени разупорядочения различных структур: полностью упорядоченных, умеренно разупорядоченных, сильно неупорядоченных и хаотичных. Традиционно о степени порядка системы судят по величине энтропии (чем выше энтропия, тем меньше порядка) или по связанной с энтропией величине - количеству информации. Проблема в том, что единой энтропии, пригодной к интерпретации различных ситуаций, не существует. Предложена дюжина энтропий и число их продолжает увеличиваться. Для разных структур приходится использовать разные энтропии. Достижение последних лет - найдены условия, при которых возможны переходы от одного типа энтропии к другому.

Энтропия возникла в термодинамике, термодинамика отправила её в информатику, что серьёзно пошло последней на пользу. Обратная волна от информатики к термодинамике пока не последовала, но надо полагать - последует и будет способствовать существенной модернизации этого раздела физической химии.

Важным успехом явилось объединение энтропии с элементами фрактальной геометрии. По крайней мере при описании самоподобных структур. Энтропийный подход дал разумную классификацию фрактальных размерностей. Поскольку энтропию часто проще рассчитать, чем фрактал, то определив энтропию (и информацию) найдём величину фрактальной размерности, что позволит судить о качестве беспорядка и о его вкладе в систему. Тем самым осуществляется параметризация системы (процедура определения параметров, количественно характеризующих систему), которая необходима для количественной идентификации систем и их состояний. Особенно это важно для сложных систем с несколькими вложенными фракталами.

Феноменологическими параметрами, получаемыми в рамках подхода с использованием энтропийно мультифрактального формализма, являются экстенсивные параметры (энтропии) и интенсивные параметры (размерности). В качестве информационной основы при выборе таких параметров взяты идеи об информационной природе энтропии, скейлинговом поведении экспериментальных и наблюдательных данных, фрактальной симметрии и её нарушениях в различных структурах или временных рядах.

Скейлинг (масштабная инвариантность) — свойство уравнений физики сохранять свой вид при изменении всех расстояний и промежутков времени в одинаковое число раз, то есть $x \rightarrow kx$, $y \rightarrow ky$, $z \rightarrow kz$, $t \rightarrow kt$. Причём здесь подразумевается лишь изменение единиц измерения, само пространство-время остаётся неизменным. Такие изменения называются преобразованиями подобия и образуют группу масштабных преобразований. При масштабном преобразовании одни физические величины остаются неизменными, а другие изменяются в соответствии со своей размерностью.

Фрактальное самоподобие (скейлинг) - повторение фракталом самое себя на разных масштабных уровнях, т.е. неизменность закона построения фрактала.

Скейлинговая процедура - анализ, при котором одновременно растут области наблюдений и точки наблюдений образуют все более плотные подмножества евклидова пространства.

Анализ параметров, рассчитываемых в рамках энтропийно-фрактального подхода, позволяет достаточно полно описать структурные особенности природных объектов, получать важную дополнительную количественную информацию о процессах в сложных неравновесных средах, в том числе и в динамических системах. Энтропийно-фрактальный анализ данных позволяет выявлять феноменологические соотношения, характерные масштабы и времена, прогнозировать на их основе возможное будущее поведение системы, что имеет важное практическое значение. Феноменологическая информация, полученная в рамках энтропийно-фрактального подхода – надёжная количественная основа и чёткий критерий при разработке физических моделей различных систем.

В данной работе мы рассмотрели статику сложных систем, динамика их, динамический (детерминированный) хаос, бифуркации и аттракторы будут проанализированы в следующих публикациях.

В этом эссе мы всё же уделили внимание одному процессу – диффузии. Достижением последнего времени явилось объединение двух подходов, долгое время существовавших отдельно: статистического и феноменологического. В статистике стали широко применяться распределения Леви-Парето с бесконечными дисперсиями и неопределёнными математическими ожиданиями (частным случаем их является классическое случайное блуждание, подчиняющееся распределению Гаусса). Средний квадрат смещения теперь зависит от времени в дробной степени, величина которой определяется показателем фрактала. Соответственно и феноменологическое описание диффузии строится на базе частных производных с дробными степенями: по времени и/или пространству. Дробные степени также связаны с показателями фракталов. Данный подход впервые позволил описать в рамках одной идеологии классическую диффузию, субдиффузию (замедленную диффузию, диффузию по фракталам) и супердиффузию (ускоренную диффузию, диффузию по фракталам).

Объединение энтропии, информации, геометрии фракталов, распределений Леви и дробных производных в целях описания диффузии позволило решить очень сложную задачу – непрерывный монотонный переход от волнового процесса (полный порядок) к диффузионному (полный беспорядок). Это позволило перейти к анализу реальных структур (нано-, аморфных и стеклообразных материалов, пористых тел, геологических структур, временных процессов) и реальных процессов миграции (распространение радионуклидов из могильников, распространение радона и т.п.). На данной идеологической базе начались работы по решению обратных задач: нахождению координат и запасов источника диффузанта по его хаотическому выходу на поверхность.

Комплексный подход с объединением различных способов характеристики плохоупорядоченных систем успел продемонстрировать свою перспективность. Можно утверждать, что у него большое будущее.