

ЭНТРОПИЙНЫЕ МЕТОДЫ В ТЕОРИИ САМООРГАНИЗАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Обсуждаются вопросы применения энтропийных методов при исследовании сложных систем. Описаны свойства как термодинамической, так и информационной энтропии. Показано, что для случая, когда состояние системы описывается многомерным нормальным вектором, можно достичь уменьшения энтропии за счет увеличения парных коэффициентов корреляции.

Обговорюються питання застосування ентропійних методів при дослідженні складних систем. Описано властивості як термодинамічної, так і інформаційної ентропії. Показано, що для випадку, коли стан системи описується багатомірним нормальним вектором, можна досягти зменшення ентропії за рахунок збільшення парних коефіцієнтів кореляції.

Problems of entropy methods application in research of complex systems are considered. Features of thermodynamic and informational entropies are described. It is shown that an entropy decrease due to an increase of double coefficients of correlation can be obtained when the system state is described by a multidimensional normal vector.

Энтропийные методы широко применяются при исследовании сложных систем [1], при управлении качеством и разработке методов оценки надежности [2, 3]. Но особенно эффективно применение энтропийных методов при построении теории процессов самоорганизации, закономерности которых изучает новая научная дисциплина синергетика [4]. Различают термодинамическую энтропию S и информационную H [5 – 9]. Кратко рассмотрим методы термодинамической энтропии при изучении эволюционных процессов и динамики иерархических систем [10, 11]. Изменение термодинамической энтропии dS определяется как

$$dS = \frac{\Delta Q}{T},$$

где ΔQ – изменение теплоты в процессе; T – абсолютная температура.

В общем случае приращение энтропии dS можно представить в виде суммы двух слагаемых [12]

$$dS = dS_e + dS_i,$$

где dS_e – изменение энтропии, обусловленное обменом с окружающей средой; dS_i – приращение энтропии, вызванное необратимыми изменениями внутри системы.

В соответствии с законами термодинамики dS_e может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Приращение же dS_i в соответствии со вторым законом термодинамики может быть только положительным. Для изолированной системы $dS_e = 0$, и в такой системе энтропия может только возрастать. Величину $\Theta = \frac{dS_i}{dt}$ называют производством энтропии. Эта величина характеризует скорость накопления необратимых изменений. В термодинамике необратимых процессов полагают [12]

$$\Theta = \sum_j X_j J_j, \quad (1)$$

© Е.С. Переверзев, 2010

где X_i – термодинамическая сила; J_i – термодинамический поток, вызванный действием силы X_i .

Методы нахождения термодинамических сил и потоков основаны на анализе законов сохранения энергии и вещества. Термодинамическими силами обычно являются температура, химический потенциал, тензор напряжений и т.д. Термодинамическими потоками являются тепловой поток, скорость химической реакции, тензор скорости деформации и др.

При термодинамическом равновесии $J_i = 0$, $X_i = 0$. Поэтому при малом отклонении от положения равновесия принимают:

$$J_i = \sum_{j=1}^n L_{ij} X_j,$$

где L_{ij} – кинетические коэффициенты; n – число термодинамических сил и потоков.

Полагают, что коэффициенты L_{ij} от потоков и сил не зависят, но зависят от параметров состояния, и поэтому в каждом конкретном случае необходимо искать способы вычисления этих коэффициентов. На основе принципа микроскопической обратимости Онзагер показал, что для большого числа процессов при соответствующем выборе потоков и сил

$$L_{ij} = L_{ji}. \quad (2)$$

Последнее соотношение обычно называют принципом Онзагера. Этот принцип позволяет учитывать эффекты наложения. Заметим, что при описании эффектов наложения в соответствии с принципом Онзагера необходимо, чтобы необратимые процессы имели одинаковый тензорный ранг.

Для термодинамики необратимых процессов большое значение имеет поиск вариационных принципов, из которых могут быть получены определяющие уравнения. Онзагер первым показал, что соотношения взаимности (2) эквивалентны некоторому вариационному принципу, который назван принципом наименьшего рассеяния. В этом принципе используется неравновесная потенциальная функция

$$\varphi(X, X) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} L_{ij} X_i X_j.$$

Для линейных процессов

$$\varphi(X, X) = \frac{1}{2} \Theta(X, J).$$

В соответствии с этим принципом функция

$$G = \Theta(X, J) - \varphi(X, X)$$

имеет максимум по сравнению со всеми возможными необратимыми процессами с теми же потоками, но различными сопряженными им силами.

При стационарных необратимых процессах в открытых системах диссипация энергии минимальна. К аналогичному выводу можно прийти, если использовать потенциальную функцию

$$\Psi(J, J) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} L_{ij}^{-1} J_i J_j = \frac{1}{2} \Theta(X, J).$$

В этом случае, варьируя функцию $F = \Theta(X, J) - \Psi(J, J)$ по потокам при заданных силах, получаем

$$\delta(F)_X = \delta[\Theta - \Psi]_X = 0.$$

К принципу наименьшего рассеяния можно прийти, варьируя соответствующим образом следующие потенциальные функции: $G_1 = \varphi - \Theta$ и $F_1 = \Psi - \Theta$.

Принцип Пригожина формулируется следующим образом. В стационарном состоянии производство энтропии Θ в открытой системе при фиксированных внешних параметрах минимально.

В соответствии с приведенными принципами при определенных ограничениях на внешние воздействия стационарное состояние линейных необратимых процессов в открытых системах характеризуется минимумом производства энтропии. По-видимому, и для нелинейных необратимых процессов, допускающих представление (1), если существует для них такая потенциальная функция рассеяния φ , что

$$J_i = \frac{\partial \varphi}{\partial X_i},$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial X_i \partial X_j} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial X_j \partial X_i},$$

при оговоренных выше условиях в стационарном состоянии будет выполняться принцип минимального производства энтропии.

Рассмотрим вопрос об устойчивости стационарного состояния. Как известно, для устойчивости системы достаточно, чтобы производная по времени от знакоопределенной функции Ляпунова была противоположна по знаку выбранной функции или тождественно равна нулю. Возьмем в качестве функции Ляпунова производство энтропии Θ . Эта функция является положительно определенной и в стационарном состоянии $\frac{d\Theta}{dt} = 0$. Отсюда в соответствии с теоремой Ляпунова следует вывод, что в стационарном состоянии открытая система является устойчивой. При стремлении системы к устойчивому стационарному состоянию $\frac{d\Theta}{dt} < 0$. По-видимому, открытые системы стремятся к стационарному состоянию кратчайшим путем.

Как уже отмечалось, критерий устойчивости стационарного состояния определяется знаком скорости производства энтропии $\frac{d\Theta}{dt}$. Разложим ее следующим образом на две составляющие

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{d\Theta_x}{dt} + \frac{d\Theta_J}{dt},$$

где

$$\frac{d\Theta_x}{dt} = \sum_i J_i \frac{dX_i}{dt}; \quad \frac{d\Theta_J}{dt} = \sum_i X_i \frac{dJ_i}{dt}.$$

Стационарное состояние характеризуется постоянством потоков. В этом случае $\frac{dJ_i}{dt} = 0$ и

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{d\Theta_x}{dt}.$$

Ввиду того, что в стационарном состоянии $\frac{d\Theta}{dt} = \frac{d\Theta_x}{dt} = 0$ и при стремлении к стационарному состоянию скорость производства энтропии отрицательна, критерием эволюции открытых диссипативных систем по Пригожину является условие

$$\frac{d\Theta_x}{dt} \leq 0.$$

Рассматривая накопление повреждений в элементах технических устройств в процессе их эксплуатации, можно сделать заключение, что реальные термодинамические системы при $\Theta \neq 0$ могут находиться в стационарном состоянии в течение ограниченного времени. Это обусловлено непрерывным расходом ресурса технических систем в процессе эксплуатации. Поэтому, начиная с какого-то времени $t = t^*$, необратимые процессы в реальных системах становятся нестационарными. Величина t^* может выбираться из условия

$$\int_0^{t^*} \Theta(t) dt = S^*,$$

где S^* – некоторое значение приращения необратимой составляющей энтропии, начиная с которого скорость производства энтропии $\frac{d\Theta}{dt}$ возрастает.

Поэтому эксплуатировать технические системы целесообразно в области $t \leq t^*$ или, по крайней мере, начиная с $t = t^*$ своевременно прогнозировать наступление отказа. Очевидно, при $t > t^*$ производная $\frac{d\Theta}{dt} > 0$. В соответствии с теоремой Ляпунова система становится с этого момента неустойчивой и стремится к новому равновесному состоянию. В области $t > t^*$, по-видимому, имеет место принцип максимальной скорости порождения энтропии, сформулированный Циглером [13]. В соответствии с этим принципом система, подверженная действию заданных термодинамических сил, стремится к конечному состоянию кратчайшим путем.

Качественная картина изменения производства энтропии представлена на рис. 1, из которого видно, что весь интервал времени можно разделить на три участка.

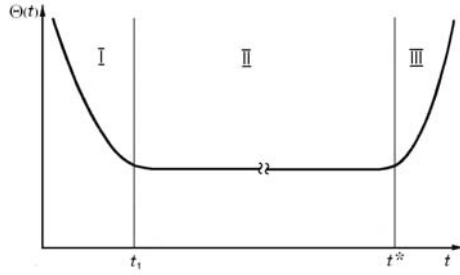


Рис. 1

На участке I, где $\frac{d\Theta}{dt} < 0$, система кратчайшим путем стремится к стационарному состоянию. На участке II $\frac{d\Theta}{dt} = 0$ и производство энтропии при заданных ограничениях достигает минимального значения. На участке III $\frac{d\Theta}{dt} > 0$ и система кратчайшим путем стремится к новому равновесному состоянию. При этом участки I и II являются устойчивыми, а III – неустойчивым.

В [14] предложено следующее выражение для вероятности безотказной работы

$$P = \exp \left[\frac{-\int_0^t \Theta(\tau) d\tau}{S^*} \right] = \exp \left(-\frac{S}{K} \right),$$

где $S = \int_0^t \Theta(\tau) d\tau$; $K = S^*$; S^* – математическое ожидание приращения энтропии, при котором происходит отказ.

Последняя формула аналогична известной формуле Больцмана в классической термодинамике, устанавливающей связь между энтропией и вероятностью нахождения термодинамической системы в данном состоянии, и ее можно получить, проделав выкладки, аналогичные тем, которые использовались при выводе формулы Больцмана.

Подчеркнем, что коэффициент K не является постоянной Больцмана, хотя их размерности совпадают.

Приведенное соотношение, устанавливающее связь между вероятностью безотказной работы и приращением энтропии, имеет большое методологическое значение. Если известен конкретный физический механизм накопления повреждений, на этапе проектирования можно проводить приближенные вероятностные расчеты, полагая

$$\lambda(t) \approx \frac{\langle \Theta(t) \rangle}{S^*},$$

где $\langle \Theta(t) \rangle$ – математическое ожидание производства энтропии.

До сих пор нами рассматривалась термодинамическая энтропия, которая для одного моля идеального газа может быть вычислена по формуле Больцмана

$$S = -R \int_{-\infty}^{\infty} \ln f(v) f(v) dv, \quad (3)$$

где R – универсальная газовая постоянная; $f(v)$ – плотность распределения скоростей движения молекул газа.

В последнее время развивается теория самоорганизационных процессов, при построении которой особенно эффективно применение информационной энтропии H . Для произвольной случайной величины X энтропия H вычисляется по формуле

$$H = - \int_{-\infty}^{\infty} \ln g(x) g(x) dx, \quad (4)$$

где $g(x)$ – плотность распределения случайной величины X .

Из сравнения выражений (3), (4) видно, что они отличаются только постоянным множителем. Если рассматривать одну частицу, то

$$s = -k \int_{-\infty}^{\infty} \ln f(v) f(v) dv,$$

где $k = \frac{R}{N_a}$ – постоянная Больцмана; N_a – число Авогадро.

Некоторые авторы полагают [2], что если информационную энтропию произвольной случайной величины умножить на постоянную Больцмана, то получим термодинамическую энтропию. Такое утверждение справедливо только в том случае, если вычисляется информационная энтропия случайной величины, которая описывает энергетические характеристики, например скорость движения молекул газа. Так как рассматриваемые выражения отличаются только постоянным множителем, то у них много общих свойств. Например, в равновесном состоянии систем соблюдается принцип максимума энтропии. Исходя из этого принципа, можно обосновать вид закона распределения изучаемых случайных величин. Например, если известны только конечные пределы изменения случайной величины, то максимальная энтропия у равномерного распределения. При заданном математическом ожидании максимальная энтропия у экспоненциального распределения, при заданной дисперсии максимальная энтропия у нормального распределения. Вот почему, исходя из принципа максимума энтропии, распределения скоростей движения молекул идеального газа описываются нормальным законом.

В соответствии с принципом максимума энтропии при заданной дисперсии микронапряжений распределения микронапряжений в нагруженных элементах конструкций также будет описываться нормальным законом.

При изучении динамики многих сложных систем по аналогии с производством энтропии можно вводить скорость изменения информационной энтропии.

В общем случае необходимо учитывать одновременно изменение термодинамической и информационной энтропии. В этом случае при решении ва-

риационных задач функция Φ , подлежащая исследованию на экстремум, записывается так:

$$\Phi = S + BH,$$

либо

$$\Phi = H + bS.$$

Между коэффициентами B и b должно выполняться соотношение

$$bB = 1.$$

В самоорганизационных процессах скорость $\frac{dH}{dt}$ принимает отрицательные значения. Заметим, что энтропию H можно также определить по формуле

$$H = \ln W,$$

где W – число микросостояний, которым может быть реализовано данное макросостояние. Отсюда

$$W = \exp(H).$$

Величина H вычисляется по формуле (4). Для одного моля идеального газа

$$H_1 = \log \left(\frac{6\pi eRT}{M_1} \right)^{1/2},$$

где M_1 – масса одного моля.

Соответственно

$$W_1 = \left(\frac{6\pi eRT}{M_1} \right)^{1/2}.$$

В большинстве случаев основные свойства энтропии исследуются для независимых систем. Исследуем, как влияет на изменение энтропии зависимость элементов системы. Рассмотрим систему, состояние которой описывается многомерным нормальным вектором X . Информационная энтропия в этом случае вычисляется по формуле [15]

$$H = \log \left[(2\pi e)^n |K| \right]^{1/2},$$

где n – размерность вектора; $|K|$ – определитель корреляционной матрицы.

Для удобства рассмотрим систему, у которой все компоненты имеют одинаковые дисперсии σ^2 . Тогда

$$|K| = \sigma^{2n} \Delta,$$

где Δ – определитель нормированной корреляционной матрицы

$$\Delta = \begin{vmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1n} \\ r_{21} & r_{22} & \dots & r_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{n1} & r_{n2} & \dots & r_{nn} \end{vmatrix},$$

где r_{iK} , $i, K = \overline{1, n}$ – коэффициенты корреляции между отдельными случайными величинами.

При таком представлении

$$H = \log \left[(2\pi e)^n \sigma^{2n} \Delta \right]^{1/2}.$$

Исследуем влияние коэффициентов корреляции на величину H при $r_{iK} \geq 0$. С уменьшением значений коэффициентов корреляции энтропия увеличивается и при $r_{iK} = 0$ достигает максимального значения H_{\max} . При $r_{iK} = 0$ определитель $\Delta = 1$ и соответственно

$$H_{\max} = \log \left[2\pi e \sigma^2 \right]^{n/2}.$$

С увеличением значений коэффициентов корреляции энтропия H уменьшается, при $r_{iK} \rightarrow 1$ определитель $\Delta \rightarrow 0$ и $H \rightarrow -\infty$.

Физически реализовать системы со всеми коэффициентами корреляций компонентов, равными единице, по-видимому, невозможно. Представляет интерес определить значения коэффициентов корреляции, при которых энтропия достигает нулевого значения. Значение определителя Δ в этом случае вычисляется по формуле

$$\Delta = \frac{1}{(2\pi e)^n \sigma^{2n}}.$$

Приведем выражения для Δ для конкретных значений $n = 2, 3, 4$; соответствующие определители обозначим $\Delta_2, \Delta_3, \Delta_4$.

Для $n = 2$ имеем

$$\Delta_2 = 1 - r_{12}^2.$$

Соответственно для $n = 3$

$$\Delta_3 = 1 - r_{12}^2 - r_{13}^2 - r_{23}^2 + r_{12}r_{13}r_{23}.$$

Для краткости выражение для определителя Δ_4 приводится ниже для частного случая $r_{iK} = r$.

Для удобства анализа предельных случаев положим все коэффициенты корреляции одинаковыми, т.е. $r_{iK} = r$, $i, K = \overline{1, n}$.

В этом случае

$$\Delta_3 = 1 - 3r^2 + 2r^3,$$

$$\Delta_4 = 1 - 6r^2 + 8r^3 - 3r^4.$$

При $r = 1$ соответственно имеем

$$\Delta_2 = \Delta_3 = \Delta_4 = 0.$$

Из приведенных выражений находим значения r , при которых энтропия равна нулю.

Для $n = 2$ получим

$$r = \sqrt{1 - \frac{1}{(2\pi e\sigma)^2}}.$$

Для $n = 3$ необходимое значение r определяется из выражения

$$(2\pi e)^3 \sigma^3 (1 - 3r^2 + 2r^3) = 1,$$

соответственно для $n = 4$ r находится из выражения

$$(2\pi e)^4 \sigma^4 (1 - 6r^2 + 8r^3 - 3r^4) = 1.$$

Анализ приведенных выражений показывает, что при заданных значениях коэффициентов корреляции с увеличением n определитель Δ_n уменьшается. Так, при $r = 0,5$ имеем:

$$\Delta_2 = 0,75; \quad \Delta_3 = 0,5; \quad \Delta_4 = 0,3125.$$

Нами исследовалось изменение информационной энтропии от степени связи между элементами для многомерного нормального вектора.

Покажем, что и для произвольных распределений с увеличением связи между ее элементами энтропия системы уменьшается. В [16] приведено следующее приближенное выражение для произвольных многомерных распределений

$$G_n(x) = \eta G_1(x) + (1 - \eta) G_1^n(\eta), \quad (5)$$

где η – параметр, учитывающий степень зависимости между случайными величинами; $G_1(x)$ – одномерная функция распределения; $G_n(x)$ – многомерная функция распределения.

Параметр η изменяется от нуля до единицы. При $\eta = 0$ случайные величины независимы и

$$G_n(x) = G_1^n(x).$$

В этом случае энтропия системы H равна сумме энтропий отдельных элементов. Для одинаковых элементов

$$H = nh, \quad (6)$$

где h – энтропия отдельного элемента.

При $\eta = 1$ между случайными величинами наибольшая зависимость и

$$G_n(x) = G_1(x). \quad (7)$$

В этом случае энтропия системы равна энтропии элемента

$$H = h.$$

Из сравнения выражений (6), (7) следует, что в предельном случае при $\eta = 1$ имеет место соотношение

$$H_{зав} = \frac{H_{нез}}{n}, \quad (8)$$

где $H_{зав}$, $H_{нез}$ – соответственно энтропии систем с зависимыми и независимыми элементами.

Для произвольных значений $0 < \eta < 1$ согласно выражению (5) можно записать

$$H = \eta H_{\min} + (1 - \eta) H_{\max}, \quad (9)$$

где H_{\min} – минимальное значение энтропии при $\eta = 1$; H_{\max} – максимальное значение энтропии при $\eta = 0$.

Для одинаковых элементов получим

$$H = \eta h + (1 - \eta) n h. \quad (10)$$

Таким образом, для систем с зависимыми элементами повышение сложности системы приводит к уменьшению энтропии.

Из изложенного выше следует, что для уменьшения энтропии реальных систем необходимо находить конструктивные методы увеличения зависимости между составляющими элементами, а для систем с зависимыми элементами – методы повышения их сложности за счет увеличения числа элементов.

1. Вильсон А. Дж. Энтропийные методы моделирования сложных систем / А. Дж. Вильсон. – М.: Наука, 1978. – 246 с.
2. Завальнюк П. А. Термодинамическая концепция управления качеством / П. А. Завальнюк – Тверь: Изд-во Твер. у-та, 1992. – 149 с.
3. Воробьев В. Л. Термодинамические основы диагностики и надежности микроэлектронных устройств / В. Л. Воробьев. – М.: Наука, 1989. – 160 с.
4. Хакен Г. Синергетика: Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах: Пер. с англ. / Г. Хакен. – М.: Мир, 1985. – 423 с.
5. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика: Теория поля и вариационные принципы / И. Дьярмати. – М.: Мир, 1974. – 304 с.
6. Митюгов В. В. Физические основы теории информации / В. В. Митюгов. – М.: Сов. радио, 1976. – 216 с.
7. Коган И. М. Прикладная теория информации / И. М. Коган. – М.: Радио и связь, 1981. – 216 с.
8. Шамбадаль П. Развитие и приложения понятия энтропии / П. Шамбадаль. – М.: Наука, 1967. – 278 с.
9. Поплавский Р. П. Термодинамика информационных процессов / Р. П. Поплавский. – М.: Наука, 1981. – 255 с.
10. Николис Дж. Динамика иерархических систем: Эволюционное представление: Пер. с англ. / Дж. Николис. – М.: Мир, 1989. – 488 с.
11. Николис Г. Познание сложного. Введение: Пер. с англ. / Г. Николис, И. Пригожин. – М.: Мир, 1990. – 344 с.
12. Базаров И. П. Термодинамика: Учебник. – 3-е изд., перераб. и доп. / И. П. Базаров. – М.: Высш. шк., 1983. – 344 с.
13. Циглер Г. Экстремальные принципы термодинамики необратимых процессов и механика сплошных сред / Г. Циглер. – М.: Мир, 1966. – 133 с.
14. Переверзев Е. С. Модели накопления повреждений в задачах долговечности / Е. С. Переверзев. – Киев: Наук. думка, 1995. – 358 с.
15. Пугачев В. С. Теория случайных функций и ее применение к задачам автоматического управления / В. С. Пугачев. – Физматгиз, 1960. – 883 с.
16. Переверзев Е. С. Вероятностные распределения и их применение / Е. С. Переверзев, Ю. Ф. Даниев. – Днепрпетровск: Институт технической механики НАН Украины и НКА Украины, 2004. – 418 с.

Институт технической механики
НАН Украины и НКА Украины,
Днепрпетровск

Получено 18.05.10,
в окончательном варианте 18.05.10