УДК 539.145

МЕТОД МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ. СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СИСТЕМ

Б. З. Белашев [а], *М. К. Сулейманов* [б]

[а] Институт геологии Карельского научного центра РАН, Петрозаводск
[б] Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Метод максимума энтропии (ММЭ) применен для нахождения функций распределения физических величин. ММЭ естественным образом сочетает требование максимальной энтропии, свойства системы и условия связи в виде ограничений, накладываемых на систему. Это позволяет применять его для статистического описания закрытых и открытых систем. Рассмотрены примеры, в которых ММЭ использован при описании равновесных и неравновесных состояний, а также стационарных состояний, далеких от термодинамического равновесия.

The maximum entropy technique (MENT) is applied for searching the distribution functions of the physical values. MENT takes into consideration the demand of maximum entropy the characteristics of system and the connection conditions, naturally. It is allowed to apply MENT for statistical description of the closed and the open systems. The examples in which MENT had been used for the description of the equilibrium and nonequilibrium states and the states far from the thermodynamical equilibrium are considered.

Статистические характеристики широко используют при анализе данных экспериментов физики высоких энергий [1]. Одним из простых приемов анализа является оценка энтропии продуктов ядерной реакции — параметра, чувствительного к переходу порядок–беспорядок, несущего информацию об образовании в ходе реакции упорядоченных систем [2].

Использование понятия энтропии в математике позволило получить ряд значимых результатов. Так, в теории оценивания путем максимизации энтропии установлены робастность оценок, достижение дисперсиями нижней границы в неравенстве Рао–Крамера и др. [3]. Энтропийные методы с успехом применяют при моделировании систем с большим числом равновероятных состояний [4]. Примером такого подхода является исследование динамической симметрии и внутреннего хаоса в моделях взаимодействующих бозонов [5, 6], проведенное с помощью метода максимума энтропии (ММЭ) [7].

ММЭ является эффективным средством решения обратных задач [8]. Его применение к статистическим проблемам перспективно и актуально. Однако представляется обоснованной проверка ММЭ для моделей, хорошо апробированных в плане статистического описания. В данной работе применимость ММЭ продемонстрирована при описании равновесных и неравновесных состояний систем.

Целью статистического описания системы является оценивание функций распределения физических величин, представленных в результатах наблюдения интегральным образом. Если такое оценивание ведут только на основе данных наблюдения о системе, то с математической точки зрения имеет место некорректная обратная задача, в которой не выполнены требования существования, единственности и устойчивости решения. Условие максимальной энтропии позволяет удовлетворить этим требованиям автоматически. Из всех решений задачи отбирается единственное, имеющее максимальную энтропию, являющееся наиболее вероятным, а потому и наиболее устойчивым. Получаемое решение оказывается заведомо положительным в силу экспоненциальной формы ММЭ-оценки и удовлетворяет одному из основных свойств функции распределения — неотрицательности. Другие свойства функции распределения, например нормировка в ММЭ, могут быть заданы в виде дополнительных ограничений.

Теория ММЭ основана на втором законе термодинамики, характеризующем состояние термодинамического равновесия закрытой системы максимальной энтропией. Обобщение этого принципа на открытые системы сводится к утверждению, что максимальной является энтропия, выделяемая во внутренних диссипативных процессах [9]. Требование максимальной энтропии, свойства системы и условия связи в виде накладываемых на систему ограничений сочетаются в ММЭ естественным образом, что позволяет применить его для статистического описания равновесных и неравновесных состояний открытых и закрытых систем.

Математическую структуру энтропийного функционала связывают с типом квантовой статистики физического носителя данных и степенью заполнения квантовых степеней свободы [8]. Для фермионов и бозонов с низкой вероятностью заполнения энергетических уровней — фотонов некогерентного электромагнитного излучения, адронов, γ-квантов — используют энтропийный функционал

$$H = -\sum_{\xi=1}^{N} f\{\xi\} \ln f(\xi), \tag{1}$$

где $f(\xi)$ — оценка функции распределения; ξ — независимая переменная. В случаях, когда вероятность заполнения энергетических уровней высока, форму функционала выбирают иной

$$H = -\sum_{\xi=1}^{N} \ln f(\xi), \tag{2}$$

как, например, в задачах радиоастрономии или спектрального анализа [10]. Мы будем использовать наиболее распространенную форму энтропийного функционала (1), соответствующую общепринятому понятию энтропии математической [3].

1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

Найдем с помощью ММЭ распределение N частиц по m уровням энергии E_i, имеющее максимальную энтропию, при сохранении полной энергии E и числа частиц N:

$$\sum_{i=1}^{m} n_i E_i = E, \quad \sum_{i=1}^{m} n_i = N. \tag{3}$$

Задачу определения вероятности $f_i = n_i/N$ нахождения частицы на уровне E_i сформулируем как вариационную задачу на условный экстремум с множителями Лагранжа λ и μ в форме

$$-\sum_{i=1}^{m} f_i \ln f_i + \lambda \left(E/N - \sum_{i=1}^{m} f_i E_i \right) + \mu \left(1 - \sum_{i=1}^{m} f_i \right) \to \max . \qquad (4)$$

Приравняв первую вариацию функционала (4) по f_i нулю, получим соотношение

$$-\ln f_i - 1 - \mu - \lambda E_i = 0, \qquad (5)$$

которое дает для вероятности f_i выражение

$$f_i = \frac{1}{Z} \exp(-\lambda E_i), \qquad (6)$$

совпадающее с распределением Больцмана, если под множителем λ понимать обратную температуру $\lambda = 1/kT$, под $Z = \exp(1+\mu)$ — статистическую сумму $Z = \sum_{i=1}^{m} \exp(-\lambda E_i)$, а множитель μ связать со статистической суммой Z соотношением $\mu = \ln(Z/e)$.

Требование максимальной энтропии в закрытой системе с заданным числом частиц и энергией автоматически приводит к распределению Больцмана. Этот вывод является частным случаем общего утверждения, согласно которому плотность функции равномерного, экспоненциального и нормального распределений являются решениями вариационной задачи условной максимизации энтропийного функционала при ограничениях на моменты этих распределений соответственно нулевого, 1-го и 2-го порядка [11].

2. НЕРАВНОВЕСНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

Применим ММЭ для характеристики состояния двухуровневой системы (уровни 1 и 2), имеющей магнитный момент $\mathbf{M}$ и состоящей из N частиц с магнитным моментом $\mathbf{m}$. Магнитное поле будем считать отсутствующим, состояние системы — неравновесным, а направления магнитных моментов частиц, находящихся на уровнях 1 и 2, — противоположными.

Пусть $f(1)$ и $f(2)$ — вероятности найти частицу соответственно на уровнях 1 и 2. Уравнения полной вероятности и поляризации P системы будем рассматривать в качестве условий связи:

$$f(1) + f(2) = 1, \qquad (7)$$

$$f(1) - f(2) = \mathbf{M}/N\mathbf{m} = P. \qquad (8)$$

Для определения $f(1)$ и $f(2)$ используем обычную схему ММЭ с функционалом:

$$-f(1)\ln f(1) - f(2)\ln f(2) + \mu(1 - f(1) - f(2)) + \lambda(P + f(2) - f(1)) \to \max . \qquad (9)$$

Полученные из условия (9) формулы

$$
\begin{aligned}
&-\ln\, f(1) - 1 - \mu - \lambda = 0, \\
&-\ln\, f(2) - 1 - \mu + \lambda = 0
\end{aligned}
\tag{10}
$$

дают выражения для вероятностей:

$$
\begin{aligned}
f(1) &= \exp\,(-1 - \mu - \lambda), \\
f(2) &= \exp\,(-1 - \mu + \lambda).
\end{aligned}
\tag{11}
$$

Подстановка этих выражений в условия (7) и (8) определяет связь между множителями Лагранжа:

$$
\begin{aligned}
\exp\,(-1 - \mu) 2\, \mathrm{ch}\,(\lambda) &= 1, \\
\exp\,(-1 - \mu) 2\, \mathrm{sh}\,(\lambda) &= P.
\end{aligned}
\tag{12}
$$

Разделив второе уравнение на первое, для поляризации P системы имеем выражение

$$
P = \mathrm{th}\,(\lambda). \tag{13}
$$

Сравнивая его с выражением для поляризации равновесного состояния двухуровневой системы с магнитным моментом $\mathbf{M}$ в магнитном поле $\mathbf{H}$ [12]:

$$
P = \mathrm{th}\,(\mathbf{mH}/kT), \tag{14}
$$

заключаем, что, положив $\lambda = \mathbf{mH}/kT$, мы тем самым характеризуем неравновесное состояние как квазиравновесное с магнитным полем $\mathbf{H}$, соответствующим заданной поляризации P или магнитному моменту $\mathbf{M}$:

$$
H(P) = (kT/2m)\, \ln\,[(1 + P)/(1 - P)]. \tag{15}
$$

Смысл полученного результата в том, что термодинамически равновесное состояние двухуровневой системы при наличии магнитного поля в случае его мгновенного выключения оказывается неравновесным, не может измениться мгновенно, и потому в моменты времени, малые по сравнению с временем релаксации системы, описывается как квазиравновесное при наличии плавно уменьшающегося по величине магнитного поля.

3. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ

Далекие от равновесия стационарные состояния открытых систем наблюдают во многих процессах. Системы с протекающими автокаталитическими химическими реакциями были одними из первых, продемонстрировавших характерные типы поведения таких систем, как бистабильность, осцилляции, генерация волн, объясненные механизмом автокатализа [9]. Примером такой реакции является реакция Белоусова–Жаботинского с реагентами: сульфатом церия $Ce_2(SO_4)_3$, малоновой кислотой $CH_2(COOH)_2$, броматом калия $KBrO_3$, ферроином, при интенсивном перемешивании поступающими в реакционный объем, из которого одновременно выводятся продукты реакции. Катализатор реакции церий способствует тому, что из одной молекулы промежуточного продукта бромистой кислоты $HBrO_2$ производятся две молекулы

$$\mathrm{HBrO_2 + BrO_3^- + 3H^+ + 2Ce^{3+} \to 2HBrO_2 + 2Ce^{4+} + H_2O}. \tag{16}$$

Катализатор при этом не расходуется, но меняет валентность. Ферроин придает раствору красный цвет при избытке ионов трехвалентного церия и голубой — при избытке ионов четырехвалентного церия. Если время пребывания реагентов в зоне реакции недостаточно для выравнивания скоростей прямых и обратных реакций, то в системе возникают феномены бистабильности и химических часов — периодического чередования бистабильных состояний соответственно с избытком трехвалентных или четырехвалентных ионов церия. Цвет реакционного раствора изменяется с периодом в несколько минут. В отсутствие перемешивания в системе наблюдают генерацию и распространение волн.

Стационарные состояния открытых систем рассмотрим на примере простой модели автокатализа [9], представленной двумя сопряженными газовыми химическими реакциями:

$$A + 2X \underset{k_2}{\overset{k_1}{\leftrightarrow}} 3X, \quad X \underset{k_4}{\overset{k_3}{\leftrightarrow}} B. \tag{17}$$

В качестве переменной состояния принята концентрация x промежуточного продукта X. Вещества A и B непрерывно поступают в систему или удаляются из нее, обеспечивая тем самым постоянство их концентраций a и b. Вещество A является катализатором и увеличивает содержание промежуточного продукта X, который в то же самое время превращается в вещество B.

При равновесии имеет место равенство скоростей прямой и обратной реакций:

$$\begin{aligned} &k_1 a x^2 = k_2 x^3, \\ &k_3 x = k_4 b, \end{aligned} \tag{18}$$

единственным образом определяющих концентрацию промежуточного продукта x и отношение концентраций реагентов a/b:

$$\begin{aligned} &x = \frac{k_4 b}{k_3} = \frac{k_1 a}{k_2}, \\ &\frac{b}{a} = \frac{k_1 k_3}{k_2 k_4}. \end{aligned} \tag{19}$$

Вдали от равновесия стационарное состояние характеризуют условием сбалансированности суммарного влияния прямых и обратных реакций в форме кубического уравнения:

$$-k_2 x^3 + k_1 a x^2 - k_3 x + k_4 b = 0. \tag{20}$$

Переменную x, описывающую концентрацию промежуточного продукта X, будем понимать в статистическом смысле как наиболее вероятное значение. Интенсивная случайная величина x представляет результат усреднения по мгновенным значениям момента наблюдения и объему и может быть выражена суммой статистически независимых, одинаково распределенных величин, соответствующих концентрациям различных элементов объема x_i.

Применяя обычную схему ММЭ для описания такого стационарного состояния с условием связи (20)

$$-\sum_i \left[x_i \ln x_i - \lambda(-k_2 x_i^2 + k_1 a x_i^2 - k_3 x_i + k_4)\right] \to \max, \tag{21}$$

приходим к уравнению

$$\ln x = \lambda(-3k_2 x^2 + 2k_1 a x - k_3), \tag{22}$$

которое легко решить графически.

При том, что проследить связь между множителем Лагранжа λ и концентрацией x из-за отсутствия аналитического выражения теперь оказывается намного сложнее, соотношение (22) позволяет сделать заключения об основных чертах описываемого процесса. Данное уравнение может иметь только одно или два устойчивых решения. Два решения означают существование бистабильности в открытой химической системе и возможность феномена химических часов. При этом значения концентраций x, соответствующих этим состояниям, оказываются количественно определяемыми, заведомо положительными, а сами состояния в соответствии с ММЭ наиболее устойчивыми.

Связь между множителем Лагранжа λ, концентрацией x и другими параметрами задачи легко продемонстрировать для случая, когда уравнение (22) имеет одно решение. Графики логарифма в левой части и параболы в правой части уравнения касаются друг друга, а следовательно, имеют общую касательную. Равенство производных этих функций

$$\frac{1}{x} = \lambda(-6k_2 x + 2k_1 a) \tag{23}$$

преобразуем в квадратное уравнение:

$$6k_2 \lambda x^2 - 2k_1 a \lambda x + 1 = 0. \tag{24}$$

Единственность решения требует, чтобы дискриминант этого квадратного уравнения был равен нулю:

$$4k_1^2 a^2 \lambda^2 - 24 k_2 \lambda = 0, \tag{25}$$

что позволяет выразить множитель Лагранжа λ соотношением

$$\lambda = \frac{6k_2}{k_1^2 a^2}, \tag{26}$$

а переходную в бистабильный режим концентрацию x — выражением

$$x = \frac{k_1 a}{6k_2}. \tag{27}$$

Полученное значение концентрации в шесть раз меньше значения равновесной. Переход в бистабильный режим происходит раньше, чем будет достигнуто термодинамическое равновесие.

Удобство ММЭ для моделирования систем связано с тем, что он позволяет в качестве условий связи использовать не только эмпирическую, но и априорную информацию. При этом появляется возможность оценить чувствительность функции распределения к тому или иному условию. Для компьютерного моделирования сложных статистических систем могут быть использованы специальные ММЭ-алгоритмы [11, 12].

ВЫВОДЫ

1. Применение ММЭ для решения статистических проблем перспективно и актуально. ММЭ-оценка функции распределения удовлетворяет свойствам плотности вероятности. Свойство неотрицательности удовлетворяется автоматически в силу экспоненциальной формы ММЭ-решения, а нормировку можно считать одним из дополнительных условий, используемых при работе метода.

2. Обобщение второго закона термодинамики на открытые системы позволяет применить ММЭ для их статистического описания.

3. При описании равновесных и неравновесных состояний в рамках традиционных статистических моделей ММЭ приводит к известным результатам и дает новые результаты при применении к описанию стационарных состояний открытых систем с автокаталитическими химическими реакциями.

4. Простая схема, данные наблюдений и априорная информация, используемые в качестве ограничений, способствуют применению ММЭ при описании и моделировании различных процессов, в том числе и в физике высоких энергий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Никитин Ю. П., Розенталь И. Л.* Ядерная физика высоких энергий. М.: Атомиздат, 1980.
2. *Simak V., Sumbera M., Zborovsky I.* Entropy in Multiparticle Production and Ultimate Multiplicity Scaling // Phys. Lett. B. 1988. V. 206. P. 159–162.
3. *Huber P. J.* Robast Statistics. N. Y.: Wiley, 1981.
4. *Вильсон А. Дж.* Энтропийные методы моделирования сложных систем. М.: Наука, 1978.
5. *Cejnar P., Jolie J.* Wave-Function Entropy and Dynamical Symmetry Breaking in Interacting Boson Model // Phys. Rev. E. 1998. V. 58, No. 1. P. 387–399.
6. *Cejnar P., Jolie J.* Dynamical-Symmetry Content of Transitional IBM-I Hamiltonian // Phys. Lett. B. 1998. V. 420. P. 241–247.
7. *Friden B. R., Swindel W.* // Science. 1976. V. 191. P. 1237–1246.
8. *Сороко Л. М.* Принцип максимума энтропии и его применение для решения обратных задач // ЭЧАЯ. 1981. Т. 12, вып. 3. С. 754–823.
9. *Николис Г., Пригожин И.* Познание сложного. М., 1990. С. 75–80; 24–34.
10. *Burg J. R.* Ph. D. Thesis, Department of Geophysics, Stanford University. Stanford, 1975.
11. *Ту Дж., Гонсалес Р.* Принципы распознавания образов. М., 1978. С. 152–155.
12. *Гельфер Я. М., Любощиц В. Л., Подгорецкий М. И.* Парадокс Гиббса и тождественность частиц в квантовой механике. М., 1975. С. 17; 62.
13. *Barrodale I., Erikson R. E.* Algorithms for Least Square Linear Prediction and Maximum Entropy Spectral Analysis // Geophysics. 1980. V. 5, No. 3. P. 420.
14. *Белашев Б. З., Сороко Л. М.* Обработка данных методом максимума энтропии. Препринт ОИЯИ Р10-80-696. Дубна, 1980.

Получено 6 апреля 2001 г.