ЭНТРОПИЯ ВЫПУКЛЫХ ПОЛИЭДРОВ

Войтеховский Ю.Л. (woyt@geoksc.apatity.ru)
Кольское отделение. Геологический институт Кольского научного центра РАН. Апатиты

ENTROPY OF CONVEX POLYHEDRA

Voytekhovsky Yu.L.
Kola branch. Geological Institute, Kola Science Centre of RAS. Apatity, Russia

В статьях (*Voytekhovsky, 2016, 2017 a-c*) автором предложены новые подходы к описанию комбинаторных типов выпуклых полиэдров, что вызвано довлеющим преобладанием среди них асимметричных (примитивных триклинных) форм. Здесь в качестве дополнительной характеристики рассматривается статистическая энтропия.

Категория энтропии предложена в термодинамике Клаузиусом в 1865 г. Её статистическая интерпретация дана Больцманом в 1872 г. Шеннон (*Shannon, 1948*) и Альфен (*Halphen, 1957*) независимо нашли ту же формулу в рамках математической теории информации и популяционной статистики, соответственно:

$$H = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i$$

В обоих случаях H есть свёртка некоторого распределения вероятностей p_i с условием $p_1 + \ldots + p_n = 1$. Функция H ограничена $H_{min} = 0$, когда одна из $p_i = 1$, и $H_{max} = \log n$, когдавсер$_i$ = 1/n. Графики H для двух (дуги с $H_{max} = \lg 2$) и трёх (поверхность с $H_{max} = \lg 3$) p_i даны на рис. 1 над барицентрической диаграммой $p_1 + p_2 + p_3 = 1$. Видно, что малые изменения p_i в её углах дают большие изменения H, те же изменения p_i в центре диаграммы влияют на H слабее.

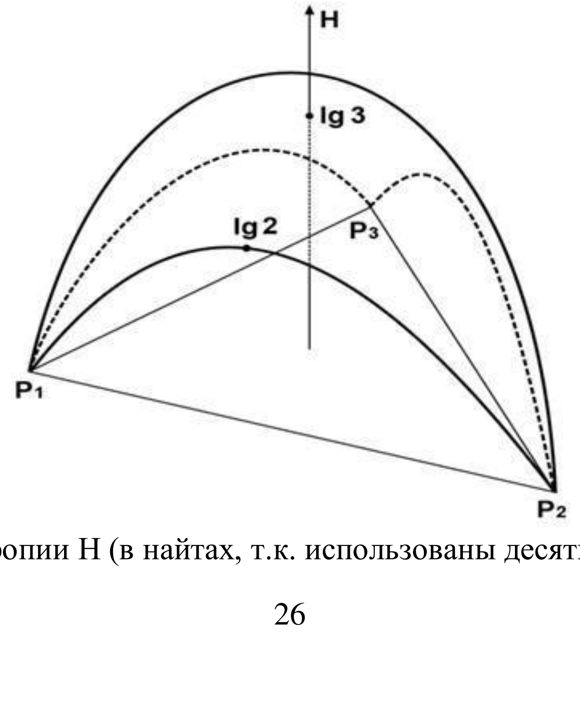

Рис. 1. График энтропии H (в найтах, т.к. использованы десятичные логарифмы).

Рассмотрим топологическую энтропию H для вероятностей p_i нахождения вершин n-акра в разных позициях по точечной группе симметрии (т.г.с.). Тогда H_{max} достигается дл якомбинаторно асимметричных n-акров (n≥ 7), H_{min} – для правильных и полуправильных полиэдров, включая серии призм и антипризм (чётные n ≥ 4). Но как H зависит от порядка группы автоморфизмов (п.г.а.,a.g.o.)?

Были изучены рёберные графы 4- … 8-акров (*Войтеховский, Степенщиков, 2008*). Результаты даны на рис. 2-4. Они обнаруживают общий тренд: чем выше симметрия, тем ниже H – с многими исключениями. n-акры с одним п.г.а. (и даже т.г.с.) могут иметь различную H, n-акры с одной H могут иметь разные т.г.с. (и даже п.г.а.). Более того, n-акры с б*о*льшим п.г.а. могут иметь б*о*льшую H.

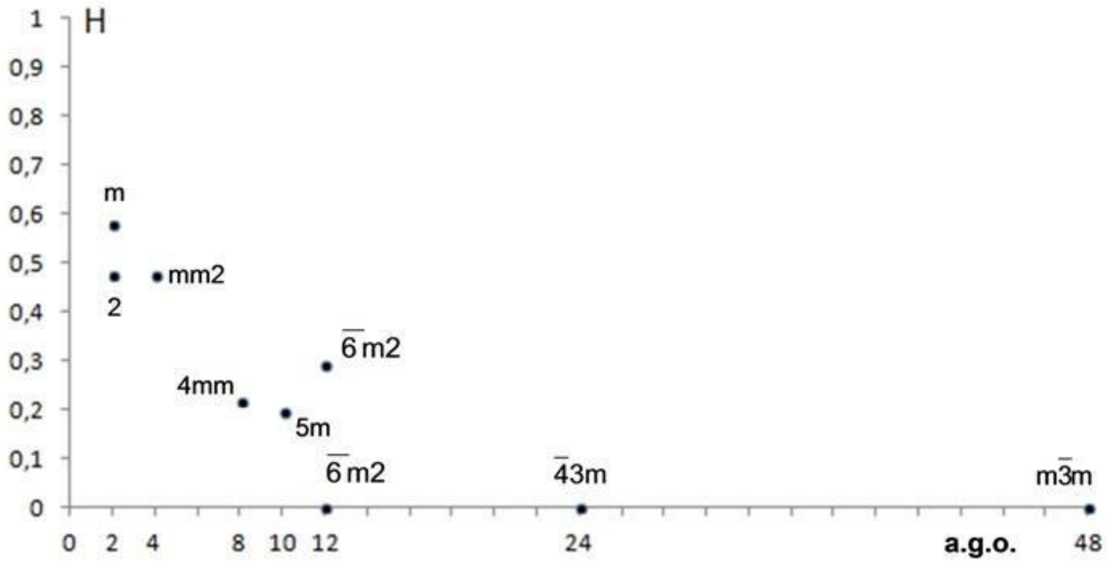

Рис. 2. Энтропия H выпуклых4- … 6-акров (всего 10) *vs*. п.г.а. (a.g.o.).

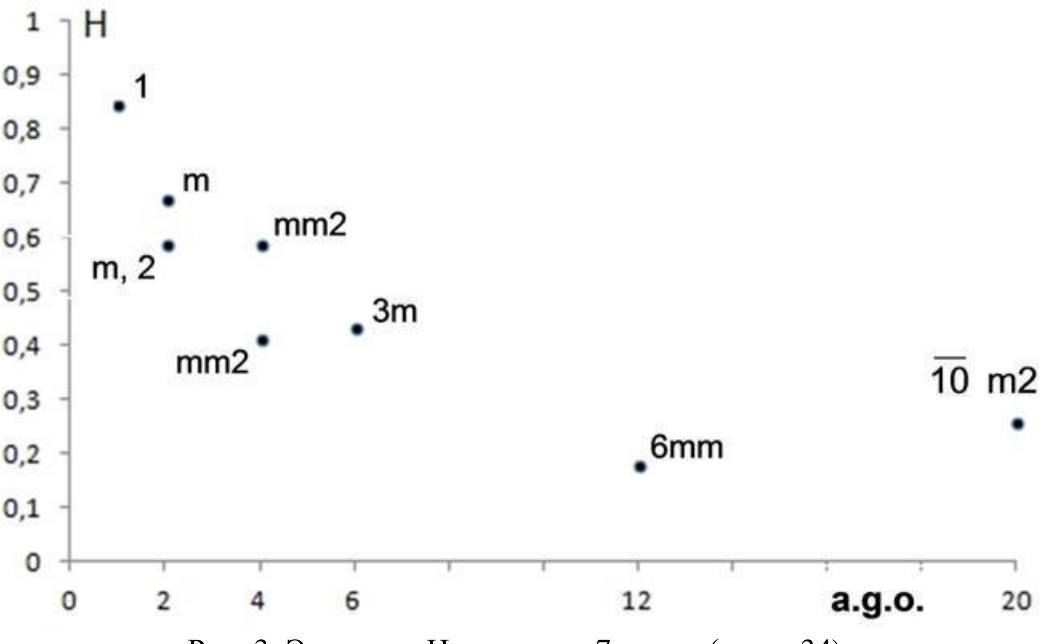

Рис. 3. Энтропия H выпуклых7-акров (всего 34).

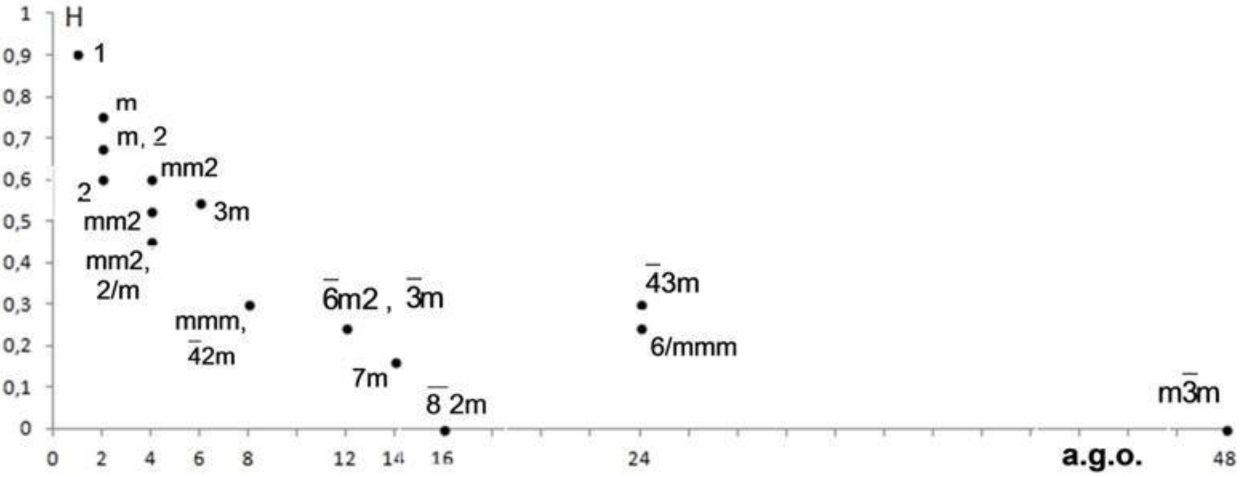

Рис. 4. Энтропия H выпуклых 8-акров (всего 257).

Топологическая энтропия H характеризует не столько «сложность», сколько «неупорядоченность» n-акра. Комбинаторно асимметричные полиэдры наиболее неупорядоченные (H_{max}), правильные и полуправильные – наиболее упорядоченные (H_{min}). Показатель сложности должен различать n-акры одной т.г.с., но разного числа рёбер, по-разному связывающих вершины (организующих систему). Для этого предлагается энтропия H_v, учитывающая вероятности p_iвершин с разными валентностями. Так, есть 7 комбинаторно асимметричных 7-акров, не различимых по H. Но почти все они различимы по H_v: 511, 43, 412, 331 (два 7-acra), 3211, 232. (В кодах последовательно даны числа 3- …6-валентных вершин). Аналогично, 140 комбинаторно асимметричных 8-акров, не различимых по H, по кодам вершин разбиваются на 31 класс, по H_v – на 12 классов.

В отличие от H, энтропия H_v достигает абсолютного минимума для правильных и полуправильных n-акров, но не достигает максимума lgn в силу утверждения: нет выпуклого полиэдра, у которого все вершины имеют разные валентности. Оно следует из более сильного утверждения: всякий выпуклый полиэдр содержит по меньшей мере 4, или 3 и 2, или 3 пары вершин той же валентности.

Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. Кн. 4: Выпуклые полиэдры. Т. 1: 4- … 12-эдры. Апатиты: КНЦРАН, 2008. 833 с.

Halphen E. L’analyse intrinsèque des distributions de probabilité. Publ. Inst. Stat. Univ. Paris. 1957. V. 6. N 2. P. 77-159.

*Shannon C.E.*The mathematical theory of communication. Bell Syst. Tech. J. 1948. V. 27. P. 379-423, 623-656.

Voytekhovsky Yu.L. How to name and order convex polyhedra // Acta Cryst. 2016. A72. P. 582-585.

Voytekhovsky Yu.L. Ordering of convex polyhedra and the Fedorov algorithm // Acta Cryst. 2017 *a*. A73. P. 77-80.

Voytekhovsky Yu.L. Convex polyhedra with minimum and maximum names // Acta Cryst. 2017 *b*. A73. P. 271-273.

Voytekhovsky Yu.L. Accelerated scattering of convex polyhedra // Acta Cryst. 2017 *c*. A73.In press.