

# АЛГОРИТМЫ ЭНТРОПИЙНОГО МЕТОДА АНАЛИЗА ДЛЯ ОТОБРАЖЕНИЯ СВОЙСТВ ОБЪЕКТА В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

А. Б. ЛОГОВ, Р. Ю. ЗАМАРАЕВ, А. А. ЛОГОВ

*Институт угля и углекислоты СО РАН, Кемерово, Россия*

e-mail: r.zamaraev@mail.kemsc.ru, logoff@rambler.ru

We present an improvement of the entropy analysis method for the complex multifactor systems of unique objects. The algorithms of mapping and ranging object's properties (rather than objects themselves) in the phase space are presented. Some features of this method applied to the analysis of the Mendeleev periodic system of chemical elements are demonstrated.

Практика исследования сложных систем (экономических, промышленных, социальных и т. д.) показала, что наибольшую полезность имеют заключения о собственных аномалиях показателей и диспропорциях характеристик отдельных элементов (уникальных объектов) системы или их групп. Такая постановка для краткости может быть названа системным аудитом.

Инвертированная схема энтропийного метода позволяет получить ранжирование на фазовой плоскости показателей и характеристик в системе по степени их специфичности для каждого структурного элемента, что является удобной и наглядной формой системного аудита. Такой переход к выявлению видов состояний элементов системы рассматривается как развитие прямой схемы, изложенной в [1, 2].

Содержание прямой схемы составляет построение первичных отображений таблицы исходных данных  $R(i, j)$ , приводящих к моделям элемента  $i$  при условии выбора показателя  $j$ . Основная процедура инвертированной схемы — инверсия таблицы первичных отображений, приводящая к определению новых переменных — моделей показателей  $j$  при условии выбора элемента  $i$ .

Без промежуточных обоснований и результатов, содержащихся в [2], приведем алгоритмы для получения:

фазовой абсциссы

$$U_y(j/i) = \frac{U_2(i/j)}{\sigma [\ln U_2(i)]} = \ln \left( U_2(i/j) \prod_{i=1}^m U_2(i/j)^{-\frac{1}{m}} \right)^{\frac{1}{\sigma [\ln R(j)] \times \sigma [\ln U_2(i)]}}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned}\sigma^2 [\ln U_2(i)] &= \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n \ln^2 U_2(i/j); \\ U_2(i/j) &= \ln \left[ R(i/j) \prod_{i=1}^m R(i/j)^{-\frac{1}{m}} \right]^{\frac{1}{\sigma[\ln R(j)]}}; \\ \sigma^2 [\ln R(j)] &= \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m \ln^2 K(i/j); \\ K(i/j) &= R(i/j) \prod_{i=1}^m R(i/j)^{-1},\end{aligned}$$

и ординаты

$$U_z(j/i) = \frac{U_3(i/j)}{\sigma [R^{-1}(j)] \times \sigma [U_3(i)]}, \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned}\sigma^2 [U_3(i)] &= \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n U_3^2(i/j); \\ U_3(i/j) &= \frac{L(i/j)}{\sigma [R^{-1}(j)]}; \\ \sigma^2 [R^{-1}(j)] &= \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m L^2(i/j); \\ L(i/j) &= \hat{M} [R^{-1}(j)] - R^{-1}(i/j)\end{aligned}$$

из таблицы исходных данных  $R(i, j)$ .

Для фазовых портретов вида  $(U_y; U_z)$  инвертированных отображений справедливы результаты, полученные ранее для фазовых портретов отображений прямой схемы. Так, показатели  $j$ , изображающие точки которых выходят за эллиптические или гиперболические границы, классифицируются как проявления другого вида состояния и являются особенно специфичными для рассматриваемого элемента  $i$ . Диагностическими признаками могут быть как большие, так и малые величины характеристик, важно, чтобы у прочих элементов они были другими.

В [2] изложены результаты тестирования на примере периодической системы химических элементов по инвертированной схеме, там же содержится полный перечень из 56 исследованных характеристик по 82 элементам (от водорода до свинца).

Простейший вариант фазового портрета — для одного элемента — приведен на рис. 1 и 2. Собственные портреты Li и Na позволяют указать на специфичность показателей энергии ионизации второго и третьего уровня ( $R(10)$ ,  $R(11)$ ) при отметке ниже среднего энергии ионизации первого уровня ( $R(9)$ ).

Яркие и методически важные результаты следуют из обобщенных портретов объективных групп элементов. Алгоритм обобщения  $j$ -го показателя по подмножеству элементов  $H$  из исходного набора для фазовых координат имеет вид

$$U(j/H) = \frac{P(j, H)}{\sigma [P(H)]}, \quad (3)$$

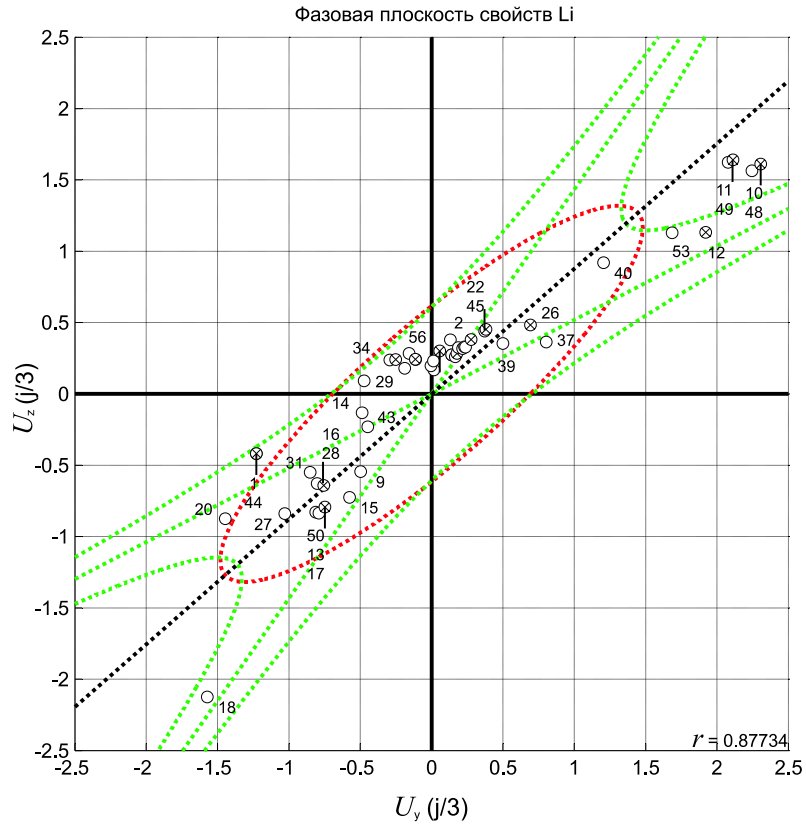


Рис. 1.

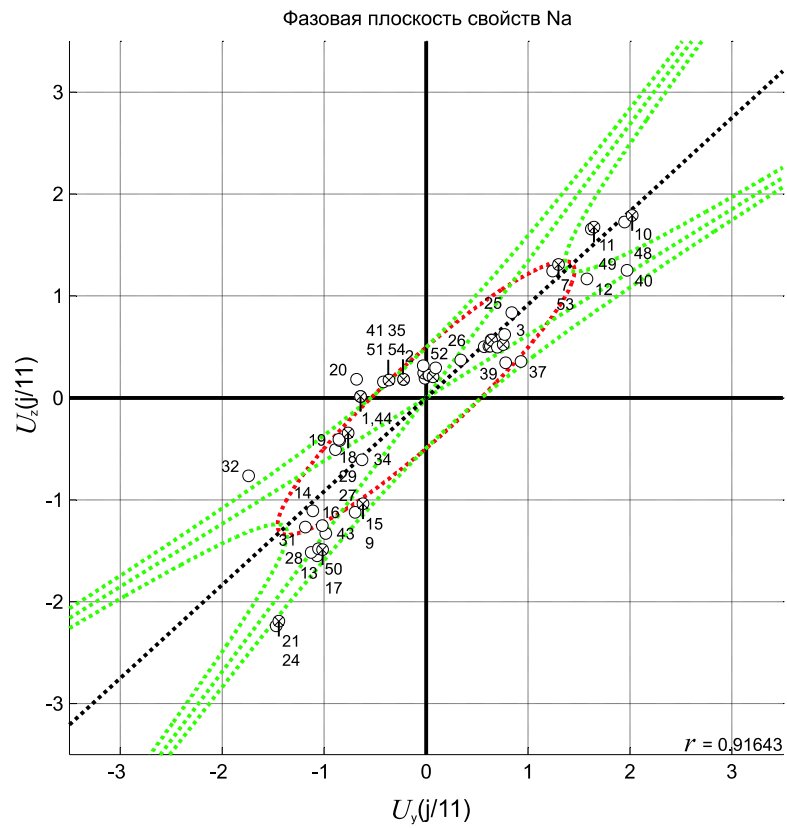


Рис. 2.

где

$$P(j, H) = \sum_{i \in H} U(j/i);$$

$$\sigma^2[P(H)] = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n P^2(j, H).$$

Например, для газов N, O, F и Cl подмножество  $H$  составит  $i = 7, 8, 9, 17$ . Обобщение фазовых абсцисс (1) и ординат (2) этих элементов приводит к моделям свойств группы  $U_y(7, 8, 9, 17)$  и  $U_z(7, 8, 9, 17)$ . Соответствующий фазовый портрет приведен на рис. 3. В такой подсистеме наиболее специфичным признаком является оценка электроотрицательности, обозначенная в порядке убывания значимости  $R(50)$ ,  $R(15)$ ,  $R(13)$ ,  $R(14)$ ,  $R(16)$  и  $R(17)$ .

Столь же сильным признаком служат характеристики ионизации — энергия первого уровня  $R(9)$ , второго уровня  $R(10)$  и второй потенциал  $R(48)$ . К ним приближаются показатели третьего уровня  $R(11)$  и  $R(49)$ .

Яркой специфичностью обладает следующая комбинация: энергия связи 2 атомной молекулы  $R(2)$  относительно длины связи  $R(3)$ . Другую интересную комбинацию образует сравнение энергий 1s-оболочки  $R(20)$  и 2s-оболочки  $R(21)$ . После получения и анализа подобных портретов нетрудно высказать идеи по формированию наиболее информативных разностных и наиболее устойчивых суммарных комбинаций.

В области малых значений также проявляются специфичные характеристики — скорость звука  $R(26)$ , теплопроводность  $R(39)$  и набор определений атомных радиусов

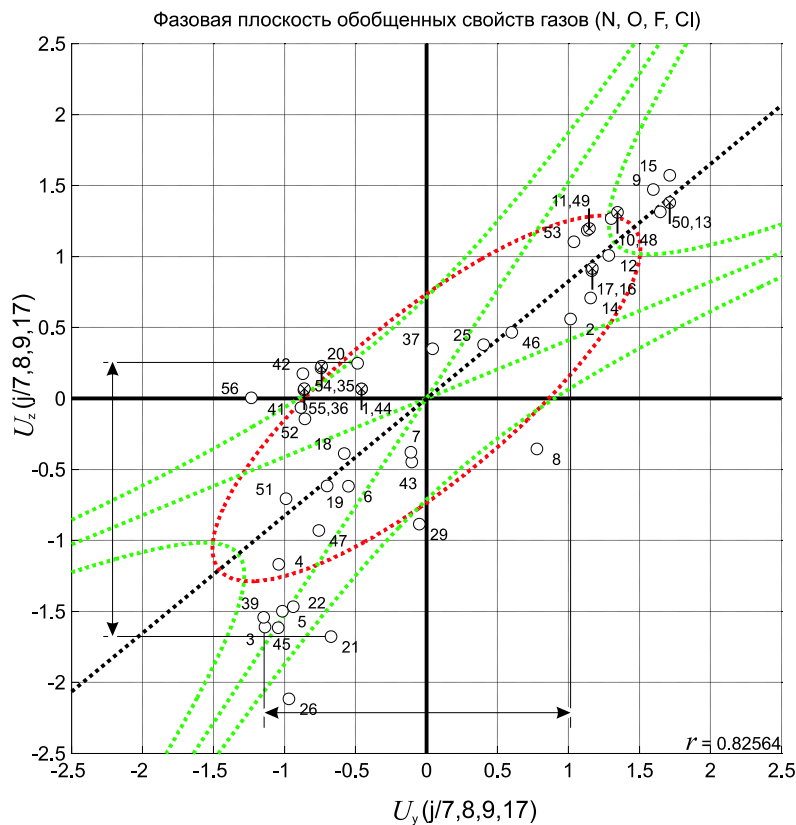


Рис. 3.

$R(4), \dots, R(7), R(22)$  и  $R(45)$ . Аналогичным образом были получены портреты свойств группы инертных газов, лантаноидов, элементов столбца 1А и 2А.

Отличия подсистемы инертных газов от газов проявляются прежде всего в изменении соотношения энергии  $R(2)$  и длины  $R(3)$  связи (рис. 4).

Черты специфичности приобретают низкие уровни термодинамических характеристик: температуры  $R(35)$  и теплоты  $R(54)$  плавления, аналогичные показатели  $R(36)$  и  $R(55)$  кипения, а также энергий: “Fusion energy”  $R(41)$  и “Vaporization energy”  $R(42)$ .

Малые значения параметров ионизации составляют особенность портрета лантаноидов (рис. 5); столь же яркими признаками являются малые показатели электроотрицательности. В этой подсистеме энергия  $2s$ -оболочки  $R(21)$  превышает энергию  $R(20)$ , вместе с этим длина связи  $R(3)$  велика по сравнению с энергией  $R(2)$ , но самая сильная специфика лантаноидов заключается в низкой энергии ионизации, особенно по показателям второго уровня.

Ряд характеристик попадает в зону специфичности только на данном портрете: низкая теплоемкость  $R(52)$ , большое электрическое сопротивление  $R(34)$  и большой атомный объем  $R(25)$ .

Выделяемые подсистемы могут быть образованы частично формальными признаками, тогда будет оцениваться целесообразность произведенной группировки. Например, на рис. 6 и 7 иллюстрируются фазовые портреты столбцов таблицы: 1А (Li, Na, K, Rb, Cs) и 2А (Be, Mg, Ca, Sr, Ba).

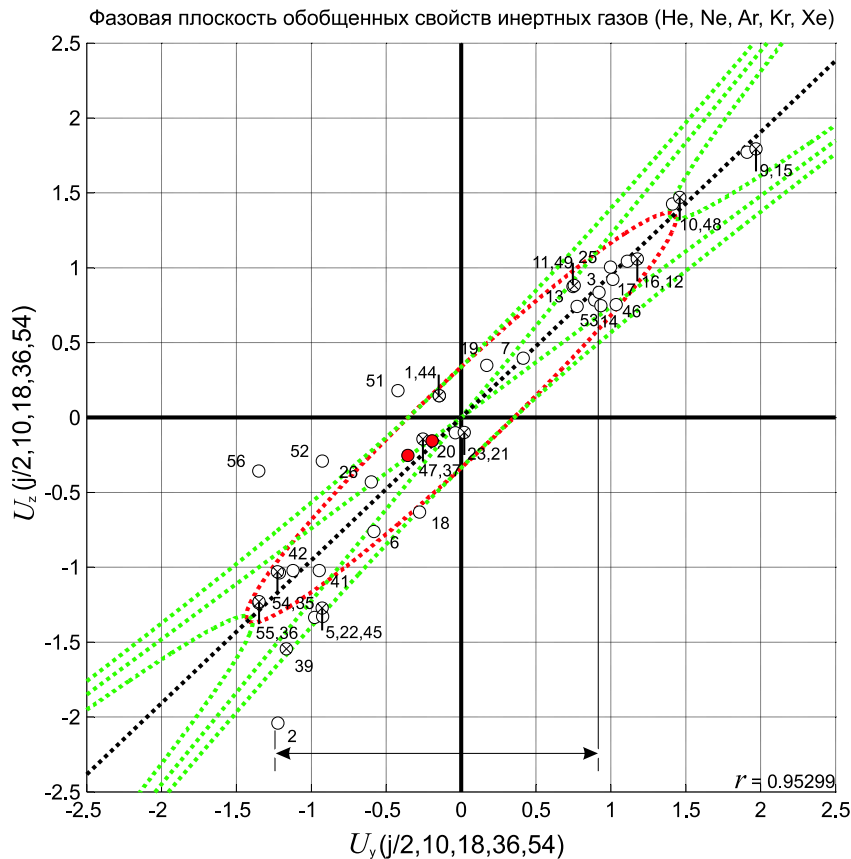


Рис. 4.

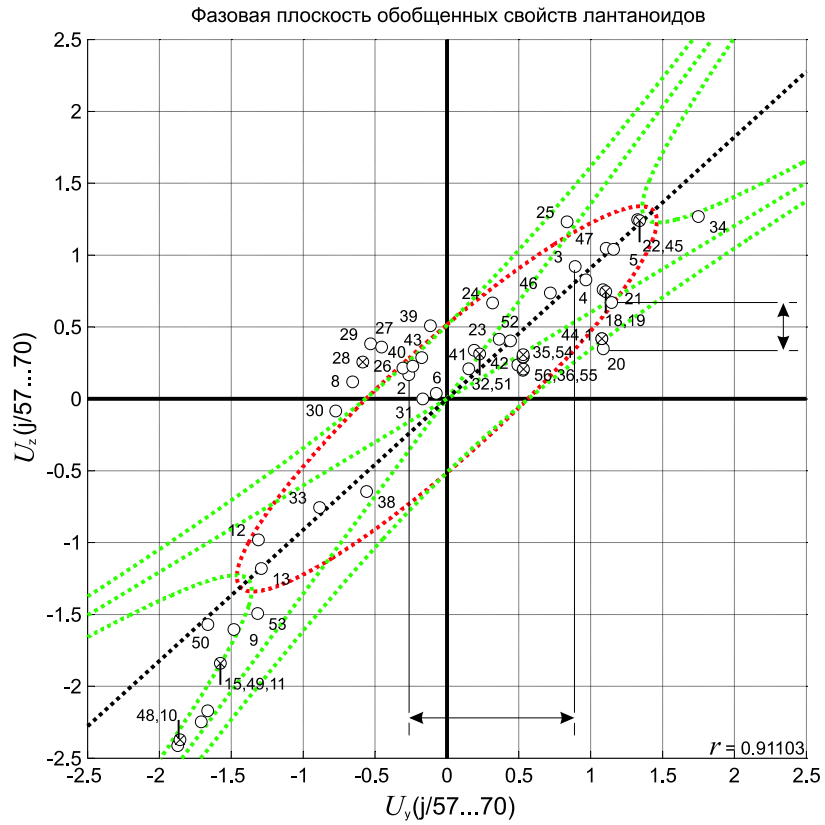


Рис. 5.

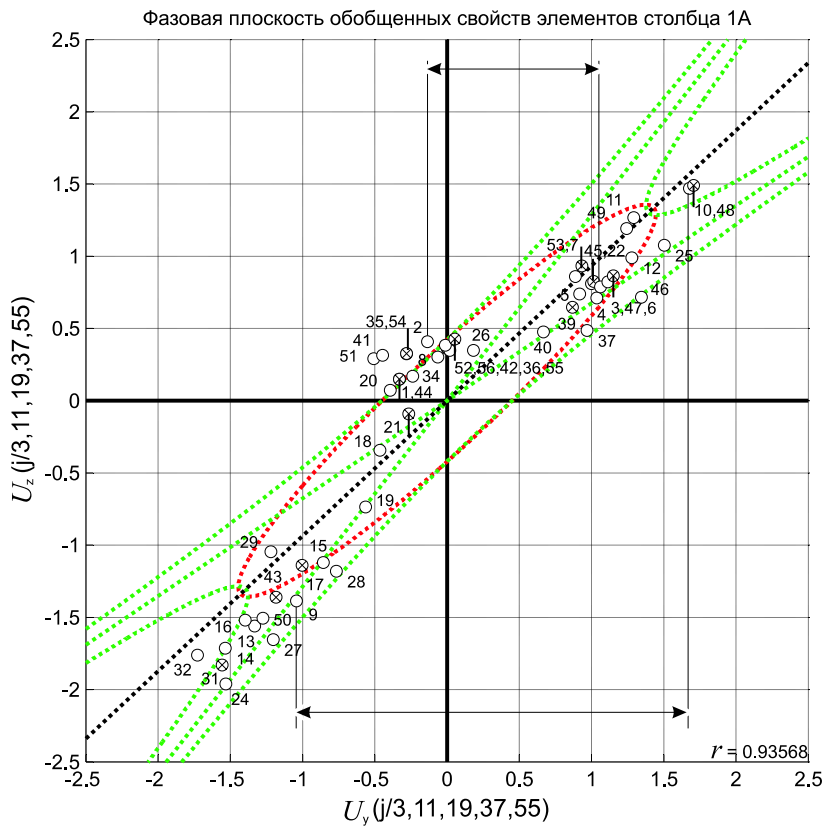


Рис. 6.

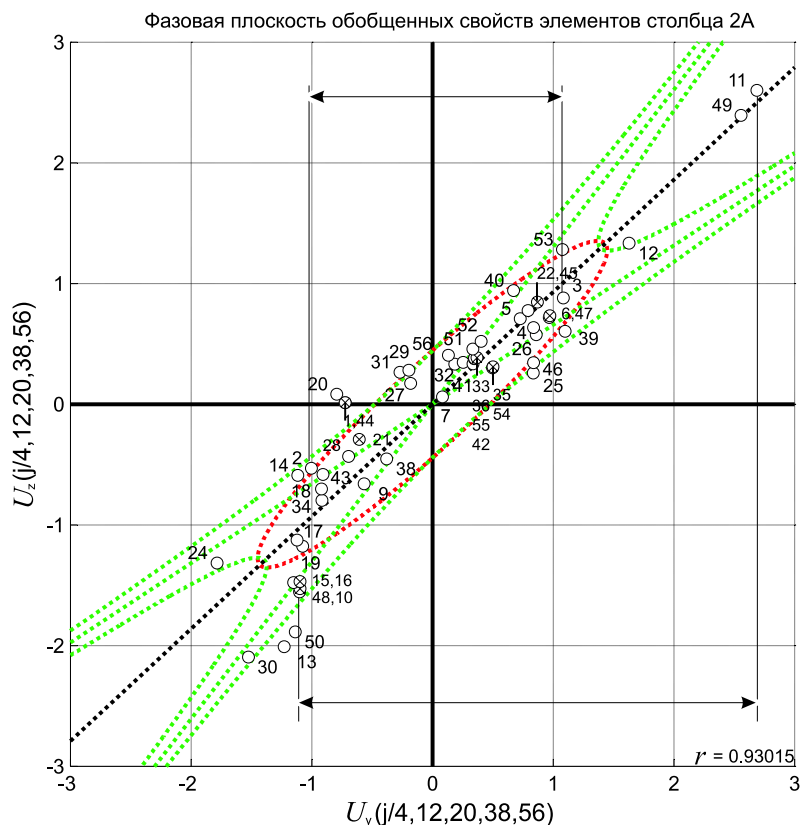


Рис. 7.

Основными диагностическими признаками столбца 1А являются высокая энергия ионизации второго уровня  $R(10)$  и второй потенциал  $R(48)$  относительно малой энергии первого уровня  $R(9)$ . В столбце 2А проявляются высокие показатели третьего уровня —  $R(11)$  и  $R(49)$  — относительно малых характеристик второго.

Очевиден ряд сильных свойств, объединяющих эти группы. Это прежде всего большой молярный  $R(25)$  и атомный  $R(46)$  объем, малые плотность  $R(24)$  и электроотрицательность по всем показателям.

Корректность выводов по фазовым портретам групповых свойств не может быть обеспечена методами математического моделирования, а целиком определяется объективным существованием или отсутствием групп в исследуемой системе, что может быть выявлено при анализе системы и ранжировании ее элементов алгоритмами прямой схемы.

## Список литературы

- [1] ЛОГОВ А.Б., КОЧЕТКОВ В.Н., РОЖКОВ А.А. Энтропийный подход к моделированию процесса реструктуризации угольной отрасли. М.: Недра, 2001. 324 с.
- [2] ЛОГОВ А.Б., ЗАМАРАЕВ Р.Ю., ЛОГОВ А.А. Анализ функционального состояния промышленных объектов в фазовом пространстве. Кемерово: Институт угля и углехимии СО РАН, 2004. 168 с.

*Поступила в редакцию 11 февраля 2005 г.,  
в переработанном виде — 12 мая 2005 г.*