

# ENTROPIA E CONFLITTO DI ENTROPIA NELLE SERIE STORICHE DI DATI IDROLOGICI

*M. Fiorentino*<sup>\*</sup>, *M. R. Margiotta*<sup>\*\*</sup>, *A. Sanchirico*<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup> Dipartimento delle Culture Europee e del Mediterraneo, Università degli Studi della Basilicata, Via San Rocco, 75100, Matera

<sup>\*\*</sup> Scuola di Ingegneria, Università degli Studi della Basilicata, Viale dell'Ateneo Lucano n. 10, 85100, Potenza

## SOMMARIO

A partire dallo sviluppo della teoria dell'informazione di Shannon, ed in particolar modo con l'introduzione del principio di massima entropia ad opera di Jaynes, il concetto di entropia si è rivelato uno strumento teorico potente ed estremamente versatile per l'analisi dei sistemi complessi, sia stocastici che deterministici, in numerosi settori scientifici, idrologia inclusa. Questo lavoro intende fornire una descrizione dello stato dell'arte relativo all'uso del concetto di entropia per la modellazione idrologica, partendo dalla sua originaria formulazione ad opera di Clausius, fino alla definizione di un approccio meccanico-statistico valido per i grafi, i quali forniscono uno schema teorico generale ed innovativo per lo studio di un gran numero di sistemi complessi.

# 1. Cenni introduttivi sul concetto di entropia: dalla termodinamica alla teoria dell'informazione

## 1.1 Interpretazione meccanico-statistica dell'entropia

La funzione entropia, originariamente definita da Clausius sulla base di esigenze di carattere tecnico, come la quantità di calore (per unità di temperatura) non trasformabile in lavoro [1], ha acquisito ben presto una portata cosmologica: il secondo principio della termodinamica afferma infatti che l'entropia di un sistema isolato, quale l'universo, evolve verso un massimo. Di conseguenza, sebbene nella sua formulazione termodinamica l'entropia dipenda soltanto da variabili di stato macroscopiche, non appena si è cominciato ad indagare l'origine meccanica di tale grandezza, è divenuta necessaria la ricerca di una sua formulazione in termini della struttura microscopica del sistema termodinamico. Tuttavia, una descrizione meccanica dell'entropia basata su un approccio di tipo deterministico richiederebbe uno sforzo computazionale immenso, implicando l'analisi delle traiettorie di ogni singolo elemento costituente il sistema (il numero di molecole di un gas termodinamico è tipicamente dell'ordine di  $10^{23}$ ). Per aggirare tale insormontabile problema, Boltzmann adottò un approccio statistico, stabilendo un legame tra la seconda legge della termodinamica e la teoria del calcolo delle probabilità [1]. Coniugando l'additività dell'entropia come funzione di stato estensiva con il carattere moltiplicativo delle configurazioni microscopiche (dette anche microstati del sistema), Boltzmann propose la seguente relazione

$$S = k_B \cdot \ln W , \quad (1)$$

dove la costante  $k_B$  vale circa  $1.381 \times 10^{-23}$  J/K, e  $W$  rappresenta il numero di microstati corrispondenti ad uno stesso stato macroscopico, vale a dire il numero di modi di realizzare un macrostato la cui entropia vale  $S$  [1]. Da un punto di vista combinatorio, lo stato macroscopico al quale corrisponde il maggior numero di microstati equivalenti è allora quello più probabile. In tal modo viene data una interpretazione statistica del secondo principio della termodinamica: gli stati di equilibrio di un sistema termodinamico isolato sono quelli per i quali la funzione  $W$  è massima, ed il conseguente aumento irreversibile di entropia è interpretato come evoluzione del sistema verso probabilità di stati più elevate.

In generale, possiamo schematizzare un gas di  $N$  molecole come un insieme statistico, la cui collezione di coordinate e momenti degli elementi costituenti rappresenta uno spazio delle fasi a sei dimensioni. Tale insieme statistico può essere suddiviso in  $\Omega$  stati, ciascuno definito da un assegnato valore dell'energia delle molecole che lo compongono. Utilizzando una schema in uso in matematica combinatoria, il calcolo del numero di microstati equivalenti è effettuato utilizzando il cosiddetto modello delle "biglie nelle urne" [2], secondo cui le molecole del gas sono assimilate a biglie da collocare in urne, quest'ultime rappresentate dai differenti stati energetici in cui l'insieme statistico è suddiviso. Allo-

ra, il numero  $W$  di modi di disporre le  $N$  molecole in  $\Omega$  stati, con lo stato  $k$ -simo contenente  $N_k$  molecole di energia  $E_k$ , è dato dal coefficiente multinomiale

$$W = \frac{N!}{\prod_k N_k!}, \quad (2)$$

per  $1 \leq k \leq \Omega$ . Poiché, per le proprietà di simmetria di  $W$ , i macrostati più probabili si realizzano in corrispondenza di distribuzioni più uniformi delle biglie nelle urne (distribuzioni che ci appaiono, pertanto, come più disordinate), la seconda legge della termodinamica esprime in termini probabilistici la schiacciante prevalenza del disordine rispetto a configurazioni ordinate degli elementi di un generico sistema fisico.

Sostituendo l'espressione di  $W$  nella relazione (1), nel limite per  $N$  tendente ad infinito, si ottiene il valore dell'entropia (per molecola) data da Gibbs:

$$S = -k_B \sum_k p_k \ln p_k, \quad (3)$$

dove  $p_k = N_k/N$  rappresenta la probabilità che una molecola scelta a caso si trovi nello stato di energia  $E_k$  [1]. Una volta scritta l'entropia nella forma data dalla (3), il calcolo della distribuzione più probabile degli elementi di un sistema termodinamico è ricondotto ad un problema di massimo vincolato per il funzionale  $S(p_k)$ . Massimizzando la (3) utilizzando, oltre alla condizione di normalizzazione  $\sum_k p_k = 1$ , un vincolo esprimente una condizione sul valore medio dell'energia  $\sum_k p_k E_k = E$ , dove  $E$  è l'energia totale del sistema, si ottiene la nota distribuzione di Boltzmann per la frequenza delle particelle aventi assegnato valore dell'energia

$$p_k = \frac{e^{-\mu E_k}}{\sum_k e^{-\mu E_k}}, \quad (4)$$

dove il moltiplicatore di Lagrange  $\mu$  è l'inverso della temperatura. La costante di normalizzazione al denominatore della (4) è detta funzione di partizione, il cui logaritmo (cambiato di segno) rappresenta l'energia libera dell'insieme canonico ed agisce come funzione generatrice del valore atteso dell'energia. L'insieme canonico definisce l'insieme statistico associato ad un sistema termodinamico chiuso ed in equilibrio con l'ambiente.

## 1.2 Informazione e principio di massima entropia

Consideriamo un messaggio emesso da una sorgente, il quale può essere rappresentato per mezzo di una stringa di simboli estratti da un insieme di cardinalità  $\Omega$ , ed indichiamo con  $p_k$  la probabilità di occorrenza del generico simbolo  $R_k$  in un dato luogo del messaggio, per  $1 \leq k \leq \Omega$ . La quantità di informazione associata alla presenza di  $R_k$  in una data posizione della stringa è allora dipen-

dente dalla sua probabilità di occorrenza. Shannon [3] ha postulato il seguente legame tra la probabilità  $p_k$  e l'informazione  $I_k$  ad essa associata

$$I_k = -\ln p_k. \quad (5)$$

Infatti, l'informazione deve essere anzitutto una funzione strettamente decrescente della probabilità: quanto più la presenza di un dato segno in un messaggio è *a priori* improbabile, tanto più il suo verificarsi è *a posteriori* informativo. Al contrario, un simbolo la cui presenza nella stringa sia certa non produrrà alcuna informazione supplementare. Inoltre, la probabilità di trovare contemporaneamente nella stringa due simboli distinti è data dal prodotto delle rispettive probabilità di occorrenza, mentre è intuitivo assumere che l'informazione ricavabile dalla concomitante occorrenza dei due simboli sia pari alla somma delle rispettive informazioni. L'unica funzione continua delle  $p_k$  che soddisfa tutte le condizioni richieste è data dalla (5). L'informazione media

$$E[I_k] = -\sum_k p_k \ln p_k, \quad (6)$$

ottenuta pesando l'informazione relativa ai singoli simboli per mezzo delle loro probabilità *a priori*, è chiamata incertezza media per simbolo della sorgente, intendendo che l'informazione contenuta in una particolare realizzazione di un messaggio è numericamente uguale alla incertezza prima della realizzazione. In altri termini, il contenuto informativo (la sorpresa) di un messaggio sarà tanto maggiore quanto maggiore era l'ignoranza relativa al contenuto del messaggio prima della sua decodifica. È opportuno precisare che il "contenuto" del messaggio va inteso soltanto in termini probabilistici, senza alcun riferimento al suo effettivo valore semantico. In teoria dell'informazione, il contenuto di un messaggio risiede, quindi, interamente nella distribuzione di probabilità dei suoi simboli.

A meno della costante di Boltzmann, la relazione (6) risulta identica alla (3). L'interpretazione che Shannon dà delle probabilità di occorrenza di un simbolo in un messaggio per misurarne l'informazione è, allora, analoga all'uso che Boltzmann fa delle distribuzioni di probabilità delle molecole di un gas per misurare il grado di disordine molecolare di un campione di materia. Pertanto, l'incertezza media viene anche chiamata entropia della sorgente di messaggio. Poiché la costante di Boltzmann conferisce alla grandezza adimensionale (6) le dimensioni di una entropia,  $k_B$  rappresenterebbe un "quanto" di energia termica non utilizzabile, vale a dire il più piccolo flusso di calore per unità di temperatura associabile ad ogni elemento di un sistema termodinamico.

L'uguaglianza tra l'entropia di Gibbs e la funzione di informazione introdotta da Shannon consente di estendere le leggi della termodinamica alla risoluzione di problemi di inferenza statistica. A tale proposito, sia data una variabile aleatoria discreta  $K$  ed indichiamo con  $p_k$  la probabilità di occorrenza di un suo generico valore  $k$ , per  $1 \leq k \leq \Omega$ . Possiamo assimilare la variabile aleatoria ad un messaggio i cui simboli sono scelti tra tutti i possibili valori di  $K$ . Poiché, in

tal modo, la distribuzione di probabilità della variabile casuale definisce anche le probabilità di occorrenza dei simboli nel messaggio, l'entropia della sorgente fornisce una misura dell'incertezza media relativa alla distribuzione  $p_k$ . Esattamente come un sistema termodinamica raggiunge il massimo grado di disordine all'equilibrio termico, Jaynes ha postulato che, in condizioni di incompleta informazione sul processo stocastico che governa un dato sistema fisico, la distribuzione più probabile della variabile aleatoria che lo descrive è quella che massimizza l'entropia nel rispetto di un insieme di vincoli i quali forniscono le sole informazioni disponibili [4, 5]. Un vincolo può rappresentare un qualunque processo fisico in grado di esercitare una qualche influenza sistematica sui valori osservati di  $K$ . Con il principio di massima entropia, Jaynes introduce quindi un metodo di inferenza che fornisce la stima meno distorta della variabile aleatoria, vale a dire una stima basata sulla formulazione del minor numero di ipotesi circa lo stato statistico del sistema. In generale, infatti, le dinamiche che governano un sistema stocastico non sono note *a priori*, o comunque sono note soltanto in modo parziale. Le tecniche di inferenza si propongono allora di determinare le caratteristiche di un processo aleatorio sulla base delle osservazioni dei dati sperimentali generati da tale processo. Le sole osservazioni disponibili possono essere espresse come opportune funzioni della variabile aleatoria, le cui medie d'insieme determinano analiticamente i vincoli da utilizzare per la massimizzazione dell'entropia. Una questione centrale dell'inferenza statistica è rappresentata quindi dalla determinazione dei vincoli, la cui identificazione equivale a scegliere le caratteristiche più significative del sistema, quelle che racchiudono i dettagli statistici più rilevanti del modello di probabilità che si intende determinare. Il principio di massima entropia è diffusamente impiegato per derivare un gran numero di distribuzioni di probabilità, alcune delle quali trovano ampia applicazione in idrologia. Per una rassegna si veda, ad esempio [6].

Nel prossimo capitolo descriveremo una importante classe di sistemi fisici per i quali sarà possibile scrivere un vincolo costitutivo interno, schematizzante l'interconnessione del sistema con il suo ambiente.

## **2. Sistema ed ambiente: formulazione del conflitto di entropia**

Come discusso nel capitolo precedente, la termodinamica dei sistemi all'equilibrio è governata da un principio variazionale di validità generale: quello di massima entropia. Vale la pena sottolineare che una descrizione termodinamica dei sistemi all'equilibrio implica sempre la suddivisione dell'universo in due distinte regioni: il sistema e l'ambiente esterno, con il quale il sistema è, per l'appunto, in condizioni di equilibrio. La definizione di un sistema termodinamico presuppone dunque il tracciamento dei suoi confini, laddove la natura degli scambi energetici attraverso le superfici di separazione riveste un ruolo fondamentale nella descrizione dello stato di equilibrio raggiunto. Per un sistema isolato, per il quale sono nulli sia i flussi di energia che di materia con l'esterno, l'entropia può solo aumentare, raggiungendo un massimo incondizionato

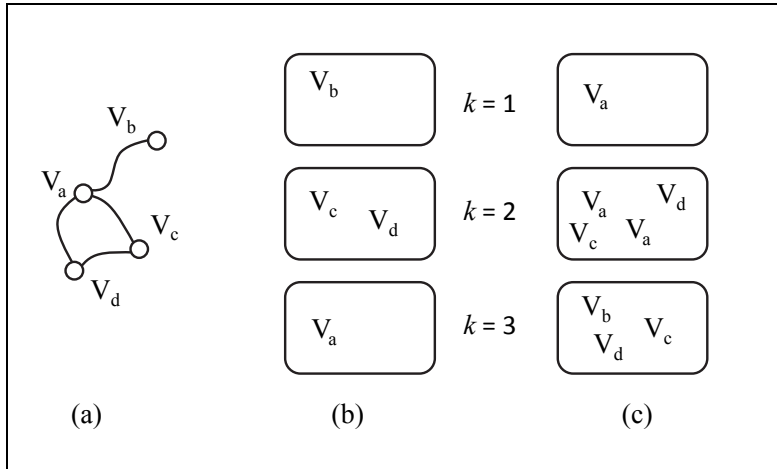
all'equilibrio, detto in tal caso equilibrio microcanonico. Per un sistema chiuso, invece, il quale se pure non scambia materia con l'ambiente può scambiare energia, la configurazione di equilibrio si ottiene in corrispondenza di un massimo vincolato dell'entropia (equazione di Boltzmann), e si parla in tal caso di equilibrio canonico. Di seguito schematizzeremo un sistema fisico mediante un grafo. All'interno di tale schema concettuale emergerà un conflitto tra sistema ed ambiente, i quali competeranno per il raggiungimento delle rispettive configurazioni di equilibrio.

### ***2.1 Nodi e confinanti di una rete complessa***

Un grafo è definito formalmente come un insieme di  $N$  nodi (o vertici) connessi mediante  $M$  archi (o connessioni). Un sistema di elementi interagenti, di seguito detto anche rete complessa, si presta naturalmente ad essere schematizzato mediante un grafo, i cui nodi rappresentano gli elementi costitutivi mentre gli archi ne descrivono le reciproche interazioni. L'utilità della teoria dei grafi risiede innanzitutto nella sua semplicità, consentendo una descrizione teorica valida per una classe estremamente varia di fenomeni. Esempi di reti complesse includono [7]: i sistemi sociali, dove gli individui umani rappresentano i nodi, mentre le relazioni interpersonali fungono da archi; molti sistemi tecnologici, quali ad esempio il web, i cui nodi sono rappresentati dalle pagine web mentre gli archi sono i relativi hyperlink; i sistemi biologici per i quali le molecole sono connesse tra loro mediante reazioni chimiche. Di particolare importanza in geomorfologia è lo schema a rete per la funzione di larghezza di un reticolo idrografico naturale recentemente proposto in [8].

La proprietà più immediata di un grafo è il grado del nodo, anche detto connettività  $k_j$ , definito come il numero delle connessioni del generico nodo  $V_j$ . Un nodo  $V_j$  è detto primo confinante di un nodo  $V_i$  se questi due nodi sono collegati da un arco. Di conseguenza, il grado di un nodo è precisamente il numero dei suoi primi confinanti. In figura 1(a), a titolo esemplificativo è rappresentato un grafo con 4 nodi in cui, ad esempio, la connettività del nodo  $V_A$  vale 3. La distribuzione del grado, cioè la probabilità che un nodo scelto a caso abbia grado  $k$ , è definita come  $p_k = N_k/N$ , dove con  $N_k$  si è indicato il numero di nodi con  $k$  archi. La distribuzione del grado rappresenta una grandezza estremamente importante per le reti reali, dal momento che ne influenza il comportamento dinamico. Ad esempio, è stato dimostrato che le reti con distribuzione del grado a legge di potenza manifestano una sorprendente robustezza rispetto alla rimozione casuale dei loro elementi costitutivi [7]. Di seguito, con riferimento al modello di rete complessa sviluppato in [9], introdurremo un insieme statistico, detto  $G_n$ , raggruppando in nodi in classi ciascuna con uno stesso valore della connettività [Fig. 1(b)]. In particolare, utilizzando un modello di "biglie nelle urne", i nodi del grafo, pensati come elementi dell'insieme statistico, rappresentano le biglie, mentre i gradi dei nodi fungono da urne. Allora, procedendo come per la (2), il numero  $W_p$  di modi di disporre  $N$  nodi in  $\Omega$  stati, con il  $k$ -simo stato contenente

$N_k$  nodi di connettività  $k$ , è dato dal coefficiente multinomiale  $W_p = N! / \prod_k N_k!$ , per  $1 \leq k \leq \Omega$ . In tal modo, come misura del disordine racchiuso nella distribuzione del grado, a meno della costante di Boltzmann, la funzione di entropia può essere definita come proporzionale al logaritmo di  $W_p$ , ottenendo  $S_p = -\sum_k p_k \ln p_k$ , la quale rappresenta l'analogo della (3) per le reti complesse. In questo caso, la distribuzione del grado  $p_k$  definisce la probabilità che un nodo scelto a caso si trovi nello stato  $k$ -simo.



**Fig. 1** – Esempio di grafo. In (b) i nodi di  $G_n$  sono raggruppati sulla base dei valori della connettività, (c) mentre gli elementi dei corrispondenti stati dell'insieme  $G_{nm}$  sono dati dai primi confinanti dei nodi di grado  $k$

Massimizzando l'entropia  $S_p$ , utilizzando (oltre alla condizione di normalizzazione) il vincolo  $\sum_k p_k k = \langle k \rangle$ , esprime una condizione sul grado medio della rete, si ottiene una distribuzione del grado di tipo esponenziale  $p_k = e^{-\mu k} / \sum_k e^{-\mu k}$ , la quale rappresenta l'analogo della (4) per una rete complessa. Il parametro  $\mu$  è il moltiplicatore di Lagrange corrispondente all'inverso di una temperatura generalizzata. Infine, la funzione  $-\ln \sum_k e^{-\mu k}$  funge da energia libera del sistema, rappresentando la funzione generatrice del valore atteso dell'energia (funzione hamiltoniana è in tal caso pari a  $\mu \langle k \rangle$ ).

Come detto, ogni nodo di grado  $k$  della rete è collegato ad altri  $k$  nodi, i cosiddetti primi confinanti del nodo in questione. Ciò comporta che, in aggiunta all'insieme statistico  $G_n$  costituito di  $N$  nodi, possiamo definire un secondo insieme statistico, di seguito denotato con  $G_{nm}$ , composto di tutti i primi confinanti degli  $N$  nodi del grafo, in numero pari a  $C = \sum_k N_k k$  [Fig. 1(c)]. In questo caso, con riferimento al modello delle "biglie nelle urne", assumiamo che i nodi confinanti rappresentano le biglie da collocare in  $\Omega$  urne (gli stati di  $G_{nm}$ ), ancora identificati dai differenti valori di  $k$ . Il numero di modi di disporre  $C$  elementi negli  $\Omega$  stati di  $G_{nm}$ , con il  $k$ -simo stato contenente  $C_k = N_k k$  elementi, è dato da

$W_r = C! / \prod_k C_k!$ , la cui corrispondente entropia (omettendo una costante di proporzionalità) vale  $S_r = -\sum_k r_k \ln r_k$ , dove la frequenza  $r_k = C_k / C$  rappresenta la frazione dei primi confinanti di tutti i nodi di grado  $k$  sul numero totale di confinanti. In accordo con Newman [10], la probabilità  $r_k$  fornisce la distribuzione del grado dei nodi all'estremo di un arco scelto a caso. Poiché, di seguito tratteremo soltanto grafi non correlati, si dimostra che la probabilità  $r_k$  definisce anche la distribuzione del grado dei primi confinanti di un nodo scelto a caso [10]. Infine, la relazione tra le due distribuzioni del grado è data da

$$r_k = \frac{p_k k}{E[k]}, \quad (7)$$

dove  $E[k] = \sum_k p_k k$  rappresenta la connettività media della rete.

## 2.2 Conflitto di entropia per le reti complesse

L'aver interpretato i nodi ed i primi confinanti di un grafo come membri di due insiemi statistici accoppiati ( $G_n$  e  $G_{nn}$ ) consente di quantificare la casualità delle distribuzioni  $p_k$  ed  $r_k$  per mezzo delle rispettive funzioni di entropia introdotte nel precedente paragrafo. Assumiamo per il momento che  $G_n$  sia l'insieme statistico di un sistema termodinamico isolato. È ben noto che la massimizzazione dell'entropia  $S_p$  ad esso associato, nel rispetto del solo vincolo di normalizzazione per la probabilità  $p_k$ , conduce alla distribuzione uniforme  $p_k = 1/\Omega$  (distribuzione microcanonica) degli elementi di  $G_n$ , la quale esprime il fatto che, per un sistema isolato, ogni stato di  $G_n$  è ugualmente probabile. La distribuzione uniforme delle  $p_k$  corrisponde, quindi, alla configurazione più casuale dei nodi di un grafo. Allo stesso modo, considerando l'insieme  $G_{nn}$  come isolato dal resto dell'universo, la distribuzione microcanonica dei suoi elementi, cioè la distribuzione più casuale dei primi confinanti di un grafo, è la distribuzione uniforme  $r_k = 1/\Omega$ . Allora, in condizioni di massima casualità, i vertici del grafo tenderebbero a soddisfare simultaneamente entrambe le distribuzioni  $p_k = 1/\Omega$  e  $r_k = 1/\Omega$ , appartenendo ad entrambi gli insiemi statistici  $G_n$  e  $G_{nn}$ . Tuttavia, ciò non è possibile dal momento che le distribuzioni del grado dei nodi e dei primi confinanti sono collegate a mezzo della relazione (7). Tale relazione esprime il fatto che i due insiemi statistici non sono isolati e, di conseguenza, i loro elementi non potranno mai raggiungere simultaneamente le rispettive configurazioni uniformi. Ogni tentativo da parte degli elementi di  $G_n$  di assumere la configurazione che soddisfa la distribuzione uniforme delle  $p_k$  sbilancerà gli elementi di  $G_{nn}$ , la cui distribuzione  $r_k$  si allontanerà da quella uniforme, e viceversa. In altri termini, la tendenza di  $G_n$  verso il proprio stato di equilibrio microcanonico sarà vincolata dalla concomitante tendenza di  $G_{nn}$  verso la propria configurazione microcanonica. Possiamo allora supporre che entrambi gli insiemi statistici, entrando in reciproca competizione, tenderanno verso uno stato di equilibrio canonico in corrispondenza del quale i tentativi di rendere uniforme le distribuzioni dei loro elementi si bilancia mutuamente. Per tradurre analiti-



camente questo comportamento, che d'ora in avanti chiameremo conflitto di entropia, possiamo imporre la condizione di massima casualità degli elementi di  $G_{nn}$  come un vincolo per la massimizzazione dell'entropia  $S_p$  associata all'insieme  $G_n$ , o anche il viceversa. Dal punto di vista dell'inferenza statistica, stiamo assumendo che il comportamento competitivo che emerge tra l'insieme dei nodi e quello dei confinanti rappresenta la sola informazione per mezzo della quale scegliamo di descrivere lo stato statistico del sistema: l'informazione usata per ridurre l'entropia di  $G_n$  (rispetto al suo massimo incondizionato) è data dalla conoscenza della condizione di massima entropia relativa all'insieme  $G_{nn}$ .

Come detto, in condizioni di equilibrio microcanonico, la distribuzione di massima casualità degli elementi di  $G_{nn}$  è data da  $r_k=1/\Omega$ , alla quale corrisponde, tramite la (7), la distribuzione del grado dei nodi data da  $\pi_k=1/kA_1$ , dove la costante di normalizzazione  $A_1$  assume un valore finito per la condizione, detta di cut-off, esprime il fatto che il numero  $N$  di elementi dei sistemi reali, sebbene molto grande è comunque finito. Portando in conto soltanto gli effetti che la tendenza verso la massima casualità degli elementi di  $G_{nn}$  ha sulla distribuzione degli elementi di  $G_n$ , la distribuzione  $\pi_k$  rappresenta allora la stima meno distorta della distribuzione del grado dei nodi. La tendenza dell'entropia  $S_r$  verso il suo valore massimo può essere scritta sotto forma di vincolo per la massimizzazione di  $S_p$ , imponendo che il valor medio dell'informazione relativa alla distribuzione  $\pi_k$  uguagli il valore atteso osservato  $-\sum_k p_k \ln \pi_k = \langle I(\pi_k) \rangle$ , dove il valor medio dell'informazione relativa a  $\pi_k$  sullo spazio di probabilità  $p_k$  è detta entropia incrociata [11]. Il conflitto di entropia conduce allora alla ricerca del massimo vincolato dell'entropia  $S_p$  nel rispetto delle seguenti condizioni:

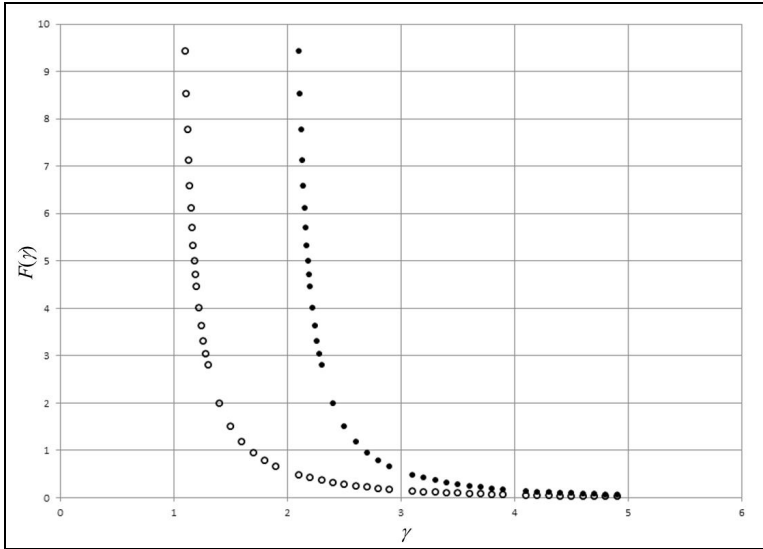
$$\sum_k p_k = 1 \text{ e } \sum_k p_k \ln k = \langle \ln k \rangle_p, \quad (8)$$

dove la seconda si ottiene sostituendo l'espressione di  $\pi_k$  nella funzione che definisce l'entropia incrociata, ed il pedice "p" al simbolo di valore atteso specifica che la media è calcolata sullo spazio di probabilità  $p_k$ .

Utilizzando il metodo dei moltiplicatori di Lagrange si perviene alla seguente coppia di leggi di potenza per la distribuzione del grado dei nodi e dei primi confinanti di un grafo:

$$p_k = \frac{k^{-\gamma}}{\zeta(\gamma)} \text{ e } r_k = \frac{k^{-(\gamma-1)}}{\zeta(\gamma-1)}. \quad (9)$$

da cui si nota innanzitutto che la funzione di partizione per l'insieme canonico  $G_n$  è data dalla funzione zeta di Riemann  $\zeta(\gamma)=\sum_k k^{-\gamma}$ , definita per  $k \geq 1$  e convergente per  $\gamma > 1$ . Poiché il parametro  $\gamma$  rappresenta l'inverso di una temperatura generalizzata dell'insieme  $G_n$ , nel limite per  $\gamma \rightarrow 0$ , la prima delle (9) si riduce alla distribuzione uniforme  $p_k$ , riottenendo in tal modo la condizione per l'equilibrio microcanonico di  $G_n$ . Infine, sostituendo la prima delle (9) nella seconda delle (8), si perviene alla seguente relazione (vedi Fig. 2)



**Fig. 2** – Esponente si cala  $\gamma$  delle leggi di potenza in funzione della caratteristica topologica  $F(\gamma)$  della rete: I cerchi pieni rappresentano  $g$  in funzione di  $F(g)=\langle \ln k \rangle$ , secondo la relazione (13). I cerchi vuoti rappresentano, invece,  $\gamma$  in funzione di  $F(\gamma)=\langle \ln k \rangle_p$ , in accordo con l'equazione (10)

$$\langle \ln k \rangle_p = -\frac{\partial \ln \zeta(\gamma)}{\partial \gamma}, \quad (10)$$

dove la funzione  $-\ln \zeta(\gamma)$ , che rappresenta l'energia libera dell'insieme  $G_n$ , agisce come la funzione generatrice del valore atteso di  $\ln k$ , il quale giuoca un ruolo simile all'energia in meccanica statistica (in questo caso la funzione hamiltoniana è data da  $\gamma \ln k$ ).

A questo proposito osserviamo che la definizione degli stati dei due insiemi statistici,  $G_n$  e  $G_{nn}$ , non è stata data con riferimento ai valori di una qualche funzione energia del sistema, ma soltanto sulla base dei differenti valori di  $k$ . È la proprietà di connettività dei nodi (una condizione, quindi, puramente topologica) che specifica il raggruppamento degli elementi del sistema in stati differenti. L'espressione della funzione di energia per gli stati non è quindi posta *a priori* ma emerge, come  $\ln k$ , in funzione della struttura interna del sistema, come espresso dai vincoli imposti per la procedura variazionale.

### 2.3 Il problema duale

La logica sottostante al problema di massimo vincolato testé introdotto (che nel seguito indicheremo con  $S_p|S_r$ ) può essere completamente ribaltata. Infatti, dal momento che ogni vertice del grafo è sia nodo che primo confinante di altri nodi, il ruolo giocato dai suoi elementi è interscambiabile. Di conseguenza, in

modo del tutto complementare a quanto appena discusso, possiamo massimizzare l'entropia  $S_r$  usando come vincolo una condizione sul valore atteso dell'informazione relativa alla particolare distribuzione  $\rho_k = k/\Lambda_2$  dei primi confinanti (la costante di normalizzazione  $\Lambda_2$  è finita ancora per la condizione di cut-off). Poiché la distribuzione  $\rho_k$  corrisponde, tramite la (7), alla distribuzione uniforme degli elementi di  $G_n$  (massimo incondizionato dell'entropia  $S_p$ ),  $\rho_k$  fornisce la stima meno distorta degli elementi di  $G_{nn}$  in condizioni di massima casualità. In modo simile a quanto fatto per il metodo  $S_p|S_r$ , il problema duale, di seguito indicato come  $S_r|S_p$ , consiste nella massimizzazione dell'entropia  $S_r$  nel rispetto dei seguenti vincoli:

$$\sum_k r_k = 1 \text{ e } \sum_k r_k \ln k = \langle \ln k \rangle_r, \quad (11)$$

dove il pedice “ $r$ ” al simbolo di valore atteso attesta che la media logaritmica è calcolata sullo spazio di probabilità  $r_k$ . L'utilizzo del metodo dei moltiplicatori di Lagrange conduce allora alla seguente coppia di leggi di potenza

$$p_k = \frac{k^{-g}}{\zeta(g)} \text{ e } r_k = \frac{k^{-(g-1)}}{\zeta(g-1)}, \quad (12)$$

la quale è identica alla coppia di relazioni definite dalla (9), a meno dei valori dell'esponente di scala  $g$ , i quali sono in questo caso definiti dalla relazione (vedi Fig. 2)

$$\langle \ln k \rangle_r = -\frac{\partial \ln \zeta(g-1)}{\partial (g-1)}. \quad (13)$$

La seconda delle (12) definisce la distribuzione canonica degli elementi di  $G_{nn}$ , la cui funzione di partizione è data da  $\zeta(g-1)$ , convergente per  $g > 2$ . Il parametro  $g$  definisce l'inverso di una temperatura generalizzata dell'insieme  $G_{nn}$ , la cui distribuzione canonica si riduce alla distribuzione uniforme  $r_k$  nel limite per  $g \rightarrow 1$ , come richiesto dalla condizione di equilibrio microcanonico. Infine, le funzioni energia libera ed hamiltoniana per l'insieme dei primi confinanti sono pari rispettivamente a  $-\ln \zeta(g-1)$  e  $(g-1) \ln k$ .

Entrambi i metodi ( $S_p|S_r$  ed  $S_r|S_p$ ) descrivono due processi alternativi di tendenza verso la configurazione di equilibrio di una rete complessa, i quali conducono agli stati di equilibrio canonico per l'insieme  $G_n$  e  $G_{nn}$ , rispettivamente. In particolare, con riferimento alla definizione del problema variazionale che definisce il metodo  $S_p|S_r$ , gli elementi di  $G_n$  sono considerati come appartenenti al sistema, mentre l'insieme  $G_{nn}$  definisce l'ambiente esterno, assunto come un campo uniforme di elementi all'interno del quale il sistema è immerso. Viceversa, la scrittura delle equazioni che definiscono il metodo  $S_r|S_p$  assume implicitamente l'insieme  $G_{nn}$  come sistema, laddove  $G_n$  rappresenta invece il relativo ambiente, la cui distribuzione di probabilità degli elementi è assunta essere quella di massima casualità. In tal modo, la distinzione tra sistema ed ambiente

diventa sfumata: un dato insieme statistico appare ora come sistema ora come ambiente, a seconda delle equazioni costitutive imposte per la descrizione fenomeno. Esiste allora una sostanziale simmetria tra i due metodi, dal momento che possiamo passare dall'uno all'altro semplicemente scambiando i ruoli giocati dalle due funzioni di entropia. A conferma di questo fatto, entrambi i metodi conducono alla stessa coppia di leggi di potenza, sebbene con valori differenti dei relativi esponenti di scala. Ciò suggerisce che la topologia a legge di potenza è intrinsecamente radicata nella struttura del sistema, indipendentemente da un qualunque ordinamento esterno stabilito dall'osservatore.

In ogni caso, i valori differenti degli esponenti di scala nelle coppie di relazioni (9) e (12) implicano una rottura di simmetria nel processo di evoluzione verso l'equilibrio della rete complessa, la quale può muovere verso la condizione di equilibrio tanto nel modo descritto dal metodo  $S_p|S_r$ , che in quello descritto dal metodo  $S_r|S_p$ . Tale rottura di simmetria può essere imputata al differente contenuto informativo dei vincoli di normalizzazione dati dalla prima delle (8) e dalla prima delle (11). Infatti, quest'ultima, per così dire, nasconde una informazione aggiuntiva rispetto alla pura e semplice condizione di normalizzazione, dal momento che, come si può verificare immediatamente utilizzando la (7), la relazione  $\sum_k P_k = 1$  è equivalente a  $\sum_k P_k k = \langle k \rangle$ , la quale esprime una condizione sul grado medio della rete. Al contrario, nell'insieme di equazioni che definiscono il metodo  $S_p|S_r$ , non vi è alcuna condizione vincolante la connettività media. Notiamo a questo punto che per una distribuzione del grado a legge di potenza il grado medio risulta è finito per tutti i valori dell'esponente di scala  $\gamma > 2$ , dal momento che possiamo scrivere  $E_p[k] = \zeta(\gamma-1)/\zeta(\gamma)$ . Allora, il metodo  $S_r|S_p$ , il quale prevede valori di  $g$  nell'intervallo tra 2 ed infinito [vedi Eq. (13)], fornisce distribuzioni del grado a legge di potenza con valori finiti della connettività media. Di conseguenza, ci aspettiamo che il metodo  $S_r|S_p$  sia quello più idoneo per la descrizione statistica delle reti complesse con valore finito del grado medio. D'altra parte, le reti con valore (teoricamente) infinito della connettività media (vale a dire con valori dell'esponente di scala compresi tra 1 e 2) possono essere descritte in maniera più appropriata per mezzo del metodo  $S_p|S_r$ , il quale non contempla alcun vincolo su  $E_p[k]$ . In tal modo, il metodo  $S_p|S_r$  rende conto dell'esistenza di quelle reti complesse che hanno i valori più bassi dell'esponente di scala ( $\gamma < 2$ ).

#### **2.4 Una possibile estensione del metodo diretto: la distribuzione di probabilità di tipo gamma**

Come discusso in precedenza, gli stati che definiscono entrambi gli insiemi statistici sono identificati per mezzo dei diversi valori delle connettività. Pertanto, è naturale considerare il grado medio della rete al fine di ricercare la configurazione di equilibrio del sistema. A tal fine, aggiungiamo la condizione sul valore medio della connettività all'insieme di equazioni che definiscono i vincoli per il metodo  $S_p|S_r$ . Ciò equivale a massimizzare l'entropia  $S_p$  nel rispetto delle seguenti condizioni:

$$\sum_k p_k = 1, \sum_k p_k \ln k = \langle \ln k \rangle_p \text{ e } \sum_k p_k k = \langle k \rangle_p. \quad (14)$$

Utilizzando, al solito, il metodo dei moltiplicatori di Lagrange si perviene alla seguente coppia di relazioni per la distribuzione del grado dei nodi e dei primi confinanti di un grafo:

$$p_k = \frac{k^{-\gamma} e^{-tk}}{Li_\gamma(e^{-t})} \text{ e } r_k = \frac{k^{-(\gamma-1)} e^{-tk}}{Li_{\gamma-1}(e^{-t})}, \quad (15)$$

date dal prodotto di una legge di potenza per una distribuzione esponenziale, diviso l'appropriata costante di normalizzazione, in questo caso data dalla funzione speciale polilogaritmo  $Li_\gamma(\alpha) = \sum_k k^{-\gamma} \alpha^k$ , convergente per  $|\alpha| < 1$  (ossia per  $t > 0$ ). In questo caso la funzione hamiltoniana è data dalla somma di due termini  $-\gamma \ln k + tk$ , i quali esprimono due forme di energia. In modo concorde con quanto stabilito a proposito del metodo  $S_p|S_r$ , il termine  $-\gamma \ln k$  rappresenterebbe l'energia termica del sistema, ed in tal caso il parametro  $\gamma$  sarebbe ancora interpretabile come l'inverso di una temperatura generalizzata dell'insieme  $G_n$ . Il secondo termine dell'hamiltoniana,  $tk$ , porterebbe invece in conto energie di altra natura, quali ad esempio l'energia magnetica scambiata dal sistema con il suo ambiente. In tal modo, il parametro  $t$  risulterebbe allora proporzionale al campo magnetico applicato all'insieme  $G_n$ . Qualora il campo magnetico esterno sia nullo ( $t \rightarrow 0$ ), la coppia di relazioni date dalla (15) riduce immediatamente a quella data dalle (9), dove si è sfruttato il fatto che  $Li_\gamma(1) = \zeta(\gamma)$ . Infine, l'energia libera dell'insieme  $G_m$  è pari ad  $-\ln Li_\gamma(e^{-t})$ , il cui legame con i vincoli è dato dalla coppia di relazioni

$$\langle \ln k \rangle_p = -\frac{\partial \ln Li_\gamma(e^{-t})}{\partial \gamma} \text{ e } \langle k \rangle_p = -\frac{\partial \ln Li_\gamma(e^{-t})}{\partial t}. \quad (16)$$

La distribuzione di probabilità definita dalle (15) è meglio nota in idrologia nella sua versione continua (distribuzione di tipo gamma). Infatti, con riferimento alla prima delle (15), indicando con  $f(x)$  la funzione densità di probabilità della variabile continua  $x$  che sostituisce la variabile discreta  $k$ , e sostituendo la sommatoria che compare al denominatore con l'integrale, dopo semplici passaggi algebrici si perviene alla seguente relazione

$$f(x) = \frac{1}{b} \frac{1}{\Gamma(z)} \left(\frac{x}{b}\right)^{z-1} e^{-\left(\frac{x}{b}\right)}, \quad (17)$$

la quale rappresenta la ben nota distribuzione di probabilità di tipo gamma. Il parametro di forma  $z = 1 - \gamma$  ed il parametro di scala  $b = 1/t$  sono espressi in funzione dei vincoli imposti tramite le relazioni

$$\ln z - \Psi_0(z) = \ln \langle k \rangle - \langle \ln k \rangle_p \text{ e } zb = \langle k \rangle, \quad (18)$$

dove  $\Psi_0$  denota la funzione speciale digamma.

### 3. Discussione e conclusioni

I sistemi idrologici sono il risultato di complesse dinamiche, spesso di tipo stocastico, caratterizzate da meccanismi di retroazione non lineari tra le variabili che ne definiscono i processi e da una elevata variabilità spazio-temporale dei parametri delle equazioni costitutive, a tutte le scale di rappresentazione. Una descrizione stocastica dei processi idrologici, in grado di cogliere l'elevata interconnessione degli elementi costituenti il sistema, è allora particolarmente indicata. Il concetto di entropia, unitamente alla teoria delle reti complesse, fornisce lo strumento ideale per un'analisi di tipo statistico. L'aspetto cruciale dei metodi di inferenza basati sulla termodinamica statistica consiste nella scelta dei vincoli costitutivi, i quali definiscono le caratteristiche strutturali del sistema in relazione ai flussi di energia scambiati con l'ambiente esterno.

Sistema	Entropia	Vincoli	Distribuzione di probabilità
Sistema isolato di elementi non interconnessi	$S_p = \sum_k p_k \ln p_k$	$\sum_k p_k = 1$	$p_k = \frac{1}{\Omega}$
Sistema chiuso di elementi non interconnessi	$S_p = \sum_k p_k \ln p_k$	$\sum_k p_k = 1$	$p_k = \frac{e^{-tk}}{\sum_k e^{-tk}}$
		$\sum_k p_k k = \langle k \rangle_p$	
Sistema chiuso di elementi interconnessi (grafo)	$S_p = \sum_k p_k \ln p_k$	$\sum_k p_k = 1$	$p_k = \frac{k^{-\gamma}}{\zeta(\gamma)}$
		$\sum_k p_k \ln k = \langle \ln k \rangle_p$	
Sistema chiuso di elementi interconnessi (grafo)	$S_p = \sum_k p_k \ln p_k$	$\sum_k p_k = 1$	$p_k = \frac{k^{-\gamma} e^{-tk}}{\text{Li}_\gamma(e^{-t})}$
		$\sum_k p_k \ln k = \langle \ln k \rangle_p$	
		$\sum_k p_k k = \langle k \rangle_p$	
Sistema chiuso di elementi interconnessi (grafo)	$S_r = \sum_k r_k \ln r_k$	$\sum_k r_k = 1$	$p_k = \frac{k^{-(\gamma-1)}}{\zeta(\gamma-1)}$
		$\sum_k r_k \ln k = \langle \ln k \rangle_r$	

**Tab. 1** – Distribuzioni di probabilità in funzione dei vincoli imposti per la massimizzazione dell'entropia

I sistemi isolati, i quali non scambiano flussi di energia con l'ambiente (prima riga di Tab. 1), sono banalmente modellati imponendo come unico vincolo quello di normalizzazione. La conseguente distribuzione degli elementi è caratterizzata dalla condizione di massima casualità (distribuzione uniforme).

All'estremo opposto vi sono i sistemi chiusi costituiti da elementi non interagenti (seconda riga di Tab. 1). Tali sistemi scambiano energia (termica) con l'ambiente esterno, il cui valor medio è assunto come vincolante la distribuzione degli elementi costitutivi. La distribuzione di probabilità è allora di tipo esponenziale, come originariamente ricavato per le molecole di un gas termodinamico all'equilibrio termico. Per i sistemi rappresentati da grafi, uno schema di questo tipo equivale ad ignorare le connessioni tra gli elementi, e l'energia è rappresentata da una proprietà intrinseca dei nodi, numericamente coincidente con la loro connettività ma spogliata del suo carattere relazionale. Qualora la struttura a grafo diventi preponderante, le connessioni diventano ugualmente significative per l'organizzazione strutturale del sistema, al pari degli elementi che lo costituiscono. Appare allora l'emergenza di un conflitto tra l'insieme dei nodi e delle connessioni, il quale costituisce un vincolo strutturale interno al sistema che fornisce l'informazione meno distorta possibile sullo stato statistico. In tali condizioni, è possibile definire due funzioni di entropia per il sistema, le quali tendono verso i loro massimi valori vincolandosi a vicenda.

Considerando l'insieme delle connessioni come l'ambiente esterno, e ricercando la condizione di massima entropia per il sistema rappresentato dai vertici (terza riga di Tab.1), sia la distribuzione del grado dei nodi che dei primi confinanti si configurano come leggi di potenza, con esponente di scala dato dalla (10). La differenza cruciale, con la distribuzione esponenziale risiede allora nell'espressione del termine energetico che in questo caso risulta più debole, essendo proporzionale al logaritmo delle connessioni, contro una relazione di diretta proporzionalità nel caso della distribuzione esponenziale. In tal modo l'energia immessa nel sistema cresce più lentamente in funzione delle connettività (rispetto alla statistica di Boltzmann) e, di conseguenza, il sistema è meno vincolato. Ciò si riflette nella forma della lunga coda della legge di potenza il cui andamento tende maggiormente all'uniformità rispetto alla distribuzione esponenziale. In tali condizioni il caso domina l'evoluzione del sistema: l'unico vincolo strutturale porta in conto nient'altro che la seconda legge della termodinamica.

Qualora si assuma che il grado medio della rete rappresenti una condizione vincolante anche per un sistema a grafo (quarta riga di Tab. 1), la distribuzione di probabilità degli elementi è rappresentata dal prodotto di una legge di potenza per una funzione esponenziale (distribuzione gamma), la quale cattura la condizione di cut-off, solitamente attribuita all'effetto che le limitate dimensioni dei sistemi reali hanno sulla distribuzione dei loro elementi. Ciò si riflette nella riduzione della coda della distribuzione a legge di potenza la quale, in tal modo, tende meno all'uniformità. Ciò era prevedibile dato il maggior numero di vincoli imposti, i quali possono rendere conto differenti forme di energia. Infine,

la condizione sul grado medio della rete può essere portata in conto inglobandola nel vincolo di normalizzazione per la distribuzione dei primi confinanti. È questo il caso dei grafi per i quali l'insieme dei nodi è assimilato all'ambiente esterno, mentre le connessioni rappresentano gli elementi costitutivi (quinta riga di Tab 1.). In tal caso, la coppia di equazioni che definiscono la distribuzione del grado di nodi e primi confinanti è ancora formata da due leggi di potenza, i cui valori dell'esponente di scala sono definiti dalla relazione (12). Rispetto al suo gemello, questo problema di ottimizzazione restituisce leggi di potenza con grado medio finito (e dunque meno uniformi rispetto a quelle caratterizzate da un valore infinito della connettività media). Pertanto, il vincolo aggiuntivo agisce ancora nella direzione di una riduzione della coda della legge di potenza, ma in maniera meno marcata di quanto accade per la distribuzione gamma. Infatti, mentre nel caso della gamma il vincolo viene aggiunto tal quale, per la legge di potenza la condizione sul grado medio della rete è in qualche modo smorzata, essendo inglobata in un vincolo di normalizzazione.

## Bibliografia

1. Prigogine I., Kondepudi D. (2002) – *Termodinamica. Dalle macchine termiche alle strutture dissipative* – Bollati Boringhieri, Torino
2. Bialas, P., Burda Z., Johnston D. (1997) – *Condensation in the Backgammon model* – Nucl. Phys. B Vol. 493, pp.505
3. Shannon C. E. (1948) – *A mathematical theory of communication* – Bell. Syst. Tech. J. Vol. 27, pp. 379-423
4. Jaynes E. T. (1957) – *Information theory and statistical mechanics* – Phys. Rev. Vol. 106, pp. 620
5. Jaynes E. T. (1957) – *Information theory and statistical mechanics II* – Phys. Rev. Vol. 108, pp. 171
6. Singh V. P., Fiorentino M. (1992) – *A historical perspective of entropy applications in water resources*, in Singh V. P. and Fiorentino M. (Eds), *Entropy and energy dissipation in water resources*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht pp. 155
7. Albert R., Barabási A.-L. (2002) – *Statistical mechanics of complex networks* – Rev. Mod. Phys. Vol. 74, pp. 47
8. Sanchirico A., Fiorentino M. (2015) – *Capturing quantum behavior in evolution of complex river networks* – Sottomesso a Phys. Rev. E
9. Sanchirico A., Fiorentino M. (2008) – *Scale-free networks as entropy competition* – Phys. Rev. E Vol. 78, pp. 046114
10. Newman M. E. J., Strogatz S. H. Watts D. J. (2001) – *Random graphs with arbitrary degree distributions and their applications* – Phys. Rev. E Vol. 64, pp. 026118
11. Cover T. M., Thomas J. A. (1991) – *Elements of Information Theory* – Wiley, New York