

УДК 548.1

КОМБИНАТОРНАЯ СЛОЖНОСТЬ СИГНАТУРЫ НАТУРАЛЬНОГО ТАЙЛИНГА

© 2025 г. Д. А. Банару^{1,*}¹Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, Россия

*E-mail: banaru@geokhi.ru

Поступила в редакцию 16.11.2024 г.

После доработки 26.11.2024 г.

Принята к публикации 26.11.2024 г.

Разработана аддитивная модель расчета комбинаторной (шэнноновской) сложности сигнатуры натурального тайлинга, который используют для описания топологических свойств микро- и мезопористых материалов, в частности цеолитов. Для расчета сложности данного вида составлен программный код на языке Python. Код протестирован для тайлингов цеолитного типа, обнаружены корреляции рассчитанной сложности сигнатуры тайлинга и комбинаторной сложности производящей тайлинг структуры.

DOI: 10.31857/S0023476125010206, EDN: IRLJHV

ВВЕДЕНИЕ

Информационная энтропия H по Шэннону [1], она же шэнноновская, или комбинаторная, сложность, обычно выражается в битах и в таком случае имеет вид

$$H = -\sum_{i=1}^s p_i \log_2 p_i, \quad (1)$$

где $p_i = m_i/m$ — доля m_i элементов i -го вида в дискретном множестве из m элементов, каждый элемент которого отнесен к одному из s видов, $\sum_{i=1}^s p_i = 1$.

Комбинаторная сложность используется в химии как мера сложности молекулярных ансамблей [2], в том числе дендримеров [3], и ее изменения при химических превращениях [4–7], а в кристаллографии как мера сложности кристаллических структур [8–17] и химических составов [18], а также систем порождающих операций кристаллографических групп [19] и систем опорных контактов в кристаллической структуре [20]. В минералогии информационную энтропию использовал академик Н.П. Юшкин для оценки сложности распределения минералов по сингониям [21]. Применению информационной энтропии в минералогии и кристаллографии также посвящен миниобзор Ю.Л. Войтеховского [22].

Комбинаторная сложность относится к более широкому классу индексов видового разнообразия, называемому числами Хилла, поскольку является числом Хилла первого порядка [23].

В кристаллографии числа Хилла можно использовать для оценки неравномерности распределений записей в структурных банках данных по кристаллографическим таксонам, таким как сингонии, кристаллические классы, пространственные группы [24]. Видовое разнообразие объектов неживой природы имеет некоторые сходства с разнообразием биологических видов [25].

В настоящей работе исследована комбинаторная сложность сигнатуры натурального тайлинга [26]. Под тайлингом понимается нормальное (грань к грани) разбиение пространства на тайлы — обобщенные, не обязательно выпуклые полиэдры, в которых каждая вершина инцидентна двум или более вершинам, а грани могут быть криволинейными [27]. Всякому тайлингу соответствует некоторая сетка, образованная вершинами и ребрами. Натуральным называют тайлинг, отвечающий следующим условиям: симметрия тайлинга совпадает с симметрией соответствующей ему сетки; гранями тайла являются сильные кольца (циклы, не являющиеся суммой нескольких циклов меньшего размера); все сильные кольца сетки, кроме принадлежащих граням, имеют пересечения, т.е. общие внутренние точки; если в соответствии с предыдущими пунктами возможны разные тайлинги, то путем объединения тайлов друг с другом строят один тайлинг. Таким образом, если для данной сетки натуральный тайлинг вообще существует, то только один. Поиск натурального тайлинга в общем случае нетривиален, но достаточно давно реализован в программном комплексе TorosPro [28]. Для тайлов принято использовать гранный символ вида $[A^a.B^b\dots]$, который

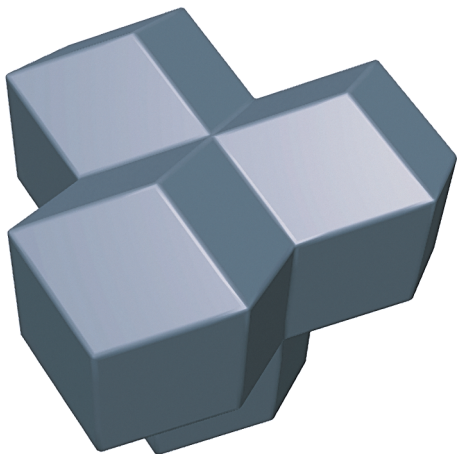


Рис. 1. Тайл $[4^{36}]$ одноименного натурального тайлинга структуры пироклора $\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_6\text{F}$.

означает наличие у тайла a A -угольных, b B -угольных граней, $A < B < \dots$. На рис. 1 изображен натуральный тайл $[4^{36}]$ структуры пироклора. Тайлинг принято обозначать сигнатурой, показывающей соотношение тайлов, например, запись $2[3^4] + [3^8]$ означает тетраэдрические $[3^4]$ и октаэдрические $[3^8]$ тайлы в соотношении 2 : 1.

МЕТОД

Для сложения комбинаторной сложности от нескольких источников информации простая аддитивность подходит только в том случае, если источники информации независимы [29]. Например, если две подсистемы одной системы изолированы друг от друга, т.е. разделены в пространстве и не обмениваются массой и энергией. Но если подсистемы взаимозависимы, как это всегда бывает с подструктурами одной кристаллической структуры [17], то должна выполняться сильная аддитивность: помимо слагаемых, отвечающих отдельным подсистемам, в сумму включается дополнительное слагаемое, которое учитывает прирост информации за счет смешивания подсистем. В работах Сабирова (например, [30]) такое дополнительное слагаемое называется эмерджентным параметром. Принципы разложения комбинаторной сложности дискретных мультимножеств на вклады отдельных множеств с эмерджентным параметром были подробно рассмотрены в [13].

Применим этот подход к сигнатуре натурального тайлинга, записанной в стандартном виде

$$k_1[A_1^{a_1} \cdot B_1^{b_1} \dots] + k_2[A_2^{a_2} \cdot B_2^{b_2} \dots] + \dots + k_n[A_n^{a_n} \cdot B_n^{b_n} \dots], \quad (2)$$

где $k_1:k_2:\dots:k_n$ — простейшее целочисленное соотношение n тайлов разного сорта. Совокупность граней тайла i -го сорта ($i = 1, \dots, n$) представляет собой

мультимножество $\Phi_i = \{(A_i, a_i), (B_i, b_i), \dots\}$. Комбинаторная сложность такого мультимножества по определению (1) равна

$$H_{\text{tile},i} = -\frac{a_i}{a_i + b_i + \dots} \log_2 \frac{a_i}{a_i + b_i + \dots} - \frac{b_i}{a_i + b_i + \dots} \log_2 \frac{b_i}{a_i + b_i + \dots} - \dots \quad (3)$$

Совокупность k_i граней тайлов i -го сорта представляет собой мультимножество $\{(A_i, k_i a_i), (B_i, k_i b_i), \dots\}$, имеющее такую же комбинаторную сложность $H_{\text{tile},i}$. Складывая значения $H_{\text{tile},i}$ с учетом соотношения между тайлами по правилу сильной аддитивности [13], получаем

$$H_{\text{tiling}} = \sum_{i=1}^n w_i H_{\text{tile},i} + H(w_1, w_2, \dots, w_n), \quad (4)$$

$$w_i = \frac{k_i \phi_i}{\sum k_i \phi_i}, \quad (5)$$

$$H(w_1, w_2, \dots, w_n) = -\sum_{i=1}^n w_i \log_2 w_i, \quad (6)$$

где $\phi_i = (a_i + b_i + \dots)$ — число граней в i -м тайле, w_i — весовые множители, определяющие вклад $H_{\text{tile},i}$ в общую сложность тайлинга H_{tiling} . Сложность, рассчитываемая по формуле (6), является эмерджентным параметром [30]. Как следует из свойств сильной аддитивности [13], H_{tiling} является комбинаторной сложностью мультимножества

$$\Phi = \left\{ \bigcup_{i=1}^n \{(A_i, a_i), (B_i, b_i), \dots\} \right\}. \quad (7)$$

Поскольку каждая грань тайлинга принадлежит ровно двум тайлам, в мультимножество Φ она включена дважды, однако это никак не влияет на распределение граней по размерам и не искажает стехиометрию тайлинга. Единицей измерения $H_{\text{tile},i}$ и H_{tiling} является бит/грань. При умножении H_{tiling} на общее число граней в сигнатуре тайлинга получается общая комбинаторная сложность сигнатуры (бит/сигнатура):

$$H_{\text{tiling,tot}} = H_{\text{tiling}} \sum k_i \phi_i. \quad (8)$$

В табл. 1 представлен код на языке Python, позволяющий рассчитать значения H_{tiling} и $H_{\text{tiling,tot}}$ для сколь угодно большого списка сигнатур, записанных в столбце файла с таблицей формата MS Excel. Столбец таблицы не должен иметь заголовка, формат сигнатуры (2) точно такой же, как в выдаче программы ToposPro [28] при построении тайлинга, например, “ $2[3^4] + [3^8]$ ”. По умолчанию программа обращается к исходным данным по адресу $C:\text{tilings}\backslash\text{input.xlsx}$ и создает в той же папке файл с именем $\text{input_with_entropies.xlsx}$, в котором рядом со столбцом сигнатур записаны два столбца (тоже без заголовков) с рассчитанными значениями H_{tiling} и $H_{\text{tiling,tot}}$ соответственно.

Таблица 1. Код для расчета значений H_{tiling} и $H_{\text{tiling,tot}}$

<pre> import pandas as pd from collections import Counter import numpy as np # Load the Excel file without headers file_path = 'C:/tilings/input.xlsx' df = pd.read_excel(file_path, header=None) # Function to transform the expression def transform_expression(expression): def expand_term(term): term = term.strip() if term[0].isdigit(): coefficient, inner = term.split('[', 1) inner = '[' + inner expanded_inner = expand_single_term(inner) expanded_inner_list = expanded_inner.strip('[]').split(',') return f'[{','.join(expanded_inner_list * int(coefficient))}]' else: return expand_single_term(term) def expand_single_term(term): term = term.strip('[]') if '.' in term: factors = term.split('.') expanded_factors = [] for factor in factors: if '^' in factor: base, exp = factor.split('^') base = base.strip() exp = int(exp.strip()) expanded_factors.extend([base] * exp) else: expanded_factors.append(factor.strip()) return f'[{','.join(expanded_factors)}]' elif '^' in term: base, exp = term.split('^') base = base.strip() exp = int(exp.strip()) return f'[{','.join([base] * exp)}]' else: return f'[{term.strip()}]' def modify_output(output): parts = output.split('+') all_values = [] for i, part in enumerate(parts): if part.startswith('(') and part.endswith(')'): inner_content = part[1:-1].split(',') </pre>	<pre> indexed_content = [f'{value.strip()}{i + 1}' for value in inner_content] all_values.extend(indexed_content) return f'[{','.join(all_values)}]' parts = expression.split('+') expanded_parts = [expand_term(part.strip()) for part in parts] final_output = '+'.join(expanded_parts) return modify_output(final_output) # Function to calculate Shannon entropy def calculate_shannon_entropy(numbers): counts = Counter(numbers) total_count = sum(counts.values()) probabilities = [count / total_count for count in counts. values()] entropy = -sum(p * np.log2(p) for p in probabilities if p > 0) return entropy # Processing each expression and calculating entropy def process_expression(expression): output = transform_expression(expression) output_numbers = list(map(int, output.strip('[]').split(','))) entropy = calculate_shannon_entropy(output_numbers) total_numbers = len(output_numbers) weighted_entropy = entropy * total_numbers return entropy, weighted_entropy # Clean and sanitize the expression input if necessary def clean_expression(expression): expression = expression.replace('[', '').replace(']', '').strip() return expression # Apply cleaning and process the expressions in the first column df[0] = df[0].apply(clean_expression) df[['Entropy', 'Weighted Entropy']] = df[0].apply(lambda x: pd.Series(process_expression(x))) # Save the updated DataFrame to the same file, adding the Entropy and Weighted Entropy columns output_file_path = 'C:/tilings/input_with_entropies.xlsx' df.to_excel(output_file_path, index=False, header=False) print(f'Processed entropies saved to {output_file_path}') </pre>
--	--

Метод опробован на массиве сигнатур натуральных тайлингов цеолитного типа, представленного в сопроводительных материалах к пионерской работе [31] и насчитывавшего на тот момент 194 сигнатуры. Также был проведен поиск ранговой (по Спирмену) и линейной (по Пирсону) корреляций H_{tiling} и $H_{\text{tiling,tot}}$ с уже известными индексами сложности цеолитных каркасов, в частности с

комбинаторной сложностью по С.В. Кривовичеву I_G (бит на вершину каркаса) и $I_{G,\text{tot}}$ (бит на приведенную ячейку) (по известным данным для 201 каркаса [32]), с конфигурационной сложностью H_{conf} (бит на степень свободы) и $H_{\text{conf,tot}}$ (бит на приведенную ячейку) (по ранее полученным данным для 242 каркасов [33]), а также с числом классов симметрично-эквивалентных ребер в каркасе e'' .

Таблица 2. Корреляции индексов сложности цеолитных каркасов и тайлингов

Индекс	Тип корреляции	I_G , бит/вершина	H_{conf} , бит/с.с.	e''
H_{tiling} , бит/грань	Линейная	0.690	0.670	0.601
	Ранговая	0.653	0.633	0.640
Индекс	Тип корреляции	$I_{G,\text{tot}}$, бит/яч.	$H_{\text{conf,tot}}$, бит/яч.	e''
$H_{\text{tiling,tot}}$, бит/сигнатура	Линейная	0.886	0.827	0.426
	Ранговая	0.779	0.774	0.615

Примечание. с.с. — степень свободы.

Для поиска корреляций использовали только те каркасы, которые входили в каждый из трех массивов структур [31–33], за исключением разупорядоченных каркасов (рефкоды *BEA, *MRE и *STO в банке данных цеолитных структур [34]). Таким образом, анализировали данные по 191 каркасу.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 2 представлены коэффициенты корреляции индексов сложности для каркасов цеолитного типа и соответствующих им натуральных тайлингов. Из этих данных видно, что все тестируемые пары индексов положительно коррелированы. Для случайной выборки объемом $N = 191$ p -уровню значимости $p < 0.05$ отвечает коэффициент корреляции больше 0.142; таким образом, все обнаруженные корреляции статистически значимы. Слабее всего коррелированы $H_{\text{tiling,tot}}$ и e'' ; H_{tiling} средне коррелирует с другими индексами, в том числе I_G (рис. 2а); корреляцию $H_{\text{tiling,tot}}$ с $I_{G,\text{tot}}$ (рис. 2б) и $H_{\text{conf,tot}}$ можно считать сильной. Коэффициент ранговой корреляции во всех случаях, кроме тех, в которых один из индексов e'' , оказался меньше коэффициента линейной корреляции, что нетрудно объяснить одинаковой логарифмической зависимостью соответствующих индексов от некоторых, пусть и разных, структурных параметров. Как показало сравнительное исследование серии структур Hg-содержащих минералов и их синтетических аналогов, все использующиеся сегодня в кристаллографии индексы сложности в той или иной мере коррелированы друг с другом [35].

Самым сложным в исследованной выборке оказался тайлинг каркаса PAU ($H_{\text{tiling,tot}} = 2928.3$ бит/сигнатура), обладающего и наибольшим значением $I_{G,\text{tot}} = 4763.5$ бит/яч. В то же время еще более сложный каркас SFV ($I_{G,\text{tot}} = 19557.6$ бит/яч.) [32] в исследованную выборку не попал. Самым простым оказался тайлинг каркаса ABW ($H_{\text{tiling,tot}} = 9.5$ бит/сигнатура), в то время как самый простой каркас — содалитовый (SOD, $I_{G,\text{tot}} = 16.5$ бит/яч. [32]). Тайлинги, как и каркасы, можно классифицировать по классу сложности [36]: очень простые (0–20 бит/сигнатура), простые (20–100), средней сложности (100–500), сложные (500–1000) и очень

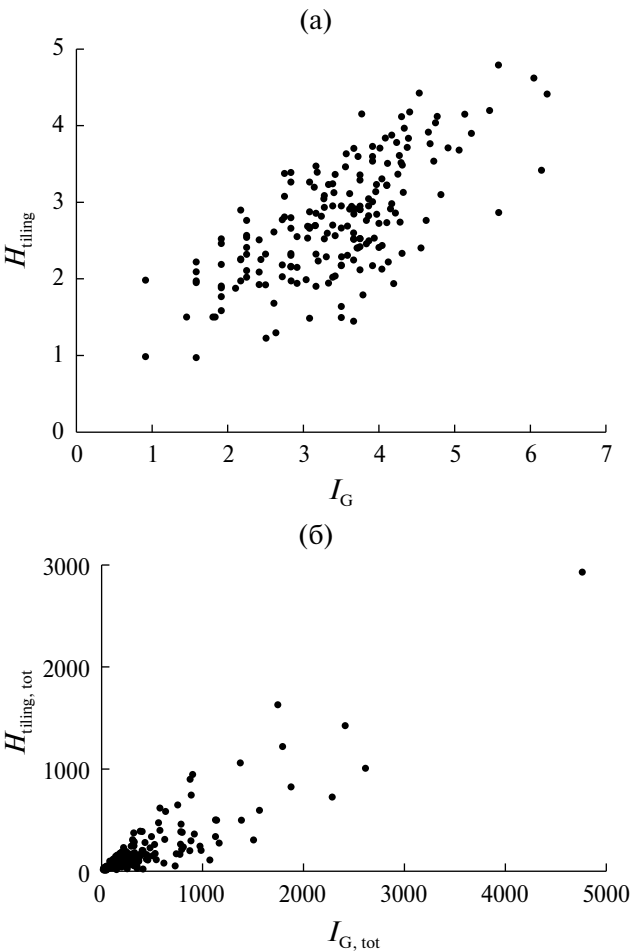


Рис. 2. Диаграмма рассеяния H_{tiling} и I_G (а), $H_{\text{tiling,tot}}$ и $I_{G,\text{tot}}$ (б) для каркасов цеолитного типа.

сложные (более 1000). Больше 80% тайлингов простые или средней сложности (рис. 3).

Натуральные тайлинги позволяют строить маршруты миграции катионов по пустотам каркаса и прогнозировать ионную проводимость, поэтому они имеют важное значение не только для каркасов цеолитного типа, но и для “антицеолитных” [37] катионных каркасов [38], а также для смешанных тетраэдрических (ТТ) каркасов,

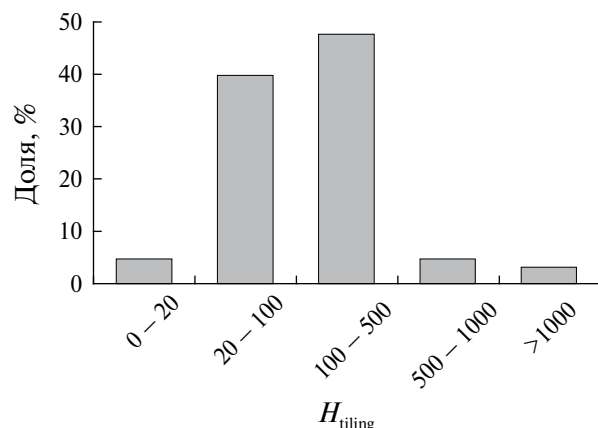


Рис. 3. Доля натуральных тайлингов разного класса сложности для каркасов цеолитного типа.

например, в структурах боро- [39] и бериллофосфатов [40], и даже для гетерополиэдрических *MT*-каркасов, например, в структурах эвдиалита [41], алюодита [42], келдышита [43], минералов группы колумбита [44], лабунцовита [45], в структурах синтетических германатов [46], ванадатов [47], молибдатов [48]. Расчет комбинаторной сложности по С.В. Кривовичеву для любого каркаса легко провести в пакете программ *TorosPro* [28], расчет дополнительных индексов, таких как конфигурационная сложность по Хорнфеку, возможен с помощью *Rython*-приложения *crystIT* [15]. Однако, не имея *cif*-файла со структурными данными, провести такие расчеты невозможно. Для расчета комбинаторной сложности сигнатуры натурального тайлинга, наоборот, требуются не структурные данные, а только сигнатура тайлинга. Поэтому этот индекс сложности легко использовать в экспертных системах, не привязанных непосредственно к структурным данным. Исследователь, не являющийся специалистом в кристаллографии, может рассчитать этот индекс для серии соединений просто по списку сигнатур в литературном источнике.

Автор выражает благодарность за помощь С.М. Аксенову (КНЦ РАН), а также коллективу Международного научного-исследовательского центра по теоретическому материаловедению (г. Самара, Россия) за научный семинар, в результате которого родилась идея настоящей работы.

Работа выполнена по госзаданию Института геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shannon C.E. // Bell Syst. Tech. J. 1948. V. 27. P. 379. <https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x>
2. Sabirov D.S., Shepelevich I.S. // Entropy. 2021. V. 23. <https://doi.org/10.3390/e23101240>
3. Sabirov D., Tukhbatullina A., Shepelevich I. // Liquids. 2021. V. 1. P. 25. <https://doi.org/10.3390/liquids1010002>
4. Sabirov D., Tukhbatullina A.A., Shepelevich I.S. // J. Mol. Graph. Model. 2022. V. 110. P. 108052. <https://doi.org/10.1016/j.jmkgm.2021.108052>
5. Zimina A.D., Shepelevich I.S., Sabirov D.S. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2023. V. 97. P. 2099. <https://doi.org/10.1134/S0036024423100291>
6. Zimina A.D., Tukhbatullina A.A., Sabirov D.S. // Dokl. Phys. Chem. 2023. V. 513. P. 181. <https://doi.org/10.1134/S0012501623600365>
7. Sabirov D.S., Zimina A.D., Tukhbatullina A.A. // J. Math. Chem. 2024. V. 62. P. 819. <https://doi.org/10.1007/s10910-023-01566-5>
8. Krivovichev S. // Acta Cryst. A. 2012. V. 68. P. 393. <https://doi.org/10.1107/S0108767312012044>
9. Krivovichev S.V. // Angew. Chemie. 2014. V. 53. P. 654. <https://doi.org/10.1002/anie.201304374>
10. Krivovichev S.V. // Acta Cryst. B. 2016. V. 72. P. 274. <https://doi.org/10.1107/S205252061501906X>
11. Krivovichev S.V. // Z. Krist. 2018. V. 233. P. 155. <https://doi.org/10.1515/zkri-2017-2117>
12. Krivovichev S.V., Krivovichev V.G. // Acta Cryst. A. 2020. V. 76. P. 429. <https://doi.org/10.1107/S2053273320004209>
13. Hornfeck W. // Acta Cryst. A. 2020. V. 76. P. 534. <https://doi.org/10.1107/S2053273320006634>
14. Hornfeck W. // Z. Krist. 2022. V. 237. P. 127. <https://doi.org/doi:10.1515/zkri-2021-2062>
15. Kaußler C., Kieslich G. // J. Appl. Cryst. 2021. V. 54. P. 306. <https://doi.org/10.1107/s1600576720016386>
16. Hallweger S.A., Kaußler C., Kieslich G. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. V. 24. P. 9196. <https://doi.org/10.1039/D2CP01123A>
17. Banaru D., Hornfeck W., Aksenov S., Banaru A. // CrystEngComm. 2023. V. 25. P. 2144. <https://doi.org/10.1039/D2CE01542K>
18. Siidra O.I., Zenko D.S., Krivovichev S.V. // Am. Mineral. 2014. V. 99. P. 817.
19. Banaru A.M., Banaru D.A., Aksenov S.M. // Crystallography Reports. 2022. V. 67. P. 521. <https://doi.org/10.1134/S106377452203004X>
20. Banaru A.M., Banaru D.A., Aksenov S.M. // Crystallography Reports. 2022. V. 67. P. 1133. <https://doi.org/10.1134/S1063774522070410>
21. Юшкин Н.П., Шафрановский И.И., Янулов К.П. Законы симметрии в минералогии. Л.: Наука, 1987. 335 с.
22. Voytekhovsky Y.L. // Vestn. Geosci. 2022. V. 325. P. 44. <https://doi.org/10.19110/geov.2022.1.4>
23. Tuomisto H. // Oecologia. 2010. V. 164. P. 853. <https://doi.org/10.1007/s00442-010-1812-0>
24. Banaru D.A., Banaru A.M., Aksenov S.M. // Crystallography Reports. 2024. V. 69. № 7. P. 1019. <https://doi.org/10.1134/S1063774524601503>

25. Krivovichev S.V., Borovichev E.A. // Biogenic–Abiogenic Interactions in Natural Anthropogenic Systems 2022 / Ed. Frank-Kamenetskaya O.V. et al. Cham: Springer International Publishing, 2023. P. 651.
26. Blatov V.A., Delgado-Friedrichs O., O’Keeffe M., Proserpio D.M. // Acta Cryst. A. 2007. V. 63. P. 418. [https://doi.org/ 10.1107/S0108767307038287](https://doi.org/10.1107/S0108767307038287)
27. Blatov V.A. // J. Struct. Chem. 2009. V. 50. P. 160. [https://doi.org/ 10.1007/s10947-009-0204-y](https://doi.org/10.1007/s10947-009-0204-y)
28. Blatov V.A., Shevchenko A.P., Proserpio D.M. // Cryst. Growth Des. 2014. V. 14. P. 3576. [https://doi.org/ 10.1021/cg500498k](https://doi.org/10.1021/cg500498k)
29. Csiszár I. // Entropy. 2008. V. 10. P. 261. [https://doi.org/ 10.3390/e10030261](https://doi.org/10.3390/e10030261)
30. Sabinov D.S. // Comput. Theor. Chem. 2020. V. 1187. P. 112933. [https://doi.org/ 10.1016/j.comptc.2020.112933](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2020.112933)
31. Anurova N.A., Blatov V.A., Ilyushin G.D., Proserpio D.M. // J. Phys. Chem. C. 2010. V. 114. P. 10160. [https://doi.org/ 10.1021/jp1030027](https://doi.org/10.1021/jp1030027)
32. Krivovichev S.V. // Micropor. Mesopor. Mater. 2013. V. 171. P. 223. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2012.12.030>
33. Банару Д.А. // Матер. Междунар. молодежного науч. форума “ЛОМОНОСОВ-2021”. Секция “Геология”, подсекция “Кристаллография и Кристаллохимия”. М.: МАКС Пресс, 2021. https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2021/data/section_6_22056.htm
34. Database of Zeolite Structures. <https://www.iza-structure.org/databases/>
35. Banaru D.A., Aksenov S.M., Banaru A.M., Oganov A.R. // Z. Krist. 2024. V. 239. P. 207. [https://doi.org/ doi:10.1515/zkri-2024-0062](https://doi.org/doi:10.1515/zkri-2024-0062)
36. Krivovichev S.V. // Angew. Chemie. 2014. V. 53. P. 654. [https://doi.org/ 10.1002/anie.201304374](https://doi.org/10.1002/anie.201304374)
37. Rashchenko S.V., Bekker T.B. // J. Struct. Chem. 2021. V. 62. P. 1935. [https://doi.org/ 10.1134/S002247662112012X](https://doi.org/10.1134/S002247662112012X)
38. Topnikova A.P., Eremina T.A., Belokoneva E.L. et al. // Micropor. Mesopor. Mater. 2020. V. 300. P. 110147. [https://doi.org/ 10.1016/j.micromeso.2020.110147](https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110147)
39. Aksenov S.M., Yamnova N.A., Borovikova E.Y. et al. // J. Struct. Chem. 2020. V. 61. P. 1760. [https://doi.org/ 10.1134/S0022476620110104](https://doi.org/10.1134/S0022476620110104)
40. Кобелева Е.А., Аксенов С.М., Банару А.М. и др. // Матер. XII Всерос. молодежной науч. конф. “Минералы: строение, свойства, методы исследования”. Институт геологии и геохимии УрО РАН, Екатеринбург, 2021. С. 74.
41. Aksenov S.M., Kabanova N.A., Chukanov N.V. et al. // Acta Cryst. B. 2022. V. 78. P. 80. [https://doi.org/ 10.1107/S2052520621010015](https://doi.org/10.1107/S2052520621010015)
42. Aksenov S.M., Yamnova N.A., Kabanova N.A. et al. // Crystals. 2021. V. 11. P. 237. [https://doi.org/ 10.3390/cryst11030237](https://doi.org/10.3390/cryst11030237)
43. Kabanova N.A., Panikarovskii T.L., Shilovskikh V.V. et al. // Crystals. 2020. V. 10. P. 1016. [https://doi.org/ 10.3390/cryst10111016](https://doi.org/10.3390/cryst10111016)
44. Chukanov N.V., Pasero M., Aksenov S.M. et al. // Mineral. Mag. 2023. V. 87. P. 18. [https://doi.org/ 10.1180/mgm.2022.105](https://doi.org/10.1180/mgm.2022.105)
45. Vaitieva Y.A., Chukanov N.V., Viganina M.F. et al. // J. Struct. Chem. 2024. V. 65. P. 1357. [https://doi.org/ 10.1134/S0022476624070072](https://doi.org/10.1134/S0022476624070072)
46. Dal F., Aksenov S.M., Burns P.C. // J. Solid State Chem. 2019. V. 271. P. 126. [https://doi.org/ 10.1016/j.jssc.2018.12.044](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2018.12.044)
47. Chong S., Aksenov S.M., Dal Bo F. et al. // Z. Anorg. Allg. Chemie. 2019. V. 645. P. 981. <https://doi.org/10.1002/zaac.201900092>
48. Aksenov S.M., Pavlova E.T., Popova N.N. et al. // Solid State Sci. 2024. V. 151. P. 107525. [https://doi.org/ 10.1016/j.solidstatesciences.2024.107525](https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2024.107525)

COMBINATORIAL COMPLEXITY OF THE SIGNATURE OF A NATURAL TILING

D. A. Banaru*

Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry of RAS, Moscow, Russia

*E-mail: banaru@geokhi.ru

Abstract. An additive model has been developed for calculating the combinatorial (Shannon-like) complexity of a signature of the natural tiling, which is used to describe the topological properties of micro- and mesoporous materials, in particular, zeolites. To calculate the complexity of this type, a Python program code has been compiled. The code was tested for tilings of a zeolite type. Correlations of the calculated complexity of a signature of the tiling and the combinatorial complexity of the tiling-generating structure were found.