KOOPERATÍV VISELKEDÉS KOMPLEX RENDSZEREKBEN

Doktori értekezés tézisei

Karsai Márton

témavezetők:

Prof. Dr. Iglói Ferenc
Dr. Jean-Christian Anglès d'Auriac

Fizika Doktori Iskola

Szegedi Tudományegyetem - Elméleti Fizikai Tanszék
Université Joseph Fourier

2009

BEVEZETÉS

Kooperatív jelenségek a tudomány számos területén megjelennek - elsősorban olyan kölcsönható rendszerekben, ahol az egyes egyedek valamilyen optimális állapot elérésére törekednek, és ennek érdekében hajlamosak az együttműködésre. Ilyen típusú viselkedés megfigyelhető a gazdaságban, a szociológiában, a biológiában vagy fizikai rendszerekben is, ahol ugyan a kölcsönható entitásokat eltérő módon definiálják, de hasonló korrelatív viselkedésük a háttérben univerzális törvényeket sejtet. Ezen rendszerek esetén a komplexitás az egyszerre jelenlévő tényezők együttes hatásaként jelenik meg. Ilyen hatások lehetnek az egyedek kölcsönhatását, vagy dinamikai viselkedését leíró törvényszerűségek, vagy egy külső tényező befolyása, esetleg a rendszer speciális geometriai struktúrájából eredő kényszerek. Az ilyen tényezők együttes jelenléte vezet a rendszer komplexitásához, és vet fel olyan érdekes kérdéseket, amelyek mélyebb vizsgálódásra ösztönöznek.

A kooperáló rendszerek hatékonyan vizsgálhatóak a statisztikus fizika keretein belül. Ezen tudományág tárgya olyan jelenségek és modellek vizsgálata, ahol a rendszer állapota véletlen valószínűségi változók függvénye, és célja nagyszámú megfigyelésből származó statisztikai eredmények alapján ezen rendszerek megfelelő fizikai leírása. E tárgykörön belül kiemelkedő figyelmet élvez a fázisátalakulások vizsgálata, amely a XX. század elejétől fogva vált intenzíven kutatott területté. Ilyen jelenségek számos helyen előfordulnak a természetben, ahol egymással versengő folyamatok igyekeznek felülírni a rendszer állapotát egy külső paraméter függvényében. A legjobban ismert példák a folyadék-gőz, vagy a ferromágneses-paramágneses átalakulások, de hasonló viselkedések figyelhetők meg modell rendszerekben is, mint például különböző spin-modellekben, vagy fertőzés terjedési problémákban valamint kritikus perkoláció esetén.

A téma egyik első releváns tárgyalása az *átlagtér elmélet* volt, amely egy széles körben alkalmazható fenomenológikus közelítéssel szolgált a fázisátalakulások és kritikus jelenségek megértéséhez. Az elméletet Pierre Weiss definiálta először 1907-ben ferromágneses rendszerekre, ahol alapötletként feltételezte, hogy a spinek kölcsönhatása egy átlagtérrel helyettesíthető, ami minden egyes spinre ugyanúgy hat. Ez az ún.

molekuláris térközelítés teljes mértékben elhanyagolja a kölcsönhatási tagban fellépő fluktuációkat, így kellőképp leegyszerűsítve a probléma megoldását. Azonban a modell hátránya szintén a fluktuációk elhanyagolásából származik, miután így alkalmatlan olyan rendszerek kezelésére, ahol ezek hatása fontos szerepet játszik. Így ez a modell csak magasabb dimenziójú rendszerekre alkalmazható, vagy ott, ahol a flukuációk nem befolyásolják drasztikusan a rendszer viselkedését. Az egyik legegyszerűbb és legelegánsabb átlagtér tárgyalás 1936-ból Lev D. Landau-tól származik. Ő a termodinamikai potenciál általános alakjából kiindulva és a rendparaméter szimmetria tulajdonságait kihasználva sikerrel értelmezte a folytonos fázisátalakulások során fellépő jelenségeket. Feltételezte, hogy a szabad energia analitikus, és a rendparaméter szerint sorba fejthető, ahol csak a rendszer szimmetriáját nem sértő tagok jelennek meg.

Az a megfigyelés, - hogy a kritikus rendszer korrelációs hossza a fázisátalakulási pont környékén divergál, és a rendszerben megjelenő fluktuációk önhasonlóak a hosszúság skálától függetlenül - ez vezetett a kritikus rendszerek skálainvariáns viselkedésének felismeréséhez. A jelenség első átfogó matematikai tárgyalását Leo Kadanoff adta, akinek az eredményeit felhasználva az 1970-es évek elején Kenneth G. Wilson dolgozta ki a *renormalizációs csoportelméletet*. Ez a hipotézis a kísérleti eredményekkel egybecsengő elméleti jóslásokkal szolgált, melynek segítségével a kritikus rendszerek az őket jellemző szingularitások alapján univerzalitási osztályokba sorolhatóak. Ezekért az eredményekért Wilson 1982-ben megkapta a Nobel-díjat.

A hetvenes években egy másik teória is napvilágot látott - kiegészítve a már korábban kidolgozott elméleti módszereket. A *konform térelméletet* Polyakov definiálta először kihasználva, hogy a konform-leképezések csoportja ekvivalens a kétdimenziós komplex analitikus függvények csoportjával. Ezt és a skálainvariáns viselkedést felhasználva egy kritikus rendszer állapotösszege felírható, ami aztán alkalmas a kritikus tulajdonságok pontos meghatározására. A konform-leképezések során a rendparaméter korrelációs függvénye szintén kiszámolható, amiből következtethetünk a renparaméter profilok alakjára a rendszer határai mentén.

Első közelítésben a vizsgált rendszert homogénnek szokás tekinteni, ez nagyban megkönnyíti annak vizsgálatát, és fizikai leírását. Azonban a természetben az anyagokra jellemző nagyfokú inhomogenitás is fontos szerepet játszhat, amikor azok fázisátalakuláson mennek keresztül. Erre a legjobb példa a kristályokban előforduló szennyeződések és rácshibák, melyek jelentékenyen képesek befolyásolni az anyag kritikus viselkedését. Az elméleti leírás során az ilyen inhomogenitásokat valamely paraméteren definiált véletlenszerűséggel szokás bevezetni a vizsgált *rendezetlen modellbe*. Ilyen random paraméter lehet a kölcsönhatás erőssége, vagy megjelenhet egy a rendszerre ható külső térben, vagy pl. definiálható a kölcsönható részecskék véletlenszerű hígításával. A rendezetlenség ilyen fajta bevezetése perturbálhatja a kritikus viselkedést, megváltoztatva a fázisátalakulás rendjét, valamint felülírhatja annak kritikus jellemzőit, így transzformálva a rendszert egy másik univerzalitási osztályba.

Ezen kívül inhomogenitás a rendszer geometriai tulajdonságaiból is eredhet. A szilárdtest fizikából ismert kristályos szerkezeteken túl sok önszervező hálózat a természetben véletlenszerű struktúrákba fejlődik. Az ilyen típusú struktúrákra az első releváns modellt két magyar matematikus, Erdős Pál és Rényi Alfréd definiálta, akik az ún. *véletlen gráf modellben* figyelembe vették az elrendezés lehetséges rendezetlenségét is. Az ő munkájuk során fejlődött ki a máig széles körben kutatott hálózatok tudománya. Azonban, a technika előrehaladásával a valós hálózatokról egyre több információ vált elérhetővé, így lehetőség nyílott a háttérben meghúzódó valódi rendezőelvek megértésére, ami alapján egy összetettebb viselkedés körvonalazódott ki. A kilencvenes évek elején Barabási-Albert László, Albert Réka és Hawoong Jeong a világháló struktúrájának vizsgálata során figyeltek fel arra, hogy a hálózat fokeloszlása hatványfüggvény szerint cseng le, ami alapján következtettek a hálózat fejlődéséért felelős törvényszerűségekre. Az általuk definiált *Barabási-Albert hálózati modellben*, figyelembe vették, hogy a hálózat időben dinamikusan növekszik, valamint a fejlődés során egy ún. preferált kapcsolódási szabály felelős a rendszer inhomogenitásáért. Ez a két tulajdonság együttes megjelenése vezet a kialakuló hálózat skálamentes viselkedéséhez. Az általuk felállított modell széles körben népszerűvé vált, miután egyre több valós *komplex hálózatban* találtak hasonló struktúrát. Ez a skálamentes tulajdonság az önszervező hálózatok fejlődésénél univerzális törvényszerűségeket mutat a háttérben, mely intenzíven kutatott terület mind mai napig.

ALKALMAZOTT NUMERIKUS MÓDSZEREK

A komplex sok-test rendszerek vizsgálata korábban nehézkes volt, mert az ilyen típusú rendszerek nagy szabadsági fokkal rendelkeznek, így rengetek különböző állapotuk lehetséges. Azonban a számítógépek fejlődésével lehetőség nyílott nagy forrásigényű eljárásokat felhasználva a releváns modellek hatékony vizsgálatára. Ez szolgáltatta az alapot egy új szemléletmód, a numerikus fizika kialakulásához, mely az elmúlt évtizedekben az elméleti és kísérleti tudományon kívül a fizikai harmadik alappillérévé fejlődött. A numerikus módszerek segítségével a kölcsönható sok-test rendszerek statisztikai vizsgálata is lehetővé vált, ez pedig a huszadik század második felétől kezdve a statisztikus fizika reneszánszához vezetett. A statisztikus modellek vizsgálatára kifejlesztett numerikus módszereket közösen *Monte Carlo metódusoknak* nevezzük, melyek később a fizikán kívül számos más tudományágban is alkalmazásra találtak.

Az egyik legelső, és legtöbbet használt módszer az 1953-ban megjelent ún. *Metropolis algoritmus*, amely kölcsönható spin-rendszerek vizsgálatára alkalmas. Ez a spin-forgató algoritmus a rendszert, mint egy Markov folyamatot kezeli, ahol az energia fejlődése csak lokális konfigurációk függvénye. Ezen túl más módszerek is léteznek ilyen típusú rendszerek vizsgálatára, mint pl. a *Wolff*, vagy a *Swendsen-Wang* algoritmusok, amelyek nem egyesével forgatják át a spineket, hanem egyszerre teljes domének irányát változtatják meg, így kényszerítve a rendszert egy gyorsabb időfejlődésre.

Azonban ezeken kívül számos más olyan statisztikai módszerek léteznek, melyek szigorú matematikai eljárásokat követve alkalmasak különböző fizikai tulajdonságok, vagy termodinamikai függvények pontos meghatározására. Ilyen, pl. az az algoritmus, amely a *kombinatorikus optimalizáció* módszerét felhasználva alkalmas a szabadenergia egzakt meghatározására olyan spin modellekben, ahol a szabadenergia, mint *szubmoduláris függvény* írható fel. Egy ilyen iteratív, erősen polinomiális futásidejű algoritmust alkalmaztunk számos esetben a munkánk során.

CÉLOK ÉS EREDMÉNYEK

Doktori tanulmányaim fő motivációja - a fent említett elméleti és numerikus módszerek felhasználásával - a kooperatív viselkedés vizsgálata volt komplex rendszerekben. Munkám célja a kölcsönható sok-részecske rendszerekben megjelenő fázisátalakulások és kritikus jelenségek tanulmányozása, és azok univerzális tulajdonságainak leírása volt. Ennek céljából négy különböző témában végeztem kutatásokat, ezek analitikus és numerikus eredményeit disszertációban foglaltam össze a következő struktúrát követve:

I. Nemegyensúlyi fázisátalakulások és véges méret skálázás élsúlyozott skálamentes hálózatokban

Elsőként a nemegyensúlyi fázisátalakulásokat vizsgáltam skálamentes hálózatokban, ahol minden élhez a végpontok fokszámának hatványával arányos élsúlyt rendeltem [1]. Ez az újraskálázás úgy módosítja a rendszert, hogy a valós esetekhez hasonlóan fázisátalakulás alakulhat ki benne, még $\gamma \leq 3$ értékű fokexponens esetén is. A vizsgált nemegyensúlyi folyamat egy reakció-diffúzió modellek közé tartozó ún. kontaktfolyamat volt, ami az irányított perkoláció univerzalitási osztályba sorolható. Ez a fertőzés terjedési modell fázisátalakulást mutat egy fertőzött-aktív és egy tiszta-inaktív fázis között a fertőzési és meggyógyulási valószínűségek hányadosának függvényében. A kontaktfolyamat élsúlyozott skálamentes hálózatokon való vizsgálatai során következő eredményekre jutottam:

I/a: Először a rendszer dinamikai átlagtér megoldását adtam meg, melynek segítségével sikerült azonosítani a korábbi számolásokból várt három fokexponenstől függő kritikus tartományt. Az elsőben a megadott átlagtér megoldás maradéktalanul teljesül. A második az ún. nem-konvencionális átlagtér tartomány, ahol a fázisátalakulás kritikus paraméterei γ függővé válnak. Végül a harmadik rezsimben nem történik fázisátalakulás a rendszerben, mivel az mindig az aktív állapotában van.

I/b: Ezek után a konvencionális tartományban, tér-elméleti megfontolások alapján vizsgáltam a rendszer véges-méret skálázását. Sikerült egyszerűen bevezetni a rendszer térfogatát a skálafüggvényekbe, ezeket két alapesetre írtam fel: egyrészt, amikor a fertőzés egy átlagos fokszámú pontból indul ki, másrészt, amikor a legjobban összekötött pontból terjed szét.

I/c: A kontakt-folyamat vizsgálatára a konvencionális átlagtér tartományban hosszú futásidejű numerikus szimulációkat végeztem. Sikerült lokalizálni a rendszer fázisátalakulási pontját, és megállapítani a véges-méret kritikus exponenseket mindkét fertőzési esetre. Ezek az átlagtér értékekkel jó egyezést mutattak. Szintén kiszámoltam a korrelált térfogati exponenst, ami azonos értéket mutatott mindkét esetben, és jó illeszkedett az elméletből várt eredményekhez. Végül rendszer dinamikus skálázását vizsgáltam a fenti két esetben, ahol egy extrapolációs eljárással sikerült a kapcsolódó dinamikai exponenseket megkapni, amelyek ugyan nem voltak azonosak a maximális és a tipikus fokszámú esetre, de összeegyeztethetőek voltak az átlagtér és véges-méret skálázásból származó elméleti értékekkel.

II: Elsőrendű fázisátalakulás módosulása és optimális kooperáció skálamentes hálózatokban

Az általam vizsgált második probléma a ferromágneses nagy-q állapotú Potts-modell volt, élsúlyozott skálamentes hálózatokon [2]. Ez a modell megfeleltethető egy olyan optimális kooperáció problémának, ahol az egyes egyedek a párkölcesönhatásból (itt a Potts kölcsönhatás) és egy külső támogatásból (esetünkben a hőmérséklet) származó bevételeket alapján próbálják megtalálni azt a számukra optimális konfigurációt, amikor a nyereségük maximális. A rendszerben fázisátalakulás jelenik meg egy korrelált és egy rendezetlen magas hőmérsékleti fázis között. Ezt a problémát skálamentes gráfokon egy polinomiális időben megoldható kombinatorikus optimalizációs eljárással vizsgáltam homogén hálózatokon, valamint olyan esetben, ahol az élsúlyok egy kvázifolytonos eloszlást követtek különböző rendezetlenségi erősség mellett.

II/a: Elsőként felírtam a probléma egzakt megoldását homogén esetben - nagyszámú dinamikusan fejlődő hálózatra általánosítva. Ekkor a rendszerben végbemenő fázisátalakulást szigorúan elsőrendűnek találtam, ahol egyszerű elméleti meggondolások alapján a kritikus pontot is sikerült határoznom.

II/b: Számítógépes szimulációk segítségével is sikerült homogén élsúlyozás esetén a fent említett fázis egybeesést reprodukálni. Azonban a rendszer mágnesezettségét numerikusan vizsgálva kitűnt, hogy bármilyen erősségű nem-zéró rendezetlenséget bevezetve a rendszerben lévő fázisátalakulás folytonossá válik. A fázisátalakulás során tanulmányoztam az optimális gráf szerkezetét is, ahol vizsgálatokból kitűnt, hogy a gráf a skálamentes struktúráját egészen a kritikus hőmérsékletig megtartja, fölötte viszont ez teljesen szétesik.

II/c: Ezen kívül igyekeztem meghatározni - maximális rendezetlenség mellett - a rendszer kritikus paramétereit. Iteratív számolások segítségével sikerült megállapítani a kritikus mágnesezettségi exponenst, valamint lokalizálni a fázisátalakulási pontot két egymástól független módszer segítségével. Eltérő méretek esetén számolt véges-méret kritikus hőmérsékletek eloszlása a mérések alapján két különböző exponenssel skálázódott, amiket megállapítva a sikeresen skáláztam össze a különböző méretekhez tartozó eloszlásgörbéket.

II/d: A kritikus mágnesezettségi exponenst sikerült visszakapnom az átlagos klaszterméretre való két-pont illesztés segítségével. Az így kapott értékek kompatibilisek a fent említett exponensek értékeivel.

III: Kritikus klaszeterek sűrűsége szalag geometriákban erősen rendezetlen rendszer esetén

A harmadik tanulmányozott probléma szintén a nagy-q állapotú Potts-modelhez kapcsolódott. Ebben az esetben azon kritikus klaszterek sűrűségét vizsgáltam, melyek egy előre meghatározott módon tapadnak ki egy véges átmérőjű szalag geometria egyes határfelületein [3]. Miután ez a rendszer konform-invarianciát mutat a kritikus pontban, ezért hasonló viselkedést vártunk, mint ahogy egy másik konform-invariáns rendszerben, a kritikus perkoláció esetén korábban egzaktul meg lett adva. A vizsgálódások során a fenti kombinatorikus optimalizációs algoritmust használva a sűrűség profilok átlagát hasonlítottam össze az elméletből származó analitikus görbékkel.

III/a: A vizsgálatok során a véletlen kötéseket bimodális eloszlás alapján választottam ki. A rendezetlenség erőssége erősen befolyásolta a kritikus klaszterek felbontási hosszát, ezért első lépésként a rendezetlenség megfelelő intenzitását kellet megállapítani úgy, hogy a felbontási hossz megfelelően kicsi legyen, de a rendszer elég messze van a perkolációs limittől.

III/b: Ezt követően azon kritikus klaszterek sűrűségét tanulmányoztam, amelyek a szalaggeometria mindkét felületét érintették. Kiváló egybeesés mutatkozott az elméletből várt és a numerikusan számolt eredmények között a különböző lineáris méretek esetén. Ezen túl a határfelületek közelében a tömbi-, és felületi mágnesezettségi viselkedésből származtatott exponens érvényességét is ellenőriztem. A megfigyelt viselkedés jól illeszkedett az exponens alapján várt algebrai alakra. Végül egy korrekciós tag hatását vizsgáltam meg, mely a felületek közelében megfelelően csökkentette a mért és elvárt elméleti eredmények közti eltérést.

III/c: Ezek után azon klaszterek sűrűségét elemeztem, melyek legalább az egyik határfelületen kitapadtak. Ez a sűrűség profil megegyezik a rendszer rendparaméter profiljával rögzített-szabad határfeltételek mellett. Ezt a profilt a véges felbontási hosszra visszavezethető felületi hatások erősen perturbálták a rögzített határ mentén, azonban a szabad határon a sűrűségprofil jól megközelítette a jósolt analitikus görbét. A rögzített határhoz közel csak extrapolációval sikerült megbecsülnöm a profil alakját, de a termodinamikai limitben asszimptotikusan jó viselkedést találtam.

III/d: Az utolsóként vizsgált sűrűségprofil azon klaszterekhez tartozott, amelyek bármelyik határfelületet érintik, így vagy mindkét oldalon vagy legalább az egyiken kitapadtak. Ez a sűrűségprofil a mindkét végén rögzített rendparaméter profillal ekvivalens. Ezt a görbét mindkét végén erősen befolyásolta a véges felbontási hossz, így egy másik, de ugyanazon renparaméter profilhoz tartozó sűrűséget vezettem be az elméleti eredmények ellenőrzésére. Azonosan elvégezve a számolást kritikus perkolációra is, mindkét esetben az eredmények jól illeszkedtek a konform-analítikus görbékre.

IV: Az antiferromágneses Ising modell nemegyensúlyi dinamikájának vizsgálata háromszgrácson T=0 hőmérsékleten

A negyedik probléma az anti-ferromágneses Ising-modell dinamikai viselkedésének vizsgálata volt háromszögrácson, zéró hőmérsékleten, külső mágneses tér hiányában [4]. Ez a geometriailag frusztrált modell egyensúlyban érdekes viselkedést mutat, amely egy igen intenzíven vizsgált terület volt az elmúlt évtizedekben. Azonban a nemegyensúlyi viselkedésével kapcsolatban ellentmondó vélemények jelentek meg a szakirodalomban. Két eltérő nézőpont közül az egyik szerint a dinamika során a korreláció az általános dinamikai exponenssel jellemezhető diffúzív növekedést mutat, melyhez logaritmikus korrekciók járulnak. Ezzel szemben a másik állítás szerint egy szubdiffúzív viselkedés jellemzi a rendszert, amit effektív exponensekkel írhatunk csak le. A vizsgálódásaim célja az volt, hogy a dinamikai viselkedés egy új típusú vizsgálatával független bizonyítékokat találjak valamelyik magyarázathoz. Ezen kívül a nemegyensúlyi tartomány dinamikájának részletesebb vizsgálatát tűztem ki magam elé.

IV/a: A nemegyensúlyi viselkedés vizsgálatára egy új mennyiséget definiáltam, a t_r nemegyensúlyi relaxációs időt, ami tisztán a rendszer dinamikájától függ, és alkalmas a z dinamikai exponens közvetlen meghatározására. Ezen relaxációs idő eloszlását vizsgálva különböző méretű rendszerekre, meggyőző bizonyítékokat találtam a diffúzív viselkedést leíró $z=2$ exponens mellett, amihez egy logaritmikus korrekció adódott – hasonlóképpen, mint az azonos kritikus viselkedést mutató XY modellben, valamint a teljesen frusztrált Ising-modell esetén.

IV/b: Más hasonló modelleken elvégzett vizsgálati módszerek alapján tanulmányoztam az autokorrelációs függvényt különböző várakozási idők mellett, miután a rendszer relaxálódott egy egyensúlyi alapállapotba. Az ilyen típusú dinamikát jellemző idő-transzlációs viselkedésen túl sikerült lokalizálni az egyensúlyi dinamikai exponenst, amely szintén az előző pontban említett értéket adta vissza.

IV/c: Végül a nemegyensúlyi autokorrelációs függvény skálázását tanulmányoztam a különböző várakozási idők esetében, két különböző skálázási változót használva. Az első, logaritmikus korrekcióktól mentes változóval történt behelyettesítés nem vezetett semmilyen releváns egybeeséshez a skálázás során, ebből arra következtethettem, hogy a rendszer valójában nem ezzel a változóval skálázódik. Ezzel szemben a logaritmikus korrekciókat tartalmazó skálázási változó asszimptotikusan jó összeskálázást mutatott, mely szintén a korábbi megállapításainkat támasztotta alá, miszerint a rendszert a nemegyensúlyi fázisban egy diffúzív dinamika jellemzi, additív logaritmikus korrekciókkal.

Kapcsolódó publikációk:

[1] **Karsai, M.**; Juhász, R. és Iglói, F.: *Nonequilibrium phase transitions and finite-size scaling in weighted scale-free networks.*
Physical Review E, **73**, 036116 (2006)

[2] **Karsai, M.**; Anglès d'Auriac, J-Ch. és Iglói, F.: *Rounding of first-order phase transitions and optimal cooperation in scale-free networks.*
Physical Review E, **76**, 041107 (2007)

[3] **Karsai, M.**; Kovács, I. A.; Anglès d'Auriac, J-Ch. és Iglói, F.: *Density of critical clusters in strips of strongly disordered systems.*
Physical Review E, **78**, 061109 (2008)

[4] **Karsai, M.**; Anglès d'Auriac, J-Ch. és Iglói, F.: *Non-equilibrium dynamics of triangular antiferromagnetic Ising model at T=0.*
publication in progress (2009)