O različitim termodinamičkim slikama ansambala kompleksnih mreža

Rožić, Eugen

Master's thesis / Diplomski rad

2017

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:730345

Rights / Prava: In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2024-03-29**

Repository / Repozitorij:

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Eugen Rožić

O RAZLIČITIM TERMODINAMIČKIM SLIKAMA ANSAMBALA KOMPLEKSNIH MREŽA

Diplomski rad

Zagreb, 2017.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: ISTRAŽIVAČKI

Eugen Rožić

Diplomski rad

O različitim termodinamičkim slikama ansambala (kompleksnih) mreža

Voditelj diplomskog rada: dr. sc. Vinko Zlatić

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2017.

Zahvaljujem se svojem mentoru što je našao idealnu temu za mene i pustio me da radim kako mi paše, pomažući mi kroz razgovore ne samo u radu nego i životu. Zahvaljujem se također i svojem nesuđenom mentoru, docentu Tomislavu Marketinu, na uloženom trudu i vremenu, ugodnim razgovorima te dobroti i razumijevanju.

Zahvaljujem se svojoj skorašnjoj supruzi na strpljenju, brizi, interesu, kvalitetnim razgovorima i svemu ostalom. Bez nje i Perimeter Instituta, koji mi je neznajući pružio fantastično okruženje za rad, ovog diplomskog rada možda ne bi ni bilo.

Konačno, i najviše, zahvaljujem se svojim roditeljima što su imali razumijevanja, strpljenja i mudrosti pružati mi neprocjenjivo vrijeme i mir za razvoj i spoznaju sebe podržavajući i uzdržavajući me kroz dva fakulteta i punih devet godina visokoškolskog obrazovanja.

Sažetak

Svrha ovoga rada bila je istražiti neke elementarne pojmove iz termodinamike, poput ekstenzivnosti i termodinamičke granice, u kontekstu kompleksnih mreža, a s obzirom na to da u mrežama (grafovima) ne postoje standardne fizikalne veličine i objekti, poput volumena ili čestica, o kojima definicije navedenih pojmova, ili barem intuicija o njima, standardno ovise. Rezultat istraživanja zaključak je da je pojam čestice, u smislu elementarnog dijela sustava, centralan za definiciju i interpretaciju navedenih termodinamičkih pojmova. Kao posljedica tog zaključka razrađena su dva pogleda, odnosno termodinamičke slike kompleksnih mreža: *vrhovi-kao-čestice* i *bridovi-kao-čestice*, koje su zatim primijenjene na osnovne statističke modele kompleksnih mreža. Utvrđeno je da se zaključci o raznim svojstvima modela, poput ekvivalentnosti ansambala i aditivnosti, značajno razlikuju ovisno o odabranoj slici te da *bridovi-kao-čestice* slika daje konzistentne i matematički smislene rezultate dok *vrhovi-kao-čestice* slika ne. Također je utvrđeno da su neki dosadašnji rezultati, prije svega zaključak da ansambli konfiguracijskog modela nisu ekvivalentni te da aditivnost na utječe na ekvivalentnost ansambala, dobiveni efektivno u okviru *vrhovi-kao-čestice* slike, i stoga neispravni. Istovremeno, drugi radovi i rezultati, uglavnom matematičara, iz područja statističkih modela mreža u skladu su sa *bridovi-kao-čestice* slikom koja im time pruža određenu konceptualnu podlogu i fizikalno uporište.

Ključne riječi: eksponencijalni slučajni grafovi, fizikalne analogije, ekvivalentnost ansambala, aditivnost, kompleksne mreže.

On different thermodynamical pictures of ensembles of complex networks

Abstract

The purpose of this thesis was to explore some elementary notions of thermodynamics, like extensivity and the thermodynamic limit, in the context of complex networks and with regard to the fact that standard physical quantities and objects, like volume or particles, upon which the definitions, or at least the intuition, of said notions usually depend do not exist in networks (graphs). The result is the conclusion that the notion of a particle, in the sense of an elementary part of a system, is central for the definition and interpretation of other thermodynamical notions. As a consequence of this conclusion two views, i.e. thermodynamical pictures, were developed: *vertices-as-particles* and *edges-as-particles*, which were then applied to the basic statistical models of complex networks. It was determined that various properties of models, like ensemble equivalence and additivity, differ greatly depending on the chosen picture and that the *edges-as-particles* picture gives consistent and mathematically sound results while the *vertices-as-particles* picture does not. It was also determined that some of the current results, like the inequivalence of ensembles of the configuration model and the conclusion that additivity does not determine ensemble equivalence, were acquired effectively in the frame of the *vertices-as-particles* picture and are thus invalid. At the same time, other work and results in the area of statistical models of networks, mostly by mathematicians, were found in line with the *edges-as-particles* picture which now provides them with a conceptual grounding and physical support.

Keywords: Exponential Random Graphs, Physical Analogies, Ensemble Equivalence, Additivity, Complex networks.

Sadržaj

1 Uvod **1**

2 Statistička fizika i termodinamika **3**

2.1 Subjektivistička statistička fizika 4

2.2 Ekstenzivnost i termodinamička granica 7

2.3 Teorija velikih devijacija 8

2.4 (Ne)ekvivalentnost ansambala 12

2.5 Aditivnost i termodinamika neaditivnih sustava 14

3 Termodinamika kompleksnih mreža **17**

3.1 Osnove kompleksnih mreža 17

3.2 Ansambli kompleksnih mreža 18

3.3 Dvije (termodinamičke) slike 20

3.3.1 Vrhovi-kao-čestice (*vertices-as-particles*) 21

3.3.2 Bridovi-kao-čestice (*edges-as-particles*) 22

3.4 Erdős-Rényi model 23

3.4.1 Fazni prijelaz 27

3.5 Konfiguracijski model 28

3.5.1 Poseban primjer: regularni grafovi 32

3.5.2 Bipartitni grafovi 34

4 Rasprava i usporedba s ranijim istraživanjima **39**

5 Zaključak **42**

Dodaci **43**

A Izvod kanonskog ansambla konfiguracijskog modela **43**

Literatura **45**

1 Uvod

Motivacija primjene termodinamike u širem, odnosno ansambala i metoda statističke fizike u užem smislu u polju kompleksnih mreža je višestrana. S obzirom na veličine i kompleksnosti proučavanih mreža primjena metoda statističke fizike može služiti razlučivanju statističkih posljedica nametanja relativno jednostavnih uvjeta, poput uniformne vjerojatnosti ostvarenja pojedine veze (*Erdős-Rényi model*), od stvarne kompleksnosti realnih mreža, a što može poslužiti i kao svojevrsna definicija kompleksnosti. S druge strane, statistička fizika pruža i mogućnost otkrivanja mehanizama (naizgledne) kompleksnosti realnih mreža na način da se postavljanjem netrivijalnih, međuovisnih uvjeta pokušaju statistički reproducirati svojstva realnih mreža, na taj način pokazujući da su kompleksna svojstva realnih mreža zapravo nužna statistička posljedica određenog sklopa relativno jednostavnih uvjeta. Standardni pristup tom problemu pokušavanje je pogađanja i otkrivanja nekih principa, poput *small-world* modela ili preferencijalnog povezivanja (*Price/Barabasi-Albert model*) [1, 2], koji rezultiraju nekim vrlo netrivijalnim svojstvima realnih mreža. U članku [3] povučena je zanimljiva paralela između tog pristupa i kinetičke teorije plinova, gdje je kinetička teorija plinova bila vrlo intuitivna i fizikalna, ali jako nepraktična i ograničenog potencijala, dok je statistička mehanika, iako neintuitivna, riješila gotovo sva pitanja temelja termodinamike.

Opravdanje za primjenu metoda statističke fizike na sustave koji nisu, strogo gledano, fizikalni prvi je dao E. T. Jaynes u poznatom radu iz 1957. godine [4], a ono se može naći i u modernoj matematičkoj teoriji velikih devijacija. No neovisno o tome ostaje činjenica da termodinamika i statistička mehanika nisu iste stvari te da je termodinamika vrlo specifično, fenomenološki vezana uz fizikalne sustave. Također, činjenica je i da fizičari puno intuicije i zaključaka baziraju upravo na termodinamici te da se statistička fizika i termodinamika često efektivno doživljavaju kao sinonimi.

Zbog toga se javlja pitanje uspostave analogija i definiranja analogona za nefizikalne sustave, poput pitanja Što odgovara čestici? ili Kada je sustav aditivan? Takve analogije služe kako bi fizičari mogli pravilno i lakše prenositi znanje i intuiciju stečenu proučavanjem fizikalnih sustava na područja poput kompleksnih mreža. Zanemarivanje tih analogija, odnosno nedostajanje konzistentnog fizikalnog pogleda na mreže dovodilo je, u mojem mišljenju, do nekih krivih zaključaka i rezultata zad-

njih godina, na što ću se osvrnuti u odjeljku 4. Kao pristup tom problemu, u odjeljku 3 ovoga rada predložena su dva pogleda, u smislu analogija sa fizikalnim sustavima, odnosno termodinamičke slike kompleksnih mreža: *vrhovi-kao-čestice* i *bridovi-kao-čestice*, te istražene posljedice primjene tih slika na tipične statističke modele kompleksnih mreža kao što su Erdős-Rényi model i konfiguracijski model. Istraživanje i razumijevanje tih posljedica zahtijeva dobro razumijevanje statističke fizike i termodinamike, posebice nekih pretpostavki i ograničenja na koje se uobičajeno ne obraća pozornost. Radi toga odjeljak 2 koji slijedi sadrži kratko ponavljanje osnova statističke fizike i termodinamike s naglaskom na pretpostavke i precizno definiranje ključnih pojmova, te relativno kratki pregled relevantnih naprednijih tema poput termodinamike neaditivnih sustava i neekvivalentnosti ansambala.

2 Statistička fizika i termodinamika

Termodinamika je po svojoj prirodi fenomenološka grana fizike koja proučava toplinu i druge oblike energije u tvari, primarno iz perspektive pretvorbe jednog oblika u drugi. Ona je definirana kroz svoje zakone, potencijale i relacije te je kao takva vrlo korisna bez ikakvog objašnjenja zašto se tvar tako ponaša i što točno toplina jest. Potraga za odgovorom na to pitanje odvela je fizičare neočekivano do statistike i vjerojatnosti, odnosno do razvoja onoga što danas nosi naziv statistička fizika.

Moglo bi se reći da je glavna preokupacija statističke fizike objašnjenje i izračun entropije sustava, budući da ona gotovo u potpunosti određuje termodinamičko ponašanje sustava. Prvi rezultat u tom smjeru bio je poznati izraz L. Boltzmanna za entropiju zatvorenog sustava, tzv. mikrokanonsku entropiju, kao logaritam broja mikroskopskih stanja koji rezultiraju istim zadanim makrostanjem (sustavom točno određene energije, volumena, broja čestica itd.). Potom je J. W. Gibbs uveo koncept statističkog ansambla te, proučavajući kanonski ansambl, pronašao sljedeći općenitiji izraz za entropiju sustava:

$$S = -k \sum_i p_i \ln(p_i) \ , \tag{2.1}$$

zajedno sa poznatom kanonskom mjerom vjerojatnosti

$$p_i \propto e^{-\beta E_i} \tag{2.2}$$

koja opisuje otvoreni podsustav i s kojom se puno lakše može računati.

Budući da se smatralo da su mikrokanonski i kanonski ansambli uvijek ekvivalentni za sustave u termodinamičkoj granici, razvoj kanonskog ansambla omogućio je praktičnu primjenu statističke fizike. No postojali su mnogi konceptualni i matematički problemi koji su bacali sumnju na statističku fiziku kao potpuno objašnjenje termodinamike te njenu slobodnu primjenu na sve fizikalne sustave. Knjiga D. Ruellea [5] sistematično i lijepo uz rigorozne rezultate opisuje i te mnoge nedostatke i neutemeljenosti statističke fizike.

Interesantna povijesna okolnost dogodila se 1948. godine kada je C. Shannon otkrio, u određenom smislu, entropiju u teoriji informacija. Ona je bila istog oblika kao i Gibbsova entropija (2.1), a Shannon je pokazao da je to jedinstvena moguća forma za mjeru informacije u sustavu, ako se od nje zahtijevaju određena smislena

svojstva[1]. Tu činjenicu iskoristio je E. T. Jaynes koji je ponudio sasvim drugačiju interpretaciju statističke fizike od dotadašnje [4], baziranu na tzv. subjektivističkoj interpretaciji vjerojatnosti. To će biti tema idućeg odjeljka u kojem će iz te perspektive biti izvedene relacije kanonskog ansambla te opravdana primjena na sustavima koji nisu fizikalni u uskom smislu riječi.

No neovisno o tome, pitanja tipičnih termodinamičkih koncepata, poput ekstenzivnosti i termodinamičke granice, ostaju važna i djelomično otvorena, tim više što se otvorila mogućnost primjene statističke fizike na sustave koji nisu fizikalni, odnosno standardni. Ta pitanja biti će obrađena u odjeljku 2.2, pogotovo jer su na neki način ključna za teoriju velikih devijacija čije će osnove i najvažniji rezultati biti prezentirani u odjeljku 2.3.

Teorija velikih devijacija zadnji je korak u razvoju potpunosti i matematičke rigoroznosti statističke fizike, odnosno te potrage za objašnjenjem i točnim izračunom entropije sustava. To je grana matematičke teorije vjerojatnosti koja se u fiziku probija vrlo sporo kroz zadnjih 30-ak godina i još danas je s njome upoznato relativno malo fizičara te se njome bave i koriste ju uglavnom matematički fizičari ili matematičari s inklinacijom ka fizici. Čini se da je u okviru te teorije moguće potpuno rigorozno i relativno jednostavno dokazati i objasniti sve rezultate statističke fizike [7, 8], dakle moglo bi se reći da je ona njen prirodni matematički temelj i jezik, kao što je to diferencijalna geometrija za opću relativnost. To se posebno jednostavno vidi na primjeru ekvivalentnosti ansambala koji je zasebno obrađen u odjeljku 2.4.

Tema ekvivalentnosti ansambala posebno je važna za sustave sa tzv. dugodosežnim (*engl. long-range*) interakcijama pa je stoga logično da se tamo nailazi na djelatnu primjenu teorije velikih devijacija [11]. Takvi sustavi po definiciji su neaditivni i stoga se smatralo da su neprikladni za primjenu termodinamike, no pokazalo se da je primjena termodinamike na takve sustave ipak opravdana i nužna. To područje ukratko je obrađeno u odjeljku 2.5 zbog važnosti svojstva aditivnosti u analizi statističkih modela grafova.

2.1 Subjektivistička statistička fizika

Postoje dvije škole interpretacije vjerojatnosti. Ona uobičajena je tzv. frekventistička i u njoj se vjerojatnost doživljava kao objektivno svojstvo promatranog događaja, nešto

[1]Popis svojstava te svojevrstan izvod može se pronaći u dodatku poznatog Jaynesovog članka [4].

što se uvijek može izmjeriti provođenjem dovoljnog broja eksperimenata. Subjektivistička škola, s druge strane, promatra vjerojatnost samo kao mjeru našeg neznanja, kao procjenu našeg očekivanja da se nešto dogodilo ili će se dogoditi s obzirom na informacije koje o tome imamo. Stoga je subjektivistička interpretacija vjerojatnosti u svakom slučaju šira, jer uz sva frekventistička pitanja priznaje kao smislene i mnoga druga poput Koja je vjerojatnost da postoji naseljivi planet u svemiru?

Ono čime se statistička fizika zapravo bavi upravo je problem vjerojatnosti subjektivističkog tipa pa je stoga nužno da zauzmemo taj pogled. Konkretno, statistička fizika bavi se pitanjem procjene vjerojatnosti p_i sustava u i-tom stanju, odnosno u užem smislu samo očekivane vrijednosti veličina danog sustava, a s obzirom na eksperimentalno poznate informacije. Iako se to čini kao jako pododređen problem, sve što mi možemo je naći najbolju moguću, nepristranu procjenu s obzirom na dostupne informacije, a jedino što nam za to treba je ispravna mjera informacija koje posjedujemo. Jaynes tvrdi da je Shannonova, odnosno Gibbsova entropija upravo ta mjera informacija i da se od nje treba krenuti, a ne nju izvesti.

Kada se statistička fizika tako postavi onda je ona ništa više nego matematički najbolja moguća, nepristrana procjena nepoznatih informacija iz poznatih. Time ona gubi skoro svaki fizikalni sadržaj i sva pitanja o ispravnosti primjene statističke fizike na sustave za koje ne znamo zadovoljavaju li neka svojstva, poput ergodičnosti i metričke tranzitivnosti, postaju izlišna jer je statistička fizika po definiciji najbolje što se može sa poznatim informacijama. Jedino gdje fizika sudjeluje je u prebrojavanju mogućih stanja sustava, tako da ako statistička fizika daje rezultate koji nisu sukladni sa eksperimentom krivnju ne treba tražiti u njoj nego u brojanju. Da je to upravo tako najbolje je vidljivo iz primjera kvantne fizike gdje je zapravo klasična statistička fizika stalno ukazivala na to da se broje mnoga stanja koja su ista, jer su čestice neraspoznatljive, time što je davala točne rezultate tek kada bi se u prebrojavanje stanja uveo faktor $1/N!$. Iz gore navedenoga jasno je zašto je Jaynesova interpretacija omogućila, odnosno dala opravdanje za primjenu statističke fizike na sustave koji se u standardnom smislu uopće ne doživljavaju kao fizikalni, poput grafova. To će također biti jasno i iz izvoda koji slijede, a u kojima ništa neće biti eksplicitno fizikalno.

Uzme li se, znači, izraz za Gibbs-Shannonovu entropiju (2.1) kao dan, sva standardna (ravnotežna) statistička fizika može se izvesti iz poznatih informacija o veličinama sustava maksimiziranjem entropije uz korištenje Lagrangeovih multiplikatora. Kon-

kretno, ako su empirijski utvrđene srednje vrijednosti nekih veličina

$$\langle X_k \rangle = \sum_i p_i X_{k,i} \tag{2.3}$$

onda se tzv. procjene maksimalne entropije vjerojatnosti p_i dobivaju rješavanjem sljedeće jednadžbe:

$$\frac{\partial}{\partial p_i}\left[-\sum_i p_i \ln(p_i) - \alpha \sum_i p_i - \sum_k \beta_k \sum_i p_i X_{k,i}\right] = 0 \ , \tag{2.4}$$

pri čemu drugi uvjet (uz multiplikator α) dolazi od normiranosti vjerojatnosti, odnosno zahtjeva da vrijedi $\sum_i p_i = 1$. Rezultirajući izrazi upravo su izrazi poznati iz kanonskog ansambla, konkretno:

$$e^{(\alpha+1)} = Z = \sum_i e^{-\sum_k \beta_k X_{k,i}} \ , \tag{2.5}$$

$$p_i = \frac{e^{-\sum_k \beta_k X_{k,i}}}{Z} \quad \text{i} \tag{2.6}$$

$$\langle X_k \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta_k} \ln Z \ . \tag{2.7}$$

Iako su svi eksperimentalni podatci po svojoj prirodi uvijek samo srednje vrijednosti, pa se stoga čini opravdanim uvijek upotrebljavati gore izvedene formule, opisanim postupkom moguće je reproducirati i mikrokanonski ansambl, ako se poznati podatci proglase egzaktno točnima za zatvoreni sustav. U tom slučaju jednadžba (2.4) ne sadrži treći član pa ostaje samo multiplikator α koji u potpunosti određuje vjerojatnost:

$$e^{(\alpha+1)} = W = \sum_i 1 \ , \tag{2.8}$$

$$p_i = \frac{1}{W} \ , \tag{2.9}$$

pri čemu suma u izrazu za W broji samo ona mikroskopska stanja koja su za sustav moguća. Time je reproduciran Laplaceov princip nedovoljnog znanja kao i Boltzmannov izraz za entropiju.

Raspodijele vjerojatnosti dobivene na ovaj način mogu biti načelno svakakve. Ako

su široke onda nam ne govore gotovo ništa, a ako su koncentrirane oko nekih vrijednosti onda sadrže veliku moć predikcije. Glavni problem ove interpretacije statističke fizike čini mi se taj da ne daje nikakve odgovore na pitanje kako je moguće da tako malo informacija o sustavu omogućuje tako dobru procjenu vjerojatnosti i često veliku moć predikcije, odnosno kakve vrste informacija o sustavu su potrebne da bi to bio slučaj. Djelomičan odgovor na to pitanje nalazi se u sljedećem odjeljku.

2.2 Ekstenzivnost i termodinamička granica

Gotovo svi sustavi kojima se u okviru statističke fizike znanstvenici bave sadrže toliko čestica da su efektivno beskonačni. Zato ima smisla zahtijevati da svaki statistički opis sustava, ako je ispravan, bude dobro definiran u granici beskonačnog sustava. Za uobičajene sustave ta granica odgovara termodinamičkoj granici, koja se tako zove jer u njoj statistička fizika generira zakone i relacije termodinamike, a mogla bi se opisno definirati kao situacija u kojoj dodavanje tvari sustavu ne mijenja njegova svojstva [6].

Ekstenzivnost bi se, isto tako opisno, mogla definirati kao svojstvo sustava da posjeduje termodinamičku granicu [6]. Ta definicija potpuno je u skladu sa standardnom idejom ekstenzivnosti kao svojstvom proporcionalnosti neke veličine sa veličinom cijelog sustava, ako se ekstenzivnim sustavom smatra onaj koji je opisan ekstenzivnim veličinama. Razlog tome je što će ekstenzivne veličine u termodinamičkoj granici imati dobro definiranu vrijednost po nekom jediničnom dijelu sustava, a kako u termodinamičkoj granici svaki dio sustava po definiciji ima ista svojstva kao i cjelina onda se cijeli sustav može promatrati kroz te veličine. Dakle, da bi statistički opis sustava mogao biti smatran ispravnim nužno je da je opisan ekstenzivnim veličinama, odnosno da posjeduje termodinamičku granicu.

Uobičajeno je da se pri definiciji ekstenzivnosti za spomenuti jedinični dio sustava uzme jedinični volumen [5], dakle da termodinamička granica postoji ako vrijedi da je entropija po volumenu

$$s(n,\epsilon) = \lim_{\Lambda\to\infty} \frac{S(N,E)}{V} \tag{2.10}$$

dobro definirana funkcija u granici beskonačnog sustava, pri čemu su broj čestica po volumenu n i energija po volumenu ϵ (i eventualne druge ekstenzivne veličine koje opisuju sustav) konačne u istoj granici. No jedinični dio sustava može se definirati i

preko čestica, što se čini fundamentalnijim odabirom, budući da su čestice i interakcije među njima ono što u potpunosti određuje sve druge veličine sustava. Stoga ima jednako smisla definirati volumen po čestici, energiju po čestici i entropiju po čestici kao veličine koje trebaju biti konačne i dobro definirane u termodinamičkoj granici.

Ovo naizgledno cjepidlačenje stvarno je irelevantno za standardne fizikalne sustave, ali samo zato što je odnos čestice i volumena vrlo lokalan - svaka čestica zauzima određeni (efektivan) prostor oko sebe. No ako se ovaj aparat i pojmovi pokušaju primijeniti na nefizikalan sustav poput grafova, onda ovo pitanje postaje vrlo važno, budući da volumen kod grafova uopće nije definiran. Čak i kad bi postojao neki analogon volumena ili prostora, u grafovima ne postoji nikakva lokalnost, svaki vrh može biti susjedan svakom drugom. Kada bi se proizvoljan graf ograničio na pravilnu strukturu poput rešetke, onda bi ovaj problem možda bio rješiv nalaženjem analogona volumenu, npr. u vrhovima. No za slučaj općenitih grafova, koji su tema ovoga rada, ovakvom redefinicijom ekstenzivnih veličina po čestici, umjesto po volumenu, postiže se da je nužno definirati samo jednu analogiju fizikalnim sustavima i to onu prirodnu analogiju pojma čestice kao osnovnog građevnog dijela sustava.

2.3 Teorija velikih devijacija

Kao što je ranije rečeno, teorija velikih devijacija može se doživjeti kao prirodan matematički jezik statističke fizike u okviru kojega je se može rigorozno formulirati. No da bi to bilo moguće nužno je prvo matematički precizno definirati sustave, odnosno njihova mikroskopska i makroskopska stanja.

Svaki sustav mora biti sastavljen od N nekakvih primitivnih objekata, svaki od kojih se uvijek nalazi u jednom od mogućih stanja ω_i iz skupa Λ. Mikrostanje cijelog sustava definirano je stoga kao:

$$\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_N) \in \Lambda^N \ . \tag{2.11}$$

Makrostanje sustava odgovara onome što se makroskopski može opaziti, dakle skupu vrijednosti relevantnih makroskopskih opservabli određenih mikrostanjem sustava. Formalno se ono može definirati kao

$$M_N : \Lambda^N \to \mathcal{M} \ , \tag{2.12}$$

gdje je $\mathcal{M}$ neka mnogostrukost, najčešće definirana kao Poljski prostor, koja se može zamisliti kao direktan produkt prostora vrijednosti svih relevantnih makroskopskih opservabli. I mikrostanje i makrostanje sustava mogu se interpretirati kao slučajne varijable sa svojim pridruženim raspodjelama vjerojatnosti.

Osnovni pojam teorije velikih devijacija je princip velike devijacije (*engl. Large Deviation Principle*) za kojeg možemo reći da neka mjera vjerojatnosti P slučajne varijable M_N zadovoljava, ako postoji

$$\lim_{N\to\infty} \frac{-1}{N} \ln P\left(M_N \in [s, s+ds]\right) = I(s) \ . \tag{2.13}$$

Funkcija $I(s)$ nosi naziv funkcija intenziteta (*engl. rate function*) i u potpunosti opisuje eksponencijalno ponašanje vjerojatnosti P. Centralni rezultat teorije velikih devijacija Varadhanov je teorem, kojeg se za potrebe ovog rada može zapisati na sljedeći način:

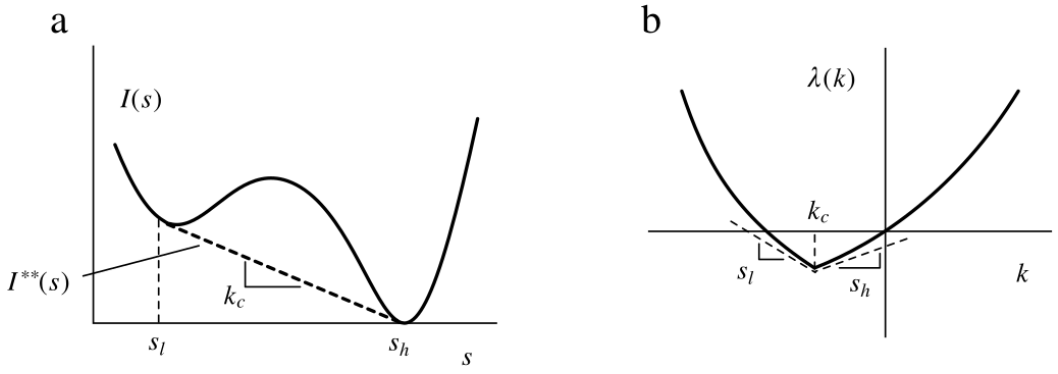
$$\lambda(k) \equiv \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \left\langle e^{N\, k\cdot M_N} \right\rangle = \sup_{s\in\mathcal{M}} \left[k\cdot s - I(s)\right] = I^{\star}(s) \ . \tag{2.14}$$

To ukratko znači da je funkcija $\lambda(k)$, koja se u matematici naziva skalirana funkcija izvodnica kumulanata, Legendre-Fenchelov transformat funkcije intenziteta. Mnogi drugi rezultati slijede iz svojstava Legendre-Fenchelove transformacije, primjerice Gärtner-Ellisov teorem:

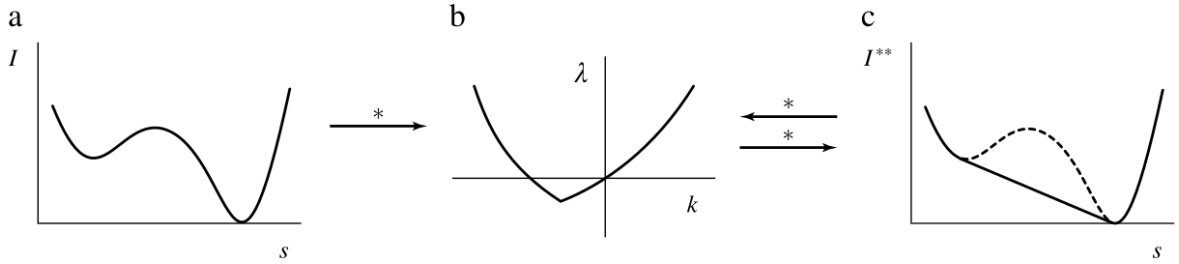
$$I(s) = \sup_{k\in\mathcal{M}} \left[k\cdot s - \lambda(k)\right] = I^{\star\star}(s) \ , \tag{2.15}$$

koji omogućuje izračun funkcije intenziteta iz funkcije izvodnice kumulanata uz uvjet da je ona svugdje diferencijabilna, što je ekvivalentno uvjetu konkavnosti funkcije intenziteta (slika 2.1). Iz svojstava Legendre-Fenchelove transformacije također slijedi da je funkcija $\lambda(k)$ uvijek konkavna te da će njen Legendre-Fenchelov transformat $\lambda^{\star}(k) = I^{\star\star}(s)$ biti jednak originalnoj funkciji $I(s)$ ako i samo ako je $I(s)$ konkavna funkcija, u protivnom će biti jednak konkavnoj envelopi od $I(s)$ (slika 2.2).

Funkcija intenziteta $I(s)$ uvijek je pozitivna funkcija, a njene nule (dakle minimumi) odgovaraju točkama čije vjerojatnosti se ne smanjuju eksponencijalno sa N. Ako postoji samo jedna takva točka ona odgovara srednjoj vrijednosti slučajne varijable $\lim_{N\to\infty} \langle M_N \rangle$. Time teorija velikih devijacija reproducira zakon velikih brojeva,



Slika 2.1: Ako je funkcija nekonkavna (lijevi graf) onda će njen Legendre-Fenchelov transformat (desni graf) biti nediferencijabilan u točkama koje odgovaraju koeficijentima smjera poveznica lokalnih minimuma. (slika preuzeta iz [7])



Slika 2.2: Odnos Legendre-Fenchelovih transformata. Ako je funkcija nekonkavna (lijevi graf) onda će njen dvostruki Legendre-Fenchelov transformat biti njena konkavna envelopa (desni graf). (slika preuzeta iz [7])

ali ga i poopćuje jer opisuje kako točno slučajna varijabla M_N konvergira ka svojoj srednjoj vrijednosti. Teorija velikih devijacija poopćuje i centralni granični teorem, drugi matematički stup klasične statističke fizike, jer on u osnovi odgovara kvadratnoj aproksimaciji funkcije intenziteta oko njene nule.

Veza gore izvedenih rezultata sa statističkom fizikom može se uočiti već iz sličnosti forme izraza i prisutnosti Legendreovih transformata, no ona i matematički vrlo jednostavno slijedi ako se za slučajnu varijablu uzme makrostanje sustava $M_N(\omega)$, a za mjeru vjerojatnosti mikrostanja odabere $P(d\omega) = d\omega/\Lambda^N$, dakle uniformna mjera po svim mikrostanjima. Iz toga slijedi da je vjerojatnost nekog sustava da se nalazi u makrostanju u jednaka

$$P(M_N \in du) \equiv P\left(M_N \in [u, u+du]\right) = \int\limits_{\{\omega\in\Lambda^N : M_N(\omega)\in du\}} P(d\omega) =$$

$$= \frac{\Omega(M_N \in du)}{\Lambda^N} \,. \tag{2.16}$$

Uvrštavanjem gornjeg izraza u definiciju funkcije intenziteta (2.13) dobije se sljedeća jednakost:

$$I(u) = -\lim_{N\to\infty} \frac{\ln \Omega(M_N \in du)}{N} + \ln|\Lambda| = -s(u) + \ln|\Lambda| \ , \tag{2.17}$$

dakle funkcija intenziteta je, do na predznak i konstantu, isto što i mikrokanonska entropija sustava po čestici u termodinamičkoj granici, tj. specifična entropija!

S druge strane, promatrajući definiciju skalirane funkcije izvodnice kumulanata $\lambda(k)$ (2.14) vidimo da ona sadržava logaritam nečega što jako sliči na funkciju izvodnicu Z iz kanonskog ansambla. I stvarno, jednostavnom zamjenom varijabli $k \to -\beta$ dobiva se sljedeća jednakost:

$$\lambda(k) = \lim_{N\to\infty} \frac{\ln Z}{N} - \ln|\Lambda| = -\phi(\beta) - \ln|\Lambda| \ , \tag{2.18}$$

dakle da je skalirana funkcija izvodnica kumulanata, do na predznak i konstantu, isto što i kanonski Massieuov potencijal[2] po čestici u termodinamičkoj granici. Iz ove perspektive otkriva se kako su termodinamička granica i ekstenzivnost ključni pojmovi za statističku fiziku, budući da su centralne veličine njene prirodne matematičke formulacije definirane upravo u termodinamičkoj granici.

Uvrštavanjem dobivenih identifikacija funkcija iz teorije velikih devijacija sa poznatim termodinamičkim veličinama u temeljne relacije te teorije (2.14, 2.15) dobivaju se poznate (i temeljne) relacije termodinamike:

$$\phi(\beta) = \inf_u \{(\beta \cdot u) - s(u)\} \ , \tag{2.19}$$

$$s(u) = \inf_\beta \{(\beta \cdot u) - \phi(\beta)\} \ . \tag{2.20}$$

Mnoga svojstva termodinamike relativno jednostavno slijede iz općih svojstava funkcije intenziteta i Legendre-Fenchelove transformacije. Primjerice, principi ekstremalnosti (maksimizacija entropije, minimizacija slobodne energije), objašnjenje i poopćenje Einsteinove teorije fluktuacija ili objašnjenje metastabilnih stanja kao lokalnih maksimuma nekonkavnih specifičnih entropija. Izvodi tih posljedica teorije velikih devijacija, kao i mnogih drugih, uz puno preciznije i detaljnije izlaganje os-

[2]U literaturi se ϕ često proziva slobodnom energijom jer je to poznatiji pojam, a od Massieuovog potencijala se razlikuje samo za faktor $k_B T$.

nova, mogu se pronaći u preglednom radu [7] i knjizi [8].

2.4 (Ne)ekvivalentnost ansambala

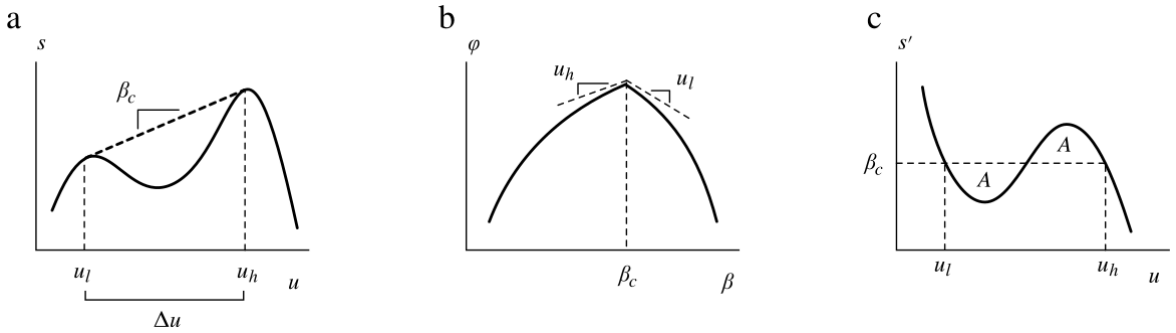
Da ansambli teoretski mogu biti neekvivalentni dobro je poznato od samih početaka statističke fizike, a najjednostavnije se može vidjeti na izrazima za toplinski kapacitet, koji je i eksperimentalno provjerljiva veličina. U mikrokanonskom ansamblu toplinski kapacitet dan je izrazom

$$C_V = -\frac{\left(s'(u)\right)^2}{s''(u)} \tag{2.21}$$

pa teoretski može biti negativan (ako je entropija nekonkavna), dok je u kanonskom ansamblu on dan izrazom

$$C_V = -\frac{\partial\beta}{\partial T}\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial\beta^2} = \beta^2 \left\langle \left(E - \langle E\rangle\right)^2 \right\rangle \tag{2.22}$$

i očito je nužno pozitivan. No opći stav da ansambli nužno moraju biti ekvivalentni za fizikalne sustave bio je motiviran rezultatom o iščezavanju relativnih fluktuacija sa veličinom sustava te jakim iskustvenim otporom spram koncepta negativnog toplinskog kapaciteta jer bi to značilo da sustav može davati energiju grijanjem ili primati hlađenjem. Poznato iskustvom motivirano rješenje tog problema, kada bi se pojavilo u teorijskoj krivulji jednadžbe stanja, je tzv. Maxwellova konstrukcija jednakih površina kojom se modeliraju fazni prijelazi prve vrste.



Slika 2.3: Konkavna envelopa specifične entropije (crtkano na lijevom grafu) odgovara poznatoj Maxwellovoj konstrukciji na grafu temperature (crtkano na desnom grafu), a razlika energija na kojima se maksimumi entropije nalaze (Δu) odgovara latentnoj toplini prijelaza. (slika preuzeta iz [7])

Iz perspektive teorije velikih devijacija Maxwellova konstrukcija proizlazi izravno iz konkavne envelope mikrokanonske entropije (slika 2.3). Činjenica da je line-

arni dio u entropiji, koji odgovara Maxwellovoj konstrukciji, posljedica upravo nediferencijabilnosti slobodne energije (vidi sliku 2.1) daje jednostavno matematičko objašnjenje zašto je Maxwellova konstrukcija model faznih prijelaza prve vrste[3], ali i zašto fazni prijelazi prve vrste (u tom matematičkom smislu) ukazuju na postojanje neekvivalentnosti ansambala. Naime, Maxwellova konstrukcija je dobar model samo u termodinamičkoj granici i samo za sustave sa kratkodosežnim interakcijama. Dokaz prve tvrdnje može se naći u [9] gdje je izmjeren negativni toplinski kapacitet izoliranog sustava od svega 147 čestica, a dokaz druge u sljedećem odjeljku.

U prošlom odjeljku utvrđeno je da Gärtner-Ellisov teorem, odnosno relacija (2.20), vrijedi samo ako je specifična mikrokanonska entropija konkavna funkcija. Ako ona to nije, relacija (2.20) rezultirati će funkcijom koja je njena konkavna envelopa, dakle čiji nekonkavni dijelovi su zamijenjeni linearnim odsječcima od ekstrema do ekstrema. Ta funkcija odgovara specifičnoj kanonskoj entropiji sustava i ona će se, dakle, razlikovati od mikrokanonske. Time teorija velikih devijacija na jednostavan način pokazuje da mikrokanonski i kanonski ansambli nekog sustava mogu biti neekvivalentni i u termodinamičkoj granici, a da je taj sustav i dalje dobro definiran.

Takva vrsta (ne)ekvivalentnosti zove se *termodinamička (ne)ekvivalentnost*, a određuje ju pitanje daju li termodinamički potencijali dvaju ansambala iste rezultate, odnosno postoji li između njih bijekcija? U [10] definirane su još dvije vrste ekvivalentnosti: *ekvivalentnost u makrostanjima* i *ekvivalentnost po mjerama*. Prvu određuje pitanje jesu li skupovi ravnotežnih makrostanja isti za oba ansambla?, a drugu određuje pitanje konvergiraju li, na neki način, razdiobe vjerojatnosti dvaju ansambala u termodinamičkoj granici? Dokazano je da su sve tri definicije ekvivalentnosti međusobno ekvivalentne[4], kao i da su sve ekvivalentne uvjetu konkavnosti mikrokanonske entropije. Dakle ako je mikrokanonska specifična entropija konkavna funkcija, onda su i ansambli ekvivalentni na sve od navedenih načina, a ako nije onda nisu niti na jedan od njih.

Ekvivalentnost po mjerama korisna je i praktična jer daje jednostavan numerički

[3]Fazni prijelazi prve vrste definiraju se kao singulariteti u prvoj derivaciji relevantnog termodinamičkog potencijala, iako ta definicija ne odgovara iskustvu u potpunosti s obzirom da će vrijediti i za sustave čija mikrokanonska entropija neće postići svoju konkavnu envelopu u termodinamičkoj granici. Takvim sustavima bavi se odjeljak 2.5 i oni nemaju fazne prijelaze u klasičnom smislu jer se uopće ne uređuju u faze, po definiciji makroskopski homogene dijelove sustava.

[4]Ekvivalentnost u makrostanjima nije strogo ekvivalentna ostalima, ali samo u specifičnim slučajevima i na način koji je dosta tehničke prirode.

kriterij ekvivalentnosti, no da bi bila u potpunosti definirana treba joj prvo pridružiti neki kriterij konvergencije mjera vjerojatnosti. To se može postići korištenjem relativne entropije, poznate i kao Kullback-Leibler udaljenost[5], kao svojevrsne mjere udaljenosti dvaju mjera vjerojatnosti. Ona je u diskretnom slučaju[6] dana sljedećim izrazom:

$$D(P_N^u||P_N^\beta) = \sum_{\omega\in\Lambda^N} P_N^u(\omega)\ln\frac{P_N^u(\omega)}{P_N^\beta(\omega)}\ . \tag{2.23}$$

Kriterij konvergencije mjera, odnosno ekvivalentnosti ansambala može se onda izraziti kao uvjet da specifična relativna entropija

$$d = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}D(P_N^u||P_N^\beta) = \lim_{N\to\infty}\frac{\ln P_N^u(\omega^\star) - \ln P_N^\beta(\omega^\star)}{N} \tag{2.24}$$

iščezava u termodinamičkoj granici, odnosno da vrijedi $d = 0$. Druga jednakost u gornjem izrazu slijedi iz činjenice da će mikrokanonska vjerojatnost biti različita od 0 samo za sustave za koje vrijedi $M_N(\omega^\star) = u$.

2.5 Aditivnost i termodinamika neaditivnih sustava

Ako se sustav podijeli na dva dijela, bilo koja veličina X može se zapisati kao zbroj te veličine za svaki dio zasebno i jednog doprinosa od interakcije tih dijelova, dakle kao $X = X_1 + X_2 + X_{int}$. Aditivna je ona veličina koja je ekstenzivna i za koju vrijedi da je $\lim_{N\to\infty} X_{int}/N = 0$ za svaku moguću particiju sustava, a sustav je aditivan ako je opisan aditivnim veličinama. Dakle, aditivnost implicira ekstenzivnost, ali obrat ne vrijedi!

Da je to stvarno tako može se vidjeti na jednostavnom modelu srednjeg polja, tzv. Curie-Weissovom modelu magnetizma, čija energija je definirana sljedećim Hamiltonijanom:

$$H_{CW} = \frac{-J}{2N}\sum_{i,j=1}^{N} S_iS_j = \frac{-J}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N} S_i\right)^2 = -N\frac{J}{2}m^2\ , \tag{2.25}$$

pri čemu je $S_i \in \{-1, +1\}$. Gore definirana energija očigledno je ekstenzivna za cijeli sustav, ali isto tako očito nije aditivna po podsustavima. Najbolji način da se to vidi je da se sustav podijeli na podsustav u kojem su svi $S_i = +1$ i podsustav u kojem su

[5] Ona formalno nije udaljenost jer nije simetrična i ne zadovoljava nejednakost trokuta, no može se koristiti kao generalizirana metrika.

[6] U radu [10] je sve definirano na kontinuiranim mjerama, no za ovaj rad je to nepotrebno i samo bi bilo nepotrebno zbunjujuće i kompliciranо.

svi $S_i = -1$.

Način na koji se Curie-Weissov Hamiltonijan učinio ekstenzivnim, i time omogućila primjena statističke fizike na njega, općenito se naziva Kacov postupak i podrazumijeva redefiniciju konstante vezanja. Konkretno, u slučaju Curie-Weissovog modela napravljena je redefinicija $J \to J/N$, no sličan postupak može se u načelu primijeniti na sve sustave sa interakcijom oblika $V(r) = Jr^{-\alpha}$ čija energija nije ekstenzivna veličina. Uzmimo kao idealizirani primjer sustav homogene gustoće ρ u ν dimenzija sa takvom interakcijom. Energija po čestici takvog sustava dana je izrazom:

$$\epsilon = \int_{\delta}^{R} \rho J \frac{d^{\nu} r}{r^{\alpha}} = \rho J \Omega_{\nu} \int_{\delta}^{R} r^{\nu-1-\alpha} dr = \frac{\rho J \Omega_{\nu}}{\nu - \alpha} \left[R^{\nu-\alpha} - \delta^{\nu-\alpha} \right] , \tag{2.26}$$

pri čemu je Ω_{ν} puni prostorni kut u ν dimenzija, a δ neka donja granica na kojoj je potencijal odrezan da se izbjegne divergencija, što odgovara aproksimaciji čestica čvrstim kuglicama. Vidimo da puštajući limes $R \to \infty$ energija po čestici divergira za $\alpha < \nu$, no redefiniranjem konstante vezanja $J \to JV^{\alpha/\nu-1} \propto JR^{\alpha-\nu}$ energija po čestici postaje konstanta u termodinamičkoj granici, odnosno energija postaje ekstenzivna veličina[7]. Takve interakcije nazivaju se dugodosežnima[8] i sustavi s takvim interakcijama su neaditivni. Interakcije za koje vrijedi $\alpha > \nu$ nazivaju se kratkodosežnima i sustavi s takvim interakcijama su aditivni i uobičajeni za područje termodinamike.

Primjeri sustava s dugodosežnim interakcijama zapravo su mnogobrojni jer su interakcije svih fundamentalnih sila upravo takve. Takve sustave nalazimo npr. u astrofizici, fizici plazme i hidrodinamici [11], a u njih spadaju i svi modeli srednjeg polja jer za njih vrijedi $\alpha = 0$. Među prvim sustavima takvog tipa koji su bili teorijski proučavani kroz statističku fiziku bili su sustavi čestica vezani samo gravitacijskom silom, primjer čega su maglice u svemiru. Na modelu takvog sustava prvi puta je otkrivena fundamentalna neekvivalentnost ansambala i to kroz dokaz postojanja negativnog toplinskog kapaciteta [12]. Detaljnijim proučavanjem utvrđeno je da je mikrokanonska entropija stvarno nekonkavna u termodinamičkoj granici.

To je dokaz da za sustave sa dugodosežnim interakcijama Maxwellova konstruk-

[7] Izvod tehnički ne vrijedi za $\alpha = \nu$, ali i u tom slučaju bi energija po čestici divergirala (samo logaritamski)

[8] Ta definicija dugodosežnosti ne odgovara onoj uobičajenoj preko karakteristične duljine te se koristi samo u ovom području.

cija ne vrijedi, a za to postoji više razloga. Prije svega, ona pretpostavlja da sustav postoji u fazama, pri čemu je faza definirana kao makroskopski homogena regija sustava [5], no kod neaditivnih sustava taj koncept nije dobro definiran jer će materija imati tendenciju skupljati se u nakupine, a ne se homogeno raspodjeljivati. Iz toga slijedi da takvi sustavi, iako zadovoljavaju matematičku definiciju faznog prijelaza, ne doživljavaju fazne prijelaze u fizikalnom smislu. No čak i kada to ne bi bio problem, Maxwellova konstrukcija bazirana je na ideji da separacija faza maksimizira entropiju koja je stoga samo linearna kombinacija entropija pojedinih faza, no ako entropija nije aditivna onda ni taj argument ne vrijedi.

Konačno, pretpostavlja se da neaditivnost sustava povlači neekvivalentnost ansambala, tj. da svi neaditivni sustavi imaju nekonkavnu specifičnu mikrokanonsku entropiju. Iako za to postoje neke indikacije i objašnjenja te nije još pronađen protuprimjer, koliko je meni poznato ta tvrdnja još nije rigorozno dokazana.

3 Termodinamika kompleksnih mreža

3.1 Osnove kompleksnih mreža

Matematička teorija na kojoj se zasniva modeliranje i proučavanje kompleksnih mreža je teorija grafova. Graf $G = (V, E)$ uređena je dvojka skupa vrhova V i skupa bridova E koji ih povezuju. Najčešća i najjednostavnija reprezentacija grafa, pogotovo za računalne potrebe, je matrica susjedstva (σ_{ij}). Osnovna vrsta grafova su oni u kojima postoji samo jedna vrsta vrhova i bridova, i bridovi su dvosmjerni. Matrica susjedstva takvih grafova simetrična je te sadrži samo nule i jedinice. Najjednostavniji načini kompliciranja grafova su definiranje usmjerenosti bridova, čime matrica susjedstva gubi simetričnost i dobivaju se usmjereni grafovi (*digrafi*), te postavljanje težina na bridove čime elementi matrice susjedstva postaju proizvoljni (realni) brojevi. Moguće su brojne dodatne komplikacije poput bridova koji spajaju više vrhova, tzv. hiperbridovi i rezultirajući *hipergrafovi*, ili postojanja više različitih vrsta vrhova i bridova, svake sa svojim posebnim pravilima, čime se ulazi u trenutno vrlo popularno i aktivno područje višeslojnih (*engl. multilayer*) mreža.

Za potrebe proučavanja mreža mogu se definirati brojna svojstva različitih kompleksnosti. Najjednostavnija su skalarna svojstva poput udjela broja bridova u ukupnom mogućem broju bridova: $\lambda = \frac{2}{n(n+1)} \sum_{i<j} \sigma_{ij}$, promjera mreže: $d = max\{d_{ij}\}$, pri čemu je (d_{ij}) matrica najkraćih puteva između vrhova, te srednjeg najkraćeg puta mreže: $l = \frac{2}{n(n+1)} \sum_{i<j} d_{ij}$. Jedno od najvažnijih i najčešće korištenih svojstava mreže je niz stupnjeva vrhova (*engl. degree sequence*) $\{k_i\}$, odnosno njegova distribucija, pri čemu je stupanj i-tog vrha definiran kao broj bridova spojenih na taj vrh:

$$k_i = \sum_j \sigma_{ij} \ . \tag{3.1}$$

Sljedeće svojstvo po kompleksnosti i učestalosti korištenja je tranzitivnost, odnosno grupiranje (*engl. clustering*) koje može biti definirano na više načina, ali je uvijek nekakav omjer broja trokuta i povezanih trojki, pri čemu je povezana trojka povezani tročlani podgraf dok je trokut potpuno povezani tročlani podgraf. Tranzitivnost je najjednostavniji alat za proučavanje nastajanja struktura zajednica (*engl. community structures*), blisko povezanih dijelova grafova, i najjednostavnije često korišteno svojstvo mreže koje je nelinearno u matrici susjedstva. Konkretno, broj trokuta i-tog vrha

može se definirati kao $T_i = \frac{1}{2}\sum_{jk}\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki}$, a broj trojki kao $\tau_i = \frac{1}{2}\sum_{jk}\sigma_{ij}\sigma_{ik}$. Za više informacija o osnovama, svojstvima i općenito o kompleksnim mrežama preporučam pregledni rad [1] ili knjigu [2] M. E. J. Newmana.

3.2 Ansambli kompleksnih mreža

U području kompleksnih mreža mikrokanonskim ansamblom naziva se svojevrsna generalizacija mikrokanonskog ansambla fizikalnih sustava, kod kojeg postoji čvrsti uvjet (*engl. hard constraint*) samo na energiju, na ansambl jednako-vjerojatnih sustava za zadovoljenim proizvoljnim skupom čvrstih uvjeta. Na sličan način je i kanonski ansambl kompleksnih mreža generalizacija kanonskog ansambla fizikalnih sustava jer energija gubi poseban status i ansambl biva definiran srednjim vrijednostima skupa veličina, odnosno skupom tzv. mekanih uvjeta (*engl. soft constraints*). Takve definicije ansambala motivirane su Jaynesovom interpretacijom statističke fizike (vidi odjeljak 2.1) te prirodno dozvoljavaju mješavinu mekanih i čvrstih uvjeta.

Primjena mikrokanonskog ansambla teška je i nepraktična kao i u fizici, no formalno nužna kada se analizira konkretna mreža o kojoj postoje egzaktni podaci i promatrane veličine su konstantne u vremenu. Dobivanje analitičkih rezultata za imalo kompleksnije uvjete zahtijeva rješavanje nevjerojatno kompliciranih kombinatoričkih problema čija rješenja uglavnom nisu poznata. Računalna primjena, u smislu generiranja mreža sa zadovoljenim danim uvjetima pa provođenja statistike nad tim mrežama, moguća je, ali isto vrlo problematična. Konkretno, za tipičan problem generiranja mreža sa točno određenim slijedom stupnjeva vrhova postoje dva standardna algoritma. *Edge Stub Reconnection* algoritam stvara vrhove sa unaprijed određenim brojem nespojenih veza (*engl. stubs*) i potom ih potpuno slučajno spaja. Taj algoritam vrlo često zapne i nije efikasan. Bolji je tzv. LRA (*Local Reconnection Algorithm*) koji uzima cijelu početnu referentnu mrežu i onda lokalnim slučajnim prespajanjima veza generira sve moguće varijacije, pritom nikad ne narušavajući čvrsto zadane stupnjeve vrhova. No uz to što je i LRA vrlo vremenski neefikasan te mu je potrebno puno više početnih informacija nego je nužno, dokazano je i da neergodički uzorkuje prostor svih dozvoljenih mikrostanja [13] pa je i statistički, rigorozno gledajući, neispravan. Zbog navedenih problema analitičkog, pa čak i računalnog korištenja mikrokanonskog ansambla, bilo bi poželjno i dobro da su, kao i

za fizikalne sustave, računi u kanonskom ansamblu puno jednostavniji i ekvivalentni mikrokanonskima, dakle da daju iste rezultate za dovoljno velike sustave.

No informacije o mrežama često nisu potpune ili apsolutno pouzdane i točne, a često su i same mreže promjenjive u vremenu oko srednjih vrijednosti nekih veličina. U tim slučajevima kanonski ansambl je onaj koji bi i formalno trebao biti primijenjen za analizu sustava. Kanonski ansambl u kompleksnim mrežama poznat je pod nazivom *exponential random graphs* i, kao što je već rečeno, svojevrsna je generalizacija kanonskog ansambla fizikalnih sustava na proizvoljan skup veličina čije srednje vrijednosti su zadane. Formalno matematički je sve isto kao u Jaynesovom članku [4], odnosno odjeljku 2.1, razlikuje se samo terminologija. Konkretno, uvjeti na graf uklopljeni su u tzv. *generalizirani Hamiltonijan*:

$$H(G, \vec{\theta}) = \sum_k \theta_k x_k(G) \ , \tag{3.2}$$

pri čemu je $\{x_k\}$ skup nekih svojstava grafa za koje se zahtijeva da su u prosjeku po ansamblu zadovoljena, a $\{\theta_k\}$ je skup generaliziranih temperatura. Slijedi da se uz zadane temperature $\vec{\theta^\star}$ graf G pojavljuje sa vjerojatnošću od

$$P_{can}(G) = \frac{e^{-H(G,\vec{\theta^\star})}}{Z} \ , \tag{3.3}$$

a srednja vrijednost veličine x_i računa se sljedećom formulom:

$$\langle x_k \rangle = -\frac{\partial}{\partial \theta_k} \ln Z \ , \tag{3.4}$$

pri čemu je Z particijska funkcija koja je dana izrazom

$$Z(\vec{\theta^\star}) = \sum_{G \in \mathcal{G}} e^{-H(G,\vec{\theta^\star})} \ , \tag{3.5}$$

a $\mathcal{G}$ skup svih mogućih grafova (s N vrhova).

Prednost kanonskog ansambla je ta što se poznavanjem particijske funkcije može izračunati sve, no pronalazak, odnosno izračun particijske funkcije općenito je vrlo težak problem koji jako ovisi o prirodi i broju uvjeta, odnosno o konkretnom modelu. Malo kasnije će se pokazati da je već za konfiguracijski model particijsku funkciju moguće dobiti u zatvorenom obliku samo u granici rijetkih (*engl. sparse*) grafova.

No ovdje valja napomenuti da se zadnjih godina u matematičkoj zajednici koja se bavi eksponencijalnim slučajnim grafovima počela primjenjivati nova matematička teorija limesa grafova (*engl. theory of graph limits*). Ta teorija ima prirodnu primjenu u režimu gustih (*engl. dense*) grafova, ali očekivano je da se može proširiti i na istraživanje rijetkih grafova za što već postoje neki rezultati [18]. Rad koji je centralan za tu liniju istraživanja je poznati rad cijenjenih matematičara Chatterjeeja i Diaconisa [21][9] u kojemu dokazuju teorem (3.1) koji kaže da se slobodna energija (dakle negativan logaritam particijske funkcije) bilo kojeg modela eksponencijalnih slučajnih grafova može dobiti kao rješenje optimizacijskog problema koji je, u osnovi, samo generalizacija Legendre-Fenchelove transformacije neke specifične entropije. Taj jezik, odnosno takva formulacija problema pripada teoriji velikih devijacija i teoriji limesa grafova, obje od kojih su prekomplicirane da bi se ovaj rad njima bavio više nego je napisano u odjeljku 2.3. Dovoljno je ovdje reći da spomenuti teorem na daje izravno rješenje za bilo koji model, budući da je optimizacijski problem koji bi trebalo riješiti općenito vrlo težak i definiran u jako apstraktnom prostoru, ali vodi do nekih vrlo općenitih i jednostavnih rezultata za neke klase modela (dobivenih već u spomenutom članku) te je perspektivna baza za daljnje istraživanje ostalih modela eksponencijalnih grafova, pogotovo u granici gustih grafova.

Jedna napomena o rezultatima spomenutih radova [18, 21] je nužna, a to je da su oni dobiveni u granici beskonačnih grafova, to jest u onome što bi fizičari nazvali termodinamičkom granicom. Komentar o tome zadržati ću za odjeljak 4 nakon prezentacije termodinamičkih slika mreža i njihove primjene na osnovne modele, no u tome se pokazuje jasna potreba za točnim definiranjem termodinamičke granice, odnosno kako točno uzeti $\lim_{N\to\infty}$ i zašto baš tako. Time se bavi sljedeći odjeljak.

3.3 Dvije (termodinamičke) slike

U odjeljku 2.2 dani su argumenti za to da je pojam čestice centralan za svojstva aditivnosti i ekstenzivnosti kao i za definiranje termodinamičke granice, odnosno ispravnog limesa beskonačnog sustava. U slučaju mreža čini se da postoje samo dva moguća izbora za analogon čestice, dakle za neki elementarni dio sustava: vrh i brid. Uobičajena, u pravilu prešutna, "fizikalna" slika mreža je da su vrhovi kao

[9] Taj rad je također i preglednog i pedagoškog karaktera te sadrži i kratki uvod u teoriju limesa grafova koji svakako preporučam.

fizikalne čestice, a bridovi kao interakcija između tih čestica. Pretpostavljam da je razlog tome način na koji se dolazi do grafova stvarnih sustava, gdje se u pravilu vrhovima modeliraju neki objekti (ljudi, računala, ...), a bridovima veze između tih objekata. No predmet istraživanja eksponencijalnih slučajnih grafova su sami grafovi i njihova topologija (zašto mreže u stvarnom svijetu izgledaju tako kako izgledaju?), a ne neka dinamika na već zadanim grafovima. U tom slučaju nema nikakvog a priori razloga zašto bi se za elementarni dio grafa odabrao vrh umjesto brida, niti zašto bi se bridovi gledali kao interakcije. Štoviše, logično bi bilo da se interakcijom promatra ono što je određeno samim generaliziranim Hamiltonijanom modela, a čak i ako se on sastoji samo od bridova ne znači da oni ne mogu biti analogoni čestica (npr. Gibbsova energija u termodinamici sastoji se samo od broja čestica i kemijskog potencijala).

Iz navedenih razloga u iduća dva odjeljka biti će razmotrena oba odabira: vrhovi kao čestice i bridovi kao čestice, te će za svaki od odabira biti utvrđene pripadajuće definicije aditivnosti i ekstenzivnosti modela grafova te pravilno definiranje veličina u termodinamičkoj granici.

3.3.1 Vrhovi-kao-čestice (*vertices-as-particles*)

Ako se kao analogon čestice u grafu $G = (V, E)$ uzme vrh $v \in V$ onda se mikrostanje sustava ω može definirati kao vektor stanja pojedinih vrhova $\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_N) \in \Lambda^N$, pri čemu je $N = |V|$, a Λ skup stanja u kojima se svaki pojedinačni vrh v može nalaziti. Skup stanja Λ može biti definiran kroz neka svojstva vrhova poput stupnja vrha k i u toj slici bridovi stvarno igraju samo ulogu interakcije, dakle čine da su vrhovi u nekom od mogućih stanja.

Iz perspektive ove slike sustav je dvostruko veći kada $N \to 2N$, a to izravno utječe na definiciju ekstenzivnosti koja u tom slučaju glasi: veličina X je ekstenzivna ako $X \to 2X$ kada $N \to 2N$.

Za model eksponencijalnog slučajnog grafa možemo reći da je aditivan ako mu je aditivan generalizirani Hamiltonijan. Iz perspektive ove slike jedina logična definicija podsustava je $V' \subset V$, pri čemu bridove koji povezuju vrhove iz različitih disjunktnih podskupova skupa V ima jedino smisla zanemariti. Time se samim rastavom grafa kao sustava na podsustave gubi dio originalnog grafa i spoj podsustava već na toj osnovnoj topološkoj razini ne može dati cjelinu pa je stoga za očekivati da

bilo koja veličina X koja se na grafu uopće može definirati neće biti aditivna u ovoj slici. Ovakva aditivnost se u literaturi može pronaći pod nazivom *node additivity*, a u daljnjem tekstu na nju će se odnositi termin *aditivnost po vrhovima*.

U odjeljku 2.2 pokazano je da je dobra termodinamička granica, u širem smislu, ona u kojoj ekstenzivne veličine sustava, poput entropije i energije, imaju konačnu vrijednost po čestici u granici beskonačnog sustava. To znači da su ispravni limesi za bilo koju ekstenzivnu veličinu X u vrhovi-kao-čestice slici dani sljedećim izrazom:

$$x = \lim_{N\to\infty} \frac{X}{N} < +\infty \, . \tag{3.6}$$

3.3.2 Bridovi-kao-čestice (*edges-as-particles*)

Za razliku od vrhova bridovi ne mogu postojati sami od sebe, njima trebaju vrhovi koje bi povezivali. Nemoguće je definirati mikrostanje sustava ω samo na skupu bridova E, kao što je to učinjeno sa skupom vrhova u prošlom odjeljku, jer skup bridova podrazumijeva minimalni skup vrhova i nalazi se samo u tom jednom mogućem stanju, svako drugo "stanje" nije isti skup bridova.

Ovaj konceptualni problem moguće je izbjeći na način da se kao čestice ne promatraju samo postojeći bridovi, oni koji su u matrici susjedstva σ_{ij} reprezentirani sa 1, nego i potencijalni bridovi, znači oni koji su u matrici susjedstva reprezentirani sa 0. Ako se brid definira na takav, pomalo apstraktan način, kao nezavisni element matrice susjedstva, onda su broj bridova M i skup stanja Λ u kojima se jedan brid može naći u potpunosti određeni vrstom grafa G i njegovim skupom vrhova V. Tada se mikrostanje sustava može definirati kao vektor stanja pojedinih bridova: $\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_M) \in \Lambda^M$. Za uobičajeni jednostavan, neusmjeren graf bez petlji, kakvi će se koristiti u ovom radu, broj bridova $M = \frac{N(N-1)}{2}$, a skup stanja $\Lambda = \{0, 1\}$, dok je za usmjeren, težinski graf sa dozvoljenim petljama broj bridova $M = N^2$, a skup stanja $\Lambda = \mathbb{R}$.

Rješenje da se za bridove koji u standardnom smislu ne postoje smatra da zapravo postoje u stanju 0 isprva djeluje neprirodno, no promotri li se generalizacija običnih grafova na težinske to rješenje odjednom postaje prirodno. U tom slučaju skup stanja jednog brida je kontinuum $\mathbb{R}$ i čini se neprirodno razlikovati brid sa težinom 0 od onoga sa težinom 10^{-10} ili 10^{-100}.

Uzevši sve navedeno u obzir, definicija ekstenzivnosti u bridovi-kao-čestice slici

glasi: veličina X je ekstenzivna ako $X \to 2X$ kada $M \to 2M$, što znači kada $N \to \sqrt{2}N$, a što je značajno drugačije od ekstenzivnosti u vrhovi-kao-čestice slici.

Što se tiče aditivnosti, u ovoj slici logična definicija podsustava je particija skupa bridova (u širem smislu, dakle nezavisnih elemenata matrice susjedstva) na disjunktne podskupove. U tom slučaju će svaka veličina X biti aditivna ako i samo ako je linearna u elementima matrice susjedstva σ_{ij}. Ovakva aditivnost je, kao i ekstenzivnost, značajno različita od one iz vrhovi-kao-čestice slike i u daljnjem tekstu na nju će se odnositi termin *aditivnost po bridovima*.

Na kraju, sa istim razlozima i argumentima kao i u prošlom odjeljku, ispravna termodinamička granica bilo koje ekstenzivne veličine X u bridovi-kao-čestice slici dana je sljedećim izrazom:

$$x = \lim_{N\to\infty} \frac{X}{M} \propto \lim_{N\to\infty} \frac{X}{N^2} < +\infty \,, \tag{3.7}$$

što je, ponovno, značajno različito od definicije u slici vrhovi-kao-čestice.

3.4 Erdős-Rényi model

Prvi i najjednostavniji model slučajnih grafova je onaj u kojem su svi grafovi sa N vrhova i L (ostvarenih) bridova jednako vjerojatni, odnosno u kojem se svaki od M mogućih bridova nalazi u stanju postojanja sa vjerojatnošću p. Taj model prvi su temeljito istražili P. Erdős i A. Rényi u poznatom radu [14] u kojem su dokazali mnoga zanimljiva svojstva tog modela koristeći uglavnom vrlo kompliciranu kombinatoriku. Među ostalim su pokazali i postojanje svojevrsnog faznog prijelaza u veličini najveće povezane komponente, no komentar na taj rezultat dati ću nakon analize modela alatima statističke fizike.

Po definiciji modela logično je na njega prvo primijeniti mikrokanonski ansambl sa brojem bridova L kao čvrstim i jedinim ograničenjem na graf. Time ukupni broj dozvoljenih grafova iznosi

$$\Omega_{N,L} = \binom{M}{L} = \frac{M!}{L!(M-L)!} \,, \tag{3.8}$$

iz čega izravno slijedi entropija dozvoljenih grafova kao logaritam dozvoljenih sta-

nja $S = \ln \Omega_{N,L}$. Za izračun entropije iz izraza (3.8) može se primijeniti poznata Stirlingova aproksimacija faktorijela čime se se dobije izraz

$$S(N,L) = M \ln \frac{M}{(M-L)} - L \ln \frac{L}{(M-L)} - \frac{1}{2} \ln \left(2\pi \frac{L(M-L)}{M} \right) , \tag{3.9}$$

no taj izraz nije pogodan za uzimanje termodinamičke granice. Za to je potrebno odabrati definiciju čestice, odnosno jednu od termodinamičkih slika, te izraziti (3.9) preko prikladne varijable gustoće koja u termodinamičkoj granici mora biti konstanta. U vrhovi-kao-čestice slici ta varijabla gustoće je

$$c = \frac{L}{N} , \tag{3.10}$$

dok je u bridovi-kao-čestice slici ona definirana kao

$$\lambda = \frac{L}{M} . \tag{3.11}$$

Izrazi li se entropija (3.9) preko gustoće c umjesto broja bridova L dobije se, nakon malo preslagivanja, sljedeći izraz:

$$\begin{aligned} S(N,c) = &- N \left[c \ln \left(\frac{\frac{2c}{N-1}}{1 - \frac{2c}{N-1}} \right) + \ln \left(1 - \frac{2c}{N-1} \right)^{\frac{2}{N-1}} \right] - \\ &- \frac{1}{2} \ln \left(4\pi c \left(\frac{N}{2} - c \right) \right) . \end{aligned} \tag{3.12}$$

Iz gornjeg izraza očigledno je da entropija po čestici, tzv. specifična entropija, u vrhovi-kao-čestice slici nije konačna i dobro definirana funkcija u termodinamičkoj granici. Jedini mogući zaključak iz tog rezultata je da vrhovi-kao-čestice slika nije ispravna.

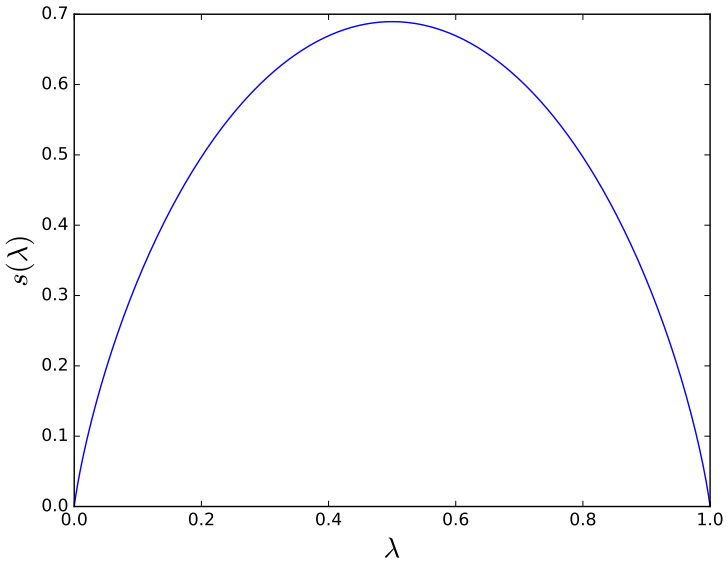
Izrazi li se entropija (3.9) preko gustoće λ iz bridovi-kao-čestice slike rezultat je puno jednostavniji i jasniji te sadrži funkciju koja je vrlo poznata:

$$S(N,\lambda) = -M \left(\lambda \ln(\lambda) + (1-\lambda) \ln(1-\lambda) \right) - \frac{1}{2} \ln \left(2\pi M \lambda (1-\lambda) \right) . \tag{3.13}$$

Dakle, specifična entropija u bridovi-kao-čestice slici dobro je definirana i dobro poz-

nata, konkavna (slika 3.1) funkcija:

$$s(\lambda) = \lim_{N\to\infty} \frac{S(N,\lambda)}{M} = -\left(\lambda \ln(\lambda) + (1-\lambda)\ln(1-\lambda)\right) \ . \tag{3.14}$$



Slika 3.1: Specifična entropija za Erdős-Rényi model u termodinamičkoj granici slike bridovi-kao-čestice

U kanonskom formalizmu ovaj model određen je sljedećim generaliziranim Hamiltonijanom:

$$H(G,\theta) = \theta\, L \ . \tag{3.15}$$

Particijska funkcija može se lako izračunati ako se iskoristi identitet

$$L = \frac{1}{2}\sum_i k_i = \frac{1}{2}\sum_{i,j} \sigma_{ij} = \sum_{i<j} \sigma_{ij} \tag{3.16}$$

i činjenica da se umnoškom mogućnosti da svaki brid postoji ili ne postoji generiraju svi mogući grafovi:

$$Z = \sum_G e^{-\theta L} = \sum_G \prod_{i<j} e^{-\theta\,\sigma_{ij}} = \prod_{i<j} \left(1 + e^{-\theta}\right) = \left(1 + e^{-\theta}\right)^M \ . \tag{3.17}$$

Uvrštavanjem gore izračunate particijske funkcije u poznate formule kanonskog an-

sambla (3.3, 3.4) dobije se da je srednji broj ostvarenih bridova za ovaj model

$$\overline{L} = M\frac{e^{-\theta}}{1+e^{-\theta}} \equiv pM = \lambda M \tag{3.18}$$

te da je kanonska vjerojatnost nekoga grafa G dana sljedećim izrazom:

$$P_{can,\theta}(G) = p^{L(G)}(1-p)^{M-L(G)} = \left(\lambda^{\lambda}(1-\lambda)^{(1-\lambda)}\right)^{M} \ . \tag{3.19}$$

Iz samih gornjih izraza jasno je da je vjerojatnost nekog grafa upravo umnožak vjerojatnosti da se L bridova ostvarilo i $M-L$ bridova nije ostvarilo te da vjerojatnost pojedinog brida da bude ostvaren odgovara upravo varijabli gustoće iz slike bridovi-kao-čestice, koja je očito prirodna varijabla za ovaj model.

Provjera ekvivalentnosti kanonskog i mikrokanonskog ansambla za ovaj model može se provesti na više načina, kako je opisano u odjeljku 2.4. Ekvivalentnost u mjerama može se utvrditi uvrštavanjem izraza za mikrokanonsku i kanonsku vjerojatnost u formulu za specifičnu relativnu entropiju (2.24), pri čemu treba paziti da se N u formuli 2.24 odnosi na broj čestica, odnosno elementarnih dijelova sustava čija stanja definiraju njegovo mikrostanje. Uzevši to u obzir, specifična relativna entropija iz perspektive slike bridovi-kao-čestice je

$$d = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2M} \ln\left(2\pi M\lambda\left(1-\lambda\right)\right) = 0 \tag{3.20}$$

pa slijedi zaključak da su ansambli ekvivalentni. To se, također, moglo i puno lakše utvrditi inspekcijom konkavnosti mikrokanonske entropije na slici 3.1.

Isti zaključak vrijedi i ako se ovaj model promatra iz perspektive slike vrhovi-kao-čestice, no razlog tome je što se mikrokanonska i kanonska vjerojatnost ovog modela razlikuju samo za treći član Stirlingove aproksimacije koji je logaritamski. Time je rezultat ekvivalentnosti iz perspektive ove slike, na neki način i u mojem mišljenju, samo slučajnost, s obzirom da niti mikrokanonska niti kanonska vjerojatnost nisu dobro definirane u limesu beskonačnog sustava.

Što se aditivnosti tiče, ovaj model nije aditivan po vrhovima. To je pokazano na kraju članka [16] i nema potrebe da se ovdje ponovi jer je relativno jednostavno, ali je rezultat i očekivan s obzirom na argumente iznesene u odjeljku 3.3.1 u kojem

je aditivnost po vrhovima definirana. No sama činjenica da je model u vrhovi-kao-čestice slici neaditivan, a da su mu istovremeno ansambli ekvivalentni, dodatan je razlog sumnje u ispravnost ove slike, budući da svaki poznati neaditivni fizikalni model nema ekvivalentne ansamble (vidi odjeljak 2.5).

S druge strane, trivijalno je vidjeti da je ovaj model aditivan po bridovima, što je također očekivano s obzirom na općeniti kriterij linearnosti u elementima matrice susjedstva koji je iznesen u odjeljku 3.3.2 u kojem se nalazi definicija aditivnosti po bridovima.

3.4.1 Fazni prijelaz

Iz gornje analize ovog modela alatima statističke fizike utvrđeno je da je mikrokanonska entropija uvijek i svugdje potpuno konkavna funkcija[10] te da su ansambli ekvivalentni pa iz toga slijedi da model ne bi trebao demonstrirati fazne prijelaze u ovisnosti o gustoći bridova λ.

S druge strane, Erdős i Rényi su pokazali da se u ovisnosti o varijabli c, koja je prirodna gustoća u slici vrhovi-kao-čestice (3.10), javlja skok u očekivanoj veličini najveće povezane komponente grafa. Konkretno, ako je $c < 1$ onda najveća povezana komponenta sadrži $O(\ln N)$ vrhova, ako je $c = 1$ onda najveća povezana komponenta sadrži $O(N^{2/3})$ vrhova, a ako je $c > 1$ onda najveća povezana komponenta sadrži $O(N)$ vrhova, odnosno graf je povezan.

Ovaj fenomen događa se u granici vrlo rijetkih grafova, s obzirom da je tada prosječni stupanj vrhova $\overline{k} = c = 1$ i ostvarenih bridova ima otprilike koliko i vrhova, a može ih biti još N puta toliko. Iz perspektive slike bridovi-kao-čestice cijeli se taj fenomen, stoga, nalazi u području vrijednosti $\lambda \approx 0$, odnosno biva potpuno stisnut u 0 u termodinamičkoj granici:

$$\lambda = c\,\frac{2}{N-1} \xrightarrow{N\to\infty} 0\ . \tag{3.21}$$

To možda objašnjava zašto se taj fenomen ne pojavljuje kao singularitet ili barem neka neobičnost u mikrokanonskoj entropiji izraženoj preko gustoće λ. No ako mikrokanonsku entropiju izrazimo u vrhovi-kao-čestice slici preko gustoće c, čak i ako

[10] Iako se čini da konkavnost za male N-ove kvari treći član iz Stirlingove aproksimacije, u egzaktnom računu bez korištenja aproksimacije vrijedi da je mikrokanonska entropija za svaki N potpuno konkavna.

zanemarimo da specifična entropija nije dobro definirana u granici beskonačnog sustava, entropija je svejedno konkavna i beskonačno diferencijabilna funkcija bez ikakvih singulariteta za $c = 1$ ili bilo koju drugu vrijednost.

Moguće objašnjenje zašto se alatima statističke fizike primijenjenima na ovaj model ne otkriva fenomen koji su Erdős i Rényi pronašli je to da taj fenomen možda uopće nije fazni prijelaz u uobičajenom fizikalnom smislu singulariteta termodinamičke funkcije. To ne bi bilo tako neobično s obzirom na to da mreže nisu standardni fizikalni sustav i da ne postoji fizikalni analogon povezanim komponentama grafa (ili on barem meni nije poznat). Taj prijelaz se i inače analizira iz perspektive perkolacija te je moguće da je za analizu povezanosti sustava potreban potpuno drugačiji model sa potencijalno drugačijom fizikalnom interpretacijom.

3.5 Konfiguracijski model

Iako od velike teorijske vrijednosti i važnosti, Erdős-Rényi model slučajnih grafova nema veliku praktičnu vrijednost jer po svojim svojstvima ne odgovara mrežama u prirodi i društvu. To se najbolje vidi na svojstvu distribucije stupnjeva vrhova jer je utvrđeno da stvarne mreže u pravilu imaju eksponencijalnu distribuciju (*engl. power-law degree distribution*) dok Erdős-Rényi model daje grafove sa Poissonovom distribucijom. Da bi se tom problemu doskočilo osmišljen je konfiguracijski model kao model slučajnih grafova sa uvjetovanim nizom stupnjeva vrhova $\{k_i\}$, odnosno zadan sljedećim generaliziranim Hamiltonijanom:

$$H(G, \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \theta_i k_i(G) = \sum_{i=1}^{N} \theta_i \sum_{j=1}^{N} \sigma_{ij}(G) \ . \tag{3.22}$$

Iako naizgled jednostavan, Hamiltonijan ovog modela vrlo je neobičan i problematičan iz perspektive statističke fizike, odnosno termodinamike, jer broj uvjeta koje sadrži ovisi o veličini sustava, odnosno ima tzv. ekstenzivan broj uvjeta [15]. To za posljedicu ima da u termodinamičkoj granici sustav nije određen sa konačno nego beskonačno mnogo termodinamičkih parametara, što je u suprotnosti sa definicijom termodinamičkog ponašanja danom u [5]. Dodatno, ti uvjeti nisu postavljeni na globalne veličine koje su definirane za svaki podsustav (poput energije) i koje se mogu slobodno izmjenjivati, tako se barem čini, a to je za Jaynesa bio uvjet primjene nje-

gove interpretacije [4].

Posljedica takvog čudnog Hamiltonijana je da se puštanjem sustava u termodinamičku granicu mijenja i sam opis sustava, odnosno da sustavi različite veličine zapravo ne pripadaju istom modelu i stoga sam pojam termodinamičke granice gubi smisao, barem u klasičnom shvaćanju. Neovisno o tome, moguće je da ima smisla uspoređivati sustave iste veličine iz perspektive različitih ansambala, pri čemu bi se to radilo u granici beskonačnog sustava. No da bi se uopće mogao razmatrati bilo kakav limes u beskonačnosti nužno je definirati ekstenzivne veličine. Uobičajeno je Hamiltonijan suma umnožaka ekstenzivnih i intenzivnih veličina pa je zbog toga i sam automatski ekstenzivan, no u ovom modelu broj tih članova raste sa sustavom pa je pitanje treba li učiniti svaki od članova ekstenzivnima ili ukupni Hamiltonijan. Ja sam mišljenja da je drugo ispravan smjer, s obzirom da je energija centralna veličina kanonskog ansambla i da Hamiltonijan određuje cijeli sustav koji bi trebao biti ekstenzivan.

U slici vrhovi-kao-čestice Hamiltonijan (3.22) biti će ekstenzivan ako se udvostruči kada $N \to 2N$, no on će to postati samim udvostručenjem broja članova u sumi, što znači da bi svaki član u sumi trebao biti konstantan. Kako su generalizirane temperature θ_i po definiciji konstante slijedi da bi u slici vrhovi-kao-čestice i stupnjevi vrhova k_i, odnosno njihove srednje vrijednosti, trebali biti promatrani kao konstante i ispravne varijable u termodinamičkoj granici.

S druge strane, u bridovi-kao-čestice slici Hamiltonijan konfiguracijskog modela biti će ekstenzivan ako se udvostruči kada M postane $2M$, odnosno kada $N \to \sqrt{2}N$. Kako to znači da će članova Hamiltonijana biti $\sqrt{2}$ puta više, da bi ukupni Hamiltonijan bio ekstenzivan nužno je da se svaki od članova, dakle stupanj svakog vrha k_i, skalira sa $\sqrt{2}$, odnosno da linearno ovisi o broju vrhova N. U tom slučaju čini se prirodno i logično definirati kao ispravne varijable u granici beskonačnog sustava skup varijabli

$$\lambda_i = \frac{k_i}{N-1} \tag{3.23}$$

kao svojevrsne gustoće stupnjeva vrhova, dakle omjere stvarnih i maksimalnog mogućeg stupnja za graf s N vrhova.

Kao što je već rečeno, primjena mikrokanonskog ansambla najčešće pretpostavlja rješavanje vrlo teških ili efektivno nemogućih kombinatoričkih problema. No srećom,

za problem broja grafova sa točno zadanim nizom stupnjeva vrhova postoji rješenje, doduše samo za grafove za koje vrijedi da je $\max_i\{k_i\} = o(\sqrt{N})$, a što su u osnovi rijetki (*engl. sparse*) grafovi. Broj takvih grafova dan je tzv. Benderovom formulom [16]:

$$\Omega_N(\vec{k}) = \frac{\sqrt{2}\left(\frac{2L}{e}\right)^L}{\prod_{i=1}^{N} k_i!} e^{-\left(\overline{k^2}/2\overline{k}\right)^2 + \frac{1}{4} + o(\overline{k}^3/N)} , \tag{3.24}$$

pri čemu je L ukupan broj ostvarenih bridova i vrijedi $L = (1/2)\sum k_i$. Uzimajući logaritam Benderove formule dobije se, nakon malo sređivanja, sljedeći izraz za mikrokanonsku entropiju konfiguracijskog modela u području rijetkih grafova:

$$\begin{aligned} S_N(\vec{k}) = \frac{N\overline{k}}{2}\left[\ln(N) + \ln(\overline{k}) + 1\right] - N\overline{k\ln(k)} - \frac{N}{2}\overline{ln(2\pi k)} - \\ - \frac{\overline{(k^2-k)}\;\overline{(k^2+k)}}{4\overline{k}^2} + \frac{1}{2}\ln(2) + o\left(\frac{\overline{k}^3}{N}\right) . \end{aligned} \tag{3.25}$$

Gornji izraz za entropiju izražen je u ispravnim varijablama za granicu beskonačnog sustava iz perspektive slike vrhovi-kao-čestice i odmah je vidljivo da specifična entropija u toj slici neće biti dobro definirana funkcija jer gornji izraz sadrži $N\ln(N)$ član koji će logaritamski divergirati za svaki $\overline{k}$ nakon normalizacije po broju čestica N. To znači da vrhovi-kao-čestice slika ni kod konfiguracijskog modela ne posjeduje dobru granicu beskonačnog sustava, odnosno nije ispravna.

Izrazi li se entropija (3.25) preko gustoća stupnjeva λ_i, ispravnih varijabli za bridovi-kao-čestice sliku, dobije se sljedeći izraz:

$$\begin{aligned} S_N(\vec{\lambda}) = M\overline{\lambda}\left[1 + \ln(\overline{\lambda}) - 2\frac{\overline{\lambda\ln(\lambda)}}{\overline{\lambda}} + \ln\left(\frac{N}{N-1}\right)\right] - \frac{M(N-1)}{2N}\left(\frac{\overline{\lambda^2}}{\overline{\lambda}}\right)^2 - \\ - \frac{N}{2}\overline{\ln((N-1)2\pi\lambda)} + o\left(\frac{(N-1)^3}{N}\overline{\lambda}^3\right) + \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\ln(2) , \end{aligned} \tag{3.26}$$

koji u termodinamičkoj granici slike bridovi-kao-čestice daje dobro definiranu funkciju entropije po čestici, odnosno specifičnu entropiju

$$s(\vec{\lambda}) = \overline{\lambda}\left[1 + \ln(\overline{\lambda}) - 2\frac{\overline{\lambda\ln(\lambda)}}{\overline{\lambda}} - \frac{1}{2\overline{\lambda}}\left(\frac{\overline{\lambda^2}}{\overline{\lambda}}\right)^2\right] + o\left(\overline{\lambda}^3\right) , \tag{3.27}$$

s time da treba imati na umu da to vrijedi samo za rijetke grafove, a to znači u

rasponu vrijednosti $\max_i\{\lambda_i\} = o(\sqrt{N}/N) = o(1/\sqrt{N}) \to 0$.

Primjena formalizma kanonskog ansambla na konfiguracijski model vrlo je netrivijalan problem i nije poznato rješenje koje vrijedi za sve moguće nizove stupnjeva $\{k_i\}$. No kao i kod mikrokanonskog ansambla, postoji rješenje u granici rijetkih grafova. S obzirom da su čak i u tom slučaju račun i logika relativno kompliciranu, točan izvod particijske funkcije i kanonske vjerojatnosti nalazi se u dodatku A, a ovdje su prikazani samo konačni rezultati od interesa. Konkretno, logaritam kanonske vjerojatnosti izražen preko stupnjeva vrhova:

$$\ln(P_{can}(\vec{k}^{\star})) = \frac{-N\overline{k}}{2}\left[\ln(N) + \ln(\overline{k}) + 1\right] + N\overline{k\ln(k)}\ , \tag{3.28}$$

te ista veličina izražena preko gustoća stupnjeva vrhova:

$$\ln(P_{can}(\lambda^{\star})) = M\overline{\lambda}\left[1 + \ln(\overline{\lambda}) - \frac{2\overline{\lambda\ln(\lambda)}}{\overline{\lambda}} + \ln\left(\frac{N}{N-1}\right)\right]\ . \tag{3.29}$$

Može se primijetiti da se za obje slike izrazi za entropiju i logaritam kanonske vjerojatnosti slažu u prva četiri člana pa će iznosom specifične relativne entropije dominirati tek onaj peti, pri čemu ponovno treba paziti da se N u formuli (2.24) odnosi na broj čestica, a što ovisi o odabranom pogledu, odnosno termodinamičkoj slici grafova. Konkretno, specifična relativna entropija iz perspektive slike vrhovi-kao-čestice dana je nejednakošću:

$$d(\vec{k}) \geq \frac{1}{2}\overline{\ln(2\pi k)} > 0\ , \tag{3.30}$$

dok iz perspektive slike bridovi-kao-čestice ona iznosi:

$$d(\vec{\lambda}) = \frac{1}{2}\left(\frac{\overline{\lambda^2}}{\overline{\lambda}}\right)^2 - o\left(\overline{\lambda}^3\right) \xrightarrow{\max_i\{\lambda_i\}\to 0} 0\ . \tag{3.31}$$

Zaključak je, dakle, da bi u slici vrhovi-kao-čestice, ako bi zanemarili činjenicu da u toj slici specifična entropija uopće nije dobro definirana funkcija, ansambli konfiguracijskog modela bili neekvivalentni, dok su u slici bridovi-kao-čestice oni ekvivalentni! Nažalost, zbog ovisnosti izraza o svim stupnjevima vrhova, odnosno raznim srednjim vrijednostima, ove zaključke nije moguće provjeriti preko konkavnosti entropije u općenitom slučaju, kao što je to bilo moguće za Erdős-Rényi model, no moguće je za

konkretne nizove stupnjeva vrhova, što će biti napravljeno u sljedećem odjeljku na primjeru regularnih grafova.

Interesantno je još promotriti i prirodu člana koji dominira specifičnom relativnom entropijom. Iz perspektive slike vrhovi-kao-čestice, u izrazu (3.30), on proizlazi iz Stirlingove aproksimacije faktorijela i to iz trećeg člana te aproksimacije, onoga koji se uobičajeno ispušta jer je za velike vrijednosti zanemariv. Meni je vrlo neobično da bi član takvog porijekla trebao imati ikakav, a kamoli ključan utjecaj na tako fundamentalnu stvar jednog modela kao što je ekvivalentnost ansambala. S druge strane, iz perspektive slike bridovi-kao-čestice, specifičnom relativnom entropijom (3.31) dominira član koji dolazi iz eksponencijalnog dijela Benderove formule (3.24) pa bi se moglo reći da nosi određenu stvarnu težinu.

Što se aditivnosti tiče, ovaj model je više nego očito i potpuno očekivano neaditivan po vrhovima. To je u slučaju ovog modela u skladu sa standardnim očekivanjem, s obzirom da su mu iz perspektive slike vrhovi-kao-čestice ansambli neekvivalentni. No ja smatram da je to samo slučajnost, uzme li se u obzir da kod Erdős-Rényi modela to nije bilo tako te da je očekivano da u toj slici svaki model bude neaditivan.

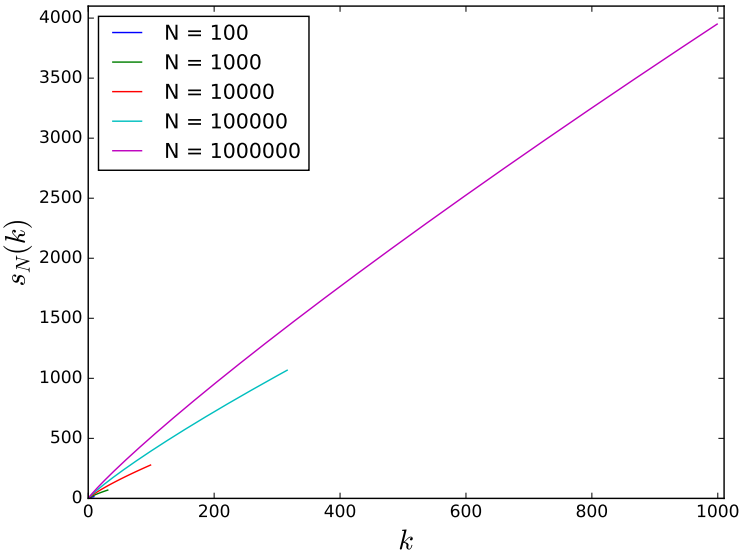
S druge strane, ovaj model je, kao i Erdős-Rényi model, aditivan po bridovima jer je linearan u elementima matrice susjedstva. To znači da su svojstva aditivnosti i ekvivalentnosti ansambala za konfiguracijski model u skladu sa standardnim očekivanjem i u slici bridovi-kao-čestice, iako su potpuno suprotna od onih iz slike vrhovi-kao-čestice.

3.5.1 Poseban primjer: regularni grafovi

Najjednostavniji primjer konkretnog niza stupnjeva koji se može primijeniti na konfiguracijski model je $k_i = k$, $\forall i \in \{1, \ldots, N\}$, što je definicija k-regularnog grafa. Na ovom primjeru moguće je jednostavno istražiti konkavnost entropije i time dobiti nezavisnu provjeru ekvivalentnosti ansambala.

Iako u slici vrhovi-kao-čestice ne postoji dobro definirana specifična entropija, može se umjesto nje provjeriti konkavnost same entropije za različite vrijednosti broja vrhova N, pri čemu je entropija za k-regularan graf dana općim izrazom (3.25) samo bez srednjih vrijednosti. Upravo to je prikazano na slici 3.2 na kojoj je jasno vidljivo da je entropija konkavna funkcija na intervalu $k \in [0, \sqrt{N}\rangle$. Iz toga slijedi da su

ansambli nužno ekvivalentni, ali koristeći kriterij ekvivalentnosti po mjerama (3.30) zaključak je upravo suprotan! Time je pokazano da slika vrhovi-kao-čestice daje kontradiktorne zaključke o ekvivalentnosti ansambala konfiguracijskog modela, što je konačan dokaz da je ta slika neispravna.



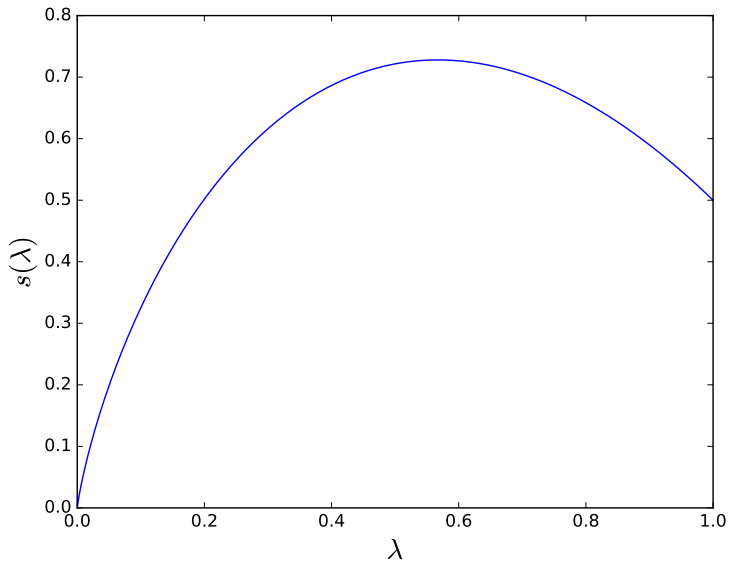
Slika 3.2: Mikrokanonska entropija konfiguracijskog modela za k-regularne grafove u slici vrhovi-kao-čestice; nacrtana za različite (velike) vrijednosti broja vrhova N

U slici bridovi-kao-čestice postoji dobro definirana specifična entropija te se ona za k-regularne grafove pojednostavljuje na

$$s(\lambda) = \lambda \left[1 - \ln(\lambda) - \frac{\lambda}{2} + o\left(\lambda^2\right) \right] \ . \tag{3.32}$$

Gore opisana funkcija prikazana je na slici 3.3 i jasno se vidi da je konkavna na cijelom intervalu definicije $\lambda \in [0, 1]$. Moglo bi se argumentirati da $o\left(\lambda^2\right)$ član možda može pokvariti konkavnost, no on to nikako ne može u okolini $\lambda = 0$ gdje, strogo gledajući, izraz (3.32) jedino egzaktno vrijedi. Time je potvrđen raniji zaključak o ekvivalentnosti ansambala konfiguracijskog modela iz perspektive slike bridovi-kao-čestice, barem za slučaj regularnih grafova.

Konačno, valja primijetiti i intuitivnu opravdanost korištenja gustoća stupnjeva λ_i u traženju termodinamičke granice regularnih grafova. Naime, ako se fiksira stupanj svih vrhova k na npr. 10, onda je jasno da 10-regularan graf sa 10 vrhova, koji je potpun, i 10-regularan graf sa 1000 ili 10^{10} vrhova, koji su praktički prazni, nisu



Slika 3.3: Specifična mikrokanonska entropija konfiguracijskog modela za k-regularne grafove u slici bridovi-kao-čestice

niti slični, a jedna od definicija termodinamičke granice (vidi odjeljak 2.2) je da dodavanje tvari ne mijenja svojstva sustava. S druge strane, ako se fiksira gustoća stupnjeva svih vrhova λ na npr. 0.1, onda se nekako čini da su 10-regularan graf sa 100 vrhova i 100-regularan graf sa 1000 vrhova slične stvari koje bi trebale imati slična svojstva.

3.5.2 Bipartitni grafovi

Bipartitni graf je graf u kojem se skup vrhova V možda podijeliti na dva disjunktna podskupa V_1 i V_2, koji sadrže $|V_1| = N_1$ i $|V_2| = N_2$ vrhova, tako da svaki (ostvareni) brid $e \in E$ povezuje vrh iz V_1 sa vrhom iz V_2. Konfiguracijski model na bipartitnim grafovima može biti definiran na jednom ili oba podskupa vrhova. U ovom radu biti će obrađen slučaj kada su uvjeti postavljeni samo na vrhove iz V_1[11], dakle kada je generalizirani Hamiltonijan dan sljedećim izrazom:

$$H = \sum_{i=1}^{N_1} \theta_i k_{1,i} = \vec{\theta} \cdot \vec{k_1} \ . \tag{3.33}$$

[11]Razlog za to je što je taj slučaj i najjednostavniji i najzanimljiviji za potrebe ovoga rada. U [17] su razrađena oba slučaja i u više detalja.

Razlozi posebnog fokusa ovog rada na konfiguracijski model na bipartitnim grafovima su ti što je za njega moguće dobiti egzaktne izraze za entropiju i kanonsku vjerojatnost za sve $\{k_i\}$, dakle bez potrebe za aproksimacijom rijetkih grafova, te što se čini da bi mogao biti zanimljiv u smislu aditivnosti po vrhovima, za što su ga koristili radovi [16] i [17] čije rezultate ću kasnije komentirati.

Sva logika i argumenti vezani za ekstenzivnost i ispravne varijable gustoće u termodinamičkoj granici slični su ili isti kao i kod konfiguracijskog modela na običnim grafovima uz uvjet da se sustav širi homogeno, odnosno da omjer $c = N_2/N_1$ ostaje približno isti i ima konačan iznos u termodinamičkoj granici. Smatram da je to jedini koristan i smislen način puštanja veličine sustava u beskonačnost, budući da bi u termodinamičkoj granici svaki dio sustava trebao sličiti cjelini[12]. Ako bi se veličina sustava puštala u beskonačnost na takav način onda bi vrijednost neke veličine X po čestici u granici beskonačnog sustava u slici vrhovi-kao-čestice bila jednoznačno definirana na sljedeći način:

$$x = \lim_{\substack{N_1\to\infty \\ N_2\to\infty}} \frac{X}{N_1 + N_2} = \lim_{\substack{N_1\to\infty \\ N_2\to\infty}} \frac{X}{N_1(1+c)} \,, \tag{3.34}$$

a gustoće stupnjeva vrhova iz V_1 mogle bi ostati prirodno definirane kao omjer stupnjeva i maksimalnog mogućeg stupnja:

$$\lambda_{1,i} = \frac{k_{1,i}}{N_2} \,, \tag{3.35}$$

bez da se promjeni ekstenzivnost generaliziranog Hamiltonijana u bridovi-kao-čestice slici. Interesantno je promotriti još i robusnost termodinamičke granice ekstenzivne veličine u slici bridovi-kao-čestice, s obzirom na sve gore navedene komplikacije:

$$x = \lim_{\substack{N_1\to\infty \\ N_2\to\infty}} \frac{X}{N_1 N_2} \,. \tag{3.36}$$

Kao što je već rečeno, razlog interesa za ovaj specifičan slučaj konfiguracijskog modela je taj što se lako mogu dobiti egzaktni rezultati i izrazi. Na primjer, mikroka-

[12]U radu [16] autori su puštali samo N_1 u beskonačnost, što smatram potpuno neopravdanim, a u radu [17] su razrađeni svi mogući odnosi N_1 i N_2 u teoremu 1.6 i pokazano je da nema velikog utjecaja na njihove zaključke osim kada je N_2 beskonačan, a N_1 konačan. Slučaj 4 u teoremu 1.6 odgovara onome što ja smatram jedinim fizikalno smislenim pri uzimanju termodinamičke granice.

nonski ansambl u potpunosti je određen brojem bipartitnih grafova sa danim nizom stupnjeva vrhova iz V_1, a koji je zbog neovisnosti V_1 i V_2 egzaktno dan sljedećom vrlo jednostavnom formulom:

$$\Omega_{N_1,N_2}(\vec{k_1}) = \prod_{i=1}^{N_1} \binom{N_2}{k_{1,i}} \,. \tag{3.37}$$

Primjenom Stirlingove aproksimacije faktorijela logaritam ovog izraza može se, u terminima stupnjeva vrhova, zapisati na sljedeći, relativno nezgrapan način:

$$\begin{aligned} S_{N_1,N_2}(\vec{k_1}) = &- N_1 N_2 \overline{\ln\left(1-\frac{k_1}{N_2}\right)} + N_1 \ln(N_2)\overline{k_1} + N_1 \overline{k_1 \ln\left(1-\frac{k_1}{N_2}\right)} - \\ &- N_1 \overline{k_1 \ln(k_1)} - \frac{N_1}{2} \overline{\ln\left(2\pi k_1 \left(1-\frac{k_1}{N_2}\right)\right)} \,. \end{aligned} \tag{3.38}$$

Kao i kod općenitog konfiguracijskog modela odmah je vidljivo da specifična entropija u terminima stupnjeva vrhova, dakle u slici vrhovi-kao-čestice, nije dobro definirana funkcija. Konkretno, primjenom (3.34) prvi član linearno, a drugi logaritamski divergiraju u N_2.

Entropija, kao i u svim slučajevima do sada, ima puno ljepši i prirodniji zapis u varijablama slike bridovi-kao-čestice, dakle u terminima gustoća stupnjeva kako su definirani u (3.35):

$$\begin{aligned} S_{N_1,N_2}(\vec{\lambda_1}) = &- N_2 \sum_{i=1}^{N_1} \lambda_{1,i} \ln(\lambda_{1,i}) + (1-\lambda_{1,i}) \ln(1-\lambda_{1,i}) - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_1} \ln\left(2\pi N_2 \lambda_{1,i}(1-\lambda_{1,i})\right) \,. \end{aligned} \tag{3.39}$$

Može se prepoznati da je gornji izraz samo suma N_1 funkcija entropije Erdős-Rényi modela (3.13) te da je zbog toga nužno, kao i entropija Erdős-Rényi modela, u potpunosti konkavna funkcija. Specifična entropija je ponovno u ovoj slici dobro definirana funkcija, što trivijalno slijedi primjenom (3.36) na gornji izraz za entropiju.

Račun u kanonskom ansamblu gotovo je identičan onome za Erdős-Rényi model pa ga ovdje neću ponavljati. Rezultat je, stoga, očekivano analogan onome za Erdős-Rényi model, dakle logaritam kanonske vjerojatnosti u osnovi je samo suma izraza

logaritma kanonske vjerojatnosti Erdős-Rényi modela:

$$\ln(P_{can}(\vec{\lambda_1}^{\star})) = -N_2 \sum_{i=1}^{N_1} \lambda_{1,i} \ln(\lambda_{1,i}) + (1-\lambda_{1,i}) \ln(1-\lambda_{1,i}) \ . \tag{3.40}$$

Uvrštavanjem dobivenih izraza u formulu za specifičnu relativnu entropiju (2.24), za obje termodinamičke slike dobivaju se sljedeći rezultati:

$$\begin{aligned} d(\vec{k_1}) &= \lim_{\substack{N_1\to\infty \\ N_2\to\infty}} \frac{1}{N_1(1+c)} \left[\frac{N_1}{2} \overline{\ln\left(2\pi k_{1,i}\left(1-\frac{k_{1,i}}{N_2})\right)\right)}\right] = \\ &= \frac{1}{2(1+c)} \overline{\ln(2\pi k_{1,i})} > 0 \ , \end{aligned} \tag{3.41}$$

$$d(\vec{\lambda_1}) = \lim_{\substack{N_1\to\infty \\ N_2\to\infty}} \frac{1}{N_1 N_2} \left[\frac{N_1}{2} \overline{\ln\left(2\pi N_2 \lambda_{1,i}\left(1-\lambda_{1,i}\right)\right)}\right] = 0 \ . \tag{3.42}$$

Kao što se vidi, po kriteriju ekvivalentnosti po mjerama slika vrhovi-kao-čestice kaže da su ansambli neekvivalentni, a slika bridovi-kao-čestice tvrdi suprotno. No za razliku od općenitog konfiguracijskog modela, za mikrokanonsku entropiju ovog modela možemo tvrditi da je konkavna funkcija, iz perspektive obje slike. To znači da je slika vrhovi-kao-čestice ponovno došla u kontradikciju sama sa sobom što se tiče rezultata o ekvivalentnosti ansambala, dok je slika bridovi-kao-čestice ponovno dala konzistentne rezultate.

Aditivnost po bridovima ovog modela trivijalna je i naslijeđena od općenitog konfiguracijskog modela. No aditivnost po vrhovima je jedan od razloga zašto su bipartitni grafovi bili zanimljivi autorima članaka [16] i [17]. U tim člancima autori tvrde da je konfiguracijski model na bipartitnim grafovima aditivan po vrhovima, no ja smatram da to nije tako jer smatram da nije moguće (osim na trivijalan način) podijeliti skup vrhova V na takav način da ne postoje bridovi koji povezuju vrhove iz različitih podskupova, čime se oni onda ne bi "izgubili" i učinili model neaditivnim.

Tvrdnju o aditivnosti autori članaka [16,17] baziraju na argumentu da su podgrafovi koji se sastoje od jednog vrha iz skupa V_1 i svih vrhova iz skupa V_2 međusobno disjunktni. No ja smatram da to nikako ne može biti točno jer dva takva podgrafa dijele sve osim jednog vrha! Istina je da ti podgrafovi ne dijele niti jedan brid, zbog definicije bipartitnih grafova, no to smatram potpuno nevažnim jer skup vrhova je po defi-

niciji graf, iako prazan. Isto tako ne smatram da je ovaj prigovor samo tehnikalnost jer smatram da fizikalna ideja aditivnosti zahtijeva podjelu sustava na manje sustave, što u ovom slučaju uključuje i podskup vrhova V_2, a ono što autori članaka [16, 17] efektivno rade je kopiranje skupa vrhova V_2 N_1 puta.

4 Rasprava i usporedba s ranijim istraživanjima

Primarna motivacija za istraživanje opisano u ovom radu nalazi se u člancima [16] i [17]. U njima autori tvrde da su ansambli konfiguracijskog modela neekvivalentni te, dodatno, da neekvivalentnost ansambala statističkih modela kompleksnih mreža nije korelirana sa njihovom aditivnošću, suprotno očekivanjima i iskustvu iz fizikalnih sustava. Te tvrdnje autori su bazirali na kriteriju iščezavanja relativne entropije po vrhu u granici beskonačnog sustava (2.24) te na definiciji aditivnosti po vrhovima. Ukratko, radili su u okviru onoga što sam ja u ovom radu nazvao termodinamičkom slikom vrhovi-kao-čestice. Dodatnu potporu svojim tvrdnjama i izračunima našli su u članku [15] gdje je prvi put utvrđeno da se za konfiguracijski model, odnosno za svaki model sa tzv. ekstenzivnim brojem uvjeta, entropije po vrhu mikrokanonskog i kanonskog ansambla razlikuju u termodinamičkoj granici.

Smatram da su autori svih triju članaka [15–17] pogriješili jer su previdjeli činjenicu da entropije po vrhu koje su izračunali uopće *nemaju* tzv. termodinamičku granicu, budući da nisu dobro definirane funkcije u limesu beskonačnog sustava. U člancima [16] i [17] korišten je kriterij ekvivalentnosti ansambala po mjerama iz članka [10], no taj kriterij izveden je koristeći teoriju velikih devijacija koja zahtijeva postojanje specifične entropije u termodinamičkoj granici. To nedvosmisleno onemogućuje korištenje entropije po vrhu za taj kriterij ekvivalentnosti, i uopće u limesu beskonačnog sustava. Dodatnu sumnju u ispravnost zaključaka u člancima [16] i [17] budi i njihov rezultat da je specifična relativna entropija $\neq 0$ na cijelom području definicije, što bi efektivno značilo da su ansambli svugdje neekvivalentni, a to povlači da bi entropija trebala biti svugdje konveksna funkcija?!

Druga tvrdnja sadržana u člancima [16] i [17] je ta da ekvivalentnost ansambala nije korelirana sa aditivnošću sustava. No ako se odbaci slika vrhovi-kao-čestice, jer iz te perspektive ne postoji dobra termodinamička granica, onda se mora odbaciti i definicija aditivnosti po vrhovima kao ona relevantna za donošenje "fizikalnih" zaključaka o modelima grafova.

Odbacujući, dakle, sliku vrhovi-kao-čestice kao neispravnu i uzimajući sliku bridovi-kao-čestice kao ispravnu, svi zaključci radova [16] i [17] padaju u vodu. To je relativno važan rezultat jer se ti zaključci dosta nekritički prenose [18, 19] te uvode, u mojem mišljenju, ponešto konfuzije u područje.

Dobar primjer za to spomenuti je članak [18] koji se bavi slučajnim grafovima sa *power-law* distribucijom stupnjeva u granici rijetkih grafova, ali iz vrlo matematičke perspektive koristeći ranije spomenutu novu teoriju limesa grafova i grafona. U tom članku autori koriste tzv. reskaliranu Gibbsovu entropiju $\mathcal{S}^\star\left[G_N\right]$, koja je ništa drugo nego entropija po bridu kako je definirana u ovom radu u slici bridovi-kao-čestice. Nadalje, autori citiraju rezultate u kojima je pokazano da je ona konačna i jednaka tzv. grafonskoj entropiji $\sigma\left[G_N\right]$ u termodinamičkoj granici konfiguracijskog modela nad gustim grafovima, za kojeg je pokazano da su mu ansambli ekvivalentni. Glavni rezultat njihovog rada je da za rijetke grafove u termodinamičkoj granici također vrijedi da su reskalirana Gibbsova i grafonska entropija jednake te da zajedno $\to 0$ kao $\ln(N)/N$, no iz toga autori ne zaključuju da je upravo to ispravna specifična entropija i normalizacija koja bi trebala biti korištena, a koja odgovara slici bridovi-kao-čestice i iz koje slijedi da su ansambli ekvivalentni, nego citiraju kao poznat i ispravan rezultat neekvivalentnost ansambala iz članaka [15, 16].

Svi radovi koji su do sada komentirani, osim djelomično [18], pripadaju tzv. fizikalnoj zajednici koja se bavi tematikom kompleksnih mreža. No paralelno i poprilično nezavisno, barem je to moj dojam, istom tematikom, ali na sasvim drugačiji način, bavi se jedan dio tzv. matematičke zajednice [20–24]. Oni za analizu modela eksponencijalnih slučajnih grafova koriste teoriju velikih devijacija, a za to je nužno imati dobro definirane limese u beskonačnosti i funkcije intenziteta, koje su u srži samo specifične entropije. Ako se pažljivo pogledaju centralni radovi [20, 21] može se vidjeti da su sve relevantne veličine normalizirane sa N^2 pri uzimanju limesa u beskonačnosti, odnosno da je N iz Varadhanovog (2.14) ili Gartner-Ellisovog (2.15) teorema zamijenjen sa N^2. To je u [21] i eksplicitno opravdano samo nužnošću postojanja limesa u beskonačnosti.

Zanimljivo je, također, primijetiti i izraz za funkciju intenziteta $I(u)$ u radu [21]. Ona je formom točno jednaka specifičnoj entropiji Erdős-Rényi modela u slici bridovi-kao-čestice (3.14)! Jedina razlika između dva izraza je u faktoru $\frac{1}{2}$ funkcije intenziteta, a kojeg tamo ne bi bilo da je normalizacija rađena sa $M = \frac{N(N-1)}{2}$ umjesto sa N^2. Iz toga bi se moglo zaključiti da je normalizacija sa M ne samo konceptualno opravdana nego i matematički prirodnija jer ne generira nepotrebne konstante.

Dodatna potpora slici bridovi-kao-čestice u navedenim matematičkim radovima

može se pronaći u dvije činjenice. Prva je ta da su varijable koje se koriste upravo varijable gustoće prirodne za sliku bridovi-kao-čestice. To se najbolje vidi u [21] na primjeru općenitog modela sa uvjetima na gustoće podgrafova. A druga, i puno važnija, je ta da rezultati otkrivaju postojanje faznih prijelaza prve vrste [21–23] kod modela nelinearnih u elementima matrice susjedstva. To dokazuje neekvivalentnost ansambala u području faznog prijelaza kod modela koji su neaditivni po bridovima, a što bi bila očekivana posljedica neaditivnosti kod fizikalnih modela. To se može smatrati dokazom da je aditivnost po bridovima upravo ona relevantna te dodatnom potvrdom konzistentnosti termodinamičke slike bridovi-kao-čestice.

5 Zaključak

U ovom radu prezentirao sam dva konceptualna pogleda na grafove u smislu toga što je elementarni građevni dio grafa, odnosno što je kod grafova analogon čestice - vrh ili brid, te pokazao da taj odabir u potpunosti određuje definicije ekstenzivnosti i aditivnosti te pravilnog uzimanja termodinamičke granice.

Iz svega prezentiranog kroz primjenu na Erdős-Rényi i konfiguracijskom modelu, te dodatne indikacije kroz druge, nelinearne modele [21–23], može se bez dvojbe zaključiti da slika vrhovi-kao-čestice nije prikladna te da nije ispravno promatrati vrhove kao elementarne dijelove grafa, već da za konceptualni temelj grafova kao fizikalnih sustava treba koristiti sliku bridovi-kao-čestice. Moglo bi se reći da iz topološkog pogleda to ima smisla jer vrhovi mogu postojati i bez bridova, a ono što daje sadržaj i svojstva grafu su upravo bridovi. Na neki način kao da su vrhovi samo gola struktura, kao prazan prostor kod fizikalnih sustava, a bridovi čestice koji taj prostor popunjavaju.

Na osnovu gornjeg zaključka o ispravnom fizikalnom pogledu na grafove, pokazao sam u ovom radu i da su neka svojstva Erdős-Rényi i konfiguracijskog modela drugačija nego se prije smatralo. Konkretno, za oba modela pokazao sam da bi se trebali promatrati kao aditivni sustavi i, puno važnije, za konfiguracijski model sam pokazao da su mu mikrokanonski i kanonski ansambli ekvivalentni u području rijetkih grafova. Ti rezultati važni su iz dva razloga: prvi je taj što je opovrgnuto ranije mišljenje da aditivnost kod grafova ne utječe na ekvivalentnost ansambala, a drugi je taj što je utvrđivanjem ekvivalentnosti ansambala konfiguracijskog modela otvoren put slobodnoj upotrebi kanonskog ansambla u svim okolnostima kada je graf dovoljno velik.

No ono što smatram možda najvećim doprinosom ovoga istraživanja spoznaja je da dio matematičke zajednice već koristi nešto približno onome što ja nazivam slikom bridovi-kao-čestice, no bez konceptualnog uporišta. Time sadržaj ovoga rada pruža konceptualno, fizikalno uporište radovima poput [20–24] te na neki način možda pruža plodno tlo za pronalaženje boljeg zajedničkog jezika i kvalitetniju suradnju matematičara i fizičara koji se bave ovim područjem iz različitih perspektiva i interesa.

Dodaci

Dodatak A Izvod kanonskog ansambla konfiguracijskog modela

Particijska funkcija konfiguracijskog modela dana je sljedećim izrazom:

$$Z = \sum_{\mathcal{G}} e^{-\sum_i \theta_i k_i} = \sum_{\mathcal{G}} \prod_i e^{-\theta_i \sum_j \sigma_{ij}} = \sum_{\mathcal{G}} \prod_{i<j} e^{-(\theta_i+\theta_j)\sigma_{ij}} = \prod_{i<j} \left(1 + e^{-(\theta_i+\theta_j)}\right) \ , \quad \text{(A.1)}$$

gdje je $\mathcal{G}$ skup svih mogućih grafova G sa N vrhova. Zadnja jednakost u gornjoj jednadžbi slijedi iz činjenice da se zbroj po svim grafovima može prikazati kao umnožak zbrojeva slučaja da je pojedini brid σ_{ij} ostvaren ili nije ostvaren. Kanonska vjerojatnost grafa G dana je tada izrazom

$$P_{can}(G) = \frac{\prod_{i<j} e^{-(\theta_i+\theta_j)\sigma_{ij}}}{\prod_{i<j} \left(1 + e^{-(\theta_i+\theta_j)}\right)} = \prod_{i<j} p_{ij}^{\sigma_{ij}} (1 - p_{ij})^{(1-\sigma_{ij})} \ , \quad \text{(A.2)}$$

koji se lako može interpretirati kao umnožak vjerojatnosti svakog brida da bude ostvaren (p_{ij}) ako je ostvaren ($\sigma_{ij} = 1$), odnosno da ne bude ostvaren ($1 - p_{ij}$) ako nije ostvaren ($\sigma_{ij} = 0$), pri čemu je ta vjerojatnost definirana kao

$$p_{ij} \equiv \frac{e^{-(\theta_i+\theta_j)}}{1 + e^{-(\theta_i+\theta_j)}} = \frac{x_i x_j}{1 + x_i x_j} \ . \quad \text{(A.3)}$$

Iz particijske funkcije lako se dobije i relacija između temperatura i stupnjeva vrhova:

$$k_i = -\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \theta_i} = \sum_{j=1}^{N} p_{ij} = x_i \sum_{j=1}^{N} \frac{x_j}{1 + x_i x_j} \ , \quad \text{(A.4)}$$

no ta relacija nije invertibilna, tj. ne mogu se odrediti x_i-jevi iz k_i-jeva. Taj problem može se riješiti uvođenjem aproksimacije rijetkih (*engl. sparse*) grafova u obliku $p_{ij} << 1$. U tom slučaju jasno je iz definicije vjerojatnosti p_{ij} (A.3) da vrijedi $x_i x_j << 1$ pa se vjerojatnost može aproksimirati izrazom

$$p_{ij} \approx x_i x_j \ . \quad \text{(A.5)}$$

Korištenjem te aproksimacije u izrazu (A.4) dobije se relacija $k_i = x_i \sum_j x_j$ koja se zatim može iskoristiti u poznatoj formuli za ukupni broj bridova u grafu: $2L = \sum_i k_i = \sum_{ij} x_i x_j$, a što konačno vodi na koristan izraz vjerojatnosti p_{ij} preko stupnjeva vrhova:

$$p_{ij} \approx \frac{k_i k_j}{2L} \ . \tag{A.6}$$

Podatak koji je potreban za izračun relativne entropije logaritam je kanonske vjerojatnosti, ali ne za bilo koji graf nego samo za one grafove koji pripadaju mikrokanonskom ansamblu. Za takve grafove $G^\star$ vrijedit će da su njihovi parametri $\vec{k}(G^\star) = \vec{k}^\star$ jednaki srednjoj vrijednosti tih parametara po cijelom kanonskom ansamblu $\langle \vec{k}(G) \rangle$. Ta okolnost može se iskoristiti na sljedeći način:

$$\begin{aligned} \ln(P_{can}(\vec{k}^\star)) &= -H(G^\star) - \ln(Z) = -\vec{\theta} \cdot \vec{k}(G^\star) - \ln(Z) = -\vec{\theta} \cdot \langle \vec{k}(G) \rangle - \ln(Z) = \\ &= \sum_{\mathcal{G}} P_{can}(G) \left[-H(G) - \ln(Z) \right] = \sum_{\mathcal{G}} P_{can}(G) \ln(P_{can}(G)) = \\ &= \sum_{i<j} p_{ij} \ln(p_{ij}) + (1 - p_{ij}) \ln(1 - p_{ij}) \ . \end{aligned} \tag{A.7}$$

Kako p_{ij} nije općenito poznat, u gornjem izrazu može se sada iskoristiti ranije korištena aproksimacija rijetkih grafova $p_{ij} << 1$ na način da se drugi logaritam razvije oko jedinice i zadrže samo članovi linearni u maloj veličini p_{ij}, te da se iskoristi izraz (A.6). Kada se sve to primjeni dobije se sljedeći izraz za logaritam kanonske vjerojatnosti grafova koji čvrsto zadovoljavaju uvjete:

$$\begin{aligned} \ln(P_{can}(\vec{k}^\star)) &= \sum_{i=1}^{N} k_i \ln(k_i) - L(\ln(2L) + 1) = N \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} k_i \left[\ln(k_i) - \frac{1}{2} \ln(\overline{k} N) - \frac{1}{2} \right] = \\ &= \frac{-N\overline{k}}{2} \left[\ln(N) + \ln(\overline{k}) + 1 \right] + N \overline{k \ln(k)} \ . \end{aligned} \tag{A.8}$$

Gornja formula izražena preko gustoća stupnjeva $\lambda_i = \frac{k_i}{N-1}$ dana je sljedećim izrazom:

$$\ln(P_{can}(\lambda^\star)) = -M\overline{\lambda} \left[1 + \ln(\overline{\lambda}) - \frac{2\overline{\lambda \ln(\lambda)}}{\overline{\lambda}} + \ln\left(\frac{N}{N-1} \right) \right] \ . \tag{A.9}$$

Literatura

[1] Newman, M. E. J. The structure and function of complex networks. // SIAM Review. Vol. 45, 2(2003), str. 167-256.

[2] Newman, M. E. J. Networks: An Introduction. 1st ed. New York : Oxford University Press, 2010.

[3] Park, J.; Newman, M. E. J. Statistical mechanics of networks. // Physical Review E. Vol. 70, 6(2004).

[4] Jaynes, E. T. Information Theory and Statistical Mechanics. // Physical Review. Vol. 106, 4(1957), str. 620-630.

[5] Ruelle, D. Statistical Mechanics: Rigorous Results. 1st ed. (2nd printing) Reading : W. A. Benjamin, 1974.

[6] Sunko, D. Statistička fizika i termodinamika (27.10.2016.), `http://www.phy.pmf.unizg.hr/dodip/notes/statisticka/statisticka.pdf`, 16.8.2017.

[7] Touchette, H. The large deviation approach to statistical mechanics. // Physics Reports. Vol. 478, 1(2009), str. 1-69.

[8] Ellis, R. S. Entropy, Large Deviations and Statistical Mechanics. Reprint of the 1985 edition, Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2006.

[9] Schmit, M. Negative Heat Capacity for a Cluster of 147 Sodium Atoms. // Physical Review Letters. Vol. 86, 7(2001), str. 1191-1194.

[10] Touchette, H. Equivalence and Nonequivalence of Ensembles: Thermodynamic, Macrostate and Measure Levels. // Journal of Statistical Physics. Vol. 159, 5(2015), str. 987-1016.

[11] Campa, A.; Dauxois, T.; Ruffo, S. Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. // Physics Reports. Vol. 480, 3(2009), str. 57-159.

[12] Einarsson, B. Negative specific heat in self-gravitating systems. Magistarski rad. Stockholm : Stockholm University, Department of Physics, 2004.

[13] Roberts, E. S.; Coolen, A. C. C. Unbiased degree-preserving randomization of directed binary networks. // Physical Review E. Vol. 85, 4(2012).

[14] Erdős, P.; Rényi, A. On the evolution of random graphs. // Publications of the Mathematical Institute of the Hungarian Academy of Sciences. Vol. 5(1960), str. 17–61.

[15] Anand, K.; Bianconi, G. Entropy measures for networks: Toward an information theory of complex topologies. // Physical Review E. Vol. 80, 4(2009).

[16] Squartini, T.; de Mol, J.; den Hollander, F.; Garlaschelli, D. Breaking of ensemble equivalence in networks. // Physical Review Letters. Vol. 115, 26(2015).

[17] Garlaschelli, D.; den Hollander, F.; Roccaverde, A. Ensemble nonequivalence in random graphs with modular structure. // Journal of Physics A. Vol. 50, 1(2016).

[18] van der Hoorn, P.; Lippner, G.; Krioukov, D. Sparse Maximum-Entropy Random Graphs with a Given Power-Law Degree Distribution (29.5.2017.), `http://arxiv.org/abs/1705.10261`, 16.8.2017.

[19] Zuev, K.; Papadopoulos, F.; Krioukov, D. Hamiltonian dynamics of preferential attachment. // Journal of Physics A. Vol. 49, 10(2016).

[20] Chatterjee, S.; Varadhan, S. R. S. The large deviation principle for the Erdős-Rényi random graph. // European Journal of Combinatorics. Vol. 32, 7(2011), str. 1000-1017.

[21] Chatterjee, S.; Diaconis, P. Estimating and understanding exponential random graph models. // The Annals of Statistics. Vol. 41, 5(2013), str. 2428-2461.

[22] Radin, C.; Yin, M. Phase transitions in exponential random graphs. // The Annals of Applied Probability. Vol. 23, 6(2013), str. 2458-2471.

[23] Radin, C.; Sadun L. Phase transitions in a complex network. // Journal of Physics A. Vol. 46, 30(2013).

[24] Chatterjee, S.; Diaconis, P.; Sly, A. Random graphs with a given degree sequence. // The Annals of Applied Probability. Vol. 21, 4(2011), str. 1400-1435.