Hálózatok statisztikus termodinamikája

Palla Gergely

Farkas Illés, Derényi Imre, Vicsek Tamás

Bevezetés

Az élet szinte minden területén találkozhatunk hálózatokkal:

- Internet, WWW,
- Közlekedési hálózatok,
- Metabolikus hálózatok,
- Tudományos hivatkozások,
- Együttműködési hálózatok,
- ...

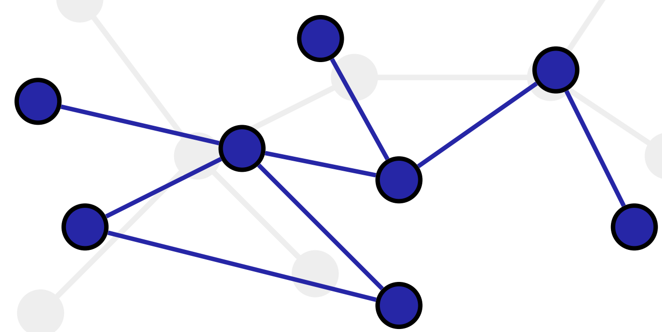
Kapcsolódó tudomány területek:

- matematika,
- biológia,
- szociológia,
- fizika,
- ...

Mi az, hogy hálózat?

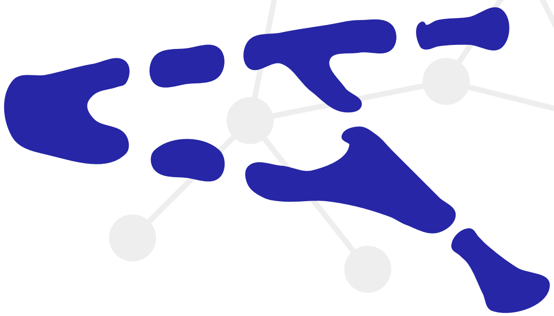
- Sok egyszerű, identikus vagy nagyon hasonló alkotó eleme van.
- Ezek egy gráf struktúrában kapcsolódnak össze.

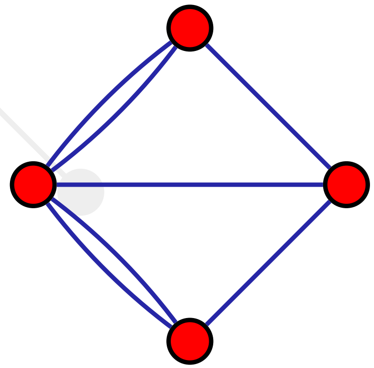
- A teljes rendszer viselkedése sokkal bonyolultabb mint az egyes alkotó elemeké. A teljes objektum tulajdonságaira az alapelemek kapcsolatait (kölcsönhatását) leíró gráf is nagy hatással van.



Történeti áttekintés

- Euler és a königsbergi hidak problémája (1736):





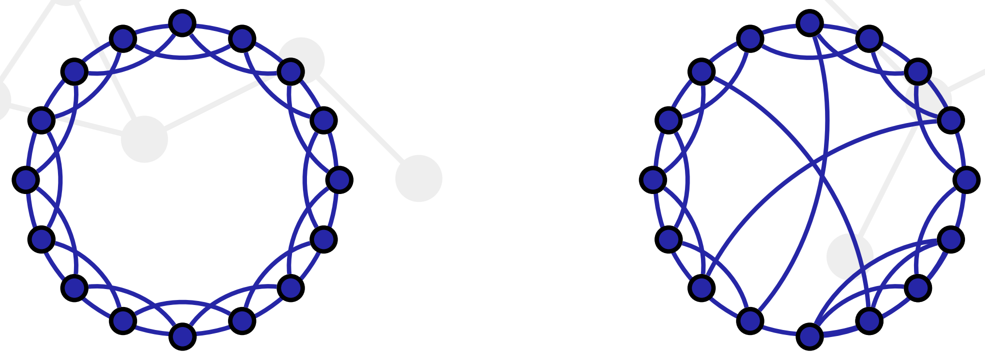
- Erdős Pál és Rényi Alfréd (1959): véletlen gráfok.

  - N db vertex

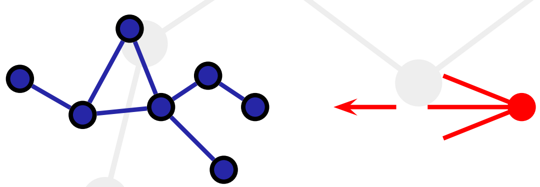
  - minden vertex párt egymástól függetlenül p valószínűséggel összekötünk.

Történeti áttekintés

- Watts és Strogatz „Kis világ” modellje (1998):
  szabályos rácsból indulva minden élet p valószínűséggel átkötünk.



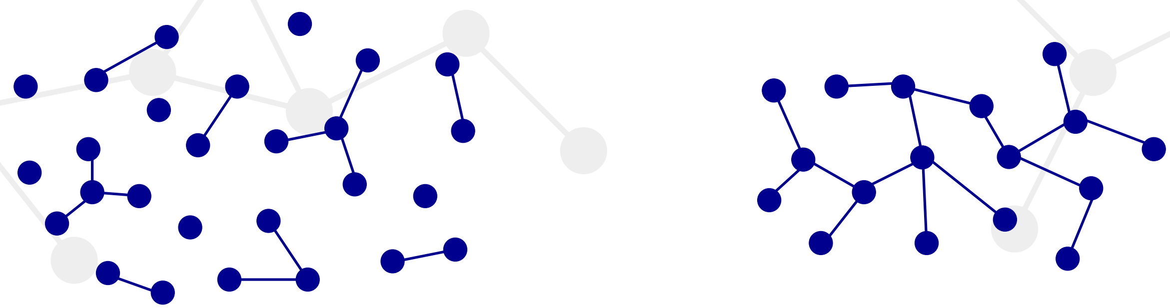
- Barabási Albert-László és Albert Réka (1999):
  növekvő hálózatok, **preferált kapcsolódási szabály**.



skálafüggetlen:
$p_k \sim k^{-\gamma}$

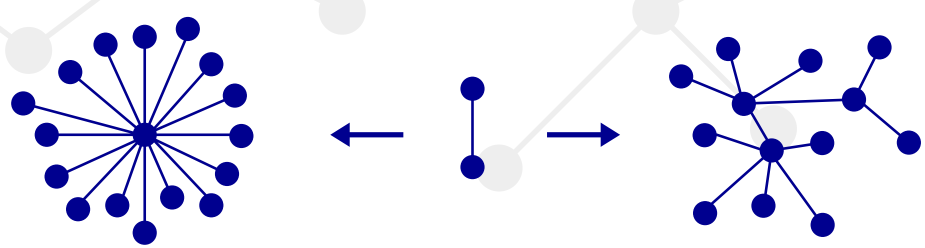
Analógiák fizikai rendszerekkel

- Óriás komponens és perkolációs fázisátalakulás
  Klasszikus véletlen gráf modell az $N \to \infty$ határesetben:



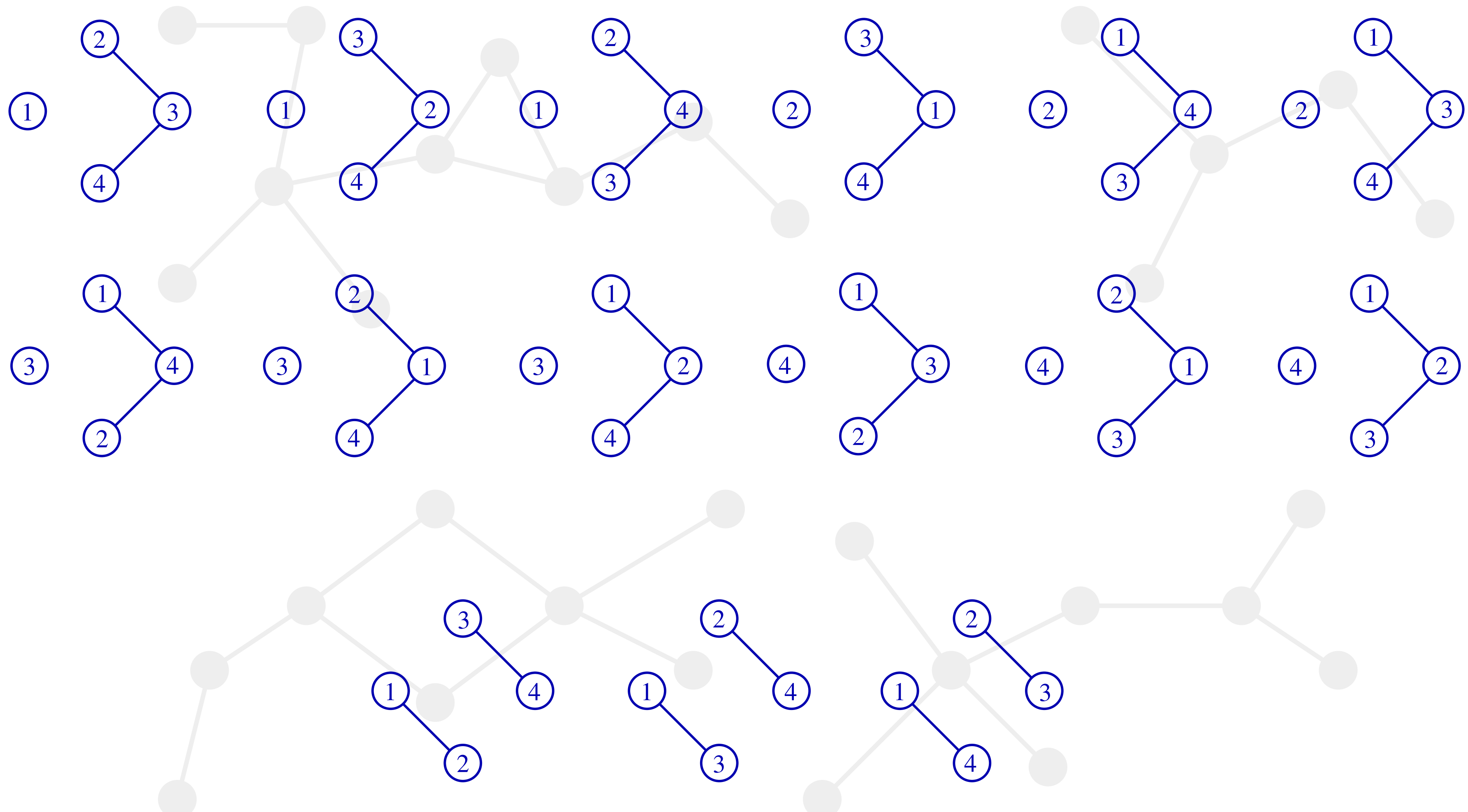
$\langle k \rangle < 1$ $\qquad$ $\langle k \rangle \geqslant 1$

- Bose-Einstein-kondenzáció
  A Barabási-Albert-féle gráfnövekedési modell egyik verziója:



Irányítatlan egyszerű gráfok

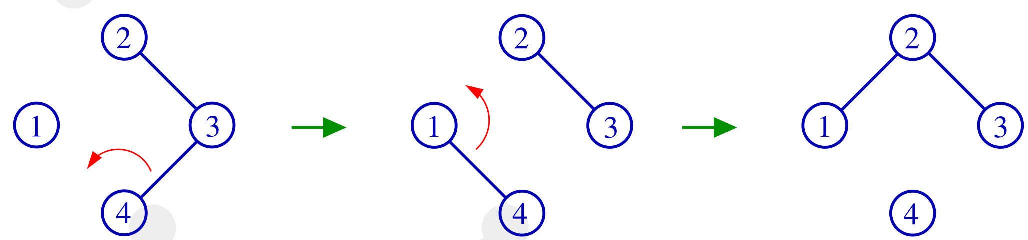
Vertexcímkézett, irányítatlan egyszerű gráfokban gondolkodunk:



Átrendeződési folyamatok

A hálózatok szerkezetét növekedési és átrendeződési folyamatok formálják.

Mi az átrendeződésekre fogunk koncentrálni:



Az **éleket** tekinthetjük egy stat. fiz. rendszer **részecskéinek**, a csúcsok száma, N, pedig a térfogatnak feleltethető meg. (Feltesszük, hogy N állandó).

Gráf sokaságok

Lect. Notes Phys. **650**, 163–187 (2004)

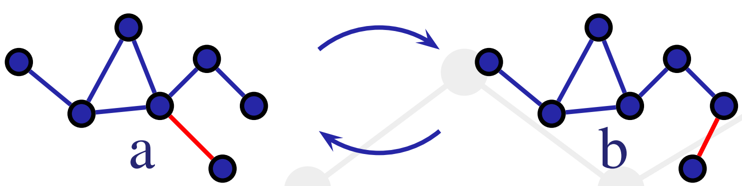
Egyensúlyi gráf sokaság: olyan stac. gráf sokaság, melyben az átrendeződési folyamatok kielégítik a részletes egyensúly és az ergodicitás követelményeit.

Időfejlődés:

$$\frac{\partial P_a}{\partial t} = \sum_b (P_b r_{b\to a} - P_a r_{a\to b}).$$

Részletes egyensúly:

$$P_a^{\mathrm{stat}} r_{a\to b} = P_b^{\mathrm{stat}} r_{b\to a}.$$



Fordítva: ha adott egy eloszlás, akkor az $r_{a\to b} = \nu_{ab} P_b$ és $r_{b\to a} = \nu_{ab} P_a$ dinamika ehhez az eloszláshoz konvergál (feltéve, hogy ergodikus).

Gráf sokaságok

Ha adott egy **energiafüggvény**, akkor a sokaságok a megszokott módon definiálhatók:

- **Mikrokanonikus sokaság**: E,M állandó

$$P^{\mathrm{MC}} = n^{-1} \qquad (n = \sharp\ E \text{ energiájú gráfok})$$

- **Kanonikus sokaság**: M állandó

$$P_a^{\mathrm{C}} = \frac{\mathrm{e}^{-E_a/T}}{Z^{\mathrm{C}}}, \qquad Z^{\mathrm{C}} = \sum_b \mathrm{e}^{-E_b/T}.$$

- **Nagykanonikus sokaság**:

$$P_a^{\mathrm{GC}} = \frac{\mathrm{e}^{-(E_a-\mu M_a)/T}}{Z^{\mathrm{GC}}} \qquad Z^{\mathrm{GC}} = \sum_b \mathrm{e}^{-(E_b-\mu M_b)/T}$$

Gráf sokaságok

Sokaságokat lehet előzetes energiafüggvény nélkül is konstruálni.

- **Mikrokanonikus sokaság**:
  Minden megengedett gráfnak egyforma a valószínűsége.

- **Kanonikus sokaság**:
  M élszámú gráfokhoz $\{P_a\}$ valószínűségek.
  Megfeleltethető : $E_a = -T \log P_a + \log Z$.

- **Nagykanonikus sokaság**:
  Változó élszámú gráfokhoz $\{P_a\}$ valószínűségek.
  Megfeleltethető: $E_a = -T \log P_a + \mu M_a + \log Z$.

Honnan származtassuk az energiát?

- Próbálkozhatunk sokféle energiafüggvénnyel, a gráf struktúrájára gyakorolt hatásaikat figyelve. (Érdekeseket megtartjuk, unalmasakat eldobjuk).
- Optimalizálás $\longrightarrow$ költségfüggvény tekinthető energiafüggvénynek.
- Valós hálózatok átrendeződési folyamataiból megpróbálhatjuk visszakövetkeztetni.

Energiák

- Fokszám által generált energiák:

$$E = \sum_{i=1}^{N} f(k_i), \qquad \text{például:} \qquad E = -\sum_{i=1}^{N} k_i^2.$$

Ilyen esetekben $f(k)$ lineáris része irreleváns.

- Globális tulajdonságoktól függő energiák:

- függhet az összefüggő komponensek méretétől, pl.: $E = -s_{\max}$.

- függhet a gráf átmérőjétől, pl.: $E = -\sum_{i,j} d_{i,j}$

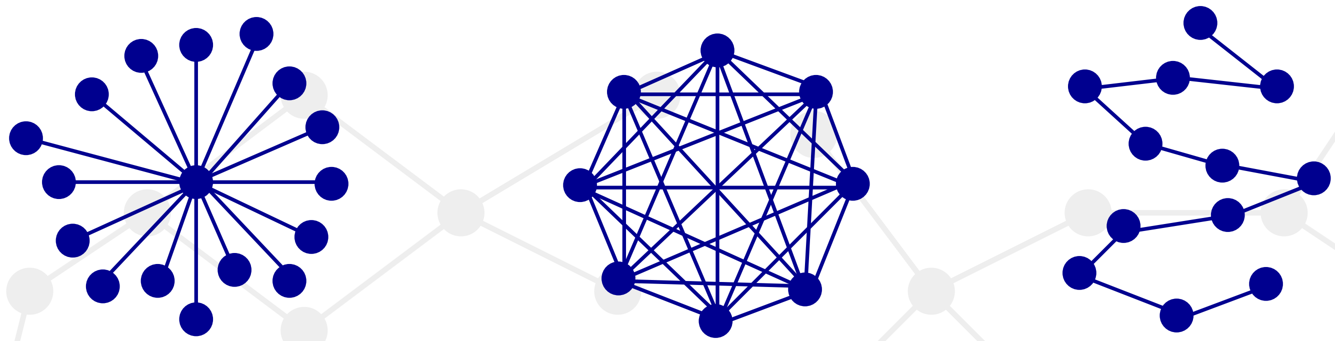
- stb.

Topologikus fázisátalakulások

Physica A **334**, 583-590 (2004),
Phys. Rev. E **69**, 046117 (2004)

$T = \infty$ esetén teljesen véletlenszerű átkötözések
$\rightarrow$ **klasszikus véletlen gráf**.

Hűtjük a rendszert...



Rendparaméter

A klasszikus véletlen gráf : $\langle k \rangle = 1$ -nél perkolációs fázisátalakulás, ha $\langle k \rangle$ változik.

$$\downarrow$$

Ha $\langle k \rangle < 1$, de az energia kedvez a nagy összefüggő komponenseknek, akkor T **változtatásával** is lehet hasonló fázisátalakulást előidézni. Ilyen esetekben a megfelelő rendparaméter:

$$\Phi_s = s_{\max}/M. \qquad (M \text{ az élek száma})$$

Ha az energia a nagy fokszámoknak kedvez, akkor $T \to 0$ esetén makroszkopikus fokszámú csúcsok jelennek meg. Ilyenkor a rendparaméter :

$$\Phi_k = k_{\max}/M.$$

Vizsgálati módszerek

- Monte-Carlo szimulációk

- Egzakt leszámlálás:
  Kis méretű rendszerekre az összes lehetséges gráf legyártása által a keresett termodinamikai függvény egzakt értékének meghatározása.

- A feltételes szabadenergia elméleti vizsgálata :
  Adott rendparaméter értékkel rendelkező gráfok számának kombinatorikai módszerekkel történő becslésén alapszik.

$$e^{-F(\Phi,T)/T} = Z(\Phi,T) = \sum_{\{g_a\}_\Phi} e^{-E_a/T}.$$

Komponens mérettől függő energiák

- $E = f(s_{\max}) = f(\Phi_s M)$:

  Ha $\langle k \rangle >= 1$, akkor $T = \infty$ mellett is van óriás komponens. Mi a helyzet $\langle k \rangle < 1$ esetén?

$$F(\Phi_s, T) = E - T \ln N_{\mathrm{clus}}(\Phi_s).$$

Mennyi a Φ_s-hez tartozó gráfok száma, N_{clus}?

- A hurkok száma $\sim N^{-1}$, ezért a legnagyobb komponenst tekinthetjük fának.
- Adott s méretű fa konfigurációk száma $= s^s$.
- A vertex címkéket is ki kell osztani.

$$N_{\mathrm{clus}} \approx (\Phi_s M)^{\Phi_s M} \binom{N}{\Phi_s M} \binom{(N - \Phi_s M)^2/2}{M - \Phi_s M}$$

Komponens mérettől függő energiák

A Stirling-formulát alkalmazva vezető rendig erre jutunk:

$$\ln N_{\text{clus}} \approx \text{const.} + \left[1 + \ln\frac{2M}{N} - \frac{2M}{N}\right]\Phi_s M + \left[\frac{3M}{2N} - \frac{1}{2} - \frac{M^2}{N^2}\right]\Phi_s^2 M.$$

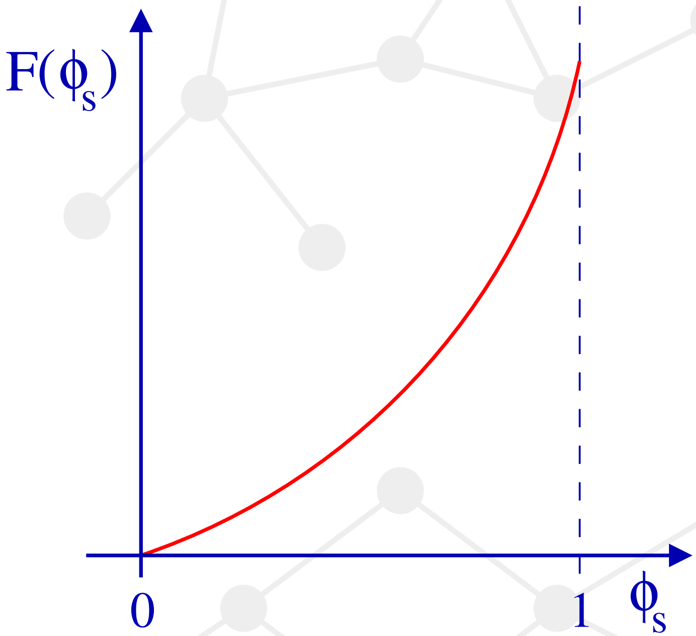
Kihasználva, hogy $2M/N = \langle k \rangle$:

$$\begin{aligned} F(\Phi_s, T) \quad &\approx \quad f(\Phi_s M) + MT\Bigg\{\left[\langle k\rangle - 1 - \ln(\langle k\rangle)\right]\Phi_s \\ &+ \left[\langle k\rangle^2 - 3\langle k\rangle + 2\right]\frac{\Phi_s^2}{4}\Bigg\}. \end{aligned}$$

Legegyszerűbb választás: $f(s_{\max}) = -s_{\max} = -\Phi_s M$.

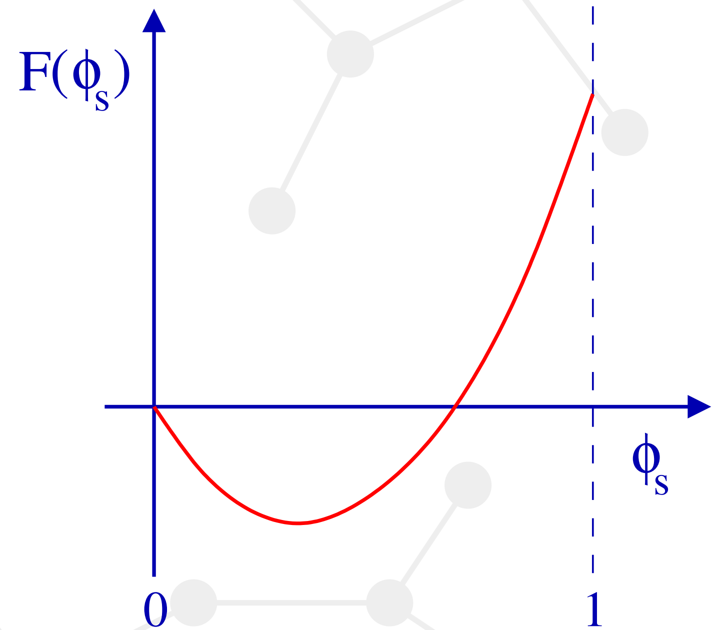
Az $E = -s_{\max}$ energia

$T > \frac{1}{\langle k\rangle - 1 - \ln(\langle k\rangle)}$:



F minimuma $\Phi_s = 0$ -nál.

$T < \frac{1}{\langle k\rangle - 1 - \ln(\langle k\rangle)}$:



F minimuma $\Phi_s > 0$ -nál:

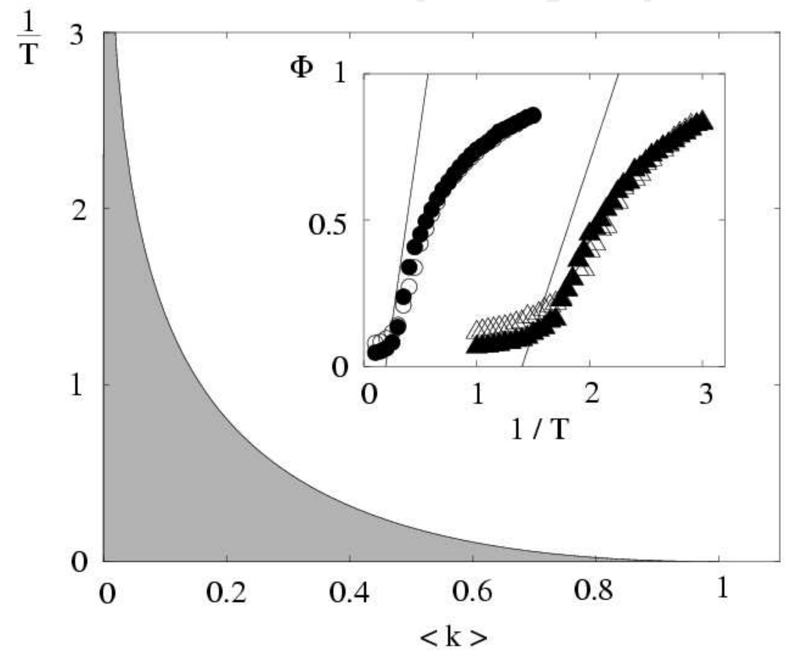
Óriás komponens!

Fázisátalakulás

- $E = -s_{\text{max}}$:
  $\langle k \rangle < 1$ esetén folytonos fázisátalakulás, az ER véletlen gráf perkolációs átalakulásával analóg módon.

$$T_{\text{c}}(\langle k \rangle) = \frac{1}{\langle k \rangle - 1 - \ln(\langle k \rangle)},$$

$$\Phi_s^*(T) = 2\frac{T^{-1} - T_{\text{c}}^{-1}(\langle k \rangle)}{\langle k \rangle^2 - 3\langle k \rangle + 2}.$$

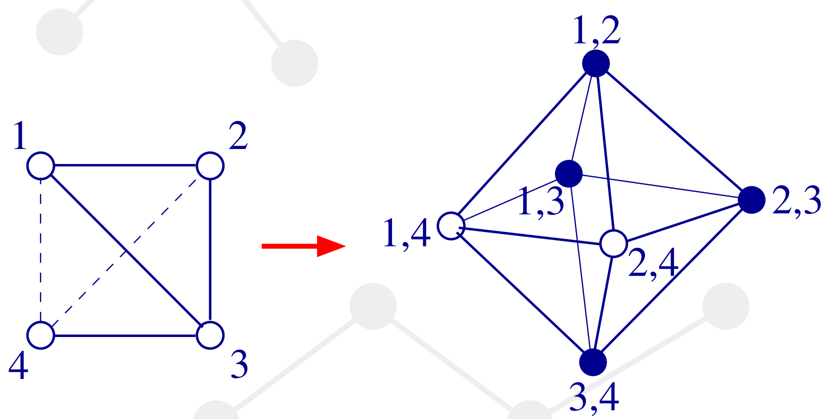


- $E = -s_{\text{max}}^2$, $E = -\sum_{i=1}^{N_c} s_i^2$:
  elsőrendű fázisátalakulás, hiszterézis.

Fokszámtól függő energiák

- $E = -\sum_{i=1}^{N} k_i^2$:

  Ekvivalens a teljesen összekötött gráf él-duális gráfján definiált rácsgáz-modellel, első szomszéd kölcsönhatással.



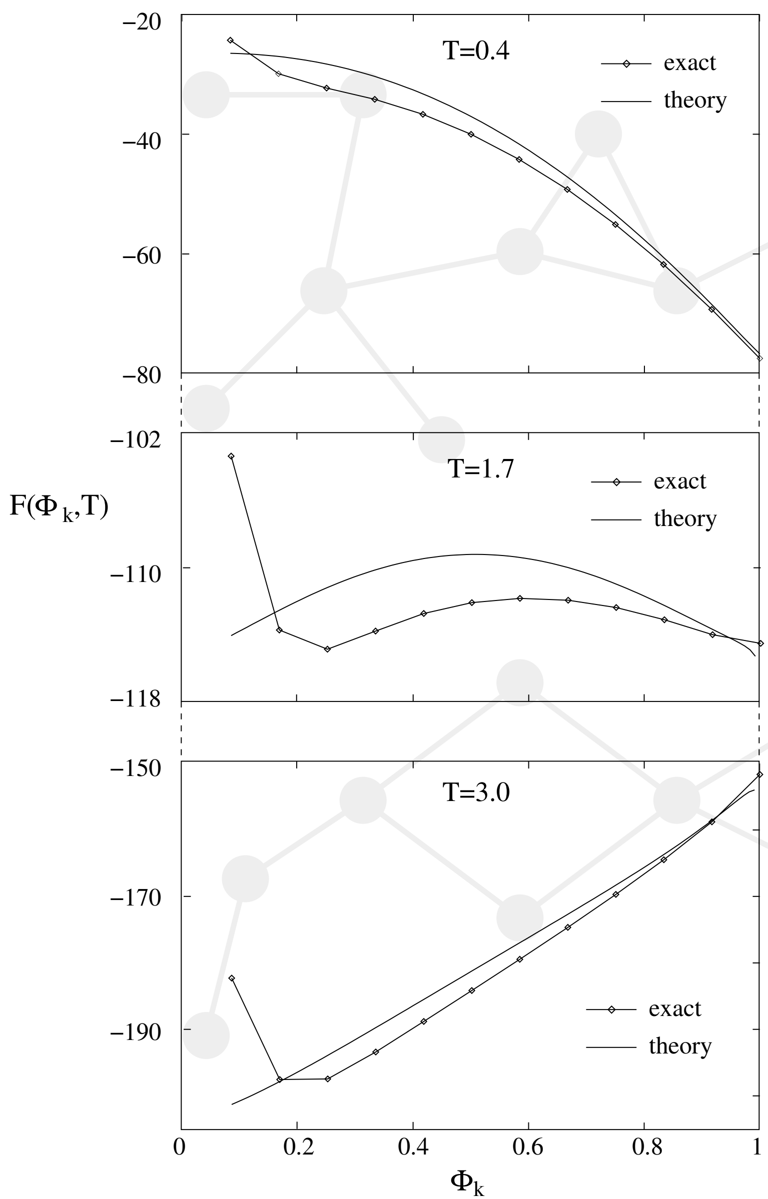
$$E = -\frac{J}{2}\sum_{i=1}^{N} k_i(k_i-1)$$

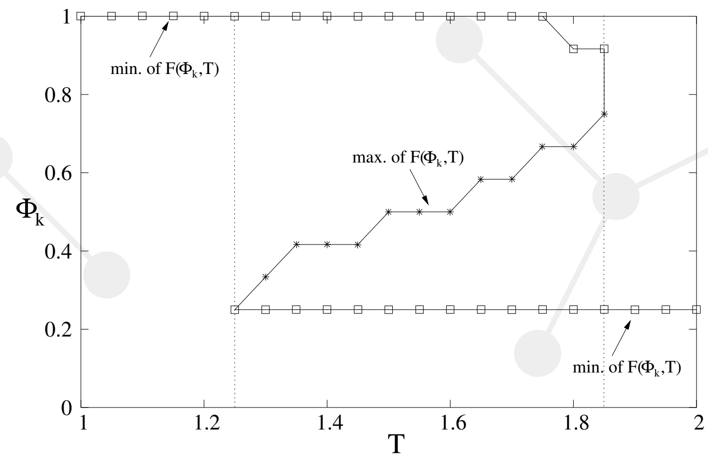
$$\Downarrow$$

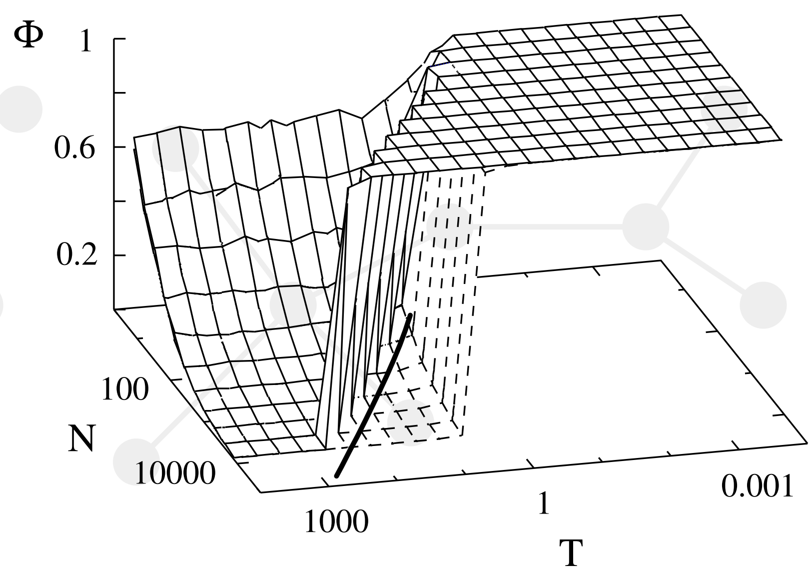
$$E = -J\sum_{\langle i,j\rangle} n_i n_j \qquad \text{(rácsg.)}$$

Elsőrendű fázisátalakulás. Alacsony hőmérsékleti állapot: „csillag”.

Fokszámtól függő energiák







Fokszámtól függő energiák

- $E = -\sum_{i=1}^{N} k_i \log(k_i)$:

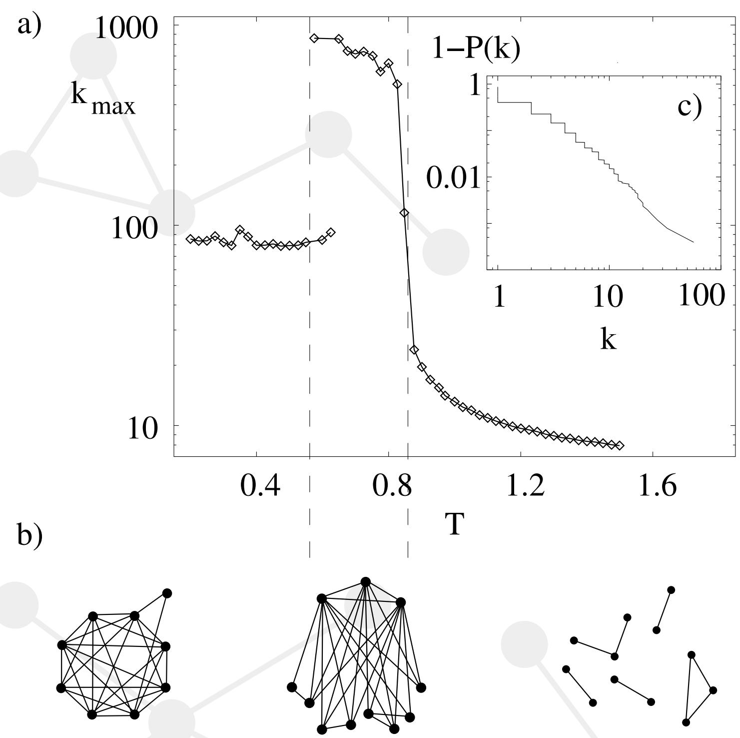
  A fokszámtól függő energiák ekvivalens alakja:

  $$E = \sum_{i=1}^{N} f(k_i) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{i'} g(k_{i'}), \qquad f(k) = kg(k),$$

  jelen esetben a szomszédok fokszámának logaritmusát „érzi” egy vertex.

  Egy folytonos- és egy elsőrendű fázisátalakulás a hőmérséklet függvényében.

Fokszámtól függő energiák



Alacsony hőmérsékleten teljesen összekötött algráf, köztes állapotban néhány nagy csillag.

Kritikus pontban skálafüggetlen gráfok.

Preferenciális kapcsolódás

Az $f(k) = -k\ln(k)$ energia és a növekvő skálafüggetlen hálózatok preferenciális kapcsolódási szabályának kapcsolata:

Tegyük fel, hogy egy Monte-Carlo szimulációban egy új élet probálunk hozzákötni egy k fokszámú vertexhez és

$$\text{elfogadás/elvetés} \;\propto\; e^{-\Delta E/T}.$$

$$\Delta E/T = -(k+1)\ln(k+1) + k\ln(k) \simeq -\ln(k).$$

$$\downarrow$$

$$\text{elfogadás/elvetés} \;\propto\; k.$$

Összefoglalás

- Definiáltuk az egyensúlyi gráf sokaságokat.
- Bevezettük a gráf konfigurációtól függő energiafüggvényeket.
- Különböző energiafüggvények hatását vizsgálva topologikus fázisátalakulásokat tapasztaltunk a hőmérséklet függvényében.