Neekvivalentnost ansambala u (kompleksnim) mrežama

Esej za predmet "Samostalni seminar iz istraživanja u fizici"
Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Eugen Rožić

Mentor: Vinko Zlatić (Institut Ruđer Bošković)

19. siječnja 2017.

Ovaj rad sadrži opis recentnih znanstvenih istraživanja o neekvivalentnosti različitih statističkih ansambala grafova s obzirom na topološke uvjete. Naglasak je stavljen na rezultate koji ukazuju na posebnu vrstu neekvivalentnosti s obzirom na ekstenzivnost broja uvjeta te na nekoreliranost svojstva aditivnosti sustava sa ekvivaletnošću ansambala. Provedeni su računi i dani argumenti koji opovrgavaju rezultate o neekvivalentnosti ansambala za sustave s ekstenzivnim brojem uvjeta te je provedena diskusija o aditivnosti.
Kao uvod u temu prezentirani su argumenti za opravdanost primjene metoda statističke fizike na grafove te motivacija za primjenu u kontekstu kompleksnih mreža, dan je kratak uvod u teoriju velikih odstupanja i tri prirodne definicije neekvivalentnosti ansambala te su ukratko opisani primjeri uobičajenih fizikalnih sustava i situacija u kojima se neekvivalentnost ansambala javlja.

1 Uvod

Statistička fizika započela je sa Ludwigom Boltzmannom koji je definirao entropiju kao logaritam broja mikrostanja koja odgovaraju zadanom makrostanju zatvorenog sustava, pri čemu je svako mikrostanje jednako vjerojatno. Iz te pretpostavke i tako definirane entropije može se rekonstruirati cijela termodinamika, no za izračun entropije potrebno je poznavati mikroskopske zakone sustava, a sam račun je iznimno kompliciran. Pravi razvoj statističke fizike došao je sa radom Willarda Gibbsa koji je uveo koncept ansambla te definirao i razradio mikrokanonski, kanonski i velekanonski ansambl.
Statistički ansambl u svojoj srži predstavlja razdiobu vjerojatnosti za mikrostanja sustava, a može se zamisliti kao bezbroj identičnih kopija promatranog fizikalnog sustava. Sve vrijednosti observabli sustava mogu se shvatiti kao usrednjene po ansamblu. Mikrokanonski ansambl zadan je kao onaj u kojem su uvjeti na sustav (vrijednosti opservabli, konkretno energije) strogo zadovoljeni u smislu da je vjerojatnost pojave sustava u mikrostanju koje ne zadovoljava uvjete jednako nuli. Dodatno, vjerojatnost pojave svakog dozvoljenog mikrostanja je jednaka, a u zbroju, naravno, daju jedan. Takav ansambl, dakle, opisuje zatvoreni sustav i odgovara Boltzmannovoj definiciji entropije. Kanonski ansambl Gibbs je definirao preko kontakta sustava sa spremnikom energije točno definirane temperature pri čemu sustav zadovoljava nametnute uvjete (iznos energije) samo u prosjeku preko cijelog ansambla, a ne nužno za svako mikrostanje.
Gibbs je tvrdio da su mikrokanonski i kanonski ansambl ekvivalentni u termodinamičkoj granici, dakle kada broj čestica $N \to \infty$, jer fluktuacije oko srednje vrijednosti idu kao $\sqrt{N}/N \to 0$. Kako su svi praktični računi puno lakši ako se umjesto mikrokanonskog koristi kanonski ansambl, to je objašnjenje brzo prihvaćeno te je kanonski ansambl ušao u opću upotrebu za sve sustave kao računski ekvivalentan onom stvarnom, mikrokanonskom. Vjerovalo se da entropija u termodinamičkoj granici uvijek mora biti konkavna funkcija, a prigovori na razini matematičke rigoroznosti i opravdanosti primjene kanonskog ansambla u pojedinim sustavima svodili su se na svojstva ergodičnosti, metričke tranzitivnosti i sličnih matematičkih pojmova za koje se tvrdilo da se trebaju pretpostaviti, zajedno sa a priori jednakim vjerojatnostima ekvivalentnih mikrostanja.
S vremenom su se pojavili fizikalni sustavi s neobičnim fenomenima poput negativnog toplinskog kapaciteta koji su ukazivali na stvarnu lokalnu nekonkavnost entropije u određenim rasponima energije. Karakteris-

tika svih takvih sustava bila je neaditivnost promatrane veličine (energije), a koja je uvijek bila posljedica neke vrste dugodosežnog djelovanja kao što je npr. gravitacijska sila. U međuvremenu je razvijena rigorozna matematička teorija velikih odstupanja (*large deviation theory*) te se shvatilo da je ona prirodan okvir za formulaciju statističke fizike te proučavanje njenih fenomena i detalja poput ekvivalentnosti ansambala.

S druge strane, neovisno se razvijala teorija informacija čiji je pionir Claude Shannon definirao informacijski sadržaj komunikacijskog kanala preko veličine koja je u osnovi bila ekvivalentna entropiji kanonskog ansambla, tzv. Gibbsovoj entropiji. Ta je veličina konceptualno odražavala maksimalnu informaciju koju je moguće ekstrahirati sa strane prijemnika bez unošenja pristranosti. To je potaknulo Edwina Thompsona Jaynesa da statističku fiziku redefinira u terminima nepristranog, probabilističkog zaključivanja na osnovi dostupnih, a nepotpunih, informacija o fizikalnom sustavu, pri čemu su zaključci statističke fizike (barem što se tiče stanja u ravnoteži) matematičke nužnosti s obzirom na poznate informacije o sustavu [1]. Time je Jaynes otklonio potrebu za bilo kakvim posebnim pretpostavkama o fizikalnom sustavu (osim poznavanja fizike) da bi korištenje kanonskog ansambla bilo točno (ne nužno i korisno), ali i otvorio, odnosno opravdao primjenu formalizma kanonskog ansambla na bilo kakve sustave koje se može definirati preko uvjeta na proizvoljne opservable. Ta spoznaja našla je korisnu primjenu u danas vrlo popularnom, brzorastućem i sveprisutnom području kompleksnih mreža u kojemu se formalizam kanonskog ansambla koristi i kao alat za potencijalno objašnjavanje naizgled kompleksnih pojava na mrežama, i kao podloga za razlučivanje stvarne kompleksnosti realnih mreža od eventualnih statističkih efekata uzrokovanih jednostavnim uvjetima na mrežu.

Nedavno je primjećeno da se pri vrlo specifičnom definiranju uvjeta na mrežu javlja zna-čajna neekvivalentnost mikrokanonskog i kanonskog ansambla i da taj efekt nema nikakve veze sa svojstvom aditivnosti. Točan uzrok i interpretacija tog fenomena nisu još dovoljno istražene, a njegove posljedice su potencijalno vrlo značajne. Taj fenomen fokus je ovoga rada i bit će relativno detaljno izložen i diskutiran. Ostatak rada osmišljen je tako da čitatelja najprije ukratko upozna sa kompleksnim mrežama te primjenom statističke mehanike na njih, a potom i sa osnovnim idejama teorije velikih odstupanja te formalnim okvirima i osnovama neekvivalentnosti ansambala u fizici.

2 Statistička mehanika 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 je simetrična 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*, te definiranja više različitih vrsta vrhova i bridova, svake sa svojim posebnim pravilima, čime se ulazi u trenutno vrlo popularno i aktivno područje višeslojnih (*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 svojstava mreže je niz stupnjeva vrhova (*degree sequence*) $\{\kappa_i\}$, pri čemu je stupanj i-tog vrha definiran kao broj bridova spojenih na taj vrh: $\kappa_i = \sum_j \sigma_{ij}$. Sljedeće svojstvo po kompleksnosti je tranzitivnost odnosno grupiranje (*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 struk-

tura zajednica (*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: $\tau_i = \frac{1}{2}\sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{ik}$. Više o osnovama kompleksnih mreža, njihove veze sa fizikom te primjeni koncepata i metoda iz fizike na njima može se naći u preglednom radu [2].

Motivacija primjene statistike i statističkih ansambala u polju kompleksnih mreža je dvojaka. Primarno je motivacija bila ta da se razluče statističke posljedice nametanja relativno jednostavnih uvjeta, poput uniformne vjerojatnosti ostvarenja pojedine veze (*Erdos-Renyi model*), od stvarne kompleksnosti realnih mreža što može poslužiti i kao svojevrsna definicija kompleksnosti. Druga motivacija je moguće otkrivanje 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*), 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, te je statistički pristup predložen kao moguće rješenje po iskustvu i analogiji iz povijesti fizike.

Primjena mikrokanonskog ansambla podrazumijeva čvrsto zadovoljene uvjete i teška je i nepraktična kao i u fizici. 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. Prvi (*Edge Stub Reconnection*) stvara vrhove sa unaprijed određenim brojem nespojenih veza (*stub*) 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, ne narušavajući pritom nikad čvrsto zadane stupnjeve vrhova. No uz to što je i LRA vrlo vremenski neefikasan i potrebno mu je puno više početnih informacija nego je nužno, dokazano je i da neergodički uzorkuje prostor svih dozvoljenih mikrostanja [4] pa je i statistički rigorozno gledajući neispravan. Puno bi bolje bilo moći raditi sa ekvivalentom kanonskog ansambla u fizici.

Kanonski ansambl u kompleksnim mrežama poznat je pod nazivom *exponential random graphs* odnosno model eksponencijalnih slučajnih grafova. Taj model utemeljen je na probabilističkom razmišljanju kakvog je iznio Jaynes u [1] i točno odgovara formalizmu kanonskog ansambla iz statističke fizike. Uvjeti na graf uklopljeni su tzv. *generalizirani Hamiltonijan*:

$$H(G,\vec{\theta}) = \sum_i \theta_i x_i(G) \quad , \tag{2.1}$$

pri čemu su $\{x_i(G)\}$ neka svojstva grafa G za koje se zahtijeva da su u prosjeku po ansamblu zadovoljena, a $\{\theta_i\}$ je skup generaliziranih temperatura. Znači, u kanonskom ansamblu uz zadane temperature $\vec{\theta^*}$ graf G se pojavljuje sa vjerojatnošću od:

$$P_{can}(G) = \frac{e^{-H(G,\vec{\theta^*})}}{Z} \quad , \tag{2.2}$$

pri čemu je Z particijska funkcija i dana je izrazom:

$$Z(\vec{\theta^*}) = \sum_{G\in\mathcal{G}} e^{-H(G,\vec{\theta^*})} \quad . \tag{2.3}$$

Ako se kanonski ansambl želi koristiti za usporedbu s nekom konkretnom realnom mrežom onda se vrijednosti $\{x_i(G)\}$ mogu odrediti iz te mreže, naći odgovarajuće vrijednosti generaliziranih temperatura $\vec{\theta^*}$ i pokazano je u [5] da u tom slučaju model kanonskog ansambla odgovara procjenitelju maksimalne vjerojatnosti (*maximum likelihood*). Izvod kanonskog modela iz prvih principa za općeniti generalizirani Hamiltonijan te egzaktni analitički izračuni za sve najčešće linearne modele, kao i neke nelinearne, uz čak djelomičan razvoj perturbativnog računa, nalaze se u [3].

3 Matematički okviri

Osnovni predmet proučavanja uvijek je neki sustav sastavljen od N primitivnih objekata (čestica, vrhova grafa, ...) svaki od kojih se može nalaziti u nekom stanju ω_i iz skupa Λ. Mikrostanje cijelog sustava definirano je stoga kao:

$$\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_N) \in \Lambda^N \quad . \tag{3.1}$$

Makrostanje sustava odgovara onome što se makroskopski može opaziti, dakle skupu vrijednosti relevantnih makroskopskih opservabli. Formalno se makrostanje definira kao vrijednost funkcije:

$$M_N : \Lambda^N \to \mathcal{M} \quad , \tag{3.2}$$

gdje je $\mathcal{M}$ neka mnogostrukost, najčešće definirana kao Polishev prostor, koja se može zamisliti kao direktan produkt prostora vrijednosti svih relevantnih makroskopskih opservabli.

3.1 Teorija velikih odstupanja

Osnovni objekti teorije velikih odstupanja su slučajne varijable X_i, a glavno pitanje je vjerojatnost da zbroj N i.i.d. takvih slučajnih varijabli poprimi vrijednost različitu od očekivane, dakle da odstupa od zakona velikih brojeva. Konkretno, Cramerov teorem kaže da $\forall m > E[X]$ vrijedi:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln P\left(\frac{1}{N}\sum_i X_i \geq m\right) = -I(m) \tag{3.3}$$

pri čemu je $I(m)$ Legendreov transformat funkcije izvodnica kumulanata $\ln E[e^{tX}]$:

$$I(m) = \sup_{t\in\mathbb{R}} \left[mt - \ln E[e^{tX}]\right] \quad . \tag{3.4}$$

U osnovi Cramerov teorem kaže da vjerojatnost odstupanja od zakona velikih brojeva eksponencijalno pada sa brojem slučajnih varijabli i određena je funkcijom $I(m)$ koja se naziva funkcija intenziteta (*rate function*). Rezultati Cramerovog teorema mogu se poopćiti na proizvoljne, dovoljno "dobre" skupove dok dva daljnja teorema, Gärtner-Ellisov i Varadhanov, Cramerove rezultate proširuju sa srednje vrijednosti zbroja varijabli prvo na općenitu slučajnu varijablu parametriziranu sa N, a potom i na funkciju takve slučajne varijable. Detaljnije o navedenim teoremima i rezultatima, kao i nešto opširniji uvod u teoriju velikih devijacija uz primjenu na fiziku može se naći u [6], a temeljito izlaganje s rigoroznim rezultatima u [7]. Konačni izraz koji vrijedi za sve fizikalne sustave i u kojemu je slučajna varijabla upravo makrostanje sustava može se pronaći u [8] i dan je sa:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln\left(P_N\left\{M_N \in A\right\}\right) = -\inf_{m\in A} I(m)\,. \tag{3.5}$$

3.2 Veza s termodinamičkim potencijalima

S obzirom da se kao slučajna varijabla uzima funkcija makrostanja sustava, a koja je definirana preko mikrostanja, može se definirati neka mjera vjerojatnosti za određeno mikrostanje:

$$P_N(d\omega) \equiv dP_N(\omega) \quad . \tag{3.6}$$

U mikrokanonskom ansamblu mjera dP_N pod pretpostavkom apriorne jednake vjerojatnosti postaje samo $d\omega$ pa vjerojatnost $P_N\left\{M_N \in [m-\epsilon, m+\epsilon]\right\}$ da je makrostanje (recimo energija) neka konkretna vrijednost m (uzimajući $\epsilon \to 0$) odgovara jednostavno broju (volumenu) mikrostanja koje zadovoljavaju taj uvjet (u odnosu na ukupan broj/volumen, no to je samo nevažna normalizacija):

$$P_N\left\{M_N \in dm\right\} = K \cdot \Omega\left\{M_N = m\right\} \tag{3.7}$$

Uvrštavajući ovaj rezultat u jednadžbu (3.5) za funkciju intenziteta dobije se:

$$-I(m) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln\left(\Omega\left\{M_N = m\right\}\right) \tag{3.8}$$

što točno odgovara Boltzmannovoj definiciji entropije po elementu sustava (čestici) u termodinamičkoj granici: $s(m) = -I(m)$.

S druge strane, iz relacije (3.4) vidimo da su entropija i funkcija izvodnica kumulanata povezani preko Legendreove transformacije. No funkcija izvodnica kumulanata definicijom podsjeća na particijsku funkciju iz statističke fizike. Preciznim izvođenjem može se utvrditi da je točno to slučaj. Konkretno, vrijedi:

$$\begin{aligned}\phi(\beta) &= -\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\ln Z_N(\beta) \\ &= \inf_{m\in\mathbb{R}}[m\beta - s(m)]\end{aligned} \tag{3.9}$$

gdje je $\phi(\beta)$ upravo specifična slobodna energija, termodinamički potencijal kanonskog ansambla. Na taj način iz teorije velikih odstupanja prirodno proizlaze poznate matematičke veze iz statističke fizike između termodinamičkih potencijala različitih ansambala krećući samo od prirodne pretpostavke jednakih vjerojatnosti mikrostanja u odsustvu bilo kakvih uvjeta.

3.3 Definicije i uvjeti ekvivalentnosti ansambala

Postoje tri uobičajene definicije ekvivalentnosti ansambala [8]:

1. *Termodinamička ekvivalentnost* - pitanje koje motivira ovu definiciju je jesu li termodinamička svojstva koja se dobivaju iz termodinamičkih potencijala jednaka za oba ansambla? To pitanje može se reformulirati na način da se pita postoji li bijektivno, invertibilno preslikavanje između dvaju termodinamičkih potencijala, konkretno entropije i slobodne energije.
2. *Ekvivalentnost u makrostanjima* - pitanje iza ove definicije je jesu li skupovi ravnotežnih makrostanja isti za oba ansambla?
3. *Ekvivalentnost u mjerama* - motivacija za ovu definiciju je pitanje konvergiraju li matematički razdiobe vjerojatnosti dvaju ansambala na neki način u nekoj granici? Da bi se ova definicija do kraja postavila potrebno je odrediti neku smislenu mjeru konvergencije koja nikako neće biti jedinstvena tako da u ovoj definiciji postoji određena sloboda.

Odgovor na prvo pitanje dan je svojstvima Legendre(-Fenchel) transformacije s obzirom da je veza između entropije i slobodne energije dana takvom transformacijom (3.9). Postoji teorem koji kaže da vrijedi: $s^{**}(m) \geq s(m)$, $\forall m$, pri čemu je $s^{**}(m)$ transformat transformata od $s(m)$, i da jednakost vrijedi ako i samo ako je $s(m)$ konkavna funkcija na cijelom području definicije. To znači da termodinamička ekvivalentnost odgovara uvjetu da je mikrokanonska entropija $s(m)$ konkavna funkcija čvrstih ograničenja na sustav. Suprotno uvriježenom mišljenju, mikrokanonska entropija može biti nekonkavna, ovisno o fizici sustava i nametnutim ograničenjima, čime ćemo se baviti u idućem odjeljku rada.

Za odgovoriti na drugo pitanje potrebno je matematički definirati ravnotežna stanja u okviru razvijene teorije velikih odstupanja. Pogledom na izraz (3.5), i uz dodatnu informaciju da su funkcije intenziteta (*rate functions*) uvijek nenegativne, može se odmah zaključiti da će ravnotežna stanja biti ona koja odgovaraju nultočkama, i eventualno lokalnim minimumima, funkcije intenziteta, odnosno ekvivalentno maksimumima mikrokanonske entropije. Ti skupovi mogu biti višečlani i u tom slučaju ekvivalentnost nije trivijalno utvrditi. Odmah je jasno da ako bi mikrokanonska entropija bila lokalno nekonkavna nužno bi postojalo više lokalnih maksimuma što je indikativno s obzirom na uvjet konkavnosti za termodinamičku ekvivalenciju. Uistinu, ako je mikrokanonska entropija strogo konkavna ansambli su makrostanjski ekvivalentni, a ako je mikrokanonska entropija nekonkavna ansambli su makrostanjski neekvivalentni i u tim slučajevima ekvivalencija u makrostanjima odgovara termodinamičkoj. Treći mogući slučaj je da je entropija lokalno ravna i u tom slučaju može biti da više “temperatura” u kanonskom ansamblu odgovara istoj “energiji” u mikrokanonskom pa ansambli strogo gledajući nisu ekvivalentni u makrostanjima i tada se ekvivalencija u makrostanjima ne poklapa sa termodinamičkom [8]. Tipičan primjer takve situacije su fazni prijelazi kada postoji koegzistencija više različitih faza.

Treća definicija ansambla zahtijeva neku smislenu mjeru odstupanja dvaju mjera, odnosno razdioba vjerojatnosti. Touchette u [8] razmatra dvije, no samo je prva, relativna entropija, korištena u radovima relevantnima za ovaj rad, a ona se ionako u većini slučajeva trivijalno svodi na drugu. Relativna entropija, poznata i kao Leibler-Kullback udaljenost, dana je sljedećim izrazom:

$$D(P_N||P_{N,\beta}) = \int_{\Lambda^N} dP_N(\omega)\ln\frac{dP_N}{dP_{N,\beta}}(\omega) \tag{3.10}$$

gdje je $\frac{dP_N}{dP_{N,\beta}}$ Radon-Nikodymova derivacija mikrokanonske mjere vjerojatnosti po kanonskoj mjeri vjerojatnosti. U diskretnom slučaju to je samo omjer vjerojatnosti za dano mikrostanje. Kaže se da su ansambli ekvivalentni u mjerama ako specifična relativna entropija:

$$d = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} D(P_N || P_{N,\beta}) \tag{3.11}$$

iščezava, dakle ako vrijedi $d = 0$. U diskretnom slučaju, i kada vrijedi da je kanonska vjerojatnost jednaka za svako mikrostanje koje odgovara istom makrostanju (što je uglavnom slučaj), definicija ekvivalentnosti u mjerama svodi se na:

$$d = \lim_{N\to\infty} \frac{\ln P_N(\omega^*) - \ln P_{N,\beta}(\omega^*)}{N} = 0 \tag{3.12}$$

za bilo koje mikrostanje ω^* koje zadovoljava uvjete, zato što su mikrokanonske vjerojatnosti za sva takva mikrostanja ista, a za sva druga mikrostanja jednaka nuli. Touchette u [8] dokazuje općenito da je takva definicija ekvivalentnosti u mjerama ekvivalentna termodinamičkoj ekvivalentnosti te da se sve tri definicije ekvivalentnosti ansambala (osim posebnog slučaja za makrostanja) mogu svesti na jedan uvjet - konkavnost mikrokanonske entropije.

4 Pojavnost neekvivalentnosti ansambala

U ovom odjeljku prvo će biti predstavljene klase i primjeri fizikalnih sustava kod kojih se prvo primijetila neekvivalentnost ansambala te neke spoznaje, zaključci i ustaljena mišljenja vezana uz pojavu neekvivalentnosti ansambala u fizikalnim sustavima, a potom će biti izneseni rezultati nekih nedavnih istraživanja o primjeni statističke fizike na mrežama, u kojima je primijećena neekvivalentnosti ansambala, što je i centralna tema ovoga rada.

4.1 Primjeri iz fizike

Povijesno prve indikacije neekvivalentnosti ansambala pronađene su za gravitacijske sustave u vidu negativnog toplinskog kapaciteta. No u to vrijeme se uopće sumnjalo u ispravnost primjene statističke mehanike na takve sustave zbog ne postojanja ispravne termodinamičke granice. Razlog besmisla termodinamičke granice nalazio se u činjenici da energija takvih sustava nije ekstenzivna veličina nego raste nadlinearno. Konkretno, za interakciju danu potencijalom oblika $V(r) \propto r^{-\alpha}$ u d dimenzija energija jedne čestice u homogenom sredstvu gustoće ρ sa konstantom vezanja J dana je izrazom:

$$\begin{aligned}\epsilon &= \int_\delta^R \rho J \frac{\mathrm{d}^d r}{r^\alpha} = \rho J \Omega_d \int_\delta^R r^{d-1-\alpha} \mathrm{d}r \\ &= \frac{\rho J \Omega_d}{d-\alpha} \left[R^{d-\alpha} - \delta^{d-\alpha}\right]\end{aligned} \tag{4.1}$$

pri čemu je Ω_d puni prostorni kut u d dimenzija, a δ neka donja granica na kojoj je odrezan potencijal da se izbjegne divergencija, što odgovara aproksimaciji čestica čvrstim kuglicama. Vidimo da puštajući limes $R \to \infty$ energija po čestici divergira za $\alpha < d$. Izvod izraza (4.1) ne vrijedi za $\alpha = d$, ali i u tom slučaju bi energija po čestici divergirala (logaritamski).

Isti problem javljao se kod svih modela interakcije u srednjem polju (*mean-field models*) gdje efektivno svaki element sustava međudjeluje sa svim ostalima. Najjednostavniji takav model je Curie-Weissov model magnetizma koji je zadan Hamiltonijanom:

$$H_{CW} = \frac{-J}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} S_i S_j = \frac{-J}{2N} \left(\sum_{i=1}^{N} S_i\right)^2 \tag{4.2}$$

no u njemu je problem riješen tzv. Kacovim skaliranjem, dijeljenjem Hamiltonijana sa N. Kao što se lako može provjeriti, Hamiltonijan (4.2) je ekstenzivan iako načelno odgovara slučaju $\alpha = 0 < d$ iz formule (4.1). Općenito je utvrđeno da se generalizacijom Kacovog skaliranja, redefiniranjem konstante vezanja $J \to JV^{\alpha/d-1}$, energija svake interakcije oblika $V(r) \propto r^{-\alpha}$ može svesti na ekstenzivnu veličinu i time je riješen prigovor na primjenu statističke fizike na takve sustave. No ostala je činjenica da se u takvim sustavima javljaju čudni fenomeni poput negativnog toplinskog kapaciteta i da su kvalitativno različiti standardnim sustavima statističke fizike. Zajednička osobina svih takvih sustava, u kojima je $\alpha \leq d$, neaditivnost je energije po dijelovima sustava. To svojstvo energije ne može se "popraviti" Kacovim skaliranjem i posljedica je određene intuitivno shvaćene dugodosežnosti interakcije pa je zaključeno da je upravo neaditivnost, odnosno dugodosežnost interakcija, uzrok neekvivalentnosti ansambala. Primjeri takvih sustava u kojima su primijećeni efekti neekvivalentnosti ansambala su, uz već navedene gravitacijske sustave i modele srednjeg polja, sustavi nabijenih čestica, dipolarni sustavi te 2D hidrodinamika i elastičnost [9].

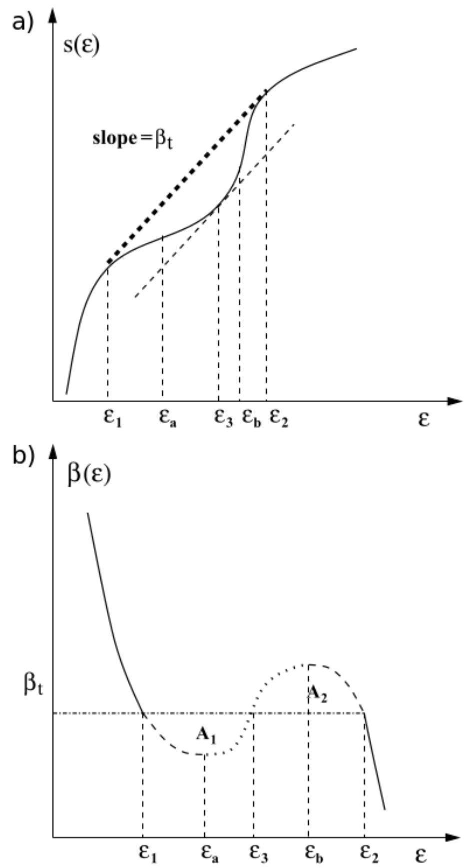
Razlog zašto je negativan toplinski kapacitet bio indikacija neekvivalentnosti ansambala je taj što je formula za toplinski kapacitet u kanonskom ansamblu:

$$C_V = -\frac{\partial \beta}{\partial T}\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = \beta^2 \left\langle (E - \langle E \rangle)^2 \right\rangle \ , \qquad (4.3)$$

što očito uvijek mora biti ≥ 0, dok je u mikrokanonskom ansamblu toplinski kapacitet dan izrazom:

$$C_V = -\frac{\left(s^{'}(u)\right)^2}{s^{''}(u)} \qquad (4.4)$$

pa može biti negativan kada je druga derivacija entropije pozitivna, a što upravo odgovara nekonkavnosti entropije u toj točki. Do tada je nekonkavnost entropije bila poznata, ali samo kao fenomen pri faznim prijelazima i to u konačnim sustavima. Puštanjem sustava u termodinamičku granicu entropija bi poprimila oblik konkavne envelope entropije konačnog sustava (vidi gornji graf na slici 1), što točno odgovara poznatoj Maxwellovoj konstrukciji (vidi donji graf na slici 1) te posebnom slučaju u smislu ekvivalencije ansambala po makrostanjima iz prethodnog odjeljka. Razlika sustava sa neaditivnim uvjetima, odnosno dugodosežnim interakcijama i poznatih situacija faznih prijelaza kod "normalnih" sustava je ta što kod neaditivnih sustava nekonkavnost entropije ne nestaje u termodinamičkoj granici i stanja sa negativnim toplinskim kapacitetom su mikrokanonski stabilna. U tom slučaju ne može se govoriti o koegzistenciji različitih faza tvari i faznom prijelazu pa se to područje energija, u kojemu entropija odstupa od svoje konkavne envelope i ekvivalentnost ansambala je narušena, naziva dugodosežni fazni prijelaz.
Veza između neaditivnosti Hamiltonijana i postojanja lokalne nekonkavnosti mikrokanonske entropije još uvijek nije sasvim jasna i rigorozno utvrđena pa je taj kriterij više fenomenološke prirode te pitanje točnih uvjeta i uzroka nekonkavnosti entropije u termodinamičkoj granici stoji otvoreno. Više i detaljnije o području statističke mehanike i dinamike sustava sa dugodosežnim interakcijama može se naći u preglednom radu [9].



Slika 1: (a) konkavna envelopa entropije (masno iscrtkana), (b) Maxwellova konstrukcija

4.2 Primjeri iz mreža

Statistička fizika na mrežama može, u širem smislu, značiti primjenu metoda statističke fizike na bilo kakav (fizikalni) sustav čije su interakcije, i općenito protežnost, definirane na mreži. Drugim riječima, kada god je mreža samo "podloga", fiksna pozornica koja definira što je u vezi s čime, ali na vrhovima mreže se nalaze nekakve fizikalno motivirane "čestice" i Hamiltonijan koji opisuje sustav baziran je u fizici. Primjer istraživanja ponašanja takvog sustava je [10] koji istražuje Pottsov model na k-regularnom grafu i pokazuje postojanje tipičnog dugodosežnog faznog prijelaza. No razlog tom ponašanju je sam Pottsov model, koji pokazuje takvo ponašanje i bez mreže kao podloge. Takva istraživanja pripadaju zapravo u prethodni pododjeljak i nisu posebno zanimljiva u kontekstu ovoga rada kojemu je u fokusu statističko generiranje mreža i proučavanje njihovih topoloških osobina kroz ansamble.
Najjednostavniji (topološki) generalizirani Hamiltoni-

jan (2.1) sastoji se samo od broja bridova $L = |E|$ i odgovarajuće generalizirane temperature, odnosno udjela bridova λ u ukupnom mogućem broju bridova $M = N(N-1)/2$:

$$H(G,\theta) = \theta\, L = \theta\, M\lambda \quad . \tag{4.5}$$

Particijsku funkciju za ovaj model može se lako izračunati koristeći činjenicu da je ukupni broj bridova grafa jednak zbroju elemenata gornjeg (ili donjeg) trokuta matrice susjedstva te "trik" da je zbroj po svim mogućim grafovima sa n vrhova jednak umnošku za svaki element gornjeg (ili donjeg) trokuta zbroja mogućnosti da brid postoji ili ne. Konkretno:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_G e^{-\theta L} = \sum_G \prod_{i<j} e^{-\theta\,\sigma_{ij}} = \\ &= \prod_{i<j} \left(1+e^{-\theta}\right) = M\left(1+e^{-\theta}\right) \end{aligned} \tag{4.6}$$

Iz particijske funkcije se onda standardnim formulama statističke fizike lako može dobiti odnos temperature i srednjeg (poznatog) broja bridova:

$$\frac{L^*}{M} = \lambda^* = \frac{e^{-\theta}}{1+e^{-\theta}} \equiv p \tag{4.7}$$

te kanonska vjerojatnost nekog grafa:

$$P_{can,\theta}(G) = p^{L(G)}(1-p)^{M-L(G)} \quad . \tag{4.8}$$

Mikrokanonska vjerojatnost grafa sa zadanim brojem bridova L^* odnosno udjelom λ^* dobije se kao inverz ukupnog broja grafova sa N vrhova i L^* bridova, što je jednostavan kombinatorički problem:

$$\Omega_{L^*} = \binom{M}{L^*} = \frac{M!}{L^*!(M-L^*)!} \tag{4.9}$$

Korištenjem Stirlingove aproksimacije za faktorijele dobije se da je specifična mikrokanonska entropija ovakvog sustava u termodinamičkoj granici dana izrazom:

$$s(\lambda) = -\left(\lambda \ln(\lambda) + (1-\lambda)\ln(1-\lambda)\right) \tag{4.10}$$

Lako se provjeri da je uvjet ekvivalentnosti ansambala u mjerama (3.12) za ovaj sustav zadovoljen, a što je i konzistentno sa oblikom funkcije $s(\lambda)$ koja je svugdje konkavna (Slika 2).

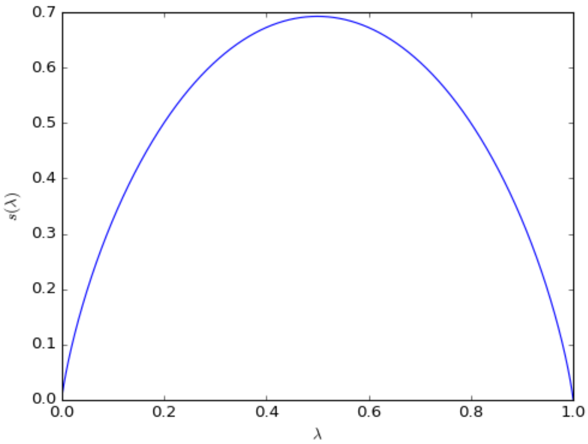
Ono što je interesantno za primijetiti kod ovog modela je to što iako je vrlo jednostavan i ansambli su mu (očekivano) ekvivalentni, Hamiltonijan modela je neaditivan [12, 13]. To se lako može vidjeti ako se sustav podijeli na proizvoljna dva skupa vrhova $N = N_1 + N_2$. Tada je "energija interakcije" jednaka:

$$\begin{aligned} H_{int} &= \frac{\theta\lambda}{2}\left[N(N-1) - N_1(N_1-1) - N_2(N_2-1)\right] = \\ &= \frac{\theta\lambda N^2}{2}\left(1-\alpha_1^2-\alpha_2^2\right) = \theta\lambda N^2\alpha_1\alpha_2 \end{aligned} \tag{4.11}$$

pa je omjer energije interakcije i ukupne energije u termodinamičkoj granici:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{H_{int}}{H_{tot}} = 2\alpha_1\alpha_2 > 0 \tag{4.12}$$

Ovaj rezultat se kosi sa osnovnim iskustvenim kriterijem iz fizikalnih sustava i upućuje na to da sam kriterij neaditivnosti nije dovoljan.



Slika 2: Mikrokanonska entropija za $H(G,\theta) = \theta\, L = \theta\, M\lambda$ model

Sljedeći tipični model je tzv. *konfiguracijski model*. Njegov Hamiltonijan kao uvjete sadrži niz stupnjeva vrhova grafa $\{k_i\}$:

$$H(G,\vec{\theta}) = \sum_i \theta_i k_i(G) \; . \tag{4.13}$$

Sličnim postupkom kao kod ranijeg modela može se relativno jednostavno doći do izraza za particijsku funkciju i kanonsku vjerojatnost grafa:

$$Z = \prod_{i<j}\left(1+e^{-\theta_i}e^{-\theta_j}\right) \tag{4.14}$$

$$P_{can}(G) = \prod_{i<j} p_{ij}^{\sigma_{ij}}(1-p_{ij})^{1-\sigma_{ij}} \tag{4.15}$$

uz definiranje parametra vjerojatnosti veze:

$$p_{ij} = \frac{e^{-\theta_i} e^{-\theta_j}}{1 + e^{-\theta_i} e^{-\theta_j}} \tag{4.16}$$

Iz formalizma kanonskog ansambla dobiju se relacije:

$$2L = \sum_i k_i = \sum_{i,j} p_{ij} = \sum_{i,j} \sigma_{ij} \tag{4.17}$$

čime se u približenju rijetkog grafa $k_{max} = o(\sqrt{N})$ može dobiti poznati izraz koji odgovara klasičnoj granici u statističkoj fizici [3]:

$$p_{ij} = \frac{k_i k_j}{2L} \tag{4.18}$$

iz čega slijedi izraz za logaritam kanonske entropije:

$$\begin{aligned} \ln P_{can}(G) &= \sum_{i<j} p_{ij} \ln p_{ij} + (1 - p_{ij}) \ln(1 - p_{ij}) = \\ &= \sum_{i=1}^{N} k_i \ln k_i - L \ln(2L) - L \end{aligned} \tag{4.19}$$

S druge strane, pitanje mikrokanonske entropije puno je teže nego kod prvog modela jer je kombinatorički problem broja grafova s danim nizom stupnjeva još uvijek nije riješen u potpunosti. No u istom približenju rijetkog grafa koje je iskorišteno za kanonski ansambl postoji relativno komplicirana Benderova formula:

$$\Omega_N(\vec{k}) = \frac{\sqrt{2}\left(\frac{2L}{e}\right)^L}{\prod_{i=1}^{N} k_i!} e^{-\left(\bar{k^2}/2\bar{k}\right)^2 + \frac{1}{4} + o(\bar{k}^3/N)} \tag{4.20}$$

koja za mikrokanonsku entropiju ovog modela daje sljedeći približan izraz:

$$\begin{aligned} S_N(\vec{k}) = &- \sum_{i=1}^{N} \ln(k_i!) + L \ln(2L) - L - \\ &- \left(\frac{\overline{k^2}}{2\bar{k}}\right)^2 + o\left(\frac{\overline{k}^3}{N}\right) + const. \end{aligned} \tag{4.21}$$

Uvrštavajući izraze (4.19) i (4.21) u kriterij ekvivalentnosti (3.12) i koristeći Stirlingovu aproksimaciju dobiva se [12]:

$$d \geq \overline{\ln \sqrt{2\pi k_i}} > 0 \tag{4.22}$$

Dakle, po tom kriteriju mikrokanonski i kanonski ansambl nisu ekvivalentni i to čini se na cijelom području parametara, a ne samo u uskom području kao što je to kod dugodosežnih faznih prijelaza. Izgleda da se ovaj fenomen događa kada god postoji ekstenzivan broj uvjeta u Hamiltonijanu, znači kada Hamiltonijan raste (linearno) u broju članova sa brojem vrhova (čestica), što je predloženo kao mogući poseban kriterij nastupanja ovakve vrste neekvivalentnosti ansambala neovisan o aditivnosti sustava [11, 12, 13].

Dodatni argumenti tezi da neekvivalentnost ansambala nema nužno veze sa svojstvom aditivnosti izneseni su u [12] na primjeru konfiguracijskog modela na bipartitnim grafovima te pojačani i poopćeni u [13] uzimajući u obzir slučajeve raznih uvjeta i limesa na općenitim višeslojnim mrežama. Konkretno na (N, M) bipartitnom grafu, znači na dva skupa vrhova kardinaliteta N i M te bridovima samo između vrhova u različitim skupovima, konfiguracijski model se može zadati sa uvjetima samo na jednom skupu vrhova ili na svima, a limesi se mogu uzimati s obzirom na kardinalitete jednog skupa vrhova, drugog skupa vrhova ili oba skupa u raznim odnosima. Konfiguracijski model sa uvjetima na oba skupa vrhova gotovo se identično rješava kao i gore obrađeni konfiguracijski model na običnom, unipartitnom grafu, a i zaključci su isti. Pravi razlog uvođenja bipartitnih grafova u analizu je što se za slučaj Hamiltonijana sa uvjetima samo na prvom skupu vrhova tvrdi da je sustav aditivan, jer su svi vrhovi iz prvog skupa međusobno nezavisni (na tu tvrdnju osvrnuti ćemo se kasnije u diskusiji). Mikrokanonski ansambl za takav graf jednostavan je kombinatorički problem, trivijalno poopćenje formule (4.9) iz najjednostavnijeg modela:

$$\Omega_{N,M}(\vec{k}) = \prod_{i=1}^{N} \binom{M}{k_i} = \prod_{i=1}^{N} \frac{M!}{k_i!(M-k_i)!} \tag{4.23}$$

dok se kanonski ansambl dobije postupkom analognim već pokazanom, ali je znatno jednostavniji i može se izvesti bez uvođenja ograničenja na rijetke grafove i aproksimacije malih vjerojatnosti:

$$Z = \prod_{j=1}^{M}\prod_{i=1}^{N}\left(1+e^{-\theta_i}\right) \tag{4.24}$$

$$P_{can}(G) = \prod_{i=1}^{N}\left(\frac{k_i}{M}\right)^{k_i}\left(\frac{(M-k_i)}{M}\right)^{M-k_i} \tag{4.25}$$

$$\ln P_{can}(G) = \sum_{i=1}^{N}\left(k_i \ln k_i + (M-k_i)\ln(M-k_i)\right) - \\ - MN\ln(M) \tag{4.26}$$

Relativna entropija između dobivenih izraza za mikrokanonski i kanonski ansambl iznosi:

$$D(P||P_{can}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\ln\left(2\pi k_i\left(1-\frac{k_i}{M}\right)\right) \tag{4.27}$$

Uzme li se kao termodinamička granica $N \to \infty$ uz $M = konst.$, standardna mjera ekvivalentnosti (3.12) kao rezultat daje [12]:

$$d = \frac{1}{2}\overline{\ln\left(2\pi k_i\left(1-\frac{k_i}{M}\right)\right)} > 0 \tag{4.28}$$

dakle govori da su ansambli i za ovaj slučaj ekstenzivnog broja uvjeta neekvivalentni, no ovaj put na sustavu za koji se tvrdi da je aditivan.

Treba još za kraj napomenuti da se istražuju i drugi modeli Hamiltonijana sa konačnim (malim) brojem uvjeta kao što su, uz broj bridova, broj trokuta ili trojki. Takvi sustavi proučavaju se posebnom matematikom (*theory of graph limits*, *graphons* [14]) u gustom (*dense*) režimu. U njima je također primijećena neekvivalentnost ansambala i određeni tipični "dugodosežni fazni prijelazi" [15], no to je sasvim u skladu i potpuno analogno standardnim fizikalnim sustavima s obzirom da su opisani neaditivnim Hamiltonijanom s nekoliko uvjeta.

5 Diskusija

Dobra termodinamička granica

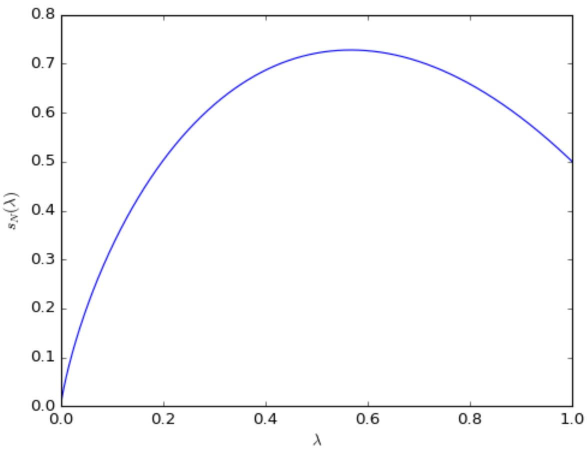
Rezultat o neekvivalentnosti u mjerama za konfiguracijski model na unipartitnom grafu (4.22) trebao bi, po teoriji prezentiranoj u odjeljku 3.1, podrazumijevati nekonkavnost specifične entropije. U svrhu provjere uzmimo najjednostavniji, poseban slučaj k-regularnih grafova. U tom slučaju izraz za mikrokanonsku entropiju (4.21) postaje:

$$S_N(k) = \frac{Nk}{2}\left[\ln(N) - \ln(k) + 1\right] - \frac{k^2}{4} \tag{5.1}$$

Ono što je odmah vidljivo je da u uobičajenoj termodinamičkoj granici $\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}$ (korištenoj u odjeljku 3.1 pa i za mjeru koja je dala rezultat 4.22) specifična entropija logaritamski divergira. To dovodi u pitanje uopće primjenjivost teorije, formula i uvjeta kao što je npr. (3.12), razvijenih uz pretpostavku dobre termodinamičke granice i definiranosti specifične entropije, na konfiguracijski model.
Dodatno, u dobro definiranoj termodinamičkoj granici uvjeti na sustav (članovi Hamiltonijana) trebali bi također biti dobro definirani preko veličina analognih gustoćama čestica. U slučaju konfiguracijskog modela vidimo da Hamiltonijan u toj uobičajenoj termodinamičkoj granici postaje beskonačna suma nula što djeluje besmisleno i dodatno povećava sumnju u ispravnost primjene teorije razvijene za "normalne" sustave. No provodeći tu termodinamičku granicu u Hamiltonijanu se pojavljuju omjeri k_i/N koji asociraju na gustoće s obzirom da odgovaraju udjelu stupnja i-tog vrha od maksimalnog mogućeg. Postavlja se pitanje ne bi li imalo više smisla definirati Hamiltonijan u terminima tih udjela λ_i, pogotovo s obzirom na to da povećanjem mreže ona na neki način zadržava topologiju ako se i stupnjevi vrhova povećavaju u skladu s njom, a ne ostaju fiksirani. Ako se to učini mikrokanonska entropija konfiguracijskog modela postaje:

$$S_N(k) = \frac{N^2}{2}\lambda\left[1 - \ln(\lambda) - \frac{\lambda}{2}\right]. \tag{5.2}$$

Izraz (5.2) mami svojom ovisnošću o N na normalizaciju brojem bridova ($N(N-1)/2$) prilikom uzimanja termodinamičke granice umjesto brojem vrhova. Takva normalizacija provedena je u modelu sa ograničenjem samo na broj bridova i za njega daje dobru specifičnu entropiju (4.10). Uzme li se takva termodinamička granica izraz za specifičnu entropiju postaje jednostavna funkcija λ-e prikazana na slici 3. Kao što se može vidjeti to je u potpunosti konkavna funkcija što, suprotno rezultatu (4.22), indicira da su ansambli ekvivalentni (barem za k-regularne grafove). Treba imati na umu da izraz (5.2), odnosno graf na slici 3 vrijedi samo za $\lambda = o(1/\sqrt{N})$ zbog ograničenja iz Benderove formule (4.20).



Slika 3: Mikrokanonska entropija za konfiguracijski model regularnih grafova

Izraze li se formule za mikrokanonsku (4.21) i kanonsku (4.19) entropiju konfiguracijskog modela preko udjela stupnjeva $\{\lambda_i\}$ te uvrste u uvjet ekvivalentnosti (3.12), uz normalizaciju sa $N(N-1)/2$ umjesto sa N, dobije se:

$$d = \frac{1}{2}\left(\frac{\overline{\lambda^2}}{\overline{\lambda}}\right)^2 \tag{5.3}$$

Kako zbog navedenih ograničenja Benderove formule u termodinamičkoj granici vrijedi $\lambda \to 0$ čini se da je rezultat (5.3) konzistentan sa zaključkom donesenim na osnovu konkavnosti specifične entropije (5.2) i suprotan zaključcima članaka [12, 13].

Kada se isti pristup u definiranju Hamiltonijana primijeni na konfiguracijski model na bipartitnim grafovima, funkcije mikrokanonske (4.23) i kanonske (4.26) vjerojatnosti postaju:

$$S_{N,M}(\vec{\lambda_i}) = -M\sum_{i=1}^{N}(\lambda_i \ln\lambda_i + (1-\lambda_i)\ln(1-\lambda_i)) - \\ -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\ln\left(2\pi M\lambda_i(1-\lambda_i)\right) \tag{5.4}$$

$$\ln P_{can}(G) = M\sum_{i=1}^{N}(\lambda_i \ln\lambda_i + (1-\lambda_i)\ln(1-\lambda_i))$$

a njihova specifična relativna entropija je:

$$d = \lim_{M\to\infty}\frac{1}{2M}\overline{\ln(2\pi M\lambda_i(1-\lambda_i))} = 0 \tag{5.5}$$

Ovaj rezultat također se slaže sa kriterijem konkavnosti mikrokanonske entropije jer je ona u ovom slučaju ništa drugo nego zbroj funkcija prikazanih na grafu na slici 2, a zbroj dvaju konkavnih funkcija opet je konkavna funkcija. Također može se primijetiti prirodnost normalizacije sa faktorom NM u termodinamičkoj granici (što je broj ukupnih mogućih bridova) s obzirom na mikrokanonske i kanonske entropije, kao i njihove specifične relativne entropije, jer nema razloga zašto bi u termodinamičkoj granici puštali kardinalnost jednog skupa vrhova u beskonačnost dok drugoga ne, a dijeljenje sa zbrojem dovodi do divergencije specifične relativne entropije što je rezultat koji bi bio iznimno čudan.

Aditivnost

Što se tiče aditivnosti konfiguracijskog modela na bipartitnim grafovima, upitno je može li se sustav smatrati aditivnim samo ograničavanjem na jedan skup vrhova. Naime, bipartitni graf čini sustav u cjelini bez obzira što na drugi skup vrhova nisu nametnuti uvjeti pa se ne pojavljuju u Hamiltonijanu. Razlozi zašto bi imalo smisla ograničiti promatranje samo na jedan skup grafa nisu jasni.

Standardno poimanje aditivnosti podrazumijevalo bi mogućnost particije grafa na disjunktne podgrafove čiji zbroj Hamiltonijana bi dao ukupni Hamiltonijan. To kod konfiguracijskog modela nije moguće na način koji autori u [12, 13] predlažu jer to zahtijeva N kopija drugog skupa vrhova, a particioniranjem drugog skupa vrhova na N dijelova puno bi bridova bilo između podgrafova. Iz toga se može zaključiti da je konfiguracijski model na bipartitnim grafovima ipak neaditivan.

No to nas vraća na pitanje korelacije aditivnosti sustava i neekvivalentnosti njegovih ansambala. Standardna mudrost iz statističke fizike fizikalnih sustava govori da neaditivnost sustava povlači neekvivalentnost ansambala i nije pronađen niti jedan protuprimjer (koji je nama poznat). Također, puno se o tome pisalo i izreklo svakakvih argumenata o tome zašto bi to tako bilo. No ovdje smo vidjeli primjer dva sustava koji su neaditivni, a ansambli su im ekvivalentni. Posebice jasan primjer toga je najjednostavniji model grafa sa zadanim brojem bridova. To očito pokazuje da aditivnost sama po sebi nije dovoljan uvjet za neekvivalentnost ansambala i postavlja se pitanje što onda je i koje je to svojstvo grafova koje čini da se toliko razlikuju u tom pogledu od svih dosad proučavanih fizikalnih sustava? Moguće je da se odgovor krije u dimenzionalnosti sustava ili definiciji površine i volumena, s obzirom da su ti pojmovi za grafove slabo ili specifično definirani.

Ekstenzivan broj uvjeta

Kod konfiguracijskog modela Hamiltonijan je vrlo različit od uobičajenih fizikalnih Hamiltonijana iz razloga što je ima uvjeta i temperatura, dakle članova, jednako koliko i čestica. Iako u teoriji vjerojatnosti ne postoji razlog zašto bi to bio problem takvo ponašanje Hamiltonijana se jako kosi sa fizikalnom intuicijom te je upitna ispravnost i smislenost termodinamičke granice u kojoj Hamiltonijan dinamički raste u broju članova i na koncu sadrži beskonačno članova. Moguće je da su neki od specifičnih rezultata primjene statističke fizike na konfiguracijski model upravo artefakti takvog neobičnog, dinamičkog, u članovima divergirajućeg Hamiltonijana. Također je moguće da se dobra termodinamička granica ne postiže normalizacijom sa faktorima N^2 i NM zbog broja bridova nego upravo zbog nužnosti kompenzacije ekstenzivnosti Hamiltonijana u broju članova.
Jedna moguća redefinicija Hamiltonijana riješila bi problem dinamičkog rasta iako je upitna korisnost i upotrebljivost takvog oblika. Ako bi se sa n_k označio broj čvorova sa stupnjem k onda bi se Hamiltonijan mogao definirati kao:

$$H(G, \vec{\theta}) = \sum_{k=1}^{\infty} \theta_k n_k \qquad (5.6)$$

pri čemu bi vrijedio uvjet $\sum_{k=1}^{\infty} n_k = N$. Na taj način Hamiltonijan se ne referira na pojedine vrhove i ne raste u broju članova sa brojem vrhova, a i termodinamička granica se može definirati smisleno preko gustoće čvorova sa stupnjem k: n_k/N. No s druge strane, takav Hamiltonijan od početka ima beskonačno članova što je također upitno, a objekti $\{n_k\}$ djeluju puno nespretnije za računanje s njima od samih stupnjeva $\{k_i\}$.

Interpretacija neekvivalentnosti

Konačno, ako ansambli stvarno jesu tako specifično neekvivalentni za Hamiltonijane s ekstenzivnim brojem uvjeta postavlja se pitanje interpretacije. Što bi to značilo da su ansambli neekvivalentni na cijelom području definicije parametara? Kako izgleda entropija takvog sustava, je li na cijelom području definicije konveksna? Kakve to posljedice ima na "toplinski kapacitet" i koje bi interpretacije toga bile? Smije li se u tom slučaju uopće upotrebljavati kanonski formalizam u analitičkim računima i praktičnim primjenama i ako da zašto i uz koja moguća ograničenja?

6 Zaključak

Rezultati o neekvivalentnosti mikrokanonskog i kanonskog ansambla kod modela sa ekstenzivnim brojem uvjeta, prezentirani u [11], [12] i [13], vrlo su neobični i jedinstveni te kada bi bili točni povlačili bi mnoga važna i teška pitanja. No, postoji jaka sumnja u njihovu ispravnost zbog divergencije specifične entropije te loše definiranosti parametara Hamiltonijana u korištenoj termodinamičkoj granici. Moguće rješenje predloženo je kroz drugačiju definiciju termodinamičke granice za takve sustave, sličnu onoj za sustav sa uvjetom samo na broj bridova, te redefiniranje Hamiltonijana preko određenih analogona gustoća dobro definiranih u toj termodinamičkoj granici. Izračuni pokazuju da u tako postavljenom problemu mikrokanonski i kanonski ansambl nisu neekvivalentni i za to se dobivaju rezultati konzistentni sa teorijom, konkretno sukladnost kriterija iščezavanja specifične relativne entropije i konkavnosti specifične entropije.
Dobiveni rezultat za konfiguracijski model na unipartitnim grafovima vrijedi samo u približenju rijetkog grafa korištenjem Benderove formule (4.20). Za potpuno razumijevanje modela te otklanjanje sumnje u rezultate valjalo bi istražiti ponašanje sustava za sve grafove, bez ograničenja, no to je vrlo težak problem. Mogući daljnji smjer istraživanja predstavlja razmatranje modela u okviru gustih grafova za koje je prikladna nedavno razvijena matematička teorija limesa grafova [14].
U svakom slučaju, Hamiltonijani konfiguracijskih modela sa svojom ekstenzivnošću u broju članova svakako nisu uobičajeni, može se reći niti uopće fizikalni, pa se na osnovu njih teško mogu donositi bilo kakvi zaključci o kriterijima neekvivalentnosti ansambala stan-

dardnih fizikalnih sustava. No trivijalan primjer modela grafova sa uvjetom samo na broj bridova čiji su ansambli ekvivalentni, a koji je evidentno neaditivan, ipak ukazuje na pogrešnost uobičajenog uvjerenja da je neaditivnost sustava dovoljan uvjet za neekvivalentnost njegovih ansambala te dodatno potiče na rješavanje ionako otvorenog problema točnih uvjeta i razloga nastupanja neekvivalentnosti ansambala.

Literatura

[1] Jaynes E. T., **Information Theory and Statistical Mechanics**, 1957, Physical Review 106(4), American Physical Society

[2] Newman M. E. J., **The structure and function of complex networks**, 2003, SIAM Review 45(2), Society for Industrial and Applied Mathematics

[3] Park J., Newman M. E. J., **Statistical mechanics of networks**, 2004, Physical Review E 70, American Physical Society

[4] Roberts E. S., Coolen A. C. C., **Unbiased degree-preserving randomization of directed binary networks**, 2012, Physical Review E 85, American Physical Society

[5] Squartini T., Garlaschelli D., **Analytical maximum-likelihood method to detect patterns in real networks**, 2011, New Journal of Physics, Institute of Physics

[6] Touchette H., **The large deviation approach to statistical mechanics**, 2009, Physics Reports 478, Elsevier

[7] den Hollander F., **Large Deviations**, 2000, Fields Institute Monographs 14, American Mathematical Society

[8] Touchette H., **Equivalence and Nonequivalence of Ensembles: Thermodynamic, Macrostate and Measure Levels**, 2015, Journal of Statistical Physics 159, Springer

[9] Campa A., Dauxois T., Ruffo S., **Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions**, 2009, Physics Reports 480, Elsevier

[10] Barre J., Concalves G., **Ensemble inequivalence in random graphs**, 2007, Physica A 386, Elsevier

[11] Anand K., Bianconi G., **Entropy measures for networks: Toward an information theory of complex topologies**, 2009, Physical Review E 80, American Physical Society

[12] Squartini T., de Mol J., den Hollander F., Garlaschelli D., **Breaking of ensemble equivalence in networks**, 2015, Physical Review Letters 115, American Physical Society

[13] Garlaschelli D., den Hollander F., Roccaverde A., **Ensemble nonequivalence in random graphs with modular structure**, 2016, Journal of Physics A 50, Institute of Physics

[14] Chatterjee S., Diaconis P., **Estimating and understanding exponential random graph models**, 2013, The Annals of Statistics 41, Institute of Mathematical Statistics

[15] Radin C., Sadun L., **Phase transitions in a complex network**, 2013, Journal of Physics A 46, Institute of Physics