ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ «Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Московский Физико-Технический институт (национальный исследовательский университет)"

Физтех-школа фундаментальной и прикладной физики Факультет общей и прикладной физики

Кафедра квантовой теории поля и астрофизики

Критическое поведение случайных сетей

(Выпускная квалификационная работа на степень бакалавра)

Направление подготовки: 03.03.01 Прикладные математика и физика

Работу выполнил: студент 626 группы _____ Иваненко Алексей Иванович

Научный руководитель: д.физ.-мат.н.

Горский Александр Сергеевич

оглавление

Введени	Ie	3
2 Аналитическое решение		5
2.1	Описание модели	5
2.2	Решение методом среднего поля	5
Анализ	решения	7
4 Численное решение		10
4.1	Описание метода	10
4.2	Эволюция сети	10
4.3	Результаты	11
5 Заключение		13
6 Приложение		14
6.1	Переход в методе среднего поля	14
6.2	Обозначенные функции	15
	Введени 2.1 2.2 Анализ Анализ Числени 4.1 4.2 4.3 Заключ Прилож 6.1 6.2	Введение Аналитическое решение 2.1 Описание модели

1 Введение

В настоящее время имеется множество объектов, которые можно описывать случайными сетями: интернет, социальные взаимодействия, биомолекулярное моделирование и др. Не меньший интерес случайные сети представляют и для физики. С помощью случайных сетей моделируются процессы во многих областях физики. Например, был предложен ряд работ по исследованию модели Изинга[1, 2, 3, 4], ХҮ-модели[5, 6], квантовой гравитации[7] с точки зрения случайных сетей.

Одной из особенностей случайных сетей является критическое поведение в различных моделях. Приведем несколько примеров критического поведения случайных сетей: структурные изменения, возникновение критического состояния, перколяционные явления, критические точки и фазовые переходы[8].

В данной работе основное внимание уделено такому критическому поведению, как фазовый переход. Для ряда моделей взаимодействующих объектов было предложено общее описание их поведения с помощью теории фазовых переходов Ландау[9]. Фазовый переход второго рода в случайных сетях также характеризуется нарушением симметрии. При нарушении симметрии появляются области упорядоченной и неупорядоченной фаз. Также был обнаружен фазовый переход первого рода при исследовании конденсации степеней вершин случайной сети в заданном интервале[10]. В данной модели появляются две критические линии первого рода определяющих топологических переход в сети. При пересечении данных линий был обнаружен переход от пуассоновского распределения степеней к пиковому

Одним из исследуемых случаев случайных сетей, являются модели ненаправленных экспоненциальных графов[8, 11]. Такие модели описываются статистическим ансамблем случайных графов, то есть набором всех возможных конфигураций случайно сети при заданных условиях: $\mathbf{G} = \{G\}$. Наблюдаемыми в данных графах могут быть любые малые конфигурации в нем. Например: количество ребер, количество N-циклов, количество путей длиной k и другие. Каждый граф в таком ансамбле описывается вероятностью:

$$P(G) = \frac{e^{-H(G)}}{Z},$$
(1.1)

где Z, по аналогии с статистической физикой, является статистической суммой. Из условия нормировки следует непосредственное выражение для Z :

$$Z = \sum_{\mathbf{G}} e^{-H(G)} \tag{1.2}$$

Гамильтониан H(G) включает в себя все вклады от наблюдаемых в конкретной модели. В более общем случае можно записывается как:

$$H(G) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i x_i(G), \qquad (1.3)$$

где x_i - наблюдамемые, а α_i - задаваемые параметры.

Были исследованы примеры данных сетей в случаях классического случайного графа[11], *two-star* модели[12] и модели 3-циклов (модель треугольников)[13]. В последних двух был обнаружен фазовый переход второго рода.

В данной работе предлагается исследование критического поведения случайной сети в модели 4-циклов (впоследствии будем называть моделью четырехугольников). В исследуемой модели также обнаружен фазовый переход второго рода с критической точкой. Результаты данной работы и исследования two — star модели и модели треугольников позволяют построить предположение о наличии фазового перехода второго рода в случайных ненаправленных сетях без вводимых ограничений в моделях с большим порядком циклов.

Для исследования модели сперва предлагается аналитическое решение во второй главе. Обнаружение и описание фазового перехода можно найти в третьей главе. В четвертой главе показаны резльтаты численного эксперимента и их сравнение с полученным аналитическим решением.

2 Аналитическое решение

2.1 Описание модели

В данной работе будет исследоваться критическое поведение случайной сети в модели Эрдёша — Реньи. В данной модели рассматривается граф, содержащий *n* неразличимых вершин. Вершины независимо соединяются ребрами согласно распределению Бернулли с вероятностью *p*. Также вводится дополнительное ограничение на количество ребер, соединяющих две вершины: между двумя вершинами может быть не более одного ребра. То есть

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} = \begin{cases} 1, \text{ есть ребро} \\ 0, \text{ нет ребра} \end{cases}, \qquad (2.1)$$

где σ_{ij} - элементы присоединенной матрицы, причем в силу отсутствия направленности $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$.

Наблюдаемыми являются количество ребер p и количество четырехугольников k. Их можно найти как среднее по ансамблю случайных графов:

$$p = \langle \sigma_{ij} \rangle_{\mathbf{G}} \quad k = \langle \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li} \rangle_{\mathbf{G}}, \tag{2.2}$$

Важно отметить, что p и k соответствуют нормированному количеству ребер и четырехугольников соответственно на их количество в полном графе (где между любой парой вершин проведено ребро).

Гамильтониан такой модели записывается как:

$$H = \theta \sum_{i < j} \sigma_{ij} - \mu \sum_{i < j < k < l} \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li}$$
(2.3)

где μ
и θ - параметры теории. Заметим, что пр
и $\mu>0$ система принимает меньшую энергию при большем количестве четыр
ехугольников.

Перепишем гамильтониан в следующем виде:

$$H = \sum_{i < j} \sigma_{ij} \left[\theta - \mu \sum_{j < k < l} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li} \right]$$
(2.4)

По полученному виду гамильтониана можно ожидать, что искомое число четырехугольников будет зависить от числа ребер $< \sigma_{ij} >$ и количество путей длиной 3: $< \sigma_{ik} \sigma_{kl} \sigma_{li} >$.

2.2 Решение методом среднего поля

Первым делом найдем вероятность p, как среднее значение элемента присоединенной матрицы по ансамблю:

$$p = \langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} e^{-H} \frac{\exp\left[-\theta + \mu \sum_{k,l \neq i,j} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li}\right]}{1 + \exp\left[-\theta + \mu \sum_{k,l \neq i,j} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li}\right]}$$
(2.5)

Полученная вероятность (2.2) приводится к следующему виду:

$$p = <\frac{1}{2}\left(1 - \tanh\frac{1}{2}\left[\theta - \mu \sum_{k,l \neq i,j} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li}\right]\right) >$$
(2.6)

Система исследуется при большом количестве вершин, поэтому будет справедливо воспользоваться методом среднего поля. Для этого обозначим $p \equiv <\sigma_{ij} >$ и $r \equiv <\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li} >$. Тогда (2.3) примет следующий вид:

$$p = \frac{1}{2} (1 - \tanh \frac{1}{2} \left[\theta - \mu (n-2)(n-3)r \right])$$
(2.7)

Подродробное обоснование перехода (2.3) \rightarrow (2.4) можно найти в приложении.

(2.4) дает зависимость p(r). Следующим шагом найдем явно r как функцию r(p,r):

$$r = \langle \sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li} \rangle = \frac{1}{Z} \sum e^{-H} \frac{P_{111}}{P_{111} + 3 \times P_{11} + 3 \times P_1 + P_0}$$
(2.8)

Где P_0 соответствует случаю, когда каждая σ в r равна нулю, P_1 - когда одна из σ равна 1, P_{11} - две σ равны 1 и P_{111} все три равны 1. Подробный вид функций P можно найти в приложении.

Дробь под суммой в (2.5) после подстановки P приводится к следующему виду:

$$\frac{e^{\mu\sigma_{ij}}}{(e^{\theta-\mu\sum\sigma_{ij}\sigma_{kl}\sigma_{li}}+1)(e^{\theta-\mu\sum\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{li}}+1)(e^{\theta-\mu\sum\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}}+1)+e^{\mu\sigma_{ij}}-1}$$
(2.9)

Далее можно используя то, что $\sigma_{ij} = \overline{0,1}$, заменяем экспоненту следуюзим образом:

$$e^{\mu\sigma_{ij}} = (e^{\mu} - 1)\sigma_{ij} + 1 \tag{2.10}$$

Тогда выражение для r, применяя метод среднего поля, записывается как:

$$r = \frac{1 + (e^{\mu} - 1)p}{(e^{\theta - \mu(n-2)(n-3)} + 1)^3 + (e^{\mu} - 1)p}$$
(2.11)

Осталось подставить (2.4) в (2.8), чтобы получить рекурсивную функцию на r:

$$r(r) = \frac{e^{\theta - \mu(n-2)(n-3)r} + e^{\mu}}{(e^{\theta - \mu(n-2)(n-3)r} + 1)^4 + e^{\mu} - 1}$$
(2.12)

Таким образом, при заданных параметрах n, μ, θ можно найти значения r и p.

Осталось найти число четырехугольников в исследуемом графе. Будем искать его аналогичным способом:

$$k = \langle \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li} \rangle = \frac{1}{Z} \sum e^{-H} \frac{P_{1111}}{P_{1111} + 4 \times P_{111} + 6 \times P_{11} + 4 \times P_1 + P_0} \quad (2.13)$$

После подстановки функций *P* и применения метода среднего поля выражение становится следующего вида:

$$k = \frac{e^{\mu}}{e^{\mu} - 1 + (1 + e^{\theta - \mu(n-1)(n-2)r})^4}$$
(2.14)

3 Анализ решения

Для начала рассмотрим решения уравнения (2.9), так как значения p и k зависит от них. Для наглядности на рисунке 3.1 приведены графики правой и левой части уравнения (2.9) при разных значениях μ и θ . Как видно из графиков, существует три различных варианта на количество решений.

Разберем первый случай, отображенный на рисунке 3.1 а). По данному графику у уравнения (2.9) 1 решение, соответствующее большому значению $r \approx 1$. Такие значения r, исходя из (2.11) соответствуют большому значению k, то есть большому количеству четырехугольников.

Вторым случаем рассмотрим график, приведенный на Рисунок 3.1 в). Данный график соответствует случаю, когда у уравнения (2.9) также 1 решение. Однако это решение соответствет малому значению $r \ll 1$, а значит и малому значению $k \ll 1$. Получается, данный случай соответствует малому количеству четырехугольников.

Последний случай, отображенный на рисунке 3.1 в) соответствует 3 решениям. Первые два соответствуют предыдущим двум случаям. Третье же решение соответствует 0 < r < 1. Такой случай можно интерпретировать как смешанный.

Отметим, что в рисунке 3.1 в) только случаи большого и малого количества четырехугольников соответствуют минимумам свободной энергии. Третье решение же является неустойчивым. Такое поведение системы соответствует описанию фазового перехода второго рода с критической точкой. Таким образом, можно говорить, что система имеет фазы с симметрией и нарушенной симметрией. Ситуации с большим и малым количеством четырехугольников будем называть режимами повышенной и пониженной плотности четырехугольников соответственно.

На рисунках 3.2 и 3.3 приведены графики p, r и k как функций от параметра μ . Рисунок 3.2 отображает ситуацию смешанного режима повышенной и пониженной плотностей четырехугольников. Рисунок 3.3 отображает переход от режима пониженной плотности к режиму повышенной плотности.

На рисунке 3.4 изображена фазовая диаграмма с критической точкой, которая, как видно на рисунке, находится в области $\theta \sim \frac{n^2 \mu}{10}$.



Рисунок 3.1 — Графики функций r(r)
иr.а) при $\theta\ll 0.1\mu n^2,$ б) пр
и $\theta\sim 0.1\mu n^2,$ в) при $\theta\gg 0.1\mu n^2$



Рисунок 3.2 — для решений при значении параметра $\theta=2$ и количестве вершин в графе n=100. а) - $p(\mu)$, б) - $r(\mu)$, в) - $k(\mu)$



Рисунок 3.3 — для решений при значении параметра $\theta=0.2$ и количестве вершин в графеn=100.а) - $p(\mu),$ б) - $r(\mu),$ в) - $k(\mu)$



Рисунок 3.4 — Фазовая диаграмма в пространстве внешних параметров

4 Численное решение

4.1 Описание метода

Исследуемая сеть является видом экспоненциального графа. Для таких систем хорошим численными методом является метод Монте-Карло. Этот метод включает в себя выполенение определенного количества итераций, алгоритм которых для каждой системы определяется из следующих соображений: допустим измнение исследуемых величин в графе *G*. Тогда с вероятностью:

$$p = \frac{P(G_{ch})}{P(G)} \tag{4.1}$$

допускаются эти изменения. Для экспоненциальных графов справедлив следующий переход:

$$p = \begin{cases} e^{H(G) - H(G_{ch})}, & H(G) - H(G_{ch}) < 0\\ 1, & H(G) - H(G_{ch}) > 0 \end{cases}$$
(4.2)

Приведем алгоритм изумитераций для исследуемой системы:

- 1) Выбирается случайная пара вершин
- Считаем количество четырехугольников Δ в графе, содержащих ребро между вершинами (в случае если нет ребра, то считается количество четырехугольников как если бы оно было)
- Если между выбранными вершинами изначально не было ребра, то возможны два случая:
 - 3.1) $-\theta + \mu \Delta > 0$, тогда ребро добавляется
 - 3.2) $-\theta + \mu \Delta < 0$, тогда ребро добавляется с вероятность $e^{-\theta + \mu \Delta}$
- 4) Если между выбранными вершинами изначально было ребро, то также рассматриваются два случая:
 - 4.1) $\theta \mu \Delta > 0$, тогда ребро уничтожается
 - 4.2) $\theta \mu \Delta < 0$, тогда ребро уничтожается с вероятность $e^{\theta \mu \Delta}$

Выбор количества необходимых итераций показан в следующем разделе.

4.2 Эволюция сети

Можно определить критерий останова, как достижение стабильного состояния, то есть требовать разность измеряемой величины f очень малой по сравнению с задаваемой точностью ε :

$$\Delta f \ll \varepsilon \tag{4.3}$$



Рисунок 4.1 — Количество исследуемых величин в зависимости от итераций а) - количетсво ребер, б) - количество четырехугольников

Справедливость того, что критерий останова сработает следует из исследования эволюции сети. Приведем графики эволюции исследуемых величин сети, а также эволюцию самой сети.

Как видно из графиков, исследуемые величины ожидаемо выходят на некоторое плато.

Покажем эволюцию присоединенной матрицы графа в зависимости от итераций:



Рисунок 4.2 —
а) - при 0 итераций, б) при 1000 итераций, в) при 10 5 и
тераций

4.3 Результаты

Для случаев, приведенных в анализе решения на рисунках 3.2 и 3.3, были посчитанным описанным методом значения *p* и *k*. На рисунках 4.3.1 и 4.3.2 приведены графики для указанных случаев с наложением численных значений. Как можно заметить, форма и значения с хорошей точностью совпадают.



Рисунок 4.3 — для решений при значении параметра $\theta = 0.2$ и количестве вершин в графе n = 100. Точками обозначены результаты вычислений методом Монте-Карло. а) - $p(\mu)$, б) - $k(\mu)$



Рисунок 4.4 — для решений при значении параметра $\theta = 2$ и количестве вершин в графе n = 100. Точками обозначены результаты вычислений методом Монте-Карло. а) - $p(\mu)$, б) - $k(\mu)$

5 Заключение

В данной работе было исследованно поведение случайной сети в модели четырехугольника. Было получено, что в данной модели существует фазовый переход второго рода с критической точкой. Полученное аналитическое решение было проверено численным экспериментом. Результаты совпали с приемлемой точностью. Интересно отметить, что поведение данной модели схоже с поведением модели треугольников и, т.н. *two – star* моделью, где гамильтонианы записывается следующим образом соответственно

$$H_{\Delta} = \theta \sum_{i < j} \sigma_{ij} - \mu \sum_{i < j < k} \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{ki} \quad H_{ts} = \beta \sum_{i < j} \sigma_{ij} - \mu \sum_{i} \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j} \sigma_{ij} \sigma_{jk} \quad (5.1)$$

Данное сходство позволяет построить предположение, что схожие системы с более высоким порядком цикла будут иметь схожее поведение.

6 Приложение

6.1 Переход в методе среднего поля

Необходимо обосновать переход от (2.3) к (2.4), так как метод среднего поля не подразумевает переход от усреднения гиперболического тангенса к гиперболическому тангенсу усреднения.

Для этого обозначим:

$$S = \sum_{k,l \neq i,j} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li} = \sum S_{kl}$$

Далее под знаком среднего разложим гиперболический тангенс:

$$< \tanh\left[\theta + \mu S\right] > = <\sum \frac{\tanh^{(m)}(\theta)\mu^m}{m!} S^m > =\sum \frac{\tanh^{(m)}(\theta)\mu^m}{m!} < S^m >$$

Второй переход возможен, так как
 $\theta,\,\mu$ и m - постоянные параметры. Рассмотрим конкр
етнее $< S^m >:$

$$< S^{m} > = < \underbrace{\left(\sum S_{kl}\right) \left(\sum S_{kl}\right) \dots \left(\sum S_{kl}\right)}_{m} \sum_{m} = a_{m1} < S_{11} + S_{12} + \dots + S_{21} + \dots > + a_{m2} < S_{11}S_{12} + S_{11}S_{13} + \dots > + \dots = a_{m1}r(n-2)(n-3) + a_{m2}r^{2}C_{2}^{(n-2)(n-3)} + \dots = \sum_{w} a_{mw}r^{w}C_{w}^{(n-2)(n-3)}$$

При больших значениях *n* можно воспользоваться формулой Стирлинга и привести сумму к виду:

$$\langle S^m \rangle \approx \sum_w a_{mw} r^w \frac{(n-2)^w (n-3)^w}{w!}$$

Заметим, что коэффициенты a_{mw} имеют смысл количества возможностей выбора S_{kl} из каждой суммы в произведении. Данные коэффициенты совпадают с коэффициентами разложения функции $(e^x - 1)^w$, то есть их можно выразить следующим образом:

$$a_{mw} = \frac{\partial^m}{\partial x^m} (e^x - 1)^w \bigg|_{x=0}$$

Тогда полученная сумма свернется следующим образом:

$$= \frac{\partial^{m}}{\partial x^{m}} \sum r^{w} \frac{(e^{x}-1)^{w}(n-1)^{w}(n-2)^{w}}{w!} \bigg|_{x=0} = ((n-1)(n-2)r)^{m} + o(n^{m-1})$$

Как можно увидеть, полученный результат совпадает в первом порядке разложения с (2.4) при больших значениях n.

6.2 Обозначенные функции

В данном разделе приведены явный вид функций, использумемы в (2.?) и (2.?)

$$\ln P_{1111} = -\theta \sum_{i,j \neq k,l} \sigma_{ij} - 4\theta + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{kl} + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{li} + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{kl} \sigma_{li} + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{kl} \sigma_{li}$$
(6.1)

$$\ln P_{111} = -\theta \sum_{i,j \neq k,l} \sigma_{ij} - 3\theta + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{kl} + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{li} + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{kl} \sigma_{li} \quad (6.2)$$

$$\ln P_{11} = -\theta \sum \sigma_{ij} - \theta + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{kl} \sigma_{li} - \theta \sum \sigma_{ij} - \theta + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{li}$$
(6.3)

$$\ln P_1 = -\theta \sum \sigma_{ij} - \theta + \mu \sum \sigma_{ij} \sigma_{kl} \sigma_{li}$$
(6.4)

$$\ln P_0 = -\theta \sum \sigma_{ij} \tag{6.5}$$

Литература

- Phase transitions in Ising models on directed networks / Adam Lipowski, António Luis Ferreira, Dorota Lipowska [и др.] // Physical Review E. 2015. Nov. T. 92, № 5. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.92.052811.
- [2] Aleksiejuk Agata, Hołyst Janusz A., Stauffer Dietrich. Ferromagnetic phase transition in Barabási–Albert networks // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2002. Jul. T. 310, № 1-2. c. 260–266. URL: http://dx.doi.org/10.1016/S0378-4371(02)00740-9.
- [3] Dorogovtsev S. N., Mendes J. F. F. Evolution of networks // Advances in Physics. 2002. Jun. T. 51, № 4. c. 1079–1187. URL: http://dx.doi.org/10.1080/00018730110112519.
- [4] T Nikoletopoulos1 A C C Coolen I Pérez Castillo N S Skantzos J P L Hatchett1, Wemmenhove B. Journal of Physics A: Mathematical and General Replicated transfer matrix analysis of Ising spin models on 'small world' lattices // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2004. June. T. 37, № 25.
- [5] A C C Coolen N S Skantzos I Pérez Castillo C J Pérez Vicente J P L Hatchett B Wemmenhove, Nikoletopoulos T. Finitely connected vector spin systems with random matrix interactions // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2005. September. T. 38, № 39.
- [6] Dorogovtsev S. N., Goltsev A. V., Mendes J. F. F. Correlations in interacting systems with a network topology // Physical Review E. 2005. Dec. T. 72, № 6. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.72.066130.
- [7] Trugenberger Carlo A. Combinatorial quantum gravity: geometry from random bits // Journal of High Energy Physics. 2017. Sep. T. 2017, № 9. URL: http://dx.doi.org/10.1007/JHEP09(2017)045.
- [8] Dorogovtsev S. N., Goltsev A. V., Mendes J. F. F. Critical phenomena in complex networks // Reviews of Modern Physics. 2008. Oct. T. 80, № 4. c. 1275–1335. URL: http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.80.1275.
- [9] Goltsev A. V., Dorogovtsev S. N., Mendes J. F. F. Critical phenomena in networks // Physical Review E. 2003. Feb. T. 67, № 2. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.67.026123.
- [10] Metz Fernando L., Castillo Isaac Pérez. Condensation of degrees emerging through a first-order phase transition in classical random graphs // Physical Review E. 2019. Jul. T. 100, № 1. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.100.012305.
- [11] Fronczak Agata. Exponential random graph models. 2012. URL: https://arxiv.org/abs/1210.7828.

- [12] Annibale A, Courtney O T. The two-star model: exact solution in the sparse regime and condensation transition // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2015. Aug. T. 48, № 36. c. 365001. URL: http://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/48/36/365001.
- [13] Park Juyong, Newman M. E. J. Solution for the properties of a clustered network // Physical Review E. 2005. Aug. T. 72, № 2. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.72.026136.