

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

КРАСНИЦЬКА Мар'яна Богданівна

УДК 537.9

ДИСЕРТАЦІЯ

КОЛЕКТИВНА ПОВЕДІНКА НА СКЛАДНИХ МЕРЕЖАХ: ФУНДАМЕНТАЛЬНІ АСПЕКТИ ТА ЗАСТОСУВАННЯ

01.04.02 — теоретична фізика

(104 — фізика та астрономія)

10 — природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело



М.Б. Красницька

Науковий консультант Головач Юрій Васильович, доктор фіз.-мат. наук,
професор, академік НАН України

Львів — 2025

АНОТАЦІЯ

Красницька М.Б. Колективна поведінка на складних мережах: фундаментальні аспекти та застосування. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук (доктора наук) за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 — Фізика та астрономія). — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2025.

Дисертаційна робота стосується дослідження колективної поведінки складних систем, а саме з'ясування особливостей фазових переходів у магнетиках з нетривіальною архітектурою, явища впорядкування у класичних моделях статистичної фізики та у їх модифікаціях на складних мережах. Багато особливостей колективної поведінки і впорядкування у багаточастинкових системах можна зрозуміти та кількісно описати за допомогою аналізу конкуренції між ентропією та енергією. Якщо розглянути як приклад магнітне впорядкування, баланс енергія-ентропія дозволяє пояснити відсутність спонтанної намагніченості при низьких вимірностях простору або вплив структурного (топологічного) безладу на магнітне впорядкування. Тому багато уваги приділено аналізу явищ впорядкування в багаточастинкових системах шляхом введення моделей, які дають прямий доступ до здійснення кількісного опису ентропійного впливу на систему.

Було проаналізовано критичну поведінку моделі Поттса з невидимими станами на графах різної топології. Для цієї моделі вводять “невидимі” стани r , для яких спіни, що перебуває у одному з цих станів, не взаємодіє з іншими спінами у системі і r відіграє роль параметра, який регулює рід фазового переходу. У випадку моделі Поттса із q взаємодіючими (“видимими”) станами перехід першого роду відбувається починаючи з певного граничного значення r_c . Для моделі Поттса з невидимими станами при $q = 2$ раніше було встановлено, що зміна відбувається при великих r (для $d = 2$) і значення в межах аналізу середнього поля становить $3 < r_c < 4$. Для моделі Поттса на повному графі для $q = 2$ було отримано точнішу

оцінку граничного значення $r_c \simeq 3.65(5)$. Подальший чисельний аналіз стосувався пошуку точних значень для маргінальних вимірностей, що характеризують різні типи критичної поведінки для моделі з невидимими станами. Було проаналізовано область значень $1 \leq q < 2$. Було виявлено, що механізм який змінює порядок фазового переходу у цьому випадку є нетривіальним і раніше не спостерігався. А саме: є два граничні значення, r_{c1} і r_{c2} , що характеризують температурну поведінку першої похідної від вільної енергії. При r_{c1} стрибок першої похідної з'являється при певній температурі $\tilde{t} < t_c$, однак перехід при t_c залишається другого роду. Розрив збільшується і рухається до t_c з подальшим збільшенням r , і при r_{c2} досягає t_c : перехід стає першого роду. Граничні вимірності r_{c1} і r_{c2} є функціями q . Наведені вище спостереження показують істотну різницю в поведінці моделі Поттса з невидимими станами при $q = 2$ і при $1 \leq q < 2$.

При дослідженні моделі Поттса з невидимими станами на відпаленій безмасштабній мережі, де імовірність, що випадково обраний вузол має ступінь k описується степеневим законом ($P(k) \sim k^{-\lambda}$) результати підтверджують, що q , r та λ відіграють роль глобальних параметрів, що визначають критичну поведінку системи. Залежно від їх значень, фазова діаграма складається із трьох областей з різною критичною поведінкою. Встановлено, що додавання невидимих станів викликає додатковий фазовий перехід першого роду, який для певного діапазону r існує поряд з фазовим переходом, який існував при $r = 0$. Це означає, що топологічний та ентропійний ефекти на фазовий перехід є незалежними. Слід зауважити, що вплив топології, який представлений граничними значеннями $\lambda_c(q)$, домінує над ентропійним фактором, що визначається кількістю невидимих станів r .

Розглянувши випадок перколяції вузлів ($q \rightarrow 1$) для моделі Поттса з невидимими станами на повному графі та відпаленій безмасштабній мережі продемонстровано, що велика кількість невидимих станів r змінює фазовий перехід на перехід першого роду. Таким чином, запропоновано ще один механізм генерування перколяційного переходу. Цей механізм відрізняється від уже відомих механізмів вибухової чи гібридної перколяції.

В рамках дослідження критичної поведінки спінових моделей на складних мережах запропоновано нове узагальнення моделі Ізінга, коли довжина (інтенсивність) окремого спіну $\mathcal{S}$ може змінюватися. Модель призначена для аналізу впорядкування в системах, що складаються з агентів із бінарною опозицією, а розподіл довжин спіна підкоряється степеневому закону розподілу $q(\mathcal{S}) \sim \mathcal{S}^{-\mu}$, який регулюється показником μ . Було розглянуто модель на повному графі, графі Ердоша-Рені та на відпаленій безмасштабній мережі. Отримано вирази для вільної енергії та термодинамічних функцій, проаналізовано фазову поведінку моделі й результати підсумовано на фазовій діаграмі. У випадку моделі на безмасштабній мережі використано наближення відпаленої мережі, що призводить до самоусереднення термодинамічних функцій. Встановлено, що конкуренція двох степеневих законів значним чином впливає на процеси впорядкування у моделі, а локальні характеристики (інтенсивність спінової змінної на вузлі) впливають на критичну поведінку рівнозначно із глобальними – топологічними характеристиками мережі.

Для моделі Ізінга з випадковою довжиною спіна на різних типах графів було розраховано універсальні критичні характеристики фазового переходу другого роду, а саме: критичні показники та показники логарифмічних поправок, знайдено два нові класи універсальності для логарифмічних поправок для моделі на відпаленій безмасштабній мережі. А також отримано вирази для скейлінгових функцій та відношення критичних амплітуд у різних діапазонах параметрів. Встановлено, що критична поведінка у випадку моделі зі змінною довжиною на безмасштабній мережі визначається меншим із показників загасання функцій розподілу для довжини спіна μ чи ступеня вузла λ .

Вплив структурного безладу на виникнення магнітного впорядкування в регулярних (ґраткових) системах становить значний інтерес. На сьогоднішній день добре встановлено, що навіть слабе розведення немагнітними компонентами може призвести до кардинальних змін у поведінці магнітно-впорядкованих систем. Наслідки розведення залежать від його характеру. Було розглянуто випадок, коли випадкові структурні дефекти пов'язані з локальною густиною енергії. Структурно-невпорядковані магнетики переважно описуються як модель із магні-

тною та немагнітною (домішка) компонентами. Вперше показано, що домішки не обов'язково повинні бути немагнітними, щоб викликати однакові ефекти в критичній поведінці. Ключовим інгредієнтом для зміни критичної поведінки є сам структурний безлад. Для цього запропоновано застосувати до опису проблеми модифіковану модель Ізінга, де спіни можуть набувати різної довжини. Для моделі на тривимірній ґратці отримано представлення для ефективного гамільтоніана, а також, застосовуючи теорію ренормгрупи (РГ), знайдено ефективні критичні показники. Аналітичні результати були підтверджені результатами Монте-Карло симуляцій для суміші зі спінами двох довжин ($\hat{L} = 1$ і $\hat{L} = s$) при різному наборі параметрів, що відповідають різній поведінці скейлінгових поправок отриманих із теоретико-польового аналізу РГ. Базуючись на РГ аналізі ефективних показників було промодельовано критичну поведінку для системи з двома наборами параметрів: $s = 1,7$ (з концентрацією $c = 0,53$) і $s = 3$ (з концентрацією $c = 0,79594$). Підтверджено, що для опису поведінки у неупорядкованих системах можна застосовувати моделі з кількома магнітними компонентами, де довжина спіну та концентрація використовуються для налаштування критичних властивостей.

Для тристанової спінової моделі вперше проаналізовано поведінку на повному графі використовуючи формалізм нулів статистичної суми. Було розглянуто модель Блюма-Капеля на повному графі, де спіни можуть приймати значення $\pm 1, 0$. На повному графі всі спіни взаємодіють один з одним із однаковою силою, що рівнозначно наближенню середнього поля. Тому в термодинамічній границі ця задача є точно розв'язуваною. Метод нулів статистичної суми є альтернативою для аналізу критичної поведінки: з аналізу їх універсальних співвідношень та асимптотик можна отримати значення критичних показників. Використовуючи перетворення Стратоновича-Габбарда було отримано точне представлення для статистичної суми. Досліджено нулі розкладеної статистичної суми при комплексній температурі, комплексному зовнішньому магнітному полі (відповідно нулі Фішера та Лі-Янга), а також комплексному кристалічному полі, яке контролює анізотропію. Головний інтерес становило дослідження відмінностей критичної та трикритичної поведінки для системи скінченного розміру і спостереження крос-

соверу між цими двома режимами. Отримані кути перетину нулів з дійсною віссю та асимптотики скінченновимірною скейлінгу задовільняють очікувані співвідношення для показників та критичних амплітуд.

Дослідження колективних ефектів на складних мережах, а також дослідження самої структури складних мереж було реалізовано для декількох прикладів. Так, було представлено результати застосування теорії складних мереж для дослідження двох типів мереж – соціальної мережі співавторства авторів журналу та семантичної мережі понять. Проаналізовано співпрацю українських авторів “Журналу фізичних досліджень” (ЖФД) за 1996–2016 роки та побудовано мережі співпраці між авторами з України. Розглянуто основні мережеві характеристики такої системи та її еволюцію. При аналізі мережі наукових понять, було опрацьовано вибірку, що складається з 36 386 препринтів, поданих до електронного сховища arXiv.org протягом 2013 року, які були віднесені до однієї категорії під час процесу подання. Для кожного з рукописів набір властивих йому понять було виділено за допомогою платформи ScienceWISE. Отримана мережа емпіричних понять складалась з $N = 11853$ вузлів, з’єднаних $L = 5382448$ зв’язками. Вона характеризувалася високою щільністю зв’язків, дисортативністю, розбіжністю між транзитивністю і середнім коефіцієнтом кластерності, а також асиметричним розподілом ступенів вузлів. Ймовірність спільної появи двох понять складала приблизно 7,66%, що свідчить про сильний взаємозв’язок між ними. Традиційні моделі, як-от граф Ердоша–Рені та модель Барабаші–Альберта, не змогли відтворити ці властивості. Тому була запропонована генеративна модель, що враховувала два механізми: зростання за блоками та переважний вибір понять. Вона імітує появу нових понять як групи пов’язаних вузлів та їх інтеграцію в існуючу мережу. Цей підхід пояснює формування зв’язків між раніше незалежними науковими галузями. Модель успішно відтворює властивості емпіричних мереж і може бути корисною для вивчення інших щільних мереж понять.

Ключові слова: складні мережі, складні системи, фазові переходи, критичні показники, спінові системи, перколяція, нулі статистичної суми, структурно-невпорядковані магнетики, мережі співавторства, семантичні мережі.

ABSTRACT

Krasnytska M.B. Collective behavior on complex networks: fundamental aspects and applications. — Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the Degree of Doctor of Sciences in Physics and mathematics on the speciality 01.04.02 “Theoretical Physics” (104 — Physics and Astronomy). — Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2025.

The thesis is concerned with the study of the collective behavior of complex systems, namely the investigation of the features of phase transitions in magnets with nontrivial architecture, the phenomenon of ordering in classical models of statistical physics, and in their modifications on complex networks. Many aspects of collective behavior and ordering in many-body systems can be understood and quantitatively described by analyzing the competition between entropy and energy. For example, in the case of magnetic ordering, the energy–entropy balance allows one to explain the absence of spontaneous magnetization in low spatial dimensions or the influence of structural (topological) disorder on magnetic ordering. Therefore, much attention is devoted to analyzing ordering phenomena in many-body systems by introducing models that provide direct access to a quantitative description of the entropic influence on the system.

The critical behavior of the Potts model with invisible states on graphs of various topologies was analyzed. In this model, “invisible” states r are introduced such that a spin occupying one of these states does not interact with other spins in the system, and r serves as a parameter that regulates the order of the phase transition. In the case of the Potts model with interacting (“visible”) states q , a first-order transition occurs starting from a certain threshold value r_c . For the Potts model with invisible states at $q = 2$, it was previously established that the change occurs at large r (for $d = 2$), with the mean-field analysis yielding a value in the range $3 < r_c < 4$. For the Potts model on a complete graph with $q = 2$, a more precise estimate of the threshold value was obtained: $r_c \simeq 3.65(5)$. Further numerical analysis focused on the initial steps toward

finding exact values for the marginal dimensions that characterize different types of critical behavior for the model with invisible states. The range $1 \leq q < 2$ was analyzed with the aim of better understanding how r_c changes with q . It was found that the mechanism which alters the order of the phase transition in this case is nontrivial and had not been observed before. Namely, there exist two marginal values, r_{c1} and r_{c2} , which characterize the temperature behavior of the first derivative of the free energy. At r_{c1} a jump in the first derivative appears at a certain temperature $\tilde{t} < t_c$, while the transition at t_c remains of the second order. The discontinuity increases and shifts toward t_c with further increasing r , and at r_{c2} it reaches t_c : the transition becomes first order. The marginal dimensions r_{c1} and r_{c2} are functions of q . The observations above demonstrate a significant difference in the behavior of the Potts model with invisible states at $q = 2$ compared to $1 \leq q < 2$.

When studying the model on an annealed scale-free network, where the probability that a randomly chosen node has degree k is described by a power-law distribution ($P(k) \sim k^{-\lambda}$), the results confirm that q , r , and λ act as global parameters determining the critical behavior of the system. Depending on their values, the phase diagram consists of three regions with different critical behaviors. It was established that the addition of invisible states induces an additional first-order phase transition, which, for a certain range of r , coexists with the phase transition that exists at $r = 0$. This means that the topological and entropic effects on the phase transition are independent. It should be noted that the impact of topology, represented by the threshold values $\lambda_c(q)$, dominates over the entropic factor determined by the number of invisible states r .

Considering the case of node percolation ($q \rightarrow 1$) for the Potts model with invisible states on a complete graph and on an annealed scale-free network, it was demonstrated that a large number of invisible states r changes the phase transition to a first-order transition. Thus, another mechanism for generating a percolation transition is proposed. This mechanism is distinct from the already known mechanisms of explosive or hybrid percolation.

Within the framework of studying the critical behavior of spin models on complex networks, a new generalization of the Ising model has been proposed in which the length

(magnitude) $\mathcal{S}$ of an individual spin can vary. The model is designed for analyzing ordering in systems composed of agents with binary opposition, and the distribution of spin lengths obeys a power-law distribution $q(\mathcal{S}) \sim \mathcal{S}^{-\mu}$, which is regulated by the exponent μ . The model was considered on a complete graph, an Erdős–Rényi graph, and an annealed scale-free network. Expressions for the free energy and thermodynamic functions were derived, the phase behavior of the model was analyzed, and the results were summarized in a phase diagram. In the case of the model on a scale-free network, an annealed network approximation was used, which leads to self-averaging of the thermodynamic functions. It was established that the competition between two power laws significantly affects the ordering processes in the model, and local characteristics (the intensity of the spin variable at a node) influence the critical behavior on an equal footing with the global – topological – characteristics of the network or graph.

For the model on different types of graphs, universal critical characteristics of the second-order phase transition were calculated, namely: critical exponents and logarithmic correction exponents; two new universality classes for logarithmic corrections were found for the model on an annealed scale-free network. In addition, expressions for the scaling functions of the model and the ratios of critical amplitudes in different parameter ranges were obtained. It was established that the critical behavior in the case of the model with variable spin length on a scale-free network is determined by the smaller of the decay exponents of the distribution functions for the spin length μ or the node degree λ .

The influence of structural disorder on the emergence of magnetic ordering in regular (lattice) systems is a primary interest in modern theories of phase transitions and critical phenomena. It is well established that even weak dilution with non-magnetic components can lead to dramatic changes in the behavior of magnetically ordered systems. The consequences of dilution depend on its nature. The case was considered where random structural imperfections are associated with local energy density. Structurally disordered magnets are typically described by a model with magnetic and non-magnetic (impurity) components. For the first time, it was shown that impurities do not necessarily have to be non-magnetic to induce similar effects

in the critical behavior. The key ingredient for these modifications is the structural disorder itself. To address this problem, a modified Ising model was proposed, in which spins can acquire different lengths. For the model on a three-dimensional lattice, a representation for the effective Hamiltonian was obtained, and, using renormalization group (RG) theory, the effective critical exponents were determined. The analytical results were confirmed by Monte Carlo simulations for a mixture of spins of two different lengths ($\hat{L} = 1$ and $\hat{L} = s$) for various sets of parameters corresponding to different behaviors of the scaling corrections obtained from the field-theoretical RG analysis. Based on the RG analysis of the effective exponents, the critical behavior for a system with two sets of parameters was modeled: $s = 1.7$ (with concentration $c = 0.53$) and $s = 3$ (with concentration $c = 0.79594$). Accordingly, it was confirmed that to describe the behavior in disordered systems, one can use models with multiple magnetic components, where both the spin length and concentration are used to tune the critical properties.

For the three-state spin model, the behavior on a complete graph was analyzed for the first time using the formalism of partition function zeros. The Blume–Capel model on a complete graph was considered, where spins can take the values ± 1 and 0 . On a complete graph, all spins interact with each other with equal strength, which is equivalent to the mean-field approximation. Therefore, in the thermodynamic limit, this problem is exactly solvable. The partition function zeros method is an alternative for analyzing critical behavior: from the analysis of their universal ratios and asymptotics, one can obtain the values of the critical exponents. Using the Stratonovich–Hubbard transformation, an exact representation for the partition function of the model was obtained. The expanded partition function zeros were investigated at complex temperature, complex external magnetic field (corresponding to Fisher and Lee–Yang zeros, respectively), and complex crystal field, which controls anisotropy. The main interest was in studying the differences between critical and tricritical behavior and observing the crossover between these two regimes for a finite-size system. The obtained intersection angles of the zeros with the real axis and the asymptotics of the finite-size scaling satisfy the expected relations for the exponents and critical ampli-

tudes.

The study of collective effects on complex networks, as well as the investigation of the structure of complex networks themselves, was carried out for several examples. For instance, results were presented on the application of complex network theory to study two types of networks – the social co-authorship network of the journal’s authors and the semantic network of concepts. The collaboration of Ukrainian authors of the “Journal of Physical Studies” (ЖФД) during the period 1996–2016 was analyzed, and co-authorship networks among Ukrainian authors were constructed. The main network characteristics of this system and its evolution were examined. In the analysis of the network of scientific concepts, a dataset consisting of 36,386 preprints submitted to the electronic repository arXiv.org during 2013, which were assigned to a single category during the submission process, was processed. For each manuscript, a set of inherent concepts was identified using the ScienceWISE platform. The resulting network of empirical concepts consisted of $N = 11853$ nodes connected by $L = 5382448$ links. It was characterized by a high link density, disassortativity, a discrepancy between transitivity and the average clustering coefficient, as well as an asymmetric distribution of node degrees. The probability of the co-occurrence of two concepts was approximately 7.66%, indicating a strong interconnection between them. Traditional models, such as the Erdős–Rényi graph and the Barabási–Albert model, were unable to reproduce these properties. Therefore, a generative model was proposed that accounted for two mechanisms: block growth and preferential selection of concepts. It simulates the emergence of new concepts as groups of connected nodes and their integration into the existing network. This approach explains the formation of links between previously independent scientific fields. The model successfully reproduces the properties of empirical networks and may be useful for studying other dense conceptual networks.

Key words: complex networks, complex systems, phase transitions, critical indices, spin systems, percolation, partition function zeros, structurally disordered magnets, co-authorship networks, semantic networks.

Список публікацій здобувача

1. Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Marginal dimensions of the Potts model with invisible states // *J. Phys. A: Math. Theor.* – 2016. – Vol. 49. – P. 255001.
2. Головач Ю., Красницька М., Мриггод О., Ровенчак А. 20 років “Журналу фізичних досліджень”: Спроба журналометричного аналізу // *Журн. фіз. дослідж.* – 2017. – Vol.21, no 4. – P. 4001.
3. Головач Ю., Дудка М., Блавацька В., Пальчиков В., Красницька М., Мриггод О. Статистична фізика складних систем // *Журн. фіз. дослідж.* – 2017. – Vol. 22, No.2. – P. 2801.
4. Sarkanych P., Krasnytska M. Ising model with invisible states on scale-free networks // *Phys. Lett. A.* – 2019. – Vol.383, No. 27. – P. 125844:1–5.
5. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Ising model with variable spin/agent strengths // *J. Phys. Complex.* – 2020. – Vol. 1. – P. 035008.
6. Palchykov V., Krasnytska M., Mryglod O., Holovatch Yu. A mechanism for evolution of the physical concepts network // *Condens. Matter Phys.* – 2021. – Vol. 24, No. 2. – P. 24001.
7. Palchykov V., Krasnytska M., Mryglod O., Holovatch Yu. Network of scientific concepts: empirical analysis and modeling // *Adv. Complex Syst.* – 2021. – Vol. 21, No.1. – P. 2140001.
8. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Generalized Ising model on a scale-free network: an interplay of power laws // *Entropy.* – 2021. – Vol. 23, No. 9. – P. 1175.
9. Sarkanych P., Krasnytska M. Potts model with invisible states on a scale-free network // *Condens. Matt. Phys.* – 2023. – Vol. 26, No.1. – P. 13507.
10. Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Potts model with invisible states: a review // *Eur. Phys. J. Special Topics.* – 2023. – P. 1951–6401.
11. Dudka M., Krasnytska M., Ruiz-Lorenzo J., Holovatch Yu. Effective and

asymptotic criticality of structurally disordered magnets // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2023. – Vol. 575. – P. 170718.

12. Krasnytska M. Ising model with varying spin strength on a scale-free network: scaling functions and critical amplitude ratios // *Condens. Matt. Phys.* – 2024. – Vol. 27, No.3. – P. 33603:1–10.

13. Ruiz-Lorenzo J., Dudka M., Krasnytska M., Holovatch Yu. Emergence of the 3D diluted Ising model universality class in a mixture of two magnets // *Phys. Rev. E*. (accepted) – 2025. – [arXiv:2411.16659](#).

14. Honchar Yu., Krasnytska M., Holovach Yu., Berche B., Kenna R.. Partition function zeros for the Blume-Capel model on a complete graph // *Low Temp. Phys.* (submitted). – 2025. – [arXiv:2501.04452](#).

15. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Critical behavior on complex networks: inhomogeneous mean-field vs Lee-Yang-Fisher formalism // 42nd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Lyon (France), February 8-10, 2017. – Lyon, 2017. – P. 27.

16. Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Marginal dimensions of the Potts model with invisible states // 42nd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Lyon (France), February 8–10, 2017. – Lyon, 2017. – P. 119.

17. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu. Ising model with power-law spin length distribution // Christmas Discussions 2018, Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv (Ukraine), January 11–12, 2018. – Lviv, 2018. – P. 10.

18. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu. Ising model with a power-law spin length distribution on different graphs // 43rd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Krakow (Poland), May 1–4, 2018. – Krakow, 2018. – P. 70.

19. Красницька М., Берш Б., Головач Ю. Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна // 18-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів (Україна), Червень

7–8, 2018. – Львів, 2018. – Тези доповідей.

20. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu. New critical behaviour in a complex system induced by two competing power laws // Workshop on Current Problems in Physics, Lviv (Ukraine), July 3–4, 2018. – Lviv, 2018. – P. 11.

21. Головач Ю., Гончар Ю., Красницька М., Дудка М. Фізика і фізики в НТШ у Львові // Різдвяні дискусії – 2019, кафедра теоретичної фізики ЛНУ ім. І. Франка, Львів (Україна), January 10–11, 2019. – Львів, 2019. – P. 4.

22. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Self-averaging on annealed networks // 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, dedicated to the 110th Anniversary of the Birth of M. M. Bogolyubov, Lviv (Ukraine), July 3–6, 2019. – Lviv, 2019. – P. 40.

23. Sarkanych P., Krasnytska M. Ising model with invisible states on scale-free networks // 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, dedicated to the 110th Anniversary of the Birth of M. M. Bogolyubov, Lviv (Ukraine), July 3–6, 2019. – Lviv, 2019. – P. 61.

24. Sarkanych P., Krasnytska M. Critical behaviour of the Ising model with invisible states on a scale-free network // 45th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Online, September 14–16, 2020. – Online, 2020. – P. 32.

25. Berche B., Dudka M., Folk R., Holovatch Yu., Kenna R., Krasnytska M., Mryglod O., Sarkanych P., Sznajd J. Middle European Cooperation in Statistical Physics: a historical overview // 45th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Online, September 14–16, 2020. – Online, 2020. – P. 20.

26. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states: critical behaviour on a scale-free network // 46th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO46), Online, May 11–13, 2021. – Online, 2021. – P. 103.

27. Красницька М., Головач Ю. Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна на безмасштабній мережі // XXI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів (Україна),

ЖОВТЕНЬ 11–12, 2021. – ЛЬВІВ, 2021. – P. 18.

28. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states on a scale-free network // 13th Workshop on Current Problems in Physics, Lviv (Ukraine), October 26–27, 2021. – Lviv, 2021. – P. 11.

29. Krasnytska M. Ising model with varying spin strength on a scale-free network: scaling functions and critical amplitudes ratios // 47th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO47), Online, June 12–16, 2022. – Online, 2022.

30. Krasnytska M. Degree vs strength: an interplay of power laws for the Ising model on networks // Statistical Physics and Low-Dimensional Systems – 2022, Pont-à-Mousson (France), May 11–13, 2022. – Pont-à-Mousson, 2022.

31. Dudka M., Krasnytska M., Ruiz-Lorenzo J., Holovatch Yu. On the criticality of structurally disordered magnets // DPG Meetings 2023, Dresden (Germany), March 20–24, 2023. – Dresden, 2023. – DY 49.2.

32. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states on a scale-free network // DPG Meetings 2023, Dresden (Germany), March 20–24, 2023. – Dresden, 2023. – DY 45.15.

33. Krasnytska M., Holovatch Yu., Berche B., Kenna R. Ising model with variable spin/agent strengths on graphs // DPG Meetings 2023, Dresden (Germany), March 20–24, 2023. – Dresden, 2023. – DY 45.15.

34. Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Potts model with invisible states, old and new // 48th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO48), Stará Lesná (Slovakia), May 22–26, 2023. – Stará Lesná, 2023. – P. 57.

35. Krasnytska M. Potts model with invisible states: changeover to the percolation transition // SigmaPhi2023 Conference, Chania-Crete (Greece), July 10–14, 2023. – Chania-Crete, 2023.

36. Красницька М., Сарканич П., Берш Б., Головач Ю., Кенна Р. Модель Поттса з невидимими станами: огляд // XXIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини,

Львів (Україна), Жовтень 26–27, 2023. – Львів, 2023. – Р. 16.

37. Krasnytska M., Sarkanych P., Holovatch Yu., Berche B., Kenna R. Invisible states Potts model // Bogolyubov Kyiv Conference Problems of Theoretical and Mathematical Physics, Kyiv (Ukraine), September 24–26, 2024. – Kyiv, 2024. – Р. 40.

38. Гончар Ю., Красницька М., Берш Б., Головач Ю., Кенна Р. Ефективна критична поведінка в моделі Блюма–Капеля на повному графі // XXIV Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів (Україна), Жовтень 24–25, 2024. – Львів, 2024. – Р. 35.

ЗМІСТ

Вступ	21
1 Огляд літератури	34
1.1 Коротка хронологія розвитку науки про складні мережі	35
1.2 Моделі мереж	38
1.3 Типи мереж	40
1.4 Характеристики мереж, що використовують для аналізу	42
1.5 Спінові моделі на мережах та їх застосування	45
1.5.1 Стандартні спінові моделі (модель Ізінга, модель Поттса) на безмасштабній мережі	45
1.5.2 Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна	48
1.5.3 Моделювання безладу	50
1.5.4 Моделі, що дозволяють регулювати рід фазового переходу .	52
1.6 Висновки	57
2 Модель Поттса з невидимими станами на графах різної топології	59
2.1 Огляд, мотивація	59
2.2 Формулювання, точні результати та симуляції	60
2.3 Модель на повному графі	66
2.3.1 Метод неоднорідного середнього поля	66
2.3.2 Випадок $q = 2$	70
2.3.3 Випадок $1 \leq q < 2$	73
2.4 Модель на безмасштабній мережі	76
2.4.1 Сильно скорельовані мережі: $2 < \lambda \leq 3$	80

2.4.2	Діапазон $1 < q \leq 2$	81
2.4.3	Діапазон $q > 2$	83
2.5	Висновки	88
3	Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна на складних мережах	92
3.1	Вступ, мотивація	92
3.2	Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна	94
3.3	Модель на повному графі та графі Ердоша-Рені	96
3.4	Модель на відпаленій безмасштабній мережі	99
3.4.1	Самоусереднення	102
3.4.2	Асимптотична поведінка інтегралів при малих ε	105
3.4.3	Фазова діаграма	110
3.5	Висновки	116
4	Скейлінгові функції класичних моделей статистичної фізики на складних мережах	119
4.1	Вступ, мотивація	119
4.2	Визначення: відношення критичних амплітуд та скейлінгові функції	120
4.3	Вільна енергія та фазова діаграма	122
4.4	Результати	124
4.4.1	Відношення критичних амплітуд	124
4.4.2	Скейлінгові функції	126
4.5	Висновки	128
5	Структурний безлад і магнітне впорядкування: аналітичний підхід і чисельні симуляції	130
5.1	Вступ та мотивація	130
5.2	Функціональне представлення вільної енергії моделі Ізінга з випадковою довжиною спіна	135
5.3	Досліджувані моделі	141
5.3.1	Модель Ізінга з немагнітними домішками	141

5.3.2	Модель Ізінга зі спінами двох різних довжин	142
5.3.3	Порівняння моделей 5.3.1 та 5.3.2	143
5.3.4	Аналітичні результати: ренормгруповий потік та ефективні критичні показники	145
5.3.5	Теоретико-польові розклади ренормгрупи (РГ) та їх пересу- мовування	150
5.4	Симуляції 3D моделі Ізінга зі спінами двох довжин	153
5.4.1	Модель	154
5.4.2	Спостережувані	154
5.4.3	Параметри симуляцій	156
5.4.4	Метод коефіцієнтів (quotients method) і результати	157
5.5	Висновки	161
6	Нулі статистичної суми у комплексній площині у теорії фазових переходів на мережах	165
6.1	Модель: гамільтоніан та статистична сума	166
6.2	Фазова діаграма моделі Блюма-Капеля на повному графі	169
6.3	Аналіз нулів для точного представлення статистичної суми	174
6.3.1	Нулі Фішера для моделі Блюма-Капеля на повному графі	174
6.3.2	Нулі Фішера для моделі Ізінга на повному графі	177
6.3.3	Порівняння скейлінгу нулів	177
6.4	Аналіз нулів для розкладених виразів статистичної суми	180
6.4.1	Нулі Фішера та нулі кристалічного поля	180
6.4.2	Нулі Лі-Янга	187
6.5	Висновки	191
7	Складні мережі як засіб кількісного опису і візуалізації соціаль- них і наукометричних систем. Моделювання складних мереж	192
7.1	Характеристики мереж використані при аналізі у цьому розділі	193
7.2	Аналіз мережі співавторства ЖФД в Україні	195

7.2.1	З історії журналу та огляд бази даних	195
7.2.2	Аналіз співавторства в межах України	196
7.3	Аналіз мережі наукових понять	201
7.3.1	Про структуру семантичних мереж та аналіз понять на базі препринтів ArXiv	203
7.3.2	Про базу даних	204
7.3.3	Побудова мережі, її основні особливості та результати	207
7.3.4	Представлення моделі GBPS (growth by blocks with preferenti- al selection): зростання блоками із переважним приєднанням	211
7.3.5	Результати для різних механізмів відбору понять	213
7.4	Висновки	216
Висновки		218
Список використаних джерел		222
А СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕР- ТАЦІЇ		249
Б АПРОБАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ		254

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

ФП	—	фазовий перехід
FSS	—	finite-size scaling (скінченно-розмірний скейлінг)
ISPM	—	invisible states Potts model (модель Поттса з невидимими станами)
МК	—	Монте Карло
РГ	—	ренормгрупа
FP (НТ)	—	fixed point (нерухома точка)
MFA	—	mean field approximation (наближення середнього поля)
SF	—	scale-free (network) / безмасштабна (мережа)
GBPS	—	growth by blocks with preferential selection / зростання блоками із переважним приєднанням

ВСТУП

Актуальність теми. Наука про складні мережі настільки тісно переплелась із наукою про складні системи, що часом важко встановити межу, де закінчується одна й починається інша. Мережа (чи граф) є впорядкованою парою $G = (V, E)$, де V — це множина вершин (часом їх називають вузлами), а E — це множина ребер (зв'язків). Теорія графів — це розділ дискретної математики, що бере свій початок ще з XVIII століття. Уже із самого означення випливає перспективність і природність застосування формалізму мереж для опису складних систем агентів, що взаємодіють. При цьому потрібно ставити у відповідність кожному з агентів вершину, а кожній із взаємодій — ребро. Застосування концепції складних мереж виявилось надзвичайно продуктивним для опису складних систем.

Фізики почали аналізувати мережі лише нещодавно — перші статті датуються кінцем 1990-их років. Мета досліджень змінилася від аналізу невеликих графів та властивостей окремих вершин і ребер до розгляду статистичних властивостей цих графів (мереж). Зі зміною мети змінилися й методи аналізу. Народження “науки про мережі” відбулося внаслідок розвитку комп’ютерних технологій та засобів обробки великих масивів даних. На сьогодні в мережевому формалізмі прийнято описувати взаємодії, що змінюються з часом, стохастичні взаємодії, взаємодії, що виникають на декількох рівнях і не вбудовані в евклідовий простір. Якщо додати можливість задавати різні стани для кожного агента-вузла, то стає зрозумілим успіх використання складних мереж як своєрідної *lingua franca* науки про складні системи [1–5].

Дослідження ж колективної поведінки на складних мережах є надзвичайно важливим для розуміння процесів у багаточастинкових системах. Застосування

теорії колективної поведінки є широким і охоплює різні галузі: аналіз поширення інформації, динаміки формування громадської думки у соціальних мережах; задачі перколяції – дослідження стійкості до атак, поширення епідемій; оптимізаційні алгоритми, як от пошуку найкоротшого шляху; явища самоорганізації у біологічних системах, тощо. Актуальність вивчення колективної поведінки зумовлена необхідністю вирішення низки фундаментальних та прикладних проблем, які виникають у сучасному світі. Традиційні методи аналізу складних систем базуються на спрощених припущеннях, часто не здатні описати складну специфіку і структуру реальних мереж, чи просто обмежені застосуванням для однієї області знань і виникає необхідність розвивати нові моделі та підходи. Саме тому все частіше застосовують міждисциплінарні підходи та узагальнені моделі для вивчення складних мереж і виявлення прихованих закономірностей. Важливим, а часто – визначальним, елементом у міждисциплінарних підходах є застосування методів і концептуального апарату фізики, зокрема, статистичної фізики і фізики фазових переходів [6, 7].

Розробка нових спінових моделей для дослідження колективної поведінки на складних мережах мотивована прагненням поглибити розуміння складних систем і явищ впорядкування виходячи за межі традиційних підходів. Так, наприклад, нещодавно була запропонована модифікація моделі Ізінга [8, 9], яка зберігає її бінарну природу, але послаблює обмеження щодо фіксованої довжини спіна на кожному вузлі. Основною метою цієї моделі є дослідження критичної поведінки на різних типах графів, що дозволяє аналізувати колективні явища у складних мережах. Особливу увагу приділено вивченню взаємодії між індивідуальними характеристиками спінів та глобальними топологічними властивостями графа. Впровадження індивідуальної сили спіна в модель дозволяє більш адекватно описати складну природу соціальних мереж і водночас знайти практичне застосування у маркетингу, політиці та теорії ігор. Як приклад міждисциплінарного застосування моделі можна розглядати нейронауку. Відомо, що когнітивні процеси залежать від структурної зв'язності мозку, а нейронна взаємодія визначається складною взаємозалежністю геометрії та топології мозкових мереж [10, 11].

Інше узагальнення моделі статистичної фізики – модель Поттса з “невидимими” станами [12–14] була розроблена для пояснення розбіжностей між теоретичними прогнозами та експериментальними спостереженнями критичної поведінки систем зі спонтанно порушеною Z_3 -симетрією, де спостерігаються фазові переходи першого роду. Це суперечить стандартним передбаченням для 2D моделі Поттса, яка для $q \leq 4$ передбачає фазові переходи другого роду. Модель з “невидимими” станами привернула значну увагу завдяки своїй здатності регулювати інтенсивність та рід фазових переходів шляхом зміни кількості невидимих станів, зберігаючи такі глобальні характеристики, як вимірність простору, діапазон взаємодії та симетрію. Гнучкість у регулюванні балансу енергії та ентропії робить цю модель потужним інструментом для вивчення критичних явищ у різних за структурою складних системах (див. огляд для моделі [15]). Дослідження цієї моделі на графах [16–18] є особливо важливим через їхню здатність описувати структури, характерні для багатьох природних і штучних систем, таких як соціальні, нейронні або технологічні мережі. Різні властивості графів, як-от їхня топологія, масштабованість або складність зв’язків, безпосередньо впливають на колективну поведінку системи та її критичні властивості. Зокрема, використання графів дозволяє моделювати взаємодії між вузлами з різною міцністю зв’язків та враховувати нерівномірний розподіл станів, що надає моделі універсальності для застосування в різних галузях – починаючи від фізики до теорії ігор і когнітивних наук.

Зв’язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України, із науковою тематикою якого пов’язаний вибраний напрямок досліджень. Подані в дисертації результати отримані згідно проектів FP7 EU IRSES № IRSES project №612669 Structure and Evolution of Complex Systems with Applications in Physics and Life Sciences (STREVCOMS) (2015-2017), IRSES Project № 612707 “Dynamics of and in Complex Systems” (2014-2018); планів робіт в рамках бюджетних тем НАН України “Методи і моделі статистичної фізики для опису виникнення структур та пояснення скейлінгу у складних системах” (2018-2022 рр., номер держре-

єстрації 0118U003012), а також у рамках тем “Багатомасштабність і структурна складність конденсованої речовини: теорія і застосування” (2012-2016 рр., номер держреєстрації 0112U003119), “Нові концепції статистичного опису і їх застосування у теорії багаточастинкових систем” (2017-2021 рр., номер держреєстрації 0117U002093), 2017-2018: Проєкт НФДУ №76/105-2017 “Концепція складних мереж у задачах квантової фізики та космології” (0117U003869) (у співпраці з Астрономічною обсерваторією та кафедрою теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка); гранту від Польської АН-НАН України для короткострокового стажування у Польщі (2018 р.), 2020-2021: Проєкт НФДУ №2020.01/0338 “Комп’ютерне моделювання та теоретичні підходи до опису поширення інфекції COVID-19: роль просторової неоднорідності населення, гетерогенності мережі соціальних контактів та соціальної реакції”; Проєкт НАНУ для молодих вчених №07/01-2022(4) “Макромолекулярні утворення як складні системи: комп’ютерне моделювання та аналітичні підходи” (2022-2023); Грант для короткострокового стажування у Франції PAUSE programme (2022-2023); Проєкт НФДУ 023.03/0099 “Критичність складних систем: фундаментальні аспекти та застосування”.

Мета і задачі дослідження. *Метою дисертаційної роботи є дослідження колективної поведінки багаточастинкових систем, що описуються топологією складних мереж. Зокрема, з’ясування особливостей фазових переходів у магнетиках з нетривіальною архітектурою, явища впорядкування у класичних моделях статистичної фізики та їх модифікаціях на графах різної топології, а також формування соціальних мереж співавторства та семантичних мереж понять.*

Завдання роботи:

- дослідження фазових переходів для моделі Поттса з невидимими станами на повному графі та на безмастабній мережі;
- дослідження впорядкування, побудова фазової діаграми для моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна на графах різної топології;
- пошук скейлінгових функцій моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна на

графах різної топології;

- пошук функціонального представлення вільної енергії моделі Ізінга з випадковою довжиною спіна;
- дослідження впливу структурного безладу на магнітне впорядкування, чисельні симуляції для структурно-невпорядкованої 3D моделі Ізінга зі спінами двох довжин;
- аналіз нулів статистичної суми у площині комплексних значень фізичних параметрів для моделі Блюма-Капеля на повному графі;
- кількісний аналіз мережі співавторства ЖФД;
- аналіз динаміки росту семантичної мережі на прикладі мережі понять препринтів ArXiv.

Предмет дослідження становлять системи багатьох агентів із взаємодією різної природи: структурно-невпорядковані магнетики, мережі співавторства та семантичні мережі понять.

Об'єкт дослідження складають класичні та нові моделі статистичної фізики (моделі Ізінга та Блюма-Капеля, модель Ізінга зі змінною довжиною спіна, модель Поттса з невидимими станами) на складних мережах.

Методи дослідження використані у роботі:

- аналітичні – наближення неоднорідного середнього поля, формалізм Лі-Янга-Фішера для нулів статистичної суми у комплексній площині, метод теоретико-польової ренормалізаційної групи, асимптотичні оцінки інтегралів зі степеневими та логарифмічними розбіжностями;
- чисельні – наближені методи обчислення інтегралів, методи теорії складних мереж, мінімізаційний метод simulated annealing для пошуку глобального мінімуму функції багатьох змінних;
- Монте-Карло симуляції ґраткових спінових систем для пошуку ефективних критичних показників.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, розділу з оглядом літературних джерел, що стосуються тематики дисертації, шести розділів основної частини, у яких викладені результати досліджень здобувача, загальних висновків, списку використаних джерел та двох додатків. Робота викладена на 221 сторінках (повний обсяг разом з літературою та додатками – 255 сторінок), бібліографічний список містить 313 найменувань публікацій у наукових виданнях.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми, сформульовано мету і завдання дисертації, висвітлено наукову новизну і практичне значення отриманих результатів. Також окреслено особистий внесок здобувача та наведено інформацію щодо апробації роботи.

У **першому розділі** здійснено огляд робіт та результатів з теорії та емпіричного аналізу складних мереж. Також наведено короткий опис методів дослідження та характеристик вибраних спінових моделей на мережах, які досліджуються у дисертації.

У **другому розділі** представлено результати дослідження критичної поведінки магнетиків складної структури при наявності безладу та конкуренції ентропії і енергії на прикладі q -станової моделі Поттса з r невидимими станами на графах різної топології: на повному графі, графі Ердоша-Рені та відпаленій безмасштабній мережі. Особливу увагу приділено аналітичному формулюванню моделі та огляду теоретичних засад її аналізу. Використовуючи метод неоднорідного середнього поля розглянуто критичну поведінку моделі для різних діапазонів параметрів, що дозволяє виявити її особливості при різних умовах.

У **третьому розділі** розглядається запропонована в роботах, що увійшли до дисертації, модель Ізінга зі змінною довжиною спіна, яка є узагальненням класичної моделі Ізінга. Розділ починається з аналізу мотивації та теоретичних засад моделі, які визначають її значення для розуміння критичних явищ. Далі подається формулювання моделі та її реалізація на графах різної топології. Основну увагу приділено аналізу термодинамічних функцій та побудові фазової діаграми. Отримані результати сприяють розширенню розуміння фізичних процесів у дис-

кретних системах зі змінною природою взаємодій, відкриваючи перспективи для подальшого дослідження складних мережевих структур.

Скейлінгові функції для класичних моделей статистичної фізики на графах різної топології проаналізовано у **четвертому розділі**. Спочатку наведено означення для відношень критичних амплітуд та скейлінгових функцій. На основі отриманих виразів для вільної енергії побудована фазова діаграма спінових моделей на повному графі, графі Ердоша-Рені та відпалених безмасштабній мережі. Особливий акцент зроблено на отриманих результатах, які демонструють специфіку відношень критичних амплітуд і скейлінгових функцій у мережах різної топології. У висновках узагальнено основні результати, підкреслено потенціал для їх застосування у вивченні різноманітних природних і техногенних систем із топологією мережі.

Модель, що включає індивідуальну силу спіна, відображає складну природу соціальних мереж. З іншого боку, для об'єктів статистичної фізики модель пропонує розуміння впливу структурного безладу на колективну поведінку в магнітних системах з полідисперсними елементарними моментами. У **п'ятому розділі** було вперше отримано представлення для ефективного гамільтоніану моделі на тривимірній ґратці для моделі зі спінами двох довжин. Використовуючи теоретико-польовий підхід ренормгрупи для потоку ренормгрупи при різних початкових умовах, обчислено ефективні критичні показники. Проілюстровано, як зміна властивостей магнітних компонентів впливає на ефективні показники. Показано, що модель з наявністю двох (і більше) хімічно відмінних магнітних компонентів (спінів різної довжини) еквівалентна розбавленим магнетикам з немагнітними домішками [19]. Крім того, було підтверджено таку поведінку за допомогою моделювання Монте-Карло.

Шостий розділ описує результати отримані з аналізу нулів розкладеної статистичної суми у площині комплексних параметрів як інструменту для дослідження фазових переходів на складних мережах. У розділі розглянуто модель Блюма-Капеля на повному графі. Модель є узагальненням моделі Ізінга на випадок, коли спінова змінна може приймати не два (як у моделі Ізінга), а три

значення. Аналіз нулів статистичної суми в комплексній площині є потужним інструментом для визначення критичних та трикритичних точок.

У **сьомому розділі** розглянуто застосування теорії складних мереж для аналізу та візуалізації соціальних і наукометричних систем. У цьому розділі за мету було поставлено кілька завдань. А саме, навести прикладне застосування теорії мереж для дослідження систем реального світу, показати як механізми росту мереж і їх динаміка реалізуються на практиці і до чого вони призводять, а також продемонструвати, як реальні мережі описуються запропонованими моделями. Розглянуто застосування теорії складних мереж для аналізу та візуалізації соціальних і наукометричних систем. Перша частина розділу присвячена аналізу мережі співавторства у журналі "Журнал фізичних досліджень" (ЖФД) в Україні. Друга частина розділу фокусується на аналізі мережі наукових понять, що базується на даних препринтів ArXiv. Розглянуто структуру семантичних мереж, їхні особливості, а також побудовано модель GBPS (зростання блоками з переважним приєднанням), яка описує механізми формування таких мереж. У висновках підсумовано результати, що демонструють цінність підходів складних мереж для розуміння соціальних і наукових взаємодій, а також запропоновано перспективи їхнього подальшого застосування.

Наукова новизна отриманих результатів. Для моделі Поттса з невидимими станами виявлено особливий тип критичної поведінки, що характеризується двома граничними значеннями числа невидимих станів, які відділяють різні типи впорядкувань. Вперше розглянуто модель на повному графі та на безмасштабній мережі у різних діапазонах параметрів. Показано, що додавання невидимих станів змінює неперервний перехід у моделі перколяції зв'язків на фазовий перехід першого роду [16–18].

Запропоновано нову спінову модель – модель Ізінга зі змінною довжиною (силою) спіна [8, 9] що, зберігаючи симетрію спінів, враховує також можливість різної величини елементарного магнітного моменту. Показано, що впровадження спінів змінної довжини значно розширює фазову діаграму та зумовлює появу нових класів універсальності (для провідних значень критичних показників та по-

казників логарифмічних поправок) у випадку, коли така модель розглядається на складних мережах (повному графі, графі Ердоша-Рені та безмасштабній мережі).

Запропоновано нову модель структурно-невпорядкованого магнетика, що належить до класу універсальності моделі Ізінга з розведеними вузлами. А саме, модель Ізінга зі спінами зі змінною довжиною, коли структурний безлад зумовлюється введенням не домішки (немагнітної компоненти), але іншого магнетика із відмінним значенням елементарного магнітного моменту. Вперше здійснено опис і проаналізовано ефективну критичну поведінку моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна на тривимірній регулярній ґратці використовуючи теорію ренормгрупи [19]. Виконано Монте-Карло симуляції [20] для дослідження ефективної та асимптотичної критичної поведінки моделі з двома довжинами спінів, що підтверджують теоретичні результати.

Формалізм Лі-Янга-Фішера вперше застосовано для аналізу фазових переходів в моделі Блюма-Капеля на повному графі. Знайдено асимптотики координат нулів в околі критичної та трикритичної точки для наближеного представлення статистичної суми [21] в площині комплексної температури (нулі Фішера), комплексного кристалічного поля (нулі кристалічного поля) та комплексного магнітного поля (нулі Лі-Янга).

При аналізі мереж понять препринтів arXiv було показано [22, 23], що широко використовувані мережеві моделі – Ердоша-Рені та Барабаші-Альберта – не можуть згенерувати мережу з бажаними властивостями, як у реальній системі. Було запропоновано просту генеративну модель, де зростання мережі понять відбувається не тільки за рахунок додавання нових вузлів і приєднання їх до вже існуючих у графі, а й за рахунок появи нових зв'язків між раніше існуючими вузлами. Показано, що для отримання задовільних результатів у моделюванні таких явищ необхідно враховувати два механізми: i) зростання за блоками та ii) переважний вибір понять.

Практичне значення отриманих результатів. Модель Поттса з невидимими станами була запропонована для пояснення розбіжностей між теорією та експериментами в 2D-магнетиках із Z_3 -симетрією, таких як $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$. Мо-

дель дозволяє налаштовувати інтенсивність та рід фазового переходу, зберігаючи вимірність і симетрію. Було показано, що невидимі стани перетворюють перехід у моделі перколяції зв'язків на фазовий перехід першого роду. Концепція невидимих станів має застосування в теорії ігор (“нейтральні стратегії”) і оптимізації (“невидимі флуктуації”).

Узагальнена модель Ізінга зі змінною довжиною спінів дозволяє краще зрозуміти критичну поведінку у складних системах та мережах, враховуючи як індивідуальні властивості (сила спіна), так і глобальну топологію (структуру мережі). Модель може бути застосована для аналізу задач соціальної динаміки, таких як формування думок та маркетингові стратегії завдяки здатності моделювати складні взаємодії. У нейронауці спінові моделі допомагають вивчати нейронні мережі в мозку, де змінна сила вузлів відображає різницю у функціонуванні та взаємодії нейронів. Аналіз універсальних характеристик (критичних показників, скейлінгових функцій і відношень критичних амплітуд) дозволяє передбачати поведінку систем поблизу критичних точок, що сприяє розробці й оптимізації магнітних матеріалів, макромолекулярних структур та інших складних систем.

Застосований новий підхід до проблеми впливу структурного безладу на магнітні фазові переходи дозволяє розширити коло можливих матеріалів з властивостями структурно-неоднорідних магнетиків. Традиційні дослідження безладу в 3D моделі Ізінга зазвичай зосереджуються на замороженому безладі з немагнітними домішками у вузлах ґратки. Запропонована модифікація моделі Ізінга зі змінними довжинами спінів моделює безлад для суміші двох ізінгоподібних магнетиків (суміші зі спінами двох різних довжин). Такий підхід дозволяє дослідити вплив структурного безладу без врахування немагнітної компоненти. Також у перспективі планується досліджувати більш складні метериали для різної кількості магнітних компонент, їх концентрацій та законів розподілу.

Результати з отриманого аналізу мережі співавторства між містами України на базі “Журналу Фізичних Досліджень”(ЖФД), дозволяють редакційній колегії оцінювати динаміку співпраці з авторами та виявляти тенденції у публікаційній активності, розробити стратегії залучення нових авторів, а також підтримки

зв'язків із тими, хто раніше співпрацював із журналом.

Структуру семантичних мереж (систем знань, понять) можна моделювати різними способами, використовуючи одномодові проєкції відповідних багатосортних графів. Семантичний простір різних галузей можна представити у вигляді складної мережі тематично пов'язаних міток (де вузлами можуть бути як статті, так і поняття). Важливим завданням є аналіз структури семантичних мереж у науці та моделювання процесів їх еволюції. Із проаналізованої мережі понять препринтів на платформі arXiv, було встановлено, що спостережувана мережа є щільною та має складні характеристики, які неможливо пояснити простими генеративними моделями, типу випадкового графу Ердоша–Рені або моделі Барабаші–Альберта. Тому була запропонована модель, яка відтворює основні емпірично спостережувані особливості, дозволяє згенерувати мережу з властивостями, якісно подібними до властивостей мережі емпіричних понять, тобто, краще дозволяє моделювати процеси і структуру емпіричних семантичних систем.

Особистий внесок здобувача. Серед публікацій [8, 9, 15–19, 22–26] 1 стаття подана і 1 прийнята до опублікування [20, 21] (обидві опубліковані як препринти), 1 стаття [26] виконана дисертанткою одноосібно. У 13 роботах, виконаних спільно зі співавторами [8, 9, 15–25], здобувачці належить:

- отримання аналітичних виразів для статистичної суми та вільної енергії моделі Поттса з невидимими станами на повному графі [16];
- аналіз мережі співавторства ЖФД в Україні [24];
- результати розділу: Універсальність, нулі статистичної суми й порушення теореми Лі–Янга для моделі Ізінга на безмасштабній мережі [25];
- отримання аналітичних виразів статистичної суми та вільної енергії моделі Поттса з невидимими станами на безмасштабній мережі [17, 18];
- аналітичні розрахунки фазової діаграми моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна [8, 9];
- обговорення особливостей мережі наукових понять на базі препринтів ArXiv.

Відбір загальних і специфічних понять [22, 23];

- написання розділів 1, 2 та 4 у статті [15];
- отримання функціонального представлення вільної енергії структурно-невпорядкованого магнетика. Аналіз асимптотичної та ефективної критичної поведінки замороженої (quenched) суміші двох магнетиків [19];
- вибір моделі для комп'ютерної симуляції феромагнітного впорядкування у випадковій суміші двох магнетиків. Тестові симуляції структурно-впорядкованої 3D моделі Ізінга [20];
- отримання аналітичних виразів для точного та розкладеного представлення статистичної суми моделі Блюма-Капеля на повному графі. Аналіз нулів для наближеного представлення статистичної суми у комплексній площині [21].

Здобувачка брала безпосередню участь в обговоренні усіх результатів, опублікованих у спільних дослідженнях.

Апробація результатів дисертації. Основні результати дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на таких наукових зустрічах: MECO41: 42-nd International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Lyon, France, 2017); Різдв'яні дискусії на кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету ім. І. Франка (2018, 2019); MECO43: 43-rd International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Kraków, Poland, 2018); International 11th Workshop on Current Problems in Physics (Lviv, Ukraine, 2018); IX Scientific Conference “Selected issues of astronomy and astrophysics” (Lviv, Ukraine, 2018); 5-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications (Lviv, Ukraine, 2019); MECO45: 45-th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Hungary, online, 2020); MECO46: 46-th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Latvia, online, 2021); 13th Workshop on Current Problems in Physics (Lviv, 2021); Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, ІФКС НАН України, Львів (2018, 2021, 2023); MECO47: 47-th International Conference of the Middle

European Cooperation in Statistical Physics (Sicily, Italy, 2022); Statistical Physics and Low-Dimensional Systems (Abbaye des Prémontrés - Pont-à-Mousson, France, 2022); PG Meetings 2023 (Dresden, Germany, 2023); MECO48: 48th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Stará Lesná, Slovakia, 2023); igmaPhi2023 Conference (Chania-Crete, Greece, 2023); Bogolyubov Kyiv Conference “Problems of Theoretical and Mathematical Physics” (Kyiv, Ukraine, 2024); а також на семінарах Групи статистичної фізики Університету Естремадури (Бадахос, Іспанія), Групи статистичної фізики Університету Лотарингії (Нансі, Франція), Відділу конденсованої речовини Інституту низьких температур та досліджень структури (Вроцлав, Польща), Інституту теоретичної біології, Університету Гумбольдта в Берліні (Берлін, Німеччина), семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України (Львів) та семінарах “Статистична фізика складних систем” ІФКС НАН України.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 12 статей (із урахуванням квартилів журналів: Q2 – 7, Q4 – 5) в наукових журналах, внесених до переліку наукових видань, що індексуються наукометричними базами [8, 9, 15–19, 22–26], 1 стаття прийнята до друку [20], 1 стаття подана до друку [21] та опублікована як препринт, 24 тез конференцій [27–50].

Розділ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

I think the next century will be the century of complexity

(Stephen Hawking)

Цей розділ присвячено короткому аналізу наукових досліджень у сфері складних мереж та застосування спінових моделей при дослідженні колективної поведінки на графах. Так у **підрозділі 1.1** описано етапи розвитку науки про мережі – від теорії графів до сучасних досліджень. У **підрозділі 1.2** та **підрозділі 1.3** розглянуто основні моделі мереж (випадкові, малі світи, безмасштабні) та типи мереж, а також наведено основні характеристики для аналізу мереж у **підрозділі 1.4**. І на завершення, у **підрозділі 1.5** розглянуто результати отримані для стандартних спінових моделей на безмасштабних мережах, а також огляд нових запропонованих моделей для аналізу поведінки систем на графах, як от модель Ізінга зі змінною довжиною спіна, модель Поттса з невидимим станами, а також моделі для моделювання безладу та налаштуванням типу фазового переходу. Розділ формує основу для розуміння складних мереж та їхньої ролі в теоретичній фізиці.

До цього розділу увійшли матеріали оглядів, поданих в статтях включених до дисертації [8, 9, 15–26] і також іншого ряду ключових публікацій. Більш детальний огляд проблематики буде здійснено у кожному розділі безпосередньо.

1.1. Коротка хронологія розвитку науки про складні мережі

Топологія мереж дозволяє описати різноманітні системи як природного, так і штучного походження [1–5]. Наука про складні мережі бере свій початок із задачі про сім мостів в Кенігсберзі, розв’язаної Леонардом Ейлером у 1736 році, див. Рис. 1.1 [51]. Через місто протікала річка, що ділила його на чотири частини, сполучені сімома мостами. Задача полягала у пошуку такого маршруту, щоб пройти всі мости лише один раз. Ейлер довів, що цей маршрут є неможливий. Вважається, що саме ця робота заклала основи теорії графів і ввела фундаментальні поняття (вузлів (вершин) та зв’язків (ребер), що їх поєднують).

У 1959 році Ердош та Рені розробили модель випадкових графів, відому як модель, що передбачає рівноймовірне з’єднання вузлів і ввели важливі поняття середньої довжини шляху та ступеня вузлів, що стали ключовими для вивчення складних мереж [52]. Розуміння мереж як складних систем зробило великий крок уперед завдяки експерименту “тісного світу” (Six Degrees of Separation), проведеному Мілґремом у 1967 році [53]. Цей феномен показав, що більшість вузлів у соціальних мережах з’єднані через невелику кількість проміжних кроків. Цей

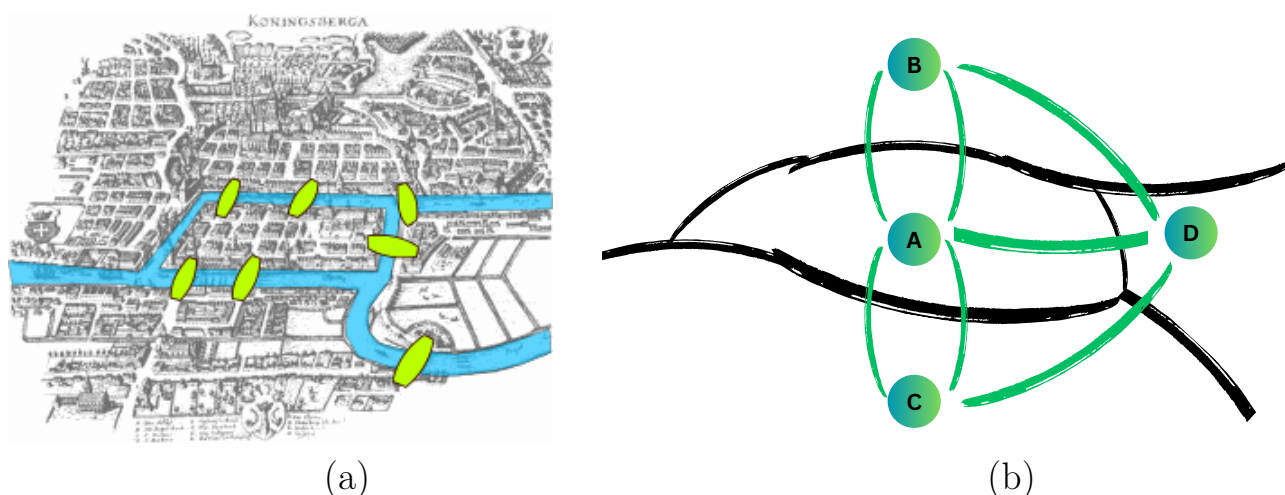


Рис. 1.1. (а) Мапа Кенігсберґа в часи Ейлера із зображенням розташування сімох мостів через річку [51]. (b) Найперший граф для ілюстрації мапи (а). Тут вузли (nodes) – це різні частини міста, що поєднані між собою зв’язками-мостами (links).

етап умовно можна вважати **класичним**, що передував сучасному.

Сучасна наука про складні мережі бере свій початок з кінця 90-тих років минулого століття. Саме тоді збіг кількох важливих факторів стимулював виникнення нових напрямків досліджень і задач. Сучасний розвиток науки про складні мережі охоплює **міждисциплінарний** підхід, інтегруючи меделі і методи точних наук для дослідження в галузях соціології, біології, економіці, тощо. Хотілося б виділити перші і основні роботи. Так у 1998 році Дункан Ваттс і Стівен Строгац представили **модель тісного світу**, яка описує перехід між регулярними та випадковими мережами [54]. Ця модель поєднує високу кластеризацію з малою середньою довжиною шляху, дозволяючи пояснити як локальні, так і глобальні взаємодії у мережах. Через рік, у 1999 році, Альберт-Ласло Барабаші та Река Альберт запропонували модель безмасштабної (scale-free, SF) мережі [55]. Ця модель ґрунтується на принципах зростання та переважного приєднання, коли нові вузли, що додаються до системи, мають більшу імовірність поєднатися із вузлами з більшою кількістю зв'язків. Вона пояснює степеневі розподіли у мережах, які відомі як **безмасштабні мережі**.

Наука про мережі має значний вплив на численні дисципліни, про що свідчать метрики цитування. У багатьох галузях статті про мережі стали найцитованішими у провідних журналах. Наприклад, статті Ватса та Строгатца (1998) про феномен тісного світу [54], а також Барабаші й Альберта (1999) про безмасштабні мережі [55] увійшли до десятки найцитованіших у фізиці за десятиліття після публікації. На Рис. 1.2 показано, як порівнюються цитування цих ключових статей науки про мережі та класичних робіт з теорії складності (як от теорії хаосу (Лоренц, 1963)[56], спінові стекла (С. Едвардс і Ф. Андерсон, 1975) [57], ренормгрупа (Вілсон, 1975) [58], нейронні мережі (Дж. Хопфілд, 1982) [59], фрактали (Мандельброт, 1982) [60]).

Складні мережі використовуються для опису складних систем (див., наприклад, [5, 61]), які цікаві іще й тим, що навіть найменші зміни параметрів, можуть суттєво вплинути на поведінку системи. Особливо це стає помітно при аналізі стійкості таких систем до атак. Як приклад, можна навести випадок каскадного збою

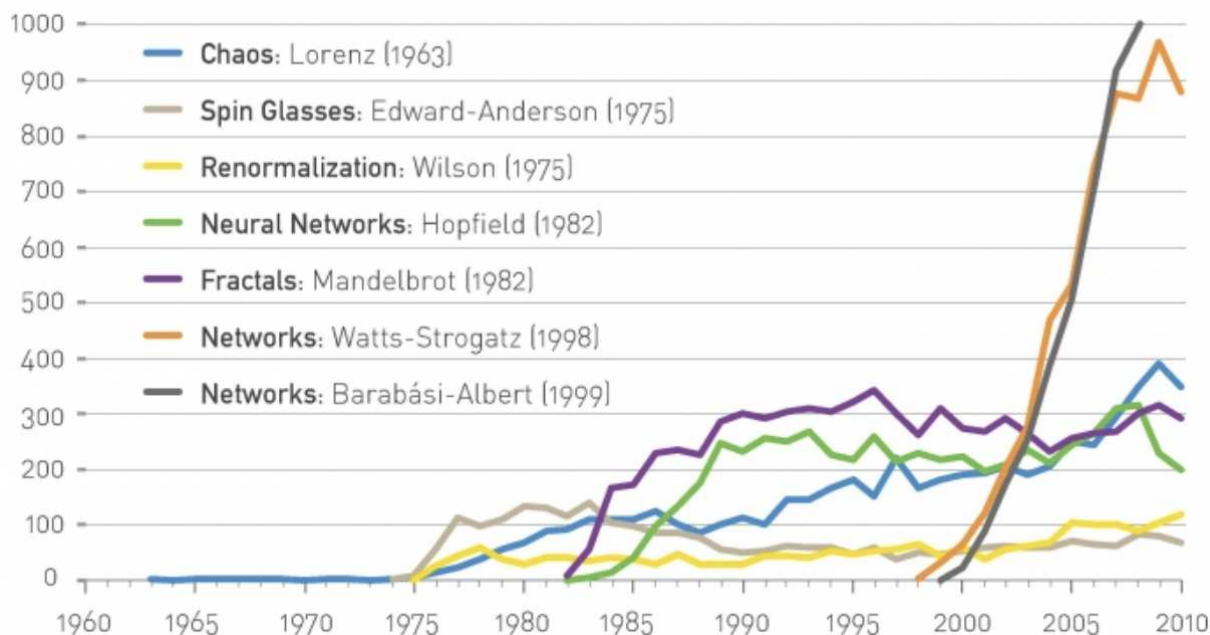
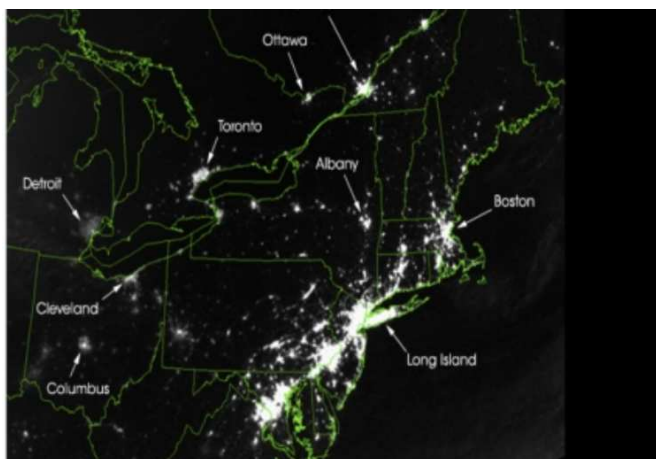
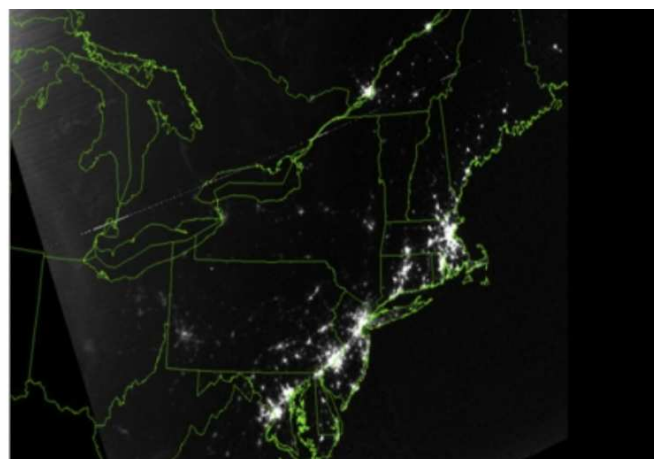


Рис. 1.2. Вплив (цитованість) статей про мережі порівняно з цитуваннями найбільш цитованих робіт про складність [61].

при знеструмленні в Північній Америці у 2003 році (див. Рис. 1.3) [61]. У випадку незначного збільшення навантаження у мережі, локальний збій переносить навантаження на інші вузли (підстанції) і такий збій залишається непоміченим. Однак якщо додаткове навантаження занадто велике для сусідніх вузлів, вони також



(a)



(b)

Рис. 1.3. Каскадні відключення світла (США, 2003). (a) Супутниковий знімок на північному сході Сполучених Штатів 13 серпня 2003 року о 21:29 (за стандартним часом) за 20 годин до відключення електроенергії. (b) Те саме через 5 годин після відключення світла [61].

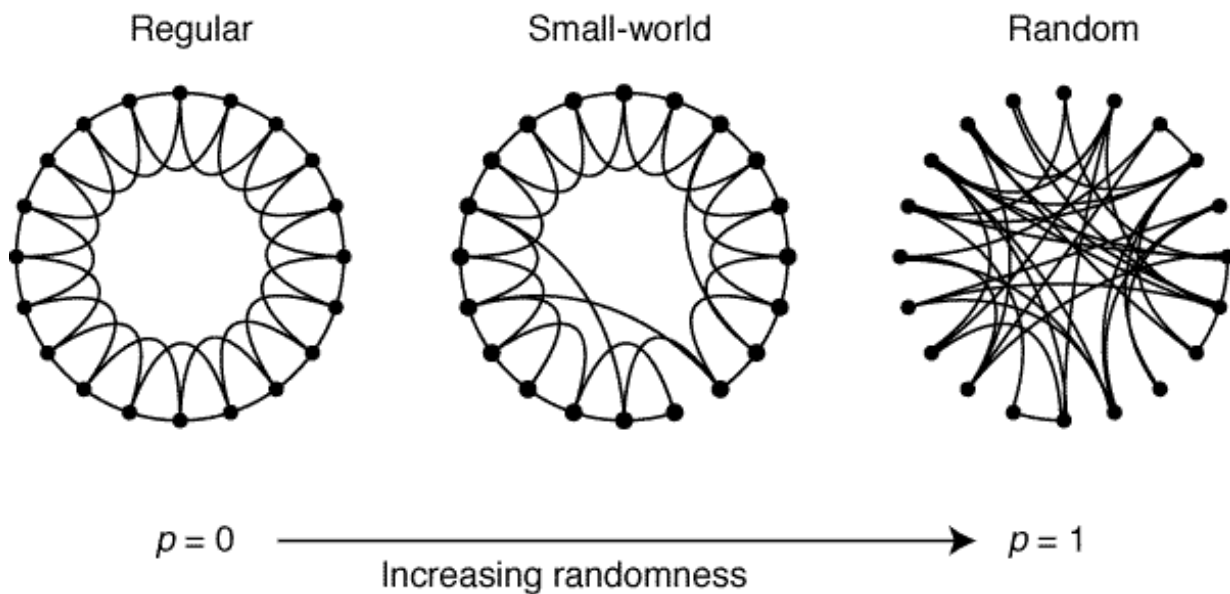


Рис. 1.4. Процедура випадкового перез'єднування зв'язків між регулярною кільцевою ґраткою та випадковою мережею без зміни кількості вершин чи ребер у графі [54].

перерозподілять навантаження на своїх сусідів. Таким чином виникає каскад, що поширюється. За супутниковими зображеннями можна спостерігати, що у цьому випадку відбувся масштабний збій, внаслідок якого мільйони людей залишились без електропостачання. Отже, з цієї ситуації випливає два важливі висновки: (1) важливо розуміти структуру мережі, по якій поширюється каскад; (2) мати змогу моделювання динамічних процесів на мережах. І тоді ми зможемо проаналізувати як взаємодія між мережевою структурою та динамікою впливає на надійність усієї системи.

1.2. Моделі мереж

На Рис. 1.4 зображено запропоновану Ваттсом і Строгатсом процедуру випадкового перез'єднання, що інтерполює між регулярною кільцевою ґраткою та випадковою мережею. Початковою конфігурацією є кільце з n вершинами, кожна з яких з'єднана з k найближчими сусідами (на схемі $n = 20$, $k = 4$, але в роботі [54] використовуються значно більші n і k). Кожне ребро переналаштовують з імовірністю p , з'єднуючи з випадковою вершиною кільця (без дублювання ребер). Процес повторюється для всіх ребер на різних рівнях близькості, доки не завер-

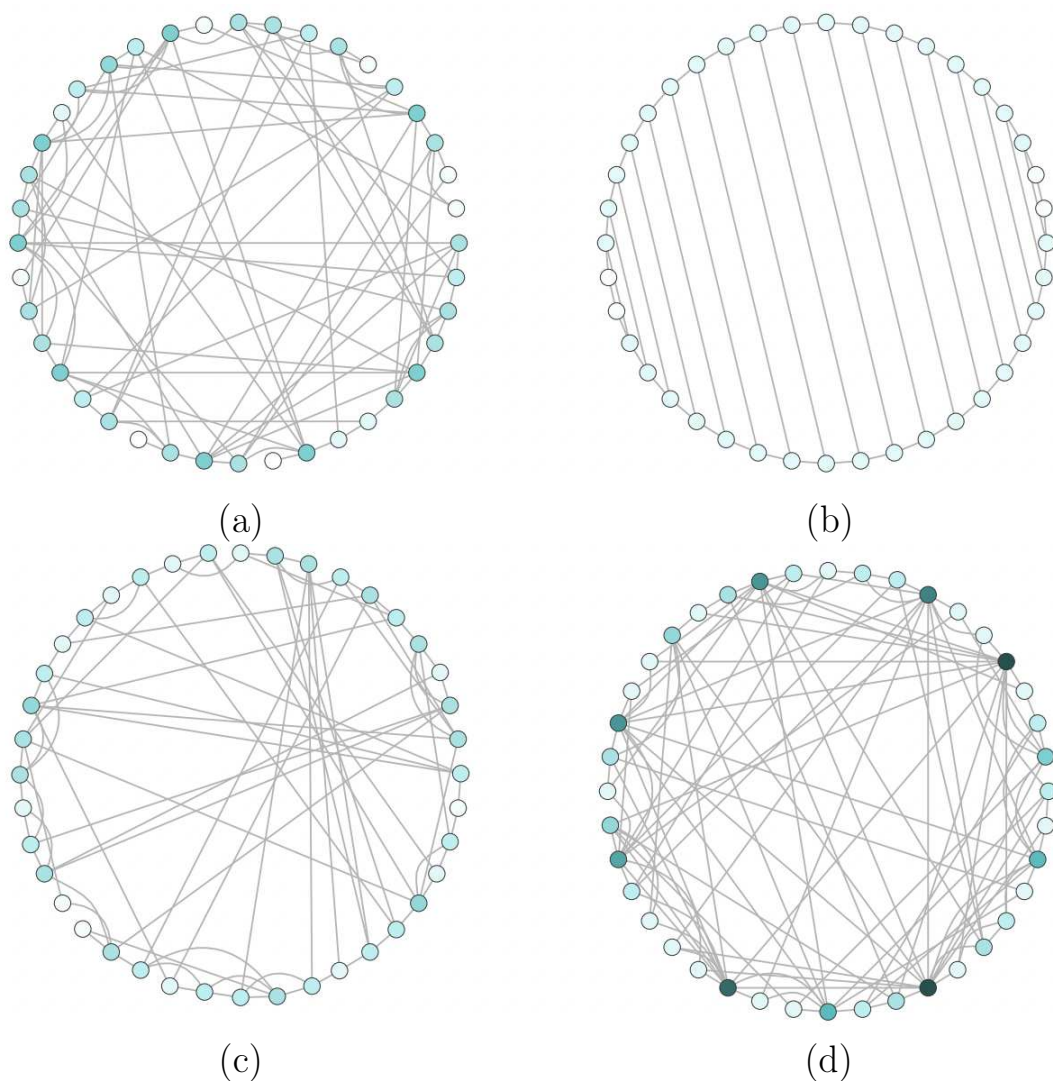


Рис. 1.5. Порівняння між різними моделями мереж. Інтенсивність кольору відображає кількість ребер, суміжних із вузлом. (a) Граф Ердоша-Рені, (b) двовимірний ґратковий граф, (c) граф Ваттса-Строгаца (тісний світ), (d) граф Барабаші-Альберта [62].

шаться $k/2$ обертів. На схемі показано реалізації для $p = 0$, $p = 0.5$, та $p = 1$. При $p = 0$ граф регулярний, при $p = 1$ максимально випадковий, а для проміжних p утворюється мережева структура тісного світу: висока кластеризація поєднується з малою довжиною середнього шляху.

Моделювання мереж є ключовим інструментом для аналізу складних систем. Різні типи мереж використовуються для дослідження взаємодій у фізичних, соціальних та біологічних системах. Кожна модель мережі має унікальні властивості, які дозволяють зрозуміти специфіку зв'язків між вузлами та їхній вплив на динаміку системи. На Рис. 1.5 розглянуто основні моделі мереж: граф Ердо-

ша–Рені, двовимірний граф, граф Ваттса-Строгаца та граф Барабаші-Альберта [62]. Кожен з них ілюструє різні підходи до генерації мереж та їхні характерні риси. Граф Ердоша–Рені отриманий шляхом з’єднання кожної пари вузлів із ймовірністю 13 %. Для двовимірного ґраткового графу кожен вузол з’єднаний із трьома найближчими сусідами. Для графа Ваттса-Строгаца кожен вузол з’єднаний із чотирма найближчими сусідами, а потім 30 % ребер випадково розкидані. У графі Барабаші-Альберта новий вузол з’єднується з трьома існуючими вузлами в мережі, віддаючи перевагу тим, що мають вищий ступінь, тобто за принципом переважного приєднання. Для побудови мережі Барабаші-Альберта слід стартувати із невеликого, повнозв’язаного графа із m_0 вузлів. Поступово додаючи нові вузли, кожен з яких формує m зв’язків з існуючими, причому вузли з більшим числом зв’язків мають більшу ймовірність бути вибраними, тобто,

$$P(i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j}.$$

Процес повторюється, що забезпечує зростання мережі і призводить до появи степеневого розподілу вузлів.

1.3. Типи мереж

Можна виділити різні класифікації мереж, наприклад:

- **За спрямованістю зв’язків (links) :** Спрямовані (directed) (Рис. 1.6b) – зв’язки мають визначений напрямок (наприклад, мережі дорожнього руху). Неспрямовані (undirected) (Рис. 1.6a, c) – зв’язки не мають напрямку (наприклад, соціальні мережі).
- **За випадковістю зв’язків та врахуванням кореляцій:** Скорельовані (correlated) – враховуються залежності між вузлами (наприклад, мережі з “томофілією” або “тетерофілією”). Нескорельовані (uncorrelated) – відсутність кореляцій між вузлами.
- **За типом взаємодії:** Зважені (weighted) – кожен зв’язок має вагу (наприклад, транспортні мережі зі швидкістю руху на маршрутах) (Рис. 1.6c).

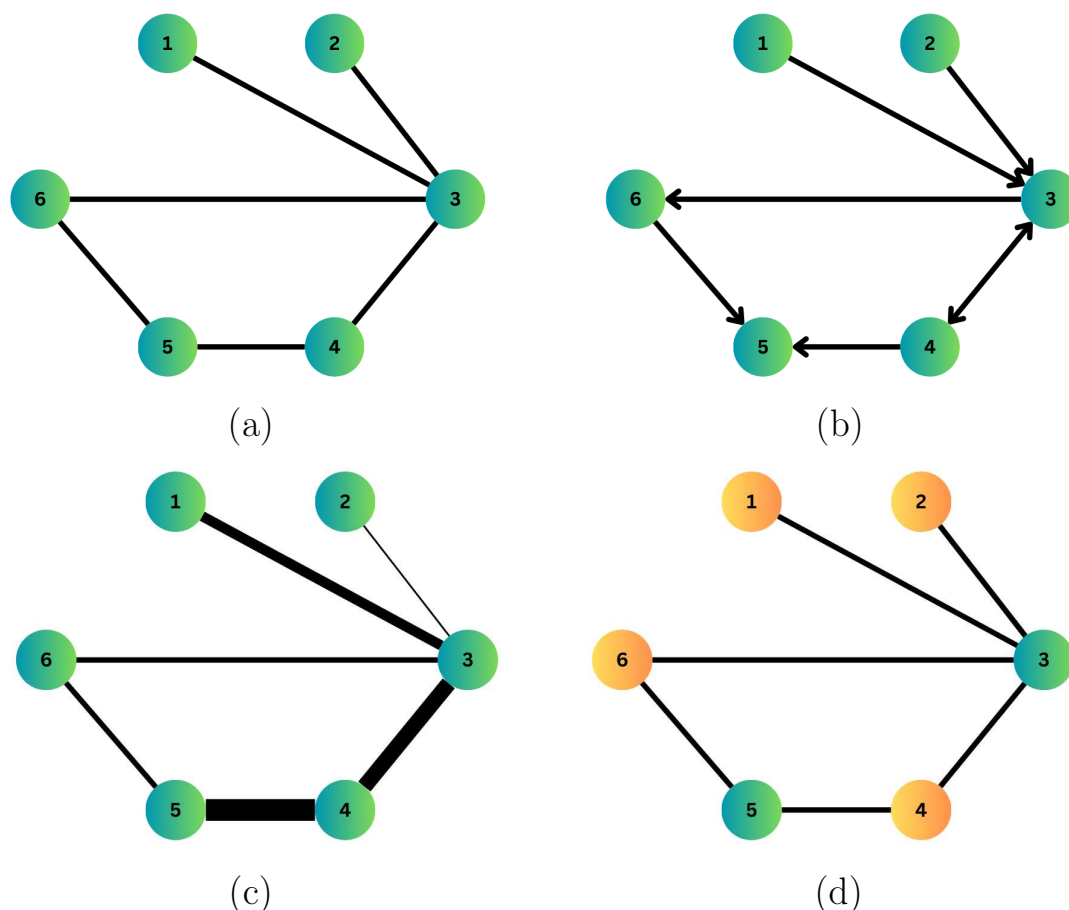


Рис. 1.6. Приклади графів: із (а) неспрямованими та (b) спрямованими зв'язками (напрямок задається стрілкою), (c) граф зі зваженими зв'язками (різна товщина лінії відповідає різній вазі зв'язку), (d) дводольний граф (різними кольорами зображені вузли різних типів).

Незважені (unweighted) – зв'язки однакові за значенням (наприклад, базові соціальні мережі “друг – ворог”) (Рис. 1.6a, b).

- **За відмінностями між вузлами:** Дводольні (bipartite) – вузли поділяються на дві групи, зв'язки можливі лише між групами (наприклад, мережі авторів і публікацій, Рис. 1.6d). Багатодольні (multipartite) – вузли розподілені між декількома групами. Мережі із одним типом вузлів (single-layer networks) – всі вузли належать до однієї категорії (Рис. 1.6a, b, c).
- **За кількістю шарів:** Одношарові (single-layer) – всі вузли й зв'язки належать до однієї площини взаємодії. Мультиплексні (multiplex) – мережа містить кілька шарів, кожен з яких представляє окремий тип взаємо-

дії (наприклад, мережі соціальної активності з шарами “дружба”, “робота”, “спільні інтереси”). Гіпермережі (hypergraphs) – дозволяють зв’язки між більш ніж двома вузлами одночасно.

- **За еволюцією їх топології:** Статичні (static) – мережі з незмінною структурою (наприклад, молекулярні графи). Динамічні (dynamic) – мережі, топологія яких змінюється з часом (наприклад, мережі цитування).
- **За типом розподілу, структурою мережі:** повний граф, випадковий граф Ердоша-Рені, мережі тісного світу, безмасштабні мережі, тощо.
- **За функціональністю:** транспортні, інформаційні, соціальні, біологічні, семантичні, тощо.

1.4. Характеристики мереж, що використовують для аналізу

Маючи арсенал інструментів теорії складних мереж [1–5], можна ефективно досліджувати широкий спектр моделей та систем, оскільки багато природніх та синтетичних структур набагато краще описуються топологією мережі, аніж регулярних ґраток. Для мереж невеликого розміру є можливість зручної візуалізації, що на інтуїтивному рівні покаже структуру. В залежності від конкретної мережі, що аналізується, слід відповідно задати, що вважається вузлами, а що зв’язками. Так, наприклад, для наукометричного аналізу публікацій вузлами мережі можуть бути як окремі публікації, так і автори, країни, міста, а зв’язки між ними означатимуть, скажімо, наявність спільного автора в публікації чи спільної публікації для авторів, країни, міста. Зокрема у **Розділі 7**, використовуючи теорію складних мереж буде проаналізовано мережу наукової співпраці та семантичну мережу понять для препринтів. Більше означень для мережевих характеристик представлено у підрозділі 7.2.

Основними характеристиками мереж (із кількістю вузлів N та L зв’язками), є наступні:

- Для будь-якого графу можна записати **матрицю суміжності (adjacency matrix)** – де матричні елементи $a_{ij} = 1$, якщо між вузлами i та j існує зв'язок, і навпаки. Наприклад, для графів представлених на Рис. 1.6а-с матриці суміжності можна записати наступним чином:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 17 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 17 & 3 & 0 & 26 & 0 & 9 \\ 0 & 0 & 26 & 0 & 36 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 36 & 0 & 9 \\ 0 & 0 & 9 & 0 & 9 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

- **Ступінь вузла k_i (node degree)** – кількість зв'язків, що виходять з цього вузла або ж кількість найближчих сусідів:

$$k_i = \sum_j a_{ij}$$

Залежно від того, чи в мережі розрізняють напрямленості зв'язків, до уваги можуть братися лише ті, що входять до вузла або виходять із нього. Можна знайти максимальний ступінь вузла мережі k_{max} :

$$k_{max} = \max_{1 \leq i \leq N} k_i,$$

або ж усереднене значення за всіма вузлами $\langle k \rangle$:

$$\langle k \rangle = \sum_{k=1}^{k_{max}} P(k)k.$$

Тут $P(k)$ – функція розподілу, що характеризує ймовірність, з якою випадково вибраний вузол має ступінь k ;

- **Функція розподілу за ступенем вузлів (node degree distribution)** $P(k)$ (Рис. 1.7) – імовірність того, що вузол має k сусідів (зв'язків). Най-

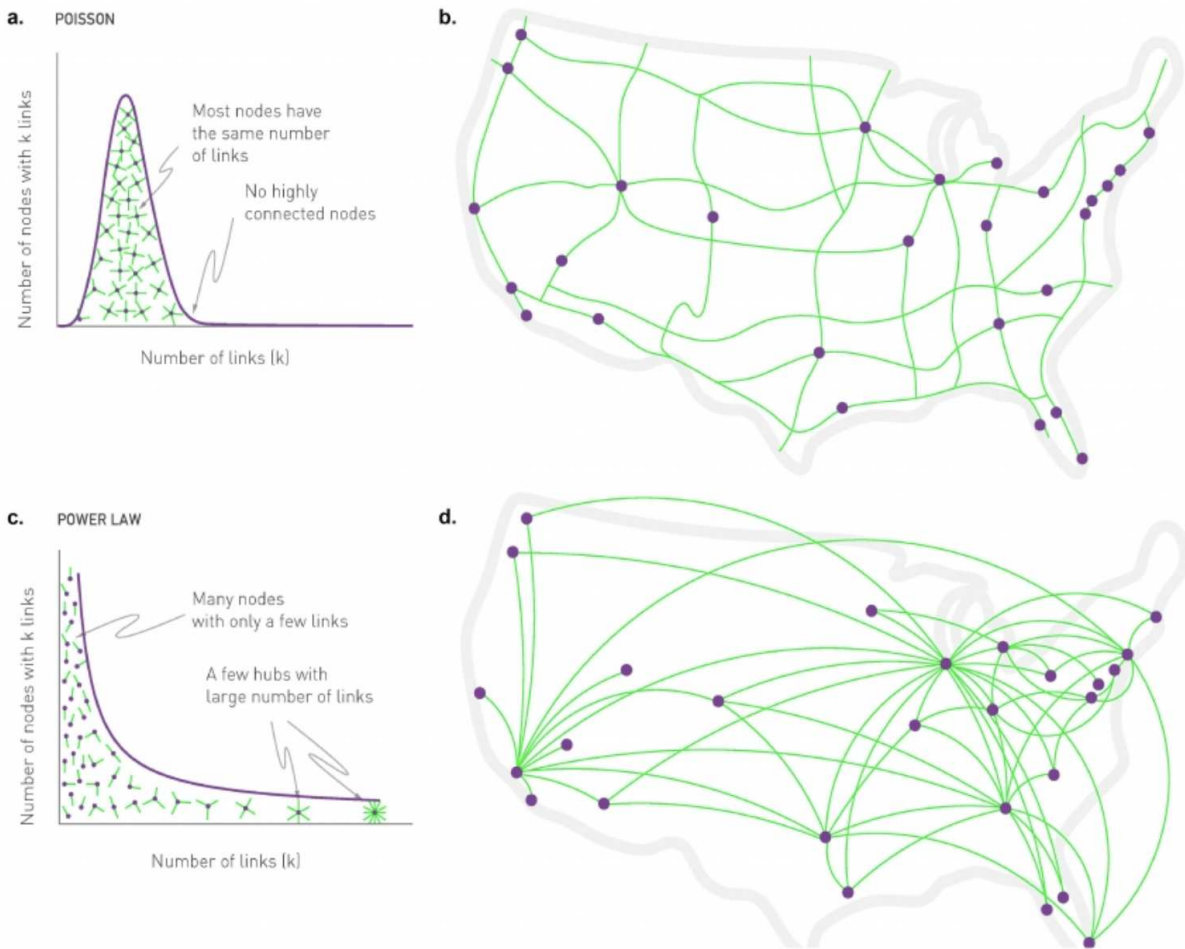


Рис. 1.7. Приклади двох розподілів за ступенем вузлів та типові структури графів, що з них випливають: (а), (b) – розподіл Пуассона, (с), (d) – степеневий розподіл. Ступені вузлів у випадковій мережі підпорядковуються розподілу Пуассона. Тому більшість вузлів мають схожі ступені, а вузли з великою кількістю зв'язків відсутні. Випадкова мережа схожа на національну мережу автострад, де вузли — це міста, а зв'язки — основні автостради. У такій мережі немає міст із сотнями автострад, і жодне місто не є ізольованим від системи автострад. У мережі зі степеневим розподілом ступенів більшість вузлів мають лише кілька зв'язків. Ці численні малі вузли утримуються разом завдяки кільком високо з'єднаним вузлам - габам. Прикладом такої мережі може бути мережа аеропортів, де вузли — це аеропорти, а зв'язки — це прямі рейси між ними. Більшість аеропортів невеликі й мають лише кілька рейсів. Однак є кілька дуже великих аеропортів, які виконують роль основних вузлів, з'єднуючи менші між собою [61].

більш поширеними є: розподіл Пуассона – $P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!}$; експоненційно-спадний – $P(k) \sim e^{-k/\langle k \rangle}$ ($k \rightarrow \infty$); степеневий-спадний (power-law distributi-

on):

$$P(k) \sim 1/k^\lambda, \quad k \rightarrow \infty. \quad (1.2)$$

Для широкого класу систем ця функція описується саме степеневою поведінкою, а такі мережі називають **безмасштабними** (scale-free). Вузли з великим ступенем називають габами (hubs). Зазвичай саме вони відіграють найважливішу роль у системі. На Рис. 1.7 наведено приклади двох розподілів та типові структури графів, що з них випливають.

1.5. Спінові моделі на мережах та їх застосування

Мотивація досліджувати нові спінові моделі випливає з мети покращити наше розуміння складних систем і явищ упорядкування, процесів перколяції на мережах (стійкість, поширення, тощо), що виходить за межі звичайних законів. Спінові моделі виявилися безцінними інструментами у вивченні широкого діапазону систем, особливо в царині статистичної механіки. Однак, оскільки наші знання про складні системи зростають, виникає потреба в нових моделях, які могли б краще відобразити тонкощі цих сценаріїв.

1.5.1. Стандартні спінові моделі (модель Ізінга, модель Поттса) на безмасштабній мережі

Існує широкий спектр моделей та графів, на яких їх досліджують, однак, у цьому розділі і підрозділі зокрема увагу сфокусовано лише на тих випадках, що безпосередньо стосуються результатів дисертаційного дослідження. А саме, моделях Ізінга та Поттса, коли спіни розташовуються на вузлах випадкового графа, а більш конкретно – на безмасштабній мережі. На Рис. 1.8 схематично представлено ці моделі. Основна відмінність між ними – це можлива кількість напрямків орієнтації спіну. Так модель Ізінга є частковим випадком моделі Поттса при $q = 2$. Однак, саме ця деталь суттєво впливає на критичну поведінку системи, як буде показано нижче.

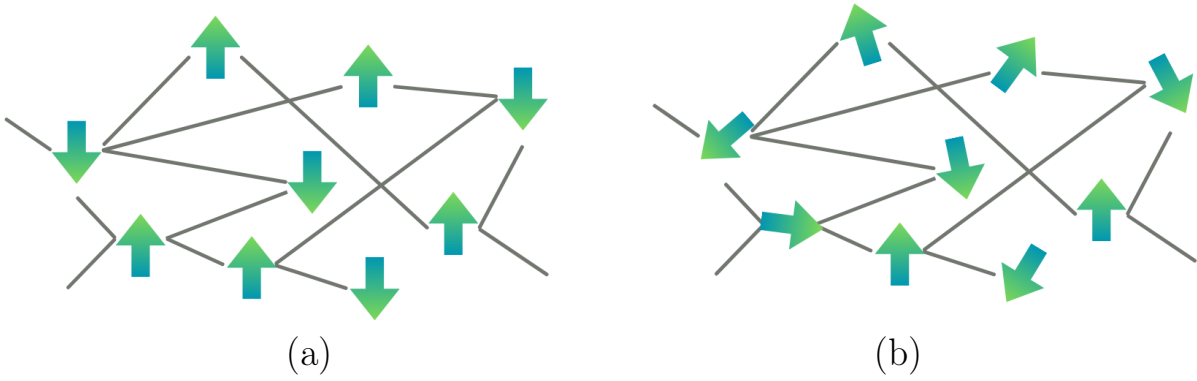


Рис. 1.8. (а) Схематичне представлення моделі Ізінга на графі, де спіни можуть приймати значення $S = \pm 1$. (б) Схематичне представлення q -станової моделі Поттса на графі (спіни можуть приймати значення $S = 1, 2, \dots, q$).

Перш ніж перейти до результатів для критичної поведінки на мережі, можна коротко навести опис типової поведінки для моделей на ґратках. Так критична поведінка моделі Ізінга на ґратці залежить від вимірності простору d [63, 64]:

- $d = 1$ – фазовий перехід при $T > 0$ відсутній;
- $d \geq 2$ – ФП 2 роду:
 - $d = 2$: точний розв’язок Онзагера;
 - $2 < d < 4$: критичні показники стають d -залежними;
 - $d = 4$: виникають логарифмічні поправки до скейлінгу;
 - $d > 4$: поведінка середнього поля.

Для моделі Поттса на ґратці критична поведінка, окрім вимірності простору d залежить від глобального параметра q . Так її зручно продемонструвати на фазовій діаграмі, див. Рис. 1.9 [65]. Вище певного критичного значення $q_c(d)$ відбувається перехід першого роду для $q > 2$, а нижче – другого роду із d -залежними критичними показниками, при $q < 2$ – спостерігається неперервний фазовий перехід. Відомі точки $q_c(2) = 4$, $q_c(4) = 2$ і $q_c(6) = 1$ позначені незамкненими кружками. Чорне коло вказує на передбачуваний перехід першого роду для $d = 3$, $q = 3$.

Однак, для мереж чи графів, поняття вимірності простору неозначене, ва-

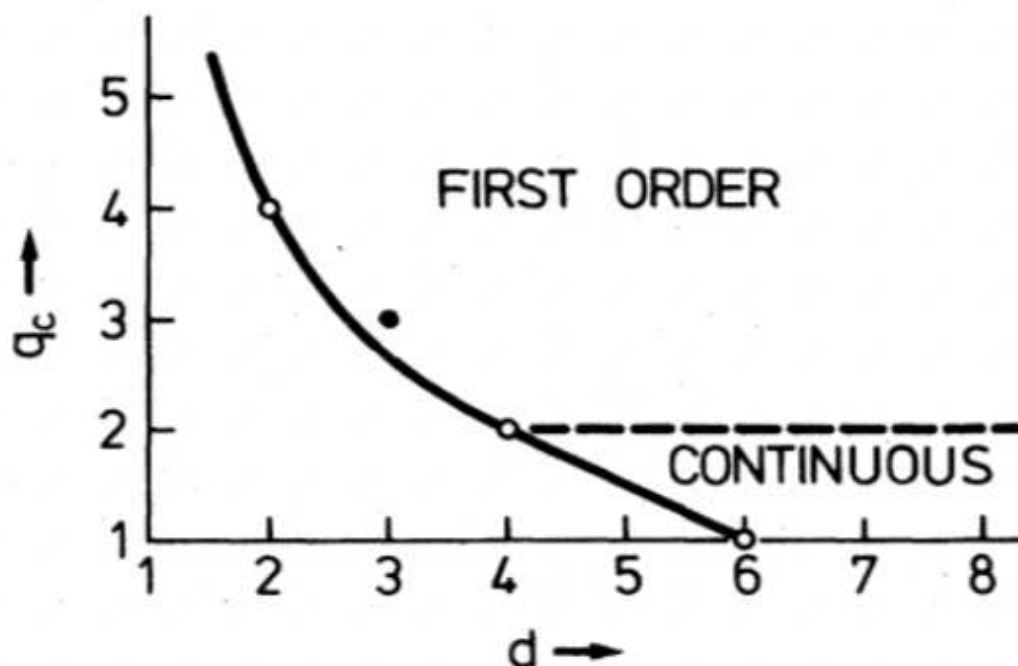


Рис. 1.9. Фазова діаграма моделі Поттса на ґратках різної вимірності при різних значеннях q [65].

жлива топологія. Типова критична поведінка моделі Ізінга на безмасштабній мережі залежить від показника λ [66–69]:

- $2 < \lambda \leq 3$ – ФП відсутній, система впорядкована при будь-якій скінченній температурі;
- $\lambda > 3$ – ФП 2 роду:
 - $3 < \lambda < 5$: критичні показники стають λ -залежними;
 - $\lambda = 5$: виникають логарифмічні поправки до скейлінгу;
 - $\lambda > 5$: поведінка середнього поля.

Для моделі Поттса на безмасштабній мережі критичну поведінку теж зручніше підсумувати на фазовій діаграмі (див. Рис. 1.10). Вона виявляється схожою до поведінки на ґратці, з основною відмінністю, що тепер роль глобального параметра, що визначає критичну поведінку, відіграє показник загасання функції розподілу λ .

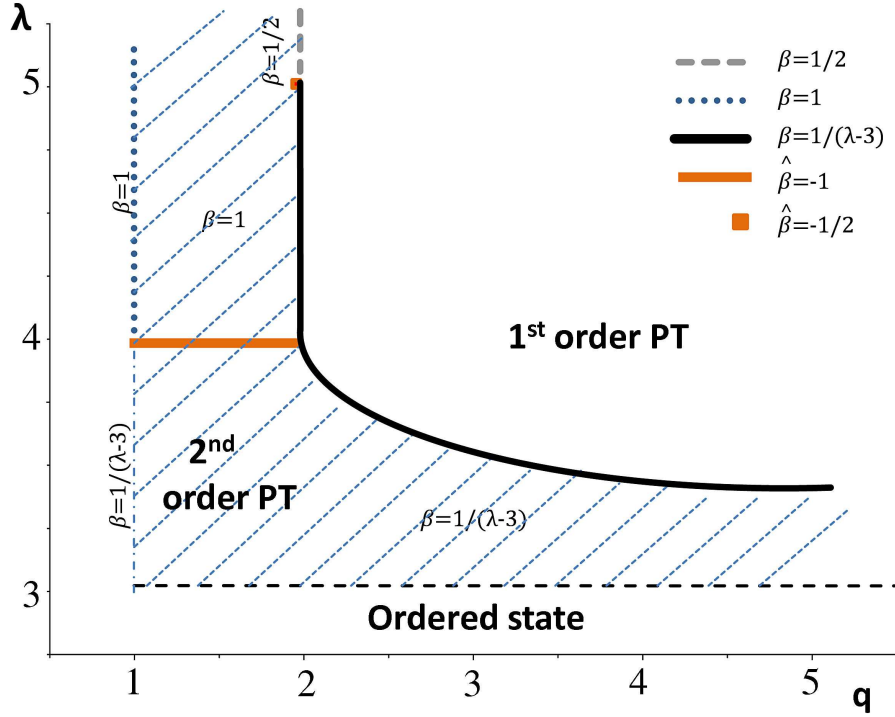


Рис. 1.10. Фазова діаграма моделі Поттса на безмасштабній мережі. Тут β є критичним показником для параметра порядку: $m \sim \tau^\beta$ [70].

1.5.2. Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна

Нещодавно ми запропонували розширення моделі Ізінга [8, 9]: вона зберігає двійкову природу моделі Ізінга, одночасно послаблюючи вимогу фіксованої довжини спіна. У нашій моделі довжина спіну розглядається як випадкова змінна відповідно до заданої функції розподілу ймовірностей $q(\mathcal{S})$ ($\mathcal{S}_{\min} \leq \mathcal{S} \leq \mathcal{S}_{\max}$). Модель подібна до інших спінових моделей, які використовуються для вивчення впливу структурного безладу на колективну поведінку [71–78].

Нашою основною мотивацією було дослідити критичну поведінку моделі на різних графах для аналізу колективної поведінки на складних мережах [6, 7]. Основна увага була зосереджена на дослідженні конкуренції індивідуальних (спін) і глобальних (топология графа) властивостей. На Рис.1.11а представлено приклад моделі для соціальної мережі. Традиційні спінові моделі часто не можуть пояснити динаміку та формування думки. Ця модель, що включає індивідуальну силу спіна, відображає складну природу соціальних мереж, але також може мати пра-

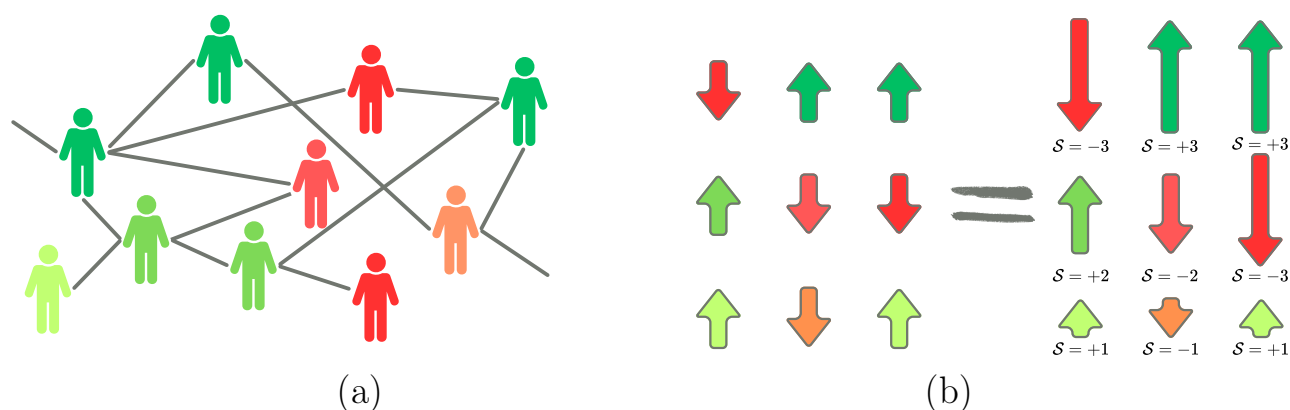


Рис. 1.11. Схематичне зображення моделі [15]. (a) Модель на соціальній мережі. Кожному окремому вузлу мережі відповідає значення спінової змінної. Наприклад, розглядаючи мережу поширення позитивних і негативних емоцій, вузли графа можуть приймати або позитивні значення спіна (напрявлені вгору, $+\mathcal{S}$) – зелені значки, або негативні (напрявлені вниз, $-\mathcal{S}$) – червоні. Інтенсивність кольору відповідає силі спіна (довжині). (b) Модель на гратці. Подібно до моделі соціального спіну, магнітні системи містять спіни із бінарною опозицією (позитивні (вгору) – зелений і негативні (вниз) – червоний), які відрізняються силою (інтенсивність кольору або довжина спіна $\mathcal{S} = 1, 2, 3$).

критичне застосування в маркетингу, політиці та теорії ігор. Як окремий випадок міждисциплінарного застосування моделі можна взяти приклад із нейронауки. Пізнання базується на зв'язних структурах у мозку, а нейронні зв'язки залежать від взаємодії між мережевою геометрією та топологією [10, 11]. Змінна природа змінної сили вузла може сприяти моделюванню мережі [79], враховуючи відмінності в тому, як вузли, визначені як сукупності тканин мозку [80], функціонують у мережах мозку. Вузли, діючи як інтерактивні одиниці, можуть демонструвати варіації міцності, що відображає внутрішні структури [81] або зміни у функціональності з часом [82].

Основна увага була зосереджена на дослідженні конкуренції індивідуальних (спін) і глобальних (топология графа) властивостей. Було проаналізовано критичну поведінку моделі на різних типах графів. Більш детально див. у **Розділах 3 та 4**. З іншого боку, для об'єктів статистичної фізики модель пропонує розуміння впливу структурного безладу на колективну поведінку в магнітних системах з полідисперсними елементарними моментами [83, 84]. Використовуючи теоретико-

польовий підхід ренормгрупи для потоку ренормгрупи при різних початкових умовах, обчислено ефективні критичні показники. Проілюстровано, як зміна властивостей магнітних компонентів впливає на ефективні показники. Показано, що модель з наявністю двох (і більше) хімічно різних магнітних компонентів (спінів різної довжини) еквівалентна розбавленим магнетикам з немагнітними домішками [19] (див. також схематичне представлення на Рис.1.11b). Крім того, було підтверджено таку спостережувану поведінку за допомогою моделювання Монте-Карло [20]. Більш детально див. у **Розділі 5**.

1.5.3. Моделювання безладу

Заморожений структурний безлад неминуче присутній у реальних магнітних матеріалах, викликаючи цікаві особливості термодинамічних властивостей, що відрізняють їх від ідеально структурованих аналогів. Тому неупорядковані магнетики стали широко використовуватися для аналізу кооперативних явищ у системах із замороженим безладом, наприклад, поблизу точок фазових переходів [85]. Зокрема, дослідження впливу безладу на критичну поведінку мають велике значення не лише з фундаментальної точки зору, але й завдяки новим технологічним застосуванням структурно неупорядкованих матеріалів [86].

Вплив безладу залежать від його природи [87]. У цьому підрозділі розглянуто випадок, коли випадкові структурні недосконалості пов'язані з локальною густиною енергії. Критерій Гарріса дає якісну відповідь про можливі зміни класу універсальності під впливом такого слабкого замороженого безладу [88]. Він пов'язує зміну класу універсальності структурно неупорядкованої системи з поведінкою теплоємності її звичайного (чистого) аналога. Якщо теплоємність регулярної системи розбігається, тобто, якщо критичний показник теплоємності $\alpha_{\text{reg}} > 0$, то структурний безлад пригнічує таку розбіжність, що призводить до нової асимптотики теплоємності з $\alpha_{\text{dis}} < 0$. Це також викликає зміни в інших критичних показниках, відношеннях амплітуд і скейлінгових функціях, що призводить до появи нового класу універсальності. Оскільки з більшості поширених

$O(m)$ -симетричних магнетиків лише ізінгівські ($m = 1$) характеризуються розбіжною теплоємністю при просторовій розмірності $d = 3$, основну увагу при аналізі виникнення нового класу універсальності було сконцентровано на поведінці структурно неупорядкованих Ізінгівських магнетиків із замороженим безладом.

Архетипним прикладом можуть бути розведені одновісні магнітні сплави $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, отримані шляхом заміщення немагнітним ізоморфом ZnF_2 його антиферомагнітного аналогу (FeF_2 або MnF_2) [89–91]. Хоча відомо, що “випадкові магнетики є матеріалами заміщення шляхом введення безладу, в яких декілька видів магнітних або немагнітних іонів сплавлені разом” [85], найпоширенішими прикладами магнітних систем із локальною температурою випадкового переходу, що вивчаються в експериментах і при моделюванні методом Монте-Карло є розведені системи магнітних і немагнітних компонент, такі як 3D-модель Ізінга із розведенням вузлів [92–95].

У дисертаційній роботі для дослідження поведінки структурно-неупорядкованих магнетиків розглядається модель Ізінга зі змінною довжиною, тобто, при наявності у системі магнетиків різних типів – спіни зберігають симетрію моделі Ізінга (спрямовані лише вгору та вниз), але можуть змінювати значення довжини спіна. Хоча модель була запропонована у контексті колективної поведінки на складних системах [8, 9], але її також було застосовано і для аналізу магнітного та фазового переходу для спінових стекол у магнетиках [19, 96]. Система взаємодіючих спінів випадкової довжини схематично представлена на Рис.1.12а. Очевидно, покладаючи для довжини всіх спінів рівні 1, ми отримаємо звичайну 3D-модель Ізінга, показану на Рис.1.12b. У аналізі буде досліджено випадок показаний на Рис.1.12c, коли вузли ґратки зайняті спінами двох різних довжин. На Рис. 1.12d – розведена модель Ізінга, в якій частина вузлів зайнята магнітними ізінгівськими спінами, а інші є немагнітними (або порожні). Причому буде показано, що ефективні Гамільтоніани двох останніх моделей належать до одного класу універсальності.

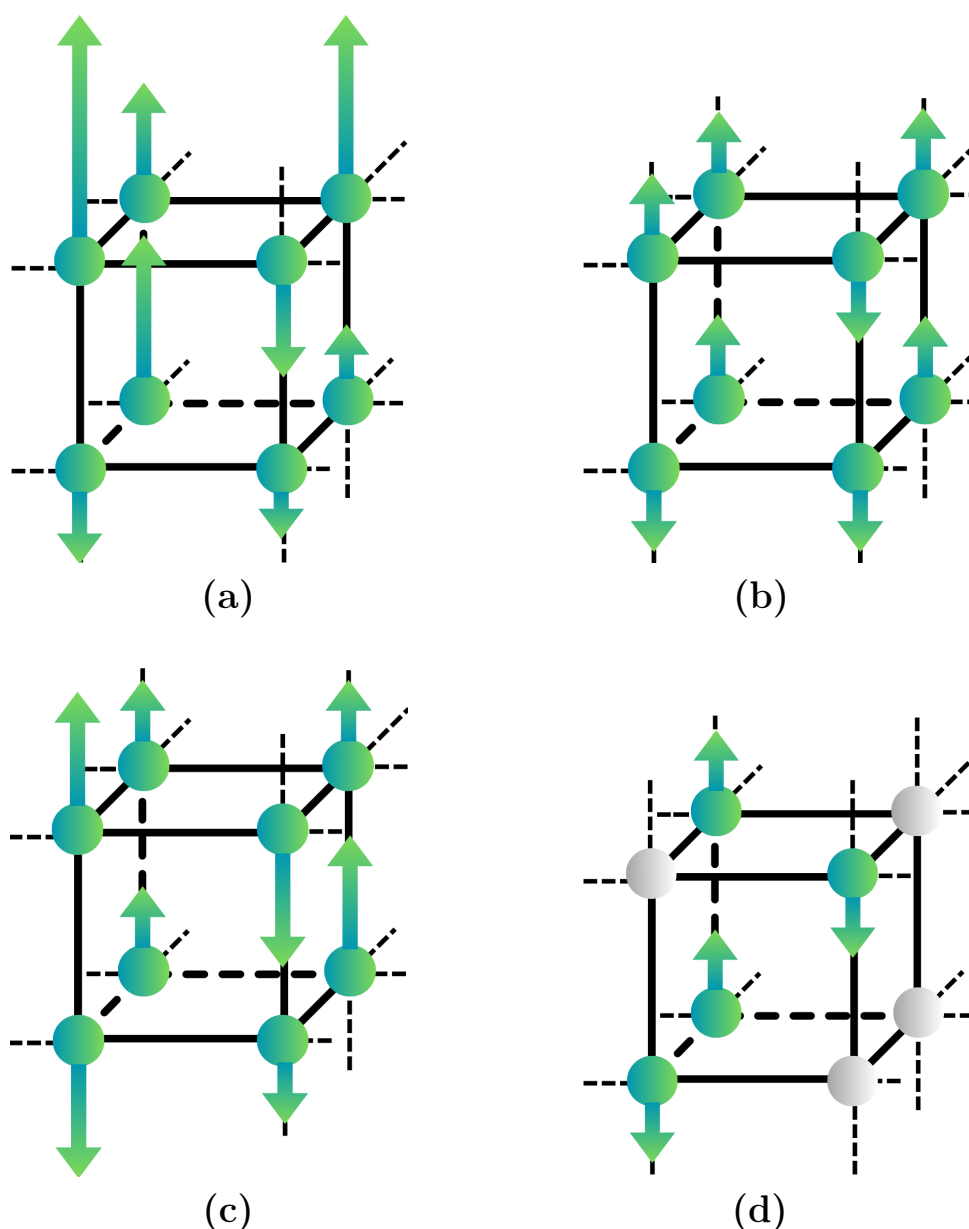


Рис. 1.12. Схематичне зображення **(а)** моделі Ізінга зі змінною випадковою довжиною спіна, **(б)** стандартна 3D модель Ізінга (зі спінами ± 1), **(с)** окремий випадок моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна: суміш двох магнетиків Ізінга з двома різними довжинами спінів, **(д)** розведена модель Ізінга, де деякі вузли (сірі) зайняті немагнітними сполуками або порожні.

1.5.4. Моделі, що дозволяють регулювати рід фазового переходу

Були запропоновані різні моделі, щоб пояснити, як порядок фазового переходу можна змінити, керуючи різними параметрами. Наприклад, моделі Блюма-Капеля [97, 98] і Блюма-Емері-Гріфітса [99] досягають цього шляхом зміни кри-

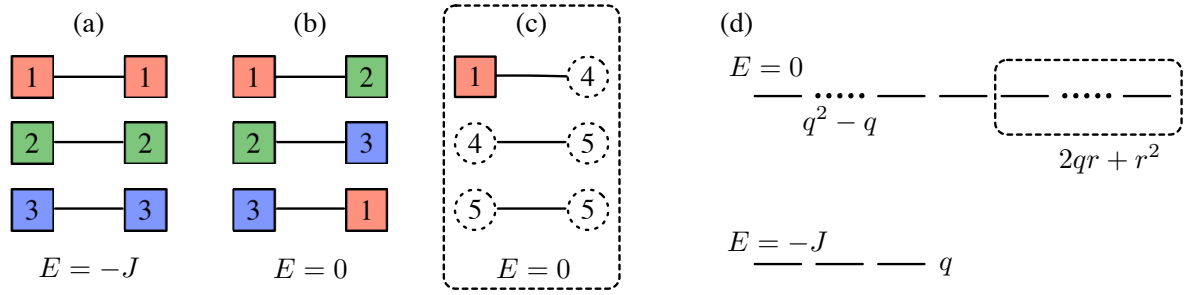


Рис. 1.13. (а)-(с): Різні конфігурації спінів для моделі (3,2) ISPM. Квадрати та пунктирні кола позначають видимі (кольорові) стани та невидимі стани відповідно. (а) Основні стани двоспінової системи. (b) і (с) Збуджені стани двоспінової системи. Обидва (а) і (b) також з'являються у випадку стандартної феромагнітної q -станової моделі Поттса тоді як конфігурації, показані в (с), з'являються лише при наявності невидимих станів. (d) Структура енергетичних рівнів двоспінової системи для (3,2) ISPM. Кількість основних і збуджених станів становить q і $q^2 - q + 2qr + r^2$ відповідно. Пунктирні рамки в (с) і (d) позначають внесок невидимих станів [101].

сталічного поля і хімічного потенціалу. У моделі Вайнфлаша [100] кількість мікростанів визначає порядок фазового переходу. Однак жоден із цих випадків не виходить за межі симетрії Z_2 .

Модель Поттса з “невидимими” станами (ISPM)

Модифікація моделі Поттса була сформульована [101, 102] як спроба налаштувати інтенсивність / порядок фазового переходу у випадку симетрії Z_q . Стан кожного зі спінів описується спіновою змінною S_i , яка може приймати $(q+r)$ різних значення $S_i = (1, \dots, q, q+1, \dots, q+r)$. Тому перші стани q вважаються “видимими”, а решта r — “невидимими”. У тексті ми будемо називати цю модель (q, r) ISPM (акронім від Invisible-State Potts Model). Проста ілюстрація енергетичних рівнів двоспінової системи з невидимими станами наведена на рис. 1.13 (відтворено з [101]). На малюнку 1.13a показано три різні комбінації основного стану для (3,2) ISPM. Рисунок 1.13b-с позначає збуджені стани для (3,2) ISPM моделі. Стани, зображені на рис. 1.13 a і b, з'являються в стандартній моделі Поттса з феромагнітним q -станом, тоді як стани, зображені на рис. 1.13c з'являються лише тоді,

коли вводяться невидимі стани. На рис. 1.13d показано структуру енергетичних рівнів двоспінової системи для (q, r) ISPM. Кількість основних станів становить q , а кількість збуджених станів — $q^2 - q + 2qr + r^2$. Внесок невидимих станів у збуджені стани становить $2qr + r^2$. Ця структура енергетичних рівнів вказує на те, що q -кратна симетрія порушується в точці переходу.

Вже через десять років після появи модель Поттса з невидимими станами привернула значний інтерес. Вона була проаналізована як аналітичними [16, 17, 103–108], так і чисельними [14, 101, 102] методами для пояснення різноманітних явищ у фізиці та за її межами [109–111]. Значною мірою цей інтерес зумовлений тією особливістю моделі, яка дозволяє змінювати інтенсивність та навіть порядок фазового переходу шляхом постійного налаштування параметрів моделі, зберігаючи незмінними інші глобальні характеристики, такі як вимірність простору, діапазон взаємодії та симетрія. Більш детальні результати для моделі, зокрема оригінальні результати, отримані при дослідженні на графах різної топології, буде наведено у **Розділі 2**.

Модель Блюма-Капеля та метод аналізу нулів статистичної суми

Модель була запропонована як варіація моделі Ізінга для якої спінова змінна може приймати три значення: $S_l = -1, 0, 1$. Серед інших параметрів, окрім температури, які визначають критичну поведінку системи, є кристалічне поле Δ та зовнішнє магнітне поле H . Їх значення в критичній та трикритичній точці є добре відомі, так само як і показники середнього поля. А саме [112–114]:

- **критична точка** ($T = \frac{2}{3}, \Delta = 0, H = 0$): $\alpha = 0, \beta = 1/2, \delta = 3$;
- **трикритична точка** ($T = \frac{1}{3}, \Delta = \frac{2}{3} \ln 2, H = 0$): $\alpha = 1/2, \beta = 1/4, \delta = 5$.

У дисертаційній роботі завданням було застосовуючи формалізм нулів статистичної суми, дослідити асимптотики нулів для розкладених виразів статистичної суми цієї моделі на повному графі (в околі критичної та трикритичної точки) в площині комплексної температури, комплексного магнітного поля та комплексного кристалічного поля. Це питання буде розглянуто більш детально у **Розділі**

6.

Нулі Лі–Янга розраховують при дійсній температурі T в площині комплексного магнітного поля H , тоді як нулі Фішера аналізують в площині комплексної температури. У термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ нулі формують неперервні криві в комплексній (H чи T) площині. Аналізуючи розташування і скейлінг нулів, у формалізмі Лі–Янга–Фішера здійснюють альтернативний опис критичної поведінки всієї системи і знаходять її універсальні характеристики. Отримані нами раніше результати стосуються аналізу нулів Лі–Янга і Фішера для моделі Ізінга на відпаленій безмасштабній мережі [115, 116]. Приємно зазначити, що наші роботи стали першими, у яких такий формалізм застосовано для аналізу критичної поведінки на безмасштабній мережі.

Статистична сума скінченної системи, як функція дійсних зовнішніх параметрів, не може приймати нульового значення. Однак ситуація змінюється, якщо фізичні параметри (такі як T , H або Δ) вважати комплексними. Можна розглянути статистичну суму вздовж критичної лінії, або в комплексному магнітному полі $H = \text{Re}H + i\text{Im}H$ (нулі Лі–Янга) при $T = T_c$, або при $H = 0$ при комплексній температурі $T = \text{Re}T + i\text{Im}T$ (нулі Фішера). Наприклад, для заданого виразу статистичної суми, щоб визначити розташування нулів Фішера, необхідно знайти розв’язок для системи рівнянь: $\text{Re}Z(T, H = 0) = 0$ і $\text{Im}Z(T, H = 0) = 0$. Формалізм нулів статистичної суми для аналізу критичної поведінки є корисним, особливо тому, що він дозволяє досліджувати широкий спектр систем як аналітично, [115–122] так і чисельно [123–126]. Метод був вперше запропонований Лі та Янгом у 1952 році для моделі ґраткового газу, а згодом використаний як метод для розгляду магнітного поля як комплексної змінної та дослідження представлення статистичної суми як многочлена при відповідному параметрі [127, 128]. Пізніше цей метод був розширений Фішером для аналізу нулів в комплексній температурній площині [129]. Універсальні характеристики можна отримати із аналізу координат нулів у відповідній комплексній площині. Ці характеристики пов’язані між собою через певні універсальні співвідношення з критичними показниками та амплітудами. Нулі Фішера накопичуються в околі критичної точки (яка має

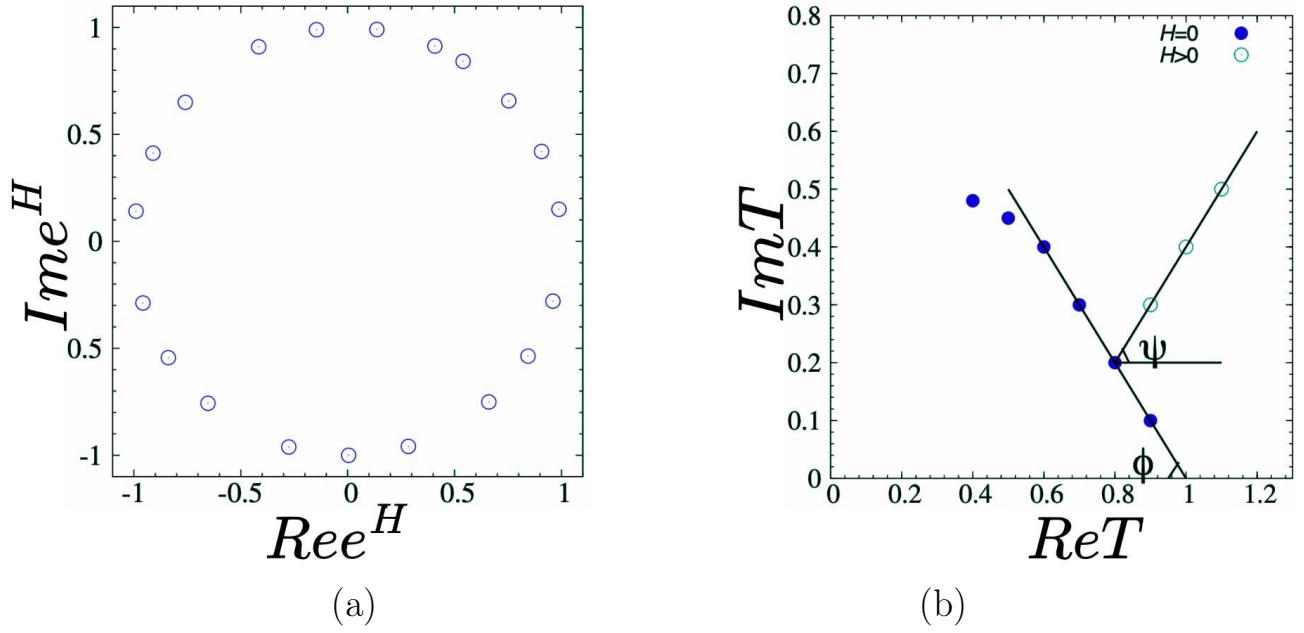


Рис. 1.14. Схематичне представлення: **(а)** нулі Лі-Янга (для комплексного магнітного поля), **(б)** нулі Фішера (для комплексної температури) [131].

дійсне значення) T_c вздовж лінії та прагнуть перетнути дійсну вісь під кутом φ . Існує співвідношення, яке пов'язує кут нулів Фішера φ із критичним показником теплоємності α та з універсальним відношенням амплітуд теплоємності A_-/A_+ , де A_+ , A_- — це амплітуди при $T > T_c$, $T < T_c$ [117, 118, 121]:

$$\tan[(2 - \alpha)\varphi] = \frac{\cos(\pi\alpha) - A_-/A_+}{\sin(\pi\alpha)}. \quad (1.3)$$

Скейлінгове співвідношення для координат нулів впливає з загальних міркувань і для нулів Лі-Янга та Фішера має вигляд [116, 118, 121, 130]:

$$H_j(N, T = T_c) \sim \left(\frac{j}{N}\right)^{g_h}, \quad T_j(N, H = 0) \sim \left(\frac{j}{N}\right)^{g_t}, \quad (1.4)$$

$$g_h = \frac{\beta\delta}{2 - \alpha}, \quad g_t = \frac{1}{2 - \alpha}, \quad (1.5)$$

де мітка j позначає порядок нуля. Показники степеня g_h, g_t , які називаються показниками загасання, оскільки вони вказують на відстань між нулем статистичної суми та дійсною віссю. Схематичне представлення для картини нулів наведено на Рис. 1.14.

Оскільки критичні та трикритичні особливості моделі Блюма-Капеля на повному графі в асимптотичній границі $N \rightarrow \infty$ керуються показниками сере-

днього поля, можна вивести на їх основі очікувані значення кутів і показників, які описують поведінку нулів. Ці значення наведені в таблиці 1.1.

Відомі результати MFA [112–114]	Трикритична точка (T_t)	Критична точка (T_c)
α	1/2	0
β	1/4	1/2
δ	5	3
γ	1	1
A_+/A_-	0	0
Очікувані результати		
φ , див Рів.(1.3)	$\pi/3$	$\pi/4$
g_h із Рів. (1.4)	5/6	3/4
g_t із Рів. (1.4)	2/3	1/2

Табл. 1.1. Критичні показники та очікуваний скейлінг для координат та кутів нулів моделі Блюма-Капеля в трикритичній та критичній точках.

Для моделі Блюма-Капеля, крім нулів Лі-Янга та Фішера, можна також скористатися аналізом нулів статистичної суми в площині комплексного кристалічного поля при нульовому магнітному полі [125, 132]. Так обираємо точку на критичній лінії (див. Рис. 6.1), підставляємо $\Delta = \text{Re}\Delta + i\text{Im}\Delta$. Стверджується, що поведінка цих нулів кристалічного поля повинна бути такою ж, як і у випадку з нулями Фішера, за винятком того, що скейлінгове поле, пов'язане з кристалічним полем, чітко визначене у трикритичній точці та погано визначене, коли наближається до критичної точки “Ізінга” при $\Delta = 0$ [125].

1.6. Висновки

У цьому розділі увагу було зосереджено на роботах присвячених розгляду деяких моментів колективної поведінки на складних мережах. Зокрема, на тих роботах, у яких аналізуються фазові переходи і критичні явища, використовуються спінові моделі. Незважаючи на актуальність таких досліджень і значний доробок у цій галузі, чимало питань залишається нез'ясованими. Вони і становитимуть предмет розгляду у дисертації.

Так у наступних оригінальних розділах дисертації буде вперше дослідже-

но критичну поведінку моделі Поттса з невидимими станами на безмасштабній мережі і показано як введення невидимих станів може змінити рід фазового переходу навіть у випадку перколяції. Для запропонованого узагальнення моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна критична поведінка буде досліджуватися на графах різних типів, а також для пояснення поведінки та моделювання структурно-непорядкованих 3D магнетиків. Буде застосовано аналіз нулів статистичної суми для дослідження моделі Блюма-Капеля на повному графі. Отримано, асимптотичну поведінку нулів для розкладеного виразу статистичної суми. І на завершення, методами теорії складних мереж буде проаналізовано способи побудови та характеристики мереж реального світу на прикладі мережі співавторства журналу та семантичної мережі понять.

Розділ 2

МОДЕЛЬ ПОТТСА З НЕВИДИМИМИ СТАНАМИ НА ГРАФАХ РІЗНОЇ ТОПОЛОГІЇ

У цьому розділі представлено результати дослідження критичної поведінки магнетиків складної структури при наявності безладу та конкуренції ентропії і енергії, а саме – моделі Поттса з невидимими станами на графах різної топології. У підрозділі 2.1 описано теоретичні принципи моделі, мотивацію та застосування. У наступному підрозділі 2.2 наведено огляд результатів досліджень моделі отримані іншими групами. Наступні два підрозділи стосуються оригінальних досліджень критичної поведінки моделі — на повному графі, графі Ердоша-Рені (підрозділ 2.3) та відпаленій безмасштабній мережі (підрозділ 2.4). У висновках підсумовано основні результати.

За результатами досліджень опубліковано 4 статті [15–18] та тези конференцій [28, 35, 36, 38, 40, 44, 46–49].

2.1. Огляд, мотивація

Модель Поттса з невидимими станами [101, 102] була запропонована, щоб пояснити розбіжності між теоретичними передбаченнями та експериментальними спостереженнями особливостей у критичній поведінці певних 2D систем зі спонтанно порушеною Z_3 -симетрією. Так, для $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ з магнітними елементами, розташованими на стільниковій ґратці з Z_3 -симетрією, на експерименті спостерігали поведінку фазового переходу першого роду [133–135]. Це, очевидно, не сумісне з теоретичними прогнозами для стандартної 2D феромагнітної q -станової моделі Поттса у якій хоча для $q > 4$ спостерігається фазовий перехід першого

роду, але при скінченій температурі, коли $q \leq 4$ [65] система описується фазовим переходом другого роду.

Гамільтоніан моделі Поттса з невидимими станами записується як:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{S_i, S_j} \sum_{\alpha=1}^q \delta_{S_i, \alpha} \delta_{S_j, \alpha}, \quad (2.1)$$

де $S_i = 1, \dots, q, q+1, \dots, q+r$ — поттсівська спінова змінна, δ — дельта-символ Кронекера, q і r — числа “видимих” і “невидимих” станів відповідно. Для моделі Поттса з невидимими станами взаємодія між двома сусідніми спінами вносить вклад в енергію, лише якщо обидва спіни знаходяться в тому самому “видимому” стані. Перша сума в (2.1) береться за всіма різними парами взаємодіючих частинок, а для другої суми потрібно, щоб обидва взаємодіючі спіни перебували в одному стані серед станів підмножини $S_i \in (1, \dots, q)$. Це і є підставою називати такі стани “видимими”. Як можна побачити з гамільтоніана (2.1), головна і єдина відмінність від звичайної моделі Поттса [65, 136] полягає в тому, що коли спін знаходиться в одному з $q+1, \dots, q+r$ “невидимих” станів, він не взаємодіє зі своїми сусідами, і, як наслідок, не вносить вклад в енергію взаємодії. Однак їх присутність збільшує кількість можливих спінових конфігурацій і, отже, вони роблять внесок в ентропію. Очевидно, що зміни параметра r , які керують кількістю невидимих станів і, таким чином, призводять до змін ентропії, зрештою викликають нову незвичну поведінку моделі. Слід зазначити, що кількість основних станів (q, r) ISPM така ж, як і стандартної феромагнітної q -станової моделі Поттса. Таким чином, (q, r) ISPM демонструє фазовий перехід із q -кратним порушенням симетрії.

2.2. Формулювання, точні результати та симуляції

Гамільтоніан ISPM задається рівнянням (2.1) і при $r = 0$ зводиться до стандартної моделі Поттса [136]. У [102] було досліджено феромагнітний фазовий перехід для (q, r) ISPM на квадратній ґратці з періодичними граничними умовами в наближенні Бреґга-Вільямса для $q = 2, 3, 4$, коли теорією передбачений другий

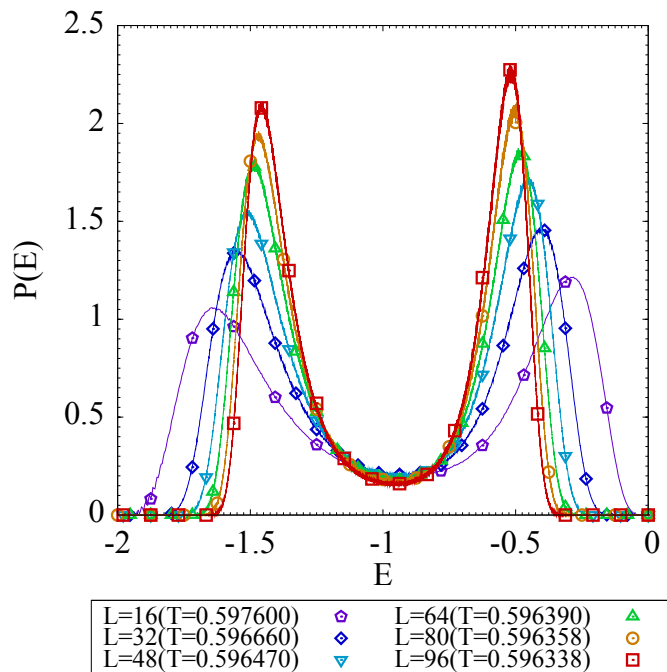


Рис. 2.1. Розподіл енергії для моделювання (3,25) ISPM на квадратній ґратці. Структура подвійного піку, де обидва піки збільшуються з розміром системи, сигналізує про існування фазового переходу першого роду. Похибки відхилення пропущені для ясності, оскільки вони менші за розмір символу[102].

рід фазового переходу. Автори також досліджували природу фазового переходу (3, 25) ISPM методом моделювання Монте-Карло, використовуючи стандартний метод Метрополіса. Вони розраховували температуру переходу та проаналізували питому теплоємність, намагніченість і щільність станів. На рис. 2.1 показано розподіл ймовірностей внутрішньої енергії $P(E)$ із бімодальною формою розподілу, що свідчить про типову поведінку фазового переходу першого роду [102].

У наступній статті [101], використовуючи варіант апроксимації середнього поля Бреґга-Вільямса та моделювання МС, було виявлено, що температура переходу знижується, а прихована теплота збільшується зі збільшенням кількості невидимих станів. Залежність прихованої теплоти та температури переходу від кількості невидимих станів r для ISPM з $q = 2, 3$ та 4 показано у [101]). Для побудови цього графіка припущено, що кожен спін взаємодіє з $z = 4$ найближчими сусідами. З рис. 2.2 випливає, що фазовий перехід другого роду має місце лише для (2, 1), (2, 2) і (2, 3) ISPM. Результати моделювання для питомої теплоємності

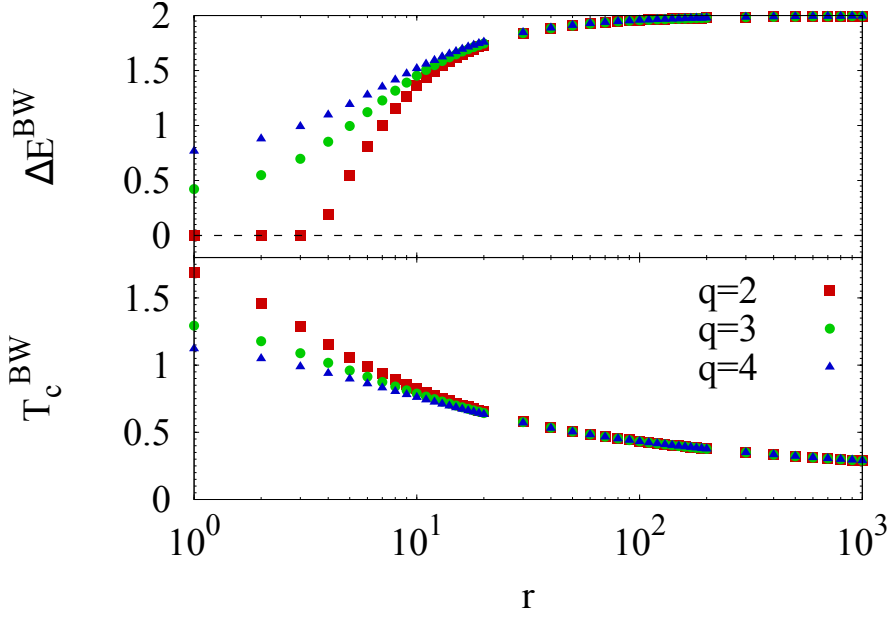


Рис. 2.2. Температура переходу T_c^{BW} і прихована теплота ΔE^{BW} як функції кількості невидимих станів r для $z = 4$ в наближенні Брега-Вільямса [101].

та температури переходу, отримані в [101] підсумовані в таблиці 2.1.

Випадкове кластерне представлення ISPM було введено в роботах [103, 104, 109]. Це дозволило авторам, використовуючи аргумент Пирогова-Синая, строго довести, що коли $(q + r)$ є достатньо великим, система зазнає фазового переходу першого роду. Цього можна досягти або великою кількістю видимих станів q , або

Табл. 2.1. Температура переходу та прихована теплота для кількох наборів параметрів (q, r) [101]. Для випадку $r = 0$ T_c і ΔE були отримані точно в роботі [65].

(q, r)	T_c	ΔE	Симетрія
(2,0)	1.13459	0	2-fold
(2,30)	0.57837(1)	1.02(2)	2-fold
(2,32)	0.56857(1)	1.23(2)	2-fold
(3,0)	0.994973	0	3-fold
(3,25)	0.59630(1)	0.81(2)	3-fold
(3,27)	0.58513(1)	1.05(2)	3-fold
(4,0)	0.910239	0	4-fold
(4,20)	0.61683(1)	0.68(2)	4-fold
(4,22)	0.60396(1)	0.87(2)	4-fold

малими значеннями q та для великої кількості невидимих станів r . Можна переписати статистичну суму для (q, r) ISPM в термінах статистичної суми r -зміщеної моделі випадкового кластера. Подібно до стандартної моделі випадкових кластерів, r -зміщена модель є корельованою моделлю перколяції зв'язків. Різниця між цією новою моделлю та оригінальною моделлю випадкового кластера полягає в тому, що її одинарно зв'язані компоненти тут мають ваги $q+r$, тоді як неординарні зв'язані компоненти мають вагу q . У границі $r \rightarrow 0$ відновлюється вихідне випадкове кластерне представлення моделі Поттса. Великі ваги одиничних зв'язаних компонентів призводять до збільшення ентропії, коли кількість невидимих станів збільшується. Однак виродження основного стану (тобто, кількість видимих станів) залишається незмінним. Випадкове кластерне представлення моделі Поттса дозволяє елегантно сформулювати інтуїтивні поняття “порядок” і “безлад” [137]. Кожна конфігурація в цій моделі розглядається як певне розташування “впорядкованих” і “невпорядкованих” зв'язків графа [109]. Тоді стан рівноваги визначається нижчою енергією, спричиненою взаємодією між упорядкованими та неупорядкованими кластерами, і відбувається фазовий перехід першого роду, якщо в точці переходу є прихована теплота. Однак цей підхід не дозволяє точно знайти значення r_c , при якому відбувається перехід першого роду. Температура переходу ISPM була асимптотично задана $\beta_c \sim \frac{1}{2} \log(q + r)$. Доведення були застосовані для досить високих значень q та/або r , що змусило припустити, що динамічні властивості ISPM мають поведінку, подібну до того, що відбувається у звичайній моделі Поттса [138].

Було досліджено динамічні властивості плавлення для ISPM на квадратній ґратці при фіксованих температурах вище температури фазового переходу [14]. Для правила еволюції часу у Монте-Карло симуляціях використовувався метод Метрополіса з одиничним перевертанням спіна (single-spin-flip). Щоб проаналізувати динамічні властивості моделі, було розглянуто три спостережувані – параметр порядку $\langle m(t) \rangle$, щільність невидимих станів $\langle \rho_{\text{inv}}(t) \rangle$ і внутрішню енергію $\langle e(t) \rangle$ [14]. Тут $\langle \dots \rangle$ означає середнє значення по ансамблю. На рис.2.3 ці три значення для (3,27) ISPM нанесено на графік у залежності від часу для різних

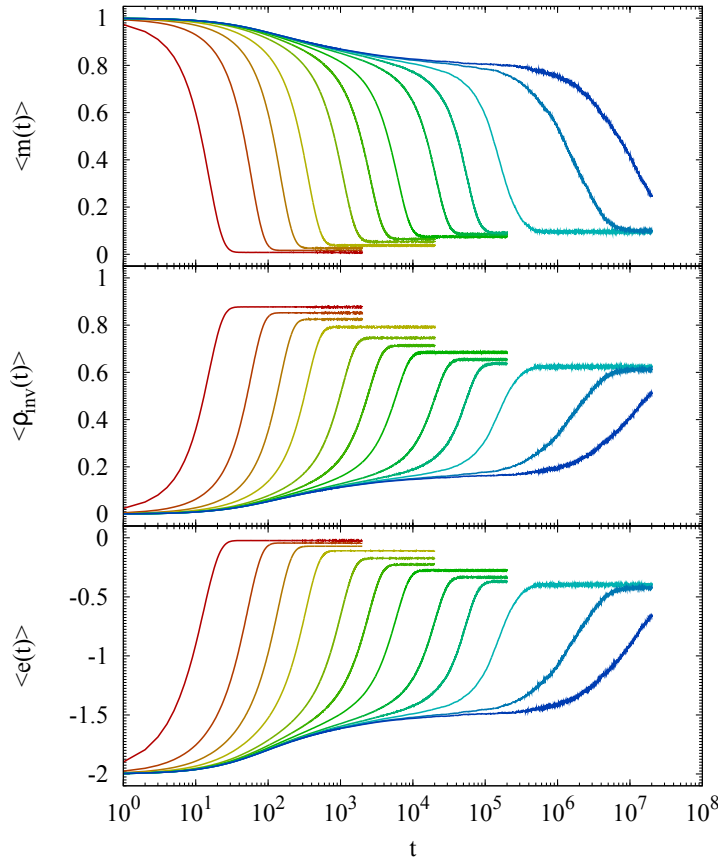


Рис. 2.3. Часова еволюція параметра порядку $\langle m(t) \rangle$, щільність невидимих станів $\langle \rho_{inv}(t) \rangle$, та внутрішньої енергії $\langle e(t) \rangle$ ($\langle \dots \rangle$ ISPM (3,27) починаючи з повністю впорядкованого стану для різних фіксованих температур. [14]

температур. Зрозуміло, що існує двоступенева релаксація, характерна для систем з фазовим переходом першого роду, а також для систем типу спінових стекл. Іншим цікавим аспектом є поведінка параметра порядку. Коли температура наближається до температури переходу, плато стає довшим. Характерний час плавлення $\tau_{\max}$ було знайдено за піками динамічної сприйнятливості. Коли температура наближається до температури переходу, час плавлення збільшується. Швидкість зростання $\tau_{\max}$ залежить від енергетичного бар'єру між упорядкованим і парамагнітним станами. У ISPM можна контролювати енергетичний бар'єр між фазами без зміни симетрії, яка порушується в точці переходу. Щоб дослідити, як невидимі стани впливають на час плавлення, було змодельовано модель (3, 25) ISPM. Отримані результати показують, що далеко від критичної точки немає ніякого

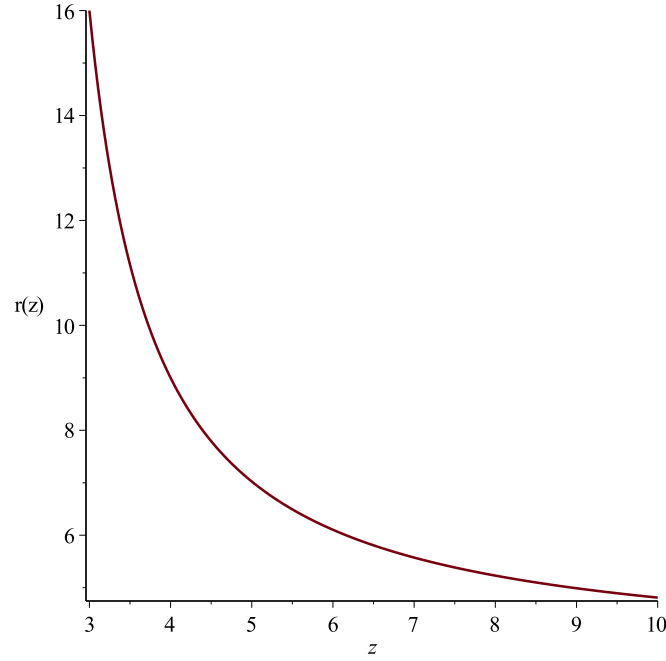


Рис. 2.4. Критична кількість невидимих станів $r_c(z)$, вище яких $(2, r)$ ISPM відображає перехід першого порядку, нанесена на графік як функція кількості сусідів z на ґратці Бете [139].

впливу на час плавлення, однак поблизу T_c необхідно враховувати невидимі стани, оскільки час плавлення збільшується з r .

У роботі [139] ISPM розглядалась на ґратці Бете з z сусідами в окремому випадку $q = 2$. Показано, що граничне значення r_c , що розрізняє перехідні режими другого та першого роду, залежить від координаційного числа z . Використовуючи вищезгаданий зв'язок із моделлю Блума-Емері-Ґріффітса, було отримано аналітичний вираз для r_c :

$$r_c(z) = \frac{4z}{3(z-1)} \left(\frac{z-1}{z-2} \right)^z. \quad (2.2)$$

Для конкретних значень $z = 3$ і $z = 4$ це дає $r_c = 16$ і $r_c = 9$ відповідно. Тоді як в границі $z \rightarrow \infty$ отримуємо результат середнього поля Бреґга-Вільямса $r_c = 4e/3 \simeq 3,624$. Показано залежність r_c від z на рис. 2.4.

У статті [106] ISPM використовувалась для ілюстрації точності теорії середнього поля у взаємодіючих системах із далекодією. Для таких класичних спінових систем з неадитивними дальніми взаємодіями очікується, що ентропія буде ідентичною відповідній моделі середнього поля. Цю відповідність іноді назива-

ють “точністю теорії середнього поля”. Однак було виявлено, що це твердження не обов’язково вірне, якщо мікроканонічний ансамбль не еквівалентний канонічному ансамблю в моделі середнього поля. У статті були проаналізовані необхідні та достатні умови точності теорії середнього поля у випадку ISPM.

Альтернативний підхід середнього поля був запропонований для ISPM на випадкових графах [105]. Використовуючи 3-регулярні випадкові графи, автори розглянули вирадок $q = 2$ ISPM. Результати показали, що додавання невидимих станів змінює перехід з другого роду на перший. Однак кількість невидимих станів, необхідних для здійснення трансмутації для $q = 2$, становить $r_c = 17$, що набагато більше, ніж у випадку із застосування методу Брегга-Вільямса [102] або значення, отримане для межі $z \rightarrow \infty$ на ґратці Бете [139].

2.3. Модель на повному графі

2.3.1. Метод неоднорідного середнього поля

Гамільтоніан $(q + r)$ -станової моделі Поттса з невидимим r станами:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{S_i, S_j} \sum_{\alpha=1}^q \delta_{S_i, \alpha} \delta_{S_j, \alpha} - h \sum_i \delta_{S_i, 1}, \quad (2.3)$$

де $S_i = 1, \dots, q, (q+1), \dots, (q+r)$ — значення спінової змінної на вузлі $i = 1, \dots, N$, $\delta_{a,b}$ дельта символи Кронекера і h — зовнішнє магнітне поле, що діє на перший видимий стан. Перша сума охоплює парні взаємодії між найближчими сусідами. Лише стани з $S_i = 1, \dots, q$ вносять вклад у взаємодію в гамільтоніані і без втрати загальності ми можемо поставити константу зв’язку для повного графа рівною 1. Решта r станів не вносять вкладу в енергію взаємодії, але вони збільшують кількість доступних конфігурацій і, отже, сприяють збільшенню ентропії (а також внутрішньої енергії). Зовнішнє поле h зорієнтовано вздовж стану $S_i = 1$.

Надалі буде представлено аналіз термодинамічних властивостей цієї моделі в наближенні середнього поля, що відповідає розгляду гамільтоніану (2.3) на повному графі, коли всі вузли пов’язані між собою.

Як згадувалося вище, розрахунок середнього поля типу Брегга-Вільямса та моделювання Монте-Карло для двовимірної ґратки призводять до висновку, що зі збільшенням r фазовий перехід у моделі (2.3) стає “різкішим”; перехід другого роду змінюється на перехід першого. У міру подальшого збільшення r прихована теплота та стрибок параметра порядку також збільшуються в точці фазового переходу першого роду [12, 14]. Оскільки в наближенні середнього поля перехід звичайної q -станової моделі Поттса є першого роду для $q > 2$, аналіз середнього поля [12] зосереджений на моделі Ізінга при $q = 2$, щоб продемонструвати зміну роду фазового переходу зі збільшенням r . Показано, що при $r > 3$ фазовий перехід стає переходом першого роду. Однак, було визначено точне значення r_c для $q = 2$. Такий аналіз було здійснено вперше у наших роботах. Так було використано інший варіант підходу середнього поля для отримання точних оцінок критичного значення r_c для $q = 2$, а також для аналізу всієї області $1 \leq q \leq 2$. Окрім випадку моделі Ізінга, ця область включає ще один часто досліджуваний фізичний випадок, а саме – випадок перколяції зв’язків, $q = 1$ [65]. Ще одна проблема полягає в спостереженні за неперервною зміною граничної вимірності $r_c(q)$ як через те, що аналітичне продовження кількості станів є невід’ємною особливістю теоретико-польового опису критичних явищ, так і тому, що модель Поттса при нецілому q актуальна для опису ряду цікавих фізичних явищ. Щоб навести лише кілька прикладів, окрім перколяції зв’язків, слід згадати про межу $q \rightarrow 1$, що описує турбулентність [140, 141]. Універсальні проникаючі дерева (графи Фортуїна-Кастелейна) описуються $q = 0$ -моделлю Поттса з нульовим станом [142, 143]. Ця межа пов’язана з моделлю ґраткового газу [144] та мережами резисторів [145, 146]. Модель Поттса при $q = 1/2$ відповідає моделі спінового скла [147, 148], яку також можна використовувати для аналізу еволюції синтаксису та мови [149]. Нарешті, модель Поттса в області $0 \leq q < 1$ описує процеси гелеутворення та вулканізації в розгалужених полімерах [150].

Табл. 2.2. Низько- та високотемпературна асимптотика для термодинамічних середніх (2.4) та для параметрів порядку (2.23).

$\beta \rightarrow \infty$	$\mu = 1$	$\nu_1 = 0$	$\nu_2 = 0$	$m_1 = 1$	$m_2 = 1$
$\beta \rightarrow 0$	$\mu = \frac{1}{q+r}$	$\nu_1 = \frac{1}{q+r}$	$\nu_2 = \frac{1}{q+r}$	$m_1 = 0$	$m_2 = 0$

Щоб продовжити аналіз середнього поля, введемо термодинамічні середні

$$\langle \delta_{S_i, \alpha} \rangle = \begin{cases} \mu, & \alpha = 1, \\ \nu_1, & \alpha = 2, \dots, q, \\ \nu_2, & \alpha = q + 1, \dots, r. \end{cases} \quad (2.4)$$

Тут усереднення виконується для гамільтоніана (2.3):

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} (\dots) e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad \text{із} \quad \mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.5)$$

у термодинамічній границі, де β є оберненою температурою, а усереднення бере-
ться за всіма можливими конфігураціями спіна.

Відповідно до (2.4), в рамках наближення середнього поля, припускається, що середнє значення спіна в даному стані не залежить від його координати. Слід звернути увагу, що три різні середні μ , ν_1 і ν_2 необхідні для врахування стану за магнітним полем і для розрізнення видимих і невидимих станів. Їх високо- та низькотемпературна асимптотика наведена в Табл. 2.2. При високих температурах всі стани однаково ймовірні, тоді як при низьких температурах напрямок порушення симетрії визначається напрямком магнітного поля.

Ця асимптотична поведінка разом із очевидною умовою нормування $\mu + (q - 1)\nu_1 + r\nu_2 = 1$ дозволяє визначити параметри порядку:

$$\begin{aligned} m_1 &= \mu - \nu_1, \\ m_2 &= \mu - \nu_2. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Параметри порядку m_1 і m_2 мають стандартну температурну асимптотику, оскільки вони рівні нулю для $\beta \rightarrow 0$ і одиниці при $\beta \rightarrow \infty$, див. Табл. 2.2. Однак, як буде показано нижче, лише m_1 має фізичну інтерпретацію як величина параметра порядку, яка з'являється нижче точки переходу та порушує симетрію системи.

Легко показати, що також виконуються такі умови:

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{m_2 r + m_1 q + 1 - m_1}{q + r}, \\ \nu_1 &= \frac{(m_2 - m_1)r + 1 - m_1}{q + r}, \\ \nu_2 &= \frac{(m_1 - m_2)q + 1 - m_1}{q + r}.\end{aligned}\tag{2.7}$$

Перший δ символ Кронекера в гамільтоніані (2.3) стає зайвим, так що

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^q \delta_{S_i, \alpha} \delta_{\alpha, S_j} - h \sum_i \delta_{S_i, 1}.\tag{2.8}$$

Щоб отримати гамільтоніан середнього поля, представляємо кожен дельта-член Кронекера як суму його середнього значення та відхилення від цього середнього. Нехтуючи членами, що містять добуток двох таких відхилень, отримуємо:

$$\mathcal{H} = -\frac{z}{2} \sum_i [\mu(2\delta_{1, S_i} - \mu) + \sum_{\alpha=2}^q (2\delta_{\alpha, S_i} - \nu_1)\nu_1] - h \sum_i \delta_{S_i, 1},\tag{2.9}$$

де z — кількість найближчих сусідів. Для статистичної суми (2.5) можна записати:

$$\mathcal{Z} = e^{-N\beta z(\mu^2 + (q-1)\nu_1^2)/2} \prod_i [e^{\beta(h+z\mu)} + (q-1)e^{\beta z\nu_1} + r].$$

Для вільної енергії на спіні отримуємо:

$$\begin{aligned}f(m_1, m_2) &= -\frac{1}{\beta N} \log \mathcal{Z} = \frac{z}{2} \left(\frac{(m_1 q - m_1 + m_2 r + 1)^2}{(q + r)^2} + \right. \\ &\quad \left. \frac{(q-1)(-m_1 r - m_1 + m_2 r + 1)^2}{(q + r)^2} \right) - \\ &\quad \frac{1}{\beta} \log \left\{ \left(\exp \left[\beta \left(h + \frac{z(m_1 q - m_1 + m_2 r + 1)}{q + r} \right) \right] + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. (q-1) \exp \left[\frac{\beta z(-m_1 r - m_1 + m_2 r + 1)}{q + r} \right] + r \right) \right\}.\end{aligned}\tag{2.10}$$

Для $r = 0$ можна відтворити вільну енергію стандартної моделі Поттса як функції одного параметра порядку m_1 у наближенні середнього поля [151–153]. Звичайно,

параметр m_2 не виникає для стандартної моделі Поттса, оскільки там спостерігається лише фазовий перехід другого роду при $q \leq 2$. Нас зацікавило, як наявність невидимих станів змінює порядок цього переходу.

Термодинаміка моделі отримана шляхом мінімізації вільної енергії по відношенню до двох параметрів m_1 і m_2 та описується виразом (2.10). Зокрема, система рівнянь, яка визначає екстремуми вільної енергії, $\partial f / \partial m_1 = \partial f / \partial m_2 = 0$, запишеться:

$$\frac{(q+r) [e^{\beta(h+m_1 z)} - r - 1]}{e^{\beta(h+m_1 z)} + r e^{\frac{\beta z(m_1 r + m_1 - m_2 r - 1)}{q+r}} + q - 1} = m_1 [q + r(r+2)] - r(m_2 r + 1), \quad (2.11)$$

$$\frac{(q+r) [e^{\beta(h+m_1 z)} + q - 1]}{e^{\beta(h+m_1 z)} + r e^{\frac{\beta z(m_1 r + m_1 - m_2 r - 1)}{q+r}} + q - 1} = -m_1 r(q-1) + m_2 q r + q. \quad (2.12)$$

Розв'язки цих рівнянь $m_1(T, h)$, $m_2(T, h)$ проаналізовано нижче, щоб переконатися, що вони відповідають умові стабільності, тобто, відповідають мінімуму вільної енергії або локальним мінімумам в випадку фазового переходу першого роду. З цих міркувань і чисельно розв'язуючи систему нелінійних рівнянь (2.11), (2.12), ми знаходимо два типи розв'язків при нульовому зовнішньому магнітному полі та скінченній температурі, а саме (i) $m_1(T, 0) = 0$, $m_2(T, 0) \neq 0$ та (ii) $m_1(T, 0) \neq 0$, $m_2(T, 0) \neq 0$. Зауважимо, що $m_2(T, 0)$ ніколи не рівне нулеві при скінченній температурі. Тому лише $m_1(T, 0)$ є правильним параметром порядку, предсталиючи спонтанну намагніченість, яка сигналізує про фазовий перехід. При фіксованому q перехід від (i) до (ii) відбувається при скінченній r -залежній температурі $T_c(r)$.

2.3.2. Випадок $q = 2$

Спочатку розглянемо узагальнення моделі Ізінга за допомогою невидимих станів. На Рис. 2.5 зображено графік залежності температури фазового переходу для $q = 2$ як функції r для $z = 4$. Критична температура є гладкою функцією r і прямує до нуля, коли $r \rightarrow \infty$. Для $2D$ моделі Поттса з невидимими станами на квадратній ґратці критична температура T_c прямує до нуля для великих $(q+r)$

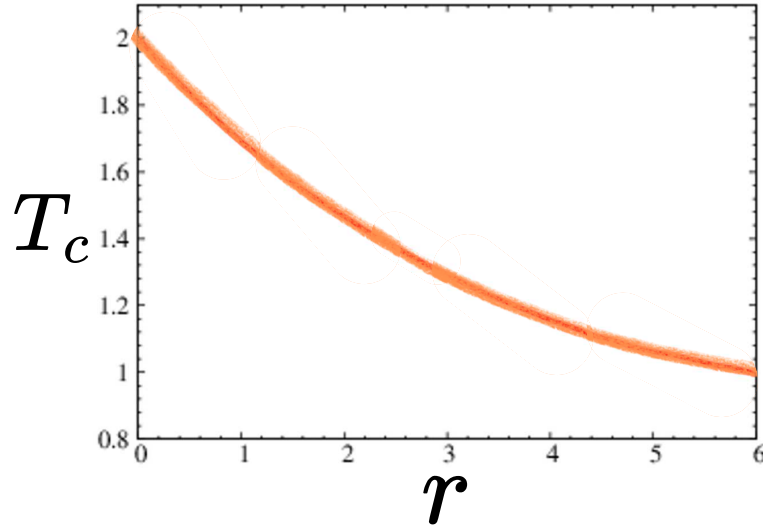


Рис. 2.5. Критична температура моделі Поттса для $q = 2$, $z = 4$ як функція кількості невидимих станів r . Критична температура є гладкою функцією r і прямує до 0 як $r \rightarrow \infty$.

як $T_c \approx 2/\ln(q + r)$ [103].

Як було показано в [12], $r = 4$ є достатньою кількістю невидимих станів для зміни фазового переходу від другого до першого роду для 2-станової моделі Поттса. Це встановлює верхню межу для граничної вимірності $r_c(q = 2) < 4$. Виводимо температурну залежність параметра порядку на Рис. 2.6 для $r = 0, 2, 4$.

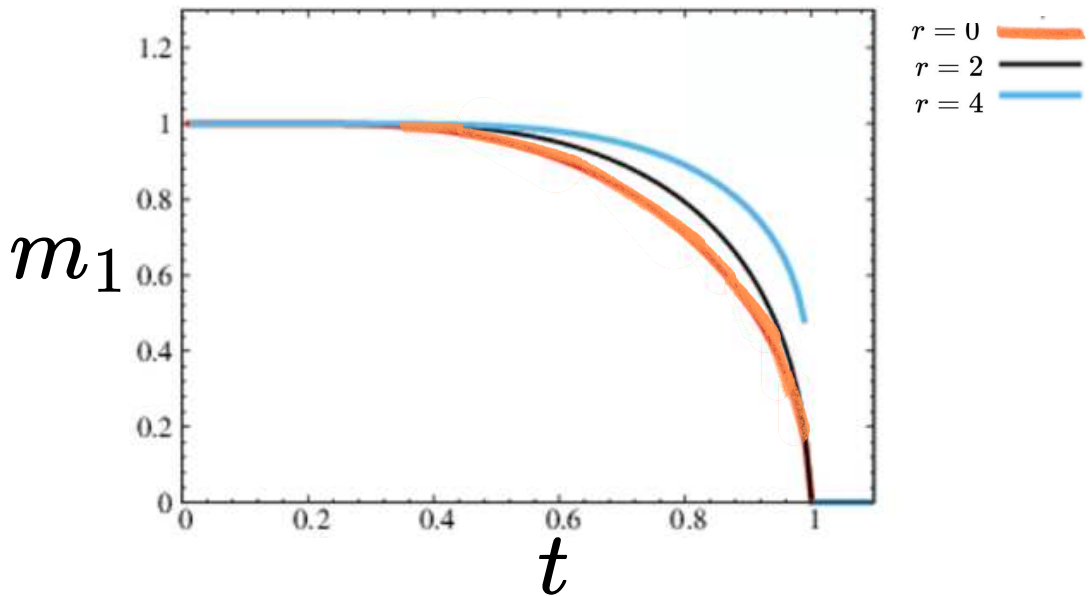


Рис. 2.6. Залежність параметра порядку m_1 від приведеної температури $t = T/T_c$ для $r = 0, 2, 4$.

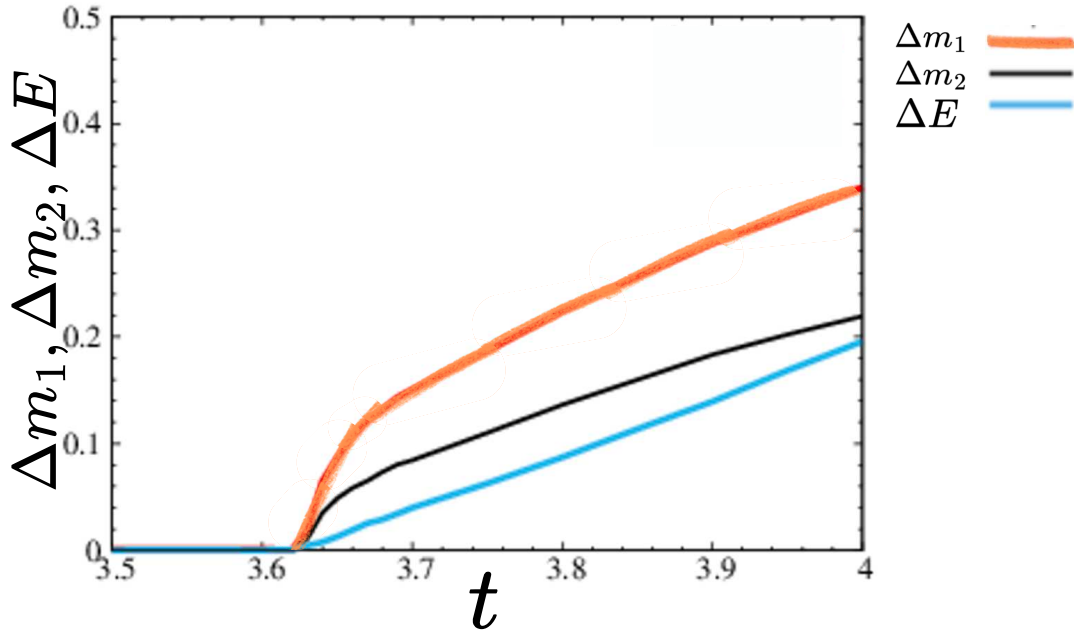


Рис. 2.7. Стрибки в параметрах порядку Δm_1 (помаранчева крива), Δm_2 (чорна крива) і прихована теплота ΔE (синя крива) моделі Поттса при $q = 2$ як функції кількості невидимих станів r .

Оскільки T_c залежить від r , використовуємо узагальнену температуру $t = T/T_c$. Як зазначалось раніше, існує лише один параметр порядку ($m_1(T)$) при $r = 0$. Залежно від значення r температурна залежність обох параметрів порядку m_1 та m_2 характеризується двома різними режимами. Для $r = 0, 2$ графіки неперервні, що свідчить про поведінку характерну для фазових переходів другого роду. Однак, коли $r = 4$ спостерігається стрибок при критичній температурі.

Щоб знайти граничне значення r_c , визначається стрибок у параметрах порядку

$$\Delta m_j = \lim_{t \rightarrow 1^-} m_j(t) - \lim_{t \rightarrow 1^+} m_j(t), \quad j = 1, 2, \quad (2.13)$$

і аналізується поведінка Δm_j , як функції r . Перша поява ненульового значення Δm_j відповідає початку фазового переходу першого роду. На Рис. 2.7 побудовано графік Δm_1 і Δm_2 , як функцій кількості невидимих станів r . Подібна поведінка спостерігається і для прихованої теплоти $\Delta E = -\Delta S T_c$, де ΔS – стрибок ентропії у точці фазового переходу:

$$\Delta S = \lim_{t \rightarrow 1^-} S(t) - \lim_{t \rightarrow 1^+} S(t). \quad (2.14)$$

Значення r_c отримані із аналізу перетворення в нуль Δm_1 , Δm_2 і ΔE рівні $r_c = 3,629(1)$, $r_c = 3,627(2)$ і $r_c = 3,617(3)$, відповідно. Усереднюючи ці значення, ми отримуємо $r_c = 3,622(8)$. Ця оцінка добре узгоджується з випадком для моделі Поттса з $q = 2$ видимими і r невидимими станами на ґратці Бете з z найближчими сусідами, коли $z \rightarrow \infty$ [139]: $r_c = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{4z}{3(z-1)} \left(\frac{z-1}{z-2} \right)^2 \simeq 3.62$.

В околі r_c можливі стрибки параметра порядку апроксимуються степеневим спадним законом:

$$\Delta m_1 \sim (r - r_c)^{a_1}, \quad \Delta m_2 \sim (r - r_c)^{a_2}. \quad (2.15)$$

Числові підгонки в інтервалі від $r = 3,625$ до $4,0$ дають оцінки показників: $a_1 = 0,477(10)$ і $a_2 = 0,566(15)$.

2.3.3. Випадок $1 \leq q < 2$

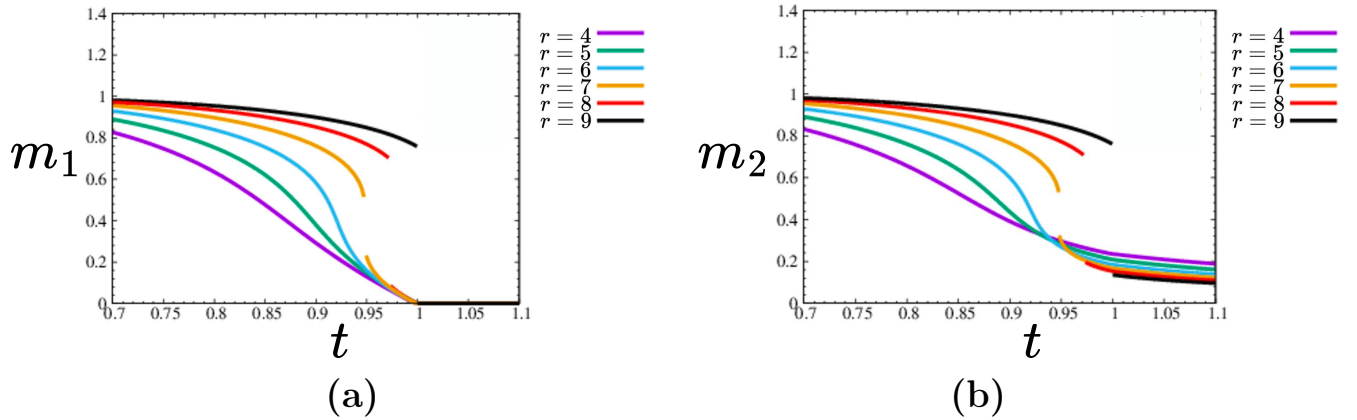


Рис. 2.8. Залежності першого (а) і другого (б) параметрів порядку від приведеної температури t для $r = 4, 5, 6, 7, 8, 9$ при $q = 1.2$. Фазовий перехід другого роду перетворюється на перший рід при $r_{c2} \simeq 8.495(5)$.

Розглянемо тепер область $1 \leq q < 2$. Типова поведінка параметрів порядку $m_1(t)$ і $m_2(t)$ для фіксованих значень q показана на рис. 2.8. Побудовано графік залежності цих функцій для $q = 1.2$ і $r = 4, 5, 6, 7, 8, 9$. Для малих значень r параметри порядку $m_1(t)$ і $m_2(t)$ є гладкими функціями t і спостерігається перехід другого роду. Параметр $m_1(t)$ лінійно прямує до нуля, коли t наближається до

Табл. 2.3. Граничні вимірності r_{c1} , r_{c2} для різних значень $1 \leq q \leq 2$.

q	r_{c1}	r_{c2}
1	7.334(49)	9.55(35)
1.2	6.834(11)	8.495(5)
1.4	6.268(9)	7.535(5)
1.6	5.658(7)	6.525(5)
1.8	4.914(8)	5.505(5)
2	3.622(8)	3.65(5)

$t_c = 1$ знизу. Це відповідає відомому результату середнього поля для критичного показника перколяції $\beta = 1$.

Для більших значень r , і починаючи з певного значення $r = r_{c1}$, розриви в $m_1(t)$ і $m_2(t)$ з'являються при $\tilde{t} < t_c$. Гранична вимірність r_{c1} , отримана в результаті обнулення цих функцій – $r_{c1} \simeq 6.834(11)$. Виникнення цього розриву не впливає на рід фазового переходу, що відбувається при $t_c = 1$, який для цих значень r залишається фазовим переходом другого роду, тому що параметри порядку залишаються там неперервними. Стрибки при $\tilde{t}$ зростають з подальшим збільшенням r і, нарешті, при $r = r_{c2}$, $\tilde{t}$ і t_c збігаються. Саме в цей момент стає зрозуміло, що перехід при $t_c = 1$ стає переходом першого роду. Таким чином значення r_{c2} є граничною вимірністю (тобто, це значення r , при якому фазовий перехід змінює свій рід). Це визначається умовою

$$\Delta m_1 > 0 \quad \text{at} \quad m_1(t \rightarrow t_c^+) = 0. \quad (2.16)$$

Виникнення стрибка для параметра порядку при температурі $\tilde{t} < t_c$ – нове явище в теорії фазових переходів. Для $r_{c1} < r < r_{c2}$ параметр порядку $m_1 \neq 0$ у температурному інтервалі $\tilde{t} < t < t_c$. Немає нового спонтанного порушення симетрії відносно m_1 при $t = \tilde{t}$. Однак, його стрибок при $t = \tilde{t}$ подібний до того, що відбувається в звичайному сценарії фазового переходу першого роду. Подібна поведінка спостерігається і при $t = \tilde{t}$ для прихованої теплоти ΔE і для параметра порядку Δm_2 .

Значення граничних вимірностей r_{c1} та r_{c2} для різних q зібрані в Табл. 2.3. Там наведено середні значення r_{c1} , отримані чисельно з поведінки функції Δm_1 ,

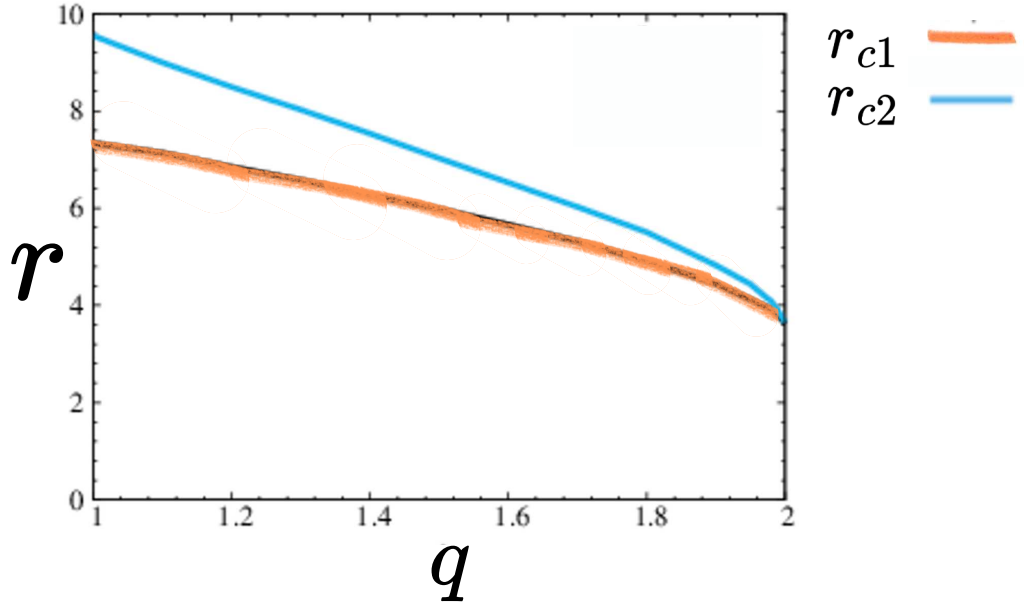


Рис. 2.9. Граничні вимірності r_{c1} (нижня крива) і r_{c2} (верхня крива) для моделі Поттса при $1 \leq q \leq 2$. При $q = 2$ обидва r_{c1} і r_{c2} збігаються: $r_{c1} = r_{c2} \simeq 3.65(5)$.

Δm_2 і ΔE . Оцінку значення для r_{c2} було отримано з поведінки m_1 при мінімальному значенні r , для якого виконується умова (2.16). На рис. 2.9 показано залежності r_{c1} і r_{c2} від q . Для випадку $q = 2$, де обидві граничні вимірності r_{c1} і r_{c2} мають збігатися, ми використовуємо оцінку $r_c = 3.65(5)$, оскільки вона включає обидва значення, наведені в таблиці. Варто відзначити, що в області $1 \leq q \leq 2$ різниця між граничними вимірностями добре апроксимується лінійною функцією: $r_{c2} - r_{c1} \simeq 2(2 - q)$, хоча не має простого пояснення цього спостереження.

У граничному випадку $q \rightarrow 1$ із рівняння (2.10) отримуємо вільну енергію, що залежить лише від другого параметра порядку m_2 :

$$\lim_{q \rightarrow 1} f(m_1, m_2) = \frac{z(m_2 r + 1)^2}{2(r + 1)^2} - T \log \left(e^{\frac{h + \frac{z(m_2 r + 1)}{r + 1}}{T}} + r \right). \quad (2.17)$$

Мінімізуючи вільну енергію відносно m_2 , отримуємо поведінку $m_2(T)$ від температури. У свою чергу, поява розриву в цій залежності може бути використана як умова для визначення граничної вимірності $r = r_{c1}$. Ми оцінюємо чисельно граничний показник розмірності r_{c2} у границі $\lim_{q \rightarrow 1+} r_{c2}(q)$.

2.4. Модель на безмасштабній мережі

Гамільтоніан для моделі Поттса з невидимими станами на мережі можна записати як [16]:

$$-H(q, r) = \sum_{i,j} J_{ij} \sum_{\alpha=1}^q \delta_{S_i, \alpha} \delta_{\alpha, S_j} + h \sum_{i=1}^N \delta_{S_i, 1}. \quad (2.18)$$

де $S_i = (1, \dots, q, q+1, \dots, q+r)$ – поттсівська змінна, q та r кількість видимих та невидимих станів відповідно, δ_{α, S_j} це дельта-символ Кронекера і зовнішнє магнітне поле h , що спрямоване вздовж першого видимого стану. Перша сума у (2.18) береться над усіма парами спінів в мережі з N вузлів, друга сума передбачає, щоб обидва взаємодіючі спіни були в однаковому видимому стані. Взаємодію J_{ij} подаємо у формі матриці суміжності з елементами: $J_{ij} = 1$, коли вузли i та j мають зв'язок між собою, або $J_{ij} = 0$ інакше.

У рамках підходу середнього поля ми також припускаємо, що мережа, на якій розглядається наша модель, є повністю випадковою відпаленою мережею [154]. Елементи матриці суміжності визначаються імовірністю з'єднання двох вузлів p_{ij} . Для відпаленої мережі ця ймовірність лінійно пропорційна їхнім ступеням (кількості найближчих сусідів) [154], тому ми отримуємо:

$$J_{ij} = J p_{ij} = J \frac{k_i k_j}{N \bar{k}}, \quad (2.19)$$

де $k_i, \bar{k}$ – ступінь вузла та середній ступінь вузла відповідно.

Ми використовуємо метод неоднорідного середнього поля (MFA)¹ з локальними змінними, як запропоновано для стандартної моделі Поттса на мережі [70]. Основна ідея полягає в тому, щоб переписати доданок, що відповідає за взаємодію в гамільтоніані (2.18) у такий спосіб, що він не міститиме добутку двох спінових змінних. З цією метою ми представляємо кожен член дельта символу Кронекера як суму його середнього значення та відхилення від цього середнього. Ми вводимо три локальні термодинамічні середні $\mu_i, \nu_{1i}, \nu_{2i}$, щоб виокремити стан, вздовж

¹Точність результатів середнього поля для моделі Поттса з невидимими станами була проаналізована в роботі [106].

якого спрямоване магнітне поле, а також видимі та невидимі стани:

$$\langle \delta_{S_i, \alpha} \rangle = \begin{cases} \mu_i, & \alpha = 1, \\ \nu_{1i}, & \alpha = 2, \dots, q, \\ \nu_{2i}, & \alpha = q + 1, \dots, r. \end{cases} \quad (2.20)$$

Тут усереднення виконується для гамільтоніана (2.18)

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}(\dots) e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad \text{with} \quad \mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.21)$$

у термодинамічній границі, де β є оберненою температурою, а шпур береться за всіма можливими конфігураціями спіну (враховуючи також невидимі стани). Введені середні значення мають передбачувану асимптотику при низьких і високих температурах, наведену в таблиці 2.4.

Припускаючи, що відхилення від середніх значень невеликі, ми нехтуємо членами квадратичного відхилення, отримуємо гамільтоніан в наближенні середнього поля:

$$-H(q, r) = \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} [\mu_i (2\delta_{1, S_j} - \mu_j) + \sum_{\alpha=2}^q (2\delta_{\alpha, S_i} - \nu_{1i}) \nu_{1j}] + h \sum_i \delta_{S_i, 1}. \quad (2.22)$$

З урахуванням умови нормування середніх величин:

$$\mu_i + (q - 1)\nu_1 + r\nu_2 = 1, \quad (2.23)$$

ми визначаємо два локальні параметри порядку, які задовольняють низькотемпературну та високотемпературну асимптотику: вони дорівнюють нулю для $\beta \rightarrow 0$ і дорівнюють одиниці для $\beta \rightarrow \infty$:

$$m_{1i} = \mu_i - \nu_{1i}, \quad m_{2i} = \mu_i - \nu_{2i}. \quad (2.24)$$

Модель Поттса з невидимими станами на мережі описується двома глобальними параметрами порядку: m_1 і m_2 . Ми вводимо їх як лінійну комбінацію локальних параметрів порядку, заданих на кожному з вузлів з вагами, пропорційними ступеню цього вузла (див. [17] для більш детального розгляду):

$$m_1 = \frac{\sum_i k_i m_{1i}}{\sum_i k_i}, \quad m_2 = \frac{\sum_i k_i m_{2i}}{\sum_i k_i}. \quad (2.25)$$

Табл. 2.4. Низькотемпературна та високотемпературна асимптотика для термодинамічних середніх, Рів. (2.20), і для параметрів порядку, Рів. (6).

$\beta \rightarrow \infty$	$\mu_i = 1$	$\nu_{1i} = 0$	$\nu_{2i} = 0$
$\beta \rightarrow 0$	$\mu_i = \frac{1}{q+r}$	$\nu_{1i} = \frac{1}{q+r}$	$\nu_{2i} = \frac{1}{q+r}$

Розглядаючи вільну енергію в розрахунку на одну частинку в термодинамічній границі ($N \rightarrow \infty$), зрештою, для вільної енергії ми отримали [17]:

$$\begin{aligned}
 f(m_1, m_2) = & \frac{\bar{k}}{(q+r)^2} \left((rm_2 + 1 + (q-1)m_1)^2 + (q-1)(rm_2 + 1 - \right. \\
 & \left. (r+1)m_1)^2 \right) - \frac{1}{\beta} \int_2^{\infty} dk P(k) \ln \left(e^{\beta(h + \frac{k}{q+r}(m_1(q-1)+1+rm_2))} + \right. \\
 & \left. (q-1)e^{\frac{\beta k}{q+r}(m_2r+1-(r+1)m_1)} + r \right), \quad (2.26)
 \end{aligned}$$

де $P(k)$ — розподіл ступенів вузла (1.2), k , $\bar{k}$ — ступінь вузла та середній ступінь вузла відповідно². Отриманий вираз для вільної енергії залежить від двох параметрів глобального порядку m_1 і m_2 , які описують стан системи та параметрів моделі, таких як кількість станів q і r , обернена температура β і показник загасання функції розподілу за ступенем вузлів λ , який описує топологію системи.

В границі $r \rightarrow 0$ дана модель зводиться до стандартної моделі Поттса на безмасштабній мережі, яка вже була проаналізована в рамках наближення середнього поля [66, 67, 70, 156]. При цьому фазова діаграма в площині (q, λ) характеризується різною критичністю в різних областях. Для малих λ ($2 < \lambda \leq 3$) мережа сильно скорельована і залишається впорядкованою при будь-якій кінцевій температурі через те, що існує забагато вузлів з високими ступенями, що робить мережу занадто корельованою і відбувається перехід в парамагнітний стан. Для $\lambda > 3$ ми можемо спостерігати різні сценарії в залежності від значення q . Область $1 \leq q \leq 2$ характеризується поведінкою фазового переходу другого роду, проте з трьома різними наборами критичних показників, що відповідають областям

²Для того, щоб існувала гігантська зв'язна компонента для даної безмасштабної мережі, нижня межа інтегрування повинна становити $k_{min} = 2$ [155].

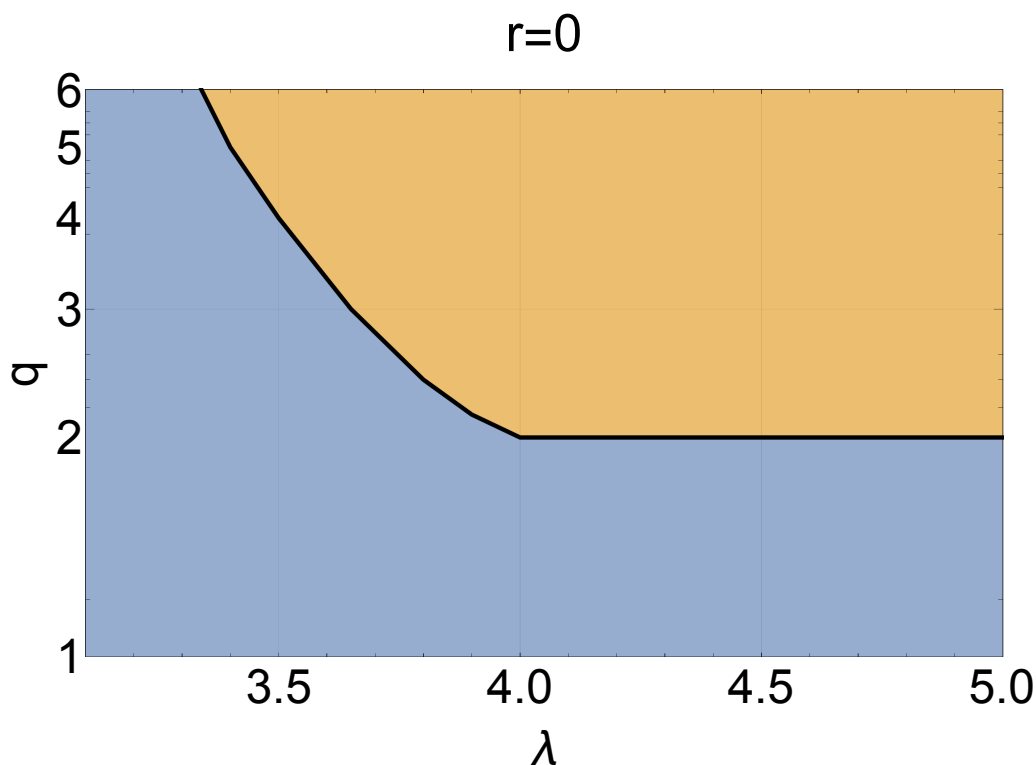


Рис. 2.10. Фазова діаграма стандартної моделі Поттса ($r = 0$) на безмасштабній мережі. Система описується фазовими переходами першого або другого роду. При $1 < q \leq 2$ спостерігається фазовий перехід другого роду. Тоді як для $q > 2$ слід враховувати критичне значення λ_c . Для кожного q при $\lambda > \lambda_c(q)$ відбувається фазовий перехід першого роду, тоді як для меншого $\lambda \leq \lambda_c(q)$ – другого роду.

$q = 1$, $1 < q < 2$, $q = 2$. Інший випадок $q > 2$ є найбільш цікавим, оскільки в залежності від значення λ відбувається фазовий перехід другого або першого роду [66, 67, 70, 156]. Для ілюстрації наведено Рис. 2.10, де показано фазову діаграму стандартної моделі Поттса.

На відміну від моделі Ізінга на безмасштабній мережі, модель Поттса описується багатшою фазовою діаграмою. Так, існує гранична вимірність $\lambda_c(q)$, що розділяє області з різною критичністю. Метою було дослідити вплив параметра λ і кількості невидимих станів r на критичну поведінку моделі Поттса на безмасштабній мережі в різних областях q , r і λ . Оскільки для звичайної моделі Поттса ($r = 0$) критична поведінка залежить від q , очікувалась така ж сама ситуація при додаванні невидимих станів. У даному аналізі ми не змогли врахувати граничний випадок $q \rightarrow 1$. Тому ми зосередилися на спонтанній ($h = 0$) намагніченості в

трех областях: $1 < q < 2$, $q = 2$ і $q > 2$.

Аналіз критичної поведінки моделі аналітичними методами є нетривіальним завданням через те, що вільна енергія системи залежить від величезної кількості різноманітних параметрів. Щоб дослідити критичну поведінку, було використано *simulated annealing minimization* метод [157]³, щоб чисельно отримати значення параметрів порядку m_1 та m_2 , що приводить до найменшої вільної енергії. З цією метою ми фіксуємо кількість видимих q і невидимих r станів, параметр λ і мінімізуємо вираз для вільної енергії відносно двох глобальних параметрів порядку (m_1, m_2 , визначених у (2.25)) під час зміни температури. Отримані температурні залежності параметрів порядку дозволяють розрізняти режими фазових переходів першого та другого родів. Однак лише параметр порядку m_1 має фізичну інтерпретацію як величину, яка з'являється нижче точки переходу та порушує симетрію системи. Другий параметр порядку m_2 зникає за відсутності невидимих станів $r = 0$ [16, 17]. Якщо m_1 плавно переходить в нуль із підвищенням температури (β зменшується), то говоримо про фазовий перехід другого роду. І навпаки, якщо для $m_1(\beta)$ спостерігаємо стрибок, то система зазнає фазового переходу першого роду.

2.4.1. Сильно скорельовані мережі: $2 < \lambda \leq 3$

Аналіз розпочинається із сильно скорельованих мереж, тобто, для діапазону $\lambda < 3$. Для звичайної моделі Поттса на безмасштабній мережі було показано, що в цьому випадку система залишається впорядкованою при будь-якій скінченній температурі і ми не спостерігаємо фазового переходу. Це відбувається через те, що розподіл ступенів вузлів повільно загасає, і багато вузлів у мережі мають високі ступені, утворюючи сильно зв'язану та кластерну структуру. Цей тип поведінки також спостерігається в моделі Поттса з невидимими станами: навіть велика кількість невидимих станів не здатна порушити порядок. Щоб проілюструвати це, на

³Порівняно з попереднім аналізом у [17] було вдосконалено алгоритм для кращого пошуку глобальних мінімумів на межі області пошуку. Це призвело до покращення пошуку мінімумів при низьких значеннях m_1 і, отже, кращих оцінок для r_{c1} і r_{c2} .

Рис. 2.11 представлено залежність обох параметрів порядку від температури при великих r . Ці плавні криві вказують на відсутність фазового переходу для мережі з повільним спадом функцій розподілу за ступенем, подібним до того, що спостерігається для стандартної моделі Поттса.

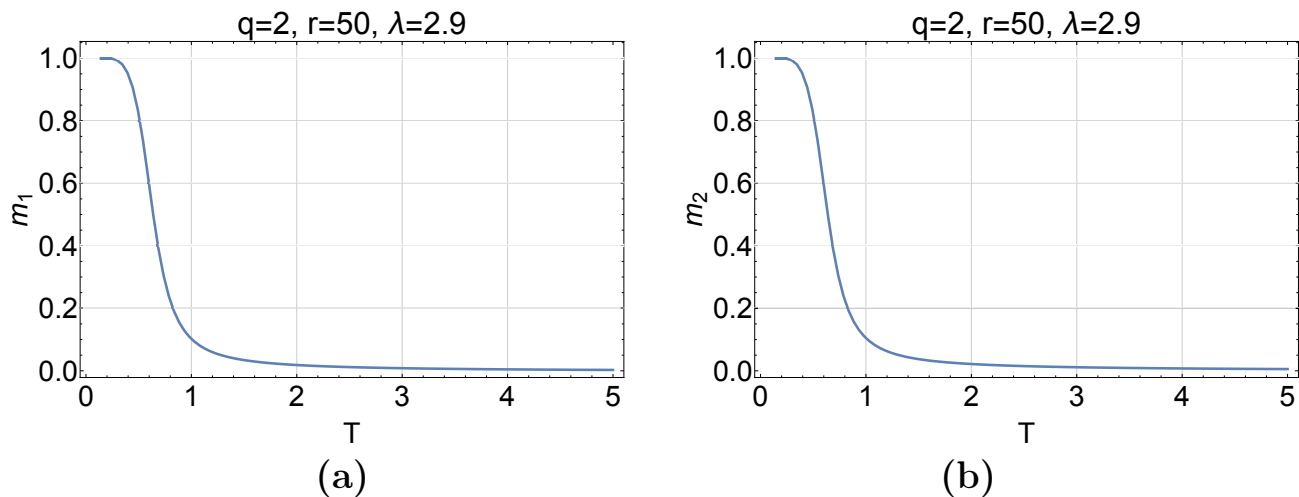


Рис. 2.11. Залежність параметрів порядку (а) m_1 , (б) m_2 від температури для моделі Поттса з $q = 2$ видимими і $r = 50$ невидимими станами на безмасштабній мережі з показником загасання $\lambda = 2.9$. Обидва параметри порядку спадають із температурою, але ніколи не зникають. Це свідчить про відсутність фазового переходу.

2.4.2. Діапазон $1 < q \leq 2$

У цьому підрозділі представлено результати для $q = 1.5$ -станової моделі Поттса, щоб проілюструвати, як додавання невидимих станів впливає на критичну поведінку. Цей випадок у багатьох аспектах подібний до випадку Ізінга ($q = 2$), розглянутого в [17]. Дослідження розпочинається із огляду поведінки критичної температури. На Рис. 2.12 представлено значення критичної температури для різних значень q , r і λ . Можна бачити, що додавання невидимих станів, а також збільшення λ знижує критичну температуру. Причина першого ефекту полягає в тому, що кількість невидимих станів впливає на ентропію, тому з більшою ентропією легше порушити порядок. Збільшення λ спричинює появу меншої кількості габів (вузлів з високим ступенем), які відіграють значну роль у зв'язності

мережі, а отже, у впорядкуванні. Це вже могли спостерігати в попередньому підрозділі.

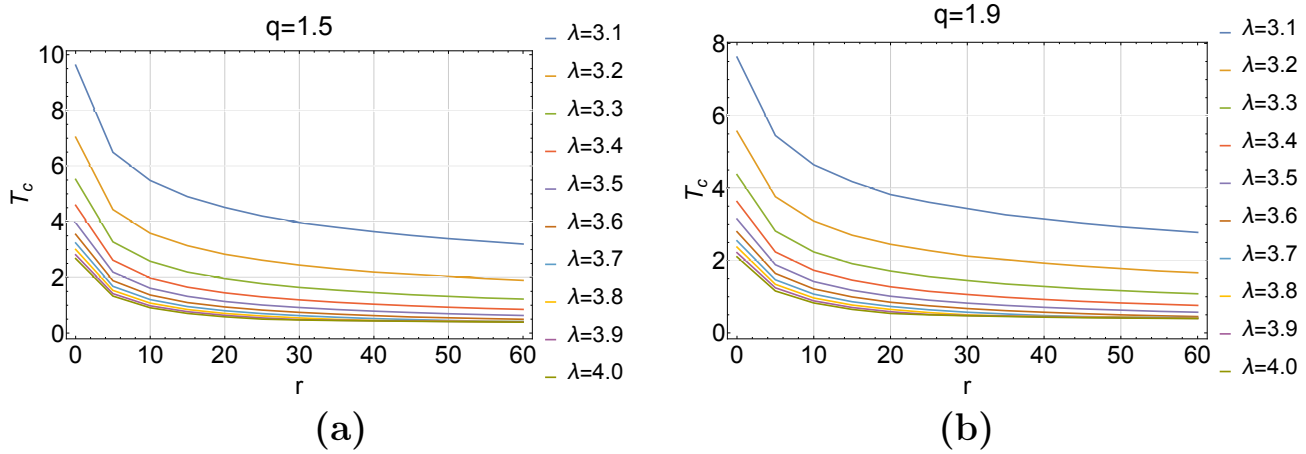


Рис. 2.12. Критична температура як функція кількості невидимих станів r для різних значень λ та (а) $q = 1.5$, (б) $q = 1.9$. Подібно до випадку $q = 2$ критична температура знижується зі збільшенням як r , так і λ . Крім того, збільшення q знижує критичну температуру. Тут наведено лише значення $3 < \lambda \leq 4$, однак аналогічні тенденції спостерігаються і у діапазоні $\lambda > 4$.

Як вже згадували, параметр порядку m_2 залишається скінченним для всіх скінченних температур і при $r = 0$ $m_2 = 0$, тому ми маємо лише один параметр порядку m_1 . Для виявлення фазового переходу ми будемо спостерігати за поведінкою параметра порядку m_1 . Проте як m_1 так і m_2 можна використовувати для розрізнення поведінки між режимами фазового переходу першого та другого роду, як показано на графіках.

На рис. 2.13 продемонстровано, як параметр порядку залежить від температури для двох значень q і різних r . Графіки наведені для $\lambda = 3.5$. Ми спостерігаємо таку ж саму поведінку, про яку вже повідомлялося у випадку моделі Ізінга ($q = 2$) [17]. Для невеликої кількості невидимих станів $r < r_{c1}$ обидва параметри порядку неперервно залежать від температури, що призводить до фазового переходу другого роду. І навпаки, для великих $r > r_{c2}$ спостерігається лише фазовий перехід першого роду, коли намагніченість падає до нуля при певній температурі. Нарешті, для проміжних значень $r_{c1} < r < r_{c2}$ є два переходи: перехід першого роду між двома (частково) впорядкованими станами та перехід другого роду,

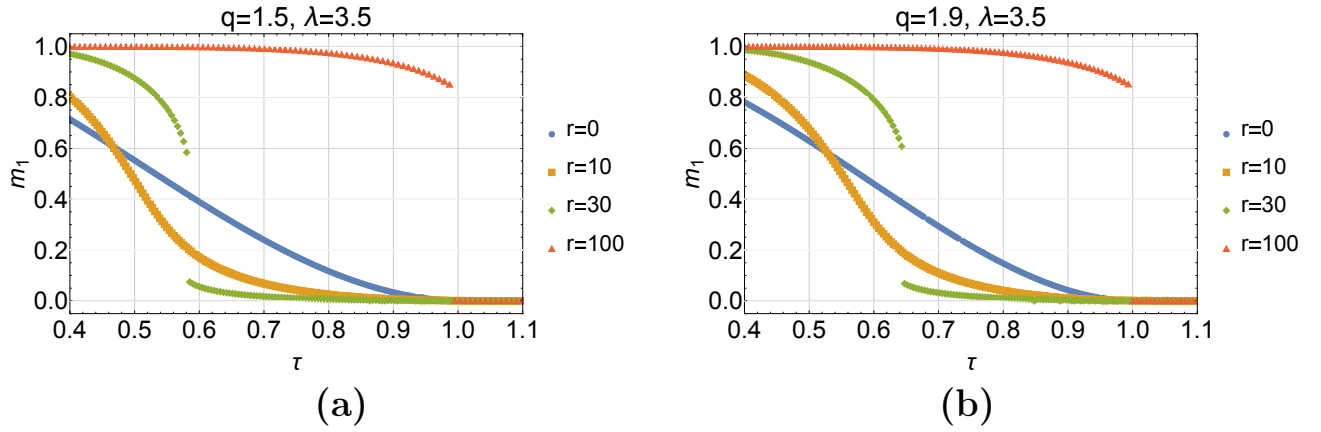


Рис. 2.13. Залежність параметра порядку m_1 від приведеної температури $\tau = T/T_c$ для (а) $q = 1.5$, (б) $q = 1.9$. При малих значеннях r система зазнає фазового переходу другого роду, тоді як при великих r відбувається лише перехід першого роду. Моделі з проміжною кількістю невидимих станів характеризуються двома фазовими переходами: фазовим переходом першого роду між двома частково впорядкованими станами при нижчій температурі та переходом другого роду при вищій температурі.

коли початкова намагніченість зникає. Це призводить до існування двох граничних значень $r_{c1}(q, \lambda)$ і $r_{c2}(q, \lambda)$, які розділяють області з різною критичністю. Фазові діаграми $q = 1.5$ моделі Поттса з невидимими станами показано на рис. 2.14. Структура фазової діаграми подібна до випадку моделі Ізінга ($q = 2$), але значення граничних вимірностей $r_{c1}(\lambda)$ і $r_{c2}(\lambda)$ більші. Це відображає той факт, що в міру зменшення q система наближається до випадку перколяції $q = 1$, який відомий як дуже чітко виражений фазовий перехід другого роду. Отже, більша кількість ентропії або, еквівалентно, кількості невидимих станів r , необхідна для зміни фазового переходу до першого роду.

2.4.3. Діапазон $q > 2$

У цій області навіть без наявності невидимих станів критична поведінка системи характеризується граничним значенням $\lambda_c(q)$. При λ вище цього значення відбувається лише фазовий перехід першого роду для стандартної моделі Поттса на безмасштабній мережі, тоді як для $\lambda < \lambda_c(q)$ існує лише фазовий перехід другого роду [70]. Як і в попередньому підрозділі, ми починаємо з дослідження

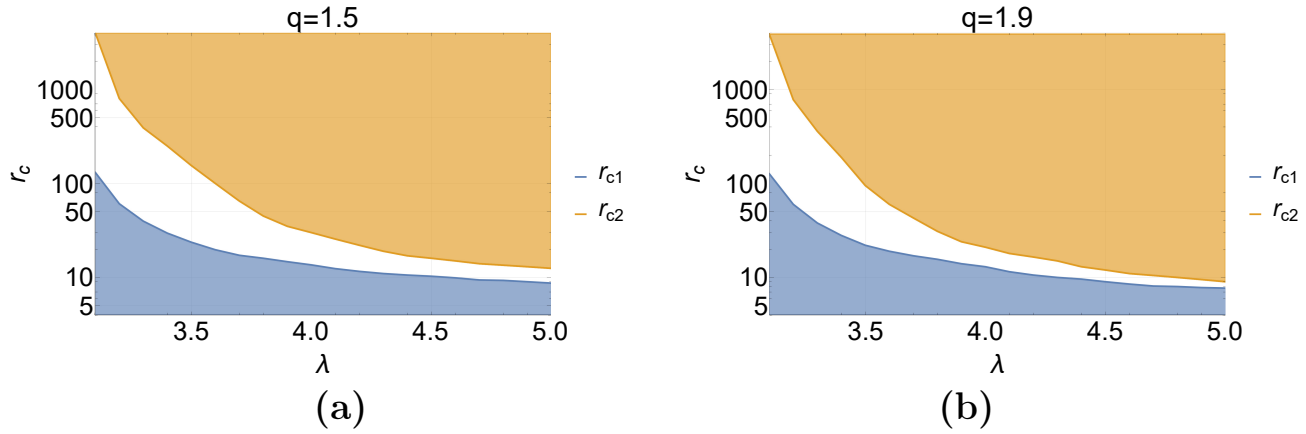


Рис. 2.14. Фазова діаграма моделі Поттса з невидимим станами на безмасштабній мережі для **(a)** $q = 1.5$, **(b)** $q = 1.9$ при різних r і $\lambda > 3$. Три області описують різні режими критичної поведінки. У випадку малої кількості невидимих станів $r < r_{c1}$ (синя область) у системі спостерігається фазовий перехід другого роду; у проміжному діапазоні маргінальних вимірностей $r_{c1} < r < r_{c2}$ – ми спостерігаємо фазові переходи першого чи другого роду в залежності від температури; при великих $r > r_{c2}$ у верхній (помаранчевій) області лише фазовий перехід першого роду.

критичної температури. На рис. 2.15 ми представляємо критичну температуру як функцію кількості невидимих станів r для різних значень λ . Як і в області $q \leq 2$, тут для $q > 2$ критична температура знижується зі збільшенням як r , так і λ .

Оскільки існує дві різні області залежно від значення λ , ми розглянемо, як додавання невидимих станів вплине на критичну поведінку в обох цих випадках.

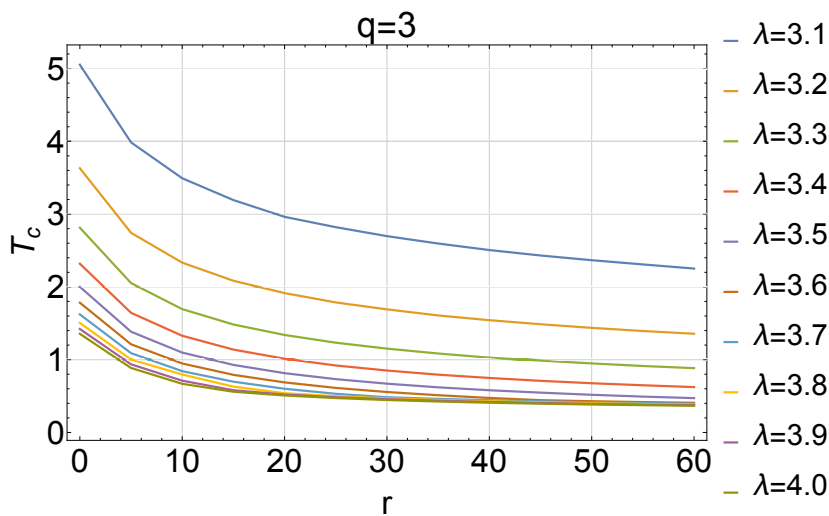


Рис. 2.15. Критична температура як функція кількості невидимих станів r для різних значень λ . Подібно до випадку $q \leq 2$ критична температура зменшується зі збільшенням як r , так і λ .

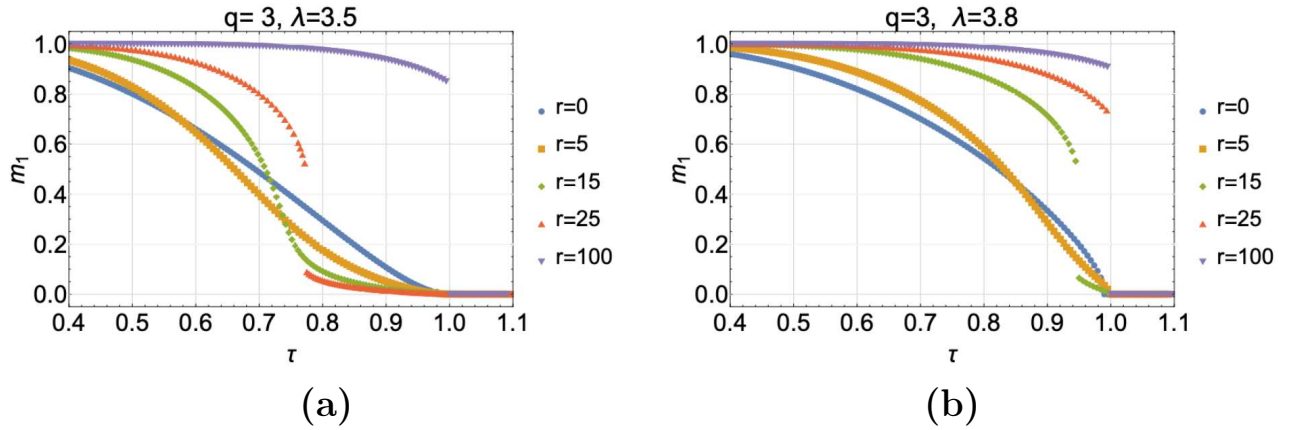


Рис. 2.16. Залежність параметра порядку від приведеної температури $\tau = T/T_c$. Лівий графік (а) ілюструє випадок $\lambda < \lambda_c(q)$ з $q = 3, \lambda = 3.5$, тоді як на правому графіку (б) $\lambda > \lambda_c(q)$ з $q = 3, \lambda = 3.8$. Ми бачимо, що в обох цих випадках поступове збільшення кількості невидимих станів спричиняє виникнення фазового переходу першого роду між двома частково впорядкованими станами, тоді як вихідний фазовий перехід залишається при T_c . Коли кількість невидимих станів достатньо велика, залишається лише один перехід першого порядку.

На рис. 2.16 показано залежність параметра порядку m_1 від приведеної температури $\tau = T/T_c$ для $q = 3$, $r = 0, 5, 15, 25, 100$ і двох значень λ , що представляє області з різною критичною поведінкою: $\lambda = 3.5 < \lambda_c(q = 3)$ і $\lambda = 3.8 > \lambda_c(q = 3)$. Подібно до випадку $q \leq 2$, описаного в попередньому підрозділі, ми бачимо, що мала кількість невидимих станів не змінює порядок фазового переходу, а велика кількість невидимих станів призводить до існування лише фазового переходу першого роду. Однак у проміжному регіоні ситуація інша. Показано, що збільшення невидимих станів r у спіновій системі з фазовим переходом другого роду запускає фазовий перехід першого роду при нижчій температурі. У попередніх роботах передбачалося, що невидимі стани не впливають на існуючий фазовий перехід першого роду [12, 16].

Тут ми бачимо, що в режимі фазового переходу першого роду $\lambda > \lambda_c(q)$ отримуємо додатковий перехід першого роду за нижчої температури. З рис. 2.16 може бути незрозуміло, що відбувається з початковим фазовим переходом першого роду, коли додаються невидимі стани, але обидва параметри порядку відчують стрибки, що сигналізує про існування фазового переходу першого роду.

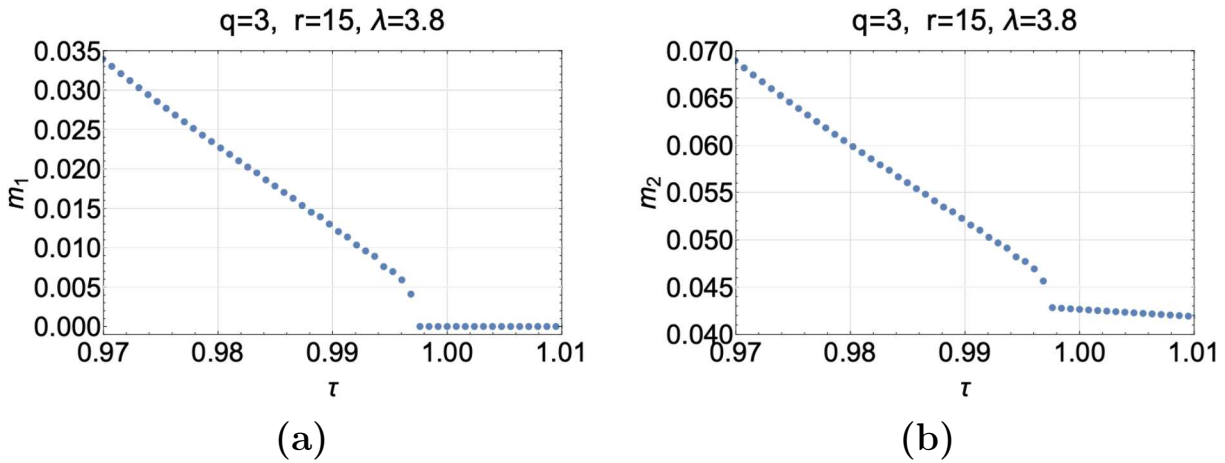


Рис. 2.17. Залежність першого (а) та другого (б) параметрів порядку від приведеної температури $\tau = T/T_c$ в околі $\tau = 1$ для $q = 3$, $r = 15$ та $\lambda = 3.8$. Обидва параметри порядку мають стрибки поблизу критичної температури, що сигналізує про існування фазового переходу першого роду.

Отже, система характеризується двома послідовними переходами першого роду. Про такий тип критичної поведінки раніше не повідомлялося для моделі Поттса з невидимими станами. Це явище спостерігається лише в обмеженій області λ . Очевидно, існує якийсь λ_u , який обмежує область, де відбуваються два послідовні фазові переходи першого роду. На рис. 2.18 ми демонструємо залежність параметра порядку від приведеної температури для $q = 3$, $\lambda = 4.4$ і r в діапазоні від 1 до 6. Ми бачимо, що зі збільшенням r існуючий фазовий перехід першого роду стає лише різкішим, і ніяких додаткових переходів не відбувається. Для $q = 3$ ми встановили, що $4.1 < \lambda_u < 4.2$.

Узагальнюючи результати на фазовій діаграмі (див. рис.2.19), можна зробити висновок, що навіть у випадку $q > 2$ система все ще характеризується двома граничними значеннями $r_{c1}(\lambda)$ і $r_{c2}(\lambda)$, проте критична поведінка в областях, на які ці граничні маргінільні вимірності розділяють фазову діаграму, залежить від λ . Для $\lambda < \lambda_c(q)$ додавання невидимих станів r має такий самий ефект, як і в попередньому випадку, тобто, для малих значень $r < r_{c1}(\lambda)$ існує лише фазовий перехід другого роду; для $r_{c1}(\lambda) \leq r \leq r_{c2}(\lambda)$ є як фазові переходи першого, так і другого роду, що відбуваються при різних температурах; для $r > r_{c2}(\lambda)$ залишається лише перехід першого роду. Для $\lambda_c(q) < \lambda < \lambda_u(q)$ поведінка дуже схожа

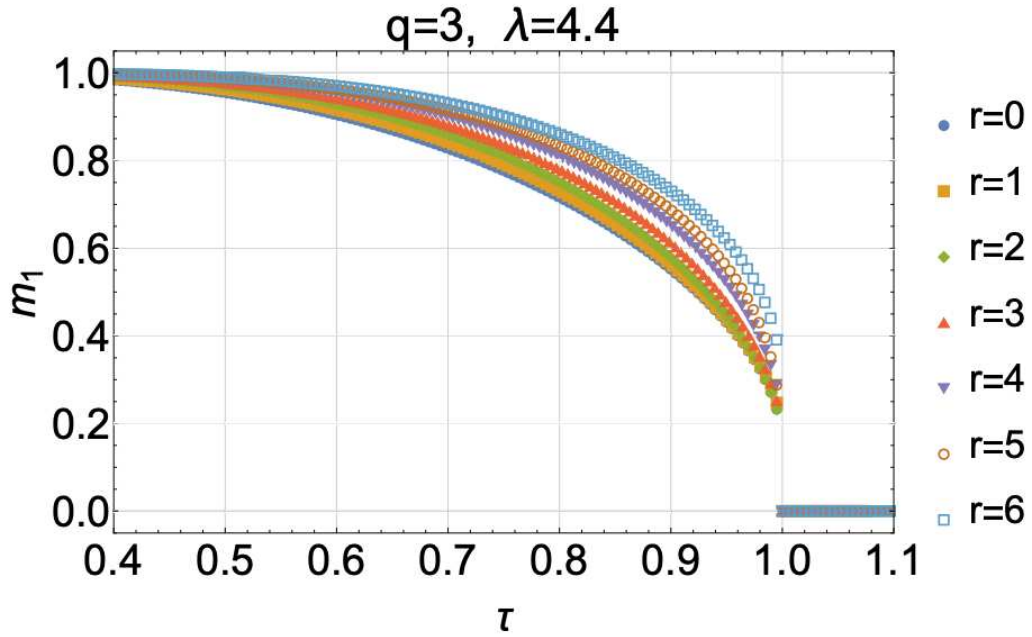


Рис. 2.18. Залежність параметра порядку від приведеної температури $\tau = T/T_c$ для $q = 3, \lambda = 4.4$ і r в діапазоні від 0 до 6. Збільшення кількості невидимих станів не викликає додаткового фазовий перехід першого роду. Однак це робить перехід різкішим.

з тією лише відмінністю, що фазовий перехід другого роду замінюється фазовим переходом першого роду, але два граничні значення $r_{c1}(\lambda)$ і $r_{c2}(\lambda)$ залишаються. І, нарешті, для $\lambda_u(q) < \lambda$ існує лише фазовий перехід першого роду зі стрибком параметра порядку, що залежить від кількості невидимих станів. Існування області, де відбуваються два фазових переходи першого роду, свідчить про те, що топологічні та ентропійні ефекти на фазові переходи певною мірою не залежать один від одного. Невидимі стани індукують відповідний перехід першого роду незалежно від природи переходу, що спостерігається в критичній точці, де параметр порядку $m_1 = 0$. З іншого боку, коли до моделі додається велика кількість невидимих станів, перехід у критичній точці завжди є переходом першого роду для всіх значень λ , де може відбутися перехід.

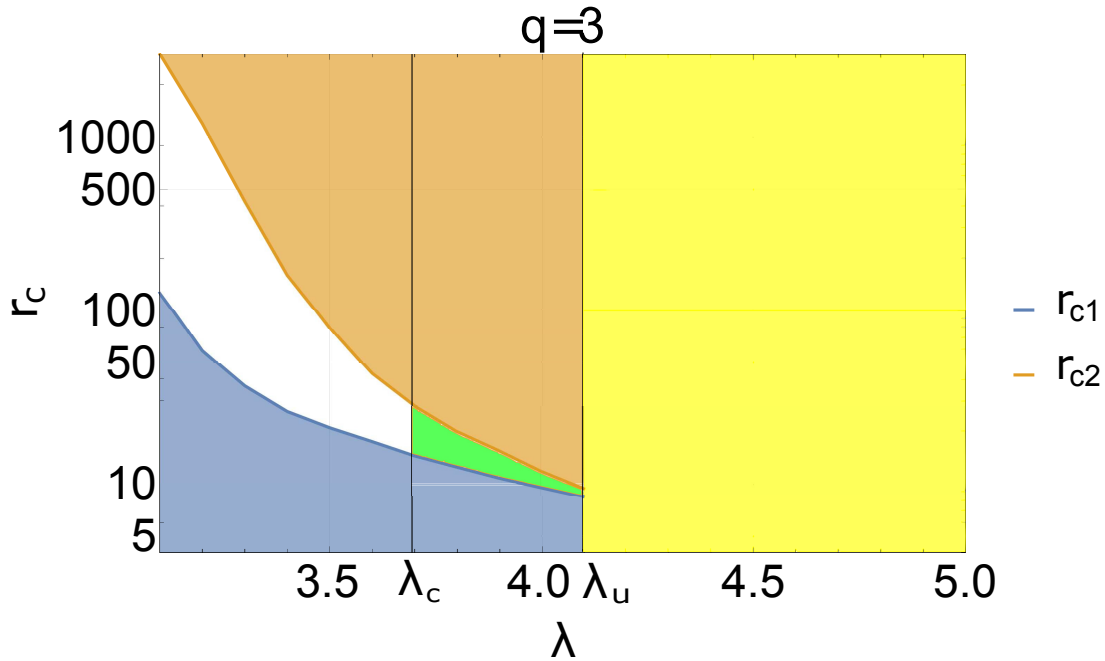


Рис. 2.19. Фазова діаграма моделі Поттса з невидимими станами на безмасштабній мережі для $q = 3$. Для $\lambda < \lambda_c(q)$ при великій кількості невидимих станів $r > r_{c2}$ (помаранчева область) відбувається фазовий перехід першого роду; якщо кількість невидимих станів невелика, система описується поведінкою фазового переходу другого роду (блакитна область), а між ними – біла область – як фазові переходи першого, так і другого роду відбуваються при різних температурах. Однак, для $\lambda > \lambda_c(q)$ критична поведінка іще інша: відбуваються два фазових переходи першого роду (зелена та темно-жовта області). В області $\lambda > \lambda_u$ жодна кількість невидимих станів не може вплинути на критичну поведінку, відбувається єдиний перехід першого порядку (світло-жовтий).

2.5. Висновки

Було використано підхід середнього поля до нещодавно запропонованої моделі Поттса з невидимими станами [12]. Модель була запропонована як спосіб вирішити суперечки між теоретичними передбаченнями сценарію фазового переходу другого роду і моделювання, що вказував на сценарій першого роду [133–135]. Дійсно, кількість невидимих станів r введена у модель відіграє роль параметра, який регулює порядок фазового переходу. У моделі Поттса з q взаємодіючих (видимих) станів, перехід відбувається за типом фазового переходу першого роду, починаючи з певного граничного значення r_c . Для окремого випадку $q = 2$ вже було показано, що зміна відбувається при великих r (для $d = 2$) і що $3 < r_c < 4$

у режимі середнього поля [12]. Тут була проведена більш точна оцінка значення для $q = 2$, а саме отримано, що $r_c \simeq 3,65(5)$. Ця оцінка чудово узгоджується з результатом, отриманим для ґратки Бете з z найближчими сусідами, коли $z \rightarrow \infty$ [139].

Також було розглянуто область $1 \leq q < 2$ та механізм, який змінює порядок фазового переходу. А саме, є два значення маргінальних вимірностей, r_{c1} і r_{c2} , як зазначено на Рис. 2.16а, б. Вони характеризують температурну поведінку перших похідних вільної енергії – параметрів порядку. При r_{c1} розрив з’являється при певній температурі $\tilde{t} < t_c$, однак перехід при t_c все ще залишається другого роду. Розрив збільшується і рухається до t_c з подальшим збільшенням r , і, нарешті, при r_{c2} досягає t_c та відбувається стрибок параметра порядку: перехід стає фазовим переходом першого роду. Граничні вимірності r_{c1} і r_{c2} є функціями q , вони показані на Рис. 2.9б і перераховані в таблиці 2.3.

Наведені вище спостереження показують істотну відмінність в поведінці моделі Поттса з невидимими станами при $q = 2$ і при $1 \leq q < 2$. Тоді як у першому випадку збільшення r перетворює фазовий перехід другого роду на слабкий фазовий перехід першого роду (стрибок в параметрі порядку $\lim_{r \rightarrow r_c} \Delta m_1 \rightarrow 0$), в останньому – до різкого фазового переходу першого роду, $\lim_{r \rightarrow r_{c2}} \Delta m_1 \neq 0$. Той самий висновок можна зробити, аналізуючи приховану теплоту. У цьому відношенні варто нагадати, що розглянутий випадок $q = 1$ відповідає перколяції зв’язків. У свою чергу, наш результат означає що додавання невидимих станів перетворює перехід моделі перколяції зв’язків в сильний фазовий перехід першого роду, що є новим методом на відміну від існуючих теорій перколяції першого роду [158–160].

Також вперше проведено аналіз критичної поведінки моделі Поттса з невидимими станами на відпаленій безмасштабній мережі. Використовуючи наближення неоднорідного середнього поля, підтвердили раніше отримані результати та висновки [17, 70, 108], а саме, що кількість невидимих станів може змінити клас універсальності стандартних моделей на повному графі або навіть і на безмасштабній мережі [17], коли показник загасання розподілу відіграє подібну роль.

Після чисельного аналізу вільної енергії моделі Поттса з невидимими станами на безмасштабній мережі можна зробити висновок, що q , r і λ відіграють роль глобальних параметрів, які впливають на критичну поведінку системи. Ми дослідили взаємодію параметрів у різних областях q , r , λ і підсумували її на фазових діаграмах. Залежно від q і λ критична поведінка змінюється.

Для сильно скорельованої області мережі $2 < \lambda \leq 3$ в підрозділі 2.4.1 було показано, що жодна велика кількість невидимих станів не здатна порушити порядок, система залишається впорядкованою за будь-якої температури. У підрозділі 2.4.2 для $1 < q \leq 2$ отримано фазову діаграму, подібну до діаграми для випадку моделі Ізінга (див. рис. 2.14). Фазова діаграма в площині (r, λ) розділена двома граничними значеннями $r_{c1}(\lambda)$ і $r_{c2}(\lambda)$ на три області з різними критичними характеристиками. У нижній області $r < r_{c1}(\lambda)$ система зазнає лише фазового переходу другого роду; в області між лініями відбуваються як фазові переходи першого, так і другого роду при різних температурах; для великої кількості невидимих станів $r > r_{c2}(\lambda)$ відбувається лише фазовий перехід першого роду. Остання область $q > 2$ є найбільш цікавою. У цій області з'являються два граничні значення λ_c і λ_u . Для $\lambda < \lambda_c$ фазова діаграма (рис. 2.19) подібна до того, що спостерігається для випадку $q \leq 2$ на рис. 2.14. В області $\lambda_c < \lambda < \lambda_u$ фазова діаграма також характеризується двома граничними значеннями $r_{c1}(\lambda)$ і $r_{c2}(\lambda)$. Для $r < r_{c1}(\lambda)$ система характеризується такими ж фазовими переходами першого роду, як і у випадку $r = 0$. В області $r_{c1}(\lambda) < r < r_{c2}(\lambda)$ відбуваються два фазових переходи першого роду при різних температурах. При нижчій температурі перехід відбувається між двома частково впорядкованими станами, тоді як при вищій температурі система стає повністю неупорядкованою $m_1 = 0$. Нарешті, для $r > r_{c2}(\lambda)$ існує лише один перехід першого роду між упорядкованим і неупорядкованим станами. В області $\lambda > \lambda_u$ жодна кількість невидимих станів не може вплинути на критичну поведінку. Існує лише один перехід першого роду незалежно від значення r .

Ми помітили, що додавання невидимих станів викликає додатковий фазовий перехід першого роду, який для певного діапазону r існує поряд з фазовим

переходом, який існував при $r = 0$. Це означає, що топологічні та ентропійні ефекти на фазовий перехід є незалежними. Наявність нецілочисельних граничних вимірностей є повсюдним у критичності складних систем. Слід зазначити, що топологія, представлена мережевою структурою, яка визначається показником загасання розподілу ступеня вузла λ , домінує над ентропійним впливом, однак ефект додаткового фазового переходу першого роду слід проаналізувати більш детально.

Розділ 3

МОДЕЛЬ ІЗІНГА ЗІ ЗМІННОЮ ДОВЖИНОЮ СПІНА НА СКЛАДНИХ МЕРЕЖАХ

У розділі наведено результати дослідження узагальненої моделі Ізінга – моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна, що описується степеневим законом розподілу довжин спіна. Були отримані точні розв’язки для цієї моделі на повному графі та графі Ердоша-Рені, а також – на відпаленій безмасштабній мережі. Структура цього розділу організована наступним чином. Спершу у **підрозділі 3.1** наведено короткі передумови та мотивацію, можливі застосування моделі. У **підрозділі 3.2** сформульовано означення моделі та продемонстровано факт самоусереднення статистичної суми, отримано представлення виразів статистичної суми на різних типах графів. Цей факт істотно полегшує розрахунки термодинамічних функцій. В **підрозділах 3.3 та 3.4** наведено результати дослідження моделі на графах трьох типів: отримано вирази для вільної енергії у різних діапазонах параметрів, проаналізовано термодинамічні функції, знайдено критичні показники та побудовано фазову діаграму моделі. Висновки наведені в **підрозділі 3.5**.

За результатами досліджень опубліковано 2 статті [8, 9] та тези конференцій [29–32, 34, 39, 41, 42, 45].

3.1. Вступ, мотивація

Марно, а мабуть і неможливо вичерпно перераховувати прогрес у розумінні різних явищ у фізиці та поза її межами, досягнутий завдяки моделі Ізінга. Чудові огляди столітньої історії моделі можна переглянути у роботах [161–166]. Особлива

риса, яка зробила модель Ізінга такою популярною для опису колективної поведінки в безлічі системах – бінарність. У своїй початковій формі, представленій у дисертації Ізінга, стан агента зображувався як пара бінарних опозицій (два протилежні значення магнітного моменту). Значною мірою завдяки цій особливості модель застосовувалася майже в усіх сферах, де бінарність відіграє ключову роль [6, 167, 168]. Деякі узагальнення моделі Ізінга втрачають цю особливість. Прикладом є q -станова модель Поттса [65, 169], яка зберігає дискретну симетрію моделі Ізінга, узагальнюючи її від Z_2 до Z_q . В результаті, хоча кожен агент (спін) може приймати лише скінченну кількість станів, бінарність втрачається для будь-якого $q \neq 2$. Ще одне популярне узагальнення – $O(m)$ -симетрична модель [170, 171], що дозволяє мати нескінченну кількість станів для одного агента, оскільки симетрія неперервна при $m \neq 1$.

Тут ми розглядаємо явища впорядкування в системах агентів, які не обов'язково мають фізичну природу, при цьому особливу роль відіграють спінові моделі на складних мережах [6, 7]. Нещодавно ми запропонували інше узагальнення моделі Ізінга, яке вирішує такі задачі, зберігаючи бінарність моделі Ізінга, але пом'якшуючи умову фіксованої довжини спіна на кожному вузлі [8]. У рамках моделі довжина кожного спіну розглядається як випадкова змінна із заданою функцією розподілу, і, отже, спостережувані величини обчислюються звичайним усередненням Гіббса за спіновими конфігураціями (вгору та вниз), а також за випадковим розподілом довжини спіна. Модель пов'язана з іншими спіновими моделями (однак відрізняється від них), які використовуються для вивчення впливу структурного безладу на колективну поведінку [71–78], і може бути корисною в аналізі впорядкування в магнітних або сегнетоелектричних системах частинок з полідисперсними елементарними моментами [83, 84]. Інша очевидна область застосування цієї моделі – розуміння особливостей упорядкування процесів у системах, що містять агентів, які, хоча і мають двійковий характер ('+' або '-', 'вгору' або 'вниз', 'так' або 'ні'), відрізняються силою впливу [172, 173]. Показовий приклад показано на Рис. 3.1. Структура мережі використовується для моделювання базових взаємодій у системі, що представляє інтерес, незалежно від того, чи мають

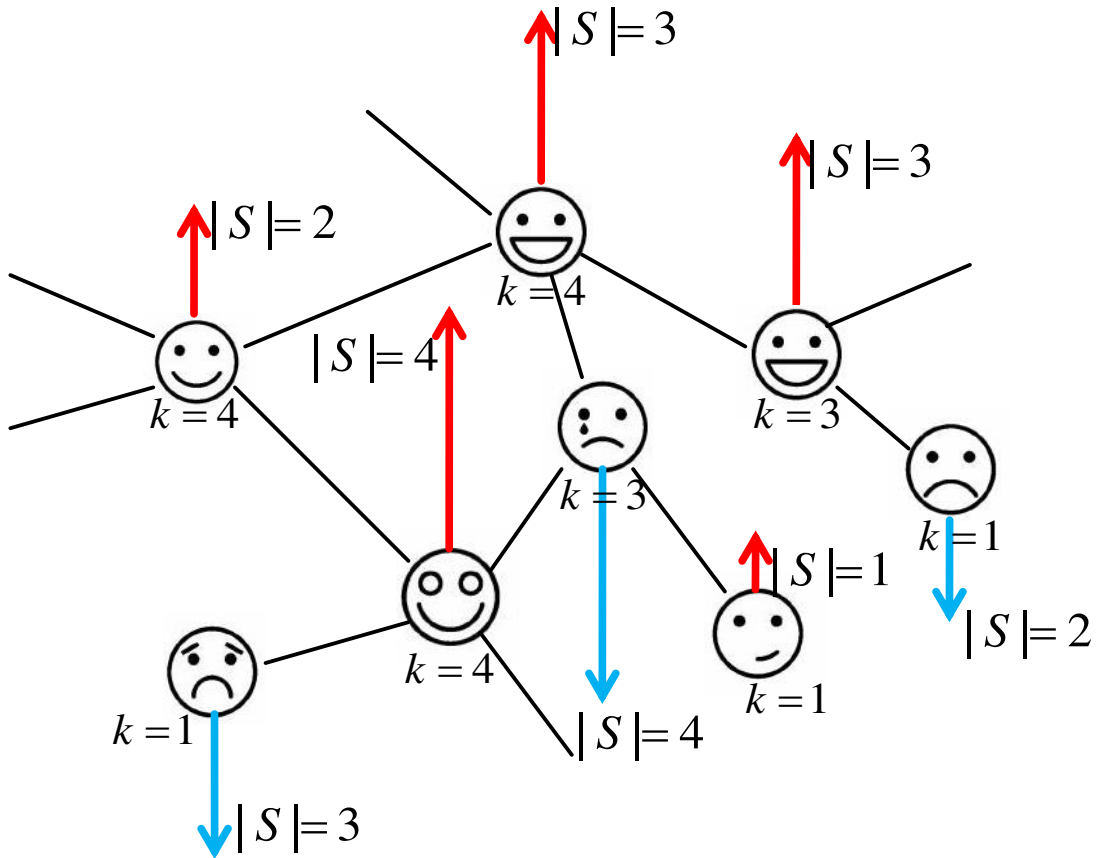


Рис. 3.1. Модель Ізінга зі змінною довжиною (силою) спіна, як модель для опису соціальних явищ. Кожен індивід представлений у вигляді вузла складної мережі із заданим ступенем k_i (тобто, кількість осіб з якою він поєднаний через соціальні зв'язки) і має силу S_i . Для такої соціальної мережі можна розглядати задачу поширення позитивних (спіни вгору) чи негативних (спіни вниз) емоцій.

вони специфічне хімічне, біологічне, соціальне чи економічне походження.

3.2. Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна

Добре вивчені узагальнення моделі Ізінга включають m -векторну модель [170, 171] і модель Поттса [65, 169]. Замість дискретної скалярної змінної $\sigma_i = \pm 1$ перша розглядає класичну векторну змінну $\vec{\sigma}_i$, яка може орієнтуватися в будь-якому напрямку в m -вимірному просторі. З іншого боку, модель Поттса зберігає дискретність змінних, але зменшує кількість станів спіна на вузлі. Тут ми розглянемо ще одне узагальнення моделі Ізінга. Нова модель зберігає бінарний характер

спінових змінних, але допускає, що вони змінюють своє абсолютне значення неперервним і випадковим чином [8]. Щоб досягти цього, ми надаємо спінам «силу» (довжину), яка може змінюватися як випадкова величина $\mathcal{S}$ із заданою функцією розподілу ймовірностей $q(\mathcal{S})$. Нижче ми розглянемо випадок, коли ця функція розподілу характеризується степеневим-спадним законом:

$$q(\mathcal{S}) = c_\mu \mathcal{S}^{-\mu}, \quad \mathcal{S}_{\min} \leq \mathcal{S} \leq \mathcal{S}_{\max}, \quad (3.1)$$

з константою нормування c_μ і $\mu > 2$ для забезпечення скінченності середньої сили спіна $\langle \mathcal{S} \rangle$ при $\mathcal{S}_{\max} \rightarrow \infty$. Як згадувалося у вступі, модель імітує неоднорідності в багаточастинкових (багатоагентних) системах різної природи, які можуть варіюватися від полідисперсних магнетиків або сегнетоелектриків [71–78, 83, 84] до різних складних соціальних чи економічних системи [172, 173]. У свою чергу, вибір функції розподілу у вигляді степеневого закону дозволяє як продовжити аналітичні розрахунки, так і отримати доступ до різних режимів полідисперсності шляхом налаштування показника μ .

Розглядаючи критичну поведінку спінової системи на складній мережі, особливу увагу приділено безмасштабним мережам [1–5, 7], які характеризуються степеневим-згасним законом розподілу ступенів вузла (див. також (1.2)):

$$p(K) = c_\lambda K^{-\lambda}, \quad K_{\min} \leq K \leq K_{\max}, \quad (3.2)$$

де $p(K)$ — це ймовірність того, що будь-який заданий вузол має ступінь (кількість зв'язків) K , c_λ — константа нормалізації, а $\lambda > 2$. Наразі добре встановлено, що модель Ізінга на безмасштабній мережі має нетривіальну критичну поведінку: залежно від значення λ вона характеризується різними критичними показниками [66, 68, 174]. Наприклад, коли $\lambda > 5$ критичні показники збігаються з показниками середнього поля, які спостерігаються для регулярних ґраток. В області $3 < \lambda < 5$ показники стають λ -залежними. Коли $\lambda = 5$ з'являються логарифмічні поправки до скейлінгу.

3.3. Модель на повному графі та графі Ердоша-Рені

За наявності однорідного поля H гамільтоніан моделі зі змінною довжиною запишеться:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm \mathcal{S}_i. \quad (3.3)$$

Для стандартної версії спіні σ_i приймає значення ± 1 , $i = 1 \dots N$ і стала взаємодії J_{ij} становить 1 для найближчих сусідів, або 0 інакше. У соціофізиці індивіди представлені у вигляді вузлів з бінарними спінами, що представляють різні соціальні стани, але не всі суспільні дії є простими бінарними станами і наша модель вводить градацію для особливості окремого вузла.

Ми надаємо спіну σ_i “силу”, яка змінюється від вузла до вузла через випадкову змінну $|\sigma_i| \equiv \mathcal{S}_i$, отриману з функції розподілу ймовірностей $q(\mathcal{S}_i)$. Ми вибрали степеневий закон розподілу (3.1). Правильне визначення термодинамічних функцій включає конфігураційні усереднення, окрім звичайного усереднення Гіббса [175], оскільки потрібно враховувати природу випадкової замороженої змінної довжини спіна.¹

Існує кілька очевидних мотивацій для вибору степеневі форми загасання довжини спіна. Через природу взаємодій у моделі Ізінга, сила спіна впливає на вузли, з якими взаємодіє даний вузол – чим більше значення $\mathcal{S}_i$, тим більш заразний або переконаний є вузол i . Цей новий елемент наближає модель ближче до реальних соціальних мереж. Таким чином введення змінних спінів до стандартної моделі відкриває нові шляхи до міждисциплінарності.

Тут розглянуто три типи графів для пошуку точних розв’язків: повний граф, граф Ердоша-Рені та безмасштабну мережу. Як і в моделі Вейса, кожна пара вузлів $\{i, j\}$ пов’язана у випадку повного графа. Імовірність зв’язку також є однаковою для кожної пари $p = p_{i,j} = c < 1$ у другому випадку, але не кожна пара пов’язана. Для третього випадку, безмасштабної мережі, розподіл ступеня вузла

¹Оскільки довжини спіна є замороженими змінними, представлена тут модель відрізняється від неперервної спінової моделі. Її також не слід плутати з моделями спінових стеклов, або відпаленими моделями. Термін “відпалений” у цьому розділі стосується випадкового графа, на якому розв’язується нова модель.

регулюється степеневим законом (3.2). Матриця суміжності запишеться [116, 154, 176]:

$$J_{ij} = \begin{cases} 1, & p_{ij}, \\ 0, & 1 - p_{ij}, \end{cases} \quad (3.4)$$

де p_{ij} — імовірність зв'язку будь-якої пари вузлів i та j . Як і в моделі Вейса, у випадку повного графа кожна пара вузлів $\{i, j\}$ пов'язана, тобто, $p_{ij} = 1$. Для графа Ердоша-Рені імовірність зв'язку також є однакою для кожної пари $p = p_{i,j} = c < 1$, але не кожна пара пов'язана. Для третього випадку, відпаленої (annealed) безмасштабної мережі, розподіл ступеня вузла регулюється степеневим законом, а імовірність зв'язку між вузлами задається як [154]:

$$p_{ij} = \frac{k_i k_j}{N \bar{k}} + O(1/N^2), \quad \bar{k} = \frac{1}{N} \sum_l k_l. \quad (3.5)$$

з $\bar{k} = \frac{1}{N} \sum_l k_l$. Очікуване значення ступеня вузла $\mathbb{E}K_i = \sum_j p_{ij} = k_i$ і його розподіл задається $p(K)$ [116, 176].

Оскільки добуток спінів у (3.3) може приймати лише два значення, ми використовуємо рівність

$$\phi(A\epsilon) = \frac{1}{2}[\phi(A) + \phi(-A)] + \frac{\epsilon}{2}[\phi(A) - \phi(-A)], \quad \epsilon = \pm 1,$$

щоб отримати конфігураційно-залежну статистичну суму:

$$\mathcal{Z}(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \prod_{i < j} c_{ij} \text{Sp}_\sigma \left(e^{\sum_{i < j} d_{ij} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_i \mathcal{S}_i \sigma_i} \right), \quad (3.6)$$

$$c_{ij} = \sqrt{a_{ij}^2 - b_{ij}^2}, \quad d_{ij} = \ln \frac{a_{ij} + b_{ij}}{a_{ij} - b_{ij}}. \quad (3.7)$$

Тут $\beta = T^{-1}$ — обернена температура, шпур береться за усіма спінами і ми зберігаємо $\sigma_i = \pm 1$, що відповідає значенню спіна $\sigma_i \mathcal{S}_i$. Коефіцієнти (3.7) неявно залежать від p_{ij} і $\mathcal{S}_i$ через співвідношення

$$a_{ij} = 1 - p_{ij} + p_{ij} \cosh(\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j), \quad b_{ij} = p_{ij} \sinh(\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j). \quad (3.8)$$

Для **повного графа** $p_{ij} = 1$, звідки $c_{ij} = 1$, $d_{ij} = 2\beta\mathcal{S}_i\mathcal{S}_j$, і з усереднення за спінами отримуємо:

$$\mathcal{Z}(\{\mathcal{S}\}) = \int_0^{+\infty} e^{\frac{-x^2 T}{2}} \left[e^{I_\mu^+(\frac{x}{\sqrt{N}})} + e^{I_\mu^-(\frac{x}{\sqrt{N}})} \right] dx, \quad (3.9)$$

використавши (3.1) з $\mathcal{S}_{\max} \rightarrow \infty$ і для малого значення магнітного поля зберігаємо лише провідний доданок

$$I_\mu^\pm(\varepsilon) = N \left[c_\mu \varepsilon^{\mu-1} I_\mu(\varepsilon) \pm \frac{\overline{\mathcal{S}^2}}{T} \varepsilon H \right], \quad (3.10)$$

з

$$I_\mu(\varepsilon) = \int_\varepsilon^\infty dz \frac{1}{z^\mu} \ln \cosh z, \quad (3.11)$$

та $\varepsilon = \frac{x}{\sqrt{N}}$. У (3.9) і в усіх відповідних інтегральних представлення нижче, ми опускаємо нерелевантні множники та числові коефіцієнти.

З асимптотичної поведінки інтегралу $I_\mu(\varepsilon)$ (3.11) оцінюється (3.9) в термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$. Для вільної енергії на один спін отримуємо:

$$\frac{f}{N} \sim \begin{cases} m^2 + m^{\mu-1} - mH, & 2 < \mu < 3, \\ m^2 + m^2 \ln \frac{1}{m} - mH, & \mu = 3, \\ \tau m^2 + m^{\mu-1} - mH, & 3 < \mu < 5, \\ \tau m^2 + m^4 \ln \frac{1}{m} - mH, & \mu = 5, \\ \tau m^2 + m^4 - mH, & \mu > 5. \end{cases} \quad (3.12)$$

Тут m — параметр порядку, а $\tau = \frac{|T-T_c|}{T_c}$ — приведена температура, де T_c позначає критичну температуру. Форма вільної енергії (3.12) аналогічна тій, що описує критичну поведінку стандартної моделі Ізінга (де $\sigma_i = \pm 1$) на відпаленій (annealed) безмасштабній мережі з показником загасання λ (див. Рис. 3.3а) [116]. У нашому випадку параметр μ відіграє подібну роль (див. Рис. 3.3с). Основні результати можна підсумувати наступним чином: при $\mu \leq 3$ система залишається впорядкованою при будь-якій скінченній температурі; при $\mu > 3$ спостерігається фазовий перехід другого роду; у проміжному діапазоні $3 < \mu < 5$ критичні показники залежать від μ ; для $\mu > 5$ поведінка системи описується критичними показниками середнього поля; у випадку $\mu = 5$ спостерігаються логарифмічні поправки

[7, 116, 154, 176], які визначаються класичними критичними показниками та задовільняють стандартні скейлінгові співвідношення.

У випадку **графу Ердоша-Рені** можна замінити $p_{ij} = c$ у (3.18). Це забезпечує подібний вираз для статистичної суми (3.17), як і в випадку повного графа (з точністю до перенормованої взаємодії). Тому критична поведінка обох моделей по суті, еквівалентна (див. схематичну фазову діаграму на Рис. 3.3с).

Для відпаленої безмасштабної мережі з імовірністю p_{ij} , що визначається (3.15), у термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ (тобто, з малим p_{ij}), застосованим до (3.18) отримуємо $d_{ij} \sim p_{ij} \beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j$. Перетворення Стратоновича-Габбарда забезпечує усереднення за спінами в (3.17) і статистична сума має унарну залежність від випадкових величин $f(k_i \mathcal{S}_i)$. Це зручно для переходу від підсумовування по вузлах i до підсумовування за випадковими змінними $k_i, \mathcal{S}_i$. Випадок безмасштабної мережі є найбільш цікавим, тому його розглянемо більш детально у наступному підрозділі.

3.4. Модель на відпаленій безмасштабній мережі

Використовуючи раніші означення для відпаленої мережі [115, 116, 154, 176] ми визначаємо відпалену мережу як ансамбль мереж із N вузлів із заданою послідовністю ступенів вузлів $\{K\} = (K_1, K_2, \dots, K_N)$, максимально випадковою за умови заданого розподілу. Вважається, що зв'язок між вузлами змінюється для кожної фіксованої послідовності $\{K\}$. Отже, у дусі концепції відпаленого безладу [175] статистичну суму слід усереднювати з урахуванням цих флуктуацій. Це відрізняється від замороженого безладу, коли для кожної фіксованої послідовності $\{K\}$ мережеві зв'язки також є фіксованими, і тому усереднюється вільна енергія. В цьому останньому випадку конфігураційна модель слугує аналогом відпаленої мережі (див., наприклад, [156]).

Для побудови відпаленої мережі з N вузлів кожному вузлу i присвоюється випадкова величина (мітка) k_i , взята з розподілу $p(k)$, а імовірність зв'язку між двома вузлами визначається як (3.15).

При наявності однорідного зовнішнього магнітного поля H гамільтоніан (звичайної) моделі Ізінга на відпаленій мережі має вигляд:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1, \quad (3.13)$$

де друга сума охоплює всі N вузлів мережі, а перше підсумовування ведеться за усіма їх парами, J_{ij} є матрицею суміжності (3.14). Для фіксованої послідовності випадкових величин $\{k\} = (k_1, \dots, k_N)$ статистична сума отримується усередненням відносно випадкових відпалених зв'язків $\{J\}$:

$$\mathcal{Z}_N(\{k\}) = \langle \text{Sp}_\sigma e^{-\beta \mathcal{H}} \rangle_{\{J\}}, \quad (3.14)$$

де

$$\text{Sp}_\sigma(\dots) = \prod_i \sum_{\sigma_i = \pm 1} (\dots), \quad (3.15)$$

$\beta = T^{-1}$ є оберненою температурою, а для усереднення див. Рів. (??):

$$\langle (\dots) \rangle_{\{J\}} = \prod_{i < j} \left[(\dots)_{J_{ij}=J} p_{ij} + (\dots)_{J_{ij}=0} (1 - p_{ij}) \right]. \quad (3.16)$$

У свою чергу, отримана після усереднення за випадковими зв'язками статистична сума $\mathcal{Z}_N(\{k\})$ залежить від конкретного вибору послідовності випадкових величин (міток) $\{k\}$. Нагадаємо, що ця послідовність була прийнята за фіксовану, тобто заморожену. Таким чином, спостережувана вільна енергія F_N отримується шляхом усереднення послідовності вільних енергій $F_N(\{k\})$ як:

$$F_N = \langle F_N(\{k\}) \rangle_{\{k\}} = -T \prod_i \sum_{k_i} p(k_i) \ln \mathcal{Z}_N(\{k\}). \quad (3.17)$$

Тут варто згадати ще одну помітну особливість відпаленої мережі: статистична сума $\mathcal{Z}_N(\{k\})$ є самоусереднювальною, тобто не залежать від конкретного вибору $\{k\}$: $\mathcal{Z}_N(\{k\}) \equiv \mathcal{Z}_N$. Це призводить до очевидного відношення

$$F_N = -T \prod_i \sum_{k_i} p(k_i) \ln \mathcal{Z}_N = -T \ln \mathcal{Z}_N, \quad (3.18)$$

що означає, що вільна енергія також є самоусередненою величиною і дозволяє уникнути усереднення логарифма статистичної суми, і це значне полегшення при розрахунках на відпалених мережах.

Модель зі змінною довжиною спіна послаблює обмеження на фіксовану довжину спіна в гамільтоніані (3.13). Подібно до звичайної моделі Ізінга, ми збережемо бінарний характер спінових змінних зберігаючи глобальну Z_2 симетрію всієї системи, дозволяючи кожному спіну змінювати своє абсолютне значення в безперервному діапазоні випадкових мод $|\sigma_i| \equiv \mathcal{S}_i$. Гамільтоніан моделі:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad S_i = \pm \mathcal{S}_i, \quad (3.19)$$

де всі позначення такі, як у Рів. (3.13) і $\mathcal{S}_i$ – незалежні однаково розподілені (i.i.d.) випадкові величини з заданою функцією розподілу $q(\mathcal{S})$. Гамільтоніан (3.19) можна переписати в термінах звичайної моделі Ізінга зі спінами одиничної довжини при заміні змінних $S_i = \sigma_i \mathcal{S}_i$:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \mathcal{S}_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1, \quad (3.20)$$

Розглянемо випадок, коли послідовність $\{\mathcal{S}\} = (\mathcal{S}_{\min}, \dots, \mathcal{S}_{\max})$ є максимально випадкова за умови, що їх розподіл є заданим. Для фіксованої послідовності випадкових величин $\{k\}$ (що визначають мережевий зв'язок) і $\{\mathcal{S}\}$ (які визначають локальну довжину спіна), статистичну суму отримано шляхом усереднення з відносно випадкових відпалених зв'язків $\{J\}$, див. рівняння (3.14):

$$\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \langle \text{Sp}_\sigma e^{-\beta \mathcal{H}} \rangle_{\{J\}}, \quad (3.21)$$

із щупром визначеним у (3.15).

Після усереднення за спінами статистична сума також залишається залежною від (випадково розподілених) довжин спіна $\{\mathcal{S}\}$, як явно позначено в (3.21). Однак у наступному підрозділі ми покажемо, що у випадку відпаленої мережі статистична сума $\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\})$ є самоусереднювальною величиною як і для відносно

випадкових величин k і $\mathcal{S}$ ($\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \mathcal{Z}_N$). Тому для вільної енергії аналогічно до (3.18), отримуємо:

$$F_N = -T \prod_i \sum_{k_i} p(k_i) \sum_{\mathcal{S}_i} q(\mathcal{S}_i) \ln \mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = -T \ln \mathcal{Z}_N. \quad (3.22)$$

Тепер наше завдання полягатиме в тому, щоб продовжити дослідження статистичної суми моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна $\mathcal{S}$ на відпаленій безмасштабній мережі з розподілами випадкових величин $q(\mathcal{S})$, $p(k)$, що описуються степеневоспадними законами (3.1), (3.2). У процесі виведення буде підтверджено властивості самоусереднення.

3.4.1. Самоусереднення

Підставляючи в (3.20) матрицю суміжності (3.14) і усереднюючи за спіновими конфігураціями отримуємо:

$$\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \text{Sp}_\sigma \left(e^{\beta H \sum_i \mathcal{S}_i \sigma_i} \prod_{i < j} (p_{ij} e^{\frac{\beta J}{2} \sum_{i \neq j} \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j \sigma_i \sigma_j} + 1 - p_{ij}) \right). \quad (3.23)$$

Беручи до уваги, що добуток спінів у (3.23) може набувати лише два значення ($\sigma_i \sigma_j = \pm 1$), ми можемо використати рівність

$$f(K\varepsilon) = \frac{1}{2}[f(K) + f(-K)] + \frac{\varepsilon}{2}[f(K) - f(-K)], \quad \varepsilon = \pm 1, \quad (3.24)$$

щоб отримати вираз для статистичної суми (3.23) у випадку $\varepsilon \equiv \sigma_i \sigma_j$, $K \equiv \beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j$:

$$\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \text{Sp}_S \left(e^{\beta H \sum_i \mathcal{S}_i \sigma_i} \prod_{i < j} \left([\cosh(\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j) + \sigma_i \sigma_j \sinh(\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j) - 1] p_{ij} + 1 \right) \right). \quad (3.25)$$

Спростуючи вираз для статистичної суми, можна отримати:

$$\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \text{Sp}_\sigma \left(e^{\beta H \sum_i \mathcal{S}_i \sigma_i} \prod_{i < j} e^{\ln(a_{ij} + b_{ij} \sigma_i \sigma_j)} \right) \quad (3.26)$$

із

$$a_{ij} = 1 - p_{ij} + p_{ij} \cosh(\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j), \quad b_{ij} = p_{ij} \sinh(\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j). \quad (3.27)$$

Використовуючи рівність (3.24) для представлення $\ln(a_{ij} + b_{ij}\sigma_i\sigma_j)$ у (3.26) для статистичної суми отримуємо:

$$\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \prod_{i < j} c_{ij} \text{Sp}_\sigma \left(e^{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} d_{ij} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_i \mathcal{S}_i \sigma_i} \right), \quad (3.28)$$

де

$$c_{ij} = \sqrt{a_{ij}^2 - b_{ij}^2}, \quad d_{ij} = \ln \frac{a_{ij} + b_{ij}}{a_{ij} - b_{ij}}. \quad (3.29)$$

Останні коефіцієнти неявно залежать від p_{ij} через (3.27). Підставляючи ці залежності в (3.29) запишемо:

$$c_{ij} = \sqrt{1 - 2p_{ij} + 2p_{ij}^2 + 2(1 - p_{ij}) \cosh(\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j)}, \quad (3.30)$$

$$d_{ij} = \ln \frac{1 - p_{ij} + p_{ij} e^{\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j}}{1 - p_{ij} + p_{ij} e^{-\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j}}. \quad (3.31)$$

Підставляючи p_{ij} у вираз для статистичної суми (3.28) і оцінюючи d_{ij} (3.31) у термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ (тобто в межі малого p_{ij})

$$d_{ij} = \ln \frac{1 - p_{ij} + p_{ij} e^{\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j}}{1 - p_{ij} + p_{ij} e^{-\beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j}} \simeq p_{ij} \beta J \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j, \quad (3.32)$$

отримуємо:

$$\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \text{Sp}_\sigma \exp \left(\beta J \sum_{i < j} \frac{k_i k_j \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j \sigma_i \sigma_j}{N \langle k \rangle} + \beta H \sum_i \mathcal{S}_i \sigma_i \right). \quad (3.33)$$

Тепер доданок взаємодії в (3.33) набуває роздільної форми, і можна застосувати перетворення Стратоновича-Габбарда, щоб виконати точно усереднення за спінами σ_i і отримати наступний вираз для статистичної суми:

$$\mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(\frac{-N \langle k \rangle T x^2}{2J} + \sum_i \ln \cosh[\mathcal{S}_i (x k_i + H/T)] \right) dx. \quad (3.34)$$

У цьому та всіх інших інтегральних представленнях статистичної суми ми опускаємо передінтегральні множники, які не мають значення для нашого аналізу. Поки виконується функціональна залежність від випадкових величин $\mathcal{S}_i$, k_i і (3.34) має

унарний тип, зручно перейти від суми за вузлами i до суми за випадковими величинами $k_i, \mathcal{S}_i$ із заданими функціями розподілу $p(k), q(\mathcal{S})$. Розглядаючи випадкові величини неперервними, приходимо до:

$$\begin{aligned} \sum_i f(k_i, \mathcal{S}_i) &= N \sum_{k_{\min}}^{k_{\max}} \sum_{\mathcal{S}_{\min}}^{\mathcal{S}_{\max}} p(k) q(\mathcal{S}) f(k, \mathcal{S}) = \\ &= N \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \int_{\mathcal{S}_{\min}}^{\mathcal{S}_{\max}} p(k) q(\mathcal{S}) f(k, \mathcal{S}) dk d\mathcal{S}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Для нескінченної системи ми покладемо $k_{\max} = \mathcal{S}_{\max} \rightarrow \infty$ і, не втрачаючи загальності, вибираємо нижню межу інтегрування $k_{\min} = \mathcal{S}_{\min} = 2$, а сталу взаємодії $J = 1$. Особливості критичної поведінки, яка нас цікавить спричинені поведінкою при $k_{\max}, \mathcal{S}_{\max} \rightarrow \infty$. Хоча більш природним є вибір нижньої межі інтегрування, рівної одиниці, але безмасштабні мережі з $k_{\min} = 1$ не мають проникаючого кластера для $\lambda > \lambda_c$ (з $\lambda_c = 3.48$ для дискретного розподілу ступеня вузла і $\lambda_c = 4$ для неперервного) [70, 177, 178]. Ми уникаємо цього обмеження, вибираючи $k_{\min} = 2$. Щоб мати вирази, симетричні відносно $k, \mathcal{S}$, ми також вибираємо $\mathcal{S}_{\min} = 2$. Тепер легко побачити, що статистична сума $\mathcal{Z}_N(\{\mathcal{S}\}, \{k\})$ не залежить від випадкових величин k і $\mathcal{S}$ і є *самоусереднюваною*:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_N(\{k\}, \{\mathcal{S}\}) &\equiv \mathcal{Z}_N = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-N\langle k \rangle T x^2}{2}\right) + \\ &+ N \int_2^{\infty} \int_2^{\infty} p(k) q(\mathcal{S}) \ln \cosh[\mathcal{S}(kx + H/T)] dk d\mathcal{S} dx. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Як видно з рівняння (3.36), властивість самоусереднення є досить загальною і стосується будь-якої форми розподілів $p(k), q(\mathcal{S})$. Нижче ми будемо використовувати цей вираз, щоб аналізувати термодинаміку у випадку, коли ці розподіли набувають степеневих форми (3.1), (3.2).

3.4.2. Асимптотична поведінка інтегралів при малих ε

Зручно перейти в (3.36) до інтегрування за додатніми значеннями x та представлення статсуми після заміни змінних:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_N = & \int_0^{+\infty} e^{\frac{-\langle k \rangle x^2 T}{2N}} \left[\exp \left(N \int_2^\infty \int_2^\infty p(k) q(\mathcal{S}) \ln \cosh \left(\frac{\mathcal{S} k x}{N} + \mathcal{S} H/T \right) dk dL \right) + \right. \\ & \left. \exp \left(N \int_2^\infty \int_2^\infty p(k) q(\mathcal{S}) \ln \cosh \left(\frac{-\mathcal{S} k x}{N} + \mathcal{S} H/T \right) dk d\mathcal{S} \right) \right] dx. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Цікавлячись провідною асимптотикою статистичної суми коли $N \rightarrow \infty$ і зберігаючи перший провідний доданок за H , перепишемо вираз (3.37) у такому вигляді:

$$\mathcal{Z}_N = \int_0^{+\infty} e^{\frac{-\langle k \rangle x^2 T}{2N}} \left[\exp(I_{\lambda, \mu}^+(x)) + \exp(I_{\lambda, \mu}^-(x)) \right] dx, \quad (3.38)$$

із

$$I_{\lambda, \mu}^\pm(x) = N \left[c_\lambda c_\mu \left(\frac{x}{N} \right)^{\frac{\lambda + \mu - 2}{2}} I_{\lambda, \mu}(\varepsilon) \pm \frac{\langle \mathcal{S}^2 \rangle \langle k \rangle}{TN} x H \right] \quad (3.39)$$

де

$$I_{\lambda, \mu}(\varepsilon) = \int_\varepsilon^\infty \int_\varepsilon^\infty \frac{\ln \cosh(k\mathcal{S})}{k^\lambda \mathcal{S}^\mu} d\mathcal{S} dk \quad (3.40)$$

і ми замінили розподіли $q(\mathcal{S})$, $p(k)$ згідно розподілів (3.1) і (3.2). Нижня межа інтегрування $\varepsilon = 2\sqrt{\frac{x}{N}}$ прямує до нуля, коли $N \rightarrow \infty$.

Тут наведено асимптотичні оцінки для інтегралів, які входять у формули (3.39), (3.63). Зокрема, поведінка при малих значеннях ε для наступних інтегралів:

$$I_\mu(\varepsilon) = \int_\varepsilon^\infty dx, \frac{1}{x^\mu} \ln \cosh x, \quad (3.41)$$

$$I_{\lambda, \mu}(\varepsilon) = \int_\varepsilon^\infty dx \int_\varepsilon^\infty dy, \frac{1}{x^\lambda y^\mu} \ln \cosh(xy), \quad (3.42)$$

Розглядаються області, де $\lambda, \mu > 2$.

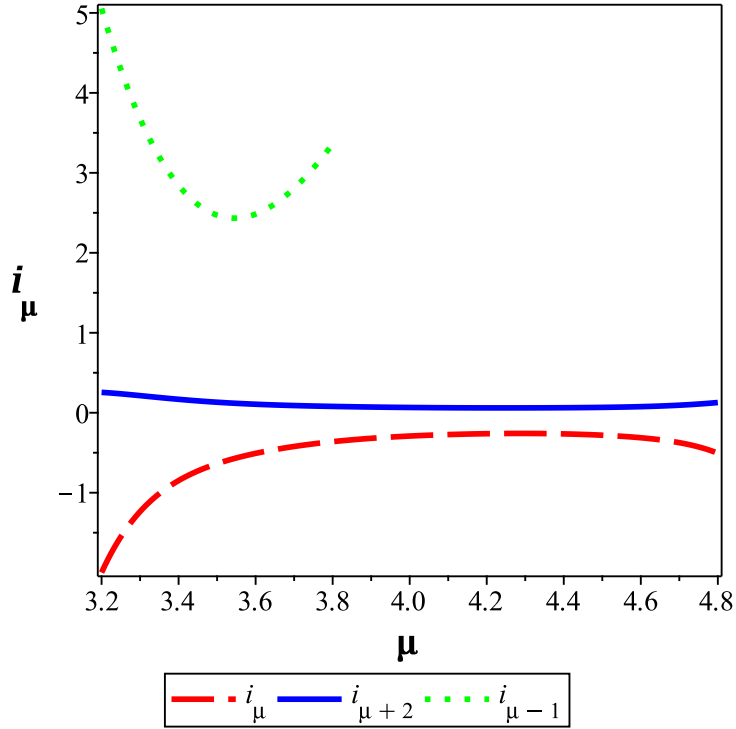


Рис. 3.2. Залежності констант i_μ у Рів. (3.43) та (3.48), (3.51) від μ .

Інтеграл $I_\mu(\varepsilon)$

Розглянемо спочатку інтеграл (3.41). Для $2 < \mu < 3$, він не розбігається при $\varepsilon \rightarrow 0$, тому його провідну поведінку в цій границі можна оцінити за допомогою числового інтегрування:

$$I_\mu(\varepsilon) = i_\mu + O(\varepsilon), \quad (3.43)$$

де

$$i_\mu = \int_0^\infty dx, \frac{1}{x^\mu} \ln \cosh x, \quad 2 < \mu < 3, . \quad (3.44)$$

Числові значення цієї та подальших констант i_μ зображено як функцію від μ на Рис. 3.2. При подальшому збільшенні μ , спочатку з'являється логарифмічна сингулярність при $\mu = 3$. Її можна виокремити:

$$I_3(\varepsilon) = -\frac{\ln \varepsilon}{2} + i_3 + O(\varepsilon^2), \quad (3.45)$$

де $i_3 = 0.64525$.

Для $\mu > 3$, щоб виокремити провідні сингулярності функції під інтегралом при малих x , слід двічі проінтегрувати частинами, що приводить до виразу:

$$I_\mu(\varepsilon) = -\frac{\varepsilon^{1-\mu} \ln \cosh \varepsilon}{1-\mu} + \frac{\varepsilon^{2-\mu} \operatorname{th} \varepsilon}{(1-\mu)(2-\mu)} - \frac{\varepsilon^{3-\mu}}{(1-\mu)(2-\mu)(3-\mu)} + i_\mu(\varepsilon), \quad (3.46)$$

де

$$i_\mu(\varepsilon) = \frac{1}{(\mu-1)(2-\mu)} \int_\varepsilon^\infty dx, x^{2-\mu} (\operatorname{th} x)^2. \quad (3.47)$$

Подальший аналіз залежить від значення μ . У межах $3 < \mu < 5$, інтеграл з правої частини рівняння (3.47) збігається при $\varepsilon \rightarrow 0$, і його провідні асимптотики можна оцінити чисельно. Таким чином, зберігаючи провідну поведінку перших трьох членів в (3.46), отримуємо:

$$I_\mu(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^{3-\mu}}{2(\mu-3)} + i_\mu + O(\varepsilon), \quad 3 < \mu < 5, \quad (3.48)$$

де

$$i_\mu = \frac{1}{(\mu-1)(2-\mu)} \int_0^\infty dx, x^{2-\mu} (\operatorname{th} x)^2. \quad (3.49)$$

Логарифмічна сингулярність з'являється в (3.47) при $\mu = 5$, що призводить до:

$$I_\mu(\varepsilon) = \varepsilon^{-2}/4 - (\ln \varepsilon)/12 + i_5 + O(\varepsilon), \quad (3.50)$$

де $i_5 = -0.11309$.

Для більших значень μ можна провести аналогічний аналіз. Зокрема, для $5 < \mu < 7$, інтегруючи двічі частинами, виокремлюється сингулярність з інтегралу (3.47):

$$I_\mu(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^{3-\mu}}{2(\mu-3)} - \frac{\varepsilon^{5-\mu}}{12(\mu-5)} + i_\mu + O(\varepsilon), \quad 5 < \mu < 7, \quad (3.51)$$

де

$$i_\mu = \frac{2}{(\mu-1)(2-\mu)(3-\mu)} \left[\int_0^\infty dx x^{3-\mu} (\operatorname{th} x)^3 - \right.$$

$$\frac{1}{4-\mu} \int_0^\infty dx x^{4-\mu} (\operatorname{th} x)^2 \Big]. \quad (3.52)$$

Підсумовуючи вищезазначені вирази для провідної поведінки інтегралу (3.41) при малих ε , отримуємо наступну корисну формулу:

$$I_\mu(\varepsilon) - i_\mu \simeq \begin{cases} O(\varepsilon), & 2 < \mu < 3, \\ -(\ln \varepsilon)/2 + O(\varepsilon^2), & \mu = 3, \\ \varepsilon^{3-\mu}/(2(\mu-3)) + O(\varepsilon), & 3 < \mu < 5, \\ \varepsilon^{-2}/4 - (\ln \varepsilon)/12 + O(\varepsilon), & \mu = 5, \\ \varepsilon^{3-\mu}/(2(\mu-3)) - \varepsilon^{5-\mu}/(12(\mu-5)) + O(\varepsilon), & 5 < \mu < 7. \end{cases} \quad (3.53)$$

Константи i_μ для різних значень μ можна обчислити чисельно, використовуючи формули (3.44), (3.49), (3.52). Їхня залежність від μ показана на Рис. 3.2. Також їх можна порівняти із аналогічними константами, обчисленими у роботі [116] за допомогою різних інтегральних представлень.

Інтеграл $I_{\lambda,\mu}(\varepsilon)$

Щоб виокремити провідні сингулярності інтегралу $I_{\lambda,\mu}(\varepsilon)$ при малих ε , потрібно продиференціювати Рів. (3.42) по ε і тоді ж отримуємо:

$$\frac{d, I_{\lambda,\mu}(\varepsilon)}{d, \varepsilon} = -\varepsilon^{\lambda-\mu-1} I_\lambda(\varepsilon^2) - \varepsilon^{\mu-\lambda-1} I_\mu(\varepsilon^2), \quad (3.54)$$

де асимптотична поведінка інтегралів з правої частини рівняння (3.54) визначається (3.53), при цьому здійснюється заміна $\varepsilon \rightarrow \varepsilon^2$. Як наслідок, асимптотична поведінка $J_{\lambda,\mu}(\varepsilon)$ отримується шляхом інтегрування рівняння (3.54) по ε . Зокрема, при $\lambda = \mu$ вираз (3.54) спрощується до:

$$\frac{d, I_{\lambda,\lambda}(\varepsilon)}{d, \varepsilon} = -2, \varepsilon^{-1} I_\lambda(\varepsilon^2), \quad (3.55)$$

і одразу ж отримуємо:

$$I_{\lambda,\lambda}(\varepsilon) - i_{\lambda,\lambda} + 2i_\lambda \ln \varepsilon \simeq \begin{cases} O(\varepsilon^2), & 2 < \lambda < 3, \\ (\ln \varepsilon)^2/2 + O(\varepsilon^4), & \lambda = 3, \\ \frac{\varepsilon^{6-2\lambda}}{2(\lambda-3)^2} + O(\varepsilon^2), & 3 < \lambda < 5, \\ \varepsilon^{-4}/8 + (\ln \varepsilon)^2/6 + O(\varepsilon^2), & \lambda = 5, \\ \frac{\varepsilon^{6-2\lambda}}{2(\lambda-3)^2} - \frac{\varepsilon^{10-2\lambda}}{12(\lambda-5)^2} + O(\varepsilon^2), & 5 < \lambda < 7. \end{cases} \quad (3.56)$$

Константи i_λ визначені вище і їх чисельні значення $i_{\lambda,\lambda}$ не є важливими при аналізі критичної поведінки, тому не розраховуються у роботі.

Слід зазначити, що інтеграл (3.42) є симетричним відносно перестановки індексів

$$I_{\lambda,\mu}(\varepsilon) = I_{\mu,\lambda}(\varepsilon),$$

а тому легко отримати асимптотики для діапазону $\mu > \lambda$. Аналізуючи попередні отримані вирази для $\mu < \lambda$ тут для $\mu > \lambda$ отримується:

- $2 < \lambda < 3$:

$$I_{\lambda,\mu}(\varepsilon) - i_{\lambda,\mu} = \begin{cases} i_\lambda \frac{\varepsilon^{\lambda-\mu}}{\mu-\lambda} + O(\varepsilon^{\lambda-\mu+2}), & 2 < \mu < 3, \\ i_\lambda \frac{\varepsilon^{\lambda-3}}{3-\lambda} + \frac{\ln \varepsilon}{3-\lambda} \varepsilon^{3-\lambda} + O(\varepsilon^{\lambda-1}), & \mu = 3, \\ i_\lambda \frac{\varepsilon^{\lambda-\mu}}{\mu-\lambda} - \frac{\varepsilon^{6-\lambda-\mu}}{2(6-\lambda-\mu)(\mu-3)} + O(\varepsilon^{\lambda-\mu+2}), & 3 < \mu < 5, \\ i_\lambda \frac{\varepsilon^{\lambda-5}}{5-\lambda} - \frac{\varepsilon^{1-\lambda}}{4(1-\lambda)} + O(\varepsilon^{\lambda-3}), & \mu = 5, \\ i_\lambda \frac{\varepsilon^{\lambda-\mu}}{\mu-\lambda} - \frac{\varepsilon^{6-\lambda-\mu}}{2(6-\lambda-\mu)(\mu-3)} + O(\varepsilon^{\lambda-\mu+2}), & 5 < \mu < 7. \end{cases} \quad (3.57)$$

- $\lambda = 3$:

$$I_{\lambda,\mu}(\varepsilon) - i_{\lambda,\mu} = \begin{cases} \frac{\varepsilon^{3-\mu}}{3-\mu} \ln \varepsilon - \varepsilon^{3-\mu} \left[\frac{i_3}{3-\mu} + \frac{1}{2(\mu-3)^2} \right] + O(\varepsilon^{\mu-1}, \varepsilon^{7-\mu}), & 3 < \mu < 5, \\ \varepsilon^{-2} [i_3/2 - 1/8] - \varepsilon^{-2} \ln \varepsilon / 2 + O(\varepsilon^2), & \mu = 5, \\ \frac{\varepsilon^{3-\mu}}{3-\mu} \ln \varepsilon - \varepsilon^{3-\mu} \left[\frac{i_3}{3-\mu} + \frac{1}{2(\mu-3)^2} \right] + O(\varepsilon^{7-\mu}), & 5 < \mu < 7. \end{cases} \quad (3.58)$$

- $3 < \lambda < 5$:

$$I_{\lambda,\mu}(\varepsilon) - i_{\lambda,\mu} = \begin{cases} i_\lambda \frac{\varepsilon^{\lambda-\mu}}{\mu-\lambda} + \frac{\varepsilon^{6-\lambda-\mu}}{2(\lambda-3)(\mu-3)} + O(\varepsilon^{\lambda-\mu+2}), & 3 < \mu < 5, \\ i_\lambda \frac{\varepsilon^{\lambda-5}}{5-\lambda} + \frac{\varepsilon^{1-\lambda}}{4(\lambda-3)} + O(\varepsilon^{\lambda-3}), & \mu = 5, \\ i_\lambda \frac{\varepsilon^{\lambda-\mu}}{\mu-\lambda} + \frac{\varepsilon^{6-\lambda-\mu}}{2(\lambda-3)(\mu-3)} - \frac{\varepsilon^{10-\lambda-\mu}}{12(10-\lambda-\mu)(\mu-5)} + O(\varepsilon^{\lambda-\mu+2}), & 5 < \mu < 7. \end{cases} \quad (3.59)$$

- $\lambda = 5, 5 < \mu < 7$:

$$I_{\lambda,\mu}(\varepsilon) - i_{5,\mu} = \frac{\varepsilon^{5-\mu}}{6(5-\mu)} \ln \varepsilon - \varepsilon^{5-\mu} \left[\frac{i_5}{5-\mu} + \frac{1}{12(\mu-5)^2} \right] + \frac{\varepsilon^{1-\mu}}{4(\mu-3)} + O(\varepsilon^{7-\mu}). \quad (3.60)$$

- $5 < \lambda < 7, 5 < \mu < 7$:

$$I_{\lambda,\mu}(\varepsilon) - i_{\lambda,\mu} = i_{\lambda} \frac{\varepsilon^{\mu-\lambda}}{\lambda - \mu} + \frac{\varepsilon^{6-\lambda-\mu}}{2(\lambda - 3)(\mu - 3)} - \frac{\varepsilon^{10-\lambda-\mu}}{12(\lambda - 5)(\mu - 5)} + O(\varepsilon^{\lambda-\mu+2}). \quad (3.61)$$

Асимптотичні оцінки (3.57)–(3.61) разом із (3.56) використані у дослідженні для отримання виразів вільної енергії моделі у різних діапазонах параметрів.

3.4.3. Фазова діаграма

Асимптотичні розклади інтеграла (3.40) при малих ε (великих N) оцінено в 3.4.2. Підставляючи ці розклади при різних значеннях параметрів λ, μ у рівняння (3.38) ми отримуємо відповідні вирази для статистичної суми, яка обчислюється при великих N методом найшвидшого спуску. Кінцевий вираз для статистичної суми виглядає так:

$$\mathcal{Z}_N = \int_0^{+\infty} e^{-N\Phi_{\mu,\lambda}(x)} dx \quad (3.62)$$

де

$$\Phi_{\mu,\lambda}(x) = \frac{\langle k \rangle x^2 T}{2} - c_{\mu} c_{\lambda} x^{\frac{\lambda+\mu-2}{2}} I_{\lambda,\mu}(\sqrt{x}) - \frac{\langle \mathcal{S}^2 \rangle \langle k \rangle}{T} x H, \quad (3.63)$$

а лінійний за H доданок походить від асимптотики при великих N для косинуса гіперболічного в рівняннях (3.38), (3.39).

Тепер легко написати вільну енергію Гельмгольца $F_N(T, H)$ в розрахунку на один вузол:

$$f(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} F_N(H, T)/N = -T \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \mathcal{Z}_N/N = T\Phi_{\mu,\lambda}(m) \quad (3.64)$$

де m – координата мінімуму функції $\Phi_{\mu,\lambda}(x)$:

$$\frac{d\Phi_{\mu,\lambda}(x)}{dx} \Big|_{x=m} = 0, \quad \frac{d^2\Phi_{\mu,\lambda}(x)}{dx^2} \Big|_{x=m} > 0. \quad (3.65)$$

Отримана вільна енергія є симетричною при заміні індексів $\mu \leftrightarrow \lambda$. Тому нижче наводимо відповідні вирази для двох випадків: $\mu > \lambda$ і $\mu = \lambda$. Для першого випадку $\mu > \lambda$, асимптотика вільної енергії при малих m визначається меншим

значенням з показників загасання, тобто λ . Зберігаючи провідні доданки розкладу, ми приходимо до:

$$\Phi_{\mu,\lambda}(m) + \frac{\langle \mathcal{S}^2 \rangle \langle k \rangle}{T} m H \simeq \begin{cases} 2 < \lambda < 3 : & -\frac{c_\mu c_\lambda i_\lambda}{\mu - \lambda} m^{\lambda-1} + \frac{\langle k \rangle T}{2} m^2, \\ \lambda = 3 : & \frac{c_\mu c_3}{2(\mu-3)} m^2 \ln \frac{1}{m} + c_\mu c_3 m^2 \left(\frac{i_3}{3-\mu} + \frac{1}{2(\mu-3)^2} \right) + \frac{\langle k \rangle T}{2} m^2, \\ 3 < \lambda < 5 : & \frac{\langle k \rangle}{2} (T - T_0) m^2 - \frac{c_\mu c_\lambda i_\lambda}{\mu - \lambda} m^{\lambda-1}, \\ \lambda = 5 : & \frac{\langle k \rangle}{2} (T - T_0) m^2 - \frac{c_5 c_\mu}{12(\mu-5)} m^4 \ln \frac{1}{m} + c_5 c_\mu \left(\frac{1}{12(\mu-5)^2} - \frac{i_5}{\mu-5} \right) m^4, \\ \lambda > 5 : & \frac{\langle k \rangle}{2} (T - T_0) m^2 + \frac{c_\mu c_\lambda}{12(\lambda-5)(\mu-5)} m^4, \end{cases} \quad (3.66)$$

із

$$T_0 = \frac{c_\mu c_\lambda}{\langle k \rangle (\lambda - 3)(\mu - 3)} = \frac{\langle k^2 \rangle \langle \mathcal{S}^2 \rangle}{2^{3-\mu} 2^{3-\lambda} \langle k \rangle}, \quad (3.67)$$

де $\langle \mathcal{S}^2 \rangle = \int_2^\infty \mathcal{S}^2 q(\mathcal{S}) d\mathcal{S}$, $\langle k^2 \rangle = \int_2^\infty k^2 p(k) dk$, а функції розподілу $q(\mathcal{S})$, $p(k)$ задані рівняннями (3.1), (3.2) і ми це врахували для $\mathcal{S}_{\min} = k_{\min} = 2$. Коефіцієнти i_μ наведені в 3.4.2, а c_μ , c_λ — сталі коефіцієнти функцій розподілу (3.1), (3.2).

Для випадку $\lambda = \mu$ провідна асимптотика при малих m виглядає так:

$$\Phi_{\mu,\mu}(m) + \frac{\langle \mathcal{S}^2 \rangle \langle k \rangle}{T} m H \simeq \begin{cases} 2 < \mu < 3 : & -c_\mu^2 i_\mu m^{\mu-1} \ln \frac{1}{m} - c_3^2 i_{\mu,\mu} m^{\mu-1} + \frac{\langle k \rangle T}{2} m^2, \\ \mu = 3 : & -i_3 c_3^2 m^2 \ln \frac{1}{m} + \left[\frac{\langle k \rangle T}{2} - c_3^2 i_{3,3} \right] m^2, \\ 3 < \mu < 5 : & \frac{\langle k \rangle}{2} (T - T_0) m^2 - c_\mu^2 i_\mu m^{\mu-1} \ln \frac{1}{m}, \\ \mu = 5 : & \frac{\langle k \rangle}{2} (T - T_0) m^2 - \frac{c_5^2}{24} m^4 (\ln \frac{1}{m})^2 - i_5 c_5^2 m^4 \ln \frac{1}{m}, \\ \mu > 5 : & \frac{\langle k \rangle}{2} (T - T_0) m^2 + \frac{c_\mu^2}{12(\mu-5)^2} m^4, \end{cases} \quad (3.68)$$

з позначеннями, поясненими вище. Знаки коефіцієнтів $i_{\mu,\lambda}$ не мають значення в нашому аналізі.

Отримані вище оцінки асимптотики вільної енергії (3.66), (3.68) дають доступ до термодинамічних властивостей системи. Як ми побачимо нижче, параметри μ і λ відіграють вирішальну роль у впорядкуванні та визначають клас універсальності узагальненої моделі Ізінга на безмасштабній мережі. Перш ніж приступити до аналізу цих виразів, доцільно нагадати основні особливості критичної поведінки двох моделей, де кожен із цих параметрів розглядався окремо: це модель Ізінга на безмасштабній мережі [66, 68, 179] і узагальнена модель Ізінга

зі степеневим законом розподілу сили спіну (3.1) на повному графі [8]. Як уже встановлено, модель Ізінга на безмасштабній мережі залишається впорядкованою при будь-якій скінченній температурі при малих значеннях показника $2 < \lambda \leq 3$. Параметр порядку загасає з температурою як $m \sim T^{1/(\lambda-3)}$ при $2 < \mu < 3$. Експоненційне загасання спостерігається для $\lambda = 3$: $m \sim e^{-bT}$. При подальшому збільшенні λ фазовий перехід другого роду відбувається для $\lambda > 3$ при $T = T_0$ і $H = 0$: $m = 0$ для високотемпературної фази, тоді як параметр порядку в околі точки переходу при $H = 0$ з $\tau = |T - T_0|/T_0$ виглядає як $m \sim \tau^{1/(\lambda-3)}$. Степенева залежність параметра порядку від температури досягає свого звичайного значення середнього поля $m \sim \tau^{1/2}$ лише тоді, коли $\lambda > 5$. Логарифмічні поправки до скейлінгу з'являються при граничному $\lambda = 5$: $m \sim \tau^{1/2} |\ln \tau|^{-1/2}$. Фазова діаграма, описана вище, зображена на рис. 3.3а. Подібна картина спостерігається, коли аналізується узагальнена модель Ізінга зі степеневі-спадною функцією розподілу за довжинами спінів на повному графі, тобто у дусі моделі Каца [180–186], коли кожен вузол поєднаний із всіма іншими вузлами. Як було продемонстровано в [8], роль глобального параметра в цьому випадку відіграє показник розподілу довжини спіна μ . У свою чергу, ми підсумовуємо степеневі асимптотики параметра порядку m для різних значень μ на рис. 3.3с.

Тепер з асимптотикою вільної енергії для узагальненої моделі Ізінга на безмасштабній мережі (3.66), (3.68) можна проаналізувати взаємодію двох параметрів: перший (μ) керує силою окремих спінів і другий (λ) регулює зв'язність графу. Температурна поведінка параметра порядку та фазова діаграма, отримана в результаті такого аналізу, показана в Таблиця 3.1 і на рис. 3.3б. Критична поведінка контролюється меншим параметром з пари $\lambda - \mu$. Коли хоча б один із параметрів (λ або μ) менший ніж три, система залишається впорядкованою при будь-якій скінченній температурі, а параметр порядку спадає як степенева функція T :

$$m \simeq \begin{cases} 2 < (\mu, \lambda) < 3; \mu > \lambda : & T^{\frac{1}{\lambda-3}}, \\ 2 < (\mu, \lambda) < 3; \mu = \lambda : & T^{\frac{1}{\lambda-3}}, \\ 2 < (\mu, \lambda) < 3; \mu < \lambda : & T^{\frac{1}{\mu-3}}. \end{cases} \quad (3.69)$$

Коли λ або μ рівні три, а інший параметр більший за три спостерігаються екс-

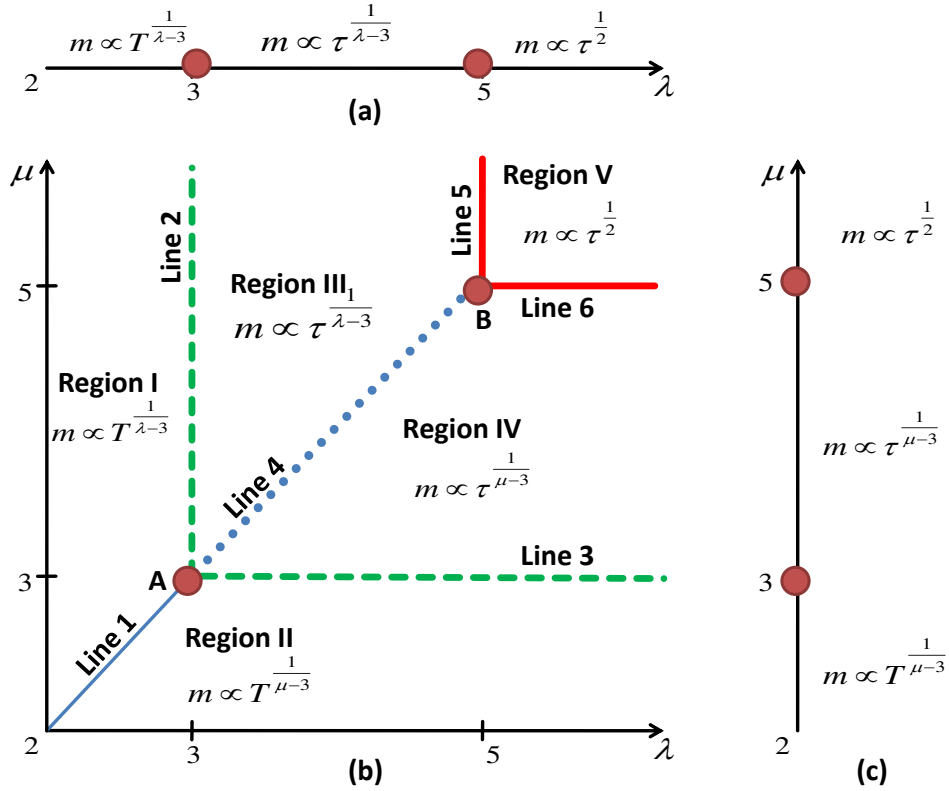


Рис. 3.3. Фазова діаграма узагальненої моделі Ізінга зі степеневим законом розподілу довжини спіна на безмасштабній мережі (рис. b) порівнюється моделлю Ізінга на безмасштабній мережі (рис. a) і узагальненою моделлю Ізінга зі степеневим законом розподілу довжини спіна на повному графі (малюнок c). Асимптотика параметра порядку в різних діапазонах μ , λ показано явно. Відповідна асимптотика при граничних значеннях μ , λ (лінії та точки на графіку) наведені в Табл. 3.1.

пониційні асимптотики для t . Фазовий перехід другого роду відбувається, коли обидва $\lambda, \mu > 3$. Залежно від значення λ, μ параметр порядку характеризується різними асимптотиками. В області $3 < \mu < 5$ ($\mu < \lambda$) критичні показники є μ -залежні, а в області $3 < \lambda < 5$ ($\mu > \lambda$) вони λ -залежні. Логарифмічні поправки з'являються при $\lambda = \mu$:

$$t \simeq \begin{cases} 3 < (\mu, \lambda) < 5; \mu > \lambda : & \tau^{\frac{1}{\lambda-3}}, \\ 3 < (\mu, \lambda) < 5; \mu = \lambda : & (\tau |\ln \tau|^{-1})^{\frac{1}{\lambda-3}}, \\ 3 < (\mu, \lambda) < 5; \mu < \lambda : & \tau^{\frac{1}{\mu-3}}. \end{cases} \quad (3.70)$$

Логарифмічні поправки до скейлінгу, також з'являються, коли $\lambda = 5$ або $\mu = 5$. Ми обговоримо ці поправки більш детально нижче.

	$2 < \lambda < 3$	$\lambda = 3$	$3 < \lambda < 5$	$\lambda = 5$	$\lambda > 5$
$2 < \mu < 3$	Eq. (3.69)	$T^{\frac{1}{\mu-3}}$	$T^{\frac{1}{\mu-3}}$	$T^{\frac{1}{\mu-3}}$	$T^{\frac{1}{\mu-3}}$
$\mu = 3$	$T^{\frac{1}{\lambda-3}}$	e^{-bT}	e^{-bT}	e^{-bT}	e^{-bT}
$3 < \mu < 5$	$T^{\frac{1}{\lambda-3}}$	e^{-bT}	Eq. (3.70)	$\tau^{\frac{1}{\mu-3}}$	$\tau^{\frac{1}{\mu-3}}$
$\mu = 5$	$T^{\frac{1}{\lambda-3}}$	e^{-bT}	$\tau^{\frac{1}{\lambda-3}}$	$\tau^{\frac{1}{2}} \ln \tau ^{-1}$	$\tau^{\frac{1}{2}} \ln \tau ^{-\frac{1}{2}}$
$\mu > 5$	$T^{\frac{1}{\lambda-3}}$	e^{-bT}	$\tau^{\frac{1}{\lambda-3}}$	$\tau^{\frac{1}{2}} \ln \tau ^{-\frac{1}{2}}$	$\tau^{\frac{1}{2}}$

Табл. 3.1. Температурна поведінка параметра порядку m при різних значеннях μ і λ . Асимптотика визначається меншим параметром з пари (μ, λ) .

Фазова діаграма на рис. 3.3b візуалізує розглянуту вище поведінку. Там ми показуємо різні області в площині $\lambda - \mu$, які характеризуються різною критичною поведінкою. Остання регулюється розподілом із “жирнішим” хвостом (менше значення з пари λ, μ). Можна порівнювати цю діаграму з діаграмами на рис. 3.3 a, c. Дійсно, коли один із показників на рис. 3.3b більше ніж п’ять (дуже швидко спадання одного з розподілів (3.1) або (3.2)), отримана діаграма більше не залежить від цього показника. Таким чином можна говорити про виродженість критичної поведінки 3.3b до одного з відповідних аналогів, рис. 3.3a або c. На лініях діаграми Рис. 3.3b виникають нові цікаві явища, які розділяють області з різними асимптотиками для параметра порядку. Зазвичай, зміни в степеневих асимптотиках для термодинамічних спостережуваних супроводжуються показниками логарифмічних поправок до скейлінгу (див. [187] і посилання там). Для d -вимірних ґраток такі поправки з’являються при верхній критичній вимірності, а для безмасштабних мереж вони, як відомо, супроводжують провідну асимптотику при $\lambda = 5$. У нашому аналізі ми завершуємо картину, спостерігаючи за *лініями* в площині $\lambda - \mu$, де виникають такі поправки. Крім того, спостерігаються нові закони скейлінгу на перетині цих ліній.

Щоб продовжити аналіз критичної поведінки, отримано вирази для інших термодинамічних функцій в околі фазового переходу другого роду, що відбувається для $\mu, \lambda > 3$ при $T = T_0$, $H = 0$. Зокрема, крім параметра порядку, ми оцінюємо провідні критичні асимптотики для ізотермічної сприйнятливості

χ_T , питомої теплоємності c_H і магнетокалоричного коефіцієнту m_T , що визначається як змішана похідна від вільної енергії за магнітним полем і температурою, ($m_T = -T(\partial m/\partial T)_H$):

$$m \sim \tau^\beta, \quad \chi_T \sim \tau^{-\gamma}, \quad c_H \sim \tau^{-\alpha}, \quad m_T \sim \tau^{-\omega}, \quad \text{at} \quad H = 0. \quad (3.71)$$

$$m \sim H^{1/\delta}, \quad \chi_T \sim H^{-\gamma_c}, \quad c_H \sim H^{-\alpha_c}, \quad m_T \sim H^{-\omega_c}, \quad \text{at} \quad \tau = 0. \quad (3.72)$$

Ми також знаходимо логарифмічні члени, які з'являються при граничних значеннях λ , μ і визначаємо показники логарифмічних поправок для кожної з наведених вище величин:

$$A \sim \tau^\Theta |\ln \tau|^{\hat{\Theta}}, \quad H = 0. \quad A \sim H^{\Theta_c} |\ln H|^{\hat{\Theta}_c}, \quad \tau = 0, \quad (3.73)$$

де A — одна з термодинамічних функцій (3.72), Θ — критичний показник, а $\hat{\Theta}$ — відповідний показник логарифмічної поправки. Значення провідних критичних показників для термодинамічних функцій (3.71) - (3.72) наведено в таблиці 3.2. Відповідні логарифмічні поправки до скейлінгу підсумовано в таблиці 3.3.

	α	α_c	γ	γ_c	β	δ	ω	ω_c
Line 4 ($\mu = \lambda$)	$\frac{\lambda-5}{\lambda-3}$	$\frac{\lambda-5}{\lambda-2}$	1	$\frac{\lambda-3}{\lambda-2}$	$\frac{1}{\lambda-3}$	$\lambda - 2$	$\frac{\lambda-4}{\lambda-3}$	$\frac{\lambda-4}{\lambda-2}$
Region III	$\frac{\lambda-5}{\lambda-3}$	$\frac{\lambda-5}{\lambda-2}$	1	$\frac{\lambda-3}{\lambda-2}$	$\frac{1}{\lambda-3}$	$\lambda - 2$	$\frac{\lambda-4}{\lambda-3}$	$\frac{\lambda-4}{\lambda-2}$
Region IV	$\frac{\mu-5}{\mu-3}$	$\frac{\mu-5}{\mu-2}$	1	$\frac{\mu-3}{\mu-2}$	$\frac{1}{\mu-3}$	$\mu - 2$	$\frac{\mu-4}{\mu-3}$	$\frac{\mu-4}{\mu-2}$
Region V, Lines 5-6, B	0	0	1	2/3	1/2	3	1/2	1/3

Табл. 3.2. Критичні показники узагальненої моделі зі степеневим розподілом довжин спінів на відпаленій безмасштабній мережі в різних діапазонах параметрів (див. також фазову діаграму на Рис. 3.3b). Лінія 4: $3 < (\lambda, \mu) < 5$, $\lambda = \mu$; Область III: $3 < \mu < 5$, $\mu < \lambda$; Область IV: $3 < \lambda < 5$, $\lambda < \mu$; Регіон V: $\lambda, \mu \geq 5$.

Подібно до випадку безмасштабних мереж, логарифмічні поправки для скейлінгу появляються при $\lambda = 5$, $\mu > 5$ і $\mu = 5$, $\lambda > 5$, а також уздовж ліній 5 і 6 на рис. 3.3b. Значення показників логарифмічних поправок збігаються зі значеннями для звичайної моделі Ізінга на безмасштабній мережі [66, 68, 174].

Щоправда, у моделі, що розглядається, виникають два нові класи логарифмічних поправок: в області $3 < (\lambda = \mu) < 5$ (рядок 4 на рис. 3.3b), а також при $\lambda = \mu = 5$ (точка В). Для $\lambda = \mu = 5$ усі показники логарифмічних поправок вдвічі більші порівняно з аналогічними для моделі Ізінга на безмасштабній мережі при $\lambda = 5$. В області $3 < (\lambda = \mu) < 5$ усі показники поправок залежать від λ . Усі показники логарифмічних поправок задовільняють скейлінгові співвідношення для логарифмічних поправок [188–190].

	$\hat{\alpha}$	$\hat{\alpha}_c$	$\hat{\gamma}$	$\hat{\gamma}_c$	$\hat{\beta}$	$\hat{\delta}$	$\hat{\omega}$	$\hat{\omega}_c$
Line 4 ($\mu = \lambda$)	$-\frac{3}{\lambda-2}$	$-\frac{3}{\lambda-2}$	0	$-\frac{\lambda-3}{2(\lambda-2)}$	$-\frac{1}{\lambda-3}$	$-\frac{1}{\lambda-2}$	$-\frac{\lambda-4}{\lambda-3}$	$-2\frac{\lambda-4}{\lambda-2}$
Point B	-2	-2	0	-2/3	-1	-2/3	-1	-4/3
Lines 5-6	-1	-1	0	-1/3	-1/2	-1/3	-1/2	-2/3

Табл. 3.3. Показники логарифмічних поправок для узагальненої моделі Ізінга зі степеневим законом розподілу за довжинами спінів на відпаленій безмасштабній мережі в різних діапазонах параметрів. Показники степеня для рядків 5-6 збігаються зі знайденими раніше [66, 68, 174]. Однак є два набори нових показників, які керують логарифмічними поправками – Лінія 4 і в точка В.

3.5. Висновки

Узагальнена модель Ізінга, яку ми розглядаємо тут, послаблює звичайну умову фіксованої довжини спіна (сили спіна) і розглядає його як заморожену випадкову змінну із заданим розподілом ймовірностей. У конкретному випадку, коли ця випадкова змінна дорівнює 1 з ймовірністю p і 0 з ймовірністю $1-p$, ми приходимо до знайомої моделі Ізінга з замороженим розведенням. Однак ми розглядаємо інший, багатший випадок, коли сила випадкового спіна підпорядковується степеневому закону розподілу (3.1), який регулюється показником загасання μ , що робить модель особливо цікавою для опису явищ колективної поведінки у соціальних системах зокрема. Модель імітує полідисперсність у магнітних моментах елементарних взаємодіючих спінів. Зацікавившись можливим застосуванням такої моделі в широкій області науки про складні системи, ми проаналізували її пове-

дінку на відпаленій безмасштабній мережі. Таким чином, ми використовуємо дві переваги: наближення відпаленої мережі призводить до самоусереднення властивостей термодинамічних функцій, а безмасштабна поведінка розподілу ступенів вузлів (3.2) дозволяє досліджувати конкуренцію степеневих законів (3.1), (3.2) у визначенні критичної поведінки.

Як виявилось в ході нашого дослідження, модель, що розглядається, має ряд цікавих несподіваних особливостей. Деякі з них узагальнено на рис. 3.3b і в таблицях 3.1–3.3. Фазова діаграма на рис. 3.3b супроводжується двома відмінностями від рис. 3.3a та c, які відповідають звичайній моделі Ізінга на безмасштабній мережі (a) і узагальненій моделі Ізінга зі степеневий законом розподіду сили спіна на повному графі (c). Як видно з цього ескізу, діаграма симетрична при перестановці $\mu \leftrightarrow \lambda$. Це означає, що обидва фактори (тобто зв'язок вузла та сила окремого спіна) впливають на критичність подібним чином. Крім того, відповідна асимптотика регулюється меншим із пари параметрів (μ, λ) : “товстіший” хвіст функції розподілу виграє змагання у визначенні класу універсальності! Для дуже низьких значень $2 < (\mu, \lambda) \leq 3$ система залишається впорядкованою при будь-якій скінченній температурі. У свою чергу, режим фазового переходу другого роду $(\mu, \lambda > 3)$ характеризується трьома різними наборами критичних показників, див. таблицю 3.2.

Своєрідні явища виникають в областях з $\mu = \lambda$, де відбуваються зміни критичних показників μ - або λ - залежностей. Як видно з таблиці 3.1, такі зміни супроводжуються появою логарифмічних поправок (3.73). Значення показників логарифмічних поправок підсумовані в таблиці 3.3. Має сенс порівняти це явище з тим, що відбувається з критичною поведінкою в d -вимірному Евклідовому просторі. Тут особливу роль відіграє поняття верхньої критичної вимірності d_u . За визначенням, це вимірність простору, вище якої спостерігається поведінка середнього поля [191]. Особливий тип логарифмічних поправок до скейлінгу з'являється при верхній критичній вимірності [187]. Відомо, що для безмасштабних мереж логарифмічні поправки з'являються при $\lambda = 5$, де провідні критичні показники досягають своїх середньопольових значень [66, 68, 174]. Подібні поправ-

ки виникають також для узагальненої моделі Ізінга зі степеневим-спадним законом розподілу для довжини спіну на повному графі при $\mu = 5$ [8]. Для моделі, що розглядається, ці поправки (що раніше спостерігалися як точки на Рис. 3.3а,с) тепер спостерігаються вздовж ліній 5,6 на Рис. 3.3b. Точка перетину цих ліній, точка В на рис. 3.3, характеризується новими значеннями логарифмічних поправок. Крім того, з'являється ще один новий набір логарифмічних поправок при $3 < \mu = \lambda < 5$.

Розділ 4

СКЕЙЛІНГОВІ ФУНКЦІЇ КЛАСИЧНИХ МОДЕЛЕЙ СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ НА СКЛАДНИХ МЕРЕЖАХ

Структура розділу організована наступним чином. У **підрозділі 4.1** описано мотивацію та короткий опис моделі, що розглядається та універсальні характеристики критичної поведінки, що будуть порашовані у розділі. У наступному **підрозділі 4.2** подано визначення відношень критичних амплітуд і скейлінгових функцій. Після цього у **підрозділі 4.3** представлено детальну критичну поведінку та фазову діаграму моделі на трьох типах графів в режимі фазового переходу другого роду, а також представлено основні рівняння для вільної енергії, що підлягають аналізу. У **підрозділі 4.4** наведено результати застосування теорії скейлінгу до моделі в трьох різних областях фазового переходу другого роду з різними класами універсальності. У **заключному підрозділі 4.5** наведено ключові висновки, встановлено зв'язки з цілями дослідження та обговорено можливі застосування результатів.

За результатами досліджень опубліковано 1 статтю [26] та тези конференцій [29–32, 34, 39, 41, 42, 45].

4.1. Вступ, мотивація

У викладених у попередніх розділах дисертації дослідженнях було розглянуто вільну енергію та фазову діаграму в різних областях глобальних параметрів. Було отримано асимптотику термодинамічних характеристик системи, що виникають поблизу критичної точки. Зокрема критичні показники та показники

логарифмічних поправок, які контролюють степеневу поведінку різних спостережуваних поблизу критичної точки, були серед цих характеристик. Однак існують інші універсальні характеристики, які пояснюють критичну поведінку: якщо системи належать до одного класу універсальності, вони не тільки мають однакові значення для критичних показників, але й мають ідентичні співвідношення критичних амплітуд і скейлінгові функції [192]. Мотивація для вивчення скейлінгових функцій має теоретичне [193–195] і практичне застосування – критичні амплітуди та скейлінгові функції можна виміряти як з моделювання Монте-Карло [196–198], так і експериментальними вимірюваннями [199–201]. Велике значення має аналіз скейлінгових функцій та амплітуд для систем з великою кількістю взаємодіючих агентів для прогнозування їх поведінки та критичних властивостей, полегшення розробки та оптимізації магнітних і макромолекулярних матеріалів для різних застосувань [202, 203]. Крім того, мотивація вивчати ці характеристики на різних типах графів для кращого розуміння процесів у соціальних системах і магнітних матеріалах (згаданих вище) справедлива для макромолекулярних систем, які за своєю суттю є складними, з численними взаємодіючими компонентами. Скейлінгові функції пропонують потужний інструмент для опису колективної поведінки цих компонентів під час фазових переходів. Аналіз скейлінгових функцій дозволяє описати динаміку макромолекулярних перетворень.

4.2. Визначення: відношення критичних амплітуд та скейлінгові функції

Ми спостерігаємо степеневу асимптотику термодинамічних характеристик в області фазового переходу другого роду поблизу критичної точки $T = T_c$, $h = 0$ [192, 194]. Для параметра порядку m , ізотермічної сприйнятливості χ_T , питомої теплоємності c_h і магнетокалоричного коефіцієнта m_T наступні функції від $\tau = |T - T_c|/T_c$ ($h = 0$) можна записати через критичні амплітуди та критичні показники:

$$m = B_- \tau^\beta, \quad \chi_T = \Gamma_\pm \tau^{-\gamma}, \quad c_h = \frac{A_\pm}{\alpha} \tau^{-\alpha}, \quad m_T = B_T^\pm \tau^{-\omega}. \quad (4.1)$$

В критичній точці $T = T_c$ (тобто при $\tau = 0$) справедливі наступні асимптотики:

$$m = D_c^{-1/\delta} h^{1/\delta}, \quad \chi = \Gamma_c h^{-\gamma_c}, \quad c_h = \frac{A_c}{\alpha_c} h^{-\alpha_c}, \quad m_T = B_T^c h^{-\omega_c}. \quad (4.2)$$

На відміну від критичних показників, критичні амплітуди є неуніверсальними, але їхні співвідношення (комбінації) є універсальними [192] і використовуються для аналізу нижче:

$$R_\chi^\pm = \Gamma_\pm D_c B_-^{\delta-1}, \quad R_c^\pm = \frac{A_\pm \Gamma_\pm}{\alpha B_-^2}, \quad R_A = \frac{A_c}{\alpha_c} D_c^{-(1+\alpha_c)} B_-^{-2/\beta}, \quad A_+/A_-, \quad \Gamma_+/\Gamma_-. \quad (4.3)$$

Щоб розпочати аналіз скейлінгових функцій, ми повинні звернутися до гіпотези скейлінгу для вільної енергії Гельмгольца $F(\tau, m)$, яка стверджує, що цей термодинамічний потенціал є узагальненою однорідною функцією [193]. Отже, використовуючи змінну масштабування x , функцію двох змінних $F(\tau, m)$ можна записати як деяку функцію від $f(x)$:

$$F(\tau, m) \approx \tau^{2-\alpha} f_\pm(x), \quad (4.4)$$

де

$$x = m/\tau^\beta \quad (4.5)$$

є скейлінгова змінна, $f_\pm(x)$ – скейлінгова функція, знаки $+$ та $-$ відповідають $T > T_c$ та $T < T_c$, відповідно. Усі інші термодинамічні потенціали також є узагальненими однорідними функціями. На основі виразу для вільної енергії можна також представити термодинамічні функції в термінах відповідних скейлінгових функцій. Скейлінгові функції для магнітного поля, ентропії, теплоємності, ізотермічної сприйнятливості та магнетокалоричного коефіцієнта визначаються таким чином (див., наприклад, [69, 193]):

$$h(m, \tau) = \tau^{\beta\delta} H_\pm(x), \quad (4.6)$$

$$S(m, \tau) = \tau^{1-\alpha} \mathcal{S}(x), \quad (4.7)$$

$$c_h(m, \tau) = (1 \pm \tau) \tau^{-\alpha} \mathcal{C}_\pm(x), \quad (4.8)$$

$$\chi_T(m, \tau) = \tau^{-\gamma} \chi_\pm(x), \quad (4.9)$$

$$m_T(m, \tau) = (1 \pm \tau) \tau^{\beta-\gamma} \mathcal{M}_\pm(x). \quad (4.10)$$

4.3. Вільна енергія та фазова діаграма

Надалі в розділі здійснено аналіз для запропонованої в [8, 9] моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна на мережі. Гамільтоніан моделі:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad S_i = \pm 1. \quad (4.11)$$

Тут h – зовнішнє магнітне поле, а J_{ij} – матриця суміжності з елементами 0 (якщо немає зв'язків між вузлами i і j) і 1 (вузли зв'язані). Імовірність p_{ij} з'єднання двох вузлів визначається властивостями графа. Наприклад, для повного графа всі вузли з'єднані один з одним, тому $p_{ij} = 1$, для графа Ердоша-Рені ймовірність зв'язків фіксується з значенням $p_{ij} = c$ ($0 < c < 1$). І останній, але не менш важливий випадок, який слід згадати, – безмасштабна відпалена мережа, де $p_{ij} = k_i k_j / (N < k >)$. Кожен індивід представляється як складний вузол мережі заданого ступеня k_i із силою спіна S_i . Функція розподілу ступеня вузла для безмасштабної мережі визначається степенєво-спадним законом:

$$p(k) = c_\lambda k^{-\lambda}. \quad (4.12)$$

Для моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна на **повному графі** вирази для вільної енергії були отримані в попередньому розділі (3.12) [8, 9]. Ми зосередимося на виразах вільної енергії в двох основних областях для фазового переходу другого роду, а саме: області I (MFA), області II (μ -залежна критична поведінка):

$$\Phi(m, \tau, h) = \frac{a}{2} \tau m^2 + \frac{b}{4} m^4 - dmh, \quad (\text{Region I}), \quad (4.13)$$

$$\Phi(m, \tau, h) = \frac{a}{2} \tau m^2 + \frac{b'}{4} m^{\mu-1} - dmh, \quad (\text{Region II}) \quad (4.14)$$

тут $\tau = |T - T_c|/T_c$ і всі коефіцієнти додатні (їх точні вирази можна знайти в, наприклад, [70]).

Для моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна на **графі Ердоша-Рені** вирази для вільної енергії є аналогічними до результатів, отриманих для повного графа [8, 9] лише із врахованим перенормуванням константи взаємодії. Тому критичну поведінку у режимі фазового переходу другого роду також можна привести

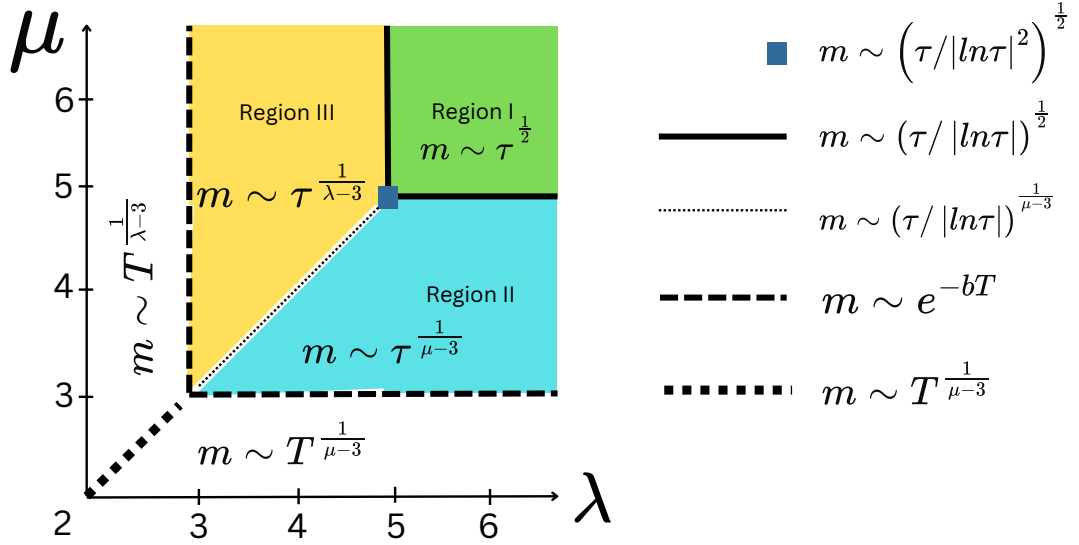


Рис. 4.1. Фазова діаграма моделі Ізінга зі степеневим розподілом сили спіну на безмасштабній мережі в площині μ - λ . Показано асимптотику намагніченості в різних областях μ і λ . Логарифмічні поправки та асимптотика в упорядкованих станах показані різними типами ліній. Для моделі з'являються три різні набори логарифмічних поправок для скейлінгу. Крім того, три кольорові області на фазовій діаграмі відповідають трьом різним класам універсальності критичних показників (див. [8, 9] для більш детальної інформації).

до представлення характерних для ділянок позначених Region I (4.17) та Region II (4.18).

Для моделі на безмасштабній мережі вільну енергію було отримано у попередньому розділі і для гамільтоніана (4.11) її можна записати як [26]:

$$\Phi_{\mu,\lambda}(m, T, h) = \frac{\langle k \rangle m^2 T}{2} - c_\mu c_\lambda m^{\frac{\lambda+\mu-2}{2}} I_{\lambda,\mu}(\sqrt{m}) - \frac{\langle \mathcal{S}^2 \rangle \langle k \rangle}{T} m h, \quad (4.15)$$

де

$$I_{\lambda,\mu}(m) = \int_{\sqrt{m}}^{\infty} \int_{\sqrt{m}}^{\infty} \frac{\ln \cosh(k\mathcal{S})}{k^\lambda \mathcal{S}^\mu} d\mathcal{S} dk, \quad (4.16)$$

а m — параметр порядку, $\langle k \rangle$ — середній ступінь вузла, $\langle \mathcal{S}^2 \rangle$ — середнє значення квадрата довжини спіна.

Отримана вільна енергія є симетричною при перестановці індексів $\mu \leftrightarrow \lambda$. Провідна асимптотика для вільної енергії визначається меншим параметром між

μ, λ (“товстіший” хвіст функції розподілу виграє конкуренцію у визначенні класу універсальності). Отже, ми можемо розглянути 3 основні випадки: $\mu > \lambda$, $\mu = \lambda$, $\mu < \lambda$. Своєрідні явища виникають в областях з $\mu = \lambda$, де відбуваються зміни критичних показників μ - або λ - залежностей. Тут спостерігаються два нові класи універсальності для показників логарифмічних поправок. Критичну поведінку моделі узагальнено на Рис. 4.1. Є два глобальні параметри – μ і λ , які впливають на критичну поведінку. Але для подальшого аналізу, а саме скейлінгових функцій і відношень критичних амплітуд, ми пропускаємо області з упорядкованою фазою та лініями фазового переходу другого роду з логарифмічними поправками. Ми зосередимося на виразах вільної енергії в трьох основних областях: області I (MFA), області II (μ -залежна критична поведінка) та області III (λ -залежна критична поведінка):

$$\Phi(m, \tau, h) = \frac{A}{2}\tau m^2 + \frac{B}{4}m^4 - Dmh, \quad (\text{Region I}), \quad (4.17)$$

$$\Phi(m, \tau, h) = \frac{A}{2}\tau m^2 + \frac{B'}{4}m^{\mu-1} - Dmh, \quad (\text{Region II}), \quad (4.18)$$

$$\Phi(m, \tau, h) = \frac{A}{2}\tau m^2 + \frac{B''}{4}m^{\lambda-1} - Dmh, \quad (\text{Region III}), \quad (4.19)$$

тут $\tau = |T - T_c|/T_c$ і всі коефіцієнти додатні.

4.4. Результати

У цьому підрозділі ми завершуємо попередній опис критичної поведінки моделі, аналізуючи відношення амплітуд та скейлінгових функцій в околі критичної точки при різних режимах фазового переходу другого роду.

4.4.1. Відношення критичних амплітуд

Для аналізу ми розпочали з виразів вільної енергії (4.17)-(4.19) у трьох областях фазового переходу другого роду. Ми взяли відповідні похідні за температурою та магнітним полем, щоб термодинамічні характеристики можна було отримати та представити у формі низки степеневих функцій τ і h і критичних

	Модель 1 [204]	Модель 2 [66, 67, 69]
Довжина спіна	$S_i = \pm 1$	$S_i = \pm 1$
Топологія графа	Повний граф	SF мережа: $p(k) \sim k^{-\lambda}$
Глобальні параметри	-	λ
Області ФП 2 роду	Region I (MFA)	Region I and III
	Модель 3 [8, 9]	Модель 4 [8, 9]
Довжина спіна	$S_i = \pm \mathcal{S},$ $q(\mathcal{S}) \sim \mathcal{S}^{-\mu}$	$S_i = \pm \mathcal{S},$ $q(\mathcal{S}) \sim \mathcal{S}^{-\mu}$
Топологія графа	Повний граф чи Ердоша-Рені	SF мережа: $p(k) \sim k^{-\lambda}$
Глобальні параметри	μ	λ і μ
Області ФП 2 роду	Region I and II	Region I, II and III

Табл. 4.1. Порівняльний аналіз критичної поведінки в різних областях режиму фазового переходу 2-го роду для різних моделей Ізінга (див. фазову діаграму на рис.4.1. Модель 1. Стандартна модель Ізінга на повному графі. Модель 2: Стандартна модель Ізінга на безмасштабній мережі. Модель 3: Модель Ізінга зі степеневим-спадним законом розподілу довжини спіна на повному графі (або графі Ердоша-Рені); Модель 4: Модель Ізінга зі степеневим-спадним законом розподілу довжини спіна на безмасштабній мережі.

амплітуд (див. (4.1)-(4.2)). Деякі відношення амплітуд залишаються незмінними в усіх критичних областях (див. перші 3 рядки для відношень амплітуд у таблиці 4.1), тоді як решта залежать від глобальних значень параметрів і відрізняються в трьох областях. Для області I вони приймають асимптотичні значення з теорії середнього поля; у Області II і III співвідношення стають залежними від μ і λ і в межі $\mu, \lambda \rightarrow 5$ наближаються до своїх середньпольових значень і залишаються незмінними для $\mu, \lambda \geq 5$. Слід зазначити цікавий факт: при $\mu = 4$ або $\lambda = 4$ три функції відношень амплітуд перетинаються в одній точці (див. рис.4.2).

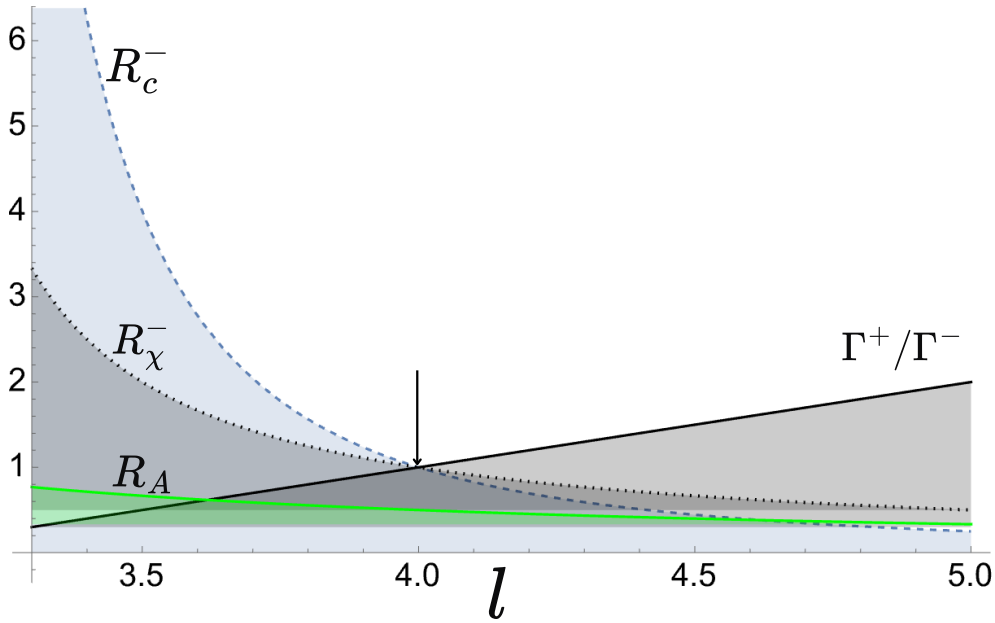


Рис. 4.2. Відношення критичних амплітуд для діапазону параметрів $3 < l < 5$ (тут l або μ (область II), або λ (область III)). Суцільна чорна лінія $\Gamma^+/\Gamma^- = l - 3$; зелена лінія $R_A = 1/(l - 2)$; точкова $R_\chi^- = 1/(l - 3)$, пунктирна $R_c^- = 1/(l - 3)^2$. Для $l \geq 5$ значення відношень амплітуд досягають значень MFA з області I і залишаються незмінними. При $l = 4$ три функції для відношень амплітуд перетинаються в одній точці.

4.4.2. Скейлінгові функції

Перехід до безрозмірної енергії $F(m, \tau)$ і безрозмірної намагніченості m ми можемо представити (4.17)-(4.19) у трьох різних областях фазової діаграми (рис. 4.1) у такому вигляді:

$$F(m, \tau) = \pm \frac{\tau}{2} m^2 + \frac{1}{4} m^4, \quad (\text{Область I}), \quad (4.20)$$

$$F(m, \tau) = \pm \frac{\tau}{2} m^2 + \frac{1}{4} m^{\mu-1}, \quad (\text{Область II}), \quad (4.21)$$

$$F(m, \tau) = \pm \frac{\tau}{2} m^2 + \frac{1}{4} m^{\lambda-1}, \quad (\text{Область III}), \quad (4.22)$$

знаки $\pm$ тут і далі відповідають температурам вище та нижче критичної точки T_c .

Маючи вирази для вільної енергії, легко записати рівняння стану та вивести термодинамічні функції. Магнітне та ентропійне рівняння стану у безрозмірних

Табл. 4.2. Скейлінгові функції та відношення критичних амплітуд для моделі Ізінга зі степеневим згасним розподілом довжини спіна на нескорельованій безмасштабній мережі, отримані з виразів вільної енергії (4.17)-(4.19) у трьох областях. Область I: $\lambda, \mu > 5$; Область II: $3 < \mu < 5, \mu < \lambda$; Область III: $3 < \lambda < 5, \mu > \lambda$. Співвідношення амплітуд, скейлінгові функції та визначення параметрів скейлінгу задані (4.3), (4.6)-(4.10) та (4.5) відповідно.

	Область I	Область II	Область III
Співвідношення амплітуд			
A^+/A^-	0	0	0
R_χ^+	1	1	1
R_c^+	0	0	0
Γ^+/Γ^-	2	$\mu - 3$	$\lambda - 3$
R_χ^-	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\mu-3}$	$\frac{1}{\lambda-3}$
R_c^-	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{(\mu-3)^2}$	$\frac{1}{(\lambda-3)^2}$
R_A	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{\mu-2}$	$\frac{1}{\lambda-2}$
Скейлінгові функції			
$f_\pm(x)$	$\pm \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4}$	$\pm \frac{x^2}{2} + \frac{x^{\mu-1}}{4}$	$\pm \frac{x^2}{2} + \frac{x^{\lambda-1}}{4}$
$H_\pm(x)$	$x^3 \pm x$	$\frac{\mu-1}{4}x^{\mu-2} \pm x$	$\frac{\lambda-1}{4}x^{\lambda-2} \pm x$
$\mathcal{S}(x)$	$-x^2/2$	$-x^2/2$	$-x^2/2$
$\mathcal{C}_\pm(x)$	$\frac{x^2}{3x^2 \pm 1}$	$\frac{x^2}{x^{\mu-3}(\mu-1)(\mu-2)/4 \pm 1}$	$\frac{x^2}{x^{\lambda-3}(\lambda-1)(\lambda-2)/4 \pm 1}$
$\chi_\pm(x)$	$\frac{1}{3x^2 \pm 1}$	$\frac{1}{x^{\mu-3}(\mu-1)(\mu-2)/4 \pm 1}$	$\frac{1}{x^{\lambda-3}(\lambda-1)(\lambda-2)/4 \pm 1}$
$\mathcal{M}_\pm(x)$	$\frac{x}{3x^2 \pm 1}$	$\frac{x}{x^{\mu-3}(\mu-1)(\mu-2)/4 \pm 1}$	$\frac{x}{x^{\lambda-3}(\lambda-1)(\lambda-2)/4 \pm 1}$

змінних m і τ запишеться:

$$h(m, \tau) = \left. \frac{\partial F(m, \tau)}{\partial m} \right|_\tau, \quad s(m, \tau) = \mp \left. \frac{\partial F(m, \tau)}{\partial \tau} \right|_m. \quad (4.23)$$

Ентропійне рівняння стану отримується як похідна по температурі при постійній намагніченості m , а явна τ -залежність однакова в усіх областях. Тому рівняння зберігає той самий вигляд у всіх областях на площині μ - λ :

$$s = -m^2/2, \quad (\text{Область I-III}). \quad (4.24)$$

Перепишучи вільні енергії (4.20)-(4.21) у термінах скейлінгової змінної x (4.5), енергії можна записати у скейлінговій формі як (4.4). Усі інші термодинамічні

характеристики можна легко отримати як відповідні похідні від енергії. Вирази для скейлінгових функцій в областях I, II та III наведені в таблиці 4.2. Записане явно в різних областях μ і λ магнітне рівняння стану і термодинамічні функції χ_T , c_h і m_T відрізняються в областях I–III. В області I - ми отримуємо MFA-подібну поведінку, в області II та III вирази залежать від μ та λ відповідно. Легко помітити, що в межі $\mu \rightarrow \infty$ ($\lambda \rightarrow \infty$) скейлінгові функції наближаються до теоретичних виразів середнього поля з області I.

4.5. Висновки

Мотивація для вивчення нових спінових моделей зумовлена еволюцією наукового дослідження, що вимагає адаптованих структур для розуміння складності різноманітних систем. Ці моделі не тільки поглиблюють наше теоретичне розуміння, але й обіцяють пролити світло на явища реального світу (соціальні системи та колективну поведінку, магнітні матеріали тощо) у більш детальний та реалістичний спосіб. Використання критичних показників і скейлінгових функцій допомагає розробляти матеріали з певними властивостями. Ці знання дозволяють дослідникам створювати матеріали з бажаними структурними характеристиками, забезпечуючи застосування в таких сферах, як доставка ліків, біоматеріали та нанотехнології. Чим більше ми знаємо про критичну поведінку системи, тим ефективніша оптимізація експериментальних умов. Застосування законів скейлінгу до соціальних, магнітних або макромолекулярних систем допомагає оптимізувати експериментальні умови досліджень, зокрема і фазових переходів.

Критична поведінка розглянутої моделі Ізінга зі змінною довжиною становить особливий інтерес через широкий діапазон можливих застосувань, а також універсальність. Модель є узагальненням моделі бінарного спіну (моделі Ізінга) і в різних областях параметрів відтворює добре відомі випадки. Були отримані аналітичні вирази для скейлінгових функцій і відношень критичних амплітудних для моделі на різних типах графів. Разом критичні індекси та критичні співвідношення амплітуд становлять кількісні характеристики класу універсальності та

можуть бути досягнуті в експериментах та моделюванні МС. Результати роботи підтверджують і доповнюють попередні дослідження [8, 9]. Обидва глобальні параметри (параметр топології глобальної мережі для безмасштабної мережі λ і параметр, що визначає індивідуальні властивості спінової сили μ) запропонованої моделі визначають класи універсальності. Критична поведінка визначається меншим із двох параметрів. Однак симетрія залежності параметра зміниться, якщо замість степеневих законів (3.1) і (4.12) вибрати різні функції ймовірності (наприклад, гауссову).

І останнє, але не менш важливе, щоб продемонструвати універсальність, охоплення проблем моделі та її універсальність, представлено порівняльний аналіз стандартної моделі Ізінга та моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна [8, 9] на графах різної топології, перелічених у таблиці 4.1: Модель 1. Стандартна модель Ізінга на повному графі (модель Каца або Кюрі-Вейса). Модель 2: Стандартна модель Ішінга на безмасштабній мережі. Модель 3: Модель Ізінга зі степеневоспадною довжиною спіна на повному графі (або графі Ердоша-Рені); Модель 4: Модель Ізінга зі степеневоспадною довжиною спіна на безмасштабній мережі. Значення спіну, топологія графа, глобальні параметри визначені в таблиці для кожного випадку. Також на основі фазової діаграми/аналізу вільної енергії ми визначили типову критичну поведінку (подібно до областей фазової діаграми на рис. 4.1). Для моделі 1 існує лише один режим фазового переходу 2-го роду – поведінка МФА, тоді як для моделі 2 і моделі 3 є дві критичні області з різною критичною поведінкою, а для моделі 4 ми отримуємо три області. Для моделі 3 вільна енергія еквівалентна стандартній моделі Ізінга ($\sigma_i = \pm 1$) на відпаленій безмасштабній мережі (Модель 2), а показник загасання λ відіграє роль μ у поточній. Таким чином, ми можемо розширити критичну поведінку для моделі Ізінга, ввівши різну довжину спіна, що було підтверджено аналізом критичних показників раніше і тут шляхом дослідження скейлінгових функцій і відношень амплітуд.

Розділ 5

СТРУКТУРНИЙ БЕЗЛАД І МАГНІТНЕ ВПОРЯДКУВАННЯ: АНАЛІТИЧНИЙ ПІДХІД І ЧИСЕЛЬНІ СИМУЛЯЦІЇ

Розділ присвячений дослідженню впливу структурного безладу на магнітне впорядкування. Розглядаються аналітичні методи і чисельні симуляції для моделей, що враховують випадкові домішки й неоднорідності. У вступі [5.1](#) наведено мотивацію та відомі результати для моделей із безладом. У підрозділі [5.2](#) отримано функціональне представлення вільної енергії моделі Ізінга з випадковою довжиною спіна. У наступному підрозділі [5.3](#) розглянуто моделі з немагнітними домішками та зі спінами різних довжин, порівняно їх критичні показники. Також проведено аналіз потоку ренормгрупи та отримано ефективні критичні показники для моделі зі спінами двох довжин. Завершується розділ аналізом симуляцій тривимірної моделі Ізінга для різних початкових умов та порівнянням результатів із аналітичними розрахунками (див. підрозділ [5.4](#)). У висновках [5.5](#) підсумовано усі одержані результати та обговорюються їхні наслідки.

За результатами досліджень опублікована одна стаття [[19](#)], одна стаття подана до друку та опублікована як препринт [[20](#)] та тези конференцій [[43](#)].

5.1. Вступ та мотивація

Серед найбільш інтригуючих питань сучасної фізики конденсованих систем слід виокремити проблему впливу структурного безладу на критичність [[78](#), [86](#), [87](#), [205–207](#)]. Виникає питання: якщо узяти регулярний ґратковий (“ідеальний”) магнетик, у якому відбувається фазовий перехід другого роду в магнітно-

впорядкований стан і критична поведінка керується заданими законами скейлінгу, то чи будуть ці універсальні закони змінені через структурний безлад введений в систему? Хоча це питання стосується властивості речовини у вузькій області фазової діаграми, а саме поблизу точки фазового переходу, відповідь на це питання має вагоме значення як з фундаментальних причин (опис критичності, що виникає в різних системах від фізики високих енергій до космогонії) [86], але також і через застосування структурно-невпорядкованих матеріалів в сучасних технологіях [208].

У контексті дисертаційних досліджень увагу було зосереджено на випадку, коли безлад у структурі реалізується через заморожений безлад при температурі випадкового локального переходу [209]. Архетипним прикладом є розбавлені одно-вісні магнетики $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, отримані як кристалічна суміш двох сполук, коли відповідний розбавлений сплав готують шляхом заміщення немагнітним ізоморфом ZnF_2 його антиферомагнітного аналогу (FeF_2 або MnF_2) [89–91]. Часи релаксації таких систем набагато більші, ніж при типовому спостереженні, що дозволяє провести їх теоретичний та чисельний аналіз в термінах розведеної моделі Ізінга із замороженим безладом, див., наприклад, роботи [78] і [210] для більш свіжих посилань. Експериментальні дані про критичну поведінку заморожених розведених магнетиків Гейзенберга було розглянуто в роботах [211–213], а нещодавно в [214–217].

Для таких систем вже точно встановлено, що навіть слабкий структурний безлад може змінити критичну поведінку. Якісна відповідь про зміни в універсальності класу фазового переходу другого роду в магнітно-впорядкований стан описує евристичний критерій Гарріса [88]: якщо значення критичного показника теплоємності α_{pure} для чистої системи додатне, тобто, теплоємність розбігається в критичній точці, тоді заморожений безлад (наприклад, розведення) викликає зміни в класі універсальності. Зокрема, змінюються значення універсальних критичних показників. Відповідно, якщо $\alpha_{\text{pure}} < 0$, то клас універсальності розведеної системи буде такий самий, як і для однорідної системи. При вимірності простору $d = 3$ лише для ізінгівських магнетиків зі скалярним (тобто $m = 1$ -

Model	ν	α	γ
$m = 1$ [218]	0.6304(13)	0.109(4)	1.2396(13)
$m = 2$ [218]	0.6703(15)	-0.011(4)	1.3169(20)
$m = 3$ [218]	0.7073(35)	-0.122(10)	1.389(50)
$m = 1$, diluted [219]	0.678(10)	-0.034(30)	1.336(20)

Табл. 5.1. Асимптотичні критичні показники чистої та розведеної 3d моделі Ізінга із замороженим безладом ($m = 1$), а також XY моделі ($m = 2$) та моделі Гайзенберга ($m = 3$), отримані шляхом підсумовування теоретико-польових ренормгрупових розкладів.

компонента) параметром порядку теплоємність розбігається в критичній точці, $\alpha_{\text{pure}}(m = 1) > 0$, тоді як не розбігається для (XY) моделі і Гейзенбергівських магнетиків, $\alpha_{\text{pure}}(m = 2), \alpha_{\text{pure}}(m = 3) < 0$, відповідно, див. Таблицю 5.1.

З теоретичної точки зору підхід ренормалізаційної групи (РГ) пов'язує появу нового класу універсальності з наявністю нової випадкової фіксованої точки Ізінга для перетворення РГ [78, 207]. В даний час ряди розкладу РГ високого порядку були отримані та ретельно проаналізовані для кількісної оцінки критичної поведінки в новому класі універсальності. Оскільки дуже часто зміни критичних властивостей структурно-невпорядкованих магнетиків обговорюються в контексті присутності немагнітних домішок, новий клас універсальності часто називають класом універсальності 3D розведеної моделі Ізінга. Більше числових значень універсальних критичних показників і кумулянтів наведено в таблиці 5.2. Їх можна порівняти з відповідними значеннями звичайної тривимірної моделі Ізінга, наведеної в останньому рядку таблиці 5.2. Численні теоретичні, експериментальні та чисельні дослідження підтвердили це спостереження і, зокрема, призвели до визначення точних значень асимптотичних критичних показників тривимірних випадкових магнетиків Ізінга в новому класі універсальності [78, 210]. У таблиці 5.1 наведено значення критичних показників ν , α і γ для кореляційної довжини, магнітної сприйнятливості та теплоємності чистої та розведеної 3d-моделі Ізінга із замороженим безладом, отримані шляхом підсумовування теоретико-польових ренормгрупових розкладів. У таблиці також наведено значення показників для чистої 3d XY моделі і моделі Гайзенберга.

Табл. 5.2. Універсальні показники та кумулянти для тривимірних моделей Ізінга. Як зазвичай, ν – показник кореляційної довжини, η – показник парної кореляційної функції, ω – показник поправки до скейлінгу, $R_\xi = \xi/L$, U_4 – кумулянт Біндера, а g_2 – кумулянт, що вимірює відсутність самоусередненості систем (останні три кумулянти, обчислені в критичній точці). Перші два рядки: аналітичні оцінки для класу універсальності розведеної моделі Ізінга, що ґрунтується на відновлених шестипетлевих ренормгрупових функціях, отриманих у межах підходу РГ для 3D моделі [219] та схема мінімального віднімання (РГ, MS) [210]. Число в *italic* дає η , розраховане за співвідношенням скейлінгу $\eta = 2 - \gamma/\nu$. Третій і четвертий рядки: результати чисельного моделювання методом Монте-Карло (МС) для показників і кумулянт 3D-моделі Ізінга з розведенням вузлів. П'ятий рядок: наші результати для МС симуляцій суміші двох магнетиків Ізінга що відрізняються довжиною спіна, див. Таблицю 5.6 і підрозділ 5.4.4, щоб дізнатися більше. Для суміші двох магнетиків та в останньому рядках ми надаємо значення перших двох провідних показників поправок до скейлінгу (тут і далі позначені як ω_1 та ω_2). Останній рядок показує числові оцінки для звичайної моделі Ізінга.

Model	ν	η	ω
РГ, 3D [219]	0.675(19)	<i>0.024(79)</i>	0.15(10)
РГ, MS [210]	0.678(10)	0.030(3)	0.25(10)
МС, Ising (розведені вузли) [92]	0.6837(53)	0.037(4)	0.37(6)
МС, Ising (розведені вузли) [95]	0.683(2)	0.036(2)	0.33(3) and 0.82(8)
Суміш двох магнетиків	0.678(2)	0.033(7)	0.31(12) and 0.94(15)
МС, Ising [220, 221]	0.629912(86)	0.0362978(20)	0.8303(18)
Model	R_ξ	U_4	g_2
МС, Ising (розведені вузли) [92]	0.598(4)	0.449(6)	0.145(3)
Суміш двох магнетиків	0.5990(8)	0.453(3)	0.138(5)
МС, Ising [220, 221]	0.6431(1)	0.46548(5)	0

Наведені результати стосуються значень асимптотичних показників. За означенням, асимптотичний показник x керує сингулярною поведінкою спостережуваної $\mathcal{O}$ безпосередньо в критичній точці T_c :

$$x \equiv - \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\ln \mathcal{O}(\tau)}{\ln \tau}, \quad \tau = |T - T_c|/T_c. \quad (5.1)$$

Проте при наближенні до T_c поведінка характеризується неуніверсальними ефективними критичними показниками, які вводяться для опису поведінки величини

в певному температурному інтервалі [222, 223]. Вони визначаються як:

$$x_{\text{eff}}(\tau) \equiv -\frac{\ln \mathcal{O}(\tau)}{\ln \tau}. \quad (5.2)$$

Вони неуніверсальні, змінюють значення з відстанню до критичної точки і збігаються з асимптотичними критичними показниками лише в (або поблизу) критичної точки. Для структурно-невпорядкованих систем ефективна критична поведінка особливо багата і разом із температурою відстань до критичної точки може визначатися такими параметрами, як концентрація неоднорідностей, їх розподіл тощо. Зайве говорити, що ефективна неуніверсальна критична поведінка структурно невпорядкованих магнетиків не підкоряється критерію Гарріса в тому сенсі, що розведення змінює ефективні критичні показники незалежно від збіжності теплоємності чистої системи. Зокрема, численні варіації скейлінгу показників гайзенбергоподібних розведених магнетиків спостерігалися експериментально та інтерпретувалися як ефективні показники, але ще не в асимптотичному режимі. Це стосується скейлінгу ізотермічної сприйнятливості [224–227], спонтанної намагніченості [225–227], магнетокалоричного коефіцієнта [228], тощо. Те саме справедливо для розбавлених одновісних ізінгівських магнетиків: хоча теорія передбачає зміни в класі універсальності, а, отже, нові значення асимптотичних показників (див. табл. 5.1 та 5.2), ефективні показники, знайдені в експериментах можуть істотно відрізнитися [229].

З теоретичної точки зору, існують спроби якісного прогнозування та кількісного опису ефективної критичної поведінки для слабо розведених заморожених [230–232] і гайзенбергівських [213, 232] магнетиків в рамках теоретико-польової ренормгрупи (РГ). З одного боку, цей метод здатний відтворювати точні значення асимптотичних показників, з іншого боку, він також може враховувати можливі порушення універсальності далі від критичної точки. Це досягається обчисленням функцій РГ, розташованих далі від фіксованих точок перетворення РГ. Таким чином, рівняння потоку РГ імітують підхід до критичності, тоді як різним початковим умовам відповідають різні неуніверсальні чинники, властиві кожному конкретному магнетику.

У розділі наведено результати дослідження ефективної критичної поведінки структурно неупорядкованих магнетиків, де розглянуто проблему з іншої точки зору. Дійсно, найпоширеніші приклади структурно неупорядкованих магнетиків зі слабким випадковим T_c -подібним безладом, які розглядалися в експериментах і в моделюванні раніше ілюструються розведеними системами, що складаються з магнітних і немагнітних компонентів. У свою чергу, зміни в критичних показниках структурно-неупорядкованих магнетиків часто пояснюють лише наявністю немагнітної складової. У цьому дослідженні метою було показати, що подібний ефект можна спостерігати не тільки для розведених магнетиків з немагнітними домішками, але це скоріше викликано наявністю замороженого структурного безладу, який може бути реалізований, наприклад, також при наявності двох (і більше) хімічно різних магнітних компонентів. Іншими словами, ми прагнемо показати, що структурний безлад сам по собі викликає зміни в критичній поведінці кожного разу, коли він має форму випадково розподілених заморожених магнітних і немагнітних компонентів, або форму випадкової суміші двох різних магнітних сполук.

5.2. Функціональне представлення вільної енергії моделі Ізінга з випадковою довжиною спіна

У цьому підрозділі представлено модель структурно-неупорядкованого магнетика, який буде проаналізовано далі. Отримаємо його функціональне представлення вільної енергії та визначено відповідний ефективний гамільтоніан. Останнє - це ключовий об'єкт аналізу в рамках РГ [233, 234]. Системи різного мікроскопічного походження, що описуються в критичній області одним і тим же ефективним гамільтоніаном мають однакові універсальні властивості критичної поведінки: кажуть, що вони належать до одного класу універсальності.

Зручно спочатку окреслити спосіб виведення ефективного гамільтоніана для звичайної моделі Ізінга і використовувати цей висновок надалі як схему для розробки ефективних гамільтоніанів, що включають структурний безлад. Розгля-

немо систему N спінів з $S_{\mathbf{R}} = \pm 1$, розташованих на $\mathbf{R}$ вузлах d -вимірної гіперкубічної ґратки, які взаємодіють з Гамільтоніаном:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} J(|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|) S_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}'} . \quad (5.3)$$

Тут і далі суми (добутки) по $\mathbf{R}$ охоплюють усі вузли ґратки. У випадку моделі Ізінґа взаємодія $J(R) > 0$ зводиться до взаємодії найближчих сусідів, але загалом можна розглядати будь-який феромагнітний короткодійний зв'язок. Схематично модель зображена на Рис. 5.1а.

Термодинаміку моделі можна проаналізувати на основі її вільної енергії

$$F = -\beta^{-1} \ln Z , \quad (5.4)$$

де $\beta = k_{\text{B}}T$, k_{B} є сталою Больцмана, а статистична сума задана як:

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad \text{Sp} (\dots) = \prod_{\mathbf{R}} \sum_{S_{\mathbf{R}} = \pm 1} (\dots) . \quad (5.5)$$

Один із способів усереднення за спінами в рівнянні (5.5) пропонує записувати статистичну суму в формі функціонального інтеграла, щоб позбутися добутку двох спінів у гамільтоніані (5.3). Цього можна досягти, наприклад, застосувавши перетворення Стратоновича-Габбарда. З цією метою використовуючи трансляційну інваріантність гамільтоніана (5.5) статистична сума записується в просторі Фур'є як діагональна форма:

$$Z = \text{Sp} \prod_{\mathbf{k}} e^{\frac{\beta \nu(\mathbf{k})}{2} S_{\mathbf{k}} S_{-\mathbf{k}}} , \quad (5.6)$$

тут і далі хвильовий вектор $\mathbf{k}$ змінюється у верхній половині відповідної зони Бріллюена і $\nu(\mathbf{k})$, $S_{\mathbf{k}}$ — фур'є-образи взаємодії та спінів:

$$J(R) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \nu(\mathbf{k}) , \quad \nu(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} J(R) , \quad (5.7)$$

$$S_{\mathbf{R}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} S_{\mathbf{k}} , \quad S_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}} . \quad (5.8)$$

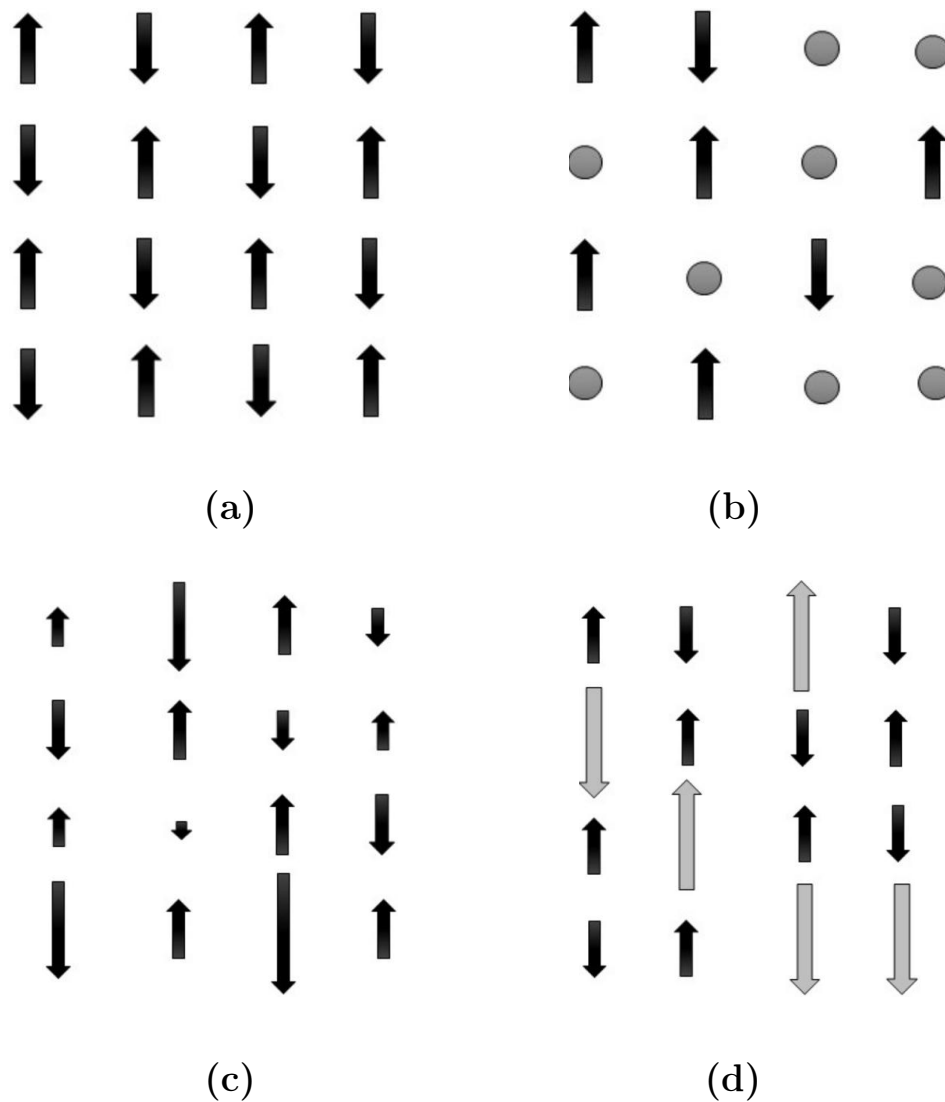


Рис. 5.1. Граткові спінові моделі. **(а)** Модель Ізінга: магнітні атоми зі спрямованістю вгору та вниз ‘спінами’ $S = \pm 1$ однакової довжини, розташовані на вузлах d -вимірної ґратки. **(б)** Заморожена розведена модель Ізінга: частина вузлів у моделі (а) зайнята немагнітними атомами (або порожні). Магнітні і немагнітні вузли розподіляються випадковим чином і фіксуються на заданих позиціях. Взаємодіють лише магнітні атоми. **(с)** Модель Ізінга із випадковою довжиною спіна: довжина спіна L (а) є випадковою величиною, що керується функцією розподілу $p(L)$, отже $S = \pm L$. **(д)** Окремий випадок моделі (с), коли функція розподілу задана рівнянням (5.27). Також і модель (б) можна розглядати як окремий випадок (с) з розподілом (5.24).

Для показника степеня в рівнянні (5.6), перетворення Стратоновича-Габбарда ви-
значається через інтегральну тотожність:

$$e^{\frac{\beta\nu(k)}{2}S_{\mathbf{k}}S_{-\mathbf{k}}} = \sqrt{\frac{1}{2\pi\beta\nu(k)}} \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_{\mathbf{k}} e^{-\frac{\phi_{\mathbf{k}}\phi_{-\mathbf{k}}}{2\beta\nu(k)} + S_{\mathbf{k}}\phi_{-\mathbf{k}}}, \quad \text{Re } \nu(k) > 0, \quad (5.9)$$

з функціональним інтегралом по полю $\phi_{\mathbf{k}}$. Це перетворення дозволяє представити систему спінів $S_{\mathbf{R}}$, що взаємодіють через дво-частинкові потенціали $J(R)$ як систе-
ми незалежних частинок, що взаємодіють із флуктуаційним полем $\phi_{\mathbf{k}}$. Подальші
кроки представлення статистичної суми d -вимірної моделі Ізінга у вигляді фун-
кціонального інтеграла можна подати так:

$$\begin{aligned} Z &\sim \int (d\phi) e^{-\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\beta\nu(k)} \phi_{\mathbf{k}}\phi_{-\mathbf{k}}} \text{Sp } e^{\sum_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}}\phi_{\mathbf{R}}} \sim \\ &\int (d\phi) e^{-\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\beta\nu(k)} \phi_{\mathbf{k}}\phi_{-\mathbf{k}}} \prod_{\mathbf{R}} \cosh(\phi_{\mathbf{R}}) \sim \int (d\phi) e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Тут і далі ми опускаємо множники, нерелевантні для подальшого аналізу, $\phi_{\mathbf{R}}$ –
це Фур'є зображення $\phi_{\mathbf{k}}$ і функціональне інтегрування означає:

$$\int (d\phi) = \prod_{\mathbf{R}} \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_{\mathbf{R}}. \quad (5.11)$$

Оскільки перший вираз у рівнянні (5.10) містить лише лінійний член за $S_{\mathbf{R}}$,
шпур зводиться до підстановки туди значення $S_{\mathbf{R}} = \pm 1$ і приводить до добу-
тку $\cosh(\phi_{\mathbf{R}})$ у другому виразі. У свою чергу, у критичній області ця функція
апроксимується розкладом до членів четвертого порядку, що веде до наступного
ефективного гамільтоніану:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\beta\nu(k)} - u_2 \right) \phi_{\mathbf{k}}\phi_{-\mathbf{k}} + \frac{u_4}{4!} \sum_{\mathbf{R}} \phi_{\mathbf{R}}^4. \quad (5.12)$$

Коефіцієнти u_{2l} легко випливають із розкладу $\ln \cosh(x)$ у рівнянні (5.10): $u_2/2 =$
 $1/2$, $u_4/4! = 1/12$. В РГ-аналізі критичної поведінки розглядаються короткохви-
льові (малі k) внески до $\nu(k)$, гаусівський член досягає форми $\sim (k^2 + m^2)\phi_{\mathbf{k}}\phi_{-\mathbf{k}}$,
що призводить до знайомого ефективного гамільтоніана (5.12) для скалярної мо-
делі ϕ^4 [233, 234].

Вплив структурного безладу на критичну поведінку моделей (5.3), (5.12) зазвичай розглядається в рамках парадигми слабого замороженого розведення немагнітним компонентом, як показано на рис. 5.1b. Результируюча критична поведінка в цьому випадку регулюється ефективним гамільтоніаном, що містить два ϕ^4 доданки різної симетрії [78, 87, 207].

Ми повернемося до цього ефективного гамільтоніана пізніше у підрозділі 5.3.1. Розглянемо спочатку ситуацію, коли структурний безлад реалізується випадковістю в розподілі магнітних атомів різних видів (різні елементарні магнітні моменти). Згадане вище слабке заморожене розведення немагнітною складовою буде одним із його часткових випадків. З цією метою розглянемо набір спінів, які можуть бути орієнтовані лише вгору та вниз, але мають різну довжину, як показано на рис. 5.1c. У такій моделі Ізінга з випадковою довжиною спіна довжина L кожного спіна є випадковою змінною, що керована функцією розподілу $p(L)$. Гамільтоніан запишеться [8, 9]:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} J(|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|) \mathbb{S}_{\mathbf{R}} \mathbb{S}_{\mathbf{R}'}, \quad \mathbb{S}_{\mathbf{R}} = \pm L_{\mathbf{R}}. \quad (5.13)$$

де $L_{\mathbf{R}}$ є рівномірно розподілені випадкові величини:

$$P(\{L\}) = \prod_{\mathbf{R}} p(L_{\mathbf{R}}) \quad (5.14)$$

а решта позначень такі ж, як у рівнянні (5.3). Гамільтоніан (5.13) можна зручно переписати в термінах спінів для звичайної моделі Ізінга:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} J(|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|) S_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}'} L_{\mathbf{R}} L_{\mathbf{R}'}, \quad S_{\mathbf{R}} = \pm 1. \quad (5.15)$$

Для замороженого безладу, який нас цікавить, довжини спіна $L_{\mathbf{R}}$ розподілені випадковим чином і фіксуються в певній конфігурації $\{L\}$. Статистична сума залежить від конфігурації, і фізичні спостережувані величини отримуються з конфігураційного середнього вільної енергії [175]:

$$F = -\beta^{-1} \langle \ln Z(\{L\}) \rangle_{\{L\}}, \quad \langle \dots \rangle_{\{L\}} = \prod_{\mathbf{R}} \sum_{L_{\mathbf{R}}} p(L_{\mathbf{R}}) (\dots), \quad (5.16)$$

де для статистичної суми, щоб уникнути усереднення логарифму в рівнянні (5.16), використовують метод реплік [235]

$$\ln Z(\{L\}) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{(Z(\{L\}))^n - 1}{n}. \quad (5.17)$$

Вираз для n -го ступеня статистичної суми, що залежить від конфігурацій, виглядає так:

$$\begin{aligned} (Z(\{L\}))^n &= \prod_{\alpha=1}^n \text{Sp}_{S^\alpha} e^{\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} J(|\mathbf{R}-\mathbf{R}'|) S_{\mathbf{R}}^\alpha S_{\mathbf{R}'}^\alpha L_{\mathbf{R}} L_{\mathbf{R}'}} \\ &\sim \prod_{\alpha=1}^n \int (d\phi^\alpha) e^{-\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\beta\nu(k)} \phi_{\mathbf{k}}^\alpha \phi_{-\mathbf{k}}^\alpha} \prod_{\mathbf{R}} \cosh(\phi_{\mathbf{R}}^\alpha L_{\mathbf{R}}). \end{aligned} \quad (5.18)$$

Тут, як і в рівнянні (5.10), опущено попередній множник, нерелевантний для подальшого аналізу та використано перетворення Стратоновича-Габбарда, поле ϕ^α тепер містить індекс репліки α . Останній член у рівнянні (5.18) потрібно усереднити відносно $\{L\}$:

$$\begin{aligned} \langle (Z(\{L\}))^n \rangle_{\{L\}} &\sim \prod_{\alpha=1}^n \int (d\phi^\alpha) e^{-\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\beta\nu(k)} \phi_{\mathbf{k}}^\alpha \phi_{-\mathbf{k}}^\alpha} \prod_{\mathbf{R}} \langle \cosh(\phi_{\mathbf{R}}^\alpha L_{\mathbf{R}}) \rangle_{\{L\}} \\ &\sim \int (d\phi) e^{-\mathcal{H}_{\text{eff}}}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

З

$$\int (d\phi) = \prod_{\alpha=1}^n \prod_{\mathbf{R}} \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_{\mathbf{R}}^\alpha, \quad (5.20)$$

що призводить до ефективного гамільтоніана з двома членами ϕ^4 різної симетрії:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\beta\nu(k)} - u_2 \langle L^2 \rangle \right) \phi_{\mathbf{k}}^\alpha \phi_{-\mathbf{k}}^\alpha + \frac{u_4}{4!} \langle L^4 \rangle \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mathbf{R}} (\phi_{\mathbf{R}}^\alpha)^4 \\ &\quad - \frac{u_2^2}{8} (\langle L^4 \rangle - \langle L^2 \rangle^2) \sum_{\alpha, \beta=1}^n \sum_{\mathbf{R}} (\phi_{\mathbf{R}}^\alpha)^2 (\phi_{\mathbf{R}}^\beta)^2. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Тут коефіцієнти u_{2l} такі ж, як отримані вище для ефективного гамільтоніану звичайної моделі Ізінга, див. рівняння (5.12), а також усереднення виконується з

локальною функцією розподілу довжини спіна $p(L)$:

$$\langle \dots \rangle = \sum_L p(L)(\dots). \quad (5.22)$$

Для аналізу термодинаміки моделі Ізінга з випадковою довжиною спіна має бути виконана реплічна границя $n \rightarrow 0$. Вираз (5.21) буде розглянуто далі в наступному підрозділі для різних розподілів випадкових величин $\{L\}$.

5.3. Досліджувані моделі

5.3.1. Модель Ізінга з немагнітними домішками

Розглянемо спочатку знайомий випадок розведеної моделі Ізінга, коли частина вузлів ґратки зайнята магнітними атомами з концентрацією c , а інші вузли з імовірністю $1 - c$ порожні або зайняті немагнітними атомами [236], тобто, випадкова величина L приймає два значення:

$$L = \begin{cases} 1, & \text{with prob. } c, \\ 0, & \text{with prob. } (1 - c), \end{cases} \quad (5.23)$$

що відповідає наступній функції розподілу у рівнянні (5.22):

$$p(L) = c\delta(L - 1) + (1 - c)\delta(L), \quad (5.24)$$

де $\delta(x) = \delta_{x,0}$ — дельта-символ Кронекера. Моменти розподілу (5.24) отримуємо наступні:

$$\langle L^k \rangle = \langle L \rangle = c,$$

$$\langle L^4 \rangle - \langle L^2 \rangle^2 = c - c^2 = c(1 - c),$$

і підставляючи їх у (5.22) отримуємо вираз для ефективного гамільтоніана розведеної моделі Ізінга:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\beta\nu(k)} - c \right) \phi_{\mathbf{k}}^{\alpha} \phi_{-\mathbf{k}}^{\alpha} + \frac{c}{12} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mathbf{R}} (\phi_{\mathbf{R}}^{\alpha})^4 - \\ & \frac{c(1-c)}{8} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n \sum_{\mathbf{R}} (\phi_{\mathbf{R}}^{\alpha})^2 (\phi_{\mathbf{R}}^{\beta})^2. \end{aligned} \quad (5.25)$$

5.3.2. Модель Ізінга зі спінами двох різних довжин

Тепер розглянемо випадок, коли всі вузли ґратки зайняті спінами, однак довжина деяких спінів фіксована і рівна 1, а інші мають фіксовану довжину s , див. рис. 5.1d . Концентрація спінів довжиною 1 рівна c , а концентрація спінів довжиною $s \in 1 - c$:

$$L = \begin{cases} 1, & \text{with prob. } c, \\ s, & \text{with prob. } (1 - c). \end{cases} \quad (5.26)$$

Коли спіни обох довжин розподіляються випадковим чином, це відповідає наступній двопараметричній функції розподілу

$$p(L) = c\delta(L - 1) + (1 - c)\delta(L - s). \quad (5.27)$$

Моменти випадкової величини L з розподілом (5.27) легко отримуються:

$$\langle L^k \rangle = c + (1 - c)s^k,$$

$$\langle L^4 \rangle - \langle L^2 \rangle^2 = c(1 - c)(1 - s^2)^2.$$

Підставляючи ці вирази в (5.21), ми отримуємо такий ефективний гамільтоніан:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\beta\nu(k)} - c \right) \phi_{\mathbf{k}}^{\alpha} \phi_{-\mathbf{k}}^{\alpha} + \frac{c + (1 - c)s^4}{12} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mathbf{R}} (\phi_{\mathbf{R}}^{\alpha})^4 \\ & - \frac{c(1 - c)(1 - s^2)^2}{8} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n \sum_{\mathbf{R}} (\phi_{\mathbf{R}}^{\alpha})^2 (\phi_{\mathbf{R}}^{\beta})^2. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Ключовою особливістю ефективних гамільтоніанів (5.25) та (5.28) є те, що вони обидва мають члени однакової симетрії ϕ^4 . Це означає, що при розгляді в підході РГ, вони обидва дають початок одній і тій самій картині фіксованих точок. У свою чергу, це призводить до такої ж універсальної критичної поведінки, за умови, що стабільна фіксована точка досягається з початкових умов. Повертаючись до ґраткових моделей, які використовували для отримання ефективних гамільтоніанів, див. рис. 5.1b і 5.1d цей висновок означає, що одновісні магнетики із замороженими немагнітними домішками та сплави одновісних магнетиків із замороженим безладом, які відрізняються елементарними магнітними моментами,

належать до одного класу універсальності. Однак через відмінність в числових значеннях коефіцієнтів у (5.25) та (5.28) ефективна критична поведінка може відрізнятися, що докладніше розглянуто нижче. Також можна помітити, що в граничному випадку $s = 0$ (спіни $1 - c$ мають «нульову довжину», тобто, відповідають немагнітним вузлам) ефективний гамільтоніан (5.28) зводиться до (5.25). Більше того, при $s = 1$ (коли всі спіни мають однакову довжину) останній доданок у (5.28) розбігається і ефективний гамільтоніан розкладається на n ефективних гамільтоніанів звичайної моделі Ізінга (5.12).

5.3.3. Порівняння моделей 5.3.1 та 5.3.2

З виведення ефективного гамільтоніана (5.28) можна зробити два висновки. Перший і очевидний полягає в тому, що його симетрія є такою ж, як і для розведеної моделі Ізінга, широко дослідженої раніше різними підходами, див., наприклад [78, 87, 207]. Це у свою чергу приводить до висновку, що асимптотична критична поведінка випадкової суміші двох магнетиків типу Ізінга та моделі Ізінга з немагнітним ізоморфом, збігаються [19]. Зокрема, усі обчислення ренормгрупи, виконані досі для аналізу асимптотичної поведінки розведеної моделі Ізінга, також безпосередньо застосовуються до нашої моделі.

Другий висновок отримується зі спостереження за співвідношенням коефіцієнтів при двох доданках ϕ^4 у рівнянні (5.28). Воно залежить від концентрації c і різниці довжини спіна s . Дійсно, змінюючи значення c , s , можна отримати співвідношення

$$r(c, s) = \frac{g_{1,0}}{g_{2,0}} = -\frac{3}{2} \frac{c(1-c)(1-s^2)^2}{c + (1-c)s^4}, \quad (5.29)$$

де

$$g_{1,0} = -3c(1-c)(1-s^2)^2, \quad (5.30)$$

$$g_{2,0} = 2(c + (1-c)s^4). \quad (5.31)$$

Це співвідношення визначає початкові умови для групового потоку ренормгрупи, який керує наближенням зв'язків g_i до їхніх значень у фіксованій точці

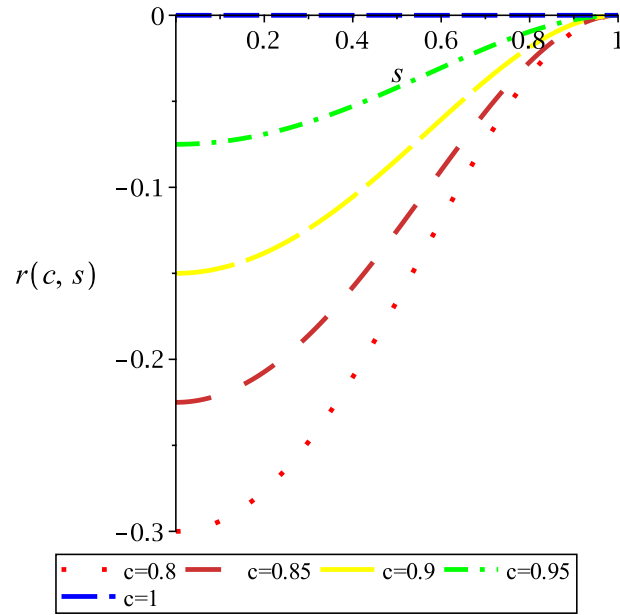


Рис. 5.2. Поведінка $r(c, s)$, рівняння (5.29), для різних концентрацій c спінів з $L = 1$. Знизу вгору: $c = 0,8; 0,85; 0,9; 0,95; 1$ (червоні, помаранчеві, жовті, зелені та сині криві). Значення $r(c, s = 0) = -\frac{3}{2}(1 - c)$ відповідає розведеній моделі Ізінга з немагнітними домішками.

після перенормування. Як обговорювалося в кінці попереднього підрозділу, при $s = 0$ ефективний гамільтоніан (5.28) відповідає моделі Ізінга з немагнітними домішками і, отже, $r(c, s = 0) = -\frac{3}{2}(1 - c)$, результат також отримується шляхом ділення коефіцієнтів при членах ϕ^4 у рівнянні (5.25). У свою чергу $r(c, s = 1) = 0$, що відповідає звичайній моделі Ізінга. Ще один граничний випадок, коли довжини двох видів спінів істотно відрізняються: $r(c, s = \infty) = -\frac{3}{2}c$.

Оскільки довжина спіна визначається рівнянням (5.26) можна отримати очевидний зв'язок:

$$r(c, s) = r(1 - c, 1/s). \quad (5.32)$$

Тому без втрати загальності ми обмежимося в подальшому аналізі областю $0 < s < 1$. Поведінка $r(c, s)$ для кількох значень концентрації c 'довших' спінів з $L = 1$ показано на рис. 5.2.

У наступному підрозділі використано наявні знання про РГ-функції моделі з ефективним гамільтоніаном (5.25) разом із отриманими тут залежностями його констант зв'язку від концентрації та довжини спінів, обговорено ефективну

критичну поведінку моделі Ізінга з випадковою довжиною спіна.

5.3.4. Аналітичні результати: ренормгруповий потік та ефективні критичні показники

Будучи потужним інструментом для обчислення універсальних характеристик критичної поведінки, РГ-підхід послідовно використовувався для розгляду критичної поведінки в неасимптотичному режимі, де підхід до критичності характеризується неуніверсальними ефективними критичними показниками. Серед його досягнень – опис експериментально спостережуваної неуніверсальної поведінки співвідношення амплітуд при теплопровідності у ^4He , коефіцієнтів переносу в суміші ^3He - ^4He , в'язкості у Xe (див., наприклад, огляд [237]). Його також використовували для розрахунку ефективних критичних показників розведених магнітних систем [213, 230–232]. У статті [19] ми вивчали ефективну критичну поведінку моделі аналізуючи ефективний гамільтоніан у неперервній межі методами теоретико-польової РГ [233, 238, 239]. Далі надано коротке пояснення методу, оскільки його використано для вибору параметрів моделі, які використовуватимуться як вхідні дані для моделювання МС у наступному підрозділі 5.4.

У неперервній границі ефективний гамільтоніан (5.28) може бути переписаний, використовуючи позначення [210] таким чином:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} = \int d^d r \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n [m_0^2 (\phi_r^\alpha)^2 + |\nabla \phi_r^\alpha|^2] \right. \\ \left. + \frac{g_{1,0}}{4!} \sum_{\alpha,\beta=1}^n (\phi_r^\alpha)^2 (\phi_r^\beta)^2 + \frac{g_{2,0}}{4!} \sum_{\alpha=1}^n (\phi_r^\alpha)^4 \right\}, \end{aligned} \quad (5.33)$$

де квадрат неперенормованої маси m_0^2 вимірює відстань у температурі τ до критичної точки, а відношення чистих зв'язків $g_{1,0}/g_{2,0}$ дорівнює $r(c, s)$, див. Рів. (5.29).

У рамках підходу РГ зміна зв'язків g_1, g_2 (починаючи з початкових значень, заданих рівняннями (5.30) та (5.31)) ефективного гамільтоніана (5.33) при

перенормуванні описується рівняннями потоку [233, 238, 239]:

$$\ell \frac{d}{d\ell} g_1(\ell) = \beta_{g_1}(g_1(\ell), g_2(\ell)), \quad \ell \frac{d}{d\ell} g_2(\ell) = \beta_{g_2}(g_1(\ell), g_2(\ell)), \quad (5.34)$$

де ℓ – параметр потоку РГ.

Параметр потоку може бути пов’язаний за допомогою так званої “умови відповідності” з кореляційною довжиною, залежно від температурної відстані τ до критичної точки, див., наприклад [237]. У простішому випадку він пропорційний оберненому квадрату кореляційної довжини, тому межа $\tau \rightarrow 0$ відповідає $\ell \rightarrow 0$. У цій межі $g_1(\ell)$ і $g_2(\ell)$ досягають своїх значень у стійкій нерухомій точці (НТ).

НТ (g_1^*, g_2^*) перетворення РГ визначається шляхом занулення обох β -функцій: $\beta_{g_1}(g_1^*, g_2^*) = 0$, $\beta_{g_2}(g_1^*, g_2^*) = 0$. НТ є стійкою, якщо обидва власні значення матриці стійкості

$$B_{ij} \equiv \frac{\partial \beta_{g_i}}{\partial g_j}, \quad i, j = 1, 2, \quad (5.35)$$

в цій НТ є додатні та дійсні.

Якщо стабільна НТ досягається з початкових умов – нагадаємо, що для ефективного гамільтоніана (5.33) початкові умови залежать від c і s і знаходяться в області $g_1 \leq 0$, $g_2 > 0$, що відповідає критичній точці для системи. Крім того, асимптотичні значення критичних показників визначаються значеннями в НТ для γ -функцій ренормгрупи. Зокрема, показники кореляційної довжини та парної кореляційної функції (аномальної розмірності поля) ν і η , відповідно, виражаються через РГ-функції γ_ϕ та γ_{m^2} , що описують перенормування поля ϕ та квадрата маси m^2 відповідно [233, 238, 239]:

$$\nu^{-1} = 2 + \gamma_{m^2}(g_1^*, g_2^*), \quad \eta = 2\gamma_\phi(g_1^*, g_2^*). \quad (5.36)$$

У схемі РГ ефективні критичні показники розраховуються в області, де зв’язки $(g_1(\ell), g_2(\ell))$ ще не досягли своїх значень для НТ і залежать від ℓ . Зокрема, для показників ν_{eff} та η_{eff} отримуємо [78]:

$$\nu_{\text{eff}}(\tau) = \frac{1}{2 + \gamma_{m^2}[g_1\{\ell(\tau)\}, g_2\{\ell(\tau)\}]} + \dots,$$

$$\eta_{\text{eff}}(\tau) = 2\gamma_\phi[g_1\{\ell(\tau)\}, g_2\{\ell(\tau)\}] + \dots, \quad (5.37)$$

де крапки позначають внесок, пропорційний β -функціям, що надходить від зміни амплітудної частини відповідних величин. Зазвичай цими частинами можна знехтувати [237].

Оскільки наша модель і модель Ізінга з розведенням вузлів мають спільний ефективний гамільтоніан, відомі вирази РГ функцій для останньої. Як відомо, пертурбативні РГ розклади мають нульовий радіус збіжності [238, 239]. Тому необхідно застосувати певні методи пересумовування, намагаючись відновити їх збіжність і отримати надійні числові оцінки. Результати, які обговорюються нижче, отримані на основі процедури конформного пересумовування Бореля [240], узагальненої для випадку кількох взаємодій [219, 241, 242]. Це коротко описано в 5.3.5, див. також [19] для детальнішої інформації.

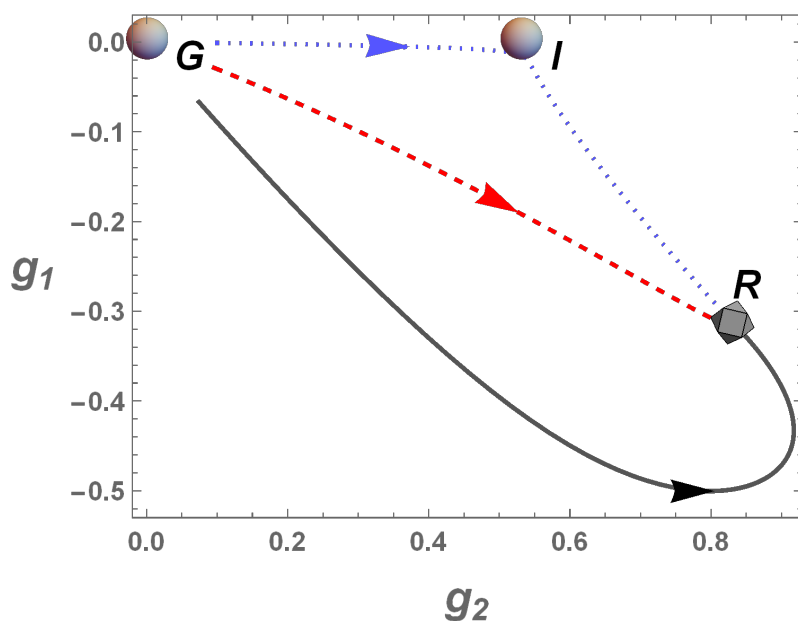


Рис. 5.3. Ренормгруповий потік у просторі зв'язків для різних початкових умов. Згори донизу: $r = g_1(\ell_0)/g_2(\ell_0) = -0,01$ (пунктирна синя крива), $-0,3$ (пунктирна червона), $-0,9$ (суцільна чорна). Нестійкі Гауссівські (**G**) і Ізінгівські (**I**) НТ показані сірими дисками, тоді як стійка випадкова Ізінгівська (random Ising, **R**) НТ показана сірим ромбом.

Як уже встановлено, рівняння потоку РГ для ефективного гамільтоніана (5.33) характеризується трьома НТ в області $g_1 \leq 0$, $g_2 \geq 0$: гаусівська НТ **G**

($g_1 = 0, g_2 = 0$), НТ чистої моделі Ізінга **I** ($g_1 = 0, g_2 \neq 0$) і НТ неупорядкованої моделі Ізінга (random Ising, **R**) ($g_1 \neq 0, g_2 \neq 0$). Вони наведені на рис. 5.3. Тільки НТ **R** є стійкою. Значення асимптотичних критичних показників, які ми отримали для НТ **R**, використовуючи описану в підрозділі 5.3.5 процедуру, такі: $\nu = 0,676$ і $\eta = 0,032$. Як видно з таблиці 5.2, вони дуже близькі до останніх аналітичних оцінок, див. також огляд [210].

Продовжимо аналізувати картину РГ в неасимптотичному режимі, щоб побачити, як ефективні критичні показники наближаються до своїх асимптотичних значень залежно від початкових умов для ефективного гамільтоніана. Оскільки далі буде наведена перевірка аналітичних прогнозів за допомогою моделювання МС, ми представимо кілька ефективних показників для вибраних початкових умов, які згодом слугуватимуть вхідними для розрахунків МС. Для цього ми чисельно розв'язуємо систему диференціальних рівнянь (5.34) із підсумованими β -функціями, отримуючи поточні значення зв'язків. Як уже зазначалося, властивості потоку РГ залежать від початкових умов ($g_1(\ell_0), g_2(\ell_0)$) диференціальних рівнянь (5.34). Ми вибрали ($g_1(\ell_0), g_2(\ell_0)$) в околі НТ **G** для трьох різних значень $r = g_1(\ell_0)/g_2(\ell_0)$.

Як видно з Рис. 5.3, зі зменшенням ℓ усі три потоки приводять до стійкої НТ. Проте їхня поведінка сильно залежить від початкових умов. Для $r = -0.01$ потік спочатку залишається в межах області притягання нестійкої НТ Ізінга (блакитна пунктирна крива на Рис. 5.3). Для $r = -0.3$ потік безпосередньо наближається до стійкого в НТ **R** (червона пунктирна крива), тоді як для $r = -0.9$ поточні значення зв'язків наближаються до своїх стійких значень НТ з поведінкою «перевищення» (чорна крива)).

Залежність ефективних критичних показників ν_{eff} і η_{eff} від параметра потоку ℓ представлено на Рис. 5.4. Залежно від початкових умов ефективний критичний показник ν_{eff} або досягає своїх універсальних значень при стійкій НТ порівняно швидко (червона крива), або досягає значень, які відрізняються від стійких НТ у широкій області переходу, яка регулюється критичними показниками з класом універсальності моделі Ізінга (синя крива), або його значення перевищує

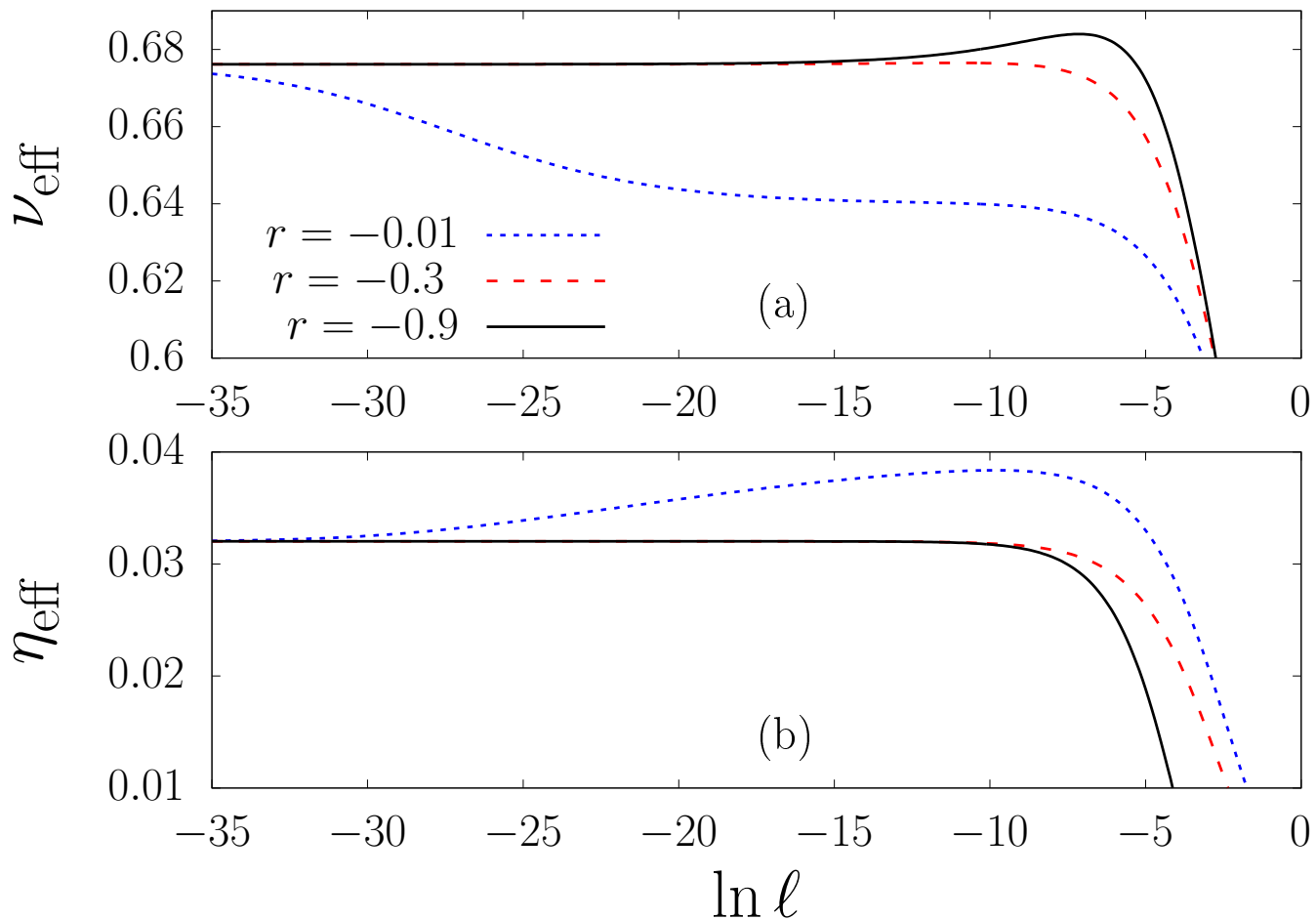


Рис. 5.4. Залежності ефективного критичного показника кореляційної довжини ν_{eff} (верхня панель (a)) та ефективного критичного показника парної кореляційної функції η_{eff} (нижня панель (b)) для параметра потоку, розрахованому вздовж потоків РГ на рис. 5.3. Ми використали ті самі кольори, що й на рис. 5.3.

стійкі НТ (пік на чорній кривій). Ми не спостерігали третього випадку для η_{eff} . Можливим поясненням є те, що значення η є малим, тому наближення, яке нехтує внеском, позначеним крапками в (5.37) не має відношення до його обчислення.

У наступному підрозділі 5.4 наведено результати комп'ютерних симуляцій для ефективних критичних показників для потоків з початковими умовами $r = 0.3$ і $r = 0.9$. З рівняння (5.29) легко бачити, що для першого випадку можна вибрати $s = 1.7$, $c \approx 0.53$, тоді як для другого випадку – $s = 3$, $c \approx 0.79594$.

5.3.5. Теоретико-польові розклади ренормгрупи (РГ) та їх пересумовування

У обчисленнях було використано найновіші ренормгрупові функції, отримані для ефективного гамільтоніана (5.33) з рекордною точністю шостого порядку в схемі мінімального віднімання [210] (див. також [243]). Пертурбативні розклади для ренормгрупових функцій мають вигляд:

$$\beta_{g_1}(g_1, g_2) = -g_1 \left(\varepsilon - \frac{8g_1}{3} - 2g_2 + \frac{14g_1^2}{3} + \frac{22g_1g_2}{3} + \frac{5g_2^2}{3} + \dots \right), \quad (5.38)$$

$$\beta_{g_2}(g_1, g_2) = -g_2 \left(\varepsilon - 4g_1 - 3g_2 + \frac{82g_1^2}{9} + \frac{46g_1g_2}{3} + \frac{17g_2^2}{3} + \dots \right), \quad (5.39)$$

$$\gamma_\phi(g_1, g_2) = \frac{g_1^2}{18} + \frac{g_1g_2}{6} + \frac{g_2^2}{12} + \dots \quad (5.40)$$

$$\gamma_{m^2}(g_1, g_2) = -g_2 - \frac{2g_1}{3} + \frac{5g_1^2}{9} + \frac{5g_1g_2}{3} + \frac{5g_2^2}{6} + \dots, \quad (5.41)$$

де $\varepsilon = 4 - d$, а трикрапки позначають вищі порядки розкладів, відомі на поточний момент до $O(g_i^7)$ та $O(g_i^6)$ для β - та γ -функцій відповідно [210, 243].

Зазвичай, починаючи з виразів для ренормгрупових функцій, можна або розвивати ε -розклад, або працювати безпосередньо при $d = 3$, вважаючи перенормовані константи зв'язку (g_1, g_2) параметрами розкладу [244, 245]. Однак такі пертурбативні розклади є асимптотично-збіжними в кращому випадку [238, 239]. Більше того, рівняння для нерухомих точок є виродженими на рівні однієї петлі в нашому випадку (див. β -функції (5.38) та (5.39)). Для цього випадку був розроблений розклад за параметром $\sqrt{\varepsilon}$ [209, 246, 247], але виявляється, що він має значно гірші конвергентні властивості. Тому ми спираємося на аналіз рівнянь (5.38)–(5.41) при фіксованому $d = 3$, підставляючи $\varepsilon = 1$ та аналізуючи їх як функції взаємодій g_1 і g_2 .

Для поліпшення збіжності пертурбативних розкладів потрібно застосовувати відповідні техніки пересумовування, щоб отримати надійні оцінки. В даний час використовуються різні методи пересумовування (див. наприклад [78, 87, 207]). У дослідженні використано метод, що ґрунтується на перетворенні Бореля, поєднаному з конформним відображенням [240]. Ця техніка пересумовування була вперше розроблена для моделей торії поля із однією константою зв'язку. Вона вимагає знань про поведінку розкладів на високих порядках теорії збурень. Цю процедуру було розширено для моделей теорії поля, що містять кілька констант зв'язку [219, 241, 242]. Наприклад, вона була використана для вивчення фрустрованих магнетиків, змодельованих ефективним Гамільтоніаном із двома взаємодіями [242, 248–250]. Хоча сумовність за Борелем не було доведено для пертурбативних рядів для моделей з безладом при $d > 0$ [241], конформний метод Бореля був успішно використаний для моделі Ізінга із випадковими вузлами [219, 232, 237, 251]. Ось короткий опис процедури, яку було використано.

Для випадку з однією змінною, початковим виразом є нескінченний ряд

$$f(g) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n g^n, \quad (5.42)$$

з коефіцієнтами a_n , що зростають факторіально. Тоді перетворення Бореля-Леруа визначається як:

$$B(u) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{\Gamma[n+b+1]} g^n, \quad (5.43)$$

де $\Gamma[\dots]$ — це гамма функція. Це перетворення повинно сходитися у комплексній площині в колі радіусом $1/a$, де $g = -1/a$ — це сингулярність $B(g)$, найближча до початку координат. Тоді, використовуючи інтегральне представлення $\Gamma[n+b+1]$, $f(g)$ переписується як:

$$f(g) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{\Gamma[n+b+1]} g^n \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{n+b}. \quad (5.44)$$

Тоді змінивши місцями підсумовування та інтегрування, можна означити пере-

творення Бореля для f як:

$$f_B(u) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^b B(gt). \quad (5.45)$$

Для обчислення інтегралу в рівнянні (5.45) по всій додатній півосі необхідно записати аналітичне продовження $B(t)$. Це можна досягти за допомогою кількох методів. Використовуючи техніку конформного відображення, ми припускаємо, що всі сингулярності $B(u)$ знаходяться на від'ємній дійсній осі, і що функція $B(u)$ – аналітична у всій комплексній площині, за винятком розриву від $-1/a$ до $-\infty$. Тоді можна виконати в B заміну змінної $w(g) = \frac{\sqrt{1+a,g}-1}{\sqrt{1+a,g}+1} \iff g(w) = \frac{4}{a} \frac{w}{(1-w)^2}$. Ця заміна відображає комплексну площину g з розривом від $g = -1/a$ до $-\infty$ на одиничне коло в площині w , так що сингулярності $B(g)$, що лежать на від'ємній осі, тепер розташовуються на межі кола $|w| = 1$.

Нарешті, результуючий вираз $B(w(g))$ потрібно повторно розкласти за степенями $w(g)$, а відновлений вираз ряду f записується:

$$f_R(g) = \sum_{n=0}^{\infty} d_n(a, b) \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^b [w(gt)]^n, \quad (5.46)$$

де $d_n(a, b)$ – коефіцієнти повторного розкладу $B(g(w))$ за степенями $w(g)$.

Також корисно узагальнити наведений вище вираз (5.46) таким чином [252]:

$$f_R(g) = \sum_{n=0}^{\infty} d_n(\alpha, a, b) \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^b \frac{[w(ut)]^n}{[1 - w(ut)]^\alpha} \quad (5.47)$$

оскільки це дозволяє забезпечити поведінку сильного зв'язку для ряду: $f(g \rightarrow \infty) \sim g^{\alpha/2}$.

Ця процедура може бути розширена для моделей з теорії поля, що містять кілька констант зв'язку. Наприклад, коли f є функцією двох змінних g_1 і g_2 , техніка пересумовування може розглядати f як функцію змінної, пов'язаної з чистим магнетиком (в нашому випадку це g_2), та відношенням $z = g_1/g_2$ [219, 241, 242]:

$$f(g_2, z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(z) g_2^n. \quad (5.48)$$

Тоді, залишаючи z фіксованим і виконуючи лише пересумовування за g_2 відповідно до кроків, описаних вище, отримуємо:

$$f_R(g_2, z) = \sum_{n=0}^{\infty} d_n(\alpha, a(z), b; z) \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^b \frac{[w(g_2 t; z)]^n}{[1 - w(g_2 t; z)]^\alpha}, \quad (5.49)$$

з параметром, залежним від z , $a(z)$. Тут, як і вище, коефіцієнти $d_l(\alpha, a(z), b, z)$ у (5.49) обчислюються так, щоб перерозклад правої частини (5.49) в степенях g_2 збігалося з розкладом у (5.48).

Обчислення параметрів a , b та α для теоретико-польових моделей з кількома константами зв'язку є надзвичайно складним завданням. Крім того, на практиці процедура, описана вище, застосовується до обрізаних рядів (5.38)-(5.41), які відомі до відповідного порядку теорії збурень. Як результат, пересумовані розклади (які зазвичай відповідають певній фізичній спостережуваній) виявляються залежними від параметрів пересумовування a , b та α . Часто, застосовуючи метод Бореля для моделей з двома константами зв'язку, ці параметри вибираються в такій області, де фізичні спостережувані менш чутливі до їх значень, див. наприклад, [248]. У нашому аналізі ми перевірили область параметрів, обговорену в дослідженні п'яти-петлевих рядів для моделі фрустрованого магнетика [248]: $a = 1/2$, b змінюється в інтервалі $[6, 30]$, тоді як α змінюється в інтервалі $[-0.5, 2]$. Остаточний вибір параметрів пересумовування: $a = 1/2$, $b = 10$ та $\alpha = 1$. При таких значеннях асимптотичні критичні показники ν та η випадкової моделі Ізінга дуже близькі до останніх аналітичних оцінок, див. Таблицю 5.2.

5.4. Симуляції 3D моделі Ізінга зі спінами двох довжин

У цьому підрозділі приведено результати комп'ютерного моделювання, виконаного з метою перевірки теоретичних передбачень. Спочатку описано метод та спостережувані, які використовувалися при аналізі. Після цього приведено характеристики критичних властивостей моделі для двох наборів параметрів.

5.4.1. Модель

Оскільки ми розглядатимемо взаємодію найближчих сусідів, зручно переписати гамільтоніан (5.13) як

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle r, r' \rangle} J_{r, r'} S_r S_{r'} \quad (5.50)$$

де підсумовування проходить по всіх парах найближчих сусідів у тривимірній кубічній ґратці розміром L (і об'ємом $V = L^3$) з періодичними граничними умовами. Змінні S_r є ізінгівськими (± 1). $J_{r, r'}$ – заморожені змінні (безлад), задані як

$$J_{r, r'} = \hat{L}_r \hat{L}_{r'} \quad (5.51)$$

Через функцію розподілу (5.27) отримуємо, що $\hat{L}_r$ дорівнює 1 з імовірністю s , інакше – $-s$. І оскільки всі $J_{r, r'} > 0$ ми можемо використовувати кластерні методи для моделювання цієї моделі.

5.4.2. Спостережувані

Введемо намагніченість на спін

$$\mathcal{M} = \frac{1}{V} \sum_r S_r. \quad (5.52)$$

Тоді сприйнятливість можна записати як

$$\chi = V \overline{\langle \mathcal{M}^2 \rangle}, \quad (5.53)$$

а кумулянт Біндера

$$U_4 = 1 - \frac{1}{3} \frac{\overline{\langle \mathcal{M}^4 \rangle}}{\overline{\langle \mathcal{M}^2 \rangle}^2}, \quad (5.54)$$

де $\langle (\dots) \rangle$ термодинамічне середнє, а $\overline{(\dots)}$ – середнє за безладом (довжиною спінів), а V це кількість вузлів ґратки. У термодинамічній границі $V \rightarrow \infty$ кумулянт Біндера дорівнюватиме нулю в парамагнітній фазі і прийматиме значення $2/3$ у феромагнітній.

Дуже корисним способом охарактеризувати фазовий перехід є використання кореляційної довжини для скінченної ґратки [233, 253], означеної як

$$\xi = \left(\frac{\chi/F - 1}{4 \sin^2(\pi/L)} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (5.55)$$

із

$$F = \frac{V}{3} \overline{|\mathcal{F}(2\pi/L, 0, 0)|^2 + \text{two permutations}}, \quad (5.56)$$

де $\mathcal{F}$ є Фур'є-образом намагніченості

$$\mathcal{F}(k) = \frac{1}{V} \sum_r e^{ik \cdot r} S_r. \quad (5.57)$$

Однак, лише ξ визначене рівнянням (5.55) є справжньою кореляційною довжиною в парамагнітній фазі, тому $R_\xi \equiv \xi/L$ дорівнює нулю в цій фазі, коли L розбігається, а ξ розбігається у феромагнітній фазі як $\xi \sim L^{d/2}$ і, отже, R_ξ (у трьох вимірах). Тому криві R_ξ для різних розмірів ґратки перетинатимуться в околі критичної температури [233, 253].

Щоб отримати показник кореляційної довжини ν з аналізу R_ξ , нам потрібно оцінити похідну кореляційної довжини відносно оберненої температури $\beta = 1/T$, $\partial_\beta \xi$ обчислюючи середні значення різних моментів намагніченості (і $\mathcal{F}$ у випадку ξ). Похідна для характеристики $\overline{\langle \mathcal{O} \rangle}$ розраховується за таким співвідношенням

$$\partial_\beta \overline{\langle \mathcal{O} \rangle} = \overline{\partial_\beta \langle \mathcal{O} \rangle} = \overline{\langle \mathcal{O} \mathcal{H} - \langle \mathcal{O} \rangle \langle \mathcal{H} \rangle \rangle}. \quad (5.58)$$

Для корекції похибки, викликаній невеликою кількістю вимірювань у кожній вибірці, ми застосували екстраполяцію третього порядку, як описано в роботі [254].

Кумулянт g_2 , який вимірює відсутність самоусередненості системи, визначається як

$$g_2 = \frac{\overline{\langle \mathcal{M}^2 \rangle^2} - \overline{\langle \mathcal{M}^2 \rangle}^2}{\overline{\langle \mathcal{M}^2 \rangle}^2}. \quad (5.59)$$

Сприйнятливість буде самоусереднюваною величиною, якщо g_2 прямує до нуля зі збільшенням L . Якщо це не так, сприйнятливість не усереднюється (див., наприклад, [255, 256]).

5.4.3. Параметри симуляцій

Модель досліджено за допомогою чисельного моделювання, використовуючи комбінацію однокластерного алгоритму Вольфа [257], доповненого локальними оновленнями Монте-Карло. Зокрема, елементарний крок Монте-Карло складався з L однокластерних оновлень, за якими слідувало послідовне повнограткове оновлення Метрополіса [92, 254, 258]. Крім того, ми оцінили термалізацію для кожного спостереження температури порівняно з логарифмом нелокальних спостережуваних за часом Монте-Карло, таких як сприйнятливість або кумулянт R_ξ . У таблиці 5.3 наведено параметри чисельного моделювання.

Табл. 5.3. Параметри, що використовуються в чисельному моделюванні. N_{samples} — кількість реалізацій безладу, а N_{sweeps} — кількість елементарних кроків Монте-Карло (побудованих L однокластерними оновленнями, за якими слідують послідовні повнограткові оновлення Метрополіса). Нарешті, наведено значення довжин спінів: 1 з імовірністю c і s з імовірністю $1 - c$.

L	s	c	N_{samples}	N_{sweeps}	s	c	N_{samples}	N_{sweeps}
8	1.7	0.53	26000	256	3.0	0.795943	48440	256
12	1.7	0.53	26000	256	3.0	0.795943	48950	256
16	1.7	0.53	26000	256	3.0	0.795943	49000	256
24	1.7	0.53	36000	256	3.0	0.795943	49000	256
32	1.7	0.53	26070	256	3.0	0.795943	48996	256
48	1.7	0.53	28080	256	3.0	0.795943	48997	256
64	1.7	0.53	31440	256	3.0	0.795943	41725	256

Було змодельовано експерименти для двох наборів параметрів:

- $s = 1.7$, $c = 0.53$ – для яких теорія ($r = -0,3$) передбачає невеликі поправки до скейлінгу (майже ідеальна дія);
- $s = 3$, $c = 0.795943$ – для якого передбачення теорії ($r = -0,9$) полягає в появі значних скейлінгових поправок.

Нижче ми називатимемо два змодельованих випадки як $s = 1.7$ і 3 . Зверніть увагу, що ми обчислили відповідні потоки РГ та ефективні показники для цих двох значень r , див. Рис. 5.4.

Щоб імітувати різні температури, ми виконали відпал від найвищої температури до найнижчої. Для $s = 3$ ми змоделювали в процедурі відпалу 20 температур у критичній області, для $s = 1.7$ ми змоделювали 20 температур для менших розмірів ґратки ($L \leq 32$) і 7 для $L = 48$ і 64 . Ми використали аналіз на основі поліномів п'ятого порядку для обчислення температури перетину.

5.4.4. Метод коефіцієнтів (quotients method) і результати

Ми зосередилися на кумулянті R_ξ , щоб охарактеризувати фазовий перехід для обох наборів параметрів s і c . На Рис. 5.5 показано криві $R_\xi(\beta)$ ($\beta = 1/T$) для різних розмірів ґратки та двох значень s . Фазові переходи дуже чіткі для обох значень s (різні криві перетинаються приблизно при тій самій оберненій критичній температурі).

Ми проаналізували ці два фазові переходи (для $s = 1.7$ і 3) за допомогою методу коефіцієнтів (quotients method) [233, 259, 260], який ґрунтується на аналізі різних спостережуваних у точці перетину кривих L і $2L$, у цьому випадку – для кумулянта R_ξ . Метод коефіцієнтів використовується для отримання екстрапольованих результатів для критичних показників і скейлінгових поправок. Нехай $O(\beta, L)$ – величина, яка масштабується в термодинамічній границі як $\xi^{x_O/\nu}$. Для безрозмірних спостережуваних $x_O = 0$. Крім того символом g позначатимуться усі безрозмірні величини, наприклад, R_ξ , U_4 або g_2 .

Основою методу коефіцієнтів є порівняння тієї самої спостережуваної, обчисленої при L і $2L$

$$Q_O = \frac{O(\beta_{\text{cross}}(L, 2L), 2L)}{O(\beta_{\text{cross}}(L, 2L), L)}, \quad (5.60)$$

при $\beta_{\text{cross}}(L, 2L)$, що визначається

$$g(L, \beta_{\text{cross}}(L, 2L)) = g(2L, \beta_{\text{cross}}(L, 2L)). \quad (5.61)$$

Тому можна писати

$$Q_O^{\text{cross}} = 2^{x_O/\nu} + \mathcal{O}(L^{-\omega}), \quad (5.62)$$

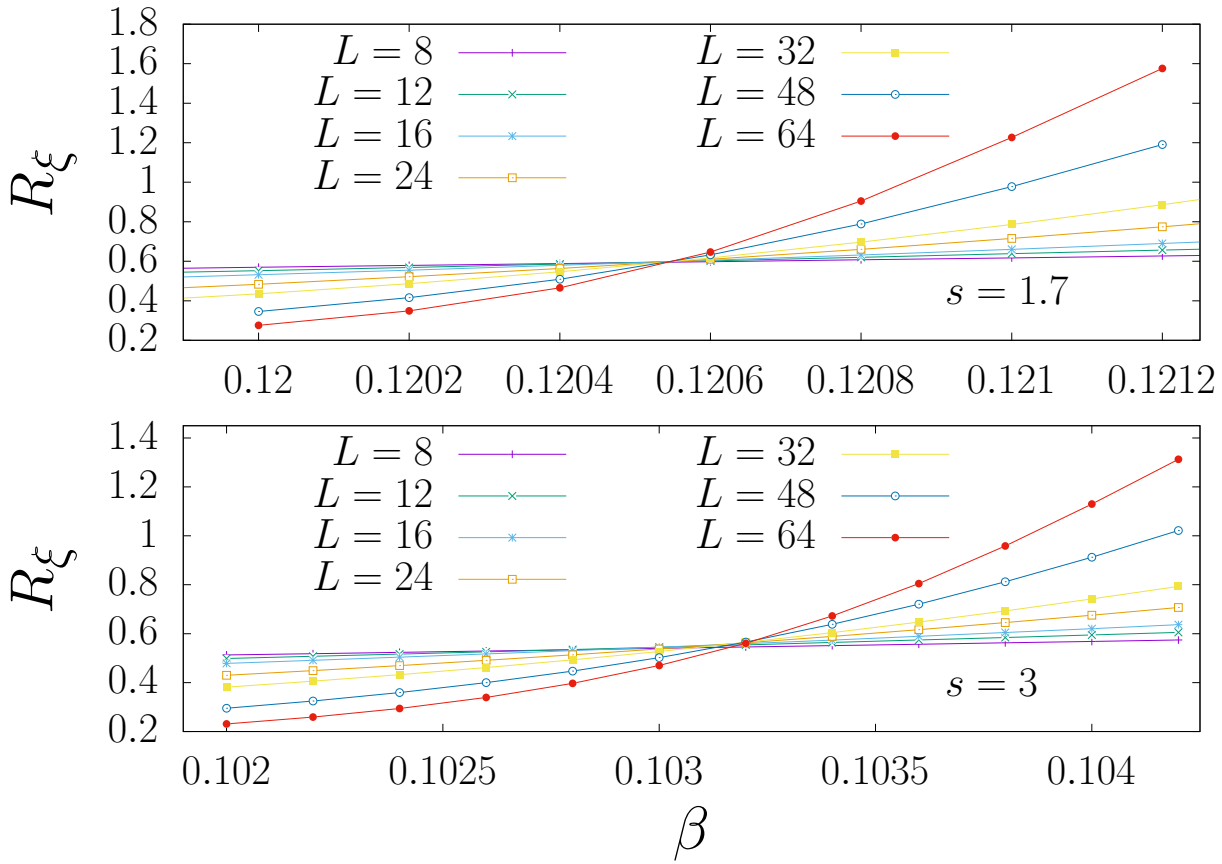


Рис. 5.5. Поведінка R_ξ як функція оберненої температури β для $s = 1.7$ (угорі) і $s = 3$ (внизу). Точка перетину різних кривих позначає ефективну точку переходу.

i

$$g^{\text{cross}} = g^* + \mathcal{O}(L^{-\omega}), \quad (5.63)$$

де x_O/ν , g^* і показник поправки до скейлінгу ω є універсальними величинами. Щоб обчислити показники ν і η , слід вивчити розмірні спостережувані, такі як сприйнятливість ($x_\chi = \nu(2 - \eta)$) і β -похідні від R_ξ і U_4 .

Точка перетину оберненої температури ($\beta_{\text{cross}}(L, 2L)$) масштабується як

$$\beta_{\text{cross}}(L, 2L) = \beta_c + A_{\beta_c, g} L^{-\omega-1/\nu} + \dots \quad (5.64)$$

Остаточно, провідний показник поправки до скейлінгу можна оцінити за допомогою скейлінгу безрозмірної величини g (Q_g) через

$$Q_g^{\text{cross}}(L) = 1 + A_g L^{-\omega} + B_g L^{-2\omega} + \dots \quad (5.65)$$

Проміжні дані аналізу на основі методу коефіцієнтів наведено в таблиці 5.4 (на основі точок перетину R_ξ) та 5.5 (на основі точок перетину R_{g_2} і R_{U_4}).

Табл. 5.4. Результати методу коефіцієнтів для двох змодельованих значень $s = 3$ і 1.7 з точок перетину R_ξ для розмірів ґратки L_1 і L_2 .

s	L_1/L_2	β_{cross}	R_ξ	ν_ξ	η	Q_{U_4}
1.7	8/16	0.12051(1)	0.594(1)	0.694(2)	0.030(4)	0.984(1)
1.7	12/24	0.120552(6)	0.598(1)	0.684(2)	0.031(4)	0.991(1)
1.7	16/32	0.120550(4)	0.599(1)	0.680(2)	0.033(4)	0.992(1)
1.7	24/48	0.120549(2)	0.598(1)	0.679(2)	0.033(4)	0.995(1)
1.7	32/64	0.120555(1)	0.601(1)	0.678(2)	0.032(4)	0.995(1)
3.0	8/16	0.10289(1)	0.537(1)	0.757(3)	0.059(6)	0.982(2)
3.0	12/24	0.1031017	0.550(1)	0.735(2)	0.044(5)	0.988(2)
3.0	16/32	0.103156(7)	0.556(1)	0.725(2)	0.039(5)	0.989(1)
3.0	24/48	0.103185(4)	0.561(1)	0.717(2)	0.036(5)	0.988(2)
3.0	32/64	0.103212(2)	0.567(1)	0.713(1)	0.034(6)	0.989(2)

Табл. 5.5. Результати методу коефіцієнтів ($s = 3$ і 1.7) для значень кумулянтів g_2 і U_4 в точках перетину R_{g_2} і R_{U_4} (відповідно) для розмірів ґратки L_1 і L_2 .

s	L_1/L_2	U_4	g_2
1.7	8/16	0.4660(9)	0.113(1)
1.7	12/24	0.4616(9)	0.122(1)
1.7	16/32	0.4591(9)	0.127(1)
1.7	24/48	0.4559(7)	0.130(1)
1.7	32/64	0.4563(9)	0.134(2)
3.0	8/16	0.4525(9)	0.238(2)
3.0	12/24	0.456(1)	0.242(3)
3.0	16/32	0.457(1)	0.237(3)
3.0	24/48	0.457(1)	0.222(3)
3.0	32/64	0.459(1)	0.215(2)

Можна більш детально розглянути дані для ефективних показників ν і η , побудувавши їх як функцію $1/L$, щоб перевірити асимптотичну поведінку (див. Рис. 5.6 та 5.7) – де подані також найточніші значення для 3D-моделі Ізінга з розведенням вузлів [95]. Випадок $s = 1.7$ є майже ідеальним, як передбачено в 5.3.4 нашим аналізом РГ, і для малих значень L спадає на асимптотичне значення для

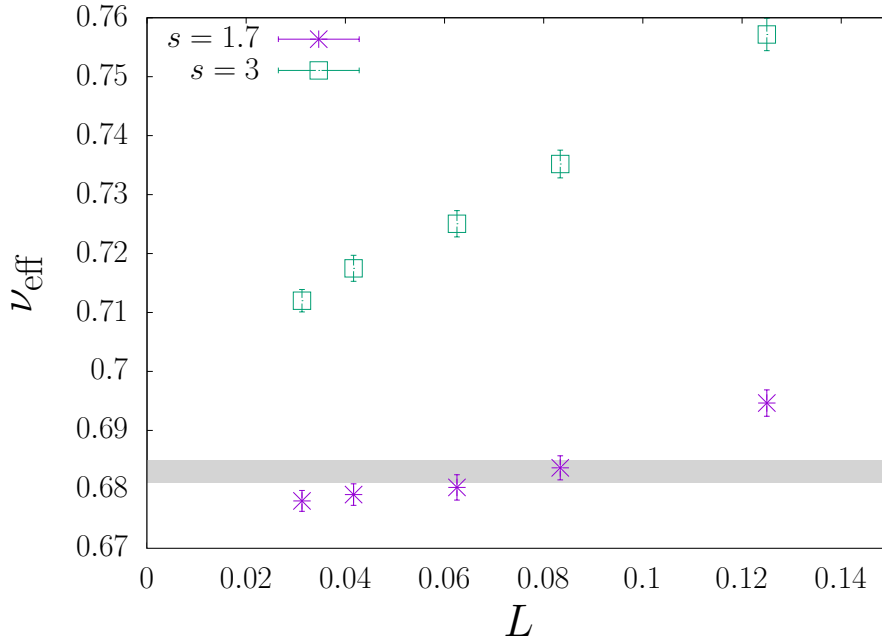


Рис. 5.6. Поведінка ефективного показника $\nu(L)$, обчисленого методом коефіцієнтів, як функції $1/L$ для двох змодельованих випадків $s = 1.7$ і 3.0 . Горизонтальна область тіні є найточнішим значенням із числового моделювання [95] (одне стандартне відхилення).

обох критичних показників. І навпаки, як передбачили наші розрахунки, випадок $s = 3$ демонструє сильніші поправки дл скейлінгу.

Більш кількісний аналіз асимптотичних значень показників ν і η , а також показників поправок до скейлінгу та асимптотичних значень точок перетину R_ξ і U_4 (які також є універсальними) представлені в Таблиці 5.6. Щоб отримати ці асимптотичні значення, ми проаналізували ефективні показники ν і η за допомогою Рів. (5.62) і значення R_ξ , g_2 і U_4 за допомогою Рів. (5.63). У всіх випадках, наведених тут, статистичні властивості різних підгонок дуже добрі (p -значення χ^2 -підгонок більші за 0,05 у всіх випадках). Зокрема, у таблиці 5.6 ми екстраполювали β_c , ν , η , g_2 , R_ξ і U_4 за допомогою підгонки трьох параметрів, тому показник ω не було виправлено, виявивши, що для ω отримуємо значну похибку. Щоб обчислити показник ω , ми проаналізували скейлінг Q_{U_4} (див. Рів. (5.65)).

Остаточні результати для універсальних величин (див. таблицю 5.6) добре узгоджуються (різниця менше ніж 1.8 стандартних відхилень у гіршому випадку) з усіма універсальними величинами 3D моделі Ізінга з розведенням вузлів,

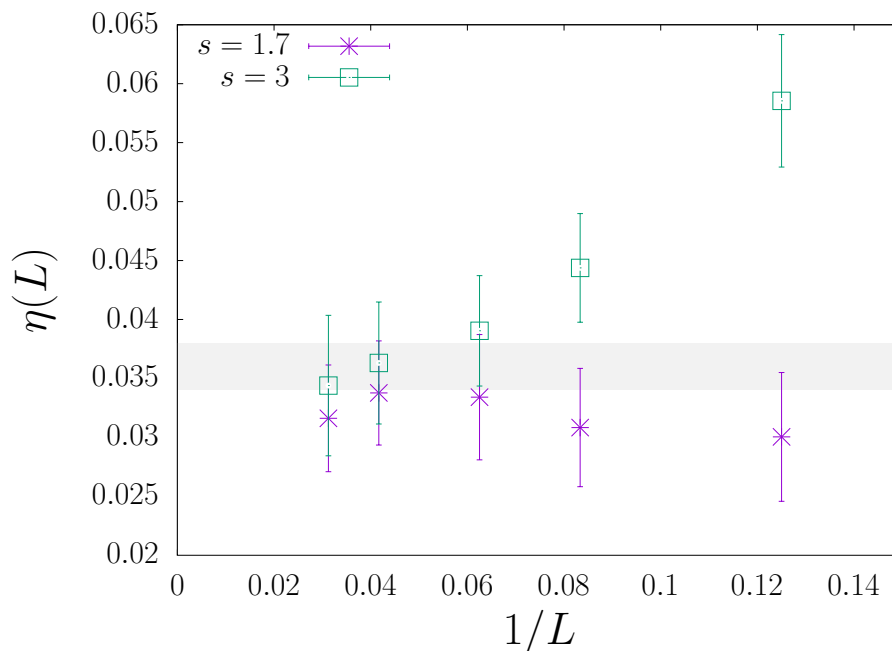


Рис. 5.7. Поведінка ефективного показника $\eta(L)$, обчисленого методом коефіцієнтів, як функції $1/L$ для двох змодельованих випадків $s = 1.7$ і 3.0 . Горизонтальна область тіні є найточнішим значенням із числового моделювання [95] (одне стандартне відхилення).

див. Табл. 5.2. Важливо зауважити, що у випадку $s = 1.7$ ми отримуємо показник поправки до скейлінгу, добре співвідноситься з допоміжним показником тривимірної розведеної моделі Ізінга ($\omega_2 = 0.82(8)$). Однак у $s = 3.0$ -випадку обчислений показник ω_2 співмірний з провідним ($\omega_1 = 0.37(6)$).

Табл. 5.6. Екстрапольовані результати за допомогою методу коефіцієнтів для $s = 1.7$ і $s = 3.0$ у порівнянні з відповідними результатами моделі Ізінга з розведеними вузлами (RIM, [254]).

s	ν	η	ω	R_ξ	U_4	g_2	β_c
1.7	0.678(2)	0.033(7)	0.94(15)	0.5990(8)	0.453(3)	0.138(5)	0.12056(1)
3.0	0.706(6)	0.033(7)	0.31(12)	0.579(8)	0.46(3)	0.13(1)	0.1033(1)
RIM	0.684(5)	0.037(4)	0.37(6)	0.598(4)	0.449(6)	0.145(3)	

5.5. Висновки

Завданням цього розділу було продемонструвати, як безлад у структурі сам по собі, без наявності немагнітної компоненти, може змінити клас універсально-

сті парамагнітно-феромагнітного фазового переходу в одноосьових магнетиках. З іншого боку, було проаналізовано можливі зміни в неуніверсальній ефективній критичній поведінці в таких системах. З цією метою розглянули модель Ізінга з випадковою довжиною спіну, коли довжина L кожного спіна є випадковою величиною, яка керується функцією розподілу $p(L)$ [8, 9].

Цікаво відзначити, що ця модель спочатку була запропонована в контексті соціофізики, де її метою було описати соціальні взаємодії та формування думок між агентами бінарної природи, але з різною силою думок. У розділі розглянуто як використали цю модель для пояснення явища в межах фізики конденсованих систем. Ми показали, що окремі випадки цієї моделі, модель Ізінга з розведенням вузлів і модель Ізінга зі спінами двох різних довжин, описуються ефективними гамільтоніанами (5.25) і (5.28) однакової симетрії, отже, вони належать до одного класу універсальності. Це означає, що їхні асимптотичні критичні показники (5.1) однакові. Однак ефективна критична поведінка цих систем відрізняється. Ми використали теоретико-польовий підхід РГ, щоб описати таку відмінність кількісно. З високою точністю відтворено відомі значення асимптотичних критичних показників у класі універсальності 3d розведеної моделі Ізінга (див. наші результати $\gamma = 1,333$ і $\nu = 0,676$ та результати [219], що наведено в четвертому рядку таблиці 5.1).

Крім того, за межами вузького регіону в околі T_c , можна спостерігати дуже різну ефективну критичну поведінку навіть у межах одного класу універсальності, як ми явно показуємо на Рис. 5.4. Наведені там ефективні критичні показники змінюються в міру наближення до T_c і, строго кажучи, досягають своїх універсальних значень лише при T_c . Зміни значень ефективних показників разом із відстанню до T_c також залежать від початкових умов, що накладаються при розв'язуванні диференціальних рівнянь для потоків РГ. Останнє, у свою чергу, можна пояснити мікроскопічними особливостями магнетика, заданими в нашому випадку концентрацією s і співвідношенням довжин спінів s . Ці особливості заковані у співвідношенні (5.29), яке керує початковими умовами для потоків РГ. Таким чином, реалізована тут схема дозволяє аналізувати ефективну критичну

поведінку структурно неупорядкованих магнетиків.

Ефективні критичні показники досліджують, коли критичну поведінку аналізують за допомогою чисельного моделювання, розглядаючи метод коефіцієнтів [233, 253, 254] як приклад. У цьому методі обчислюється температура $T_c(L)$, при якій безрозмірна спостережувана величина $g(L, T)$ (наприклад, кумулянт Binder, $B(L, T)$ або кореляційна довжина в одиницях розміру ґратки $\xi(L, T)/L$) для двох розмірів ґратки L і $2L$: таким чином, $g(L, T_c(L)) = g(2L, T_c(L))$. Крім того, можна також розглядати скейлінгову спостережувану, яка розходиться в критичній точці як $\mathcal{O}(L, T_c) \sim L^{x/\nu}$, де ν — критичний показник кореляційної довжини. Обчисливши відношення $\mathcal{O}(2L, T_c(L))/\mathcal{O}(L, T_c(L))$ можна записати:

$$\left. \frac{x}{\nu} \right|_{\infty} = \left. \frac{x}{\nu} \right|_{(L, 2L)} + O\left(\frac{1}{L^{\omega}}\right), \quad (5.66)$$

де ω можна ототожнити з провідним нерелевантним власним значенням у підході РГ [233, 234] і

$$\left. \frac{x}{\nu} \right|_{(L, 2L)} \equiv \log_2 \frac{\mathcal{O}(2L, T_c(L))}{\mathcal{O}(L, T_c(L))}, \quad (5.67)$$

який можна використовувати для визначення ефективного критичного показника. Загалом у рівнянні (5.66) з'явиться не лише головне нерелевантне власне значення РГ, ω , але й усі нерелевантні власні значення, тому поведінка ефективного показника не буде монотонною в більшості випадків. Прикладом цієї немонотонної поведінки є тривимірна модель Ізінга з випадковим полем для деяких спостережуваних і різних варіантів випадкового магнітного поля [261]. Насамкінець зауважимо, що теорію скінченно-розміного скейлінгу можна зрозуміти за допомогою РГ-перетворення з параметром РГ ℓ заданим як $\ell = 1/L$ [233].

Таким чином, ми провели аналітичний і числовий аналіз для 3D-моделі Ізінга зі змінною довжиною спіна, надаючи новий погляд на те, як структурний безлад впливає на магнітні фазові переходи. Ми обчислили критичні показники та кумулянти цієї моделі для двох значень параметрів, продемонструвавши узгодженість із критичними показниками та кумулянтами 3D-моделі Ізінга з розведеними вузлами, як передбачалось аналізом РГ.

Крім того, ми виявили, що дві змодельовані моделі, щодо їх скейлінгових поправок, поводяться відповідно до прогнозів теоретико-польового аналізу РГ. Ми розглянули граничний випадок для моделі, коли спіни можуть мати дві різні довжини $\hat{L} = 1$ і $\hat{L} = s$. На основі аналізу РГ для ефективних показників було змодельовано критичну поведінку системи з двома наборами параметрів: $s = 1.7$ (з концентрацією $c = 0.53$) і $s = 3$ (з концентрацією $c = 0.79594$). Аналіз РГ передбачив різну поведінку поправок до скейлінгу. Використовуючи метод коефіцієнтів, ми спостерігали чіткі відмінності в поправках до скейлінгу для кожного випадку. А саме: для довжини спіна $s = 1.7$ отримані значення дуже добре узгоджуються з прогнозованими асимптотичними значеннями для критичних показників, що вказує на мінімальні поправки, тоді як для випадку $s = 3$ з'являються сильні поправки до скейлінгу.

Таким чином моделюванням МС для моделі зі змінною довжиною спіна підтвердило наші попередні теоретичні результати, отримані з теоретико-польових прогнозів РГ [19]. Це в свою чергу приводить до переконливого висновку, що ми можемо створювати нові типи критичної поведінки в неупорядкованих системах, подібних до моделі Ізінга, розглядаючи системи з декількома магнітними компонентами, де довжина спіну та концентрація можуть використовуватися для налаштування критичних властивостей.

Розділ 6

НУЛІ СТАТИСТИЧНОЇ СУМИ У КОМПЛЕКСНІЙ ПЛОЩИНІ У ТЕОРІЇ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ НА МЕРЕЖАХ

В цьому розділі розглянуто тристанову спінову модель Блюма-Капеля (коли спіни можуть набувати значень $(\pm 1; 0)$) і вперше проаналізовано її поведінку на повному графі використовуючи формалізм нулів статистичної суми. Стартуючи із означення та гамільтоніану системи у **підрозділі 6.1** та використовуючи перетворення Стратоновича-Габбарда отримано точне представлення для статистичної суми моделі. Після цього наведено оцінки для фазової діаграми моделі (див. **підрозділ 6.2**). У **підрозділі 6.3** проведено аналіз поведінки нулів Фішера для точного виразу статистичної суми і системи скінченного розміру, здійснено порівняння асимптотик із результатами отриманими раніше для моделі Ізінга на повному графі. У наступному **підрозділі 6.4** здійснено аналіз поведінки нулів для розкладених виразів статистичної суми. Покладаючи комплексні значення для фізичних параметрів – температури, магнітного та кристалічних полів – було отримано координати нулів статистичної суми. Проаналізовано асимптотичну поведінку координат нулів та знайдено асимптотичні показники. Результати досліджень підсумовано у висновках.

За результатами досліджень опубліковано 1 статтю [25], 1 стаття подана до друку та опублікована як препринт [21] та тези конференцій [27, 50].

6.1. Модель: гамільтоніан та статистична сума

Модель Блюма-Капеля є узагальненням моделі Ізінга на випадок, коли спінова змінна може приймати не два (як у моделі Ізінга), а три значення. Спочатку модель була запропонована для пояснення намагніченості в оксиді урану [262], а згодом модифікована для опису фазових переходів першого роду у системах із трьома типами йонів [263]. Гамільтоніан моделі на повному графі:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{l \neq m} S_l S_m + \Delta \sum_l S_l^2 - H \sum_l S_l, \quad S_l = -1, 0, 1, \quad (6.1)$$

де Δ та H – кристалічне та зовнішнє магнітне поле відповідно, суми охоплюють усі N вузлів графу, а шкала енергії фіксується¹, встановлюючи $J = 1$. Ця трирівнева спінова модель має цікаву фазову структуру. Її критична поведінка визначається температурою T , кристалічним полем Δ та магнітним полем H . При відсутності впорядковуючого поля H площина параметрів $\Delta - T$ стає важливим об'єктом дослідження, див. Рис. 6.1. Зокрема, вона включає лінії фазових переходів другого та першого роду, які поєднані трикритичною точкою. Для повного графа трикритична точка розташована в $\Delta_t = 2/3 \ln 2$, $T_t = 1/3$ (див. детальніше Рис. 6.1). На графіку зображено результати для системи скінченних розмірів, як описано більш детально в підрозділі 6.3.

Розгляньмо деякі визначальні граничні області цієї моделі. Площина $T - \Delta$ при $H = 0$ називається *симетричною площиною* [264], і в цьому випадку гамільтоніан має вигляд:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2N} \sum_{l \neq m} S_l S_m + \Delta \sum_l S_l^2. \quad (6.2)$$

- *Границя $T \rightarrow 0$ для $\Delta \geq 0$:* У границі $T \rightarrow 0$ всі спіни заморожені (зафіксовані) в одному з трьох станів -1 , 0 або 1 . Якщо вони всі рівні ± 1 , тоді $\beta \mathcal{H} = \left(-\frac{N-1}{2NT} + \frac{\Delta}{T}\right) N$ (надалі $\beta = 1/T$, тобто стала Больцмана $k_B = 1$ для спрощення). У такому випадку система намагнічена і перебуває в звичайній впорядкованій фазі. Якщо спіни заморожені в стані 0 , система має

¹Множник $1/N$ у взаємодії між спінами необхідний для відновлення екстенсивності енергії, коли всі пари спінів взаємодіють.

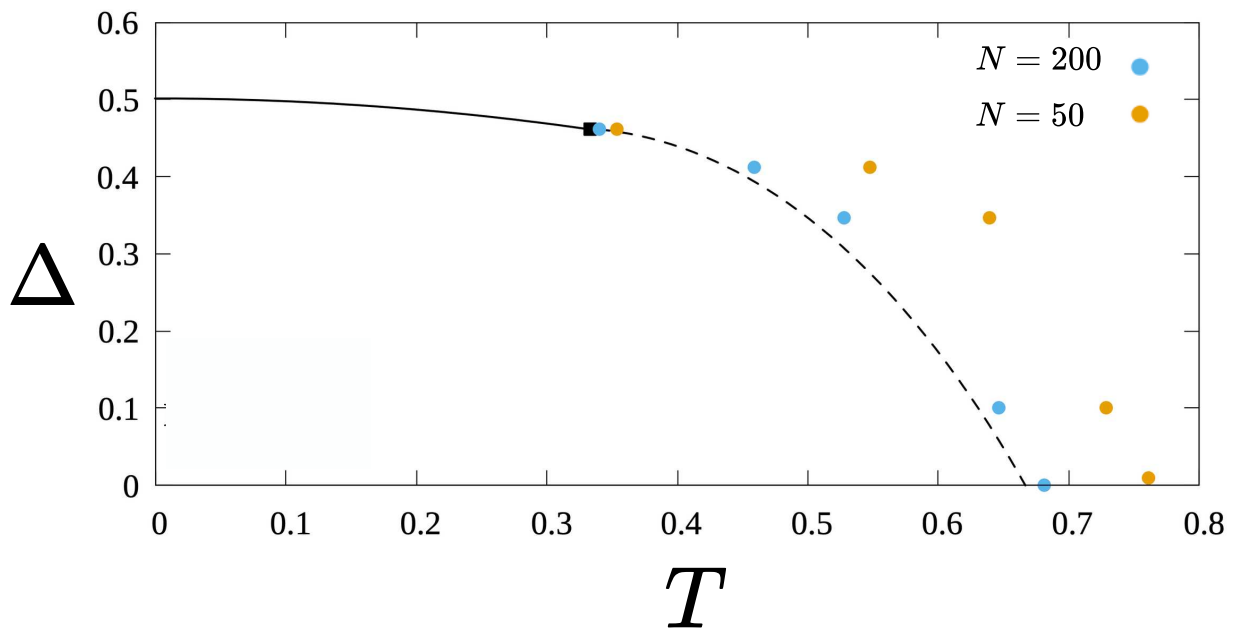


Рис. 6.1. Фазова діаграма моделі Блюма-Капеля на повному графі. Низькотемпературна область і область із малим кристалічним полем є впорядкованою фазою, тоді як із підвищенням температури система стає неупорядкованою. Пунктирна лінія представляє лінію критичних точок, а суцільна лінія — лінію фазових переходів першого роду. Точка їхнього перетину є трикритичною точкою (див. підрозділ 6.3). Кольорові точки праворуч від кривої позначають ефективні точки фазових переходів другого роду для системи скінченного розміру при $N = 50$ та $N = 200$ вузлів, відповідно, отримані в [21] за допомогою аналізу нулів статистичної суми. Як і очікувалося, зі збільшенням кількості вузлів дані наближаються до асимптотичної кривої.

нульову намагніченість (хоча вона перебуває в певному типі впорядкованої фази). Критерій рівних ваг дає, що перехід першого роду відбувається, коли вільні енергії рівні, тобто коли $1/2T - \Delta/T = 0$. Це відбувається при $\Delta = 1/2$ (див. фазову діаграму на рис. 6.1). Фаза з намагніченими станами (± 1) домінує для $\Delta < 1/2$, тоді як фаза з ненамагніченими станами домінує для $\Delta > 1/2$. Щоб побачити це, розглянемо $\Delta = 1/2 + \varepsilon$, для якої $\exp(-\beta\mathcal{H}) = \exp(-\varepsilon\Delta/T)$. Якщо $\varepsilon > 0$, ненульові стани зникають, так що $S_i = 0$ домінує, і навпаки для $\varepsilon < 0$.

- *Границя $\Delta = 0$:* У цьому випадку ми маємо трирівневу модель Ізінга, де всі

три стани спінів є однаково можливими. Критична точка в цьому випадку розташована при температурі $T = 2/3$.

- *Границя $\Delta \rightarrow -\infty$ при фіксованому T :* У цьому випадку $\exp(-\beta\mathcal{H}) = \exp(+\infty \sum S_i^2)$, тож зберігаються лише значення $S_i = \pm 1$. Це чиста (дво-станова) модель Ізінга з критичною температурою $T = 1$.
- *Границя $T \rightarrow \infty$ (або $J \rightarrow 0$) при фіксованому Δ/T :* У цьому випадку маємо N незалежних спінів, тому статистична сума факторизується на N незалежних статистичних сум, одну для кожного спіну. Тобто, $Z = z_i^N$, де $z_i = 2e^{-\Delta/T} + 1$. Умова рівних ваг, застосована до кожного з них, дає псевдопереход при $\exp(\Delta/T) = 1/2$ або $\Delta = T \ln 2$.

Щоб отримати інтегральне представлення для статистичної суми моделі (6.1), ми використовуємо рівність $(\sum_l S_l)^2 = \sum_l S_l^2 + \sum_{l \neq m} S_l S_m$ для факторизації N -частинкової статистичної суми:

$$Z_N(T, \Delta, H) = \text{Sp } e^{-\mathcal{H}/T} = \prod_{l=1}^N \sum_{S_l=\pm 1, 0} \exp \left(\frac{1}{2TN} (\sum_l S_l)^2 - \frac{1}{T} \sum_l S_l^2 \left(\frac{1}{2N} + \Delta \right) + \frac{H}{T} \sum_l S_l \right). \quad (6.3)$$

Застосовуючи перетворення Стратоновича-Габбарда, ми виражаємо статистичну суму в такій формі, де сумування за S_l можна виконати точно. Врешті-решт, отримуємо наступне інтегральне представлення для статистичної суми моделі Блюма-Капеля на повному графі:

$$Z_N(T, \Delta, H) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(\frac{-Nx^2}{2T} + N \ln(1 + 2e^{-(\frac{1}{2N} + \Delta)/T} \cosh[(x + H)/T]) \right) dx. \quad (6.4)$$

Тут і нижче ми опускаємо множники, які не мають значення для подальшого аналізу. Оскільки інтегральне представлення виразу (6.4) для статистичної суми є точним, його можна аналізувати для будь-якого скінченного значення N , а також у термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$. У останньому випадку інтеграл береться методом найшвидшого спуску, і його поведінка аналізується детальніше

в наступному підрозділі 6.3. Для оцінки його поведінки для скінченного N ми скористаємося аналізом нулів статистичної суми.

6.2. Фазова діаграма моделі Блюма-Капеля на повному графі

Більш детально розглянемо фазову діаграму моделі Блюма-Капеля на повному графі в термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$. Розглянемо інтегральне представлення для статистичної суми, рівняння (6.4):

$$Z_N(T, \Delta, H) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-NF(T, \Delta, H, x) \right) dx, \quad (6.5)$$

де вираз у показнику експоненційної функції при $H = 0$ виглядає так:

$$F(T, \Delta, x) = \frac{x^2}{2T} - \ln(1 + 2e^{-\Delta/T} \cosh[x/T]). \quad (6.6)$$

У термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ основний внесок у інтеграл (6.5) походить від глобального мінімуму $F(T, \Delta, x)$ як функції x . У свою чергу, положення мінімуму визначається парою змінних (T, Δ) . Залежно від їх значень спостерігаються різні типи поведінки, як показано на Рис. 6.2. Для низьких температур $T < 1/3$ функція F має два симетричних мінімуми при малих значеннях Δ (синя крива на Рис. 6.2а). Зі збільшенням Δ функція набуває специфічної форми з трьома мінімумами, і всі мінімуми досягають однакового значення при певному Δ , як показано зеленою кривою на Рис. 6.2а. Тоді як лише один мінімум зберігається при $x = 0$ для великих значень Δ (червона крива на Рис. 6.2а). Цей сценарій змінюється для проміжної області температур $1/3 < T \leq 2/3$, як показано на Рис. 6.2с. Тут форма функції $F(x)$ з двома мінімумами при малих значеннях Δ (синя крива) перетворюється на форму із одним мінімумом зі збільшенням Δ (червона крива), минаючи поведінку із трьома мінімумами. Перехід між двома режимами відбувається при певному значенні Δ , як показано зеленою кривою на Рис. 6.2б. Нарешті, для $T > 2/3$ спостерігається лише один мінімум для $F(x)$ при будь-якому значенні Δ . Очевидно, що сценарії, що спостерігаються при $T < 1/3$ та при

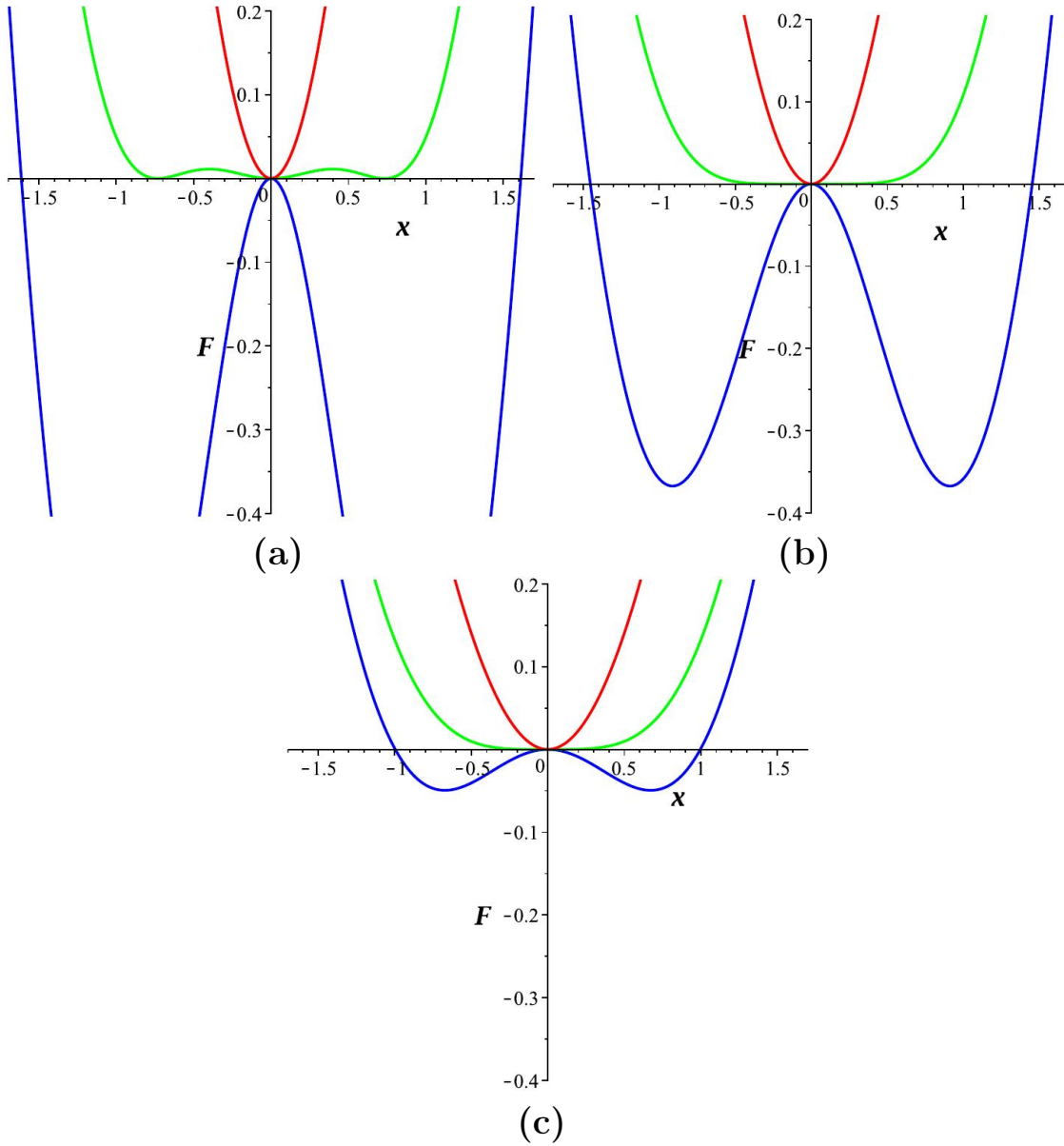


Рис. 6.2. Поведінка функції $F(T, \Delta, x)$ (6.6) від x при (а) $T = 1/4$, (б) $T = T_t = 1/3$, (с) $T = 1/2$ та різних значеннях Δ . На всіх рисунках сині і червоні криві відповідають $\Delta = 0.1$ та $\Delta = 1$. Зелена крива відповідає режиму фазового переходу першого роду при $T = 1/4$, $\Delta = 0.4762658366$ (а), трикритичній точці при $T = T_t = 1/3$, $\Delta = \Delta_t = (2 \ln 2)/3 = 0.4620981204$ (б) та режиму фазового переходу при $T = 1/2$, $\Delta = 0.3465735903$ (с). Точка відліку для F зміщена на $\ln(1 + 2e^{-\Delta/T})$.

$1/3 < T \leq 2/3$, описують перехід першого та другого роду відповідно, тоді як специфічний випадок, коли ці два сценарії зливаються при $T = T_t = 1/3$, описує точку трикритичності при $\Delta = \Delta_t = (2 \ln 2)/3$, як показано зеленою кривою на Рис. 6.2б.

Ненульові мінімуми функції $F(T, \Delta, x)$, що відповідають фазовому переходу

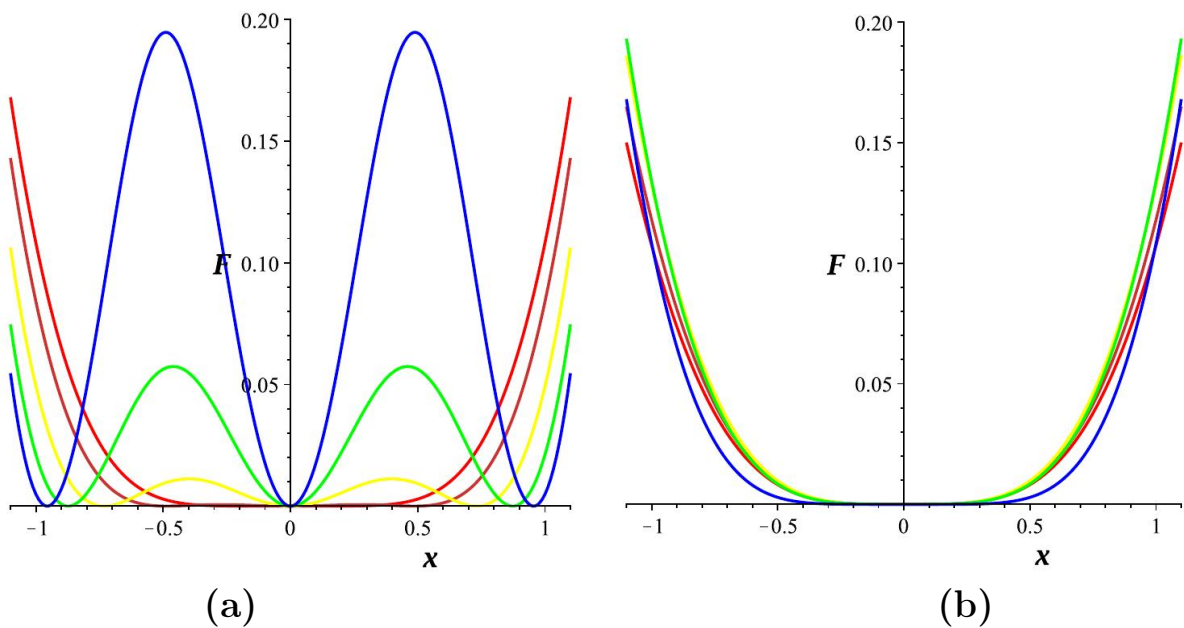


Рис. 6.3. **(а)** Поведінка функції $F(T, \Delta, x)$ (6.6) щодо x у трикритичній точці $(T, \Delta) = (1/3, (2 \ln(2))/3)$ (червона крива) та в кількох точках вздовж лінії першого порядку фазового переходу. $(T, \Delta) = (0.3, 0.4667635075)$, $(0.25, 0.4762658366)$, $(0.2, 0.4867012711)$, $(0.15, 0.4951587768)$, помаранчева, жовта, зелена, синя лінії, відповідно. **(б)** Поведінка $F(T, \Delta, x)$ (6.6) як функції від x у трикритичній точці $(T_t, \Delta_t) = (1/3, (2 \ln(2))/3)$ (синя крива) та в кількох точках вздовж лінії фазового переходу другого порядку: $(T, \Delta) = (2/3, 0)$, $(0.6, 0.1726092438)$, $(0.5, 0.3465735903)$, $(0.4, 0.4394449155)$, червона, помаранчева, жовта, зелена лінії, відповідно. Точка відліку для F зміщена на $\ln(1 + 2e^{-\Delta/T})$.

першого роду (див. зелену криву на Рис. 6.2а), задовольняють систему рівнянь:

$$F(T, \Delta, x) - F(T, \Delta, 0) = 0, \quad \partial F(T, \Delta, x) / \partial x = 0. \quad (6.7)$$

Для будь-якого фіксованого значення T (Δ) ця система рівнянь визначає значення Δ (T), при якому відбувається фазовий перехід першого роду. Функція $F(T, \Delta, x)$ при фазовому переході першого роду для кількох пар T, Δ показана на Рис. 6.3. Спостерігається, що перехід стає різкішим при зменшенні T . Розв'язуючи рівняння (6.7), отримуємо лінію фазових переходів першого роду $\Delta(T)$, яка закінчується в трикритичній точці (T_t, Δ_t) . Цю лінію показано на Рис. 6.4 синіми ромбами (відповідно чорна суцільна крива на Рис. 6.1), а координати (T, Δ) для кількох точок вздовж лінії переходу першого роду наведено в таблиці 6.1.

У режимі фазового переходу другого роду при $T > T_t$ мінімум функції

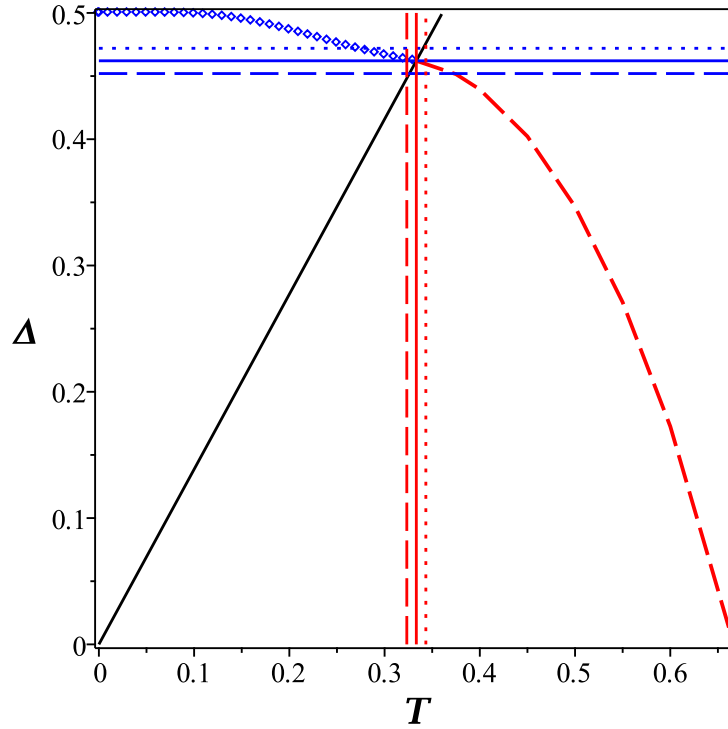


Рис. 6.4. Фазова діаграма моделі Блюма-Капеля, що випливає з аналізу функції $F(T, \Delta, x)$ (6.6). Сині ромби: лінія фазового переходу першого роду, червона пунктирна лінія: лінія фазового переходу другого роду. Обидві лінії перетинаються в трикритичній точці $(T_t, \Delta_t) = (1/3, (2 \ln(2))/3)$. Горизонтальні та вертикальні лінії ілюструють підхід до фазового переходу, який ми збираємось проаналізувати. Чорна лінія задана рівнянням (6.10), похідна $\partial^4 F(T, \Delta, x)/\partial x^4$ занулюється вздовж цієї лінії. Слід зауважити, що $\partial^2 F(T, \Delta, x)/\partial x^2$ занулюється вздовж лінії фазового переходу другого роду (найправіша червона пунктирна частина фазової діаграми).

Табл. 6.1. Координати (T, Δ) кількох точок вздовж лінії фазового переходу першого роду, див. Рис. 6.1, 6.4.

T	0	0.05	0.1	0.2	0.3	0.32
Δ	1/2	0.4999977309	0.4993435185	0.4867012711	0.4667635075	0.4624864590

$F(T, \Delta, x)$ на точці переходу (див. зелену криву на Рис. 6.2с) задовольняє рівняння:

$$\frac{\partial^2 F(T, \Delta, x)}{\partial x^2} = 0, . \quad (6.8)$$

З цього рівняння можна отримати значення параметрів, що характеризують лінію фазового переходу другого роду $\Delta(T)$, показану чорним пунктиром на Рис.

6.1 та червоним пунктиром на Рис. 6.4. З врахуванням явного виразу для функції $F(T, \Delta, x)$ та беручи до уваги, що похідна в рівнянні (6.8) обчислюється в екстремумі при $x = 0$, отримуємо таке рівняння для лінії фазового переходу другого роду:

$$T(e^{\Delta/T} + 2) = 2. \quad (6.9)$$

Координати (T, Δ) кількох точок вздовж цієї лінії наведені в таблиці 6.2. Лінія закінчується в критичній точці моделі Ізінга при $S = 1$: $(T, \Delta) = (2/3, 0)$. Лінії фазових переходів другого і першого роду зустрічаються в трикритичній точці $(T_t, \Delta_t) = (1/3, (2\ln(2))/3)$. Поведінка функції $F(T, \Delta, x)$ як функції x в трикритичній точці (T_t, Δ_t) показана на Рис. 6.3a червоною лінією і на Рис. 6.3b синьою лінією.

Табл. 6.2. Координати (T, Δ) кількох точок вздовж ліній фазового переходу другого роду, чорні та червоні пунктирні лінії на Рис. 6.1, 6.4, відповідно.

T	0.34	0.4	0.5	0.6	0.66	2/3
Δ	0.4611900752	0.4394449155	0.3465735903	0.1726092438	0.01970295557	0

У трикритичній точці як друга, так і четверта похідна функції $F(T, \Delta, x)$ за x зануляються. Отже, цю точку можна також визначити як точку перетину двох ліній: одну, визначену з умови (6.8), що задається функцією (6.9), іншу — визначену умовою

$$\partial^4 F(T, \Delta, x) / \partial x^4 = 0. \quad (6.10)$$

Розв'язуючи Рів. (6.10) отримуємо:

$$\Delta = 2T \ln 2. \quad (6.11)$$

Ця лінія показана на Рис. 6.4 чорним кольором. У наступних підрозділах представлені дослідження нулів статистичної суми для скінченних значень числа вузлів N , коли фазовий перехід наближається до $T = T_t$ або $\Delta = \Delta_t$ (червоні та сині суцільні лінії на Рис. 6.4), а також в околі трикритичної точки (переміщення

уздовж пунктирних ліній, зображених на Рис.6.4) та лінії фазового переходу другого роду, Рів. (6.9). Для вивчення ефективної критичної та трикритичної поведінки систем скінченного розміру будемо опиратися на аналіз нулів статистичної суми. Нижче наведено результати дослідження поведінки нулів статистичної суми в різних областях комплексних параметрів. Ми розглянемо перехід між різними режимами та скейлінгу з розміром системи N . Зокрема, ми дослідимо нулі статистичної суми (нулі Фішера, кристалічного поля та Лі-Янга) поблизу критичної точки, критичної лінії та трикритичної точки.

6.3. Аналіз нулів для точного представлення статистичної суми

У цьому підрозділі для дослідження використовується точний вираз для статистичної суми (6.4) і розглядається поведінка в околі критичної точки в площині комплексної температури. Аналізуються характеристики нулів чисельно для різних розмірів системи та проводиться порівняння із результатами для моделі Ізінга на повному графі. Очікувана скейлінгова поведінка не була повністю досягнута. Тому подальший аналіз (див. підрозділ 6.4) стосувався виразів для розкладеного представлення статистичної суми, що дозволило отримати асимптотично точні результати.

6.3.1. Нулі Фішера для моделі Блюма-Капеля на повному графі

Підставляючи $T = \text{Re}T + i\text{Im}T$ у статистичну суму при нульовому магнітному полі, отримуємо:

$$Z_N(T_R + iT_I, \Delta, H = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-N \left[\frac{(T_R + iT_I)x^2}{2} - \ln(1 + 2e^{-(\frac{1}{2N} + \Delta)/(T_R + iT_I)} \cosh x) \right] \right) dx. \quad (6.12)$$

Нас цікавлять одночасні розв'язки системи рівнянь:

$$\text{Re}Z_N(T_R + iT_I, \Delta, H = 0) = 0 \quad \text{та} \quad \text{Im}Z_N(T_R + iT_I, \Delta, H = 0) = 0. \quad (6.13)$$

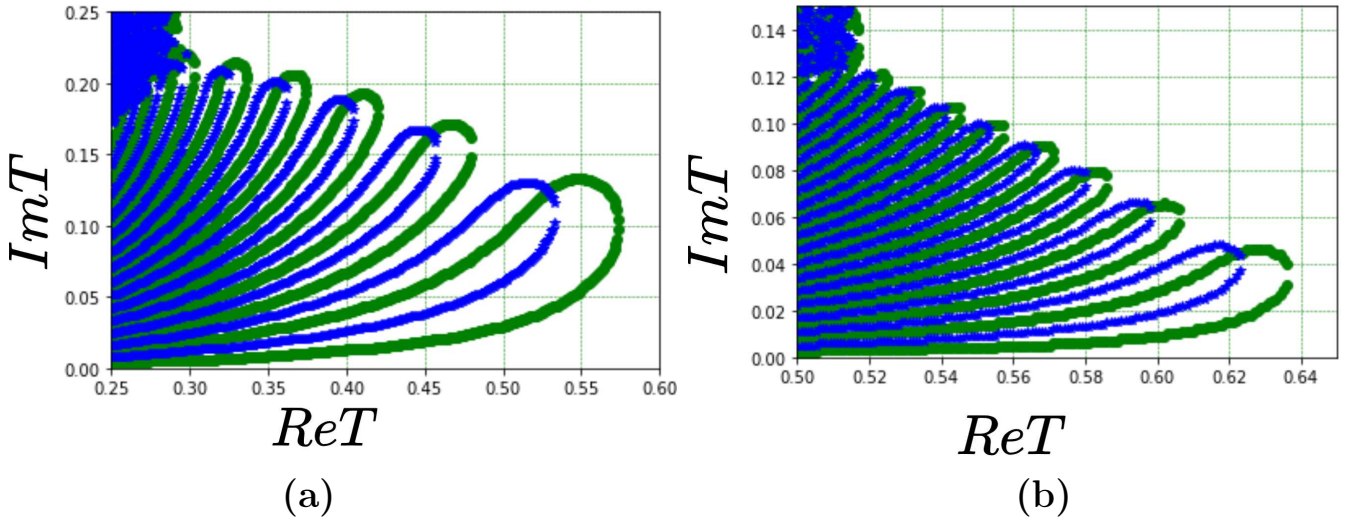


Рис. 6.5. Нулі Фішера (модель Блюме-Капеля): розв'язок системи рівнянь (6.15)-(6.16) ($\text{Re}, Z_N(T_R + iT_I, \Delta = 0, H = 0) = 0$ (пурпурні криві) та $\text{Im}, Z_N(T_R + iT_I, \Delta = 0, H = 0) = 0$ (зелені криві)) в комплексній площині температури при (а) $N = 50$ і (б) 500 для статистичної суми (6.14). Фішерові нулі отримуються шляхом пошуку перетинів зелених і пурпурних кривих.

Нижче у підрозділі наведено деталі дослідження нулів заданої статистичної суми (або перетини кривих, описаних вище рівняннями) в околі критичної точки: $T_c = 2/3$ ($\Delta_c = H_c = 0$).

Для простоти можна проаналізувати перші нулі для функції, заданої рівнянням (6.18) при $\Delta = H = 0$:

$$Z_N(T, \Delta = 0, H = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-N \left(\frac{x^2 T}{2} - \ln(1 + 2 \cosh(x)) \right) \right] dx, \quad (6.14)$$

Можливо аналітично розділити дійсні та уявні частини статистичної суми при комплексній температурі $T = T_r + iT_i$, коли знаходження нулів еквівалентно розв'язуванню системи рівнянь (див. Рис. 6.5):

$$\text{Re} Z_N = 0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-N \left(\frac{x^2 T_r}{2} - \ln(1 + 2 \cosh(x)) \right) \right] \cos \left(\frac{N x^2 T_i}{2} \right) dx, \quad (6.15)$$

$$\text{Im} Z_N = 0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-N \left(\frac{x^2 T_r}{2} - \ln(1 + 2 \cosh(x)) \right) \right] \sin \left(\frac{N x^2 T_i}{2} \right) dx. \quad (6.16)$$

Табл. 6.3. Модель Блюма-Капеля: чисельно отримані координати для перших $j = 1, \dots, 5$ нулів Фішера в околі критичної точки для статистичної суми (6.14) при різних значеннях N (оцінка похибки координат — 10^{-4}). У останніх рядках наведені оцінки для кута φ і для критичної температури T_c для кожного N . Очікувані значення: $\varphi = \pi/4$, $\tan \varphi = 1$ і $T_c = 2/3 = 0.666(6)$.

j	$N = 50$	$N = 100$	$N = 200$
1	$0.5287 + i0.1250$	$0.5685 + i0.0935$	$0.5969 + i0.0688$
2	$0.4536 + i0.1651$	$0.5146 + i0.1285$	$0.5586 + i0.0970$
3	$0.4003 + i0.1874$	$0.4757 + i0.1506$	$0.5307 + i0.1160$
4	$0.3577 + i0.2008$	$0.4440 + i0.1663$	$0.5077 + i0.1304$
5	$0.3218 + i0.2094$	$0.4167 + i0.1790$	$0.4879 + i0.1420$
$\tan \varphi$	0.4103(98)	0.5635(47)	0.6728(26)
T_c	0.8452	0.7387	0.7011
j	$N = 300$	$N = 400$	$N = 500$
1	$0.6096 + i0.0572$	$0.6172 + i0.0500$	$0.6224 + i0.0450$
2	$0.5782 + i0.0814$	$0.5900 + i0.0717$	$0.5980 + i0.0648$
3	$0.5553 + i0.0983$	$0.5701 + i0.0868$	$0.5802 + i0.0787$
4	$0.5365 + i0.1112$	$0.5538 + i0.0987$	$0.5655 + i0.0898$
5	$0.5201 + i0.1218$	$0.5396 + i0.1085$	$0.5528 + i0.0991$
$\tan \varphi$	0.7238(18)	0.7551(13)	0.7779(9)
T_c	0.6898	0.6842	0.6808

На рис. 6.5 показано розв'язок системи рівнянь (6.15)-(6.16) в площині комплексної температури. Графіки описують поведінку для малого ($N = 50$) та великого N ($N = 500$) розміру системи. Легко помітити, що з ростом розміру системи кут конденсації нулів Фішера збільшується. Те ж саме стосується і наближення до критичної температури ($T_c = 2/3$): чим більший розмір системи, тим кращі результати підгонки ми отримуємо (див. таблицю 6.3 для більш детальної інформації або рис. 6.5). Очікуваний кут — $\varphi = \pi/4$. Спостережуваний кут для $N = 50$ становить $\sim \pi/8$, для $N = 500$ — $\varphi \sim \pi/6$, а для більших N числові похибки стають занадто великими.

6.3.2. Нулі Фішера для моделі Ізінга на повному графі

Для порівняння також неведемо статистичну суму моделі Ізінга на повному графі:

$$Z_N^{Ising}(T, H = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-N \left(\frac{x^2 T}{2} - \ln(\cosh(x)) \right) \right] dx. \quad (6.17)$$

Координати перших нулів для системи різного розміру наведено у таблиці 6.4.

Табл. 6.4. Модель Ізінга на повному графі: чисельно отримані координати для перших $j = 1, \dots, 5$ нулів Фішера для статистичної суми (6.17) за різними значеннями N (оцінка похибки координат $\sim 10^{-4}$). В останньому рядку наведені оцінки для тангенса кута впливу φ та критичної температури T_c для кожного значення N . Очікувані значення: $\varphi = \pi/4$, $\tan \varphi = 1$ та $T_c = 1$.

j	$N = 50$	$N = 100$	$N = 200$	$N = 300$
1	$0.7611 + i0.2132$	$0.8300 + i0.1605$	$0.8793 + i0.1184$	$0.9012 + i0.0985$
2	$0.6308 + i0.2785$	$0.7366 + i0.2189$	$0.8128 + i0.1662$	$0.8468 + i0.1399$
3	$0.5383 + i0.3124$	$0.6691 + i0.2549$	$0.7644 + i0.1979$	$0.8072 + i0.1681$
4	$0.4642 + i0.3311$	$0.6141 + i0.2800$	$0.7246 + i0.2218$	$0.7745 + i0.1899$
5	$0.4018 + i0.3407$	$0.5668 + i0.2983$	$0.6902 + i0.2408$	$0.7461 + i0.2077$
$\tan \varphi$	0.3580(197)	0.5256(99)	0.6486(50)	0.7053(33)
T_c	1.3838	1.1448	1.0657	1.0432
j	$N = 500$	$N = 1000$	$N = 2000$	$N = 4000$
1	$0.9234 + i0.0777$	$0.9457 + i0.0560$	$0.9616 + i0.0401$	$0.9728 + i0.0286$
2	$0.8812 + i0.1116$	$0.9158 + i0.0812$	$0.9405 + i0.0587$	$0.9579 + i0.0421$
3	$0.8504 + i0.1353$	$0.8940 + i0.0994$	$0.9250 + i0.0721$	$0.9469 + i0.0519$
4	$0.8248 + i0.1540$	$0.8759 + i0.1139$	$0.9122 + i0.0830$	$0.9379 + i0.060$
5	$0.8027 + i0.1696$	$0.8602 + i0.1262$	$0.9010 + i0.0924$	$0.9300 + i0.0670$
$\tan \varphi$	0.7622(19)	0.8224(8)	0.8633(4)	0.8972(1)
T_c	1.0266	1.0143	1.0083	1.0047

6.3.3. Порівняння скейлінгу нулів

У наведених таблицях ми зібрали координати нулів Фішера. На їх основі можна обчислити асимптотики і скейлінг не лише для першого нуля, але і комбінації

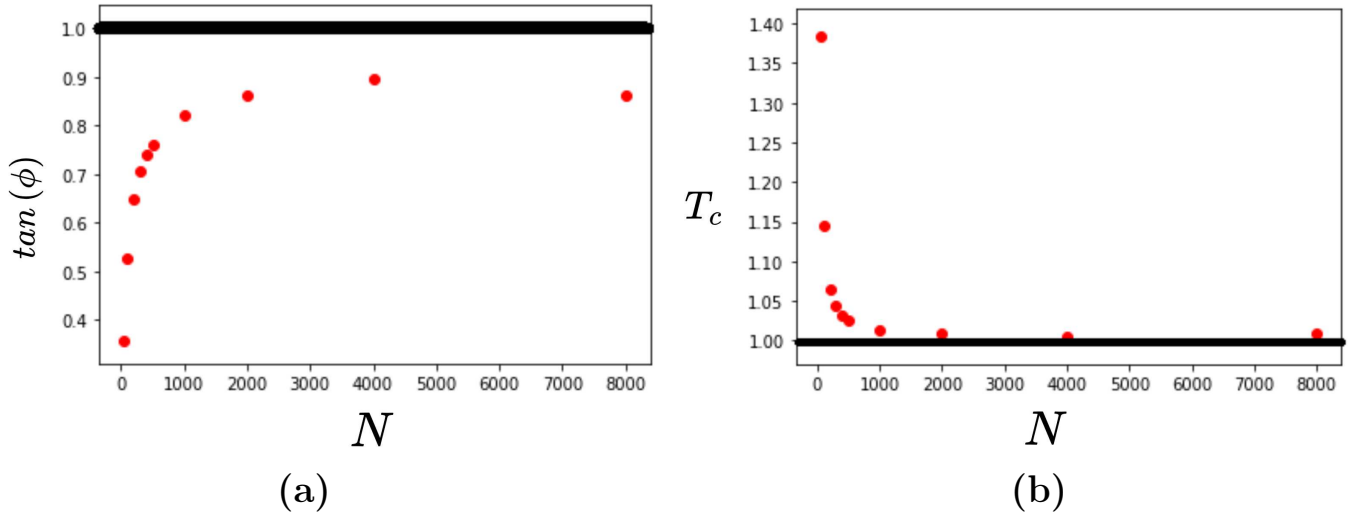


Рис. 6.6. Результати аналізу координат нулів Фішера $S = 1$ моделі Ізінга на повному графі. Залежність кута конденсації нулів φ та критичної температури T_c від N (очікувані значення $\tan \varphi = 1$, $T_c = 1$). Нулі отримані зі статистичної суми (6.17) для різних значень N . Примітки: $\arctan(0.9) \sim 42^\circ$, $\arctan(0.8) \sim 38.7^\circ$, $\arctan(0.4) \sim 22^\circ$. Очікувані значення позначені чорними кривими на кожному графіку.

нулів. Очікуваний скейлінг для координат нулів Фішера за j та N визначається рівнянням (1.4): $T \sim (\frac{j}{N})^{1/2}$, і ми перевіряємо це нижче (див. Рис. 6.6 та 6.7). Кут конденсації нулів розраховувався за координатами перших п'яти нулів. З аналізу можна зробити висновок, що скейлінг є кращим для перших нулів (ближчих до критичної точки).

Також, чим більший розмір системи, тим менші флуктуації, і більше нулів статистичної суми можна отримати з тим самим інтервалом похибок (5 нулів Фішера для $N = 50$ і 8 нулів для $N = 500$). Після $N = 500$ числові похибки стають занадто великими (інтеграл флуктує), тому ми повинні припинити обчислення. Очікуваний кут $\varphi = \pi/4$ не досягається, найкращий кут для конденсації нулів Фішера, який ми отримуємо, це $\sim \arctan(0.8) \sim 38.7^\circ$ при $N = 500$. Однак це непоганий результат. Для порівняння, для точного аналізу статистичної суми для моделі Ізінга на повному графі в критичній точці² найкраще значення, яке ми отримуємо для $N = 4000$, це $\arctan(0.9) \sim 42^\circ$. Пізніше ми покажемо, що робота з

²Тут для моделі Ізінга наведено результати які можна отримати із аналізу точних виразів для статистичної суми, яку були отримані у [115, 116].

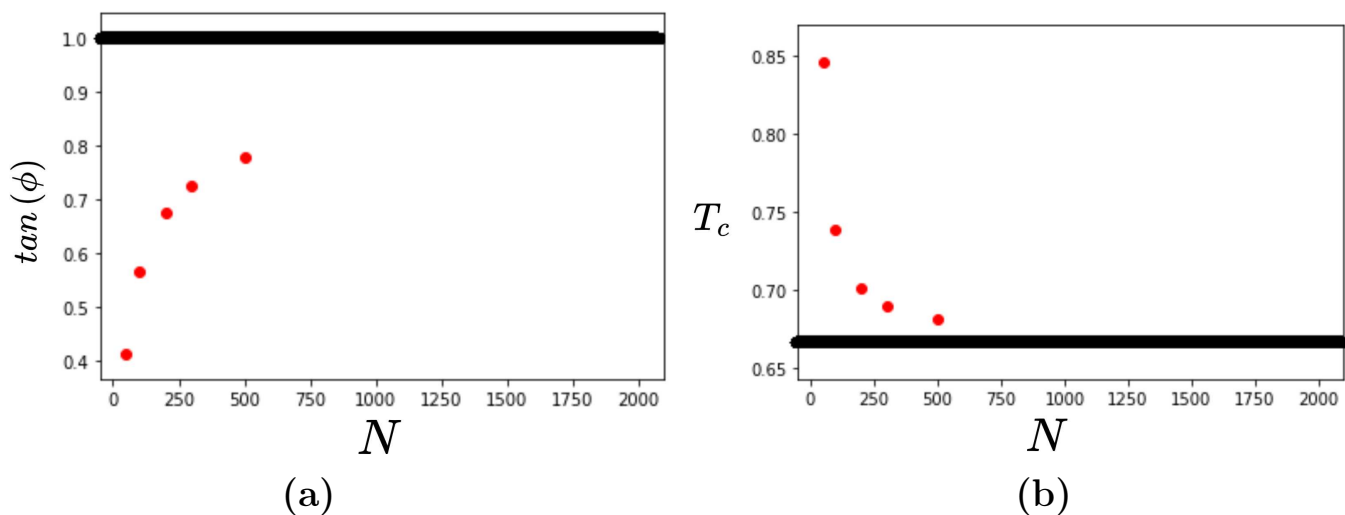


Рис. 6.7. Результати аналізу координат нулів Фішера $S = 1$ моделі Блюма-Капеля на повному графі. Залежність кута конденсації нулів φ та критичної температури T_c від N (очікувані значення $\tan \varphi = 1$, $T_c = 2/3$) Нулі отримані зі статистичної суми (6.14) для різних значень N , що наведені в таблиці 6.3. Примітки: $\arctan(0.9) \sim 42^\circ$, $\arctan(0.8) \sim 38.7^\circ$, $\arctan(0.4) \sim 22^\circ$. Очікувані значення позначені чорними кривими на кожному графіку.

розкладеною статистичною сумою дає ще точніші асимптотичні результати. Для значення критичної температури ми спостерігали набагато кращий скейлінг та наближення до очікуваного значення при великих N . Перетини ліній, де дійсна та уявна частини статистичної суми стають рівні нулеві, чітко видно навіть при малих N . Однак скейлінгові асимптотики для кінцевих розмірів системи ще не досягли очікуваних значень. Ми очікуємо, що з підвищенням розміру системи N перший нуль Фішера матиме асимптотику $T_1 \sim N^{1/2}$, проте ми спостерігаємо $T_1 \sim N^{0.44}$ для всіх розмірів системи, та $T_1 \sim N^{0.46}$, коли враховуються лише найбільші розміри графа.

У таблицях 6.5 та 6.6 наведені результати скейлінгу кута та критичної температури для різної комбінації нулів для моделі Блюма-Капеля та моделі Ізінга на повному графі. Кут конденсації нулів $\varphi_{i,j}$ розраховувався як кут нахилу прямої проведеної через нулі i -того та j -того порядку, відповідно.

N	$\tan \varphi_{0,1}$	$\tan \varphi_{0,5}$	$T_c(j_{1-5})$	$\tan \varphi_{1-5}$
50	0.9060	0.6072	0.8452	0.4103(98)
100	0.9525	0.71610	0.7387	0.5635(47)
200	0.9861	0.7943	0.7011	0.6728(26)
300	1.0023	0.8310	0.6898	0.7238(18)
400	1.0108	0.8539	0.6842	0.7551(13)
500	1.0165	0.87032	0.6808	0.7779(9)

Табл. 6.5. T_c та $\tan \varphi_{i,j}$ (i, j — порядок нулів) отримані в результаті аналізу нулів Фішера для статистичної суми (6.14) моделі Блюма-Капеля на повному графі за різними значеннями N . Очікувані значення: $\varphi = \pi/4$, $\tan \varphi = 1$ та $T_c = 2/3$.

N	$\tan \varphi_{0,1}$	$\tan \varphi_{0,5}$	$T_c(j_{1-5})$	$\tan \varphi_{1-5}$
50	0.8924	0.5695	1.3838	0.3580(197)
100	0.9441	0.6886	1.1448	0.5256(99)
200	0.9809	0.7773	1.0657	0.6486(50)
300	0.9970	0.8180	1.0432	0.7053(33)
400	1.0070	0.8429	1.0325	0.7396(24)
500	1.0144	0.8596	1.0266	0.7622(19)

Табл. 6.6. T_c та $\tan \varphi_{i,j}$ (i, j — порядок нулів) отримані в результаті аналізу нулів Фішера для статистичної суми (6.17) моделі Ізінга на повному графі за різними значеннями N . Очікувані значення: $\varphi = \pi/4$, $\tan \varphi = 1$ та $T_c = 1$.

6.4. Аналіз нулів для розкладених виразів статистичної суми

У цьому підрозділі наводиться короткий аналіз нулів для розкладених виразів статистичної суми та порівнюються результати з тими, що отримані для точного представлення.

6.4.1. Нулі Фішера та нулі кристалічного поля

У попередньому підрозділі при аналізі точних виразів статистичної суми було показано, що нулі Фішера в околі критичної точки добре визначені навіть для малих розмірів системи. Однак очікуваний скейлінг ($t \sim N^{0.5}$) для перших

нулів Фішера не було досягнуто — найкращий результат був $t \sim N^{0.44}$. Попри симетричність площини $T - \Delta$ у критичній точці, нулі кристалічного поля не є добре визначеними. У цьому підрозділі буде показано, що у випадку аналізу розкладених виразів для статистичної суми (аналогічно тому, як це було зроблено в [120]) ми здатні отримати чітку картину нулів статистичної суми в критичній точці та досягти хороших асимптотик для скейлінгу координат нулів, а також спостерігаємо хорошу узгодженість кута конденсції нулів φ з його очікуваним значенням $\pi/4$ в околі критичної точки та лінії.

Оскільки навіть для відносно малих розмірів системи доданком порядку $O(1/N)$ у показниковій частині точного виразу статистичної суми (6.4), можна знехтувати змінивши змінні $x = x/T$, ми отримуємо наступне інтегральне представлення для статистичної суми, яке враховує провідні внески за N :

$$Z'_N(T, \Delta, H) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(- N F'(T, \Delta, H, x) \right) dx, \quad (6.18)$$

де $F'(T, \Delta, H, x)$:

$$F'(T, \Delta, x) = \frac{x^2 T}{2} - \ln(1 + 2e^{-\Delta/T} \cosh[x + H/T]). \quad (6.19)$$

Нулі Фішера: $T = T_r + iT_i$

Для аналізу нулів Фішера ми розкладаємо функцію в експоненті у рівнянні (6.18) при малих значеннях x , а потім здійснюємо другий розклад (фіксуємо кристалічне поле і розкладаємо в околиці T). Для виразу з провідною асимптикою поблизу критичної точки та знехтувавши константами, отримуємо:

$$Z_N^{expand}(\Delta = H = 0, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(- N \left[\frac{x^2}{2} \left(T - \frac{2}{3} \right) + \frac{x^4}{36} + \dots \right] \right) dx, \quad (6.20)$$

Змінивши змінні та залишаючи два провідні члени можна переписати статистичну суму (6.20) в узагальненій формі (так само, як для моделі Ізінга на

повному графі) [115, 116]):

$$Z^{\text{expand}}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-zx^2 - x^4\right) dx, \quad z = (T - T_c)\sqrt{3N}, \quad T_c = \frac{2}{3}. \quad (6.21)$$

Аналогічно, розглядаючи розкладену статистичну суму поблизу критичної лінії, ми розкладаємо функцію в експоненті у рівнянні (6.18) при малих значеннях x , фіксуючи значення Δ_{line} з критичної лінії, а потім здійснюємо другий розклад в околі точки T_{line} для пари точок Δ_{line} . Наприклад, розглянемо випадок: $\Delta_{line} = 0.4261302839$, $T_{line} = 0.4207825128$ (або будь-які пари точок з таблиці 6.2). Залишаючи провідні члени отримуємо:

$$Z_{line1}^{\text{expand}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-N[0.2848965149x^2(T - 0.4207825128) + 0.00805078148x^4]\right) dx. \quad (6.22)$$

Змінивши змінні у (6.22), ми отримуємо таке ж узагальнене представлення, як для статистичної суми (6.21).

Можна також проаналізувати розкладені вирази зберігаючи наступні доданки малості:

$$Z_{line2}^{\text{expand}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-N[0.2848965149x^2(T - 0.4207825128) + [0.00459963568 + 0.03726474365(T - 0.4207825128)]x^4 + \dots]\right) dx, \quad (6.23)$$

$$Z_{line3}^{\text{expand}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-N[0.2848965149x^2(T - 0.4207825128) + [0.00459963568 + 0.03726474365(T - 0.4207825128)]x^4 + 0.003512741706(T - 0.4207825128)x^6 + (-0.00002001864847 + 0.0002425582808(T - 0.4207825128))x^8 + 0.000002617x^{10} + \dots]\right) dx.$$

Аналіз для нулів розкладеної статистичної суми (6.22)–(6.24) в околі критичної лінії наведено на Рис. 6.8.

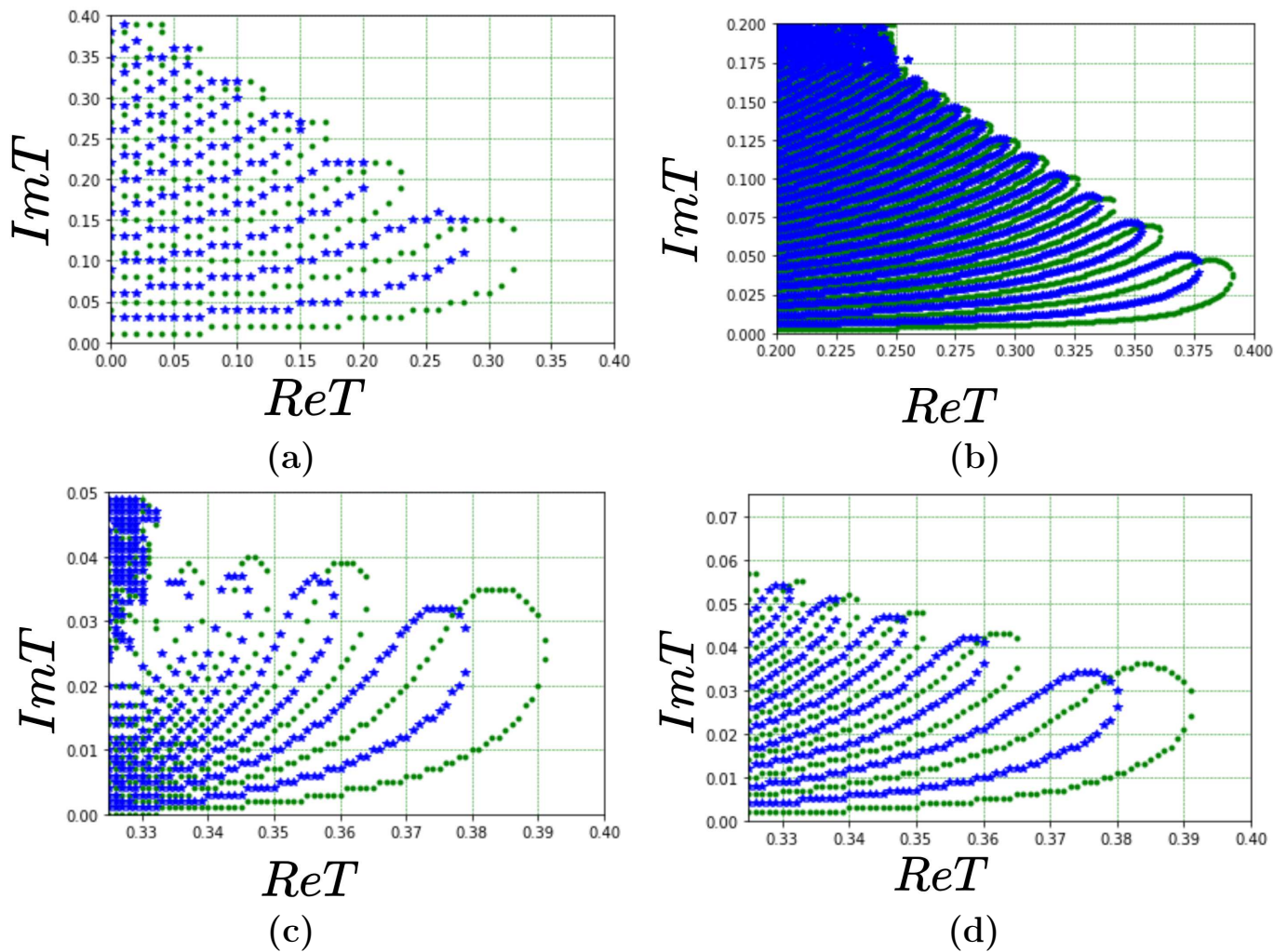


Рис. 6.8. Поведінка дійсної (зелені криві) та уявної (сині криві) частин розкладених виразів для статистичної суми (6.22)-(6.24) поблизу критичної точки в площині комплексної температури (нулів Фішера). (a)(6.22) при $N=50$, (b)(6.22) при $N=500$, (c) (6.23) при $N=500$, (d) (6.24) при $N=500$. Для (a), (b) кут конденсації нулів Фішера $\sim \pi/4$ (приблизно співпадає із очікуваним значенням в околі критичної точки та лінії). Для випадку розкладів (c) кут $\varphi \rightarrow 0!$ і для останнього розкладеного виразу для статистичної суми (d) навіть при великих розмірах системи кут не досягає очікуваних значень ($\sim \pi/6$). Однак, слід зазначити, що у всіх виразах нулі дійсно конденсуються на одній прямій і зі збільшенням розміру системи нулі наближаються до критичної точки.

Нулі кристалічного поля: $\Delta = \Delta_r + i\Delta_i$

Для аналізу нулів кристалічного поля слід розкласти функцію в експоненті (6.18) при малих значеннях x , а потім здійснити другий розклад в околиці критичних та трикритичних точок (фіксуючи температуру і розкриваючи по Δ). Для

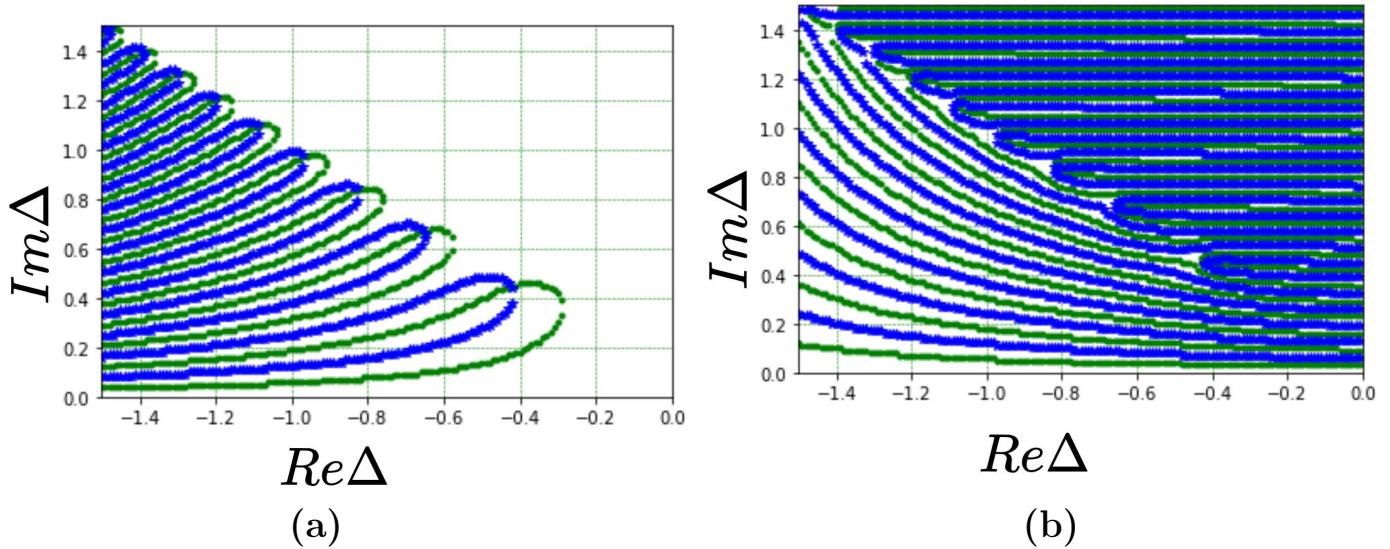


Рис. 6.9. Поведінка дійсної та уявної частин розкладеної статистичної суми поблизу критичної точки в площині комплексного кристалічного поля $\Delta = \Delta_r + i\Delta_i$ при $N = 50$. (a) Статистична сума (6.26), (b) статистична сума з коефіцієнтом. Кут розташування нулів кристалічного поля $\sim \pi/4$ (збігається з очікуваним для нулів Фішера в критичній точці).

виразу з провідними асимптотиками поблизу критичної точки ми отримуємо:

$$Z_N^{expand}(T = 2/3, \Delta \sim 0, H = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-N[-\ln 3 + \Delta + \Delta x^2/6 + x^4/12(1/3 - \Delta/2) + x^6(-13/3240 + 7/20\Delta) + \dots] \right) dx, \quad (6.24)$$

Змінивши змінну інтегрування і зберігаючи множники за Δ статистична сума запишеться:

$$Z_N^{expanded}(T = 2/3, \Delta \sim 0, H = 0) = e^{-N\Delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-N[\Delta x^2/6 + x^4/36] \right) dx. \quad (6.25)$$

Нехтуючи нерелевантними множниками у (6.25) (оскільки координати нулів від цього не змінюються, див. Рис. 6.9) та залишаючи перші провідні члени розкладу, отримуємо:

$$Z_N^{expand}(T = 2/3, \Delta \sim 0, H = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-N[\Delta x^2/6 + x^4/36] \right) dx. \quad (6.26)$$

Табл. 6.7. Перші два стовпці відповідають координатам перших $j = 1, \dots, 9$ нулів Фішера для статистичної суми (6.21). 4-й та 5-й стовпці містять оцінки для приведенного кута конденсації нулів $P = \varphi/\pi$ та для критичної температури z_c для статистичної суми (6.21) чи (6.27), отримані шляхом підгонки нулів в інтервалі $j = j_{\min}, \dots, j_{\max}$ для $j_{\max} = 10$ та різних значень $j_{\min}$. Очікувані значення: приведений кут $P = 0.25$ ($\varphi = \pi/4$) та приведена критична температура $z_c = 0$.

j	Чисельні	$j_{\max} - j_{\min}$	P	z_c
1	$-2.9852 + i3.2061$	1	0.24894	0.13575
2	$-4.6236 + i4.7707$	2	0.24893	0.1364(4)
3	$-5.8237 + i5.9414$	3	0.24889(2)	0.1389(13)
4	$-6.8167 + i6.9176$	4	0.24884(5)	0.1438(26)
5	$-7.6829 + i7.7725$	5	0.24871 (6)	0.1503(36)
6	$-8.4610 + i8.5425$	6	0.24856(9)	0.1594(49)
7	$-9.1734 + i9.2486$	7	0.24835(10)	0.1721(67)
8	$-9.8343 + i9.9046$	8	0.24800(20)	0.1924(99)
9	$-10.4536 + i10.5197$	9	0.24719(40)	0.2373(189)

У такому представленні ми можемо переписати статистичну суму (6.26) в узагальненій формі, як це було зроблено для нулів Фішера в попередньому підрозділі:

$$Z^{\text{expand}}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-zx^2 - x^4\right) dx, \quad z = \Delta N^{1/2}. \quad (6.27)$$

Як видно з таблиці 6.7, із збільшенням індексу нуля j , дійсна та уявна частини його координати стають ближчими за абсолютними значеннями, що відповідає наближенню φ до значення $\varphi = \pi/4$.

Порівняння нулів Фішера та нулів кристалічного поля

На рис. 6.10 підсумовано поведінку нулів Фішера та нулів кристалічного поля для розкладеної статистичної суми поблизу критичної точки та критичної лінії. З аналітичних виразів, отриманих у попередніх підрозділах, випливає, що узагальнена розкладена статистична сума для комплексного кристалічного поля (6.27) еквівалентна узагальненій розкладеній статистичній сумі для нулів Фішера

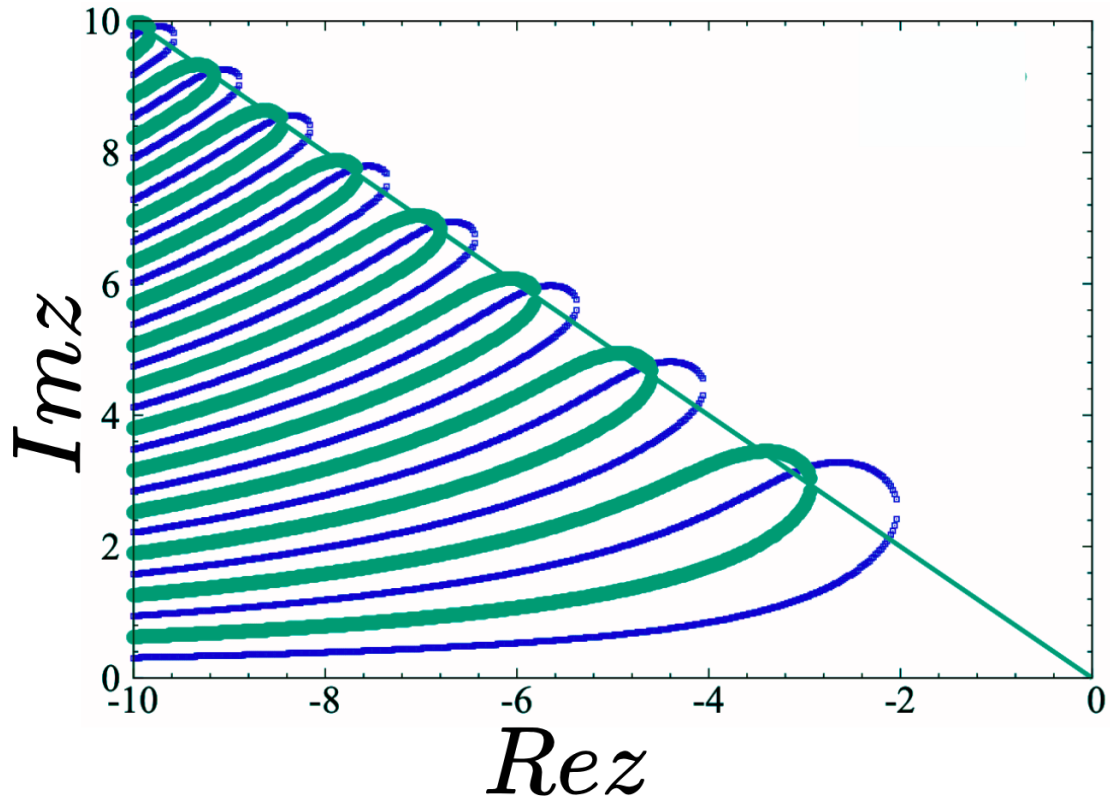


Рис. 6.10. Поведінка дійсної та уявної частин розкладеної статистичної суми (6.21) та (6.27) поблизу критичної точки/лінії в узагальненій площині змінної z . Точки, де криві різних кольорів перетинаються, визначають координати розташування нулів. Кут розташування нулів $\sim \pi/4$. Зелена лінія утворює точний кут $\varphi = \pi/4$ з дійсною віссю. Зелені точки відповідають розв'язкам $ImZ = 0$, а сині — $ReZ = 0$.

в критичній точці (6.21). Для знаходження нулів статистичної суми ми чисельно розв'язуємо систему рівнянь ($ReZ = ImZ = 0$), що випливає з рівнянь (6.21) або (6.27). Потім будуємо лінії нулів у комплексній площині змінної $z = z_i + iz_i$ (див. Рис. 6.10). З графіку можна отримати кут конденсації нулів. Отже, нулі кристалічного поля та нулі Фішера утворюють один і той самий кут $\varphi \sim \pi/4$ з дійсною віссю в околі критичної точки.

З аналізу виразів для статистичної суми (6.21) та (6.27) можна зробити висновки, що скейлінг координат нулів із розміром системи є наступним: $T \sim N^{-1/2}$ та $\Delta \sim N^{-1/2}$. Це збігається з теоретичними прогнозами для зв'язку критичних показників, а саме для показника скейлінгу g_t (див. таблицю 1.1).

6.4.2. Нулі Лі-Янга

Тут наведені результати аналізу розкладеної статистичної суми в площині комплексного зовнішнього магнітного поля для різних областей фазової діаграми з урахуванням відповідних розкладених виразів для статистичної суми (6.18). Спочатку ми розкладаємо функцію при малих значеннях x , а потім здійснюємо другий розклад (фіксуємо кристалічне поле та температуру і розкладаємо в околі H_c).

В околі критичної точки: $\Delta_c = 0$, $T_c = 2/3$, $H_c = 0$

Якщо знехтувати коефіцієнтами та залишити перший провідний член по H , ми отримуємо:

$$Z_N^{expand}(T = \frac{2}{3}, \Delta = 0, H \sim 0) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-N\left[\frac{x^4}{36} - Hx\right]\right) dx, \quad (6.28)$$

Змінюючи змінні, можна переписати статистичну суму в узагальненій формі (як для моделі Ізінга на повному графі) [115, 116]):

$$Z(h) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-x^4 + hx\right) dx, \quad h = (a_h/a_4)^{1/4} HN^{3/4}, \quad (6.29)$$

де a_h та a_4 — числові коефіцієнти для членів Hx та x^4 відповідно.

Перші 10 нулів Лі-Янга (мінімальне відхилення $\delta = \pm 0.001$ для всіх координат): 3.453i, 6.784i, 9.636i, 12.229i, 14.650i, 16.945i, 19.140i, 21.254i, 23.301i, 25.289i.

Поблизу критичної лінії: $\Delta < 2/3 \ln 2$, $T < 2/3$, $H = 0$

Розглянемо точки на критичній лінії: $\Delta = 0.4261302839$, $T = 0.4207825128$ або $T = 0.4541882906$, $\Delta = 0.3982819783$ (або інша пара точок з таблиці 6.2). Розкладаючи статистичну суму поблизу точки на критичній лінії та залишаючи провідні члени, ми змінюємо змінні так, щоб її можна записати в узагальненій формі (6.29), де a_h та a_4 — числові коефіцієнти для членів Hx та x^4 відповідно.

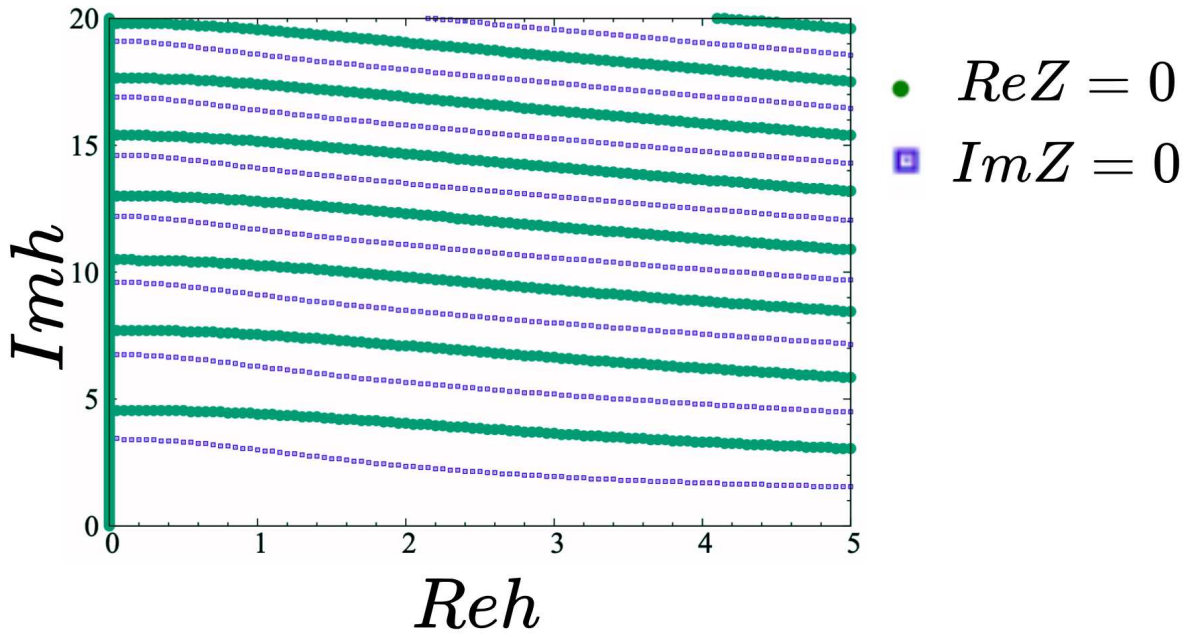


Рис. 6.11. Нулі Лі-Янга для узагальненої розкладеної статистичної суми в околі критичної точки та лінії (6.29). Зелені точки відповідають $ImZ = 0$, а сині — $ReZ = 0$.

Поблизу трикритичної точки: $\Delta_t = 2/3 \ln 2$, $T = T_t = 1/3$, $H_t = 0$

Якщо знехтувати коефіцієнтами та залишити перший провідний член по H , ми отримуємо:

$$Z_N^{expand}(T = \frac{1}{3}, \Delta = \frac{2}{3} \ln 2, H \sim 0) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-N \left[\frac{x^6}{3240} - Hx \right] \right) dx. \quad (6.30)$$

Змінивши змінні, ми можемо переписати статистичну суму в узагальненій формі:

$$Z(h) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-x^6 + hx \right) dx, \quad h = (a_h/a_6)^{1/6} H N^{5/6}, \quad (6.31)$$

де a_h та a_6 — числові коефіцієнти для членів Hx та x^6 відповідно.

Перші 20 нулів Лі-Янга (мінімальне відхилення $\delta = \pm 0.0001$ для всіх координат): 3.3711i, 6.6491i, 9.7493i, 12.6574i, 15.4404i, 18.1272i, 20.7370i, 23.2830i, 25.7747i, 28.2192i, 30.6222i, 32.9881i, 35.3205i, 37.6227i, 39.897i, 42.1456i, 44.3706i, 46.5735i, 48.7557i, 50.9186i.

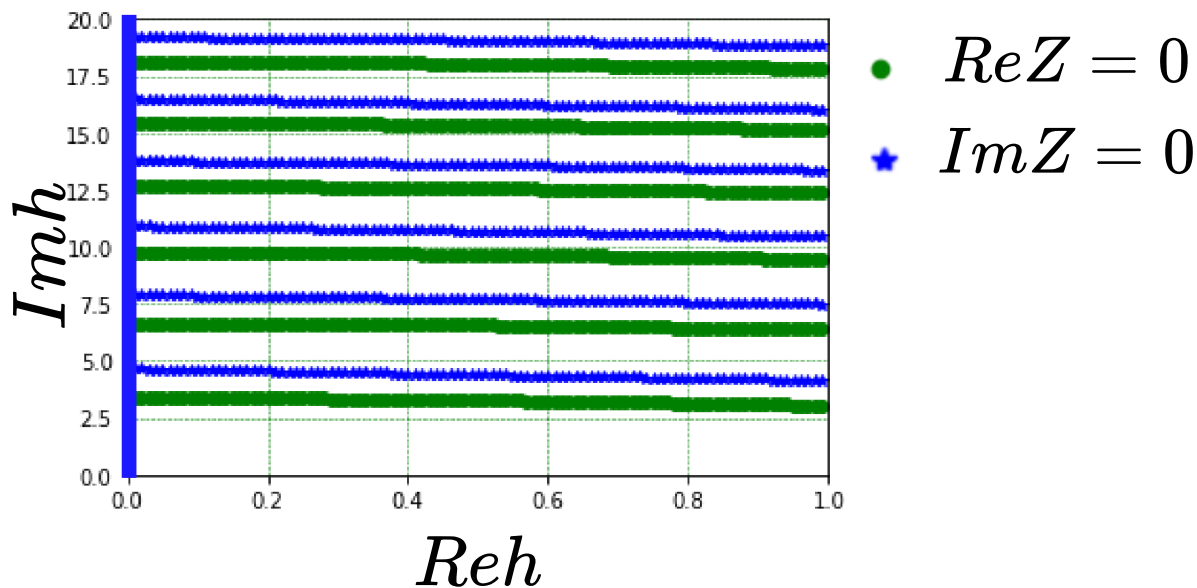


Рис. 6.12. Нулі Лі-Янга для узагальненої розкладеної статистичної суми в околі трикритичної точки та лінії (6.31).

Режим фазового переходу першого роду: $H \sim 0$, $\Delta > \Delta_t = 2/3 \ln 2$, $T < 1/3$.

Розглянемо точку $T = 0.3$, $\Delta = 0.4667635075$ та виконаємо відповідний розклад для отримання наближеного виразу для статистичної суми. Нехтуючи нерелевантними доданками і зберігаючи перші два провідні доданки, отримуємо:

$$Z_N^{expanded}(T, \Delta, H \sim 0) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-N[0.0016154798x^2 - 0.9892301350Hx] \right) dx. \quad (6.32)$$

Інтеграл легко записати в узагальненому вигляді для будь-якої точки на лінії фазового переходу 1-го роду:

$$Z_h(h) \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-x^2 + hx \right) dx, \quad h = (a_h/a_2)^{1/2} H N^{1/2}, \quad (6.33)$$

де a_h і a_2 — числові коефіцієнти для додаків Hx і x^2 відповідно. Цей інтеграл легко порахувати точно, і можна побачити, що серед розв'язків не буде нульових

значень. Про це свідчить і візуалізація на Рис. 6.13.

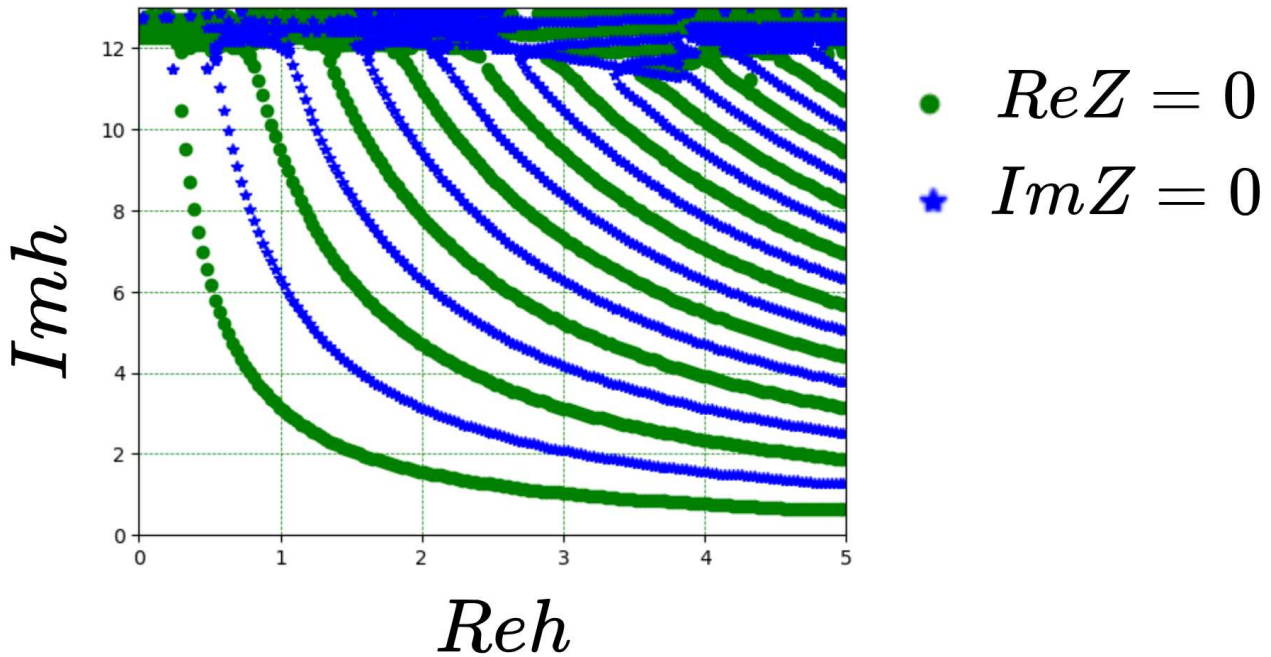


Рис. 6.13. Нулі дійсної та уявної частини узагальненої розкладеної статистичної суми(6.33). Можна бачити, що на графіку нема точок перетину ліній різного кольору, що свідчить про відсутність нулів Лі-Янга.

Підсумок аналізу нулів Лі-Янга

Нулі Лі-Янга для узагальненої розкладеної статистичної суми (6.29) в околі критичної точки та лінії візуалізовано на Рис. 6.12. Показано, що всі нулі лежать на уявній осі, отже, теорема Лі-Янга виконується. Це підтверджує, що в цих областях відбувається фазовий перехід другого роду. З аналізу рівняння (6.29) очевидно, що скейлінг по N отримано безпосередньо через заміну змінних. Отримана асимптотика точно збігається з прогнозованими значеннями для критичного показника скейлінгу координати нулів $g_h = 3/4$ (див. таблицю 1.1).

Схожий аналіз був проведений і для нулів Лі-Янга поблизу трикритичної точки. У цьому випадку всі нулі також лежать на уявній осі і задовольняють теорему Лі-Янга. З аналізу рівняння (6.31) очевидно, що скейлінг по N отримано безпосередньо через заміну змінних, і $g_h = 5/6$ точно збігається з прогнозованим значенням для трикритичної точки (див. таблицю 1.1).

6.5. Висновки

У розділі наведено результати дослідження критичної поведінки моделі Блюма-Капеля на повному графі, аналізуючи нулі статистичної суми в комплексній площині параметрів: магнітному полі (нулі Лі-Янга), температурі (нулі Фішера) та кристалічному полі (нулі кристалічного поля). Ці нулі були використані для характеристики природи фазових переходів та критичних властивостей системи за допомогою універсальних співвідношень для координат нулів. Проведено аналіз точного (нулі Фішера в околі критичної точки) та наближеного інтегрального представлення статистичної суми в різних критичних режимах.

Результати аналізу точних виразів показали, що нулі Фішера поблизу критичної точки добре визначені для малих розмірів системи, хоча очікувана скейлінгова поведінка $t \sim N^{-1/2}$ не була повністю досягнута ($t \sim N^{-0.44}$). Тому подальший аналіз стосувався виразів для розкладеного представлення статистичної суми, що дозволило отримати асимптотично точні результати. Було підтверджено, що аналітичне представлення для статистичної суми в приведених змінних при дослідженні нулів Фішера та нулів кристалічного поля є еквівалентними. Показано, що скейлінг за N , використовуючи вирази у приведених змінних, задовільняється автоматично. Теорема Лі-Янга також була перевірена для нулів поблизу критичної точки, лінії та трикритичної точки, що додатково підтвердило теоретичні прогнози. Для нулів Лі-Янга всі нулі розташовані на уявній осі, що підтверджує правильність теореми Лі-Янга та наявність фазового переходу другого роду. Скейлінг з розміром системи відповідає теоретичним прогнозам, з показниками скейлінгу $g_h \sim 3/4$ для критичної точки та $g_h \sim 5/6$ для трикритичної.

Загалом, результати отримані в роботі не тільки дають змогу глибше зрозуміти модель Блюма-Капеля, але й підкреслюють ефективність аналізу нулів статистичної суми для вивчення критичних явищ. Ці методи надають цінні відомості для подальших досліджень складних систем та фазових переходів.

Розділ 7

СКЛАДНІ МЕРЕЖІ ЯК ЗАСІБ КІЛЬКІСНОГО ОПISУ І ВІЗУАЛІЗАЦІЇ СОЦІАЛЬНИХ І НАУКОМЕТРИЧНИХ СИСТЕМ. МОДЕЛЮВАННЯ СКЛАДНИХ МЕРЕЖ

У цьому розділі розглянуто застосування теорії складних мереж для аналізу та візуалізації соціальних і наукометричних систем. У цьому розділі за мету було поставлено кілька завдань. А саме, навести прикладне застосування теорії мереж для дослідження систем реального світу, показати як механізми росту мереж і їх динаміка реалізуються на практиці і до чого вони призводять, а також продемонструвати, як реальні мережі описуються запропонованими моделями. Представлено результати дослідження двох типів мереж – соціальної мережі співавторства авторів у журналі та семантичної мережі понять. Спершу у **підрозділі 7.1** наведено огляд деяких характеристик з теорії мереж використаних при аналізі у цьому розділі. У **підрозділі 7.2** для мережі співавторства “Журналу Фізичних Досліджень” здійснено короткий огляд бази даних та опису характеристик, які використовуються при аналізі структури мережі, а також проаналізовано мережу співавторства в межах України. Наступний **підрозділ 7.3** стосується досліджень моделей для побудови семантичних мереж. Спочатку наведено опис даних, що аналізуються, пояснено принципи побудови мережі наукових понять та її особливості. І на завершення, наведено опис алгоритмів для побудови моделей семантичних мереж та здійснено порівняння із існуючими моделями для емпіричних даних – препринтів ArXiv. У висновках підсумовано основні результати розділу. За результатами досліджень опубліковано 4 статті [22–25] та тези

конференцій [33, 37].

7.1. Характеристики мереж використані при аналізі у цьому розділі

У огляді літератури було наведено загальні поняття з теорії мереж (див. 1.4). У цьому підрозділі представлені означення більш специфічних характеристик, що застосовуються для аналізу структури мереж у підрозділах 7.2 та 7.3.

- **Середня довжина найкоротшого шляху (mean shortest path length)** між двома вузлами:

$$\langle l \rangle = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i>j} l(i, j),$$

де $l(i, j)$ – довжина найкоротшого шляху між вузлами i та j , а N – загальна кількість вузлів у мережі. Тут і нижче підсумовуємо за i, j вузлами мережі.

А максимальна довжина найкоротшого шляху тоді означається як:

$$l_{max} = \max_{1 \leq i, j \leq N} l(i, j).$$

- **Щільність зв'язків (link density):**

$$\rho = 2L/N(N-1) * 100\%,$$

де L – кількість зв'язків у мережі.

- **Асортативне змішування за ступенями (assortative mixing by degree)** r визначається як коефіцієнт кореляції Пірсона між ступенями вузлів на обох кінцях зв'язків у мережі. Формально, якщо k_i та k_j – ступені вузлів, що з'єднані певним зв'язком, то коефіцієнт асортативності r можна записати як:

$$r = \frac{\langle k_i k_j \rangle - \langle k \rangle^2}{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2},$$

де середні значення обчислюються за всіма зв'язками в мережі.

- **Глобальна транзитивність (global transitivity)** визначається як співвідношення між кількістю замкнутих триплетів у мережі та загальною кількістю мережевих триплетів. Тобто,

$$T = \frac{N_{\text{замкнутих триплетів}}}{N_{\text{триплетів}}},$$

де $N_{\text{замкнутих триплетів}}$ — кількість триплетів, у яких усі три вузли взаємопов'язані (утворюють замкнені ланцюги або трикутники), а $N_{\text{триплетів}}$ — загальна кількість триплетів у мережі (як замкнутих, так і відкритих).

- **Посередництво (betweenness centrality)** — ще одна характеристика вузла, що може свідчити про його значущість у системі. Посередництво визначають кількістю найкоротших шляхів, що проходять через вузол, і розраховують як відношення кількості найкоротших шляхів між усіма парами вузлів у мережі, що проходять через вузол m , до загальної кількості найкоротших шляхів між вузлами:

$$\sigma(m) = \sum_{i \neq j} \frac{l(i, m, j)}{l(i, j)}.$$

- **Коефіцієнт кластерності C_i (clustering coefficient)** містить інформацію про те, скільки найближчих сусідів E_i конкретного вузла i зі ступенем k_i є також пов'язаними між собою:

$$C_i = \frac{2E_i}{k_i(k_i - 1)}.$$

Середній коефіцієнт кластерності визначається як

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{2E_i}{k_i(k_i - 1)}.$$

- Ще однією важливою характеристикою мережі є наявність чи відсутність **гігантської зв'язної компоненти (giant connected component)** — найбільшого за розміром окремого зв'язного фрагмента мережі. Навіть за безмежно великого розміру системи частка вузлів, що формують гігантську

компоненту, залишається скінченною:

$$N_{GCC} = \frac{N - N_i}{N} \times 100\%,$$

де N_i – кількість ізольованих вузлів.

7.2. Аналіз мережі співавторства ЖФД в Україні

Наукометричний аналіз періодичних видань є ділянкою науки, що активно розвивається. Дослідження проводять як для групи видань за певною тематикою [265, 266], так і окремих журналів. Прецедентами в українській науковій періодиці є, скажімо, здійснений у праці [267] аналіз “Українського фізичного журналу” та застосування методів теорії складних мереж до розбору публікацій журналу “Condensed Matter Physics” [268]. Цікавими прикладами самозамкнених досліджень можуть слугувати наукометричний аналіз наукометричної літератури [269] чи застосування методів кількісної лінгвістики до анотацій одного з провідних видань у цій галузі – “Journal of Quantitative Linguistics” [270].

7.2.1. З історії журналу та огляд бази даних

Ідея створення “Журналу фізичних досліджень” [271] виникла в середовищі фізиків Львівського національного університету імені Івана Франка та Західно-українського фізичного товариства. Журнал засновано 1994 року, перше номер з’явився у 1996 року. Решта три номери вийшли в 1997, і відтоді Львівський національний університет імені Івана Франка регулярно видає щорічно один том журналу, що містить чотири номери.

Особливості журналу — українська мова більшості публікацій, переважна орієнтація на західну Україну, широка тематика — як давали переваги, так і створювали проблеми впродовж усього часу його існування. Адже локальність неминуче створює загрозу провінційності. Щобільше, локальні проблеми всіх українських журналів, як і ЖФД, поєднуються із проблемами глобальними, що постають перед відповідними академічними виданнями у світі. Протягом 1996–2016

років у ЖФД опубліковано 962 статті близько 1400 різних авторів [272]. Цей масив даних дозволяє застосувати кількісні методи для їх статистичного аналізу (див. наприклад розділ 1 з оглядом літератури та прикладів обрахунку мережевих характеристик).

7.2.2. Аналіз співавторства в межах України

Маючи арсенал інструментів теорії складних мереж [1–5], можна ефективно досліджувати бібліометричні дані в найрізноманітніших інтерпретаціях: спрямовані мережі цитувань; зважені мережі співавторства; багатосортні мережі, що описують співцитування авторів у різних статтях; мультиплексні мережі, де різні типи зв'язків між парою авторів позначатимуть, відповідно, спільні публікації, місця праці чи використані однакові тематичні індекси на зразок УДК чи PACS [273]. Серед публікацій ЖФД 123 (12.8 % від усіх 962) написали автори-іноземці, 81 (8.4 %) робота з'явилася внаслідок міжнародної співпраці, а безумовна більшість належить авторству українських учених. У цьому підрозділі детальніше розглянуто географію українських авторів на рівні окремих населених пунктів (для спрощення будемо називати їх усіх містами), а також проаналізовано співавторство вітчизняних установ з погляду їх поділу на вищі навчальні заклади та установи НАН України.

Мережа співавторства на рівні міст України будується так: вузли представляють міста, а зв'язок між ними виникає тоді, коли обидва міста фігурують в адресах указаних місць праці авторів однієї статті. Важливо зауважити, що в цьому випадку всі зв'язки співавторства з іноземними містами або установами не беруться до уваги, тобто, як мережеві характеристики, так і наведена нижче статистика стосуються виключно українських авторів. На мапі України, рис. 7.1, схематично зображено побудовану мережу, що включає 29 міст України. Радіус круга для кожного міста залежить як $\ln(n + 1)$ від кількості n публікацій авторів із цього міста. Зображені зв'язки між містами є незваженими, тобто, відображають лише сам факт співпраці між містами, а не її інтенсивність. Уже з рисунка

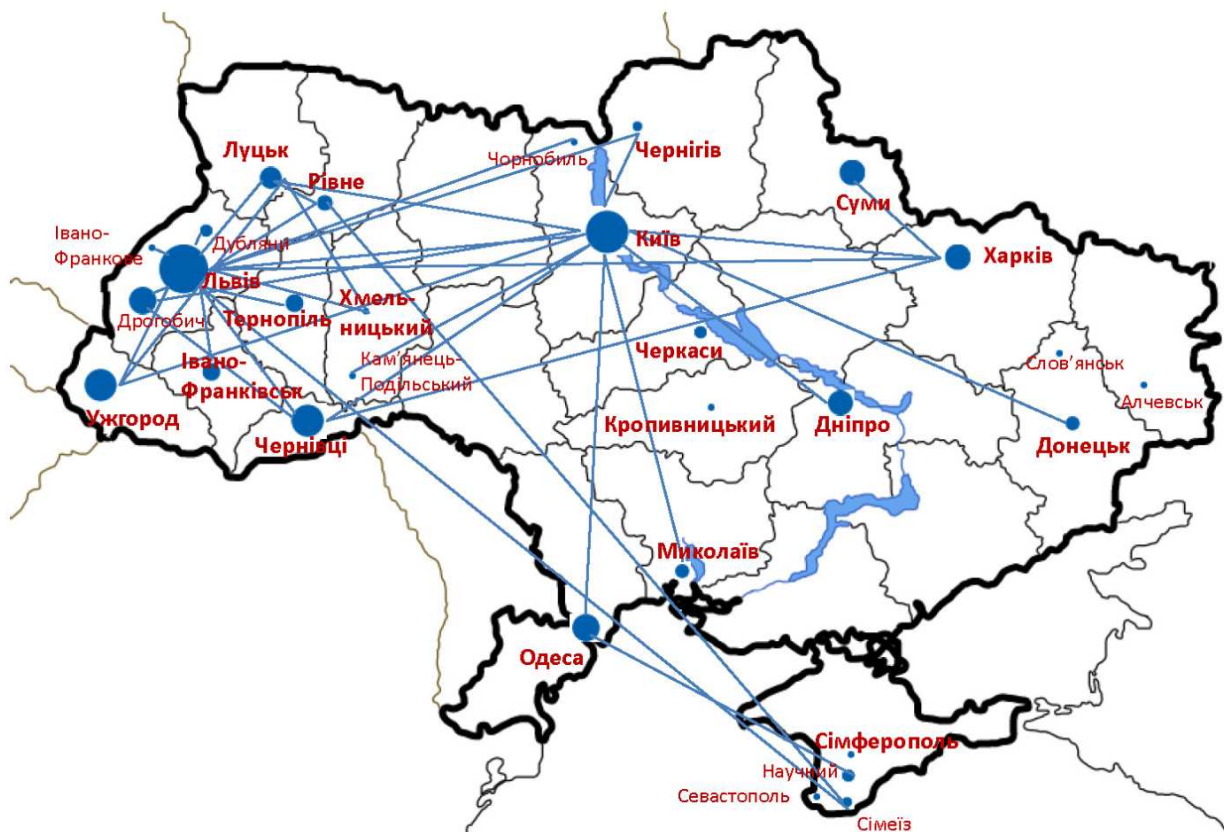


Рис. 7.1. Географія співавторства в ЖФД на рівні міст України, зображена за допомогою фрагмента незваженої мережі співавторства. Розмір вузла залежить як $\ln(n + 1)$ від кількості n публікацій, що стосуються певного міста.

можна зробити певні висновки. Передусім про те, що вузли з найбільшою кількістю публікацій мають і найбільший ступінь. Так, двома яскравими “лідерами” за кількістю робіт є Львів (439 статей) та Київ (181) із ступенями 15 та 12 відповідно. Вузли ж із найменшою кількістю публікацій є ізольованими (Слов’янськ, Сімферополь, Алчевськ, Кропивницький, Севастополь, Черкаси).

Основні кількісні характеристики побудованої мережі наведено в табл. 7.1. Бачимо, що розмір гігантської зв’язної компоненти доволі значний — 23(79.3%).

Параметр	N	L	k_{max}	$\langle k \rangle$	$\langle C \rangle$	$\langle l \rangle$	l_{max}	N_{GCC}	N_i
Значення	29	68	16	4.69	0.6	2.25	4	23(79.3%)	6

Табл. 7.1. Основні кількісні характеристики мережі співавторства на рівні міст України, побудованої на основі даних про публікації в ЖФД.

Причому, як видно з табл. 7.2, основа цієї компоненти сформувалась уже в перші роки. Детальніша статистика публікаційної активності, що стосується окремих населених пунктів України, наведена в табл. 7.2. ID в першій колонці таблиці – це порядковий номер, присвоєний 29 містам України; під номером 30 згруповано всіх іноземних авторів. У наступних трьох стовпцях наведено, відповідно, назву населеного пункту i , кількість робіт n_i , що належать до нього, та ступінь відповідного вузла в мережі k_i (ще раз підкреслимо, що в даному випадку не беремо до уваги співпраці з іноземцями). Символами “+” та “-” у наступному стовпці позначено наявність чи відсутність співпраці авторів цього міста з іноземцями. Останні дві колонки містять роки, коли назва населеного пункту вперше почала фігурувати в базі даних та коли згадувалася там востаннє.

Рис. 7.2 відображає те, наскільки широкою була географія українських авторів щорічно та скільки найменувань населених пунктів уперше потрапили до бази даних. Цікаво дослідити, протягом якого періоду окремі міста з’являлися на карті співавторства ЖФД. За допомогою цієї статистики (див. останні дві колонки табл. 7.2) можна виявити, котрі міста становлять типову географію українських авторів видання, а котрі з’явилися на карті лише одноразово. Своєрідна “тривалість життя” кожного міста в цьому контексті показана на рис. 7.3. По осі ординат відкладено порядковий номер міста від 1 до 29, а по осі абсцис – перший та останній рік згадування у статтях, проміжок між якими визначає кількість “років життя” міста.

Перші шість міст (Львів, Ужгород, Дніпро, Дрогобич, Київ, Одеса) трапляються вже під час формування початкової бази статей у 1996 році та незмінно присутні аж до 2016 року включно. Доволі “довголітніми” виявились і міста, автори з яких уперше публікували роботи протягом наступних двох років. Виняток – Чорнобиль, оскільки в 1996 році була опублікована перша і єдина стаття авторів із цього міста. Також Донецьк із першою публікацією в 1997 році вже у 2006 залишив мережу (остання стаття з’явилась у 2005 році), зробивши, однак, внесок із 4 статей. Проте треба зазначити, що ці два міста мали спільні публікації зі Львовом та Києвом відповідно, тобто їм відповідають неізолювані вузли. Є низка

ID(i)	Назва населеного пункту i	Кількість публікацій, n_i	Ступінь, k_i	Лінк $i \leftrightarrow 30$	Поява	Зникнення
1	Львів	429	15	+	1996	2016
2	Ужгород	46	3	+	1996	2016
3	Дніпро	19	1	+	1996	2016
4	Дрогобич	27	3	+	1996	2016
5	Київ	181	12	+	1996	2016
6	Одеса	25	2	+	1996	2016
7	Чорнобиль	1	1	-	1997	1997
8	Донецьк	4	1	-	1997	2005
9	Рівне	5	3	-	1997	2016
10	Тернопіль	8	1	-	1997	2013
11	Чернівці	48	4	+	1997	2016
12	Суми	22	1	+	1997	2013
13	Харків	22	4	+	1997	2015
14	Чернігів	2	2	+	1998	2013
15	Луцьк	13	5	-	1998	2016
16	Івано-Франківськ	7	2	-	1998	2016
17	Хмельницький	1	1	+	2000	2000
18	Слов'янськ	1	0	-	2000	2000
19	Сімферополь	1	0	-	2000	2000
20	Кам'янець-Подільський	1	1	-	2002	2002
21	Алчевськ	1	0	-	2002	2002
22	Сімеїз	2	2	+	2002	2002
23	Наукове	3	1	+	2002	2013
24	Черкаси	3	0	-	2005	2007
25	Кропивницький	1	0	-	2007	2007
26	Дубляни	3	1	-	2008	2016
27	Севастополь	1	0	-	2010	2010
28	Івано-Франкове	1	1	-	2010	2010
29	Миколаїв (обл. центр)	4	1	+	2012	2016
30	Іноземні адреси	204	14	+	1997	2016

Табл. 7.2. Статистика спільних публікацій авторів з різних міст України, детальніші пояснення див. у тексті.

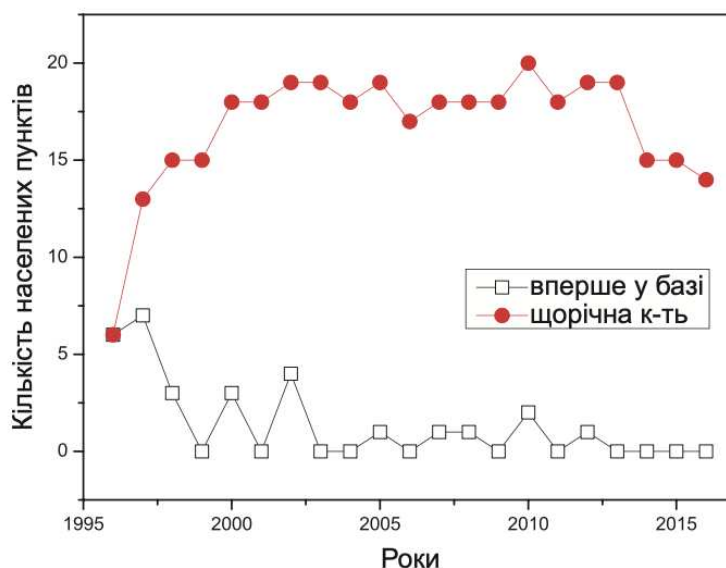


Рис. 7.2. Щорічна загальна кількість міст України, що фігурували у статтях журналу (кружки), та кількість найменувань міст, що вперше ввійшли до бази даних (прямокутники).

міст, на які натрапляємо лише протягом одного року: Хмельницький, Слов'янськ та Сімферополь у 2000, Кам'янець-Подільський, Алчевськ та Сімеїз у 2002, Кропивницький у 2007 та Севастополь й смт Івано-Франкове в 2010. Варто зазначити, що із цієї статистики не помітно певних географічних кореляцій між часом першої та останньої публікації міста.

Статистику публікацій можна розглянути також на рівні співпраці між академічними установами та вищими навчальними закладами України, як це було зроблено, наприклад, для “Українського фізичного журналу” в [267]. На рис. 7.4 наведено кількість публікацій у ЖФД, які подали автори з ВНЗ, установ НАН України, а також спільних публікацій (знову ж таки, без іноземних партнерів) у період від 1996 до 2016. Легко бачити, що частка публікацій ВНЗ переважає в кожному році. Оскільки кількість публікацій у межах одного року не стала, частка спільних статей теж змінюється, проте ніколи не зникає ¹.

¹Іноді факт співпраці фіксується за рахунок кількох афіліцій одного вченого.

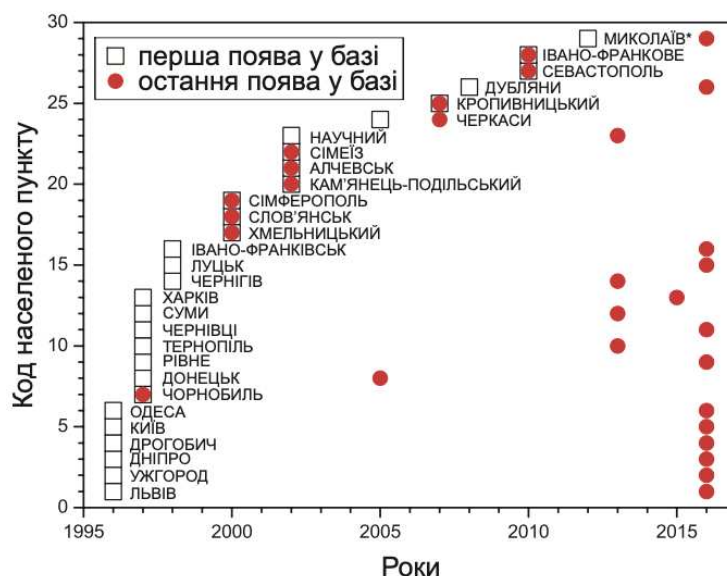


Рис. 7.3. Статистика першої появи публікації із міста з кодом від 1 до 29 (прямокутники) та останньої публікації з цього міста (круги) з 1996 по 2016 рр.

7.3. Аналіз мережі наукових понять

Семантичні мережі, тобто мережі, які відображають зв'язки між поняттями в межах конкретної області знань, належать до інструментів формалізації знання в цілому [274]. Їхню письмову історію можна простежити до знаменитого дерева Порфирія² і розширити до сучасних онтологій для комп'ютерних наук [276, 277]. Опис системи знань також є частиною логології – науки про науку, яка спрямована на кількісне розуміння витоків наукових відкриттів і творчості, їх структури та практики [278, 279]. Оскільки наукова публікація залишається основною формою документування результатів дослідження, структуру наукових галузей можна відобразити, використовуючи величезну кількість доступних на даний момент бібліографічних даних [280].

Хоча неможливо дізнатися точну структуру абстрактної системи знань, існує багато способів її моделювання за допомогою її проєкцій. Семантичний простір для різних доменів можна моделювати як складну мережу міток, що вказують на тематику. Щоб назвати декілька, можна згадати аналіз тематики для

²Діаграма, що представляє класифікацію субстанцій у «Категоріях» Арістотеля (хоча в письмовій, а не намальованій формі) філософа-неоплатоніка Порфирія[275].

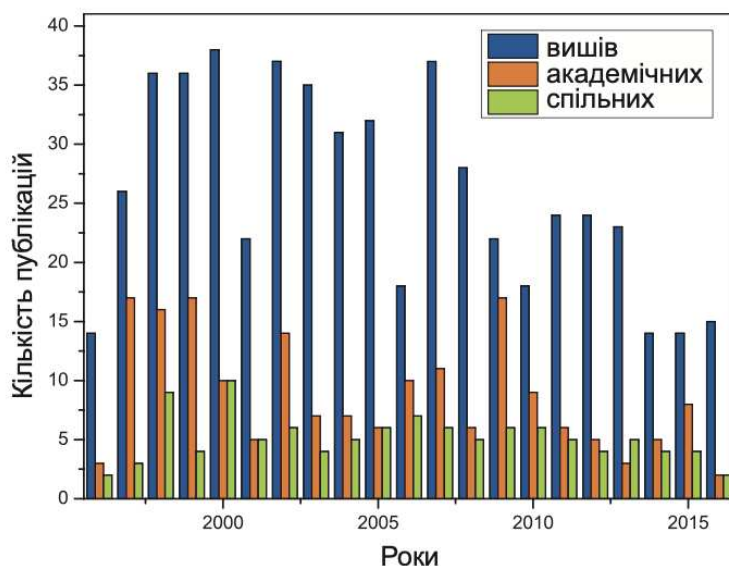


Рис. 7.4. Діаграма кількості статей, які опублікували в період від 1996 до 2016 року науковці з ВНЗ МОН України, установ НАН України та спільних публікацій — сині, оранжеві та зелені стовпці відповідно.

дослідницьких робіт на базі мережі спільно використовуваних чисел PACS (схема класифікації фізики та астрономії) [281, 282]; спільне згадування хімічних речовин у біомедичних статтях [283]; спільна поява заздалегідь визначених понять у заголовках або анотаціях доповідей із квантової фізики [284]; аналіз взаємних гіперпосилаць між сторінками Вікіпедії, присвячених математичним теоремам [285], тощо. Подібність між документами, авторами, дослідницькими групами та іншими об'єктами можна встановити за допомогою інформації про спільне використання термінів, спільне використання ключових слів або тематичних індексів, спільне цитування чи бібліографічні зв'язки тощо. Складний мережевий формалізм дозволяє візуалізувати [286] та кількісно визначати структуру таких подібностей, які зазвичай розглядаються як індикатори тематичної спорідненості і, отже, як проекції знань.

Нові знання чи інновації можна моделювати або як появу нових ідей чи понять (тобто, нових вузлів у представленні мережі), або як нові зв'язки між існуючими (тобто, шляхом встановлення нових чи зміцнення існуючих мережевих зв'язків) [287–289]. Моделювання таких процесів є складним завданням як через його фундаментальну актуальність, так і через численні практичні реалізації.

Його можна використовувати для побудови ефективної політики, спрямованої на фінансову підтримку чи цілеспрямоване стимулювання національних досліджень, або для виявлення “гарячих тем” і нових тенденцій для вибору теми дослідження. Кількісний аналіз наукових метаданих дає можливість виявити не лише явні взаємозв’язки та закономірності, а й неявні [290]. Процес наукового відкриття регулюється структурою наукового знання, але в той же час еволюція цієї структури залежить від процесу появи нових понять і зв’язків між ними. Така взаємодія між структурою та динамікою є типовою рисою будь-якої складної системи [6, 291]. Іноді важко відрізнити еволюцію основної структури знання від динамічного процесу, керованого цією структурою, оскільки обидва рекурсивно взаємопов’язані. З цією метою моделі побудовані так, щоб відобразити, як терміни, ключові слова, мітки чи теги стають спільним вибором із попередньо визначеного семантичного простору [287, 292, 293].

Дискусії навколо тем наукових відкриттів, появи новизни, руйнівного та розвиваючого характеру досліджень та багатьох інших не є новими, але вони все ще тривають [288, 293–295]. Проте не так багато методів, що дозволяють здійснити кількісний аналіз характеристик цих процесів. Формалізована мережа наукових понять дозволяє виділити один із багатьох аспектів розвитку знання. Таким чином, дане дослідження емпіричних даних, а також запропонована тут модель збагачують інструментарій для кількісного вивчення процесу наукового дослідження. Інше можливе продовження аналізу може бути досягнуто застосуванням структури гіпермережі, коли узагальнюється поняття відношення між двома об’єктами до зв’язків між багатьма об’єктами [296].

7.3.1. Про структуру семантичних мереж та аналіз понять на базі препринтів ArXiv

Зважаючи на все вищесказане, першочерговим є аналіз структури семантичних мереж у науці та моделювання процесів їх еволюції. З цією метою використано базу препринтів репозиторію [arXiv.org](https://arxiv.org), і словник наукових понять, зібра-

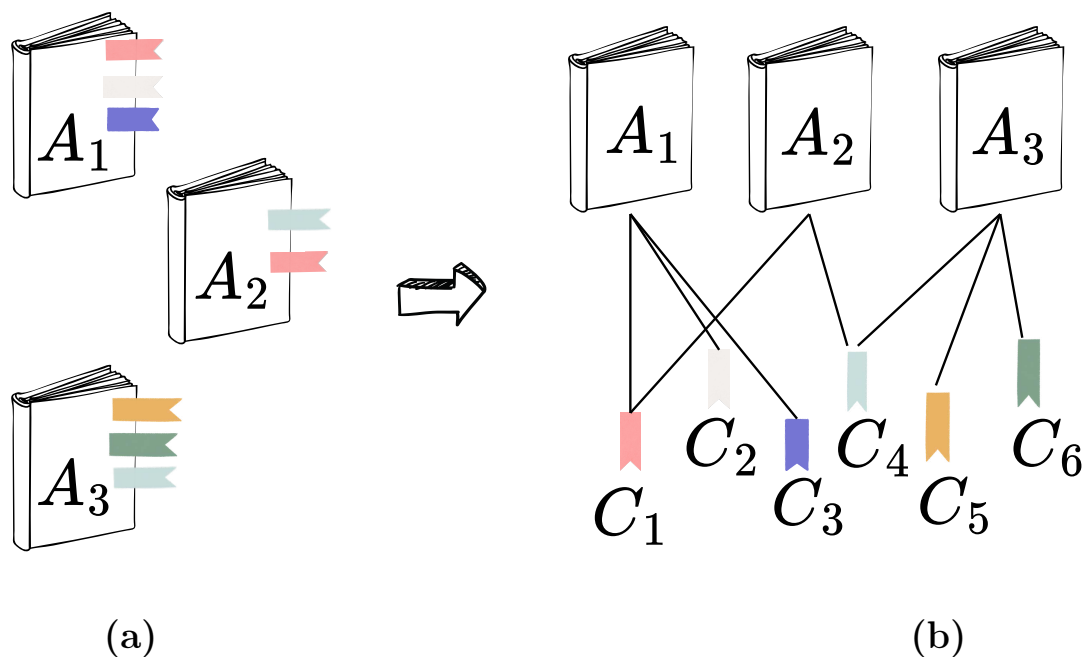


Рис. 7.5. Побудова мережі наукових понять. **(а)** Статті A_i , що містять певну кількість різних понять C_j , представлені у вигляді **(б)** дводольної мережі, яка складається з вузлів двох типів: статті $A_1, A_2, \dots, A_N$ і поняття $C_1, C_2, \dots, C_N$. У дводольній мережі зв'язки присутні лише між вузлами різних видів: кожен вузол A_i пов'язаний з вузлом C_j , що відповідає поняттю, яку зустрічаємо в цій статті. Емпіричні дані базуються на $N = 36386$ arXiv.org статтях і містять $N = 11853$ унікальних понять.

ний через платформу ScienceWISE.info³, див. рис. 7.5. Станом на 2021 рік цей словник містив найповнішу колекцію наукових понять у галузі фізики. Щоб розглянути зв'язки між поняттями, проаналізовано як поняття зустрічаються разом у публікаціях. Такий аналіз дозволяє побудувати мережу понять, а емпіричний аналіз і моделювання цієї мережі є основним предметом дослідження.

7.3.2. Про базу даних

У цьому підрозділі наведено результати дослідження для збірника наукових публікацій у галузі фізики. Вибірка рукописів складається з 36 386 преприн-

³ScienceWISE. info — це веб-служба, пов'язана з основними онлайн-репозиторіями, такими як arXiv, особливістю якої є висхідний підхід до управління науковими поняттями (<http://sciencewise.info/faq>). Поняття автоматично витягуються з наукових публікацій за допомогою КРЕХ алгоритму [297], а потім перевіряються зареєстрованими користувачами платформи, див. також [298] для отримання додаткової інформації.

тів, поданих до електронного сховища [arXiv.org](https://arxiv.org) протягом 2013 року, які були віднесені до однієї категорії під час процесу подання. Міжкатегорійні статті було вилучено з поточного аналізу, щоб мати однозначну відповідність із наборами даних, проаналізованими в [289, 298, 299]. Для кожного з рукописів набір властивих йому понять було виділено за допомогою платформи [ScienceWISE](https://sciencewise.info) [300]. Таким чином, дані, що розглядаються, див. рис. 7.5 (а), можуть бути зручно описані у формі дводольної мережі (це та інші визначення пов’язані з теорією складних мереж більш детально можна знайти, наприклад, у [301]), яка складається з вузлів двох типів: статті $A_1, A_2, \dots, A_N$ і поняття $C_1, C_2, \dots, C_N$, див. рис. 7.5 (b). У роботі [298] метою було проаналізувати структуру одномодової проекції дводольної мережі в простір статей. Таким чином знайдено спільноти, які розкривають внутрішню тематичну структуру. У свою чергу аналіз наведений нижче стосуватиметься мережі понять: представляючи інтерес як такий, він може також служити як і додатковий крок в аналізі всієї дводольної мережі, через її іншу одномодову проекцію.

Крім перевірки понять, користувачам платформи [ScienceWISE](https://sciencewise.info) [300] було запропоновано класифікувати поняття як загальні або специфічні. Таким чином кожне поняття, класифіковане як загальне, отримало відповідну мітку в базі даних. Повні тексти рукописів були відскановані платформою [ScienceWISE](https://sciencewise.info) [300] з метою виділення наукових понять, тобто, конкретних слів або їх комбінацій, які містяться в кожному препринті. [ScienceWISE](https://sciencewise.info) було створено як краудсорсингову платформу з метою допомогти вченим шляхом автоматизації частини їх повсякденної роботи. Кожен зареєстрований користувач міг розширити наявний словник наукових понять (наукових ідей, виражених у термінах ключових слів) і, у свою чергу, отримати рекомендації щодо (щойно поданих) препринтів на основі його чи її інтересів. У процесі виділення понять платформа [ScienceWISE](https://sciencewise.info) класифікує поняття на загальні та специфічні і змогла отримати близько 20,000 наукових понять. Тут наведено деякі приклади загальних та специфічних понять отриманих платформою [ScienceWISE.info](https://sciencewise.info) з кількох препринтів [arXiv.org](https://arxiv.org).⁴

⁴[ScienceWISE.info](https://sciencewise.info) доступ від 26 липня 2021 р.

- Albert-László Barabási, Réka Albert. Emergence of scaling in random networks. arXiv:cond-mat/9910332 [cond-mat.dis-nn] [55].

Generic concepts: Networks, Topology, Probability, Communication, Field, Generic property.

Non-generic concepts: Scale-free, Preferential attachment, Complex systems, Graph, Random graph, Neural network, Numerical simulation, Poisson distribution, Protein, Scale invariance.

- V. Palchykov, M. Krasnytska, O. Mryglod, Yu. Holovatch. A mechanism for evolution of the physical concepts network. arXiv:2106.01022 [physics.soc-ph] [22].

Generic concepts: Networks, Picture, Probability, Precision, Simulations, Topology.

Non-generic concepts: Complex network, Graph, Barabasi-Albert model, Clustering coefficient, Ontology, Bipartite network, Degree distribution, Preferential attachment, Random graph, Standard deviation, Primary, Assortative mixing, Complex systems, Key phrase, Pearson's correlation, Semantic network, Statistics.

- M. Krasnytska, B. Berche, Yu. Holovatch, R. Kenna. Ising model with variable spin/agent strengths. arXiv:2004.05134 [cond-mat.stat-mech] [?].

Generic concepts: Spin, Networks, Free energy, Geometry, Temperature, Thermodynamic limit, Topology, Magnetic moment, Particles, Probability, Thermodynamics, Magnetic field, Symmetry.

Non-generic concepts: Ising model, Phase diagram, Statistical physics, Universality class, Many-body systems, Partition function, Graph, Scale-free, Quenching, Critical exponent, Degree distribution, Disorder, Exact solution, Phase transitions, Random graph, Scaling law, Adjacency matrix, Concurrence, Continuous Spin, Degree of freedom, Duality, Hamiltonian, Magnetization, Mean field, Mean-field approximation, Network model, Polydispersity, Potts model, Social network, Social systems, Spin glass, Spontaneous magnetization.

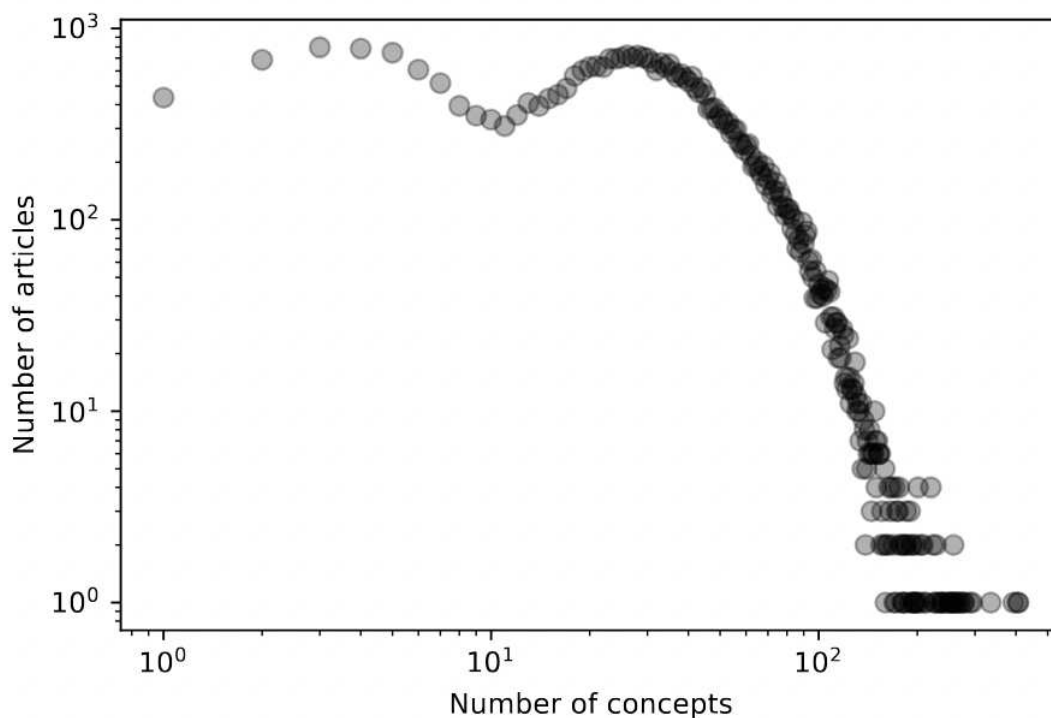


Рис. 7.6. Розподіл кількості визначених понять у повному тексті препринту. Розподіл має викривлену форму із середнім значенням 37 понять на препринт, а хвіст містить понад 400 понять на препринт.

Загальна кількість понять у наборі даних становить 12 200, з цих 347 понять є загальними, а 11 853 – незагальними. У [298] загальні поняття були виключені з аналізу, щоб уникнути надмірного ущільнення мережі статей. Для прямої відповідності дослідженням, проведеним у [298], поняття, позначені **ScienceWISE** як загальні, теж було виключено у цьому дослідженні. У результаті такої процедури виявлено, що препринт містить у середньому 37 понять. Розподіл кількості понять на препринт має досить викривлену форму, як показано на рис. 7.6, де хвіст розподілу містить приблизно 400 понять на препринт.

7.3.3. Побудова мережі, її основні особливості та результати

Описаний набір даних містить 11853 різних специфічних понять. Однак не тільки ідеї важливі в наукових творчих процесах, але і спосіб їх поєднання. Тому необхідно представити кожне поняття вузлом мережі та з'єднати два вузли

Табл. 7.3. Деякі особливості мережі понять. Емпірично спостережувана мережа (перший рядок) порівнюється з трьома різними моделями (Ердоша-Рені, Барабаші-Альберта та моделі GBPS (зростання за блоками з переважним вибором), які обговорюються нижче. Наведено чисельні результати для наступних характеристик: кількість вузлів N , кількість зв'язків L , щільність зв'язків ρ , середній ступінь вузла $\langle k \rangle$, його стандартне відхилення σ і максимальне значення $k_{\max}$, асортативність змішування за ступенями r , середній коефіцієнт кластеризації $\langle C \rangle$ і глобальна транзитивність T .

	N	$L \times 10^6$	ρ	$\langle k \rangle$	σ	$k_{\max}$	r	$\langle C \rangle$	T
Емпірична	11853	5.38	7.66%	908	1146	9970	-0.28	0.74	0.38
Ердоша-Рені	11853	5.38	7.66%	908	29	1023	0.00	0.08	0.08
Барабаші-Альберта	11853	5.38	7.66%	908	568	3875	0.01	0.15	0.15
Модель GBPS	11554	1.50	2.25%	260	788	7603	-0.62	0.95	0.12

зв'язком одиничної ваги, якщо відповідні поняття з'явилися разом принаймні в одній публікації. Структура та еволюція цієї мережі, яка надалі називається емпіричною мережею понять, є предметом подальшого аналізу. Отримана мережа емпіричних понять складається з $N = 11853$ вузлів, з'єднаних $L = 5382448$ зв'язками⁵.

У таблиці 7.3 в першому рядку (позначеному як 'емпіричний') наведено основні характеристики мережі понять, побудованих на основі даних, описаних у попередньому абзаці. Серед наведених характеристик, помітно, що емпірично спостережувана мережа понять дуже щільна: щільність зв'язків $\rho = 7,66\%$. Це число вказує на щільність понять пов'язаних в межах розглянутої дисципліни: автори які проводять дослідження з фізики, широко використовують загальноприйняту термінологію. Одним із наслідків є високе значення середнього ступеня вузла. Стандартне відхилення розподілу ступеня вузла вказує на високий рівень неоднорідності серед статистики спільного виникнення понять. Це також можна спостерігати з перекошеної форми гістограми значень ступеня вузла $N(k)$, як показано на малюнку 7.7 сірими дисками. Хвіст гістограми можна візуально порівняти зі степеневою функцією $k^{-\gamma}$ з показником, близьким до $\gamma = 1$. Хоча

⁵Усі властивості мережі було розраховано за допомогою реалізації пакету Python `igraph` [302].

цю емпіричну мережу не можна формально класифікувати як *щільну мережу* [303, 304], вона набагато щільніша порівняно з іншими реальними мережами [23]. Подібні форми розподілу ступенів вузла були знайдені для кількох інших аналогічних емпіричних мереж [292, 293]. Від’ємне значення асортативного змішування за ступенями $r = -0,28$, визначене як коефіцієнт кореляції Пірсона між ступенями вузлів на обох кінцях зв’язків у мережі, вказує на те, що в мережі поняття вузли з високим ступенем зв’язків сильно притягують вузли з низьким ступенем. Наявність шаблонів зв’язності характеризується порівняно високими значеннями середнього коефіцієнта кластерності $\langle C \rangle$ і глобальної транзитивності T (пор. $\langle \rangle = T = 1$ для повного графа та $\langle C \rangle = T = 0$ для дерева). Для вузла i зі ступенем $k_i > 1$ коефіцієнт кластерності – відношення існуючих зв’язків m_i між сусідніми вузлами до всіх можливих зв’язків між ними. У свою чергу, глобальна транзитивність T визначається як співвідношення між кількістю замкнутих триплетів у мережі та загальною кількістю мережевих триплетів [305]. Різниця між значеннями $\langle C \rangle$ і T вказує на конкретні топологічні особливості мережі. Маючи під рукою кількісні показники основних функцій мережі, продовжимо моделювання процесу зростання, який пояснює топологію мережі, подібної до емпірично спостережуваної.

Ми починаємо аналіз з моделей випадкового графа Ердоша-Рені [306] і моделі переважного приєднання Барабаші-Альберта [55]. Обидві моделі дозволяють генерувати нескорельовані мережі з тією ж кількістю вузлів N і зв’язків L , що й емпірична. Отже, щільність зв’язків ρ і середній ступінь вузла $\langle k \rangle$ співпадають. Розбіжності стають очевидними при більш глибокому аналізі. Результати розрахунку характеристик мережі для ансамблю усередненого за більш ніж 100 реалізаціями для кожної моделі показано у 2-му та 3-му рядках таблиці 7.3. Випадковий граф Ердоша-Рені більш однорідний, ніж емпірична мережа: стандартне відхилення σ майже в 40 разів менше, ніж для емпіричної мережі поняття, максимальний ступінь вузла $k_{\max}$ перевищує його середнє значення $\langle k \rangle$ лише на 12%. Це можна побачити на малюнку 7.7, де відповідна гістограма $N(k)$ показана чорними дисками. Модель Барабаші-Альберта, ключовими складовими якої є

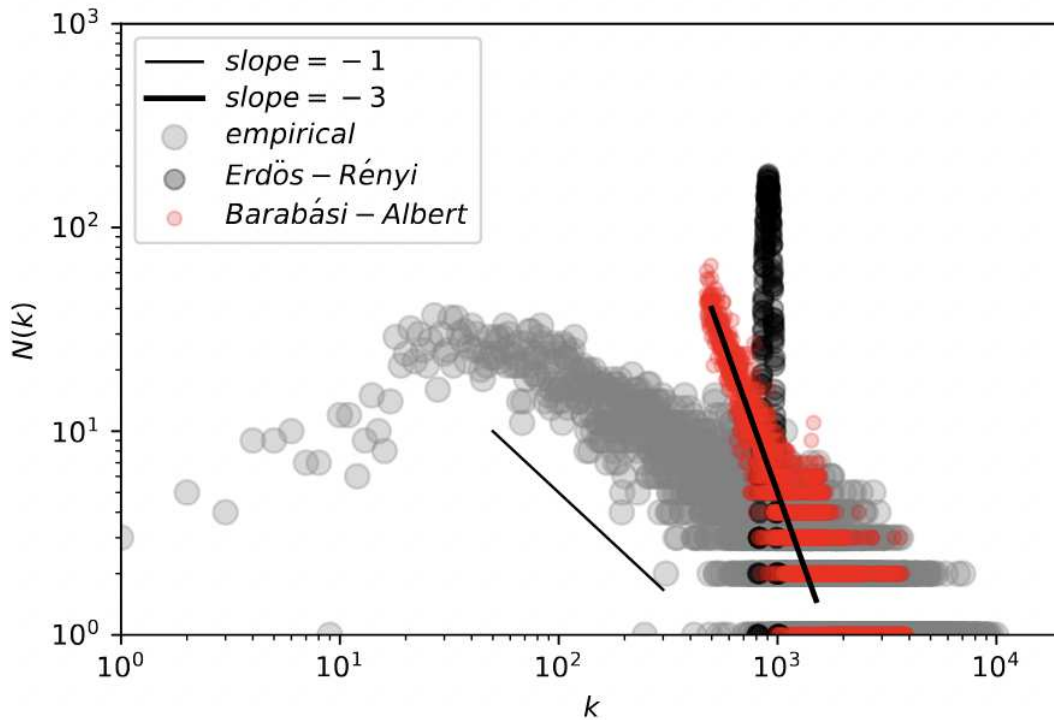


Рис. 7.7. Гістограми ступеня вузла $N(k)$ для мереж понять, розглянутих у дослідженні. Емпірично спостережувана мережа (сірі диски) порівнюється з моделями Ердоша-Рені та Барабаші-Альберта (чорні та червоні диски відповідно).

зростання та переважне приєднання, краще відтворює неоднорідність вузлів емпіричної мережі: $k_{\max}$ перевищує $\langle k \rangle$ більш ніж на 300%, а σ майже в 20 разів перевищує своє значення для графа Ердоша-Рені. Проте загасання $N(k)$ відбувається набагато швидше, ніж в емпіричній мережі (див. червоні диски на малюнку 7.7 і суцільну лінію, яка відповідає $N(k) \sim k^{-\gamma}$ з показником загасання моделі Барабаші-Альберта $\gamma = 3$ [55]). Розбіжності ще більш виражені, коли розглядати структуру зв'язків між вузлами різного ступеня. Подібно до графа Ердоша-Рені, мережа Барабаші-Альберта не є ні асортативною, ні дисасортативною, що вказує на особливість емпіричної мережі понять, які не можуть бути охоплені моделями. Інша особливість, що не фіксується цими моделями, це різниця між середнім коефіцієнтом кластерності $\langle C \rangle$ і глобальною транзитивністю T , незважаючи на те, що значення для моделі Барабаші-Альберта ближчі до значень для емпіричної мережі, ніж для мережі Ердоша-Рені.

7.3.4. Представлення моделі GBPS (growth by blocks with preferential selection): зростання блоками із переважним приєднанням

Щоб зрозуміти можливі механізми, які призводять до структури схожої як і для емпіричної мережі, було розроблено модель, яка відтворює її емпірично спостережувані особливості. При цьому головною метою було не досягнення високої точності відтворення заданого набору показників, а якісний опис основних тенденцій у структурі мережі та пояснення механізмів її генерації. Модель еволюції мережі, яку було запропоновано, базується на одночасному врахуванні двох факторів: зростання за блоками та переважному вибору понять. Розглянемо процес із дискретним часом $t = 1, \dots, \mathcal{N}$. На кожному кроці часу створюється нова стаття A_t , яка містить блок понять n_t . Він приєднується до мережі понять як повний граф із n_t вузлів. Генерування статті складається з двох кроків:

- (i) визначення розміру блоку n_t ;
- (ii) вибір конкретних понять для заповнення блоку.

Нижче детальніше описано механізм відбору понять.

Нові проти вже існуючих понять

Процес відбору понять для A_t здійснюється по одному, доки не буде досягнуто необхідної кількості n_t . Нижче наведено процедуру вибору i -го поняття для статті A_t , де i приймає значення від 1 до n_t . Як пояснено вище, модель передбачає, що з фіксованою (доволі низькою) імовірністю

$$\pi_{t,i}^{\text{novel}} = \nu \quad (7.1)$$

i -те поняття є новим, тобто, не належить множині $\mathbb{C}_{t-1}$. Відповідно, з імовірністю

$$\pi_{t,i}^{\text{exist}} = 1 - \nu \quad (7.2)$$

i -е поняття належить до множини понять $\mathbb{C}_{t-1}$. Для зручності позначимо підмножину існуючих понять із $\mathbb{C}_{t-1}$, що містяться в перших $t-1$ статтях і не включають

$i - 1$ вибраних понять для статті A_t , як $\mathbb{C}_{t \setminus i-1}$. Після того, як існуюче поняття обрано, його не можна обрати повторно для тієї ж статті. Отже, його потрібно вибирати з множини $\mathbb{C}_{t \setminus i-1}$.

Нижче запропоновано два сценарії вибору i -го поняття для статті A_t з множини вже існуючих понять.

Рівномірний процес відбору

Спочатку розглянемо рівномірний процес відбору (uniform selection process, USP). Це відносно простий сценарій. Він припускає, що кожне поняття, що з'явився в множині $\mathbb{C}_{t-1}$, має однакову ймовірність бути обраним. Тобто, ймовірність $\pi_{t,i}^{\text{exist}}(C_j)$, з якою поняття C_j буде обране як i -е для статті A_t , задається

$$\pi_{t,i}^{\text{exist,USP}}(C_j) = \frac{(1 - \nu)}{|\mathbb{C}_{t \setminus i-1}|}, \quad C_j \in \mathbb{C}_{t \setminus i-1}. \quad (7.3)$$

Тут $|\mathbb{C}_{t \setminus i-1}|$ є розміром множини $\mathbb{C}_{t \setminus i-1}$.

Переважаючий процес відбору понять

Розглянемо переважний процес відбору понять (preferential selection process, PSP). На відміну від [287, 292, 293], тут перевага не визначається властивостями початкової мережі. Жодна вхідна інформація про зв'язність між поняттями не потрібна. У цьому сценарії ймовірність $\pi_{t,i}^{\text{exist}}(C_j)$ того, що поняття C_j буде обране, пропорційна кількості статей $\mathcal{N}_{t-1}(C_j)$, у яких цей він появився:

$$\pi_{t,i}^{\text{exist,PSP}}(C_j) = \frac{(1 - \nu)(\mathcal{N}_{t-1}(C_j))}{\sum_{\ell} \mathcal{N}_{t-1}(C_{\ell})}, \quad C_j \in \mathbb{C}_{t \setminus i-1}, \quad (7.4)$$

де знаменник є сумою кількості появ кожного поняття C_{ℓ} з множини $\mathbb{C}_{t \setminus i-1}$ у всіх статтях.

У обох сценаріях мережа понять зростає за рахунок додавання кліків до існуючого графа. На кожному кроці t , коли згенеровано нову статтю A_t , що містить n_t понять, вона входить до мережі понять у вигляді повного графа з n_t вузлами та $n_t(n_t - 1)/2$ зв'язками між ними. Таким чином, протягом своєї еволюції в згенерованій мережі понять можуть спостерігатися наступні процеси: і)

додавання нових вузлів, ii) виникнення зв'язків як між новими вузлами, так і між новими та вже існуючими вузлами, iii) виникнення нових зв'язків між раніше незв'язаними існуючими вузлами, що є важливим для генерації щільних мереж.

Хоча більшість структур складних мереж як природного, так і штучного походження є розрідженими, існує постійний інтерес до так званих щільних мереж, які характеризуються розходженням середнього ступеня вузла. Для розподілів типу scale-free це означає, що відповідний показник спаду приймає значення від 1 до 2 [304, 307]. Приклади таких структур можна знайти у мозку [308], в інтернеті (див. [303] та посилання в ньому), у соціальних рекомендаційних системах [309]. Звичні моделі зростання на основі переважного приєднання не здатні відтворити властивості щільних мереж. Причина полягає в тому, що зростання в таких моделях відбувається шляхом однорідного додавання вузлів та зв'язків, що призводить до розріджених структур. Деякі сценарії обходять це обмеження та призводять до утворення щільних мереж [304, 307, 310–313]. Хоча спостережувана мережа понять характеризується дуже високою щільністю зв'язків, строго кажучи, її не можна назвати щільною мережею у вище зазначеному сенсі. Однак, ми вважаємо, що запропонована вище модель еволюції може бути корисною при вивченні інших мереж з високою щільністю зв'язків.

Після визначення процесів, що керують генерацією мережі понять, перейдемо до дослідження топологічних властивостей мережі, згенерованої за описаними вище правилами.

7.3.5. Результати для різних механізмів відбору понять

Оскільки кількість зв'язків L безпосередньо пов'язана із середнім ступенем вузла $\langle k \rangle$, середні ступені вузлів у мережах, згенерованих за допомогою механізму PSP, менші, ніж у емпіричній мережі понять, тоді як середні ступені вузлів у мережах, згенерованих за допомогою механізму USP, перевищують відповідне значення для емпіричної мережі понять. Серед двох розподілів розмірів блоків емпіричний розподіл забезпечує ближче значення середнього ступеня, якщо використовується

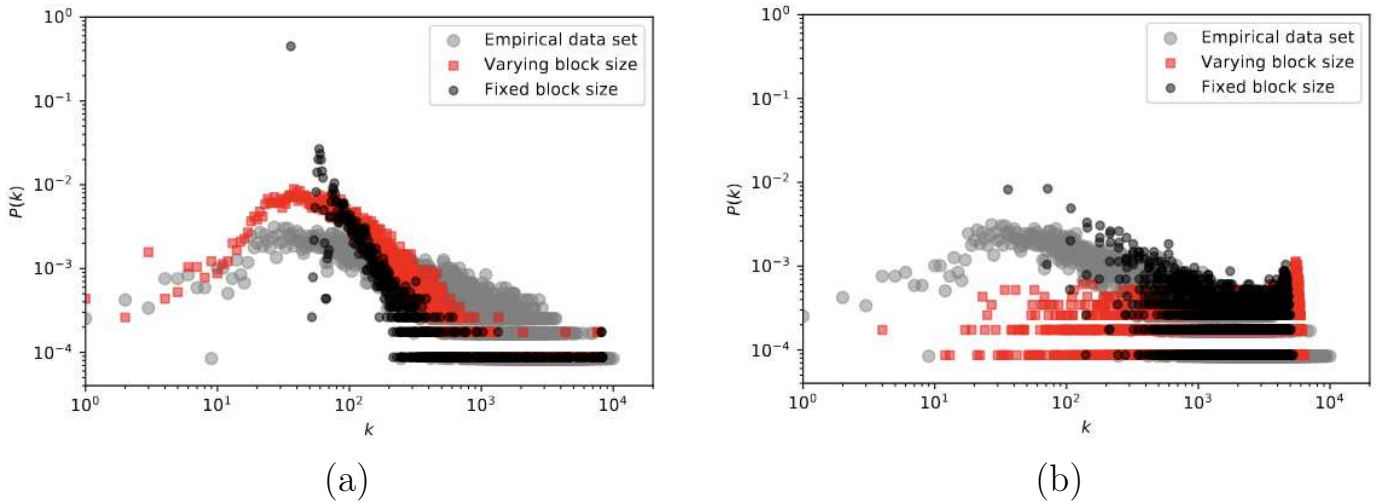


Рис. 7.8. Розподіли ступенів вузлів для мереж, згенерованих для (а) PSP та (б) USP сценаріїв відбору понять, представлені на подвійній логарифмічній шкалі. Чорні кола позначають мережі понять, згенеровані із застосуванням блоків фіксованого розміру, а червоні квадрати — мережі понять, згенеровані із застосуванням блоків змінного розміру, отримані з емпіричних даних. Для порівняння на рисунку також зображено розподіли ступенів вузлів емпіричної мережі понять, що представлені сірими дисками. Результати відповідають єдиній реалізації згенерованих мереж понять для кожного набору ступенів вільності.

механізм PSP. Але в разі механізму USP мережі, згенеровані з фіксованими розмірами блоків, мають значення $\langle k \rangle$, що ближче до оригінальної мережі понять.

Як видно з рисунка, жоден із розглянутих механізмів відбору понять у поєднанні з розглянутими розподілами розмірів блоків не може точно відтворити розподіл ступенів емпіричної мережі понять. Проте, якщо обрано механізм PSP, можна відобразити його загальну форму.

Якщо механізм PSP використовується у поєднанні з фіксованим розміром блоку (чорні диски на Рис. 7.8а), розподіл ступенів для відносно великих значень є степеневим-спадним $P(k) \sim k^{-\gamma}$ з показником близьким до $\gamma \approx 3$. Загасання з $\gamma = 3$ також очікується для мережі Барбаші–Альберта [55], яка використовувала переважне приєднання під час процесу генерації мережі. Згенеровані мережі понять мають нульову ймовірність знаходження вузла зі ступенем $k < 36$, оскільки мінімальний розмір блоку встановлює порогове значення для ступеня вузла.

Якщо механізм PSP використовується у поєднанні зі змінним розміром бло-

ку (червоні диски на Рис. 7.8a), розподіл ступенів вузлів згенерованої мережі ближчий до розподілу ступенів емпіричної мережі, ніж розподіл для згенерованої з фіксованим розміром блоку. Оскільки мінімальний блок може складатися з одного поняття, існує ненульова ймовірність знаходження ізолюваного вузла у згенерованій мережі, що не видно на Рис. 7.8a через логарифмічну шкалу. Тоді $P(k)$ має тенденцію зростати зі збільшенням k до значень $k = 30 \div 50$, подібно до розподілу ступенів емпіричної мережі понять. Подальший спад розподілу ступенів вузлів відбувається повільніше, ніж у згенерованій мережі понять з фіксованим розміром блоку, проте швидше, ніж в емпіричній мережі понять. Навіть якщо механізм PSP у поєднанні зі змінним розподілом розмірів блоку не дозволяє згенерувати мережу понять, що точно відтворює розподіл ступенів вузлів емпіричної мережі понять, він дозволяє отримати мережу з $P(k)$, яка має подібні властивості до емпіричної мережі: зростання $P(k)$ для малих значень k та відносно повільний спад для великих значень k .

Розподіли ступенів вузлів для згенерованих мереж, що використовують механізми PSP та USP, показані на Рис. 7.8 (a та b відповідно). Для порівняння також наведено розподіл $P(k)$ для емпіричної мережі.

Порівняння основних особливостей мережі понять, згенерованій завдяки моделі зростання за блоками із механізмом переважного вибору понять наведено в останньому рядку таблиці 7.3. Так само як і для двох описаних раніше моделей, тут виводяться значення усереднені за ансамблем із 100 реалізацій мережі. Кількість статей, згенерованих у симуляціях покладали таку ж саму, як кількість статей ($\mathcal{N} = 36386$) у наборі емпіричних даних. Фіксація кількості статей не гарантує, що згенерована мережа матиме однакову кількість вузлів (понять). Для вільного параметра моделі було обрано $\nu = 8.8 \cdot 10^{-3}$, щоб отримати розумне значення кількості понять N див. [23], де розглядалися інші механізми вибору понять. Як видно з таблиці, тепер змодельована мережа понять має дві особливості, які не вдалося відтворити моделям Ердоша-Рені та Барабаші-Альберта. Вона є дизасортативною ($r < 0$) і її середній коефіцієнт кластерності та глобальна транзитивність відрізняються один від одного. Той факт, що зростання за блоками

та механізм переважного вибору дозволяють правильно зрозуміти основні особливості мережі понять додатково підтверджується формою гістограми ступеня вузла.

7.4. Висновки

Було проведено дослідження співпраці українських авторів у ЖФД за період 1996–2016. На основі отриманих результатів побудовано мережі співпраці та проаналізовано окремі мережеві характеристики. Також аїдтверджено низку тенденцій, а саме: більшість публікацій належить авторам з великих наукових центрів, таких як Львів (439 статей) та Київ (181 стаття). Ці міста є ключовими вузлами мережі співпраці з найвищими ступенями (15 і 12 відповідно). Лідери публікаційної активності залишалися стабільними протягом усього аналізованого періоду. Натомість низка міст з'являлася лише одноразово, наприклад, Хмельницький, Кропивницький чи Слов'янськ. Аналіз співпраці між установами НАН України та ВНЗ показав, що частка публікацій ВНЗ перевищує інші в кожному році. Частка спільних статей між цими двома типами установ змінюється залежно від року, але ніколи не зникає, що свідчить про сталу взаємодію академічного та освітнього секторів. Проведений аналіз показав, що наукова діяльність українських авторів у ЖФД характеризується високою концентрацією у кількох наукових центрах, стабільною співпрацею між академічними та освітніми установами, а також обмеженою географічною представленістю наукових ініціатив у деяких регіонах. Подальше стимулювання міжнародної співпраці та залучення менш активних регіонів може стати ключовими напрямками для розвитку української наукової спільноти.

У другій частині цього розділу виконується аналіз мережі наукових понять, побудованих на реальних даних. Було виявлено низку специфічних особливостей, таких як висока щільність, дисортативність, різниця між транзитивністю та середнім коефіцієнтом кластеризації разом із “перекошеним” розподілом ступенів вузла. Особливістю емпіричної мережі наукових понять є високе значення щільності

зв'язків. Значення ρ , знайдене в дослідженні, означає, що будь-яке випадково вибране поняття в середньому зустрічається разом з будь-яким іншим поняттям з імовірністю $\rho \simeq 7,66\%$. У свою чергу, це свідчить про те, що наукові поняття тісно пов'язані в рамках розглянутої дисципліни. Були зроблені спроби знайти відповідну модель для відтворення такого поєднання характеристик мережі та показано, що традиційні мережеві моделі – граф Ердоша-Рені та модель Барабаші-Альберта – не можуть відтворити мережу з властивостями реальних семантичних мереж.

Запропонована генеративна модель відтворює та пояснює цю функцію мережі. Хоча отримана мережа не належить до класу щільних мереж, які активно обговорюються в літературі [304, 307, 310–313], але модель запропонована тут для опису еволюції мережі понять може бути корисною при вивченні інших мереж з високою щільністю зв'язків. Вона побудована на загальній логіці використання наукових понять: поняття не надходять ізольовано, а їх група повинна використовуватися для опису змісту. Тому природно моделювати зростання мережі як надходження наборів понять з кожною новою публікацією. У цьому випадку повністю пов'язана група вузлів представляє цей набір понять. Зростання мережі понять відбувається не тільки за рахунок додавання нових вузлів і приєднання їх до існуючих у графі, а й за рахунок появи нових зв'язків між раніше існуючими вузлами. Останній випадок може відповідати появі зв'язків між сформованими науковими галузями та може стосуватися нетипових комбінацій наукових знань [288]. Показано, що для отримання задовільних результатів у моделюванні таких явищ необхідно враховувати два механізми: i) *зростання за блоками* та ii) *переважний вибір* понять. Запропонована проста модель дозволяє згенерувати мережу з властивостями, якісно подібними до властивостей мережі емпіричних понять. Жоден із цих механізмів сам по собі не дає задовільного результату: спостережувана структура мережі відтворюється завдяки їх взаємодії.

ВИСНОВКИ

Основні висновки та результати проведених досліджень можна сформулювати у вигляді наступних тверджень.

1. Запропоновано нову спінову модель для дослідження колективної поведінки на складних мережах – модель Ізінга зі змінною довжиною спіну $\mathcal{S}$. Зберігаючи бінарність моделі Ізінга, спіни можуть відрізнятися за значенням магнітного моменту. Це, в свою чергу, дозволяє моделювати соціальні системи, у яких агенти відрізняються за силою емоцій чи за рівнем переконання. Хоча така модель спочатку була запропонована для опису колективних явищ у соціальних системах, і, відповідно, для дослідження фазових переходів на графах, однак пізніше її було застосовано і для опису класичних проблем статистичної фізики, зокрема, для моделювання критичної поведінки тривимірних структурно-невпорядкованих магнетиків.
2. Було розглянуто модель зі степенево-спадним розподілом за довжинами спінів $q(\mathcal{S}) \propto \mathcal{S}^{-\mu}$ (оскільки багато залежностей для моделей на складних мережах описуються степеневими асимптотиками) на графах трьох типів (повному графі, графі Ердоша-Рені та на відпаленій безмасштабній мережі з функції розподілу за ступенем вузлів $P(k) \propto k^{-\lambda}$). Була отримана вільна енергія моделі і проаналізовано її вирази в різних діапазонах параметрів. На основі вільної енергії отримані вирази для різних термодинамічних функцій. Розглянуто асимптотичну поведінку термодинамічних характеристик в околі критичної точки, а саме – критичні показники, поправки до логарифмічних поправок, скейлінгові функції та відношення критичних амплітуд.
3. Передбачено появу логарифмічних поправок до головних степеневих асимптотик термодинамічних характеристик моделі Ізінга із випадковою степе-

нево-спадною довжиною спіна на безмасштабній мережі. Такі поправки мають вигляд $(??)$, а їх значення для різних термодинамічних величин приведені в Таблиці 3.3. Знайдені логарифмічні поправки відрізняються від тих, що характеризують неперервні фазові переходи на ґратках при верхній критичній вимірності d_c чи на безмасштабних мережах при верхньому критичному значенні показника λ_c . Відмінність полягає як у тому, що вони спостерігаються вздовж ліній фазової діаграми, так і у тому, що за своїми значеннями вони належать до нового класу універсальності.

4. Зміни в магнітній критичній поведінці структурно-невпорядкованих магнетиків зазвичай підтверджуються експериментально та в комп'ютерному моделюванні для розведених систем, що складаються з магнітних і немагнітних компонент. У дисертаційній роботі показано, що подібні ефекти можна спостерігати не тільки для розведених магнетиків з немагнітними домішками, але вони можуть також реалізуватися, наприклад, при наявності двох (і більше) хімічно різних магнітних компонент. З цією метою проведено дослідження критичної поведінки суміші двох Ізінгівських магнетиків із різними довжинами елементарних магнітних моментів. Показано, що така модель належить до класу універсальності 3D моделі Ізінга з розведенням вузлів. Пояснено ефективну критичну поведінку і продемонстровано її особливості за допомогою Монте-Карло моделювання. Таким чином, дослідження надало нові уявлення про вплив структурного безладу на критичну поведінку магнетиків і показало можливості налаштування критичних властивостей систем за допомогою варіацій мікроскопічних параметрів.
5. Було здійснено детальний огляд робіт і отриманих результатів для $(q + r)$ -станової моделі Поттса з невидимими станами (де r – кількість невидимих станів), для яких спіни, що перебуває у одному з цих станів, не взаємодіє з іншими спінами у системі. Було вперше розглянуто та отримано вирази для статистичної суми і вільної енергії моделі на повному графі (коли всі вузли пов'язані між собою, тобто, у наближенні середнього поля), а також

на відпаленій безмасштабній мережі.

6. Отримані результати для моделі Поттса з невидимими станами на безмасштабній мережі підтверджують, що q, r та λ відіграють роль глобальних параметрів, що визначають критичну поведінку системи. Показано, що додавання невидимих станів викликає новий по своїй природі додатковий фазовий перехід першого роду, який для певного діапазону r існує поряд з фазовим переходом, який існував при $r = 0$. Це означає, що топологічний та ентропійний ефекти на фазовий перехід є незалежними. Для випадку безмасштабної мережі вплив топології, який представлений граничними значеннями $\lambda_c(q)$, домінує над ентропійним фактором, що визначається кількістю невидимих станів r .
7. Проведено аналіз критичної поведінки моделі Блюма-Капеля за допомогою аналізу нулів статистичної суми. Модель розглянуто на повному графі, де в термодинамічній границі точні розв'язки демонструють асимптотичну поведінку, характерну для теорії середнього поля. Проведений аналіз нулів для наближеного представлення статистичної суми у комплексній площині параметрів (температури, магнітного поля, кристалічного поля) дозволив отримати детальну інформацію про фазові переходи та критичну поведінку. Встановлено, що нулі Лі-Янга розташовуються на уявній осі, підтверджуючи наявність фазового переходу другого роду. Поведінка нулів Фішера та нулів кристалічного поля поблизу критичних і трикритичних точок надає додаткову інформацію про механізми фазових переходів, підтверджуючи теоретичні передбачення. Навіть у випадку аналізу розкладених наближених виразів вдалося отримати результати, що автоматично задовольняють скейлінг координат нулів від розміру системи.
8. Продемонстровано, як ідеалізовані моделі мереж та моделі їх росту реалізуються у спостережуваних мережах на практиці. З цією метою використовуючи методи теорії складних мереж було проведено дослідження структури і параметрів для мережі співпраці (на підставі мережі співавторства “Жур-

налу Фізичних Досліджень”, що видається у Львові) та семантичної мережі понять (на підставі термінів із статей на сервері препринтів arXiv).

9. При дослідженні мережі наукових концепцій було виявлено нетипову структуру для мережі, а саме – високу щільність зв’язків і специфічні властивості, такі як дисортативність та нерівномірний розподіл ступенів вузлів. Існуючі моделі, які переважно використовують для моделювання таких систем (як граф Ердоша-Рені та Барабаші-Альберта), не змогли відтворити ці характеристики. Саме тому була запропонована нова генеративна модель, яка пояснює еволюцію таких мереж. Вона включає два механізми: зростання за блоками та переважний вибір понять, які в комбінації забезпечують результат, що корелює із структурою реальних семантичних мереж, відтворюючи мережу з високою щільністю зв’язків, і є корисною для вивчення інших схожих мереж.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Albert R., Barabási A. L. Statistical mechanics of complex networks // *Rev. Mod. Phys.* 2002. Vol. 74. P. 47.
2. Dorogovtsev S. N., Mendes J. F. F. Evolution of Networks: From Biological Networks to the Internet and WWW. Oxford : Oxford University Press, 2003.
3. Complex networks / Holovatch Y., von Ferber C., Olemskoi A., Holovatch T., Mryglod O., Olemskoi I., and Palchykov V. // *J. Phys. Stud.* 2006. Vol. 10. P. 247. In Ukrainian.
4. Barrat A., Barthélemy M., Vespignani A. Dynamical Processes on Complex Networks. Cambridge University Press, 2008.
5. Newman M. *Networks: An Introduction*. Oxford University Press, 2010.
6. Holovatch Yu., Kenna R., Thurner S. Complex systems: physics beyond physics // *Eur. J. Phys.* 2017. feb. Vol. 38, no. 2. P. 023002.
7. Dorogovtsev S., Goltsev A., Mendes J. Critical phenomena in complex networks // *Rev. Mod. Phys.* 2008. Vol. 80. P. 1275–1335.
8. Ising model with variable spin/agent strengths. / Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., and Kenna R. // *J. Phys. Complex.* 2020. Vol. 1, no. 3. P. 035008.
9. Generalized Ising Model on a Scale-Free Network: An Interplay of Power Laws / Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., and Kenna R. // *Entropy*. 2021. Vol. 23, no. 9.
10. Lynn C., Bassett D. The physics of brain network structure, function and control // *Nat. Rev. Phys.* 2019. Vol. 1. P. 318–332.
11. Seguin C., van den Heuvel M., Zalesky A. Navigation of brain networks // *PNAS*. 2018. Vol. 115, no. 24. P. 6297–6302.
12. Tamura R., Tanaka S., Kawashima N. Phase Transition in Potts Model with

- Invisible States // *Prog. Theor. Phys.* 2010. Vol. 124, no. 2. P. 381.
13. Tanaka S., Tamura R., Kawashima N. Phase Transition of Generalized Ferromagnetic Potts Model Effect of Invisible States // *J. Phys. Conf. Ser.* 2011. Vol. 297. P. 012022.
 14. Tanaka S., Tamura R. Dynamical properties of Potts model with invisible states // *Journal of Physics: Conference Series*. 2011. Vol. 320. P. 012025.
 15. Potts model with invisible states: a review / Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Y., and Kenna R. // *Eur. Phys. J. Special Topics*. 2023. P. 1951–6401.
 16. Marginal dimensions of the Potts model with invisible states / Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Y., and Kenna R. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2016. Vol. 49. P. 255001.
 17. Sarkanych P., Krasnytska M. Ising model with invisible states on scale-free networks // *Phys. Lett. A*. 2019. Vol. 383, no. 27. P. 125844:1–5.
 18. Sarkanych P., Krasnytska M. Potts model with invisible states on scale-free network // *Condens. Matt. Phys.* 2023. Vol. 26, no. 1. P. 13507.
 19. Effective and asymptotic criticality of structurally disordered magnets / Dudka M., Krasnytska M., Ruiz-Lorenzo J. J., and Holovatch Y. // *JMMM*. 2023. Vol. 575. P. 170718.
 20. Emergence of the 3D diluted Ising model universality class in a mixture of two magnets / Ruiz-Lorenzo J., Dudka M., Krasnytska M., and Holovatch Y. // *Phys Rev. E (submitted)*. 2024. arXiv:2411.16659.
 21. Partition function zeros for the Blume-Capel model on a complete graph / Honchar Y., Krasnytska M., Holovach Y., Berche B., and Kenna R. // *Low Temp. Phys. (submitted)*. 2025. arXiv:2501.04452.
 22. A mechanism for evolution of the physical concepts network / Palchykov V., Krasnytska M., Mryglod O., and Holovatch Y. // *Condens. Matter Phys.* 2021. Vol. 24, no. 2. P. 24001.
 23. Network of scientific concepts: empirical analysis and modeling / Palchykov V., Krasnytska M., Mryglod O., and Holovatch Y. // *Advances in Complex Systems*.

2021. Vol. 21, no. 1. P. 2140001.
24. 20 років “Журналу фізичних досліджень”. Спроба журналометричного аналізу / Головач , Красницька , Мриглод , and Ровенчак // *Журн. фіз. дослідж.* 2017. Vol. 21, no. 4. P. 4001.
 25. Статистична фізика складних систем / Головач , Дудка , Блавацька , Пальчиков , Красницька , and Мриглод // *Журн. фіз. дослідж.* 2017. Vol. 22, no. 2. P. 2801.
 26. Krasnytska M. Ising model with varying spin strength on a scale-free network: scaling functions and critical amplitude ratios // *Condens. Matt. Phys.* 2024. Vol. 27, no. 3. P. 33603:1–10.
 27. Critical behavior on complex networks: inhomogeneous mean-field vs Lee-Yang-Fisher formalism / Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y., and Kenna R. // 42nd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics. Lyon, France. 2017. February 8-10. P. 27.
 28. Marginal dimensions of the Potts model with invisible states / Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Y., and Kenna R. // 42nd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics. Lyon, France. 2017. February 8-10. P. 119.
 29. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y. Ising model with power-law spin length distribution // Christmas Discussions 2018, Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv. Lviv, Ukraine. 2018. January 11-12. P. 10.
 30. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y. Ising model with a power-law spin length distribution on different graphs // 43rd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics. Krakow, Poland. 2018. May 1-4. P. 70.
 31. Красницька , Берш , Головач Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна // 18-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Львів, Україна. 2018. Червень 7-8. Тези доповідей.
 32. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y. New critical behaviour in a complex

- system induced by two competing power laws // Workshop on Current Problems in Physics. Lviv, Ukraine. 2018. July 3-4. P. 11.
33. Фізика і фізики в НТШ у Львові / Головач , Гончар , Красницька , and Дудка // Різдвяні дискусії – 2019, кафедра теоретичної фізики ЛНУ ім. І. Франка. Львів, Україна. 2019. January 10-11. P. 4.
 34. Self-averaging on annealed networks / Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y., and Kenna R. // 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, dedicated to the 110th Anniversary of the Birth of M. M. Bogolyubov. Lviv, Ukraine. 2019. July 3-6. P. 40.
 35. Sarkanych P., Krasnytska M. Ising model with invisible states on scale-free networks // 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, dedicated to the 110th Anniversary of the Birth of M. M. Bogolyubov. Lviv, Ukraine. 2019. July 3-6. P. 61.
 36. Sarkanych P., Krasnytska M. Critical behaviour of the Ising model with invisible states on a scale-free network // 45th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics. Online. 2020. September 14-16. P. 32.
 37. Middle European Cooperation in Statistical Physics: a historical overview / Berche B., Dudka M., Folk R., Holovatch Y., Kenna R., Krasnytska M., Mryglod O., Sarkanych P., and Sznajd J. // 45th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics. Online. 2020. September 14-16. P. 20.
 38. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states: critical behaviour on a scale-free network // 46th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO46). Online. 2021. May 11-13. P. 103.
 39. Красницька , Головач Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна на безмасштабній мережі // XXI Всеукраїнська школа-семінар і Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Львів, Україна. 2021. Жовтень 11-12. P. 18.
 40. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states on a scale-free network // 13th Workshop on Current Problems in Physics. Lviv, Ukraine. 2021.

October 26-27. P. 11.

41. Krasnytska M. Ising model with varying spin strength on a scale-free network: scaling functions and critical amplitudes ratios // 47th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO47). Online. 2022. June 12-16. P. 15.
42. Krasnytska M. Degree vs Strength: an interplay of power laws for the Ising model on networks // Statistical Physics and Low-Dimensional Systems – 2022. Pont-à-Mousson, France. 2022. May 11-13.
43. On the criticality of structurally disordered magnets / Dudka M., Krasnytska M., Ruiz-Lorenzo J., and Holovatch Y. // DPG Meetings 2023. Dresden, Germany. 2023. March 20-24. DY 49.2.
44. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states on a scale-free network // DPG Meetings 2023. Dresden, Germany. 2023. March 20-24. DY 45.15.
45. Ising model with variable spin/agent strengths on graphs / Krasnytska M., Holovatch Y., Berche B., and Kenna R. // DPG Meetings 2023. Dresden, Germany. 2023. March 20-24. DY 45.15.
46. Potts model with invisible states, old and new / Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Y., and Kenna R. // 48th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO48). Stará Lesná, Slovakia. 2023. May 22-26. P. 57.
47. Krasnytska M. Potts model with invisible states: changeover to the percolation transition // SigmaPhi2023 Conference. Chania-Crete, Greece. 2023. July 10-14.
48. Модель Поттса з невидимими станами: огляд / Красницька , Сарканич , Берш , Головач , and Кенна // XXIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Львів, Україна. 2023. Жовтень 26-27. P. 16.
49. Invisible states Potts model / Krasnytska M., Sarkanych P., Holovatch Y., Berche B., and Kenna R. // Bogolyubov Kyiv Conference Problems of Theoretical and Mathematical Physics. Kyiv, Ukraine. 2024. September 24-26. P. 40.

50. Ефективна критична поведінка в моделі Блюме-Капеля на повному графі / Гончар , Красницька , Берш , Головач , and Кенна // XXIV Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Львів, Україна. 2024. Жовтень 24-25. Р. 35.
51. Wikipedia. Seven Bridges of Königsberg. https://en.wikipedia.org/wiki/Seven_Bridges_of_K%C3%B6nigsberg. Accessed: 2025-01-14.
52. Erdős P., Rényi A. On Random Graphs. I // *Publicationes Mathematicae*. 1959. Vol. 6, no. 3–4. P. 290–297. Access mode: https://www.renyi.hu/~p_erdos/1959-11.pdf.
53. Six degrees of separation. https://en.wikipedia.org/wiki/Six_degrees_of_separation. Accessed: 2025-01-14.
54. Watts D. J., Strogatz S. H. Collective dynamics of ‘small-world’ networks // *Nature*. 1998. Vol. 393. P. 440–442.
55. Barabási A.-L., Albert R. Emergence of scaling in random networks // *Science*. 1999. Vol. 286. P. 509–512.
56. Lorenz E. N. Deterministic Nonperiodic Flow // *Journal of the Atmospheric Sciences*. 1963. Vol. 20. P. 130.
57. Edwards S. F., Anderson P. W. Theory of Spin Glasses // *Journal of Physics, F*. 1975. Vol. 5. P. 965.
58. Wilson K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem // *Reviews of Modern Physics*. 1975. Vol. 47. P. 773.
59. Hopfield J. J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities // *PNAS*. 1982. Vol. 79. P. 2554.
60. Mandelbrot B. B. The Fractal Geometry of Nature. W.H. Freeman and Company, 1982.
61. Barabási A.-L., Pósfai M. Network Science. 1st ed. Cambridge University Press, 2016. ISBN: 978-1107076266. Access mode: <https://networksciencebook.com/>.
62. Vasiliauskaite V., Rosas F. E. Understanding complexity via network theory: a gentle introduction // *arXiv*. 2020. 2004.14845.

63. Ising E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus // *Z. Phys.* 1925. Vol. 31. P. 253.
64. Onsager L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition // *Phys. Rev.* 1944. Vol. 65. P. 117.
65. Wu F. Y. The Potts model // *Rev. Mod. Phys.* 1982. Vol. 54. P. 235–268.
66. Ferromagnetic ordering in graphs with arbitrary degree distribution / Leone M., Vázquez A., Vespignani A., and Zecchina R. // *Eur. Phys. J. B.* 2002. Vol. 28. P. 191–197.
67. Iglói F., Turban L. First- and second-order phase transitions in scale-free networks // *Phys. Rev. E.* 2002. Sep. Vol. 66. P. 036140.
68. Goltsev A., Dorogovtsev S., Mendes J. Critical phenomena in networks // *Phys. Rev. E.* 2003. Vol. 67. P. 026123.
69. Entropic equation of state and scaling functions near the critical point in uncorrelated scale-free networks / von Ferber C., Folk R., Holovatch Yu., Kenna R., and Palchykov V. // *Phys. Rev. E.* 2011. Jun. Vol. 83. P. 061114.
70. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y. Phase transitions in the Potts model on complex networks // *Condens. Matter Phys.* 2013. Vol. 16. P. 23602.
71. Mattis D. Solvable spin systems with random interactions // *Phys. Lett. A.* 1976. Vol. 56. P. 421–422.
72. Bianconi G. Mean field solution of the Ising model on a Barabási–Albert network // *Phys. Lett. A.* 2002. Vol. 303. P. 166–168.
73. Pastur L., Figotin A. Exactly soluble model of a spin glass // *Sov. J. Low Temp. Phys.* 1977. Vol. 3. P. 378–383.
74. Pastur L., Figotin A. On the theory of disordered spin systems // *Theor. Math. Phys.* 1978. Vol. 35. P. 403–414.
75. Hopfield J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 1982. Vol. 79. P. 2554–2558.
76. Mezard M., Parisi G., Virasoro M. *Spin Glass Theory and Beyond. An Introduction to the Replica Method and Its Applications.* Singapore : World Scientific, 1986.

Vol. 9. P. 476.

77. Dotsenko V. An Introduction to the Theory of Spin Glasses and Neural Networks. Singapore : World Scientific, 1994.
78. Folk R., Holovatch Y., Yavors'kii T. Critical exponents of a three-dimensional weakly diluted quenched Ising model // *Phys. Uspekhi*. 2003. Vol. 46. P. 169.
79. Betzel R. F., Bassett D. S. Generative models for network neuroscience: prospects and promise // *J. R. Soc. Interface*. 2017.
80. Defining nodes in complex brain networks / Stanley M., Moussa M., Paolini B., Lyday R., Burdette J., and Laurienti P. // *Front. Comput. Neurosci*. 2013. Vol. 7.
81. Park H. J., Friston K. Structural and functional brain networks: from connections to cognition // *Science*. 2013. Vol. 342, no. 6158. P. 1238411.
82. Bagarinao E., Watanabe H., Maesawa S. Reorganization of brain networks and its association with general cognitive performance over the adult lifespan. // *Sci. Rep.* 2019. Vol. 9. P. 11352.
83. Tadić B., Malarz K., Kułakowski K. Magnetization Reversal in Spin Patterns with Complex Geometry // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Apr. Vol. 94. P. 137204.
84. Tadić B., Gupte N. Hidden geometry and dynamics of complex networks: Spin reversal in nanoassemblies with pairwise and triangle-based interactions // *EPL*. 2020. dec. Vol. 132, no. 6. P. 60008.
85. Fisher D. S., Grinstein G. M., Khurana A. Theory of Random Magnets // *Physics Today*. 1988. 12. Vol. 41, no. 12. P. 56–67.
86. Yu. Holovatch (editor). See e.g., Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory. Singapore : World Scientific, 2004. Vol. 1–7.
87. Weak quenched disorder and criticality: resummation of asymptotic series / Holovatch Y., Blavats'ka V., Dudka M., von Ferber C., Folk R., and Yavors'kii T. // *Int. J. Mod. Phys. B*. 2002. Vol. 16. P. 4027.
88. Harris A. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // *J. Phys. C Solid State Phys.* 1974. Vol. 7. P. 1671–1692.
89. Critical behavior of a site-diluted three-dimensional Ising magnet / Birgeneau R. J., Cowley R. A., Shirane G., Joshizawa H., Belanger D. P., King A. R.,

- and Jaccarino V. // *Phys. Rev. B*. 1983. Vol. 27. P. 6747.
90. Belanger D. P., King A. R., Jaccarino V. Crossover from random-exchange to random-field critical behavior in $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ // *Phys. Rev. B*. 1986. Jul. Vol. 34. P. 452–455.
 91. Critical behavior of the three-dimensional site-random Ising magnet: $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ / Mitchell P. W., Cowley R. A., Yoshizawa H., Böni P., Uemura Y. J., and Birgeneau R. J. // *Phys. Rev. B*. 1986. Vol. 34. P. 4719.
 92. Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model / Ballesteros H. G., Fernández L. A., Martín-Mayor V., Sudupe A. M., Parisi G., and Ruiz-Lorenzo J. J. // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58. P. 2740.
 93. Three-dimensional randomly dilute Ising model: Monte Carlo results / Calabrese P., Martín-Mayor V., Pelissetto A., and Vicari E. // *Phys. Rev. E*. 2003. Sep. Vol. 68. P. 036136.
 94. Criticality of the random-site Ising model: Metropolis, Swendsen-Wang and Wolff Monte Carlo algorithms / D.Ivaneyko, J.Ilnytskyi, B.Berche, and Yu.Holovatch // *Condens. Matt. Phys.* 2005. Vol. 8. P. 149.
 95. The universality class of 3D site-diluted and bond-diluted Ising systems / Hasenbusch M., Toldin F. P., Pelissetto A., and Vicari E. // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2007. feb. Vol. 2007, no. 02. P. P02016.
 96. Alfaro Miranda G., Cugliandolo L. F., Tarzia M. SWAP algorithm for lattice spin models // *Phys. Rev. E*. 2024. Oct. Vol. 110. P. L043301.
 97. Capel H. Phase transitions in spin-one Ising systems // *Physics Letters*. 1966. Vol. 23, no. 5. P. 327–328.
 98. Blume M. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 // *Phys. Rev.* 1966. Vol. 141. P. 517–524.
 99. Blume M., Emery V., Griffiths R. Ising model for the λ transition and phase separation in $\text{He}^3\text{-He}^4$ mixtures // *Phys. Rev. A*. 1971. Vol. 4. P. 1071–1077.
 100. Wajnflasz J., Pick R. Transitions low spin-high spin dans les complexes de Fe^{2+} // *J. Phys. Colloques*. 1971. Vol. 32, no. C1. P. 1–91192.
 101. Tanaka S., Tamura R., Kawashima N. Phase transition of generalized

- ferromagnetic Potts model – effect of invisible states // *Journal of Physics: Conference Series*. 2011. Vol. 297. P. 012022.
102. Tamura R., Tanaka S., Kawashima N. Phase transition in Potts model with invisible states // *Progress of Theoretical Physics*. 2010. Vol. 124, no. 2. P. 381–388.
 103. van Enter A., Iacobelli G., Taati S. First-order transition in Potts models with ‘invisible’ states: Rigorous proofs // *Progress of Theoretical Physics*. 2011. Vol. 126, no. 5. P. 983–991.
 104. van Enter A., Iacobelli G., Taati S. Potts Model with Invisible Colors: Random-Cluster Representation and Pirogov-Sinai Analysis // *Reviews in Mathematical Physics*. 2012. Vol. 24, no. 2. P. 1250004–1125000442.
 105. Johnston D., Ranasinghe R. Potts models with (17) invisible states on thin graphs // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2013. Vol. 46, no. 22. P. 225001.
 106. Mori T. Microcanonical analysis of exactness of the mean-field theory in long-range interacting systems // *Journal of Statistical Physics*. 2012. Vol. 147, no. 5. P. 1020–1040.
 107. Sarkanych P., Holovatch Y., Kenna R. Exact solution of a classical short-range spin model with a phase transition in one dimension: The Potts model with invisible states // *Physics Letters A*. 2017. Vol. 381, no. 41. P. 3589–3593.
 108. Sarkanych P., Holovatch Y., Kenna R. Classical phase transitions in a one-dimensional short-range spin model // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2018. Vol. 51, no. 50. P. 505001.
 109. Iacobelli G. Metastates, non-gibbsianness and phase transitions: a stroll through statistical mechanics : Ph.D. thesis ; University of Groningen. 2012.
 110. Király B. Phase Transitions in Evolutionary Potential Games : Ph.D. thesis ; Budapest University of Technology and Economics, Hungarian Academy of Science. Budapest, 2019. Access mode: <https://repozitorium.omikk.bme.hu/bitstream/handle/10890/13392/ertekezes.pdf?sequence=2>.
 111. Universal mechanism for hybrid percolation transitions / Lee D., Choi W., Kertész J., and Kahng B. // *Scientific Reports*. 2017. Vol. 7, no. 1. P. 5723.

112. Butera P., Pernici M. The Blume–Capel model for spins $S = 1$ and $3/2$ in dimensions $d = 2$ and 3 // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2018. O.K.T. Vol. 507. P. 22–66.
113. Thermodynamical behavior of the Blume–Capel model in the vicinity of its tricritical point / Rocha-Neto M. J., Camelo-Neto G., Nogueira E. and Coutinho S. // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2023. Nov. Vol. 629. P. 129145.
114. Phase transitions above the upper critical dimension / Berche B., Ellis T., Holovatch Y., and Kenna R. // *SciPost Phys. Lect. Notes*. 2022. P. 60.
115. Violation of Lee-Yang circle theorem for Ising phase transitions on complex networks / Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y., and Kenna R. // *EPL*. 2015. Sep. Vol. 111, no. 6. P. 60009.
116. Partition function zeros for the Ising model on complete graphs and on annealed scale-free networks / Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y., and Kenna R. // *J. Phys. A Math. Theor.* 2016. Vol. 49. P. 135001.
117. Pearson R. B. Partition function of the Ising model on the periodic $4 \times 4 \times 4$ lattice // *Phys. Rev. B*. 1982. Dec. Vol. 26. P. 6285–6290.
118. Itzykson C., Pearson R., Zuber J. Distribution of zeros in Ising and gauge models // *Nuclear Physics B*. 1983. Sep. Vol. 220, no. 4. P. 415–433.
119. Glasser M. L., Privman V., Schulman L. S. Complex temperature plane zeros in the mean-field approximation // *J Stat Phys*. 1986. Nov. Vol. 45, no. 3-4. P. 451–457.
120. Glasser M. L., Privman V., Schulman L. S. Complex-temperature-plane zeros: Scaling theory and multicritical mean-field models // *Phys. Rev. B*. 1987. Feb. Vol. 35, no. 4. P. 1841–1845.
121. Kenna R., Johnston D. A., Janke W. Scaling Relations for Logarithmic Corrections // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Mar. Vol. 96, no. 11. P. 115701.
122. Moueddene L., Donoso A., Berche B. Ralph Kenna’s Scaling Relations in Critical Phenomena // *Entropy*. 2024. Vol. 26, no. 3.
123. Janke W., Kenna R. The Strength of First and Second Order Phase Transitions

- from Partition Function Zeroes // *Journal of Statistical Physics*. 2001. Vol. 102, no. 5/6. P. 1211–1227.
124. Ruiz-Lorenzo J. J. Revisiting the Lee-Yang singularities in the four-dimensional Ising model: a tribute to the memory of Ralph Kenna // *Condens. Matt. Phys.* 2024. Vol. 27. P. 33604.
 125. Critical and tricritical singularities from small-scale Monte Carlo simulations: the Blume–Capel model in two dimensions / Moueddene L., G Fytas N., Holovatch Y., Kenna R., and Berche B. // *J. Stat. Mech.* 2024. Feb. Vol. 2024, no. 2. P. 023206.
 126. Moueddene L., Fytas N. G., Berche B. Critical and tricritical behavior of the $d = 3$ Blume-Capel model: Results from small-scale Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. E*. 2024. Dec. Vol. 110. P. 064144.
 127. Lee T. D., Yang C. N. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model // *Phys. Rev.* 1952. Aug. Vol. 87, no. 3. P. 410–419.
 128. Yang C. N., Lee T. D. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation // *Phys. Rev.* 1952. Aug. Vol. 87, no. 3. P. 404–409.
 129. Fisher M. Renormalization of Critical Exponents by Hidden Variables // *Phys. Rev.* 1968. Vol. 176. P. 257–272.
 130. Berche B., Kenna R., Walter J.-C. Hyperscaling above the upper critical dimension // *Nuclear Physics B*. 2012. Vol. 865, no. 1. P. 115–132.
 131. КРАСНИЦЬКА Мар'яна Богданівна. ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ НА СКЛАДНИХ МЕРЕЖАХ. 2016. УДК 537.9, 01.04.02 — теоретична фізика, Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук. Access mode: <https://icmp.lviv.ua/sites/default/files/avtoref.pdf>.
 132. General Theory of Lee-Yang Zeros in Models with First-Order Phase Transitions / Biskup M., Borgs C., Chayes J. T., Kleinwaks L. J. and Kotecký R. // *Phys. Rev. Lett.* 2000. May. Vol. 84, no. 21. P. 4794–4797.

133. Tamura R., Kawashima N. First-order transition to incommensurate phase with broken lattice rotation symmetry in frustrated Heisenberg model // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2008. Vol. 77, no. 10. P. 103002.
134. Stoudenmire E. M., Trebst S., Balents L. Quadrupolar correlations and spin freezing in $s = 1$ triangular lattice antiferromagnets // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. P. 214436.
135. Novel spin-liquid states in the frustrated Heisenberg antiferromagnet on the honeycomb lattice / Okumura S., Kawamura H., Okubo T., and Motome Y. // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2010. Vol. 79, no. 11. P. 114705.
136. Potts R. Some generalized order-disorder transformations // *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. 1952. Vol. 48, no. 1. P. 106–109.
137. Interfaces in the Potts model. I. Pirogov-Sinai theory of the Fortuin-Kasteleyn representation / Laanait L., Messenger A., Miracle-Solé S., Ruiz J., and Shlosman S. // *Communications in Mathematical Physics*. 1991. Vol. 140, no. 1. P. 81–91.
138. Torpid mixing of some Monte Carlo Markov chain algorithms in statistical physics / Borgs C., Chayes J., Kim J., Frieze A., Tetali P., Vigoda E., and Vu V. // Proceedings of the 40th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science. New York : IEEE. 1999. P. 218–229.
139. Potts models with invisible states on general Bethe lattices / Ananikian N., Izmaylyan N., Johnston D., Kenna R., and Ranasinghe R. // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2013. Vol. 46, no. 38. P. 385002.
140. Kasteleyn P. W., Fortuin C. M. Phase transitions in lattice systems with random local properties. 1969. Access mode: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:117993636>.
141. Giri M. R., Stephen M. J., Grest G. S. Spin models and cluster distributions for bond and site percolation models // *Phys. Rev. B*. 1977. Dec. Vol. 16. P. 4971–4977.
142. Stephen M. Percolation problems and the Potts model // *Physics Letters A*.

1976. Vol. 56, no. 3. P. 149–150.
143. Deng Y., Garoni T. M., Sokal A. D. Ferromagnetic Phase Transition for the Spanning-Forest Model ($q \rightarrow 0$ Limit of the Potts Model) in Three or More Dimensions // *Phys. Rev. Lett.* 2007. Jan. Vol. 98. P. 030602.
 144. Jacobsen J. L., Saleur H. The arboreal gas and the supersphere sigma model // *Nuclear Physics B*. 2005. Vol. 716, no. 3. P. 439–461.
 145. Fortuin C., Kasteleyn P. On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models // *Physica*. 1972. Vol. 57, no. 4. P. 536–564.
 146. Stenull O., Janssen H. K., Oerding K. Critical exponents for diluted resistor networks // *Phys. Rev. E*. 1999. May. Vol. 59. P. 4919–4930.
 147. Aharony A. Low-temperature phase diagram and critical properties of a dilute spin glass // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1978. jun. Vol. 11, no. 11. P. L457.
 148. Aharony A., Pfeuty P. Dilute spin glasses at zero temperature and the $1/2$ -state Potts model // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1979. feb. Vol. 12, no. 3. P. L125.
 149. Siva K., Tao J., Marcolli M. Spin glass models of syntax and language evolution // *arXiv: 1508.00504*. 2015. P. L125.
 150. Lubensky T. C., Isaacson J. Field Theory for the Statistics of Branched Polymers, Gelation, and Vulcanization // *Phys. Rev. Lett.* 1978. Sep. Vol. 41. P. 829–832.
 151. Kihara T., Midzuno Y., Shizume T. Statistics of Two-Dimensional Lattices with Many Components // *J. Phys. Soc. Jap.* 1954. P. 681.
 152. Straley J. P., Fisher M. E. Three-state Potts model and anomalous tricritical points // *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*. 1973. sep. Vol. 6, no. 9. P. 1310.
 153. Mittag L., Stephen M. J. Mean-field theory of the many component Potts model // *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*. 1974. jun. Vol. 7, no. 9. P. L109.
 154. Critical Behavior of the Ising model in annealed scale-free networks / Lee S. H., Ha M., Jeong H., Noh J. D., and Park H. // *Phys. Rev. E*. 2009. Vol. 80. P. 051127.

155. Aiello W., Chung F., Lu L. A Random Graph Model for Power Law Graphs // *Exp. Math.* 2001. Vol. 10. P. 53.
156. Dorogovtsev S. N., Goltsev A. V., Mendes J. F. F. Ising model on networks with an arbitrary distribution of connections // *Phys. Rev. E*. 2002. Jul. Vol. 66. P. 016104.
157. Dueck G., Scheuer T. Threshold accepting: A general purpose optimization algorithm appearing superior to simulated annealing // *J. Comput. Phys.* 1990. Vol. 90, no. 1. P. 161–175.
158. Achlioptas D., D'Souza R., Spencer J. Explosive percolation in random networks // *Science*. 2009. Vol. 323, no. 5920. P. 1453–1455.
159. Explosive percolation: Unusual transitions of a simple model / Bastas N., Giazitzidis P., Maragakis M., and Kosmidis K. // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2014. Vol. 407. P. 54–65.
160. Adler J. Bootstrap percolation // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1991. Vol. 171, no. 3. P. 453–470.
161. Brush S. History of the Lenz-Ising Model // *Rev. Mod. Phys.* 1967. Vol. 39. P. 883–893.
162. Martin N. History of the Lenz-Ising Model 1920-1950: From Ferromagnetic to Cooperative Phenomena // *Arch. Hist. Exact Sci.* 2005. Vol. 59. P. 267–318.
163. Martin N. History of the Lenz-Ising Model 1950–1965: from irrelevance to relevance // *Arch. Hist. Exact Sci.* 2009. Vol. 63. P. 243.
164. Martin N. History of the Lenz-Ising model 1965-1971: the role of a simple model in understanding critical phenomena // *Arch. Hist. Exact Sci.* 2011. Vol. 65. P. 625–658.
165. Kobe S. History of the Lenz-Ising Model // *J. Stat. Phys.* 1997. Vol. 88. P. 1572–9613.
166. Sornette D. Physics and financial economics (1776–2014): puzzles, Ising and agent-based models // *Rep. Prog. Phys.* 2014. Vol. 77. P. 062001.
167. The Fate of Ernst Ising and the Fate of his Model / Ising T., Folk R., Kenna R., Berche B., and Holovatch Y. // *Journ. Phys. Stud.* 2017. Vol. 21. P. 4001.

168. Stauffer D. Grand unification of exotic statistical physics // *Phys. A Stat. Mech. Appl.* 2000. Vol. 285. P. 121–126.
169. Potts R. Some generalized order-disorder transformations // *Math. Proc. Camb. Philos. Soc.* 1952. Vol. 48. P. 106–109.
170. Stanley H. Dependence of Critical Properties on Dimensionality of Spins // *Phys. Rev. Lett.* 1968. Vol. 20. P. 589–592.
171. Stanley H. Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford, UK : Clarendon Press, 1971.
172. Galam S. Sociophysics: A Physicists Modeling of Psycho–Political Phenomena. Berlin/Heidelberg, Germany : Springer, 2012.
173. Hołyst J. E. *Cyberemotions. Collective Emotions in Cyberspace*. Springer Series “Understanding Complex Systems”. Berlin/Heidelberg, Germany : Springer, 2017. P. 318.
174. Coupled order-parameter system on a scale-free network / Palchykov V., von Ferber C., Folk R., and Holovatch Y. // *Phys. Rev. E*. 2009. Vol. 80. P. 011108.
175. Brout R. Statistical Mechanical Theory of a Random Ferromagnetic System // *Phys. Rev.* 1959. Vol. 115. P. 824–835.
176. Bianconi G. Superconductor-insulator transition on annealed complex networks // *Phys. Rev. E*. 2012. Vol. 85. P. 061113.
177. Cohen R., Ben Avraham D., Havlin S. Percolation critical exponents in scale-free networks // *Phys. Rev. E*. 2002. Vol. 66. P. 036113.
178. Aiello W., Park F., Lu L. Proceedings of the STOC '00: Proceedings of the Thirty-Second Annual ACM Symposium on Theory of Computing, Portland, OR, USA, 21–23 May 2000 // STOC '00. New York, NY, USA : Association for Computing Machinery. 2000.
179. Entropic equation of state and scaling functions near the critical point in uncorrelated scale-free networks / von Ferber C., Folk R., Holovatch Y., Kenna R., and Palchykov V. // *Phys. Rev. E*. 2011. Vol. 83. P. 061114.
180. Berlin T., Kac M. The Spherical Model of a Ferromagnet // *Phys. Rev.* 1952. Vol. 86. P. 821–835.

181. Kac M. On the Partition Function of a One-Dimensional Gas // *Phys. Fluids*. 1959. Vol. 2.
182. Baker G. One-Dimensional Order-Disorder Model Which Approaches a Second-Order Phase Transition // *Phys. Rev.* 1961. Vol. 122. P. 1477–1484.
183. Baker G. Ising Model with a Long-Range Interaction in the Presence of Residual Short-Range Interactions // *Phys. Rev.* 1963. Vol. 130. P. 1406–1411.
184. Kac M., Helfand E. Study of Several Lattice Systems with Long-Range Forces // *J. Math. Phys.* 1963. Vol. 4. P. 1078.
185. Kac M., Uhlenbeck G., Hemmer P. On the van der Waals Theory of the Vapor-Liquid Equilibrium. I. Discussion of a One-Dimensional Model // *J. Math. Phys.* 1963. Vol. 4. P. 216.
186. Kac M., Thompson J. Critical Behavior of Several Lattice Models with Long-Range Interaction // *J. Math. Phys.* 1969. Vol. 10. P. 1373.
187. Kenna R. **Universal Scaling Relations for Logarithmic-Correction Exponents** // Order, Disorder and Criticality. World Scientific, 2012. Vol. 3. P. 1–46.
188. Kenna R., Johnston D., Janke W. Scaling Relations for Logarithmic Corrections // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96. P. 115701.
189. Kenna R., Johnston D., Janke W. Self-Consistent Scaling Theory for Logarithmic-Correction Exponents // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 97. P. 155702.
190. Kenna R., Johnston D., Janke W. Publisher's Note: Self-Consistent Scaling Theory for Logarithmic-Correction Exponents // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 97. P. 169901E.
191. Kenna R., Berche B. **Scaling and Finite-Size Scaling above the upper critical dimension** // Order, Disorder and Criticality. World Scientific, 2015. Vol. 4. P. 1–54.
192. Privman V., Hohenberg P. C., Aharony A. Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 14, Domb C., Lebowitz J. L. (Eds.). Academic Press, New York, 1991.
193. Hankey A., Stanley H. E. Systematic Application of Generalized Homogeneous Functions to Static Scaling, Dynamic Scaling, and Universality // *Phys. Rev. B*.

1972. Nov. Vol. 6. P. 3515–3542.
194. Stanley H. E. Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena // *Rev. Mod. Phys.* 1999. Mar. Vol. 71. P. S358–S366.
 195. Delfino G. Universal amplitude ratios in the two-dimensional Ising model1Work supported by the European Union under contract FMRX-CT96-0012.1 // *Phys. Lett. B*. 1998. Vol. 419, no. 1. P. 291–295.
 196. Caselle M., Hasenbusch M. Universal amplitude ratios in the 3D Ising model // *Nucl. Phys. B Proc. Suppl.* 1998. Vol. 63, no. 1. P. 613–615.
 197. Engels J., Fromme L., Seniuch M. Numerical equation of state and other scaling functions from an improved three-dimensional Ising model // *Nucl. Phys. B*. 2003. Vol. 655, no. 3. P. 277–299.
 198. Gordillo-Guerrero A., Kenna R., Ruiz-Lorenzo J. J. Universal amplitude ratios in the Ising model in three dimensions // *J. Stat. Mech.* 2011. sep. Vol. 2011, no. 09. P. P09019.
 199. Davies R. A., Pepper M., Kaveh M. An experimental test of the scaling theory of conduction in two dimensions // *J. Phys. C*. 1983. apr. Vol. 16, no. 10. P. L285.
 200. Stoop R., Peinke J., Parisi J. Phase transitions in experimental systems // *Physica D*. 1991. Vol. 50, no. 3. P. 405–411.
 201. Analytic scaling functions applicable to dispersion measurements in percolative metal-insulator systems / McLachlan D. S., Heiss W. D., Chitame C., and Wu J. // *Phys. Rev. B*. 1998. Nov. Vol. 58. P. 13558–13564.
 202. Walsh D. J., Guironnet D. Macromolecules with programmable shape, size, and chemistry // *PNAS*. 2019. Vol. 116, no. 5. P. 1538–1542.
 203. Krummenacher M., Steinhäuser M. O. Self-assembly and complex formation of amphiphilic star and bottle-brush block copolymers // *J. Chem. Phys.* 2022. 10. Vol. 157, no. 15. P. 154904.
 204. Berlin T. H., Kac M. The Spherical Model of a Ferromagnet // *Phys. Rev.* 1952. Jun. Vol. 86. P. 821–835.
 205. Hertz J. Disordered Systems // *Phys. Scr.* 1985. Vol. T10. P. 1.
 206. Dotsenko V. S. Critical phenomena and quenched disorder // *Phys. Uspekhi*.

1995. Vol. 38. P. 457. [Usp. Fiz. Nauk 165 (1995) 481].
207. Pelissetto A., Vicari E. Critical phenomena and renormalization-group theory // *Physics Reports*. 2002. Vol. 368, no. 6. P. 549–727.
208. Some random magnets were considered as good candidates for magnetic refrigerants / Duo Q., Ahoy D. Q., Pan M. X., Wang W. H., et al. // *Various Sources*. 2008–2020.
209. Grinstein G., Luther A. Application of the renormalization group to phase transitions in disordered systems // *Phys. Rev. B*. 1976. Vol. 13. P. 1329.
210. Kompaniets M. V., Kudlis A., Sokolov A. I. Critical behavior of the weakly disordered Ising model: Six-loop $\sqrt{\epsilon}$ expansion study // *Phys. Rev. E*. 2021. Vol. 103. P. 022134.
211. Egami T. Magnetic amorphous alloys: physics and technological applications // *Rep. Prog. Phys.* 1984. Vol. 47. P. 1601.
212. Kaul S. N. Static critical phenomena in ferromagnets with quenched disorder // *J. Magn. Magn. Mater.* 1985. Vol. 53. P. 5.
213. Effective critical behaviour of diluted Heisenberg-like magnets / Dudka M., Folk R., Holovatch Y., and Ivaneiko D. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2003. Vol. 256, no. 1. P. 243–251.
214. Critical properties around the ferromagnetic-paramagnetic phase transition in $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ compounds ($\text{A} = \text{Sr}, \text{Ba}$ and $x = 0, 0.15, 0.3$) / Linh D. C., Thanh T. D., Anh L. H., Dao V. D., Piao H.-G., and Yu S.-C. // *Journal of Alloys and Compound*. 2017. Vol. 725. P. 484–495.
215. Three-dimensional Heisenberg critical phenomena in $\text{La}_{0.6}\text{Bi}_{0.1}\text{S}_{0.3-x}\text{Ca}_x\text{Mn}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}\text{O}_3$ manganites ($x=0$ and 0.05) / Bouzaiene E., Dhahri J., Hlil E. K., Belmabrouk H., and Alrobei H. // *J Mater Sci: Mater Electron*. 2020. Vol. 31. P. 18186–18197.
216. Critical exponents and magnetic entropy change across the continuous magnetic transition in (La, Pr)-Ba manganites / Tozri A., Kamel R., Mohamed W. S., Laif J., Dhahri E., and Hlil E. K. // *Applied Physics A*. 2022. Vol. 128. P. 575.
217. Magnetic properties, critical behavior and magnetocaloric effect in the

- nanocrystalline $\text{Pr}_2\text{Fe}_{16}\text{Al}$ / Jaballah H., Guetari R., Mliki N., and Bessais L. // *Journ. Phys. Chem. Solids*. 2022. Vol. 169. P. 110752.
218. Guida R., Zinn-Justin J. Critical Exponents of the N-vector model // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1998. Vol. 31. P. 8103–8121.
219. Pelissetto A., Vicari E. Randomly dilute spin models: A six-loop field-theoretic study // *Phys. Rev. B*. 2000. Sep. Vol. 62. P. 6393–6409.
220. Ferrenberg A. M., Xu J., Landau D. P. Pushing the limits of Monte Carlo simulations for the three-dimensional Ising model // *Phys. Rev. E*. 2018. Apr. Vol. 97. P. 043301.
221. Simmons-Duffin D. Bounds on 4D conformal and superconformal field theories // *High Energ. Phys.* 2017. Vol. 86.
222. Kouvel J. S., Fisher M. Detailed Magnetic Behavior of Nickel Near its Curie Point // *Phys. Rev.* 1964. Vol. 136. P. A1626.
223. Riedel E. K., Wegner F. J. Effective critical and tricritical exponents // *Phys. Rev. B*. 1974. Vol. 9. P. 294.
224. Critical behavior near the paramagnetic to ferromagnetic phase transition temperature in $\text{Sr}_{1.5}\text{Nd}_{0.5}\text{MnO}_4$ compound / Zarai E., Issaoui F., Tozri A., Husseine M., and Dhahri E. J. // *Supercond. Nov. Magn.* 2016. Vol. 29. P. 869.
225. Structural, magnetic, magnetocaloric effect and critical behavior of $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3-x}\text{MnO}_3$ ($0 \leq x \leq 0.05$) / Makni-Chakrouna J., Sfirir I., Cheikhrouhou-Koubaa W., Koubaa M., and Cheikhrouhou A. // *Journ. Magn. Magn. Mater.* 2017. Vol. 432. P. 484.
226. Three-dimensional Heisenberg critical behavior in amorphous $\text{Gd}_{65}\text{Fe}_{20}\text{Al}_{15}$ and $\text{Gd}_{71}\text{Fe}_3\text{Al}_{26}$ alloys / Hou K.-Y., Dong Q.-Y., Su L., Zhang X.-Q., and Cheng Z.-H. // *Journal of Alloys and Compounds*. 2019. Vol. 788. P. 155.
227. Study of Critical Magnetic Behaviour in Nanocrystalline $\text{La}_{0.65}\text{Ce}_{0.05}\text{Sr}_{0.3}\text{Mn}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_3$ ($x=0$, $x=0.05$ and $x=0.15$) Prepared by Pechini Method / Chebaane M., Oumezzine M., Bellouz R., Hlil E. K., and Fouzri A. // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. 2021. Vol. 34. P. 193.
228. Gebara P., Hasiak M. Determination of Phase Transition and Critical Behavior of

- the As-Cast GdGeSi-(X) Type Alloys (Where X = Ni, Nd and Pr) // *Materials*. 2021. Vol. 14. P. 185.
229. Quenched Disorder and the Critical Behavior of a Partially Frustrated System / Perumal A., Srinivas V., Rao V. V., and Dunlap R. A. // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 91. P. 137202.
230. Janssen H., Oerding K., Sengespeick E. On the crossover to universal criticality in dilute Ising systems // *J. Phys. A*. 1995. Vol. 28. P. 6073.
231. Folk R., Holovatch Y., Yavors'kii T. Effective and asymptotic critical exponents of a weakly diluted quenched Ising model: Three-dimensional approach versus $\sqrt{\varepsilon}$ expansion // *Phys. Rev. B*. 2000. Jun. Vol. 61. P. 15114–15129.
232. Crossover behavior in three-dimensional dilute spin systems / Calabrese P., Parruccini P., Pelissetto A., and Vicari E. // *Phys. Rev. E*. 2004. Mar. Vol. 69. P. 036120.
233. Amit D. J., Martin-Mayor V. *Field Theory, The Renormalization Group and Critical Phenomena*. World Scientific, 2005.
234. Zinn-Justin J., Kleinert H., Schulte-Frohlinde V. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena and Critical Properties of ϕ^4 -Theories*. Oxford Univ Press and World Scientific, 1996 and 2001.
235. Dotsenko V. *Introduction to the Replica Theory of Disordered Statistical Systems*. Cambridge : Cambridge University Press, 2001.
236. Yeomans J. M., Stinchcombe R. B. Critical properties of site- and bond-diluted Ising ferromagnets // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1979. Vol. 12. P. 347.
237. Folk R., Moser G. Critical dynamics: a field-theoretical approach // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2006. may. Vol. 39, no. 24. P. R207.
238. Zinn-Justin J. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 2002. 06. ISBN: 9780198509233.
239. Kleinert H., Schulte-Frohlinde V. *Critical Properties of Φ^4 -Theories*. WORLD SCIENTIFIC, 2001. <https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/4733>.
240. Le Guillou J. C., Zinn-Justin J. Critical Exponents for the n -Vector Model in Three Dimensions from Field Theory // *Phys. Rev. Lett.* 1977. Jul. Vol. 39.

P. 95–98.

241. Alvarez G., Martin-Mayor V., Ruiz-Lorenzo J. J. Summability of the perturbative expansion for a zero-dimensional disordered spin model // *J. Phys. A*. 2000. Vol. 33. P. 841.
242. Critical behavior of $O(2) \otimes O(N)$ symmetric models / Calabrese P., Parrucini P., Pelissetto A., and Vicari E. // *Phys. Rev. B*. 2004. Nov. Vol. 70. P. 174439.
243. Six-loop ε expansion study of three-dimensional n -vector model with cubic anisotropy / Adzhemyan L. T., Ivanova E. V., Kompaniets M. V., Kudlis A., and Sokolov A. I. // *Nuclear Physics B*. 2019. Vol. 940. P. 332–350.
244. Schloms R., Dohm V. Renormalization-Group Functions and Nonuniversal Critical Behaviour // *Europhysics Letters*. 1987. feb. Vol. 3, no. 4. P. 413.
245. Schloms R., Dohm V. Minimal renormalization without ε -expansion: Critical behavior in three dimensions // *Nuclear Physics B*. 1989. Vol. 328, no. 3. P. 639–663.
246. Khmel'nitskii D. E. Second-order phase transition in inhomogeneous bodies // *Sov. Phys. JETP*. 1975. Vol. 41, no. 5. P. 981–984.
247. Lubensky T. C. Critical properties of random-spin models from the ε expansion // *Phys. Rev. B*. 1975. May. Vol. 11. P. 3573–3580.
248. Fixed points in frustrated magnets revisited / Delamotte B., Holovatch Y., Ivaneyko D., Mouhanna D., and Tissier M. // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2008. mar. Vol. 2008, no. 03. P. P03014.
249. Relevance of the fixed dimension perturbative approach to frustrated magnets in two and three dimensions / Delamotte B., Dudka M., Holovatch Y., and Mouhanna D. // *Phys. Rev. B*. 2010. Sep. Vol. 82. P. 104432.
250. Analysis of the 3d massive renormalization group perturbative expansions: a delicate case / Delamotte B., Dudka M., Holovatch Y., and Mouhanna D. // *Condensed Matter Physics*. 2010. Vol. 13, no. 4. P. 43703.
251. Krinitsyn A. S., Prudnikov V. V., Prudnikov P. V. Calculations of the dynamical critical exponent using the asymptotic series summation method // *Theoretical and Mathematical Physics*. 2006. Apr. Vol. 147, no. 1. P. 561–575.

252. Kazakov D. I., Tarasov O. V., Shirkov D. V. Analytic continuation of the results of perturbation theory for the model $g\phi^4$ to the region $g \gtrsim 1$ // *Theoretical and Mathematical Physics*. 1979. Jan. Vol. 38, no. 1. P. 9–16.
253. Cooper F., Freedman B., Preston D. Solving $\varphi_{1,2}^4$ field theory with Monte Carlo // *Nuclear Physics B*. 1982. Vol. 210, no. 2. P. 210–228.
254. The four-dimensional site-diluted Ising model: A finite-size scaling study / Ballesteros H., Fernández L., Martín-Mayor V., Muñoz Sudupe A., Parisi G., and Ruiz-Lorenzo J. // *Nuclear Physics B*. 1998. Vol. 512, no. 3. P. 681–701.
255. Wiseman S., Domany E. Lack of self-averaging in critical disordered systems // *Phys. Rev. E*. 1995. Oct. Vol. 52. P. 3469–3484.
256. Aharony A., Harris A. B. Absence of Self-Averaging and Universal Fluctuations in Random Systems near Critical Points // *Phys. Rev. Lett.* 1996. Oct. Vol. 77. P. 3700–3703.
257. Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems // *Phys. Rev. Lett.* 1989. Jan. Vol. 62. P. 361–364.
258. Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model / Ballesteros H. G., Fernández L. A., Martín-Mayor V., Muñoz Sudupe A., Parisi G., and Ruiz-Lorenzo J. J. // *Phys. Rev. B*. 1998. Aug. Vol. 58. P. 2740–2747.
259. Nightingale M. Scaling theory and finite systems // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1976. Vol. 83, no. 3. P. 561 – 572.
260. New universality class in three dimensions: the antiferromagnetic RP^2 model / Ballesteros H. G., Fernandez L. A., Martín-Mayor V., and Muñoz Sudupe A. // *Phys. Lett. B*. 1996. Vol. 378. P. 207.
261. Fytas N. G., Martín-Mayor V. Universality in the Three-Dimensional Random-Field Ising Model // *Phys. Rev. Lett.* 2013. May. Vol. 110. P. 227201.
262. Blume M. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 // *Phys. Rev.* 1966. Jan. Vol. 141, no. 2. P. 517–524.
263. Capel H. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting // *Physica*. 1966. May. Vol. 32, no. 5. P. 966–

988.

264. Lawrie I., Sarbach S. Theory of Tricritical Points // Phase transitions and critical phenomena / Ed. by Domb C., Lebowitz J. L. London : Academic press, 1984. Vol. 9.
265. Biljecki F. A scientometric analysis of selected GIScience journals // *Int. J. Geogr. Inf. Sci.* 2016. Vol. 30. P. 1302.
266. Int. Inf. Lib. Rev. / Jabeen M., Yun L., Rafiq M., Jabeen M., and Tahir M. A. // *Int. Inf. Lib. Rev.* 2015. Vol. 47. P. 71.
267. Gutsulyak K. V., Manzhara V. S. Scientometric analysis of publications in the ukrainian journal of physics for the period of 1990—2004 // *Ukr. J. Phys.* 2007. Vol. 52. P. 99.
268. Mryglod O., Holovatch Y. Towards journalometrical analysis of a scientific periodical: a case study // *Condens. Matter Phys.* 2007. Vol. 10. P. 129.
269. Scientometric Analysis of the Scientometric Literature / Mooghali A., Alijani R., Karami N., and Khasseh A. // *Int. J. Inf. Sci. Manag.* 2011. Vol. 9. P. 19.
270. Chen R., Liu H. What Makes a Good Quantitative Linguistics Textbook? // *J. Quant. Ling.* 2014. Vol. 21. P. 299.
271. Stud. J. P. J. Phys. Stud. Journal. n.d. Access mode: https://physics.lnu.edu.ua/jps/index_ua.html.
272. Stud. J. P. Cumulative author index of volumes 1–20 // *J. Phys. Stud.* 2016. Vol. 20. P. 5999.
273. AIP. PACS - 2010 Regular Edition. n.d. Access mode: <https://publishing.aip.org/publishing/pacs/pacs-2010-regular-edition>.
274. Sowa J. F. Semantic networks // Encyclopedia of Artificial Intelligence, second edition / ed. by Shapiro S. C. Wiley, 1992. P. 25.
275. Horrocks I. Ontologies and the semantic web // *Communications of the ACM.* 2008. Vol. 51. P. 58–67.
276. da Fontoura Costa L. Learning about knowledge: A complex network approach // *Phys. Rev. E.* 2006. Vol. 74. P. 026103.
277. Fensel D. Ontologies. Springer Berlin Heidelberg, 2001. P. 11–18.

278. The science of science: From the perspective of complex systems / Zeng A., Shen Z., Zhou J., Wu J., Fan Y., Wang Y., and Stanley H. E. // *Physics Reports*. 2017. Vol. 714-715. P. 1–73.
279. Wang D., Barabási A.-L. The Science of Science. Cambridge University Press, 2021. P. 304.
280. Springer Handbook of Science and Technology Indicators / Glänzel W., Moed H. F., Schmoch U., and Thelwall M. ; ed. by Glänzel W., Moed H. F., Schmoch U., Thelwall M. Springer International Publishing, 2019.
281. Herrera M., Roberts D. C., Gulbahce N. Mapping the evolution of scientific fields // *PLoS ONE*. 2010. Vol. 5. P. e10355.
282. The evolution of interdisciplinarity in physics research / Pan R. K., Sinha S., Kaski K., and Saramäki J. // *Scientific Reports*. 2012. Vol. 2. P. 551.
283. Foster J. G., Rzhetsky A., Evans J. A. Tradition and innovation in scientists' research strategies // *American Sociological Review*. 2015. Vol. 80. P. 875–908.
284. Krenn M., Zeilinger A. Predicting research trends with semantic and neural networks with an application in quantum physics // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2020. Vol. 117. P. 1910–1916.
285. Identifying the borders of mathematical knowledge / Silva F. N., Travenço B. A. N., Viana M. P., and da Fontoura Costa L. // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2010. Vol. 43. P. 325202.
286. van Eck N. J., Waltman L. Software survey: VOSviewer, a computer program for bibliometric mapping // *Scientometrics*. 2009. Vol. 84. P. 523–538.
287. Iacopini I., Milojević S., Latora V. Network dynamics of innovation processes // *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 120. P. 048301.
288. Atypical combinations and scientific impact / Uzzi B., Mukherjee S., Stringer M., and Jones B. // *Science*. 2013. Vol. 342. P. 468–472.
289. Brodiuk S., Palchykov V., Holovatch Y. **Embedding technique and network analysis of scientific innovations emergence in an arxiv-based concept network** // 2020 IEEE Third International Conference on Data Stream Mining Processing (DSMP). 2020. P. 366–371.

290. Evans J. A., Foster J. G. Metaknowledge // *Science*. 2011. Vol. 331. P. 721–725.
291. Hanel R., Thurner S., Klimek P. Introduction to the Theory of Complex Systems. Oxford University Press, 2018.
292. Collective dynamics of social annotation / Cattuto C., Barrat A., Baldassarri A., Schehr G., and Loreto V. // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2009. Vol. 106. P. 10511–10515.
293. Choosing experiments to accelerate collective discovery / Rzhetsky A., Foster J. G., Foster I. T., and Evans J. A. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2015. Vol. 112. P. 14569–14574.
294. Kuhn T. S. The Essential Tension. The University of Chicago, 1977.
295. The role of mainstreamness and interdisciplinarity for the relevance of scientific papers / Thurner S., Liu W., Klimek P., and Cheong S. A. // *PLOS ONE*. 2020. Vol. 15. P. e0230325.
296. Johnson J. Hypernetworks in the science of complex systems. World Scientific, 2013. Vol. 3.
297. Constantin A. Automatic structure and keyphrase analysis of scientific publications : Ph.D. thesis ; The University of Manchester (United Kingdom). 2014.
298. Ground truth? Concept-based communities versus the external classification of physics manuscripts / Palchykov V., Gemmetto V., Boyarsky A., and Garlaschelli D. // *EPJ Data Science*. 2016. Vol. 5. P. 28.
299. Palchykov V., Holovatch Y. Bipartite graph analysis as an alternative to reveal clusterization in complex systems // 2018 IEEE Second International Conference on Data Stream Mining Processing (DSMP). 2018. P. 84–87.
300. ScienceWISE.info. ScienceWISE.info. <http://sciencewise.info>. Accessed: June 20, 2020.
301. Barabási A.-L. Network Science. Network Science, 2014. Vol. 625.
302. The network analysis package. igraph. <https://igraph.org>.
303. Seyed-allaei H., Bianconi G., Marsili M. Scale-free networks with an exponent less than two // *Phys. Rev. E*. 2006. Vol. 73. P. 046113.
304. Courtney O. T., Bianconi G. Dense power-law networks and simplicial

- complexes // *Phys. Rev. E*. 2018. Vol. 97. P. 052303.
305. Luce R. D., Perry A. D. A method of matrix analysis of group structure // *Psychometrika*. 1949. Vol. 14. P. 95–116.
306. Erdős P., Rényi A. Erdős-rényi model // *Publ. Math. Debrecen*. 1959. P. 290–297. Access mode: <https://www.scirp.org/reference/referencespapers?referenceid=2637716>.
307. Convergent sequences of dense graphs i: Subgraph frequencies, metric properties and testing / Borgs C., Chayes J., Lovász L., Sós V., and Vesztegombi K. // *Advances in Mathematics*. 2008. Vol. 219. P. 1801–1851.
308. Gabaergic hub neurons orchestrate synchrony in developing hippocampal networks / Bonifazi P., Goldin M., Picardo M. A., Jorquera I., Cattani A., Bianconi G., Represa A., Ben-Ari Y., and Cossart R. // *Science*. 2009. Vol. 326. P. 1419–1424.
309. Emergence of scale-free leadership structure in social recommender systems / Zhou T., Medo M., Cimini G., Zhang Z.-K., and Zhang Y.-C. // *PLOS ONE*. 2011. Vol. 6. P. 1–6.
310. Diaconis P., Janson S. Graph limits and exchangeable random graphs // *arXiv:0712.2749*. 2007.
311. Wolfe P. J., Olhede S. C. Nonparametric graphon estimation // *arXiv:1309.5936*. 2013.
312. Crane H., Dempsey W. Edge exchangeable models for network data // *arXiv:1603.04571*. 2016.
313. Caron F., Fox E. B. Sparse graphs using exchangeable random measures // *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*. 2017. Vol. 79. P. 1295–1366.

Додаток А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Marginal dimensions of the Potts model with invisible states // *J. Phys. A: Math. Theor.* – 2016. – Vol. 49. – P. 255001.
2. Головач Ю., Красницька М., Мриглюд О., Ровенчак А. 20 років “Журналу фізичних досліджень”: Спроба журналометричного аналізу // *Журн. фіз. дослідж.* – 2017. – Vol.21, no 4. – P. 4001.
3. Головач Ю., Дудка М., Блавацька В., Пальчиков В., Красницька М., Мриглюд О. Статистична фізика складних систем // *Журн. фіз. дослідж.* – 2017. – Vol. 22, No.2. – P. 2801.
4. Sarkanych P., Krasnytska M. Ising model with invisible states on scale-free networks // *Phys. Lett. A.* – 2019. – Vol.383, No. 27. – P. 125844:1–5.
5. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Ising model with variable spin/agent strengths // *J. Phys. Complex.* – 2020. – Vol. 1. – P. 035008.
6. Palchykov V., Krasnytska M., Mryglod O., Holovatch Yu. A mechanism for evolution of the physical concepts network // *Condens. Matter Phys.* – 2021. – Vol. 24, No. 2. – P. 24001.
7. Palchykov V., Krasnytska M., Mryglod O., Holovatch Yu. Network of scientific concepts: empirical analysis and modeling // *Adv. Complex Syst.* – 2021. – Vol. 21, No.1. – P. 2140001.
8. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Generalized Ising model on a scale-free network: an interplay of power laws // *Entropy.* – 2021. – Vol. 23, No.

9. – P. 1175.

9. Sarkanych P., Krasnytska M. Potts model with invisible states on a scale-free network // *Condens. Matt. Phys.* – 2023. – Vol. 26, No.1. – P. 13507.

10. Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Potts model with invisible states: a review // *Eur. Phys. J. Special Topics.* – 2023. – P. 1951–6401.

11. Dudka M., Krasnytska M., Ruiz-Lorenzo J., Holovatch Yu. Effective and asymptotic criticality of structurally disordered magnets // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2023. – Vol. 575. – P. 170718.

12. Krasnytska M. Ising model with varying spin strength on a scale-free network: scaling functions and critical amplitude ratios // *Condens. Matt. Phys.* – 2024. – Vol. 27, No.3. – P. 33603:1–10.

13. Ruiz-Lorenzo J., Dudka M., Krasnytska M., Holovatch Yu. Emergence of the 3D diluted Ising model universality class in a mixture of two magnets // *Phys. Rev. E.* (accepted) – 2025. – [arXiv:2411.16659](#).

14. Honchar Yu., Krasnytska M., Holovach Yu., Berche B., Kenna R.. Partition function zeros for the Blume-Capel model on a complete graph // *Low Temp. Phys.* (submitted). – 2025. – [arXiv:2501.04452](#).

15. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Critical behavior on complex networks: inhomogeneous mean-field vs Lee-Yang-Fisher formalism // 42nd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Lyon (France), February 8–10, 2017. – Lyon, 2017. – P. 27.

16. Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Marginal dimensions of the Potts model with invisible states // 42nd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Lyon (France), February 8–10, 2017. – Lyon, 2017. – P. 119.

17. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu. Ising model with power-law spin length distribution // Christmas Discussions 2018, Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv (Ukraine), January 11–12, 2018. – Lviv, 2018. – P. 10.

18. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu. Ising model with a power-law spin length distribution on different graphs // 43rd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Krakow (Poland), May 1–4, 2018. – Krakow, 2018. – P. 70.

19. Красницька М., Берш Б., Головач Ю. Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна // 18-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів (Україна), Червень 7–8, 2018. – Львів, 2018. – Тези доповідей.

20. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu. New critical behaviour in a complex system induced by two competing power laws // Workshop on Current Problems in Physics, Lviv (Ukraine), July 3–4, 2018. – Lviv, 2018. – P. 11.

21. Головач Ю., Гончар Ю., Красницька М., Дудка М. Фізика і фізики в НТШ у Львові // Різдвяні дискусії – 2019, кафедра теоретичної фізики ЛНУ ім. І. Франка, Львів (Україна), January 10–11, 2019. – Львів, 2019. – P. 4.

22. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Self-averaging on annealed networks // 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, dedicated to the 110th Anniversary of the Birth of M. M. Bogolyubov, Lviv (Ukraine), July 3–6, 2019. – Lviv, 2019. – P. 40.

23. Sarkanych P., Krasnytska M. Ising model with invisible states on scale-free networks // 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, dedicated to the 110th Anniversary of the Birth of M. M. Bogolyubov, Lviv (Ukraine), July 3–6, 2019. – Lviv, 2019. – P. 61.

24. Sarkanych P., Krasnytska M. Critical behaviour of the Ising model with invisible states on a scale-free network // 45th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Online, September 14–16, 2020. – Online, 2020. – P. 32.

25. Berche B., Dudka M., Folk R., Holovatch Yu., Kenna R., Krasnytska M., Mryglod O., Sarkanych P., Sznajd J. Middle European Cooperation in Statistical Physics: a historical overview // 45th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Online, September 14–16, 2020. – Online, 2020. – P. 20.

26. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states: critical behaviour on a scale-free network // 46th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO46), Online, May 11–13, 2021. – Online, 2021. – P. 103.

27. Красницька М., Головач Ю. Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна на безмасштабній мережі // XXI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів (Україна), Жовтень 11–12, 2021. – Львів, 2021. – P. 18.

28. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states on a scale-free network // 13th Workshop on Current Problems in Physics, Lviv (Ukraine), October 26–27, 2021. – Lviv, 2021. – P. 11.

29. Krasnytska M. Ising model with varying spin strength on a scale-free network: scaling functions and critical amplitudes ratios // 47th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO47), Online, June 12–16, 2022. – Online, 2022.

30. Krasnytska M. Degree vs strength: an interplay of power laws for the ising model on networks // Statistical Physics and Low-Dimensional Systems – 2022, Pont-à-Mousson (France), May 11–13, 2022. – Pont-à-Mousson, 2022.

31. Dudka M., Krasnytska M., Ruiz-Lorenzo J., Holovatch Yu. On the criticality of structurally disordered magnets // DPG Meetings 2023, Dresden (Germany), March 20–24, 2023. – Dresden, 2023. – DY 49.2.

32. Krasnytska M., Sarkanych P. Potts model with invisible states on a scale-free network // DPG Meetings 2023, Dresden (Germany), March 20–24, 2023. – Dresden, 2023. – DY 45.15.

33. Krasnytska M., Holovatch Yu., Berche B., Kenna R. Ising model with variable spin/agent strengths on graphs // DPG Meetings 2023, Dresden (Germany), March 20–24, 2023. – Dresden, 2023. – DY 45.15.

34. Krasnytska M., Sarkanych P., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Potts model with invisible states, old and new // 48th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO48), Stará Lesná (Slovakia), May 22–26,

2023. – Stará Lesná, 2023. – P. 57.

35. Krasnytska M. Potts model with invisible states: changeover to the percolation transition // SigmaPhi2023 Conference, Chania-Crete (Greece), July 10–14, 2023. – Chania-Crete, 2023.

36. Красницька М., Сарканич П., Берш Б., Головач Ю., Кенна Р. Модель Поттса з невидимими станами: огляд // XXIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів (Україна), Жовтень 26–27, 2023. – Львів, 2023. – P. 16.

37. Krasnytska M., Sarkanych P., Holovatch Yu., Berche B., Kenna R. Invisible states Potts model // Bogolyubov Kyiv Conference Problems of Theoretical and Mathematical Physics, Kyiv (Ukraine), September 24–26, 2024. – Kyiv, 2024. – P. 40.

38. Гончар Ю., Красницька М., Берш Б., Головач Ю., Кенна Р. Ефективна критична поведінка в моделі Блюма–Капеля на повному графі // XXIV Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів (Україна), Жовтень 24–25, 2024. – Львів, 2024. – P. 35.

Додаток Б

АПРОБАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ

Основні результати дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на таких наукових зустрічах: MECO41: 42-nd International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Lyon, France, 2017); Різдв'яні дискусії на кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету ім. І. Франка (2018, 2019); MECO43: 43-rd International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Kraków, Poland, 2018); International 11th Workshop on Current Problems in Physics (Lviv, Ukraine, 2018); IX Scientific Conference “Selected issues of astronomy and astrophysics” (Lviv, Ukraine, 2018); 5-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications (Lviv, Ukraine, 2019); MECO45: 45-th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Hungary, online, 2020); MECO46: 46-th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Latvia, online, 2021); 13th Workshop on Current Problems in Physics (Lviv, 2021); Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, ІФКС НАН України, Львів (2018, 2021, 2023); MECO47: 47-th International Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Sicily, Italy, 2022); Statistical Physics and Low-Dimensional Systems (Abbaye des Prémontrés - Pont-à-Mousson, France, 2022); PG Meetings 2023 (Dresden, Germany, 2023); MECO48: 48th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Stará Lesná, Slovakia, 2023); igmaPhi2023 Conference (Chania-Crete, Greece, 2023); Bogolyubov Kyiv Conference “Problems of Theoretical and Mathematical Physics” (Kyiv, Ukraine, 2024); а також на семінарах Групи статистичної фізики

Університету Естремадури (Бадахос, Іспанія), Групи статистичної фізики Університету Лотарингії (Нансі, Франція), Відділу конденсованої речовини Інституту низьких температур та досліджень структури (Вроцлав, Польща), Інституту теоретичної біології, Університету Гумбольдта в Берліні (Берлін, Німеччина), семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України (Львів) та семінарах “Статистична фізика складних систем” ІФКС НАН України.