

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-17-06U

Ю. Головач, М. Дудка, В. Блавацька,
В. Пальчиков, М. Красницька, О. Мриглод*

СТАТИСТИЧНА ФІЗИКА СКЛАДНИХ СИСТЕМ

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України;
Співпраця L^4 і Коледж докторантів із статистичної фізики складних систем,
Ляйпціг-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа

УДК: 501, 530.1, 519.25, 004.942, 001.6

PACS: 89.75-k, 05.10.-a, 05.70.Fh, 07.05.Kf

Статистична фізика складних систем

Ю. Головач, М. Дудка, В. Блавацька, В. Пальчиков, М. Красницька,
О. Мриглод

Анотація. Стаття є коротким нарисом про статистичну фізику складних систем – напрямок досліджень, що зараз набуває рис сформованої ділянки науки із своїм об'єктом досліджень, понятійним апаратом, методами аналізу. Прикладами складних систем є конденсована речовина, екологічні та біологічні системи, фондові ринки та економічні системи, людське суспільство. Поняття складної системи утворює нову, міждисциплінарну галузь знань. Притаманними особливостями складних систем є самоорганізація, виникнення нових функціональних можливостей, адаптивний характер взаємодій, висока чутливість до малих змін початкових умов, підпорядкування степеневим законам (розподіли типу “товстих хвостів”). Поряд із загальним окресленням властивостей складних систем у статті здійснено короткий огляд деяких робіт, виконаних у цій ділянці в Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

Statistical physics of complex systems

Yu. Holovatch, M. Dudka, V. Blavatska, V. Palchykov, M. Krasnytska,
O. Mryglod

Abstract. The paper is a brief essay about statistical physics of complex systems, the research direction that now acquires features of the well established field of science with its object of study, conceptual background and methods of analysis. Examples of complex systems are found in condensed matter, ecological and biological systems, human society, stock markets and economy. The concept of a complex system forms a new, inter-disciplinary branch of knowledge. Peculiar features of complex systems are self-organization, emergence of new functionalities, adaptive nature of interactions, high sensitivity to small changes in the initial conditions, governing power laws (“fat-tailed” distributions). Together with general description of the properties of complex systems, we give a brief overview of some studies performed in this field at the Institute for Condensed Matter Physics of the NAS of Ukraine.

Подається в Книга ІФКС

Submitted to ICMP Book

© Інститут фізики конденсованих систем 2017
Institute for Condensed Matter Physics 2017

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Юрій Васильович Головач
Максим Леонідович Дудка
Вікторія Богданівна Блавацька
Василь Володимирович Пальчиков
Мар'яна Богданівна Красницька
Олеся Ігорівна Мриглод

СТАТИСТИЧНА ФІЗИКА СКЛАДНИХ СИСТЕМ

Роботу отримано 5 грудня 2017 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку лабораторією статистичної фізики складних систем

Виготовлено при ІФКС НАН України
© Усі права застережені

1. Складні системи: фізика поза фізикою

Складні системи – напрямок досліджень, що зараз набуває характерних рис добре сформованої ділянки науки зі своїм об'єктом, понятійним апаратом, методами аналізу [1]. Поняття *складна система* поступово стає одним із підставових понять сучасної науки, чи, ширше, все частіше виступає в загальнокультурному контексті. Зростання кола застосувань цього поняття, а також виявлення чи усвідомлення все ширшого кола явищ, де воно застосовне, приводить до труднощів при його строгому означенні. І хоча, як ми побачимо і з подальшої розповіді, наука про складні системи охоплює широке міждисциплінарне коло досліджень, центральними у ній є методи і концепції фізики. Про деякі з них йтиме мова у цьому розділі. Нашу розповідь ми почнемо, окресливши в загальних рисах основні властивості складних систем, зосередившись на тих, які становлять предмет вивчення статистичної фізики складних систем. Конкретні приклади будуть вибрані з-поміж результатів, отриманих науковцями ІФКС НАН України.

1.1. Емерджентність і ефект метелика

Як правило, складною називається система з багатьох пов'язаних між собою складових, що, як ціле, володіють властивостями, які не очевидно випливають із властивостей окремих частин [2, 3]. Таким чином, наука про складні системи вивчає, як складові частини породжують колективну поведінку системи. У фізиці підкреслюється ще одна характерна риса: система є складною, якщо її поведінка кардинальним чином залежить від деталей системи [4]. При цьому маються на увазі такі явища як детерміністичний хаос, квантове заплутування, виникнення третинної структури макромолекул білків, виникнення стану спінового скла, тощо. Згадані явища дуже різні і теоретично досліджуються різними ділянками фізики (теорія динамічних систем, квантова механіка, статистична фізика). Проте їх спільною рисою є те, що інфінітезимальна зміна у (різних за фізичною природою) початкових умовах призводить до докорінно різних сценаріїв еволюції.

Два згадані вище фактори (ще відомі як *емерджентність* та *ефект метелика*) є визначальними у формулюванні предмету досліджень статистичної фізики складних систем. Прикладами таких систем є конденсована речовина, екологічні та біологічні системи, фондові ринки та економічні системи, людське суспільство. Іншими характерними особливостями складних систем, окрім вже згаданих

вище високої чутливості до малих змін початкових умов та виникнення нових функціональних можливостей, є самоорганізація, підпорядкування степеневим законам (*товсті хвости* у статистичних розподілах) та адаптивний характер взаємодій.

1.2. Адаптивний характер взаємодій

Зупинимося спочатку на останній із перелічених вище властивостей. Відомо, що взаємодії між складовими частинами часом можуть привести до колективної поведінки і, таким чином, породити макроскопічний стан. Однак у складній системі ці взаємодії зазнають впливу макростану і змінюються впродовж еволюції системи. Іншими словами, у складній системі макро- і мікро- стани динамічно оновлюють один одного [5]. Аналіз таких ефектів і привів до створення методів і до вироблення концепцій, що були успішно застосовані для опису формально подібних явищ у хімічних, біологічних, соціальних та інших системах агентів нефізичної природи. Часом стверджується: якщо фізика – це наука чотирьох фундаментальних сил, якими взаємодіє матерія, то наука про складні системи використовує концептуальне узагальнення понять сили і матерії. Сили – це все, що змінює стан агентів-складників, а матерія – це все, до чого можна прикласти сили. Знову ж таки, приклади знаходимо як у конденсованій речовині, так і в біології, фондових ринках, економіці, соціології чи гуманітарних дисциплінах. Одні з найчастіше згадуваних прикладів виникнення нових якостей у складних системах – це виникнення свідомості чи формування погоди. Тут доречно також згадати про докорінну відмінність між складними (complex) і складеними (complicated) системами: характеристики останніх можна отримати з індивідуальних властивостей їхніх складових. Знову ж таки, часто згадуваним прикладом для пояснення цієї відмінності слугує функціонування сучасного літака як саме складеної (а не складної) системи. Незважаючи на величезну кількість складових різної природи, поведінка системи літака в цілому є (повинна бути) передбачуваною і такою, що виключає емерджентність.

1.3. Розподіли з товстими хвостами

Поява степеневих розподілів – товстих хвостів – у статистиці є ще однією притаманною, можна сказати навіть неодмінною рисою складних систем взаємодіючих агентів [6–8]. Класичним прикладом є степеневий закон розподілу слів за частотою їх вживання у тексті, відомий як закон Зіпфа. Однак американський лінгвіст Джордж

Зіпф не був першим, хто зауважив цю закономірність. Раніше подібні спостереження робили Есту (1916) і Кондон (1928). Часто такі степеневі закони носять імена їх відкривачів. В економіці – це закон розподілу багатства між індивідуумами (Парето 1896); у демографії – розподіл міст за їх розміром (Ауербах 1913); у біології – розподіл розмірів родів за кількістю видів, що в них входять (Вілліс, Юл 1922); у наукометрії – розподіл кількості статей, написаних окремими вченими (Лотка 1926), наукових журналів за кількістю статей (Бредфорд 1934), цитувань (Прайс 1965). Список можна продовжити. В той час коли появу розподілу Гауса чи Больцмана у більшості випадків можна пояснити центральною граничною теоремою, причину появи степеневих статистик вловити непросто. Те, що розподіли з товстими хвостами спостерігаються для широкого класу явищ, свідчить на користь припущення про достатньо загальні причини їх появи. З іншого боку, сам факт, що різні явища описуються однаковими степеневими законами, не означає, що природа цих законів однакова.

На сьогоднішні причини появи степеневих законів об'єднано у декілька груп, подібно до класів універсальності в теорії фазових переходів. До них відносяться, зокрема, критичні явища, процеси із перевагою, самоорганізована критичність, мультиплікативні процеси з в'язями, оптимізація та залежні від шляху неергодичні процеси, фазовий простір яких зменшується із еволюцією. *Критичні явища* є типовим прикладом появи степеневих законів у фізиці конденсованої речовини [9,10]. При наближенні до критичної точки універсальні степеневі закони визначають як розбіжність деяких термодинамічних величин (таких як стисливість плинів чи сприйнятливості магнетиків), так і їх структурні (асимптотика парної кореляційної функції) чи статистичні (розподіл за розміром скорельованих кластерів) властивості. У таких явищах причиною виникнення степеневих законів є зростання флуктуацій та їх кореляція поблизу критичної точки. Механізм процесів з перевагою, які часом ще називають явищем *rich get richer*, був запропонований Юлем і, пізніше, Саймоном. Якщо результат процесу здійснюється пропорційно до кількості реалізацій в минулому, частота результатів підлягає степеневому розподілу. Окремим класом є *самоорганізована критичність*, тут степеневі закони спричинені нелінійними взаємодіями між складовими [11]. Система сама спрямовується до критичної точки і не потрібне тонке налаштування параметрів, як це має місце у звичайних критичних явищах. *Мультиплікативні процеси* (добутки послідовностей випадкових чисел) приводять до лог-нормальних розподілів. Якщо ж на такі процеси

накладаються певні прості в'язі, то розподіл стає степеневим. До степеневих законів призводить також запропонований Бенуа Мандельбротом *сценарій оптимізації*, що базується на аргументах теорії інформації [12]. В цьому сценарії степеневі закони виникають як результат оптимізації затрат на передачу інформації. Недавно стало зрозуміло, що залежні від попередньої історії процеси, які стають обмеженими в результаті свого розвитку (*sample-space reducing processes*), також приводять до степеневих законів [13]. Завданням дослідника залишається з'ясувати, який саме із перелічених вище процесів домінує для конкретної складної системи. Дуже часто результуюча степенева поведінка може бути спричинена комбінацією таких механізмів.

1.4. Складні мережі

Надзвичайно продуктивним для опису складних систем виявилось застосування концепції складних мереж [14]. Більше того, наука про складні мережі настільки тісно переплелась із наукою про складні системи, що часом тяжко відзначити межу, де закінчується одна і починається інша.¹ 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 є розділом 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 взаємодіючих агентів, ставлячи у відповідність кожному із агентів вершину, а кожній із взаємодій – ребро. Лише нещодавно фізики почали аналізувати мережі теоретично та емпірично, перші статті датуються кінцем 1990-их років. Мета досліджень змінилася від аналізу невеликих графів та властивостей окремих вершин та ребер до розгляду статистичних властивостей цих графів (мереж). Із зміною мети змінилися і методи аналізу. Народження “науки про мережі” відбулося внаслідок розвитку комп'ютерних технологій: www надає порівняно легкий доступ до баз даних з інформацією про різноманітні мережі і в той же час потужність комп'ютерів дозволяє детально їх аналізувати (що було би просто неможливо в іншому випадку, враховуючи розміри досліджуваних мереж). На сьогодні в мережевому формалізмі прийнято описувати взаємодії, що змінюються з часом, стохастичні взаємодії, взаємодії, що виникають на декількох рівнях

¹Ситуація подібна до розмежування математики і теоретичної фізики: перша слугує мовою, а друга за її допомогою описує явища.

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* сучасної науки про складні системи. Про деякі результати таких досліджень ми розповімо у наступних підрозділах.

1.5. Дослідження складних систем в ІФКС НАНУ

До цих пір мова йшла про загальні властивості складних систем, зараз ми плануємо зосередитися на тих напрямках, у яких проводяться дослідження в ІФКС НАН України, а саме: статична і динамічна критична поведінка неупорядкованих магнетиків; конформаційні властивості полімерних макромолекул; кількісні підходи в суспільних науках; складні мережі; наукометрія. Наші методи дослідження включають аналітичні підходи (теоретико-польова ренормалізаційна група, функціональне інтегрування, пересумовування розбіжних рядів, феноменологічний термодинамічний підхід), комп'ютерні симуляції, емпіричний аналіз даних. Тяжка і марна справа перелічувати різні фізичні об'єкти, чи навіть класи об'єктів, в яких спостерігається характерна для складних систем поведінка. В наступних підрозділах ми приведемо лише два приклади, що стосуються зовсім різних за своєю природою об'єктів – фрустрованих і структурно неупорядкованих магнетиків і полімерних макромолекул. Складна кооперативна поведінка керується в них різними параметрами – температурою та хімічним потенціалом, однак, як буде видно із приведених результатів, у їхній поведінці виразно простежується ціла низка спільних рис.

1.5.1. Структурно-неупорядковані магнетики

Класичним прикладом складної системи, що описується методами статистичної фізики, є спінове скло – структурно неупорядкований магнетик із фрустрованими взаємодіями. Спінове скло характерне багатьма метастабільними станами, що, в свою чергу, призводить до присутності в системі багатьох часових масштабів [15]. Складність опису спінового скла привела, зокрема, до розгляду часткових випадків, що описуються регулярними (структурно-впорядкованими) фрустрованими моделями чи структурно неупорядкованими моделями, але без фрустрацій. В той час як кількісний аналіз колективної поведінки при фазовому переході в магнетовпорядкований стан в ідеалізованих базових моделях (таких, як наприклад, модель Ізінга), на сьогодні здійснений з високою точністю і, фактично, складає

головний зміст сучасної теорії фазових переходів [9, 16], опис критичності за присутності таких реалістичних умов як структурний безлад [17–20], анізотропія [21], фрустрації [22], чи ефекти скінченного об'єму [23] є актуальною, важкою і цікавою задачею. Така задача актуальна, бо реальні об'єкти, в яких відбувається магнітний фазовий перехід, часто характеризуються структурним безладом заміщення (тверді розчини антиферомагнетиків та їх немагнітних ізоморфів), локальною випадковою анізотропією (аморфні сплави рідкісноземельних з перехідними металами), фрустраціями (шаруваті трикутні антиферомагнетики, гелімагнетики). Така задача важка, бо поряд із звичайними труднощами, що виникають при описі критичності, доводиться долати труднощі теорії неупорядкованих систем. А цікавість і перспективність такої задачі полягає в тому, що завдяки універсальності критичної поведінки, описані ефекти можуть спостерігатися не лише в магнітних системах і не лише в об'єктах фізики конденсованої речовини. Деякі з наших результатів, отриманих при аналізі ефективної та асимптотичної колективної поведінки неупорядкованих та фрустрованих магнетиків, приведені нижче у розділах 2, 3 і 4.

1.5.2. Складні полімерні макромолекули

Концепція скейлінгу і виникнення степеневих законів в околі фазового переходу другого роду знайшла свій дальший розвиток і численні застосування у фізиці м'якої речовини. Ще в роботах Нобелівського лауреата та закордонного дійсного члена НАН України П'єра-Жіля де Жена вказано на глибокий зв'язок між фізикою критичних явищ і фізикою макромолекул [24]. Зокрема, поняття складності фігурує у формулюванні Нобелівського комітету: премія 1991 року була присуджена П.-Ж. де Жєну за “...discovering that methods developed for studying order phenomena in simple systems can be generalized to more *complex forms of matter*, in particular to liquid crystals and polymers...” [25]². Добре відомо, що конформаційні властивості довгих полімерних ланцюгів в доброму розчиннику підлягають степеневим законам – законам скейлінгу. На відміну від температурної чи польової залежності термодинамічних величин в околі точки фазового переходу, для гнучких полімерних ланцюгів степеневі закони виникають в границі $N \rightarrow \infty$, де N – кількість мономерів, що утворюють полімерний ланцюг. Так, середній характерний розмір $\mathcal{R}$ і

²Курсив – наш.

кількість конфігурацій $\mathcal{Z}$ полімерного клубка зростають з N як

$$\mathcal{R} \sim N^\nu, \quad \mathcal{Z} \sim z^N N^{\gamma-1}. \quad (1.1)$$

Тут z – неуніверсальна стала (фугативність), а ν, γ – приклади полімерних критичних показників. Подібно як в теорії критичних явищ, для гнучкого полімеру ці показники *універсальні* – незалежні від особливостей хімічного складу макромолекули і залежать лише від вимірності простору. Пошук форми законів (1.1) привів не лише до створення сучасної теоретичної фізики і хімії полімерів, але і дозволив встановити глибокий зв'язок, що існує між фізикою критичних явищ і фізикою макромолекул. Зокрема, скейлінгові властивості полімерних ланцюгів належать до того ж класу універсальності, що і властивості ґраткових блукань із самоуниканням (self avoiding walks, SAW). А останні, в свою чергу, описуються m -векторною моделлю в границі $m \rightarrow 0$. Таку границю прийнято називати границею де Жєна.

Як виявилось, зокрема, і в результаті наших досліджень, універсальним степеневим законам підлягають і інші спостережувані, що описують конформаційні властивості полімерних ланцюгів та інших макромолекулярних утворень, складних як за топологією (полімерні сітки та зірки), так і за хімічним складом (кополімери та кополімерні сітки) [26, 27]. Більше того, універсальною виявляється і форма таких утворень [28]. Деякі наші результати у цій ділянці, а також результати дослідження конформаційних властивостей полімерів у пористому середовищі [29–31] приведені у розділах 5–8.

1.5.3. Соціофізика

Приведені в двох попередніх підрозділах приклади складних систем стосувалися фізики конденсованої речовини. В кількох подальших прикладах мова йтиме про “фізику поза фізикою” – застосування концепцій і методів статистичної фізики і науки про складні мережі для дослідження систем взаємодіючих агентів нефізичної природи. Можна вибирати різні початки відліку застосування концепцій природничих наук для опису явищ, що відбуваються в суспільстві. Сам термін *соціофізика* зустрічається в назві книжки бельгійського астронома, математика і соціолога Адольфа Кетле (1835): *Sur l'homme et le developpement de ses facultés, essai d'une physique sociale* (англійський переклад див. в [32]). В цій роботі Кетле простежує низку аналогій між фізикою та астрономією, з одного боку, та суспільним життям, з іншого; пояснює важливість нормального розпо-

ділу для опису суспільних явищ; запроваджує концепцію “середньої людини” з індивідуальними випадковими флуктуаціями.

Однак, сучасне розуміння задач соціофізики сформувалося набагато пізніше, а певною мірою формується і тепер [33]. І пов’язане воно, в першу чергу, із кількісним аналізом того кола явищ в суспільстві, де прослідковуються прямі аналогії із поведінкою складних багаточастинкових систем. Завданням соціофізики є моделювання методами статистичної фізики таких великомасштабних соціальних явищ як формування точки зору (opinion formation), розповсюдження культур, походження і еволюція мови, поведінка юрби, динаміка популяцій, поширення епідемій, тощо. У цих та подібних задачах робляться спроби вивчати колективну поведінку, що виникає із взаємодій між індивідуумами як елементарними одиницями соціальних структур. І знову, скейлінг і універсальність виявляються центральними рисами цієї поведінки. Деякі із результатів, отриманих нами у цьому напрямку приведені у розділах 11 та 12.

1.5.4. Складні мережі

Про складні мережі ми вже згадували у підрозділі 1.4. Фактично, наука про складні мережі виникла як певний концептуальний апарат, що дозволяє не лише якісно окреслити і візуалізувати процеси у складних системах. Застосування науки про мережі уможливорює кількісний аналіз, зокрема дозволяє знаходити спільні риси у поведінці складних систем різної природи. Так, досліджуючи мережі громадського транспорту, ми запропонували низку графічних представлень для їх опису, з’ясували стійкість цих мереж до випадкових збоїв та спрямованих атак, застосували підходи статистичної фізики для моделювання таких мереж [34–36]. Ми були першими, хто застосував концепції науки про складні мережі до аналізу української мови [37]. Вузлами у такій мережі виступають зазвичай слова, а залежно від інтерпретації зв’язку отримуються різні зображення мережі. Проведений нами аналіз дозволив отримати кількісні характеристики мережі української мови, а отримані емпіричні результати є корисними при теоретичному описі еволюції мови.

Згадаємо ще про два проекти аналізу складних мереж, у яких ми беремо участь. Спільно із науковцями університетів Ковентрі і Оксфорду ми працюємо над виконанням проекту, у якому кількісні методи теорії складних систем, зокрема теорії складних мереж, були застосовані до таких визначних європейських епічних наративів, як пам’ятки стародавнього англосаксонського героїчного епосу *Беовульф*, античної грецької епічної поеми *Іліада*, ірландських та

ісландських саг, героїчного епосу східних слов’ян – билин [38–40]. Особливістю нашого дослідження є ще й те, що ми аналізуємо соціальні зв’язки між героями епічного наративу. Аналіз наративу як твору людського духу є традиційно прерогативою гуманітарних наук, в той час як аналіз соціальних структур є, зрозуміло, предметом наук соціальних. Застосування кількісних методів і концепцій природничих наук для такого аналізу є, на наш погляд, характерною рисою сьогодення. В проекті, який ми виконуємо спільно із наковцями Віденського медичного університету та Массачусетського технологічного інституту, вивчаються мережеві структури та активність користувачів у онлайн грі класу MMOG (Massive multiplayer online game) під назвою PARDUS [41]. В наші дні такі ігри стали однією з наймасовіших колективних форм людської діяльності, у них беруть участь сотні мільйонів людей. Аналіз же діяльності гравців у таких іграх дозволяє здійснювати кількісний опис соціальної активності із точністю, порівняльною з точністю експериментів у природничих науках. Деякі із отриманих нами результатів приведені у розділах 9–12.

1.5.5. Наукометрія

Кількісний аналіз вже впродовж довшого часу активно використовується і для вивчення такої особливої соціальної системи або специфічного виміру людської активності, як наука. В рамках наукознавства, яке називають наукою про науку, розвинувся особливий напрям, що зосередив у собі кількісні аспекти досліджень – наукометрія. Нині це вельми потужна дисципліна, що має свій понятійний апарат, використовує широкий спектр методів для аналізу великих масивів різного роду даних. Статистичний аналіз застосовується для пошуку кореляцій та опису бібліографічних даних та даних про наукові цитування; методи складних мереж забезпечують ефективний спосіб візуалізації інформації та її аналізу з метою пошуку закономірностей, типових структур та характерних властивостей системи як цілого; алгоритми аналізу часових послідовностей дають змогу проаналізувати динаміку процесів, що відбуваються всередині системи науки; підходи структурної лінгвістики допомагають здійснювати так званий контент-аналіз наукових текстів. Цим переліком не вичерпується багатий інструментарій високо міждисциплінарного наукометричного напрямку. Епоха так званих Big Data (“великих даних”) відкриває нові перспективи: вже існує чимало результатів аналізу “цифрових слідів” у мережі Інтернет – коментарі у наукових соцмережах, дописи у професійних блогах, збережені закладки

та вподобання статей, показники завантажуваності файлів та відвідуваності сторінок – такого роду дані дають змогу характеризувати вчених та їх роботи у іншому вимірі. Очевидно, що науку потрібно розглядати як систему складну та адаптивну, із механізмами самоорганізації та несподіваними колективними ефектами. Таким чином, статистична фізика, з її понятійним апаратом та досвідом моделювання і вивчення великих багаточастинкових систем у довгочасових границях, ефективно починає застосовуватись і для наукометричних задач. Деякі із них розв'язувалися вченими нашого інституту: моделювання та аналіз динаміки процесу редакційного опрацювання статей, надісланих до наукового журналу [42]; вивчення кореляцій між експертними оцінками наукових колективів та окремими індикаторами впливу на основі цитованості їх публікацій [43–45]; дослідження еволюції наукової тематики як відгуку на суспільну вагому подію [46]. Ще одна із задач коротко описана у розділі 12.

2. Ефективна і асимптотична критична поведінка тривимірних неупорядкованих магнетиків

У той час як у самій критичній точці T_c кореляційна довжина безмежна і низка термодинамічних і структурних властивостей системи описується універсальними степеневими законами, поблизу T_c кореляційна довжина хоч і суттєво перевищує міжатомну відстань, але залишається все ж скінченною. Врахування цього факту дозволило нам створити теорію ефективної критичної поведінки як один із розділів статистичної фізики критичних явищ у складних системах. Для кращого врахування умов експерименту, теорію узагальнено на опис систем із структурними неоднорідностями, анізотропією та фрустраціями. Застосовуючи метод теоретико-польової ренормалізаційної групи (РГ), ми одними з перших провели детальний опис універсальних властивостей фазового переходу у магнетовпорядкований стан для низки базових моделей структурно-неупорядкованих магнетиків, отримавши аналітичні вирази для асимптотичних критичних показників у високих порядках теорії збурень та, за допомогою техніки пересумовування рядів теорії збурень, оцінивши їх значення для тривимірних систем [17, 47]. А оскільки саме ефективна критична поведінка реально спостерігається на експерименті та в числових симуляціях, то її теоретичний аналіз був своєчасним і знайшов широке застосування при дослідженні структурно-неупорядкованих магнетиків. Ці теоретичні дослідження стимулювали проведення нових експериментів і слугували їх поясненню.

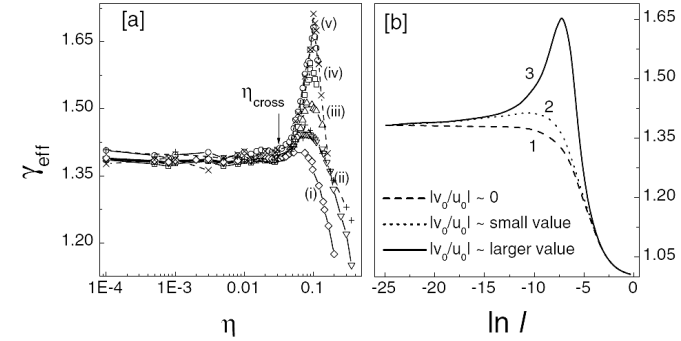


Рис. 1. Експериментальне вимірювання ефективного критичного показника ізотермічної магнітної сприйнятливості γ_{eff} аморфних сплавів FeMnZr як функції приведенної температури $\eta = (T - T_c)/T_c$ (лівий графік), виконане за нашим теоретичним передбаченням і поясненням спостережуваного ефекту (правий графік, граничне значення РГ параметру $\ell \rightarrow 0$ відповідає $T \rightarrow T_c$). Рисунок взятий з роботи [48].

Так, структурний безлад у вигляді точкових немагнітних дефектів описується моделлю m -векторного розведеного магнетика з гамільтоніаном:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j c_i c_j, \quad (2.1)$$

де m -компонентні вектори $\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j$, локалізовані на вузлах i, j d -вимірної ґратки, а $c_i = 1$, якщо вузол i зайнятий спіном, і $c_i = 0$, якщо ні. Ситуація, коли магнітні і немагнітні вузли зафіксовані в певній конфігурації (так званий *заморожений безлад*, quenched disorder) реалізується, наприклад, при швидкій зміні температури розплаву, коли час релаксації системи до рівноважного стану набагато більший від типового часу спостереження. Виявляється, що навіть при слабкому розведенні немагнітною компонентою, коли концентрація магнітних вузлів $c \simeq 1$, а кореляції в розподілі зайнятих і вільних вузлів відсутні, в системі спостерігається складна критична поведінка.

Наші передбачення ефективної критичної поведінки розведеного ґайзенберґівського ($d = m = 3$) та одновісного ($d = 3, m = 1$) магнетика зображені на Рис. 1 та Рис. 2а, відповідно. При наближенні до критичної точки ($\ell(T \rightarrow T_c) \rightarrow 0$) можуть спостерігатися різні сценарії ефективної критичної поведінки, що супроводжує фазовий перехід другого роду в магнетовпорядкований стан.

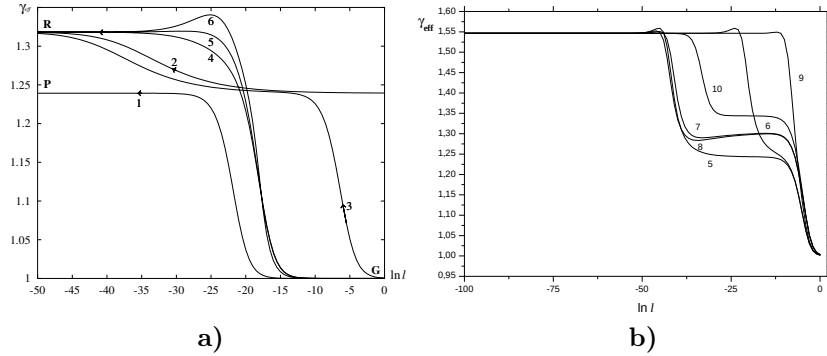


Рис. 2. Теоретичні обчислення зміни значення ефективного критичного показника ізотермічної магнітної сприйнятливості γ_{eff} при наближенні до T_c . Різні криві відповідають різним можливим сценаріям ефективної критичної поведінки. **а)**: тривимірна розведена модель Ізінга (р-ня (2.1) при $d = 3$, $m = 1$) [17]. Спостерігається критична поведінка, що відповідає класам універсальності гаусової моделі (**G**), чистої (**P**) та розведеної (**R**) моделі Ізінга. **б)**: тривимірна модель з віссю анізотропії, випадково розподіленою вздовж ребер m -вимірного гіперкуба (р-ня (2.2) при $d = 3$, $m = 2$) [21]. Різні плато відповідають різним класам універсальності.

Як свідчать результати експериментів і комп'ютерного моделювання, навіть слабка одноіонна випадкова анізотропія може привести до кардинальних змін у критичній поведінці аморфних магнетиків. Для пояснення цього явища ми дослідили модель з випадковою анізотропією [21]:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \sum_i D (\mathbf{S}_i \hat{\mathbf{x}}_i)^2. \quad (2.2)$$

Структурний безлад описується в (2.2) другим доданком, де $\hat{\mathbf{x}}_i$ – випадково спрямований заморожений одиничний вектор, а $D > 0$ – стала анізотропії. Цей доданок робить спрямування локального магнітного моменту вздовж осі випадкової анізотропії енергетично вигідним. Як підтверджено в наших роботах, в тривимірній моделі феромагнетизм відсутній при ізотропно розподіленій локальній осі анізотропії, а для анізотропного розподілу фазовий перехід може залишатися фазовим переходом другого роду, проте клас універсальності змінюється (див. Рис. 2б і огляд [21]).

3. Граничні вимірності у системах зі складною структурою

Зміна вимірності параметра порядку у системах зі складними внутрішніми симетріями може привести до зміни класу універсальності або роду фазового переходу. Значення вимірності параметра порядку, при яких відбувається така зміна, називають *граничними* (marginal). Як і критичні показники та відношення критичних амплітуд, граничні вимірності є універсальними величинами, і з'ясування їх точного значення допомагає отримати відповідь на питання про можливий тип критичної поведінки у досліджуваних системах.

У методі ренормалізаційної групи гранична вимірність визначається як вимірність, при якій відбувається зміна стійкості нерухомої точки перетворення РГ. Найточніші на сьогодні значення граничних вимірностей багатьох базових моделей критичної поведінки (так само як і значення критичних показників) отримані саме таким методом. Зокрема, в наших роботах з високою точністю визначено граничні вимірності $O(m)$ -симетричних магнетиків з кубічною анізотропією, із слабким структурним безладом (2.1), систем із зв'язаними параметрами порядку та неколінеарним впорядкуванням. Для забезпечення високої точності при отриманні виразів для граничних вимірностей проводиться перенормування у високих порядках теорії збурень. Класифікація теорії збурень відбувається за кількістю інтегрувань за хвильовим вектором, у діаграмному зображенні цьому відповідає кількість петель у фейманівських діаграмах. Так, у наших розрахунках використовувались ряди у рекордному на сьогодні шестипетлевому наближенні. Для прикладу, приведемо вираз для граничної вимірності моделі тривимірного ($d = 3$) $O(m)$ -симетричного магнетика з кубічною анізотропією [49]:

$$m_c = 4 - 4/3\tau + 0.290420\tau^2 - 0.189677\tau^3 + 0.199510\tau^4 - 0.224652\tau^5. \quad (3.1)$$

У цьому випадку гранична вимірність m_c розділяє два режими: при $m < m_c$ система “не відчуває” анізотропії, це явище відоме ще під назвою ізотропізації критичних флуктуацій. Однак при $m > m_c$ анізотропія призводить до зміни роду фазового переходу. Ряд (3.1) – це асимптотичний розклад при $d = 3$ за псевдо- ϵ параметром τ . Такі ряди мають нульовий радіус збіжності. Для їх оцінки слід не лише покласти $\tau = 1$, але і застосувати спосіб, що б дозволив отримати надійні збіжні числові значення на підставі розбіжного ряду. Розроблення і вдосконалення таких способів пересумовування асимптотичних рядів становить важливу частину інструментарію теоретико-

польової РГ і було також одним із наших завдань [50]. Так, застосування методу пересумовування Паде-Бореля до ряду (3.1) дозволило нам зробити оцінку $m_c = 2.862 \pm 0.005$. Зокрема така оцінка означає, що фазовий перехід у феромагнітних кристалах із трьома легкими осями ($m = 3$) відбувається за сценарієм переходу першого роду.

Значення граничних вимірностей важливі також для з'ясування можливої критичної поведінки складніших моделей. Зокрема, величина (3.1) і подібні оцінки входять до умов стійкості різних типів мультикритичної поведінки систем з двома зв'язаними параметрами порядку з симетрією $O(m) \oplus O(n)$. Так, до систем з симетрією $O(2) \oplus O(1)$ належать анізотропні антиферромагнетики у зовнішньому полі прикладеному вздовж осі анізотропії. Тут параметрами порядку є компоненти магнітних моментів підґраток вздовж поля та відповідні компоненти магнітних підґраток у перпендикулярних напрямках. Типові фазові діаграми таких магнетиків показані на Рис. 3. Зокрема, може спостерігатись бікритична точка, у якій зустрічаються дві лінії фазових переходів другого роду з лінією фазових переходів першого роду (Рис. 3a), розділяючи три можливі фази. Інший сценарій також можливий, коли мультикритична точка є тетракритичною, тобто зустрічаються чотири лінії фазових переходів другого роду, що розділяють чотири фази (Рис. 3b).

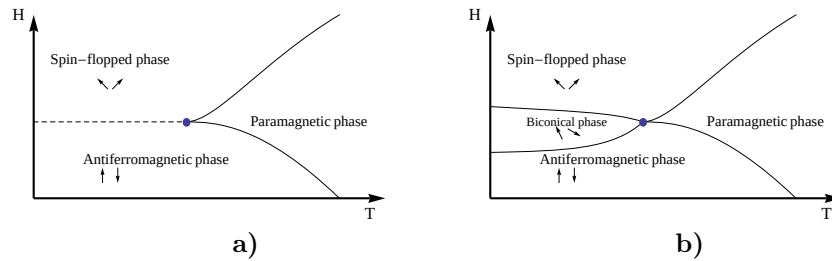


Рис. 3. Типові фазові діаграми анізотропних антиферромагнетиків у однорідному паралельному зовнішньому магнітному полі: **a)**: бікритична точка, **b)**: тетракритична точка. Тип фазової діаграми однозначно диктується значеннями граничних вимірностей $O(m) \oplus O(n)$ -симетричної моделі.

Проведений нами аналіз стійкості різних типів мультикритичної поведінки показав, що тривимірні $O(1) \oplus O(2)$ системи повинні характеризуватись тетракритичною точкою [51, 52], однак, вони знаходяться дуже близько до границі стійкості такої мультикритичної поведінки. Це означає, що критична область, де спостерігається те-

тракритична поведінка, є дуже вузькою, а тому слабо досяжною в експериментах. Тому результати експериментальних і чисельних досліджень більше підтверджують першу діаграму.

Іншою задачею, де аналіз граничних вимірностей допомагає отримати відповідь про рід фазового переходу, є фрустровані магнетики із неколінеарним впорядкуванням [53]. Класичними прикладами можуть служити шаруваті антифероманетики на трикутній ґратці (такі як CsMnBr_3 , CsCuCl_3 , CsNiCl_3) та гелімагнетики Ho , Dy , Tb . Численні експериментальні дослідження і комп'ютерні симуляції не давали однозначної відповіді про рід фазового переходу у таких системах. Для теоретичного обґрунтування природи такого переходу ми провели дослідження значення вимірності m_c , нижче якої у фрустрованих магнетиках неможливий фазовий перехід другого роду. Використовуючи ряди у шостому порядку перенормованої теорії збурень, ми отримали [54] $m_c \simeq 6.23$, що свідчить про відсутність фазового переходу другого роду для реальних систем, у яких $m = 2, 3$. Цей результат ми підтвердили при аналізі методами непертурбативної РГ, яка не використовує теорію збурень [22].

4. Вплив структурного безладу на фазові переходи у двовимірних магнетиках

Зростання інтересу до теоретичного аналізу двовимірних систем спричинене прогресом у експериментальних методах створення і дослідження низьковимірних матеріалів, зокрема ультратонких плівок та двовимірних кристалів [55]. Важливо також зауважити, що деякі двовимірні моделі дозволяють знайти точний розв'язок [56].

Розгляд питання про вплив структурного безладу на фазові переходи у низьковимірних системах є дуже важливим, оскільки навіть виготовлений у лабораторних умовах матеріал може містити дефекти та домішки, що вже казати про природні відповідники. Нижче ми зупинимося на двох явищах, спричинених присутністю немагнітних домішок у двовимірних ($d = 2$) магнетиках. Для означеності оберімо систему з гамільтоніаном (2.1) і вважатимемо, що домішок небагато (концентрація “магнітної” компоненти $c \simeq 1$) і час їх релаксації до рівноважного положення суттєво більший від характерних часів релаксації спінової підсистеми – так званий “заморожений” безлад.

Наш перший результат стосується моделі Ізінґа. Відомо, що нескорельовані заморожені немагнітні домішки не змінюють роду фазового переходу у цій моделі, більше того, провідна асимптотика

термодинамічних і структурних функцій залишається такою ж, як і у моделі Ізінга без домішок [57]. Однак, як вплинуть на магнітне впорядкування можливі кореляції у розподілі немагнітних домішок? Для з'ясування цього питання ми дослідили ефекти, спричинені структурними неоднорідностями, скорельованими на великих відстанях r згідно зі степеневим законом

$$g(r) \sim r^{-a}, \quad (4.1)$$

із кореляційним параметром a [58]. Безлад, для якого загасання парної кореляційної функції домішка-домішка (4.1) характеризується параметром $a < d$, називається *далекосяжно скорельованим* (long-range correlated). Цілі значення параметра a дають змогу описати присутність протяжних дефектів у вигляді ліній ($a = d - 1$) чи площин ($a = d - 2$), випадково розкиданих в просторі, в той час як нецілі значення кореляційного параметра відповідають дефектам у вигляді складних кластерів фрактальної вимірності $d_f = d - a$. При значенні кореляційного параметру, що перевищує вимірність простору d , відтворюється випадок точкових нескорельованих дефектів. Для розгляду впливу такого далекосяжно-скорельованого безладу на критичну поведінку двовимірної моделі Ізінга ми використали ферміонне представлення цієї моделі та застосували формалізм теоретико-польової РГ [59]. Цей формалізм дає змогу отримати точні результати для критичних показників фазового переходу у магнетовпорядкований стан у випадку нескорельованих немагнітних домішок: відомо, що провідна асимптотика залишається незмінною, і структурний безлад спричиняє лише появу логарифмічних поправок [57]. Як показано в нашій роботі, далекосяжні кореляції немагнітних домішок приводять до зміни критичних показників магнітного фазового переходу у моделі Ізінга при $d = 2$ і $0.995 < a < 2$. Зокрема, отриманий нами результат для критичного показника кореляційної довжини $\nu = 2/a + O((2 - a)^3)$ узгоджується із попередніми припущеннями, отриманими в другому порядку подвійного $(4 - d)$, $(4 - a)$ -розкладів [58, 60]. Цей факт, а також наша оцінка для показника загасання парної кореляційної функції $1/4 - (2 - a)/8 \leq \eta \leq \frac{1}{4}$ свідчать про зміну класу універсальності магнітного фазового переходу.

На відміну від моделі Ізінга, яка володіє дискретною Z_2 симетрією, фазовий перехід із виникненням параметра порядку (спонтанної намагніченості M) неможливий у двовимірній системі із неперервною симетрією. Однак у двовимірному світі відбувається ціла низка дивовижних явищ, одне із них – так зване *квазі-далекосяжне* впорядкування, у яке переходить двовимірною системою з неперервною си-

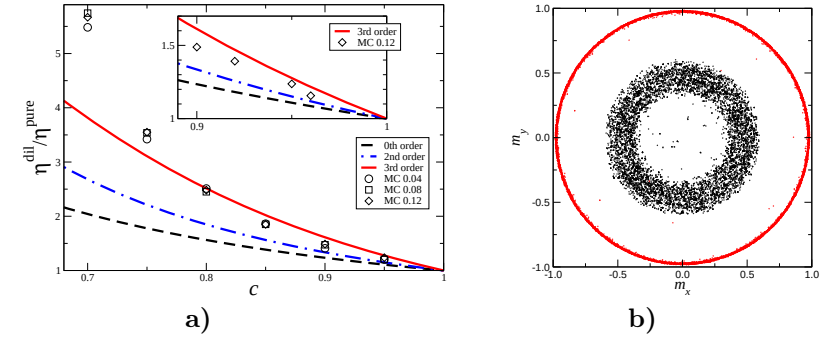


Рис. 4. Характеристики квазі-далекосяжного впорядкування у двовимірній XY моделі. **а):** Зміна показника парної кореляційної функції зі зростанням концентрації магнітної компоненти c [20]. **б):** Значення x і y компонент намагніченості для кожного кроку МС для ґратки розміром 16×16 при концентрації спінів $c = 0.70$ і температурі $k_B T/J = 0.1$ [23]. Зовнішнє кільце відповідає нерозведеній системі, $c = 1.0$.

метрією $O(2)$ при топологічному фазовому переході описаному Березинським та Костерліцом і Таулесом. За опис цього явища, що відбувається в двовимірних твердих тілах, магнетиках, Бозе-плинах, рідких кристалах, останні два автори отримали Нобелівську премію у 2016 році. Квазі-далекосяжне впорядкування характеризується відсутністю параметра порядку, $M = 0$, однак степеневим загасанням парної кореляційної функції: $G_2(R) \sim R^{-\eta}$. Як ще один приклад впливу структурного безладу на фазовий перехід приведемо наші результати дослідження двовимірної структурно-невпорядкованої (розведеної) XY моделі з гамільтоніаном (2.1) при $m = 2$. Зокрема, в результаті наших досліджень виявилось, що показник η^{dil} залежить від концентрації домішок c і збільшується у порівнянні з показником η^{pure} нерозведеної системи [20]:

$$\eta^{\text{dil}} = \eta^{\text{pure}} \left(\frac{1}{c^2} + 0.73 \frac{1 - c}{c^3} - 0.27 \frac{(1 - 3c + 2c^2)}{c^4} \right). \quad (4.2)$$

Для порівняння розрахунків у різних порядках теорії збурень із результатами МС моделювання див. на Рис. 4а. Результат (4.2) справедливий не лише у термодинамічній границі, а і для скінченних, але достатньо великих систем [23]. Середнє значення намагніченості скінченної системи відмінне від нуля (див. Рис. 4б) і спадає з кількістю спінів N як $M \approx cN^{-\eta^{\text{dil}}/4}$.

5. Концепція скейлінгу у фізиці полімерних макромолекул складної топології

Дослідження конформаційних властивостей полімерних макромолекул складної топології, утворених з'єднанням різної кількості полімерних ланцюгів, становить важливу ділянку сучасної фізики і хімії полімерів. Один із прикладів такої макромолекули, полімерна зірка, зображений на Рис. 5. Інтерес до теоретичного аналізу властивостей зіркових полімерів викликаний низкою причин – це і промислові застосування (наприклад, в нафтовидобуванні чи фармацевтичній індустрії), і наявні результати експериментального дослідження фізичних властивостей добре означених об'єктів, монодисперсних як за ступенем полімеризації, так і за кількістю гілок. Поза тим, зіркові полімери становлять унікальний клас об'єктів м'якої речовини, що пов'язує ділянки ланцюгових полімерів та колоїдів (пор., наприклад, Рис. 5a і b).



Рис. 5. Комп'ютерне моделювання полімерної зірки зі ступенем полімеризації (кількістю мономерів у ланцюзі) $N = 50$ і функціональністю (кількістю ланцюгів) $f = 10$ **a)** та $f = 50$ **b)** [61]. Зі збільшенням f полімерна зірка все менше схожа на фрактал і все більше схожа на тривимірний об'єкт – колоїдну частинку.

Подібно до того, як характерний розмір і кількість конфігурацій полімерного ланцюга у доброму розчиннику підлягають законам скейлінгу (1.1), кількість конфігурацій зіркового полімера пов'язана з його характерним розміром як [62]:

$$\mathcal{Z}_f \sim z^{Nf} N^{\gamma_f - 1} \sim \mathcal{R}^{\eta_f - f\eta_2}, \quad (5.1)$$

тут γ_f , η_f – універсальні критичні показники. Однак тепер глобальними змінними, від яких залежать критичні показники, є не лише вимірність простору d , а і функціональність зіркового полімера f .

Кількість глобальних змінних зростає при розгляді багатосортних зіркових полімерів. Так, для зіркового кополімера (полімерної зірки, що складається з f_1 ланцюгів сорту 1 і f_2 ланцюгів сорту 2) кількість конфігурацій змінюється з $\mathcal{R}$ як [26]:

$$\mathcal{Z}_{f_1 f_2} \sim \mathcal{R}^{\eta_{f_1 f_2} - f_1 \eta_{20} - f_2 \eta_{02}}, \quad (5.2)$$

тут критичні показники $\eta_{f_1 f_2}$ залежать від трьох глобальних змінних d , f_1 , f_2 .

Знання приведених вище законів (1.1), (5.1), (5.2) дозволило нам не тільки здійснити кількісний опис низки явищ, що відбуваються за участю полімерів, а і теоретично пояснити різні ефекти, для яких важлива статистика випадкових блукань. Серед таких ефектів – фазове розшарування суміші зіркових полімерів в пористому середовищі; зміна властивостей керованих дифузією реакцій із пастками, якщо пастка знаходиться на полімерному ланцюгові або на полімерній зірці; виникнення мультифрактальної поведінки у макромолекулярних системах; зміна роду фазового переходу при розчепленні молекули ДНК (unzipping transition) [26, 27, 29].

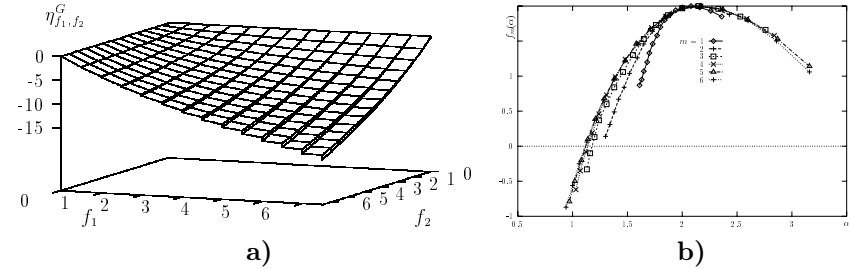


Рис. 6. Універсальні характеристики скейлінгу складних полімерів та пов'язаних з цим явищ. **a)** Показник $\eta_{f_1 f_2}$ (5.2) двовимірної ($d = 2$) полімерної зірки, утвореної двома наборами f_1 і f_2 взаємноунікних випадкових блукань (random walks) [26]. Сходінки на “килим” відповідають різниці у значеннях, отриманих в різних теоретичних підходах. Значення на діагоналі відповідають показнику скейлінгу однорідної полімерної зірки η_{2f} (5.1). **b)** Спектральна функція, що кількісно описує явище дифузії частинок біля адсорбера у формі зірки з m полімерних ланцюгів [27].

На Рис. 6 зображені результати теоретичного аналізу скейлінгу складних полімерів [26, 27]. Рис. 6a зображає показник $\eta_{f_1 f_2}$ (5.2) двовимірної двосортної полімерної зірки як функцію кількості ланцюгів

f_1 і f_2 , коли окремі ланцюги ведуть себе як випадкові блукання (ім дозволено перетинатися). У фізиці макромолекул така ситуація відповідає так званій Θ -точці (аналогічній точці Бойля в термодинаміці, коли реальний газ поводить себе як ідеальний). Однак, статистиці випадкових блукань підлягають і інші задачі, зокрема, задача про дифузію, коли блукання описує траєкторію частинки. Така інтерпретація дозволила застосувати результати для показників $\eta_{f_1 f_2}$ (і теорію, що дозволяє отримати ці результати) для опису явища дифузії частинок біля полімерного адсорбера [27]. Виявляється, що кількісні характеристики такого явища описуються мультифрактальними спектрами [63], які, як правило, важко піддаються аналітичному опису і переважно аналізуються числовими методами. Рис. 6b показує один із результатів аналітичних розрахунків для так званої спектральної функції, що кількісно описує явище дифузії частинок біля адсорбера у формі зірки з m полімерних ланцюгів. Зауважимо, що результати для показників $\eta_{f_1 f_2}$ (Рис. 6a) отримані за допомогою методу теоретико-польової РГ. Таким чином, їх застосування для обчислення спектральної функції прокладає місток між теорією поля та теорією мультифракталів, що само по собі є цікавим результатом, який може мати добрі перспективи (див. також розділ 8).

6. Конформаційні властивості полімерів у пористому середовищі

Однією із важливих проблем сучасної фізики полімерів є вплив структурних неоднорідностей (домішок) у середовищі на універсальні конформаційні властивості молекул. Зокрема, важливим є розуміння поведінки макромолекул у колоїдних розчинах чи поблизу мікропористих мембран. Приклад неупорядкованого (пористого) середовища можна знайти, зокрема, при дослідженні конформаційних особливостей протеїнів у клітинах живих організмів. Використовуючи дані рентгенівської кристалографії та кріо-електронної мікроскопії неглобулярних протеїнів у природних (зокрема, клітинних) середовищах, було знайдено, що більшість макромолекул характеризуються універсальними параметрами розміру та форми, які відрізняються від відповідних значень в ідеальних чистих розчинниках.

Флуктуації густини домішок часто призводять до значних просторових неоднорідностей та утворення складних пористих структур фрактальної природи. Вплив таких неоднорідностей на властивості полімерних макромолекул можна досліджувати в рамках моделі далекосяжно скорельованого безладу, описаного у розділі 4.

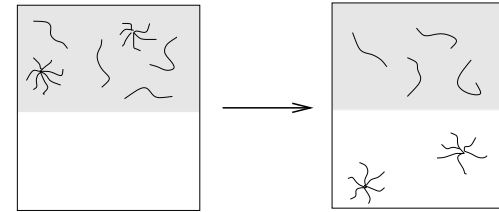


Рис. 7. Розділення суміші лінійних та зіркових полімерів в розчині, частина якого містить далекосяжно скорельовані структурні дефекти (показано сірим кольором). Рисунок взятий з роботи [64].

Застосовуючи підхід теоретико-польової РГ, у роботі [30] ми проаналізували вплив далекосяжно скорельованого безладу (4.1) на універсальні показники (1.1) та отримали числові значення показників у новому класі універсальності. Важливо відзначити, що присутність скорельованих дефектів складної структури спричиняє зростання ефективного розміру полімерного клубка (збільшення значення показника ν), і цей ефект посилюється при зростанні кореляцій безладу.

Дослідження властивостей f -гілкових зіркових полімерів у далекосяжно скорельованому безладі [31, 64] вказує на нетривіальність впливу безладу на спектр зіркових показників γ_f у виразі (5.1). Зокрема, в той час як при $f = 1, 2$, що відповідає лінійним полімерним ланцюжкам, значення показника γ зростає із зростанням кореляцій безладу, при $f > 2$ значення показника стає меншим порівняно із відповідним значенням у чистому розчині. На основі отриманих результатів можна передбачити цікаве явище розділення суміші лінійних та зіркових полімерів однакової молекулярної ваги (однакової кількості мономерів) у розчині, частина якого знаходиться в пористому середовищі у присутності скорельованих дефектів (див. Рис. 7). У тій частині розчину, що перебуває у скорельованому пористому середовищі, концентрація лінійних полімерів зростатиме, в той час як для зіркових полімерів, навпаки, енергетично вигідніше перебувати у розчині з тією ж концентрацією нескорельованих домішок.

Цікаво відзначити, що відношення характерних розмірів (радіусів гірації) лінійного полімерного ланцюжка та f -гілкового зіркового полімера $g(f) \equiv \langle R_{g\text{star}}^2 \rangle / \langle R_{g\text{chain}}^2 \rangle$ є також універсальною величиною. Більш того, ця величина є експериментально спостережуваною, і пов'язана із відношенням похідних від інтенсивностей розсіяння на

зіркових та лінійних полімерах

$$I'(k)_{\text{star}}/I'(k)_{\text{chain}} = g(f) + \dots \quad (6.1)$$

при малих значеннях хвильового вектора k .

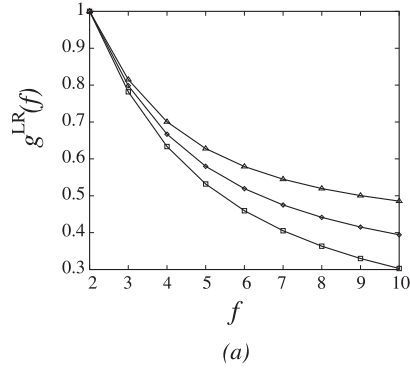


Рис. 8. Відношення $g^{\text{LR}}(f)$ як функція f при різних значеннях кореляційного параметра $\delta = 4 - a$: $\delta = 0.1$, $\delta = 0.5$, $\delta = 1.0$ знизу вгору. Рисунок взятий з роботи [66].

Відомо [65], що у чистих розчинах при будь-якому $f < 3$, відношення $g(f)$ є меншим за одиницю, а отже ефективний розмір галуженого полімера завжди менший, аніж розмір полімерного клубка тієї ж молекулярної ваги. У роботі [66] ми отримали значення відношення характерних розмірів лінійного полімерного ланцюжка та f -гілкового зіркового полімера у присутності далекосяжно скорельованого безладу, $g^{\text{LR}}(f)$. Як видно із наших результатів, зображених на Рис. 8, присутність структурного безладу призводить до зростання цієї величини із зростанням скорельованості безладу. А отже, ефективний розмір галуженої полімерної макромолекули у пористому середовищі зростає порівняно із негалуженим полімерним ланцюгом.

7. Полімери складної топології і статистика формування петель в макромолекулах

Утворення петель в полімерних макромолекулах відіграє важливу роль в низці біохімічних процесів, таких як стабілізація глобулярних протеїнів та компактифікація молекул ДНК в клітинних ядрах. Важливе явище локалізації хроматину у компактних областях, відомих

як хроматинові території, визначається утворенням множинних петель у хроматинових нитках. Численні аналітичні та чисельні дослідження присвячено аналізу процесів петлеутворення в полімерних макромолекулах. Також інтенсивно досліджувались конформаційні властивості окремих петель (кілецевих полімерів), що, в свою чергу, є важливими з огляду на те, що молекули ДНК деяких мікроорганізмів мають форму замкнутих петель.

Встановлено, що імовірність утворення петлі розміру l підлягає закону скейлінгу:

$$P \sim l^{-\lambda}, \quad (7.1)$$

де λ – універсальний показник, що залежить лише від вимірності простору. У випадку ідеального гаусового ланцюжка $\lambda = d/2$. Однак, присутність ефекту виключеного об'єму між мономерами призводить до того, що імовірність утворення петлі, а відповідно і значення показника λ залежить від розташування петлі вздовж полімерного ланцюжка [67] (див. Рис. 9).

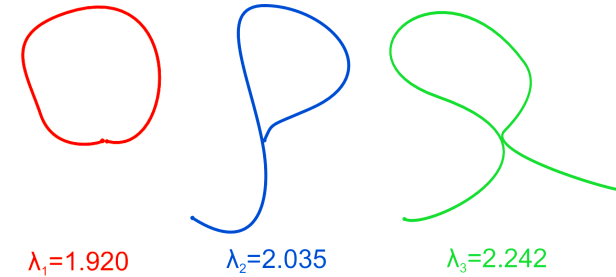


Рис. 9. Схематичне зображення різних типів утворення петель вздовж полімерного ланцюжка та відповідні значення критичних показників у виразі (7.1), отримані у роботі [67].

У роботі [68] ми проаналізували статистику утворення петель в полімерних макромолекулах у розчині в присутності далекосяжно скорельованого безладу, описаного у попередньому підрозділі. Наші результати вказують на те, що присутність скорельованих дефектів призводить до збільшення значень показників λ порівняно із випадком чистого розчину, а отже, імовірність утворення петель в полімерних макромолекулах знижується у присутності структурних дефектів.

Іншим цікавим питанням є вплив топології замкненої петлі на конформаційні властивості макромолекули. Зручним параметром для

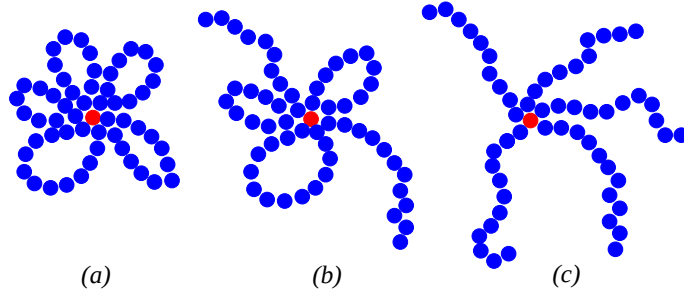


Рис. 10. Схематичне представлення полімерних систем різної топології. Рисунок взято з роботи [72].

порівняння ефективного лінійного розміру кільцевого та лінійного полімера однакової молекулярної ваги є відношення їх радіусів гірації, що, як і відношення розмірів лінійного та зіркового полімерів (6.1), є експериментально спостережуваною величиною. Встановлено, що в ідеалізованому гаусовому випадку ця величина набуває значення $1/2$ [65], в той час як присутність ефекту виключеного об'єму призводить до її зростання [69, 70]. У роботі [71] ми проаналізували вплив далекосяжно скорельованого безладу на це відношення і показали, що ефективний розмір кільцевого полімера зростає порівняно із розміром лінійної макромолекули із зростанням кореляцій безладу.

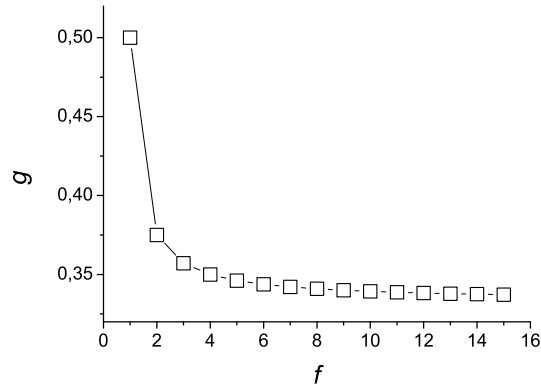


Рис. 11. Відношення радіусів гірації квіткових та зіркових полімерів однакової загальної молекулярної ваги як функція параметру галузження f . Рисунок взято з роботи [72].

У цьому відношенні цікаво дослідити конформаційні властивості полімерної системи складної топології, що містить загалом f_1 петель і f_2 лінійних ланцюжків однакової загальної довжини (див. Рис. 10). Така модель “квіткових” полімерів була запропонована в нашій роботі [72]. Ми дослідили, зокрема, поведінку відношення радіусів гірації квітового та зіркового полімерів $g \equiv \langle R_{g \text{ rosette}}^2 \rangle / \langle R_{g \text{ star}}^2 \rangle$ із $f_1 = f$ та $f_2 = f$, відповідно. Як видно з Рис. 11, ефективний розмір квітового полімера стає все більш компактним порівняно із зірковим полімером тієї ж молекулярної ваги із ростом параметру галузження, що й відповідає експериментально спостережуваному явищу компактифікації макромолекул із множинним петлеутворенням.

8. Мультифрактальні властивості полімерного ланцюжка на перколяційному кластері

При дослідженні фізичних процесів на складних фрактальних структурах часто зустрічаємось із ситуацією співіснування набору сингулярностей, пов'язаних із множинами різних фрактальних вимірностей [73]. У таких задачах необхідно враховувати цілий спектр критичних показників, що характеризують різні моменти розподілу спостережуваних величин. Такі властивості зазвичай співвідносяться із терміном “мультифрактальність” [74]. Спектр мультифрактальних вимірностей може бути використаний для опису тонких геометричних властивостей фрактального об'єкта, які не можна відобразити в рамках лише фрактальних вимірностей. Справді, кластери згенеровані в результаті процесу агрегації обмеженої дифузії (ОДА) [75] та перколяційні кластери мають ту ж фрактальну вимірність, але різну геометричну структуру. Це було відмічено, зокрема, при дослідженні мультифрактальності розподілу напруг на перколяційних кластерах та розподілу імовірностей росту в ОДА. Мультифрактальні властивості виникають при аналізі різноманітних явищ, для прикладу, турбулентності в хаотичних динамічних системах, динаміки серцебиття і т.д.

У цьому відношенні цікаво розглянути властивості блукань із самоуниканнями (SAWs) на фрактальних кластерах. Відомо, що скейлінгові властивості SAWs у таких випадках суттєво змінюються. Справді, було знайдено нові скейлінгові показники для SAWs на килимі Серпінського. Схожа ситуація спостерігається при дослідженні SAWs на неупорядкованих ґратках із концентрацією p структурних дефектів, дуже близькою до порогу перколяції p_c . У цьому випадку в системі виникає перколяційний кластер із дозволених вузлів, що

має фрактальну структуру. Відзначимо, що модель перколяції є своєрідною парадигмою при дослідженні неупорядкованих систем [76]. У цьому випадку закон скейлінгу (1.1) виконується із показником $\nu_{pc} \neq \nu_{SAW}$.

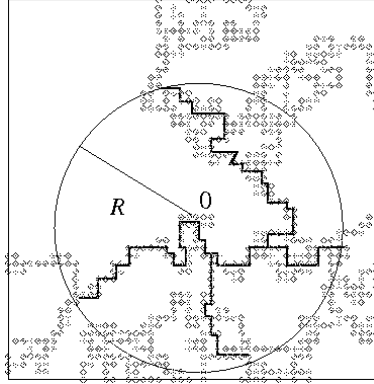


Рис. 12. Різні траєкторії SAW із фіксованою відстанню R між кінцями на перколяційному кластері при $d = 2$. Рисунок взято з роботи [78].

У той час як властивості SAWs на перколяційних кластерах служили об'єктом значної кількості чисельних та аналітичних досліджень, недостатньо уваги було приділено висвітленню мультифрактальності цієї задачі. У наших дослідженнях [77] було показано, що недостатньо лише показника ν_{pc} , щоб повністю описати властивості SAWs на перколяційному кластері. Натомість, існує цілий спектр мультифрактальних показників $\nu^{(q)}$:

$$\nu^{(q)} = \frac{1}{2} + \left(\frac{5}{2} - \frac{3}{2^q} \right) \frac{\varepsilon}{42} + \left(\frac{589}{21} - \frac{397}{14 \cdot 2^q} + \frac{9}{4^q} \right) \left(\frac{\varepsilon}{42} \right)^2 + O(\varepsilon^3), \quad (8.1)$$

де розклад проведено за $\varepsilon = 6 - d$ – відхиленням вимірності простору від верхнього критичного значення. Отримання числових оцінок на підставі цього розкладу потребує застосування процедури пересумовування, див. також розділ 3.

У нашій наступній роботі [78] цю задачу було проаналізовано за допомогою чисельного підходу в $d=2$ - та 3 -вимірних просторах. Для побудови перколяційних кластерів на неупорядкованих ґратках, було застосовано алгоритм Хошена-Копельмана [79], а для побудови

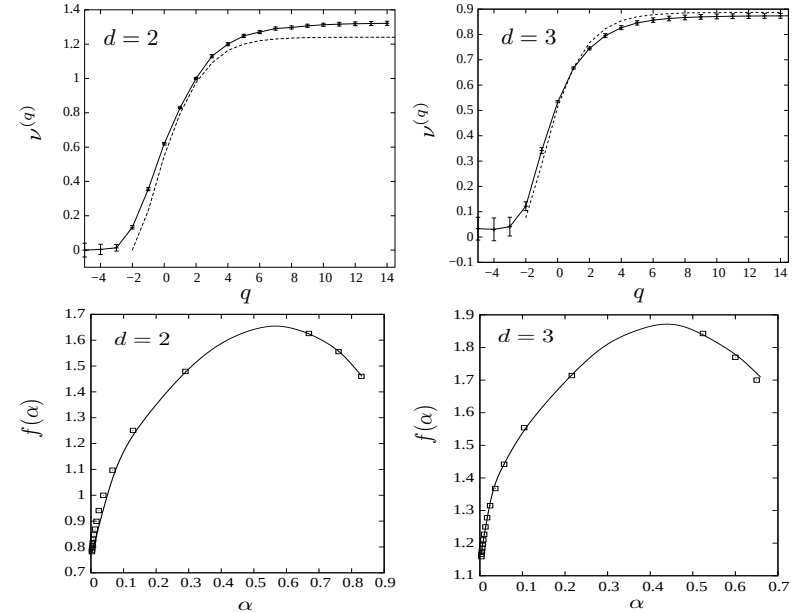


Рис. 13. Верхній рядок: спектр мультифрактальних показників $\nu^{(q)}$ як функція q при $d = 2, 3$ (суцільні криві – комп'ютерне моделювання, штриховані – Паде-апроксимація аналітичних виразів (8.1)). Нижній рядок: спектральна функція $f(\alpha)$ при $d = 2, 3$, максимальне значення $f(\alpha)$ відповідає фрактальній вимірності носія (основи перколяційного кластера). Рисунок взято з роботи [78].

траєкторії SAW використано збіднено-збагачений метод зростаючого ланцюжка [80]. Таким чином, було побудовано всеможливі траєкторії із фіксованою відстанню R між кінцями, як схематично представлено на Рис. 12. Ввівши вагу $w(i)$ для кожного вузла i перколяційного кластера, що характеризує імовірність проходження траєкторії через заданий вузол, було встановлено, що різні моменти розподілу цієї ваги

$$M^{(q)} = \sum_{i \in R} w(i)^q$$

підлягають законам скейлінгу із показниками $\nu^{(q)}$, що добре узгоджуються із теоретичними передбаченнями (8.1), див. Рис. 13. Таким чином, нами було аналітично і чисельно показано мультифрактальні властивості моделі SAW на фрактальних перколяційних кластерах.

9. Ідеї статистичної фізики у моделюванні та аналізі ефективності транспортних мереж

Використовуючи апарат статистичної фізики, наук про дані та складні мережі, ми дослідили топологію мереж громадського транспорту (ГТ), їх стійкість до зовнішніх збурень, взаємозв'язок стійкості та топології, а також змодельовали еволюційні процеси, що можуть призвести до спостережуваних структур.

Наш аналіз базувався на представленні мереж ГТ у вигляді графів. Вузлами таких графів можна обрати зупинки маршрутів, а кожну пару вузлів-зупинок поєднати зв'язком, якщо вони є послідовними зупинками хоча б для одного маршруту. Дослідження топології такої мережі розпочато із аналізу співвідношення кількості “звичайних” та “центральных” вузлів графа. Оскільки така дискретна класифікація є суб'єктивною, було розглянуто поняття центральності вузлів та проаналізовано форми їх розподілів. Одним із прикладів такої центральності є ступінь k_i вузла i – кількість зв'язків, приєднаних до нього. За характером розподілу ступенів вузлів $p(k)$ мережі можна судити про її властивості і навіть оцінити спосіб еволюції. Поширеним типом розподілів ступенів у складних мережах різної природи є степеневий [14]

$$p(k) \sim k^{-\lambda}. \quad (9.1)$$

Такі мережі прийнято називати безмасштабними у зв'язку з відсутністю характерного масштабу. На відміну від мереж із експоненційним розподілом ступенів вузлів, у безмасштабних мережах допускається можливість існування вузлів із надзвичайно великими ступенями – габів, що можуть контролювати мережу.

У рамках проведеного дослідження було проаналізовано властивості мереж громадського транспорту 14 великих міст світу, враховуючи усі доступні дані про різні типи транспорту. Показано, що розподіл ступенів вузлів може характеризуватися як степеневим, так і експоненційним загасанням, що може говорити про різні класи механізмів еволюції ГТ у цих містах. Базуючись на цих результатах, ми запропонували опис еволюції мереж ГТ [35], побудований на відомій моделі із фізики полімерів – блукання із самоуниканням. У цьому підході мережа вулиць міста розглядалася як квадратна ґратка розміром $X \times X$. Перший маршрут фіксованої довжини S прокладався випадковим блуканням із довільно вибраної точки “міста”. Початок $\vec{x}_0$ кожного наступного маршруту вибирався з ймовірністю

$$p \sim k_{\vec{x}_0} + a/X^2, \quad (9.2)$$

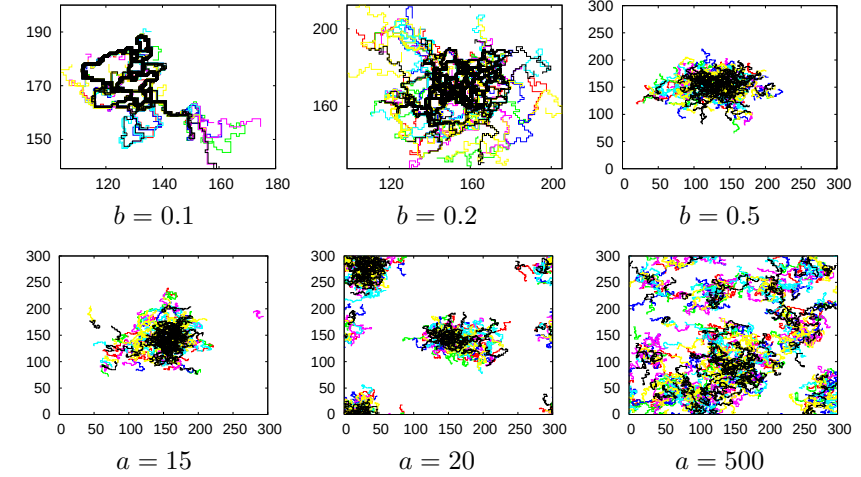


Рис. 14. Мережі ГТ різних модельованих міст розміру 300×300 із $R = 1024$ маршрутами по $S = 64$ станцій кожен. Перший рядок: $a = 0$, $b = 0.1 \div 0.5$. Другий рядок: $b = 0.5$, $a = 15 \div 500$. Із зростанням b маршрути покривають все більшу площу. Зростання a призводить до кластеризації мережі.

а кожна наступна зупинка маршруту – з ймовірністю

$$p \sim k_{\vec{x}} + b, \quad (9.3)$$

див. Рис. 14. Було показано, що ряд властивостей згенерованих мереж (розподіли ступенів вузлів, розподіли довжин найкоротших шляхів) відтворює відповідні характеристики реальних і обґрунтовано причини появи універсальності у поведінці таких характеристик.

Ще один приклад, взятий із статистичної фізики – задача про перколяцію – дозволив нам дослідити стійкість мереж ГТ до випадкових збоїв та спрямованих атак (вилучення їх складових). Ми змодельовали різні сценарії атак: від випадкових, вилучаючи вузли чи зв'язки мережі випадковим чином, до спрямованих, послідовно усуваючи найважливіші складові, див. Рис. 15.

Виявилось, що більшість мереж ГТ надзвичайно стійкі до випадкових атак, у той же час вони дуже вразливі до спрямованих сценаріїв руйнування [35, 36]. Запропоновано критерії відбору важливих вузлів мережі та спосіб передбачення стійкості мережі до атак різних типів.

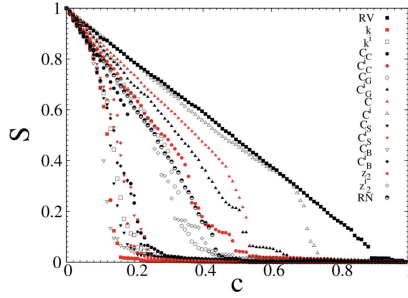


Рис. 15. Залежність розміру S найбільшої зв'язної компоненти мережі ГТ Парижу від частки c вилючених вузлів при різних сценаріях атак. Кожен сценарій атаки відображений відповідним символом на рисунку: заповнені чорні квадрати відповідають випадковому сценарію, а заповнені червоні – сценарію, при якому першими видаляються вузли із найбільшими ступенями. Див. [36] для детальнішого опису.

10. Універсальність, нулі статистичної суми і порушення теореми Лі-Янга для моделі Ізінга на безмасштабній мережі

Започаткований в роботах Нобелівських лауреатів Цзун-дао Лі та Чженьнін Янга, а також Майкла Фішера, аналіз розподілу нулів статистичної суми в комплексній площині становить сьогодні одну з основ теорії фазових переходів [81–83]. Нулі Лі-Янга розраховуються при дійсній температурі T в площині комплексного магнітного поля H , в той час як нулі Фішера аналізуються в площині комплексної температури. У термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ нулі формують неперервні криві у комплексній (H чи T) площині. Аналізуючи розташування і скейлінг нулів, у формалізмі Лі-Янга-Фішера здійснюється альтернативний опис критичної поведінки всієї системи і знаходяться її універсальні характеристики.

Отримані нами результати стосуються аналізу нулів Лі-Янга і Фішера для моделі Ізінга на відпаленій безмасштабній мережі [85, 86]. Приємно відзначити, що наші роботи є першими, у яких такий формалізм застосовано для аналізу критичної поведінки на безмасштабній мережі. Інтерес до дослідження критичної поведінки і фазових переходів у спінових моделях на складних мережах викликаний низкою причин. Так, у задачах соціофізики структура складної мережі

відповідає реальним соціальним зв'язкам між індивідуумами. Подібно, при моделюванні магнітних наносистем їх структура набагато краще описується топологією мережі, а не ґратки. Зрештою, розгляд критичних явищ на складних мережах становить і чисто академічний інтерес, адже, як показали, зокрема, і наші дослідження, такі явища суттєво відрізняються від їх аналогів на ґратках.

Наш аналіз стосувався моделі Ізінга, спіни S_i якої локалізовані на вузлах i відпаленої безмасштабної мережі із функцією розподілу ступенів вузлів згасною за степеневим законом (9.1). Наявність відпаленого безладу призводить до того, що усереднення за спінами та конфігураціями зв'язків потрібно виконувати для статистичної суми Z , а не її логарифму. Після усереднення за випадковими зв'язками “взаємодія” у Z стає сепарабельною [84]:

$$Z(T, H) = \text{Tr}_S \exp \left(\frac{1}{2N\langle k \rangle T} \sum_{i \neq j} S_i S_j k_i k_j + \frac{H}{T} \sum_i S_i \right). \quad (10.1)$$

У свою чергу, це дає змогу отримати точне інтегральне представлення для функції $Z(T, H)$ і проаналізувати її у комплексній площині. Зокрема, ми знайшли скейлінгові співвідношення для координат нулів Лі-Янга та Фішера скінченної системи з N частинок:

$$H_j(N, T = T_c) \sim \left(\frac{j}{N} \right)^\sigma, \quad T_j(N, H = 0) \sim \left(\frac{j}{N} \right)^{\frac{1}{2-\alpha}}, \quad (10.2)$$

де j – порядок нуля, $\sigma = \frac{\beta\delta}{2-\alpha}$, а α, β, δ – критичні показники фазового переходу у магнетовпорядкований стан. Подібним чином, аналізуючи рух нулів Фішера при змінному дійсному магнітному полі (типова картина розташування нулів показана на Рис. 16а), ми знайшли значення кутів φ, ψ , що характеризують розташування ліній нулів. Отриманий нами результат

$$\sigma = \frac{\lambda - 2}{\lambda - 1}, \quad \psi = \frac{\pi(\lambda - 3)}{2(\lambda - 2)}, \quad \varphi = \frac{\pi(\lambda - 3)}{2(\lambda - 1)}, \quad 3 < \lambda < 5, \quad (10.3)$$

свідчить про те, що в ділянці проміжних значень λ універсальні значення кутів і показника σ стають λ -залежними, а отже і сама гіпотеза про універсальність критичної поведінки зазнає змін, коли така поведінка відбувається на безмасштабній мережі.

Відомо, що для моделі Ізінга на ґратці справедлива теорема Лі-Янга про одиничне коло. Відповідно до цієї теореми, нулі статистичної суми мають чисто уявні координати у комплексній H -площині

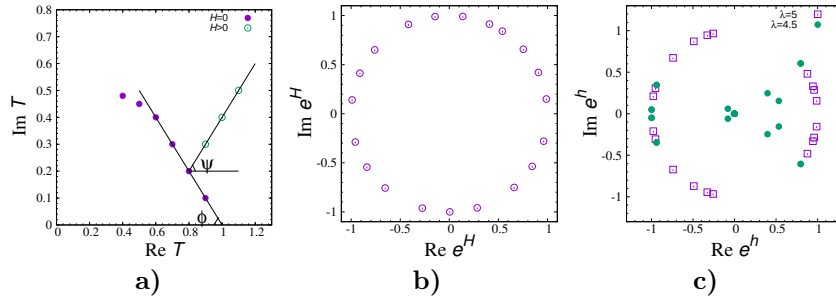


Рис. 16. **а):** Нулі Фішера у комплексній T площині. Кут φ є кутом між лінією конденсації нулів Фішера та дійсною осі. Кут ψ описує рух нулів Фішера зі зміною дійсного зовнішнього поля H . Рух першого нуля зі збільшенням магнітного поля H зображено колами. **б), с):** Нулі Лі-Янга моделі Ізінґа на двовимірній ґратці та на безмасштабній мережі. При $\lambda < 5$ теорема Лі-Янга порушується: координати нулів не лежать на колі одиничного радіусу [85].

(чи, відповідно, розташовуються на колі одиничного радіусу в площині e^H). Про важливість цієї теореми свідчить і те, що часом її називають фундаментальною теоремою теорії фазових переходів. Як виявилось в результаті нашого аналізу [85, 86], нулі Лі-Янга для моделі Ізінґа на відпаленій безмасштабній мережі в діапазоні $3 < \lambda < 5$ не задовольняють теорему про одиничне коло, тоді як при $\lambda \geq 5$ усі нулі є чисто уявними, див. Рис. 16с. Це неочікувано, оскільки означає, що роль показника загасання λ (для мереж) та вимірності d (для ґраток), які контролюють універсальні характеристики фазових переходів і є глобальними параметрами, не еквівалентна на рівні нулів Лі-Янга.

11. Соціофізика — фізичні підходи до дослідження суспільних явищ

Поява мобільного зв'язку суттєвим чином вплинула на способи дослідження соціальних систем [87]. Велика кількість інформації про кожного абонента зберігається на серверах мобільних операторів. Пізніше ці дані можуть бути використані для проведення різного роду досліджень. Прикладом такого підходу є ініціатива **D4DChallenge** [88], проведена мобільним оператором **Orange** у Кот-д'Івуарі. Надаючи дослідникам доступ до анонімізованих даних спілкування, органі-

затори ініціативи попросили провести дослідження довільного кола задач, результати яких могли би бути використаними для покращення добробуту населення країни. База даних складалася із двох частин: даних про кількість дзвінків усіма парами антен мобільного оператора **Orange** протягом 5 місяців, та десяти менших баз даних, кожна про переміщення 50 000 випадковим чином вибраних абонентів протягом двох тижнів.

До участі у даному проекті долучилося чимало фізиків, зокрема і представники нашого Інституту у співпраці з науковцями університету Аалто (Фінляндія). Хоча закони взаємодії між учасниками соціуму носять нефізичний характер, глобальна поведінка великою мірою нагадує закони, які можна спостерігати у природничих науках. Одним із таких прикладів є закон соціальної гравітації [89]. Суть його полягає у тому, що міста (населені пункти) притягаються між собою за законами, подібними до закону гравітації. Різниця полягає у тому, що саме вважається масою і що характеризує взаємодію. Аналогом маси може служити населення міста чи його економічні показники (бюджет), а аналогом сили притягання – трафік чи товарообіг між ними. Було показано, що різні характеристики взаємодій f_{ij} між містами i та j можуть бути описані залежністю

$$f_{ij} = \frac{m_i m_j}{d_{ij}^\alpha}, \quad (11.1)$$

де m_i є аналогом маси міста i , d_{ij} позначає відстань між ними, а α – показник степеня.

На Рис. 17 показано емпіричні результати [90], отримані нами у рамках ініціативи **D4DChallenge**. Аналогом маси міста вважалась загальна кількість вхідних дзвінків до чи вихідних дзвінків від абонентів у межах населеного пункту. Використовуючи інформацію про дзвінки з прив'язкою до кожної антени мобільного оператора, було досліджено питання соціальної гравітації у межах найбільшого населеного пункту – міста Абіджан (5 мільйонів індивідуальних переміщень та 109 мільйонів дзвінків між 298 антенами в межах міста, що відповідає 31% від усіх дзвінків та 50% від усіх переміщень у базі даних). Досліджено два типи взаємодій між населеними пунктами (точками): фізичне переміщення (кількість переміщень m_{ij} між точками i та j), та спілкування (кількість дзвінків c_{ij} між цими точками).

Як видно із Рис. 17 (верхній рядок) середній трафік, нормований на добуток мас точок, досить добре описується степеневою функцією

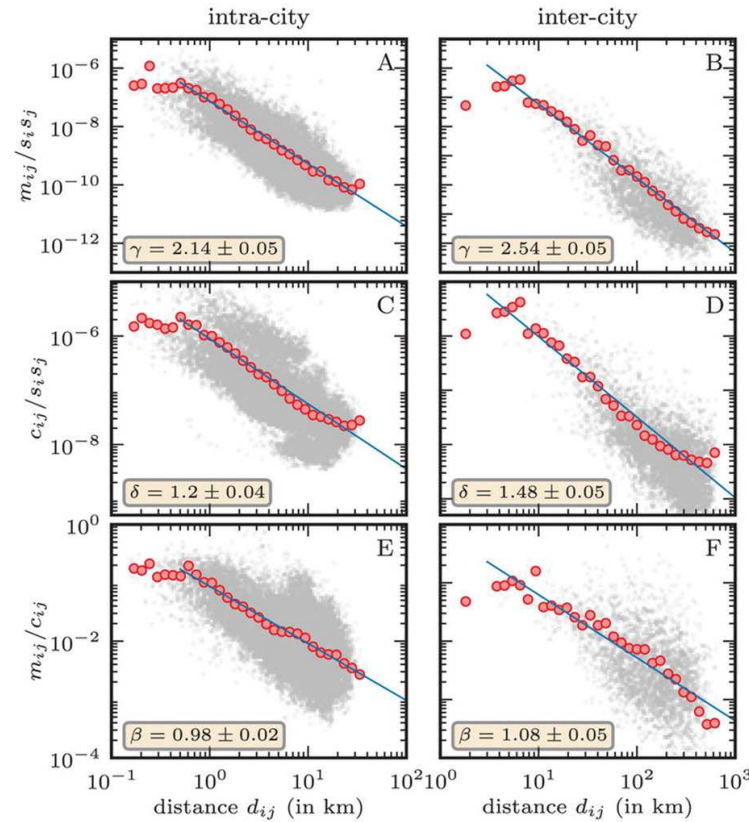


Рис. 17. Трафік (кількість переміщень) між точками i та j , нормований на добуток мас точок $m_{ij}/(s_i s_j)$ (верхній рядок), нормований мобільний трафік (кількість дзвінків) $c_{ij}/(s_i s_j)$ (середній рядок) та кількість переміщень з розрахунку на один дзвінок між точками i та j як функція відстані між точками d_{ij} . Рисунок з лівого боку відповідає гравітації між містами, з правого – між різними точками у межах населеного пункту. Рисунок взято з роботи [90].

(11.1) з показником³ γ , значення якого дещо більше за 2. Спостережено, що цей показник є більшим для міжміської (inter-city), ніж для міської (intra-city) гравітації. Аналогічну картину було отрима-

³Тут показник степеня позначено γ для того, щоб розрізняти дві різні характеристики: переміщення (γ) та мобільний трафік (δ).

но для мобільного трафіку (див. Рис. 17, середній рядок). Кількість дзвінків між двома містами чи точками в межах міста c_{ij} , нормована на добуток відповідних мас, описується степеневим загасанням із відстанню з показником δ , дещо більшим за одиницю. Показник δ є дещо більшим для міжміської, ніж для міської системи.

Повертаючись до поставленого завдання, а саме, покращення добробуту, бачимо, що прояви закону соціальної гравітації можуть мати застосування для оцінки і передбачення трафіку між різними точками. Показано (Рис. 17, нижній рядок), що якість такої оцінки можна покращити, використовуючи дані мобільного спілкування, зробивши поправку на відстань між ними.

12. Наукометричний аналіз привабливості журнальних статей

Однією із наукометричних задач, якою ми займалися спільно із науковцями університетів Ковентрі (Англія) та Лотарингії (Нансі, Франція), було вивчення “привабливості” наукових публікацій шляхом аналізу статистики їх завантажуваності онлайн [91]. На основі даних про специфічну активність користувачів у мережі Інтернет розраховуються різноманітні індикатори, покликані характеризувати визнаність вченого, авторитет установи, популярність тематичного напрямку, тощо. Такі показники названі альтметриками [92], хоча за своєю природою вони не можуть виступати альтернативою цитатпоказників, а скоріше є їх доповненням при спробі якомога всеохопніше охарактеризувати об’єкт. Так, статистика завантажень статей з веб-сторінки (її ще відносять до показників використання) є індикатором зацікавлення потенційного читача ще до їх прочитання, тому нічого не говорить безпосередньо про наукову їх значущість.

Використовуючи дані про завантаження повних текстів статей журналу *Europhysics Letters* (EPL) з офіційної веб-сторінки, опублікованих протягом більше 6.5 років, ми описали статистичну картину привабливості видання загалом та окремих його компонент. Пам’ятаючи про те, що частина статей у згаданому виданні знаходиться у відкритому доступі, а решта може завантажуватись лише за передплатою, ми з самого початку розділили ці дві категорії публікацій. База даних, таким чином, налічувала 4986 статей, доступних за передплатою, та 377 – так званих Open Access (OA) статей.

На Рис. 18 зображено кумулятивні розподіли завантажень статей відповідно до їх віку онлайн (кількість місяців після оприлюднення) для EPL та двох інших видань. Для побудови цього малюнку брали-

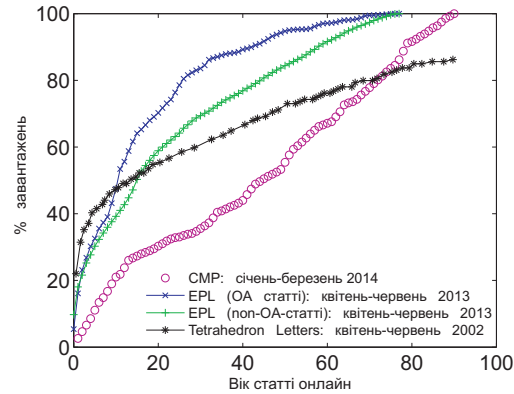


Рис. 18. Відносний кумулятивний розподіл завантажень відповідно до віку статей у журналах EPL, Tetrahedron Letters (дані з роботи [93]) та Condensed Matter Physics (CMP) на основі даних за обрані три місяці.

ся дані, що стосувалися виключно завантажень, здійснених в рамках вибраного 3-місячного часового вікна. Припустимо, що функціональні форми наведених кривих є свого роду характеристиками кожного з видань та, гіпотетично, залежать від дисципліни, домінуючого типу публікацій (короткі повідомлення, регулярні статті, огляди, тощо) та правил доступу до них. Для побудови таких розподілів потрібно опиратися на статистику, зібрану за достатньо тривалий час. З іншого боку, маючи у розпорядженні дані навіть за кілька років, можна здійснити екстраполяцію за допомогою простої моделі. На Рис. 19 показано, як густина завантажень ρ (середнє число сумарних завантажень на статтю) розподілена між публікаціями різного віку. Можна побачити, що існують два різні режими: протягом перших 5 чи 6 місяців швидкість завантажень є вищою, а пізніше відчутно спадає. Можна припустити, що різні швидкості процесу обумовлені різними мотиваціями користувачів до завантаження файлів: спочатку це зацікавлення новими матеріалами, а пізніше – інтереси архівування чи поточний пошук.

Отримані нами дані добре пояснюються так званою двофакторною моделлю [93]:

$$\rho(t) = \rho_0 [A \exp(-b_1 t) + (1 - A) \exp(-b_2 t)], \quad (12.1)$$

$$0 \leq A \leq 1, \quad b_1 > 0, \quad b_2 > 0,$$

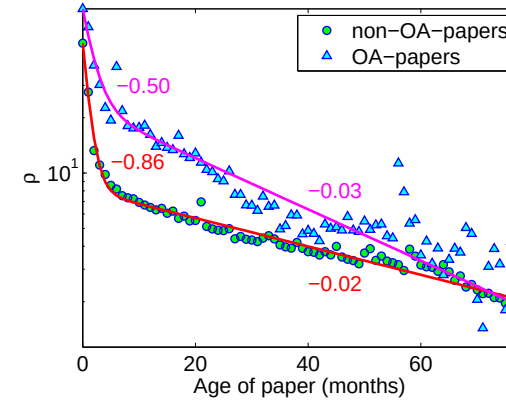


Рис. 19. Густина завантажень ρ як функція віку статті. Суцільні криві – передбачення моделі (12.1), вказані також значення констант загасання.

де A та $(1 - A)$ – відносні ваги двох факторів (різних мотивацій), а ρ_0 позначає густину завантажень, що відповідає найновішим статтям (опублікованим і завантаженим протягом одного місяця). Параметри b_1 та b_2 відповідають двом різним експонентам загасання. Використовуючи цю модель, можна передбачити, як буде виглядати процес завантажуваності у довшій часовій границі. Зокрема, можна сказати, що в рамках передплати статті наберуть 50% своїх завантажень за 25 місяців життя онлайн. Для OA-статей для цього вистачить 10 місяців. Подібним чином були ідентифіковані групи публікацій, що характеризуються різними формами динаміки процесу їх завантаження.

Література

1. S. Thurner. In *Visions for Complexity* (World Scientific, Singapore), 2016.
2. P. W. Anderson. More is different, *Science* **177**, 393 (1972).
3. D. Sherrington. Physics and complexity, *Phil. Trans. Roy. Soc. A* **368**, 1175 (2010).
4. G. Parisi Complex systems: a physicist's viewpoint, *Physica A* **263**, 557 (1999).
5. Yu. Holovatch, R. Kenna, S. Thurner. Complex systems: physics beyond physics, *Eur. Journ. Phys.* **38**, 023002 (2017).

6. M. Mitzenmacher. A Brief History of Generative Models for Power Law and Lognormal Distributions, *Internet Mathematics* **1**, 226 (2004).
7. M. E. J. Newman. Power laws, Pareto distributions and Zipf's law, *Contemporary Physics* **46**, 323 (2005).
8. M. V. Simkin, V. P. Roychowdhury. Re-inventing Willis, *Physics Reports* **502**, 1 (2011).
9. C. Domb. The Critical Point. (Taylor & Francis, London, 1996).
10. D. Sornette. Critical phenomena in natural Sciences (New York: Springer-Verlag, 2011).
11. P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld. Self-organized criticality: an explanation of $1/f$ noise, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).
12. B. Mandelbrot. An Informational Theory of the Statistical Structure of Languages. In: Communication Theory, edited by W. Jackson (Woburn, MA: Butterworth, 1953), pp. 486–502.
13. B. Corominas-Murtra, R. Hanel, S. Thurner. Understanding scaling through history-dependent processes with collapsing sample space, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **112**, 5348 (2015).
14. R. Albert, A.-L. Barabasi. Statistical mechanics of complex networks, *Rev. Mod. Phys.*, **74**, 47 (2002); S.N. Dorogovtsev, J.F.F. Mendes. Evolution of Networks: From Biological Networks to the Internet and WWW, (Oxford University Press, 2003); M. E. J. Newman. The structure and function of complex networks, *SIAM Review* **45**, 167 (2003); Ю. Головач, О. Олемской, К. фон Фербер, Т. Головач, О. Мриглод, І. Олемської, В. Пальчиков. Складні мережі, *Журнал Фізичних Досліджень* **10**, 247 (2006); A. Barrat, M. Barthelemy, A. Vespignani. Dynamical Processes on Complex Networks, (Cambridge University Press, 2008); M. Newman. Networks: An Introduction, (Oxford University Press, 2010).
15. M. Mézard, G. Parisi, M. A. Virasoro. Spin Glass Theory and Beyond. (World Scientific, Singapore, 1987).
16. Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory, ed. by Yu. Holovatch. **vol. 1–vol. 5**: (World Scientific, Singapore, 2007–2017).
17. R. Folk, Yu. Holovatch, T. Yavors'kii. Critical exponents of a three-dimensional weakly diluted quenched Ising model, *УФН* **173**, 175 (2003) [*Physics-Uspiekh* **46**, 169 (2003)].
18. D. Ivaneyko, J. Ilnytskyi, B. Berche, Yu. Holovatch. Local and cluster critical dynamics of the 3d random-site Ising model. *Physica A* **370**, 163 (2006).

19. D. Ivaneyko, B. Berche, Yu. Holovatch, J. Ilnytskyi. On the universality class of the 3d Ising model with long-range-correlated disorder. *Physica A* **387**, 4497 (2008).
20. O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch. Perturbation expansion for the diluted two-dimensional XY model. *Phys. Letts. A* **366**, 150 (2007).
21. M. Dudka, R. Folk, Yu. Holovatch. Critical properties of random anisotropy magnets. *J. Magn. Magn. Mat.* **294**, 305 (2005).
22. B. Delamotte, M. Dudka, D. Mouhanna, S. Yabunaka, Functional renormalization group approach to non-collinear magnets. *Phys. Rev. B* **93**, 064405 (2016).
23. O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch. The 2D XY model on a finite lattice with structural disorder: quasi-long-range ordering under realistic conditions. *Eur. Phys. J. B* **56**, 93 (2007).
24. P.-G. de Gennes. Scaling Concepts in Polymer Physics. (Cornell University Press, Ithaca, 1979).
25. http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1991/
26. C. von Ferber, Yu. Holovatch. Copolymer networks and stars: Scaling exponents. *Phys. Rev. E* **56**, 6370 (1997).
27. C. von Ferber, Yu. Holovatch. Multifractality of Brownian motion near absorbing polymers. *Phys. Rev E* **59**, 6914 (1999).
28. O. Kalyuzhnyi, Ja. Ilnytskyi, Yu. Holovatch, C. von Ferber. Universal shape characteristics for the mesoscopic polymer chain via dissipative particle dynamics. *J. Phys.: Cond. Matt.* **28**, 505101 (2016).
29. V. Blavats'ka, C. von Ferber, R. Folk, Yu. Holovatch. Renormalization group approaches to polymers in disordered media. In: Statistics of Linear Polymers in Disordered Media, ed. by Bikas K. Chakrabarti (Elsevier, Amsterdam, 2005), pp.103–148.
30. V. Blavatska, C. von Ferber, Yu. Holovatch, Polymers in long-range-correlated disorder. *Phys. Rev. E* **64**, 041102 (2001).
31. V. Blavatska, C. von Ferber, Yu. Holovatch, Entropy-induced separation of star polymers in porous media. *Phys. Rev. E* **74**, 031801 (2006).
32. A. Quetelet. A Treatise on Man and the Development of His Faculties. (1842) Scholars Facsimilies & Reprint. ISBN 0-8201-1061-2.
33. S. Galam. Sociophysics: A Physicist's Modeling of Psycho-political Phenomena (Understanding Complex Systems). (Springer, New York, Dordrecht, Heidelberg, London, 2012).
34. C. von Ferber, Yu. Holovatch, V. Palchykov. Scaling in public transport networks. *Condens. Matter Phys.* **8**, 225 (2005).
35. C. von Ferber, T. Holovatch, Yu. Holovatch, V. Palchykov. Public

- transport networks: empirical analysis and modeling. *Eur. Phys. J. B* **68**, 261 (2009).
36. B. Berche, C. von Ferber, T. Holovatch, Yu. Holovatch. Resilience of public transport networks against attacks. *Eur. Phys. J. B* **71**, 125 (2009).
 37. Yu. Holovatch, V. Palchykov. Mykyta the Fox and language networks. *J. Phys. Stud.* **10**, 247 (2006) (in Ukrainian).
 38. P. Mac Carron, R. Kenna. Universal properties of mythological networks. *EPL* **99**, 28002 (2012).
 39. R. Kenna, P. Mac Carron. Maths Meets Myths: Network Investigations of Ancient Narratives. *J. Phys.: Conf. Ser.* **681**, 012002 (2016).
 40. P. Sarkanyh, Yu. Holovatch, R. Kenna, P. Mac Carron. Universality and network analysis of bylyn. *J. Phys. Stud.* **20**, 4801 (2016).
 41. Mryglod O., Fuchs B., Szell M., Holovatch Yu., Thurner S. Interevent time distributions of human multi-level activity in a virtual world. *Physica A* **419**, 681 (2015).
 42. O. Mryglod, Yu. Holovatch, I. Mryglod. Editorial process in scientific journals: analysis and modeling. *Scientometrics* **91**, 101 (2012).
 43. O. Mryglod, R. Kenna, Yu. Holovatch, B. Berche. Absolute and specific measures of research group excellence. *Scientometrics* **95**, 115 (2013).
 44. O. Mryglod, R. Kenna, Yu. Holovatch, B. Berche. Comparison of citation-based indicators and peer review for absolute and specific measures of research-group excellence. *Scientometrics* **97**, 767 (2013).
 45. O. Mryglod, R. Kenna, Yu. Holovatch, B. Berche. Predicting Results of the Research Excellence Framework using departmental h-Index. *Scientometrics* **102** (2015) 2165-2180; O. Mryglod, R. Kenna, Yu. Holovatch, B. Berche. Predicting results of the research excellence framework using departmental h-index: revisited. *Scientometrics* **104**, 1013 (2015).
 46. O. Mryglod, Yu. Holovatch, R. Kenna, B. Berche. Quantifying the evolution of a scientific topic: reaction of the academic community to the Chernobyl disaster. *Scientometrics* **106**, 1151 (2016).
 47. R. Folk, Yu. Holovatch, T. Yavors'kii, Effective and asymptotic critical exponents of a weakly diluted quenched Ising model: Three-dimensional approach versus ε -expansion. *Phys. Rev. B* **61**, 15114 (2000).
 48. A. Perumal, V. Srinivas, V. V. Rao, R. A. Dunlap, Quenched disorder and the critical behavior of a partially frustrated system. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 137202 (2003).

49. R. Folk, Y. Holovatch, T. Yavors'kii, Pseudo- ε expansion of six-loop renormalization-group functions of an anisotropic cubic model. *Phys. Rev. B* **62**, 12195 (2000).
50. Yu. Holovatch, V. Blavats'ka, M. Dudka, C. von Ferber, R. Folk, T. Yavors'kii. *Int. J. Mod. Phys. B* **16**, 4027 (2002).
51. R. Folk, Yu. Holovatch, G. Moser, Field theory of bicritical and tetracritical points. I. Statics. *Phys. Rev. E* **78**, 041124 (2008).
52. M. Dudka, R. Folk, Y. Holovatch, G. Moser, Marginal dimensions for multicritical phase transitions. *Condens. Matter Phys.* **15**, 43001 (2012).
53. B. Delamotte, D. Mouhanna, M. Tissier, Nonperturbative renormalization-group approach to frustrated magnets, *Phys. Rev. B* **69**, 134413 (2004).
54. Yu. Holovatch, D. Ivaneiko, B. Delamotte, On the criticality of frustrated spin systems with noncollinear order. *J. Phys. A* **37**, 3569 (2004).
55. *I. Lyuksyutov, A. G. Naumovets, V. L. Pokrovsky. Two-Dimensional Crystals.* (Academic Press, London, 1992).
56. *R. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, New York, 1982.)
57. V. S. Dotsenko, Critical phenomena and quenched disorder. *Phys. Usp.* **38**, 457 (1995).
58. A. Weinrib, B. I. Halperin, Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder. *Phys. Rev. B* **27**, 413 (1983).
59. M. Dudka, A. A. Fedorenko, V. Blavatska, Yu. Holovatch, Critical behavior of the two-dimensional Ising model with long-range correlated disorder *Phys. Rev. B* **93**, 224422 (2016).
60. J. Honkonen, M. Y. Nalimov, Crossover between field theories with short-range and long-range exchange or correlations. *J. of Phys. A* **22**, 751 (1989).
61. C.N. Likos, H.M. Harreis. Star polymers: From conformations to interactions to phase diagrams. *Condens. Matter Phys.* **5**, 173 (2002).
62. B. Duplantier. Statistical mechanics of polymer networks of any topology. *J. Stat. Phys.* **54**, 581 (1989).
63. *J. Feder. Fractals.* (Plenum Press, New York and London, 1988).
64. V. Blavatska, C. von Ferber, Yu. Holovatch. Scaling of complex polymers: new universality classes and beyond. *Phil. Mag.* **88**, 4085 (2008).
65. B.H. Zimm, W.H. Stockmayer. The Dimensions of Chain Molecules Containing Branches and Rings. *J. Chem. Phys.* **17**, 1301 (1949).
66. V. Blavatska, C. von Ferber, Yu. Holovatch. Disorder effects on

- the static scattering function of star branched polymers. *Condens. Matter Phys.* **15**, 33603 (2012).
67. H.P. Hsu, W. Nadler, P. Grassberger. Scaling of Star Polymers with 1-80 Arms, *Macromolecules* **37**, 4658 (2004).
 68. K. Haydukivska, V. Blavatska. Probability of loops formation in star polymers in long range correlated disorder. *J. Chem. Phys.* **144**, 084901 (2016).
 69. A. Baumgärtner. Statistics of self-avoiding ring polymers. *J. Chem. Phys.* **76**, 4275 (1982).
 70. J. J. Prentis. Crossover between random and self-avoiding behaviour in a ring polymer. *J. Phys. A: Math. Gen.* **17**, 1723 (1984).
 71. K. Haydukivska, V. Blavatska. Ring polymers in crowded environment: conformational properties. *J. Chem. Phys.* **141**, 094906 (2014).
 72. V. Blavatska, R. Metzler. Conformational properties of complex polymers: rosette versus star-like structures. *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 135001 (2015).
 73. H.E. Stanley, P. Meakin. Multifractal phenomena in physics and chemistry. *Nature* **335**, 405 (1988).
 74. B.B. Mandelbrot. Intermittent turbulence in self-similar cascades: divergence of high moments and dimension of the carrier. *J. Fluid Mech.* **62**, 33 (1974).
 75. T.A. Witten, L.M. Sander. Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon. *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1400 (1981).
 76. D. Stauffer, A. Aharony. Introduction to Percolation Theory. (Taylor and Francis, London, 1992).
 77. C. von Ferber, V. Blavatska, R. Folk, Yu. Holovatch. Where two fractals meet: the scaling of a self-avoiding walk on a percolation cluster. *Phys. Rev. E* **70**, 035104(R) (2004).
 78. V. Blavatska, W. Janke. Multifractality of self-avoiding walks on percolation clusters. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 125701 (2008).
 79. J. Hoshen, R. Kopelman. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Phys. Rev. E* **14**, 3438 (1976).
 80. P. Grassberger. Pruned-enriched Rosenbluth method: Simulations of θ polymers of chain length up to 1 000 000. *Phys. Rev. E* **56**, 3682 (1997).
 81. C. N. Yang, T. D. Lee. Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. Theory of condensation. *Phys. Rev.* **87**, 404 (1952).
 82. T. D. Lee, C. N. Yang. Statistical theory of equations of state and

- phase transitions. II. Lattice gas and Ising model. *Phys. Rev.* **87**, 410 (1952).
83. M. E. Fisher. The nature of critical points. In: Lecture Notes in Theoretical Physics, Vol. 7c. (Boulder: University of Colorado Press, 1965), pp. 1–159.
 84. S. H. Lee, M. Ha, H. Jeong, J. D. Noh, H. Park. Critical behavior of the Ising model in annealed scale-free networks. *Phys. Rev. E* **80**, 051127 (2009).
 85. M. Krasnytska, B. Berche, Yu. Holovatch, R. Kenna. Violation of Lee-Yang circle theorem for Ising phase transitions on complex networks. *Eur. Phys. Lett.* **111**, 60009 (2015).
 86. M. Krasnytska, B. Berche, Yu. Holovatch, R. Kenna. Partition function zeros for the Ising model on complete graphs and on annealed scale-free networks. *J. Phys. A* **49**, 135001 (2016).
 87. D. Lazer et al. Computational Social Science. *Science* **323**, 721 (2009).
 88. Challenge 4 development, <http://www.d4d.orange.com/>.
 89. H. C. Carey. Principles of social science, vol. 3 (JB Lippincott & Company, 1867); G. A. Carrothers. An historical bedew of the gravity and potential concepts of human interaction. *J. Am. Inst. Plan.* **22**, 94 (1956); J. E. Anderson. The gravity model. *Annu. Rev. Econ.* **3**, 133 (2011).
 90. V. Palchykov et al. Inferring human mobility using communication patterns. *Sci. Rep.* **4**, 6174 (2014).
 91. O. Mryglod, R. Kenna, Yu. Holovatch. Is your EPL attractive? Classification of publications through download dynamics. *Europhys. Lett.* **108** 50011 (2014).
 92. J. Priem, D. Taraborelli, P. Groth, C. Neylon. Altmetrics: A manifesto. 2010. <http://altmetrics.org/manifesto/>
 93. H. F. Moed. Statistical Relationships Between Downloads and Citations at the Level of Individual Documents Within a Single Journal. *J. Am. Soc. Inf. Sci. Tec.* **56**, 1088 (2005).

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN: Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences; ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services; INSPEC; "Referativnyi Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>