Neekvivalentnost ansambala u (kompleksnim) mrežama

Samostalni seminar iz istraživanja u fizici

Eugen Rožić [1]

Mentor: Vinko Zlatić [2]

[1] Sveučilište u Zagrebu, PMF, Fizički odsjek

[2] Institut Ruđer Bošković

28. siječnja 2017.

Uvod

- Boltzmann:
  - statistička definicija entropije: $S = k_B \ln\left(\Omega_{N,U}\right)$
- Gibbs:
  - koncept ansambla - zamjena vremenskog usrednjavanja, pitanje ergodičnosti
  - različiti ansambli za razne “tvrdoće” zadovoljenosti uvjeta
  - općeniti izraz za entropiju uz svojstvo aditivnosti: $S = -k_B \sum_{\omega} p_\omega \ln\left(p_\omega\right)$
  - izvod vjerojatnosti pomoću entropije i Lagrangeovih multiplikatora
  - tvrdnja: ansambli su ekvivalentni u **termodinamičkoj granici** jer relativne fluktuacije postaju zanemarive ($\sqrt{N}/N \to 0$)
- Jaynes:
  - statistička fizika je matematička nužnost nepristranog zaključivanja na osnovu poznatih informacija, “dobra fizika” je sadržana samo u poznavanju mogućih stanja
  - formalizam je primjenjiv na bilo kakav sustav sa bilo kakvim uvjetima

Uvod

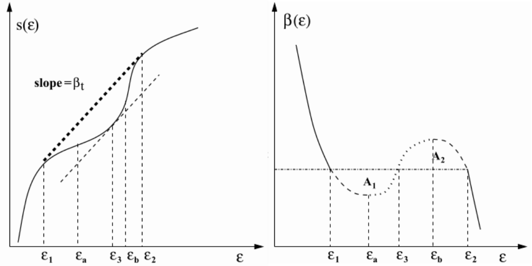
- Boltzmann:
  - statistička definicija entropije: $S = k_B \ln(\Omega_{N,U})$
- Gibbs:
  - koncept ansambla - zamjena vremenskog usrednjavanja, pitanje ergodičnosti
  - različiti ansambli za razne “tvrdoće” zadovoljenosti uvjeta
  - općeniti izraz za entropiju uz svojstvo aditivnosti: $S = -k_B \sum_{\omega} p_{\omega} \ln(p_{\omega})$
  - izvod vjerojatnosti pomoću entropije i Lagrangeovih multiplikatora
  - tvrdnja: ansambli su ekvivalentni u **termodinamičkoj granici** jer relativne fluktuacije postaju zanemarive ($\sqrt{N}/N \to 0$)
- Jaynes:
  - statistička fizika je matematička nužnost nepristranog zaključivanja na osnovu poznatih informacija, “dobra fizika” je sadržana samo u poznavanju mogućih stanja
  - formalizam je primjenjiv na bilo kakav sustav sa bilo kakvim uvjetima

Uvod

- Boltzmann:
  - statistička definicija entropije: $S = k_B \ln\left(\Omega_{N,U}\right)$
- Gibbs:
  - koncept ansambla - zamjena vremenskog usrednjavanja, pitanje ergodičnosti
  - različiti ansambli za razne "tvrdoće" zadovoljenosti uvjeta
  - općeniti izraz za entropiju uz svojstvo aditivnosti: $S = -k_B \sum_{\omega} p_{\omega} \ln\left(p_{\omega}\right)$
  - izvod vjerojatnosti pomoću entropije i Lagrangeovih multiplikatora
  - tvrdnja: ansambli su ekvivalentni u **termodinamičkoj granici** jer relativne fluktuacije postaju zanemarive ($\sqrt{N}/N \to 0$)
- Jaynes:
  - statistička fizika je matematička nužnost nepristranog zaključivanja na osnovu poznatih informacija, "dobra fizika" je sadržana samo u poznavanju mogućih stanja
  - formalizam je primjenjiv na bilo kakav sustav sa bilo kakvim uvjetima

Pojava neekvivalentnosti (1)

- opće uvjerenje u nužnost konkavnosti entropije, barem u termodinamičkoj granici (još uvijek rašireno)
- prva pojava suprotnih indikacija u konačnim sustavima kod faznih prijelaza (npr. pregrijana tekućina) - mikrokanonska entropija je lokalno nekonkavna!



- u termodinamičkoj granici mikrokanonska entropija teži u svoju konkavnu envelopu što upravo odgovara Maxwellovoj konstrukciji $\rightarrow$ zadovoljen Gibbsov uvjet i njegova tvrdnja stoji

Pojava neekvivalentnosti (2)

- za dugodosežne sustave ($V(r) \propto r^{-\alpha}$; $\alpha \leq d$) pitanje definiranosti termodinamičke granice i uopće upitnost primjene statističke fizike/termodinamike zbog **neekstenzivnosti** energije - tipičan primjer su gravitirajući sustavi ($\alpha = 1$)
- to se također javlja kod svih mean-field modela jer su oni implicitno $\alpha = 0$, npr. $H_{CW} = \frac{-J}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} S_i S_j = \frac{-J}{2N} \left(\sum_{i=1}^{N} S_i \right)^2$
- H_{CW} je ipak ekstenzivan zbog tzv. Kacovog skaliranja, koje je moguće poopćiti: $J \to J V^{\alpha/d-1}$, ali i dalje energija takvih sustava ostaje **neaditivna**

Pojava neekvivalentnosti (2)

- za dugodosežne sustave ($V(r) \propto r^{-\alpha}$; $\alpha \leq d$) pitanje definiranosti termodinamičke granice i uopće upitnost primjene statističke fizike/termodinamike zbog **neekstenzivnosti** energije - tipičan primjer su gravitirajući sustavi ($\alpha = 1$)
- to se također javlja kod svih mean-field modela jer su oni implicitno $\alpha = 0$, npr. $H_{CW} = \frac{-J}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} S_i S_j = \frac{-J}{2N} \left(\sum_{i=1}^{N} S_i \right)^2$
- H_{CW} je ipak ekstenzivan zbog tzv. Kacovog skaliranja, koje je moguće poopćiti: $J \to JV^{\alpha/d-1}$, ali i dalje energija takvih sustava ostaje **neaditivna**

Pojava neekvivalentnosti (2)

- za dugodosežne sustave ($V(r) \propto r^{-\alpha}$; $\alpha \leq d$) pitanje definiranosti termodinamičke granice i uopće upitnost primjene statističke fizike/termodinamike zbog **neekstenzivnosti** energije - tipičan primjer su gravitirajući sustavi ($\alpha = 1$)

- to se također javlja kod svih mean-field modela jer su oni implicitno $\alpha = 0$, npr. $H_{CW} = \frac{-J}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} S_i S_j = \frac{-J}{2N} \left(\sum_{i=1}^{N} S_i \right)^2$

- H_{CW} je ipak ekstenzivan zbog tzv. Kacovog skaliranja, koje je moguće poopćiti: $J \to JV^{\alpha/d-1}$, ali i dalje energija takvih sustava ostaje **neaditivna**

Pojava neekvivalentnosti (3)

- pokazuje se da kod takvih, dugodosežnih sustava mikrokanonska entropija ostaje nekonkavna (za određeni raspon vrijednosti energija) i u termodinamičkoj granici $\rightarrow$ negativan toplinski kapacitet, ako je sustav zatvoren
- kod kanonskog ansambla, znači za otvoreni sustav, takva je situacija nemoguća jer $C_V \geq 0 \rightarrow$ neekvivalentnost ansambala
- postoje razni, više i manje fini, opaženi odnosno izračunati efekti neekvivalentnosti ansambala, no iskustveno se utvrdilo:
  1. da se neekvivalentnost ansambala javlja samo u određenom rasponu vrijednosti, za većinu su i dalje ansambli ekvivalentni (tzv. dugodosežni fazni prijelaz)
  2. da se neekvivalentnost uvijek javlja kad je sustav neaditivan u promatranim veličinama
- ALI nema pravog dokaza nužnosti i dovoljnosti bilo kakvih uvjeta za pojavu neekvivalentnosti, to su više fenomenološka pravila uz različite (uvjerljive) argumente i indikacije

Pojava neekvivalentnosti (3)

- pokazuje se da kod takvih, dugodosežnih sustava mikrokanonska entropija ostaje nekonkavna (za određeni raspon vrijednosti energija) i u termodinamičkoj granici $\rightarrow$ negativan toplinski kapacitet, ako je sustav zatvoren
- kod kanonskog ansambla, znači za otvoreni sustav, takva je situacija nemoguća jer $C_V \geq 0 \rightarrow$ neekvivalentnost ansambala
- postoje razni, više i manje fini, opaženi odnosno izračunati efekti neekvivalentnosti ansambala, no iskustveno se utvrdilo:
  1. da se neekvivalentnost ansambala javlja samo u određenom rasponu vrijednosti, za većinu su i dalje ansambli ekvivalentni (tzv. dugodosežni fazni prijelaz)
  2. da se neekvivalentnost uvijek javlja kad je sustav neaditivan u promatranim veličinama
- ALI nema pravog dokaza nužnosti i dovoljnosti bilo kakvih uvjeta za pojavu neekvivalentnosti, to su više fenomenološka pravila uz različite (uvjerljive) argumente i indikacije

Matematička podloga

- sustav s N čestica:
  - mikrostanje - $\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_N) \in \Lambda^N$
  - makrostanje - $M_N : \Lambda^N \to \mathscr{M}$
- teorija velikih odstupanja (*Large Deviation Theory*):
  - Cramerov teorem:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln P\left(\frac{1}{N}\sum_i X_i \geq m\right) = -I(m) = -\sup_{t\in\mathbb{R}}\left[mt - \ln E[e^{tX}]\right]$$

  - Gärtner-Ellis, Varadhan i poopćenja:

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

- funkcija intenziteta $-I(m)$ je specifična mikrokanonska entropija $s(m)$, a specifična slobodna energija $\phi(\beta)$ njen Legendre-Fenchel transformat !

Matematička podloga

- sustav s N čestica:
  - mikrostanje - $\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_N) \in \Lambda^N$
  - makrostanje - $M_N : \Lambda^N \to \mathscr{M}$
- teorija velikih odstupanja (*Large Deviation Theory*):
  - Cramerov teorem:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln P\left(\frac{1}{N}\sum_i X_i \geq m\right) = -I(m) = -\sup_{t\in\mathbb{R}} \left[mt - \ln E[e^{tX}]\right]$$

  - Gärtner-Ellis, Varadhan i poopćenja:

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

- funkcija intenziteta $-I(m)$ je specifična mikrokanonska entropija $s(m)$, a specifična slobodna energija $\phi(\beta)$ njen Legendre-Fenchel transformat !

Matematička podloga

- sustav s N čestica:
  - mikrostanje - $\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_N) \in \Lambda^N$
  - makrostanje - $M_N : \Lambda^N \to \mathscr{M}$
- teorija velikih odstupanja (*Large Deviation Theory*):
  - Cramerov teorem:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln P\left(\frac{1}{N}\sum_i X_i \geq m\right) = -I(m) = -\sup_{t\in\mathbb{R}} \left[mt - \ln E[e^{tX}]\right]$$

  - Gärtner-Ellis, Varadhan i poopćenja:

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

- funkcija intenziteta $-I(m)$ je specifična mikrokanonska entropija $s(m)$, a specifična slobodna energija $\phi(\beta)$ njen Legendre-Fenchel transformat !

Definicije ekvivalentnosti ansambala (1)

1. **termodinamička** - da termodinamički potencijali daju iste rezultate
   - jednakost inverza Legendre-Fenchel transformata i originala
   - inverz uvijek daje konkavnu funkciju $\rightarrow$ jednakost vrijedi samo kada je original konkavna funkcija, inače konkavna envelopa

2. **u makrostanjima** - da su skupovi makrostanja za dano mikrostanje isti
   - ravnotežna stanja su maksimumi entropije
   - kod nekonkavnosti postoji više lokalnih maksimuma mikrokanonske entropije $\rightarrow$ neekvivalentnost
   - poseban slučaj: konkavna envelopa (lokalno ravno) - puno energija odgovara istoj temperaturi (Maxwellova konstrukcija) $\rightarrow$ strogo gledano neekvivalentni ansambli po ovom kriteriju

Definicije ekvivalentnosti ansambala (1)

1. **termodinamička** - da termodinamički potencijali daju iste rezultate
   - jednakost inverza Legendre-Fenchel transformata i originala
   - inverz uvijek daje konkavnu funkciju $\rightarrow$ jednakost vrijedi samo kada je original konkavna funkcija, inače konkavna envelopa

2. **u makrostanjima** - da su skupovi makrostanja za dano mikrostanje isti
   - ravnotežna stanja su maksimumi entropije
   - kod nekonkavnosti postoji više lokalnih maksimuma mikrokanonske entropije $\rightarrow$ neekvivalentnost
   - poseban slučaj: konkavna envelopa (lokalno ravno) - puno energija odgovara istoj temperaturi (Maxwellova konstrukcija) $\rightarrow$ strogo gledano neekvivalentni ansambli po ovom kriteriju

Definicije ekvivalentnosti ansambala (1)

1. **termodinamička** - da termodinamički potencijali daju iste rezultate
   - jednakost inverza Legendre-Fenchel transformata i originala
   - inverz uvijek daje konkavnu funkciju $\rightarrow$ jednakost vrijedi samo kada je original konkavna funkcija, inače konkavna envelopa
2. **u makrostanjima** - da su skupovi makrostanja za dano mikrostanje isti
   - ravnotežna stanja su maksimumi entropije
   - kod nekonkavnosti postoji više lokalnih maksimuma mikrokanonske entropije $\rightarrow$ neekvivalentnost
   - poseban slučaj: konkavna envelopa (lokalno ravno) - puno energija odgovara istoj temperaturi (Maxwellova konstrukcija) $\rightarrow$ strogo gledano neekvivalentni ansambli po ovom kriteriju

Definicije ekvivalentnosti ansambala (2)

3. **u mjerama** - da distribucije (mjere) vjerojatnosti konvergiraju (u nekom smislu) u termodinamičkoj granici
   - mjera - relativna entropija (Leibler-Kullback udaljenost):

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

   - uvjet - iščezavanje specifične relativne entropije:

$$d = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} D(P_N||P_{N,\beta}) \left(= \lim_{N\to\infty} \frac{\ln P_N(\omega^*) - \ln P_{N,\beta}(\omega^*)}{N} \right) = 0$$

   - **nužnost** dobre definiranosti termodinamičke granice za korištenje ovog uvjeta i ove definicije ekvivalentnosti ansambala

- sve tri definicije ekvivalentnosti ansambala (osim specijalnog slučaja kod makrostanja) su međusobno ekvivalentne i jednake konkavnosti specifične entropije !

Definicije ekvivalentnosti ansambala (2)

3. **u mjerama** - da distribucije (mjere) vjerojatnosti konvergiraju (u nekom smislu) u termodinamičkoj granici
   - mjera - relativna entropija (Leibler-Kullback udaljenost):

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

   - uvjet - iščezavanje specifične relativne entropije:

$$d = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} D(P_N||P_{N,\beta}) \left(= \lim_{N\to\infty} \frac{\ln P_N(\omega^*) - \ln P_{N,\beta}(\omega^*)}{N} \right) = 0$$

   - **nužnost** dobre definiranosti termodinamičke granice za korištenje ovog uvjeta i ove definicije ekvivalentnosti ansambala

- sve tri definicije ekvivalentnosti ansambala (osim specijalnog slučaja kod makrostanja) su međusobno ekvivalentne i jednake konkavnosti specifične entropije !

Grafovi i kompleksne mreže (1)

- razne mreže se pojavljuju svuda: društvene, ekonomske, tehnološke (energetika, telekomunikacije), biološke (mozak, proteini, ekologija) itd.
- prirodan matematički jezik su grafovi i njihova razna svojstva:
  - graf $G = (V, E)$, prikazan kroz matricu susjedstva σ_{ij}
  - moguća razna poopćenja: usmjerenost bridova, težine bridova, hiperbridovi, različitost vrhova i bridova, višeslojnost, ...
  - osnovna svojstva: broj bridova ($\sum_{i<j} \sigma_{ij}$), stupnjevi vrhova ($\kappa_i = \sum_j \sigma_{ij}$), broj trojki ($\tau_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{ik}$), broj trokuta ($T_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki}$), ...
  - izvedena svojstva: matrica najkraćih puteva, promjer mreže, srednji najkraći put, tranzitivnost/grupiranje, ... Moguće ih je osmisliti beskonačno, ali pitanje je koji su relevantni (i što bi bio kriterij relevantnosti)

Grafovi i kompleksne mreže (1)

- razne mreže se pojavljuju svuda: društvene, ekonomske, tehnološke (energetika, telekomunikacije), biološke (mozak, proteini, ekologija) itd.
- prirodan matematički jezik su grafovi i njihova razna svojstva:
  - graf $G = (V, E)$, prikazan kroz matricu susjedstva σ_{ij}
  - moguća razna poopćenja: usmjerenost bridova, težine bridova, hiperbridovi, različitost vrhova i bridova, višeslojnost, ...
  - osnovna svojstva: broj bridova ($\sum_{i<j} \sigma_{ij}$), stupnjevi vrhova ($\kappa_i = \sum_j \sigma_{ij}$), broj trojki ($\tau_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{ik}$), broj trokuta ($T_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki}$), ...
  - izvedena svojstva: matrica najkraćih puteva, promjer mreže, srednji najkraći put, tranzitivnost/grupiranje, ... Moguće ih je osmisliti beskonačno, ali pitanje je koji su relevantni (i što bi bio kriterij relevantnosti)

Grafovi i kompleksne mreže (1)

- razne mreže se pojavljuju svuda: društvene, ekonomske, tehnološke (energetika, telekomunikacije), biološke (mozak, proteini, ekologija) itd.
- prirodan matematički jezik su grafovi i njihova razna svojstva:
  - graf $G = (V, E)$, prikazan kroz matricu susjedstva σ_{ij}
  - moguća razna poopćenja: usmjerenost bridova, težine bridova, hiperbridovi, različitost vrhova i bridova, višeslojnost, ...
  - osnovna svojstva: broj bridova ($\sum\limits_{i<j} \sigma_{ij}$), stupnjevi vrhova ($\kappa_i = \sum\limits_{j} \sigma_{ij}$), broj trojki ($\tau_i = \frac{1}{2}\sum\limits_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{ik}$), broj trokuta ($T_i = \frac{1}{2}\sum\limits_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki}$), ...
  - izvedena svojstva: matrica najkraćih puteva, promjer mreže, srednji najkraći put, tranzitivnost/grupiranje, ... Moguće ih je osmisliti beskonačno, ali pitanje je koji su relevantni (i što bi bio kriterij relevantnosti)

Grafovi i kompleksne mreže (1)

- razne mreže se pojavljuju svuda: društvene, ekonomske, tehnološke (energetika, telekomunikacije), biološke (mozak, proteini, ekologija) itd.
- prirodan matematički jezik su grafovi i njihova razna svojstva:
  - graf $G = (V, E)$, prikazan kroz matricu susjedstva σ_{ij}
  - moguća razna poopćenja: usmjerenost bridova, težine bridova, hiperbridovi, različitost vrhova i bridova, višeslojnost, ...
  - osnovna svojstva: broj bridova ($\sum_{i<j} \sigma_{ij}$), stupnjevi vrhova ($\kappa_i = \sum_j \sigma_{ij}$), broj trojki ($\tau_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{ik}$), broj trokuta ($T_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki}$), ...
  - izvedena svojstva: matrica najkraćih puteva, promjer mreže, srednji najkraći put, tranzitivnost/grupiranje, ... Moguće ih je osmisliti beskonačno, ali pitanje je koji su relevantni (i što bi bio kriterij relevantnosti)

Grafovi i kompleksne mreže (1)

- razne mreže se pojavljuju svuda: društvene, ekonomske, tehnološke (energetika, telekomunikacije), biološke (mozak, proteini, ekologija) itd.
- prirodan matematički jezik su grafovi i njihova razna svojstva:
  - graf $G = (V, E)$, prikazan kroz matricu susjedstva σ_{ij}
  - moguća razna poopćenja: usmjerenost bridova, težine bridova, hiperbridovi, različitost vrhova i bridova, višeslojnost, ...
  - osnovna svojstva: broj bridova ($\sum_{i<j} \sigma_{ij}$), stupnjevi vrhova ($\kappa_i = \sum_j \sigma_{ij}$), broj trojki ($\tau_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{ik}$), broj trokuta ($T_i = \frac{1}{2} \sum_{jk} \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki}$), ...
  - izvedena svojstva: matrica najkraćih puteva, promjer mreže, srednji najkraći put, tranzitivnost/grupiranje, ... Moguće ih je osmisliti beskonačno, ali pitanje je koji su relevantni (i što bi bio kriterij relevantnosti)

Grafovi i kompleksne mreže (2)

- mreže u stvarnom svijetu su (naizgled) vrlo kompleksne. Cilj: pronaći skup svojstava koja ih dobro približno opisuju i neku malu količinu relativno jednostavnih principa/zakona koji takvim mrežama spontano rezultiraju (npr. *small-world*, *preferential attachment*) i njima upravljaju.
- "ručno" traženje principa je kao pristup kinetičke teorije termodinamici. Alternativa - statistička fizika. Dodatna korist - null modeli.
- Generalizirani Hamiltonijan - nakupina uvjeta na mrežu (graf):

$$H(G, \vec{\theta}) = \sum_k \theta_k x_k(G)$$

ostatak formalizma potpuno isti (opravdanje daje Jaynes).
- standardni primjeri:
  - samo broj veza: $H = \theta L = M\theta\lambda$
  - konfiguracijski model: $H(G, \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \theta_i k_i(G)$, "ekstenzivan" broj uvjeta!

Grafovi i kompleksne mreže (2)

- mreže u stvarnom svijetu su (naizgled) vrlo kompleksne. Cilj: pronaći skup svojstava koja ih dobro približno opisuju i neku malu količinu relativno jednostavnih principa/zakona koji takvim mrežama spontano rezultiraju (npr. *small-world*, *preferential attachment*) i njima upravljaju.
- "ručno" traženje principa je kao pristup kinetičke teorije termodinamici. Alternativa - statistička fizika. Dodatna korist - null modeli.
- Generalizirani Hamiltonijan - nakupina uvjeta na mrežu (graf):

$$H(G,\vec{\theta}) = \sum_k \theta_k x_k(G)$$

  ostatak formalizma potpuno isti (opravdanje daje Jaynes).
- standardni primjeri:
  - samo broj veza: $H = \theta L = M\theta\lambda$
  - konfiguracijski model: $H(G,\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \theta_i k_i(G)$, "ekstenzivan" broj uvjeta!

Grafovi i kompleksne mreže (2)

- mreže u stvarnom svijetu su (naizgled) vrlo kompleksne. Cilj: pronaći skup svojstava koja ih dobro približno opisuju i neku malu količinu relativno jednostavnih principa/zakona koji takvim mrežama spontano rezultiraju (npr. *small-world*, *preferential attachment*) i njima upravljaju.
- "ručno" traženje principa je kao pristup kinetičke teorije termodinamici. Alternativa - statistička fizika. Dodatna korist - null modeli.
- Generalizirani Hamiltonijan - nakupina uvjeta na mrežu (graf):

$$H(G,\vec{\theta}) = \sum_k \theta_k x_k(G)$$

ostatak formalizma potpuno isti (opravdanje daje Jaynes).
- standardni primjeri:
  - samo broj veza: $H = \theta L = M\theta\lambda$
  - konfiguracijski model: $H(G,\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \theta_i k_i(G)$, "ekstenzivan" broj uvjeta!

Grafovi i kompleksne mreže (2)

- mreže u stvarnom svijetu su (naizgled) vrlo kompleksne. Cilj: pronaći skup svojstava koja ih dobro približno opisuju i neku malu količinu relativno jednostavnih principa/zakona koji takvim mrežama spontano rezultiraju (npr. *small-world*, *preferential attachment*) i njima upravljaju.
- "ručno" traženje principa je kao pristup kinetičke teorije termodinamici. Alternativa - statistička fizika. Dodatna korist - null modeli.
- Generalizirani Hamiltonijan - nakupina uvjeta na mrežu (graf):

$$H(G,\vec{\theta}) = \sum_k \theta_k x_k(G)$$

  ostatak formalizma potpuno isti (opravdanje daje Jaynes).
- standardni primjeri:
  - samo broj veza: $H = \theta L = M\theta\lambda$
  - konfiguracijski model: $H(G,\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \theta_i k_i(G)$, "ekstenzivan" broj uvjeta!

Grafovi i kompleksne mreže (2)

- mreže u stvarnom svijetu su (naizgled) vrlo kompleksne. Cilj: pronaći skup svojstava koja ih dobro približno opisuju i neku malu količinu relativno jednostavnih principa/zakona koji takvim mrežama spontano rezultiraju (npr. *small-world*, *preferential attachment*) i njima upravljaju.
- "ručno" traženje principa je kao pristup kinetičke teorije termodinamici. Alternativa - statistička fizika. Dodatna korist - null modeli.
- Generalizirani Hamiltonijan - nakupina uvjeta na mrežu (graf):

$$H(G,\vec{\theta}) = \sum_k \theta_k x_k(G)$$

  ostatak formalizma potpuno isti (opravdanje daje Jaynes).
- standardni primjeri:
  - samo broj veza: $H = \theta L = M\theta\lambda$
  - konfiguracijski model: $H(G,\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \theta_i k_i(G)$, "ekstenzivan" broj uvjeta!

Jednostavan model (Erdős-Rényi)

- mikrokanonski broj stanja za zadani broj bridova je $\Omega_L = \binom{M}{L} = \binom{M}{M\lambda}$ pa je mikrokanonska entropija:

$$S(\lambda) = -M(\lambda \ln(\lambda) + (1-\lambda)\ln(1-\lambda)) + o(\ln M)$$

- kanonski izračun daje: $P_{can,\theta}(G) = p^{L(G)}(1-p)^{M-L(G)}$, uz $\lambda^* = \frac{e^{-\theta}}{1+e^{-\theta}} \equiv p \quad \Rightarrow$ ansambli su ekvivalentni, ali uz termodinamičku granicu $\lim\limits_{N\to\infty} \frac{1}{M}$!
- također, sustav je **neaditivan** jer $\lim\limits_{N\to\infty} \frac{H_{int}}{H_{tot}} = 2\alpha_1\alpha_2 \geq 0$, što se kosi sa uobičajenim mišljenjem i iskustvom (vratit ćemo se na to na kraju)

Jednostavan model (Erdős-Rényi)

- mikrokanonski broj stanja za zadani broj bridova je $\Omega_L = \binom{M}{L} = \binom{M}{M\lambda}$ pa je mikrokanonska entropija:

$$S(\lambda) = -M(\lambda \ln(\lambda) + (1-\lambda)\ln(1-\lambda)) + o(\ln M)$$

- kanonski izračun daje: $P_{can,\theta}(G) = p^{L(G)}(1-p)^{M-L(G)}$, uz $\lambda^* = \frac{e^{-\theta}}{1+e^{-\theta}} \equiv p \quad \Rightarrow \quad$ ansambli su ekvivalentni, ali uz termodinamičku granicu $\lim\limits_{N\to\infty} \frac{1}{M}$!

- također, sustav je **neaditivan** jer $\lim\limits_{N\to\infty} \frac{H_{int}}{H_{tot}} = 2\alpha_1\alpha_2 \geq 0$, što se kosi sa uobičajenim mišljenjem i iskustvom (vratit ćemo se na to na kraju)

Konfiguracijski model (1)

- broj grafova sa zadanim nizom stupnjeva težak je kombinatorički problem, postoji samo približna formula za rijetke ($k_{max} = o(\sqrt{N})$) grafove (Bender):

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

koja za mikrokanonsku entropiju ovog modela daje približan izraz:

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

- kanonski izračun u istoj granici $k_{max} = o(\sqrt{N})$ daje:

$$\ln P_{can}(G) = \sum_{i=1}^{N} k_i \ln k_i - L\ln(2L) - L$$

Konfiguracijski model (2)

- ukupni rezultat uz termodinamičku granicu uzetu kao $\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N}$ je

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

koji ukazuje na to da su ansambli neekvivalentni

- ALI, u toj termodinamičkoj granici postoje barem 2 problema:
  - Hamiltonijan se sastoji od beskonačno članova, svaki od kojih je $k_i/N \to 0$
  - što znači da u granici kad graf ima beskonačno vrhova mi zadržavamo stupnjeve vrhova fiksnima?
- dodatno, u k-regularnom slučaju entropija postaje:

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

za koju je očito da u toj termodinamičkoj granici i za fiksne k_i divergira pa nije dobro definirana funkcija koju bi se smjelo koristiti u izrazu za ekvivalentnost ansambala

Konfiguracijski model (2)

- ukupni rezultat uz termodinamičku granicu uzetu kao $\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N}$ je

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

koji ukazuje na to da su ansambli neekvivalentni

- ALI, u toj termodinamičkoj granici postoje barem 2 problema:
  - Hamiltonijan se sastoji od beskonačno članova, svaki od kojih je $k_i / N \to 0$
  - što znači da u granici kad graf ima beskonačno vrhova mi zadržavamo stupnjeve vrhova fiksnima?
- dodatno, u k-regularnom slučaju entropija postaje:

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

za koju je očito da u toj termodinamičkoj granici i za fiksne k_i divergira pa nije dobro definirana funkcija koju bi se smjelo koristiti u izrazu za ekvivalentnost ansambala

Konfiguracijski model (2)

- ukupni rezultat uz termodinamičku granicu uzetu kao $\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}$ je

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

  koji ukazuje na to da su ansambli neekvivalentni

- ALI, u toj termodinamičkoj granici postoje barem 2 problema:
  - Hamiltonijan se sastoji od beskonačno članova, svaki od kojih je $k_i/N \to 0$
  - što znači da u granici kad graf ima beskonačno vrhova mi zadržavamo stupnjeve vrhova fiksnima?

- dodatno, u k-regularnom slučaju entropija postaje:

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

  za koju je očito da u toj termodinamičkoj granici i za fiksne k_i divergira pa nije dobro definirana funkcija koju bi se smjelo koristiti u izrazu za ekvivalentnost ansambala

Konfiguracijski model (2)

- ukupni rezultat uz termodinamičku granicu uzetu kao $\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}$ je

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

  koji ukazuje na to da su ansambli neekvivalentni

- ALI, u toj termodinamičkoj granici postoje barem 2 problema:
  - Hamiltonijan se sastoji od beskonačno članova, svaki od kojih je $k_i/N \to 0$
  - što znači da u granici kad graf ima beskonačno vrhova mi zadržavamo stupnjeve vrhova fiksnima?
- dodatno, u k-regularnom slučaju entropija postaje:

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

  za koju je očito da u toj termodinamičkoj granici i za fiksne k_i divergira pa nije dobro definirana funkcija koju bi se smjelo koristiti u izrazu za ekvivalentnost ansambala

Konfiguracijski model - bipartitni grafovi (1)

- isti Hamiltonijan, samo graf ima još M vrhova i bridovi postoje samo između skupina vrhova, ne unutar iste skupine - svi računi postaju jednostavniji i egzaktni
- mikrokanonski broj stanja za zadani niz stupnjeva je $\Omega_{N,M}(\vec{k}) = \prod_{i=1}^{N} \binom{M}{k_i}$ iz čega se trivijalno kao i u jednostavnom modelu dobije mikrokanonska entropija
- kanonski izračun daje: $\ln P_{can}(G) = \sum_{i=1}^{N} \left(k_i \ln k_i + (M - k_i)\ln(M - k_i)\right) - MN\ln(M)$ pa je relativna entropija dana izrazom:

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

što u standardnoj termodinamičkoj granici $\lim_{\substack{N\to\infty \\ M\to\infty}} \frac{1}{(N+M)}$ daje razne slučajeve (ovisno o odnosima N i M), ali uglavnom ukazuje opet na neekvivalentnost

Konfiguracijski model - bipartitni grafovi (1)

- isti Hamiltonijan, samo graf ima još M vrhova i bridovi postoje samo između skupina vrhova, ne unutar iste skupine - svi računi postaju jednostavniji i egzaktni
- mikrokanonski broj stanja za zadani niz stupnjeva je $\Omega_{N,M}(\vec{k}) = \prod_{i=1}^{N} \binom{M}{k_i}$ iz čega se trivijalno kao i u jednostavnom modelu dobije mikrokanonska entropija
- kanonski izračun daje: $\ln P_{can}(G) = \sum_{i=1}^{N} (k_i \ln k_i + (M - k_i)\ln(M - k_i)) - MN\ln(M)$ pa je relativna entropija dana izrazom:

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

što u standardnoj termodinamičkoj granici $\lim_{\substack{N\to\infty \\ M\to\infty}} \frac{1}{(N+M)}$ daje razne slučajeve (ovisno o odnosima N i M), ali uglavnom ukazuje opet na neekvivalentnost

Konfiguracijski model - bipartitni grafovi (1)

- isti Hamiltonijan, samo graf ima još M vrhova i bridovi postoje samo između skupina vrhova, ne unutar iste skupine - svi računi postaju jednostavniji i egzaktni
- mikrokanonski broj stanja za zadani niz stupnjeva je $\Omega_{N,M}(\vec{k}) = \prod_{i=1}^{N} \binom{M}{k_i}$ iz čega se trivijalno kao i u jednostavnom modelu dobije mikrokanonska entropija
- kanonski izračun daje: $\ln P_{can}(G) = \sum_{i=1}^{N} (k_i \ln k_i + (M - k_i) \ln(M - k_i)) - MN \ln(M)$ pa je relativna entropija dana izrazom:

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

što u standardnoj termodinamičkoj granici $\lim_{\substack{N\to\infty \\ M\to\infty}} \frac{1}{(N+M)}$ daje razne slučajeve (ovisno o odnosima N i M), ali uglavnom ukazuje opet na neekvivalentnost

Konfiguracijski model - bipartitni grafovi (2)

- problemi/sumnjivosti:
  - ako je mikrokanonska entropija samo suma onih kao kod jednostavnog modela onda je i ona konkavna funkcija
  - sami oblik i analogija indicira da bi se formula trebala, kao i kod jednostavnog modela, izraziti preko $\lambda_i = k_i / M$ i podijeliti sa brojem bridova NM
- ovaj sustav je **aditivan**! Ili, možda ipak nije? Može li se gledati samo particija jednog skupa vrhova i tvrditi da je to aditivnost?

Konfiguracijski model - bipartitni grafovi (2)

- problemi/sumnjivosti:
  - ako je mikrokanonska entropija samo suma onih kao kod jednostavnog modela onda je i ona konkavna funkcija
  - sami oblik i analogija indicira da bi se formula trebala, kao i kod jednostavnog modela, izraziti preko $\lambda_i = k_i/M$ i podijeliti sa brojem bridova NM
- ovaj sustav je **aditivan**! Ili, možda ipak nije? Može li se gledati samo particija jednog skupa vrhova i tvrditi da je to aditivnost?

Konfiguracijski model - bipartitni grafovi (2)

- problemi/sumnjivosti:
  - ako je mikrokanonska entropija samo suma onih kao kod jednostavnog modela onda je i ona konkavna funkcija
  - sami oblik i analogija indicira da bi se formula trebala, kao i kod jednostavnog modela, izraziti preko $\lambda_i = k_i/M$ i podijeliti sa brojem bridova NM
- ovaj sustav je **aditivan**! Ili, možda ipak nije? Može li se gledati samo particija jednog skupa vrhova i tvrditi da je to aditivnost?

Konfiguracijski model - bipartitni grafovi (2)

- problemi/sumnjivosti:
  - ako je mikrokanonska entropija samo suma onih kao kod jednostavnog modela onda je i ona konkavna funkcija
  - sami oblik i analogija indicira da bi se formula trebala, kao i kod jednostavnog modela, izraziti preko $\lambda_i = k_i / M$ i podijeliti sa brojem bridova NM
- ovaj sustav je **aditivan**! Ili, možda ipak nije? Može li se gledati samo particija jednog skupa vrhova i tvrditi da je to aditivnost?

Konfiguracijski model - drugačiji pogled (1)

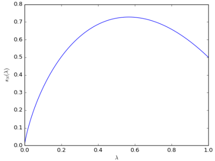
- što ako se svi Hamiltonijani izraze preko gustoća λ_i kao udjela stupnja u maksimalnom stupnju? (implicitno se zadaje niz tih gustoća, a stupnjevi rastu s brojem vrhova)
  - unipartitni grafovi:

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

    ali $\lambda_i \to 0$ u granici rijetkih grafova, pa je $d = 0$
  - za slučaj k-regularnih (unipartitnih) grafova:

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

    što upućuje na termodinamičku normalizaciju sa N^2, a i konkavna je funkcija (slika) što je konzistentno



Konfiguracijski model - drugačiji pogled (1)

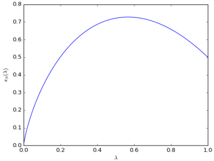
- što ako se svi Hamiltonijani izraze preko gustoća λ_i kao udjela stupnja u maksimalnom stupnju? (implicitno se zadaje niz tih gustoća, a stupnjevi rastu s brojem vrhova)
  - unipartitni grafovi:

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

    ali $\lambda_i \to 0$ u granici rijetkih grafova, pa je $d = 0$
  - za slučaj k-regularnih (unipartitnih) grafova:

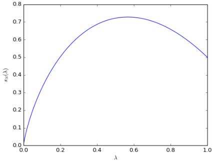
$$S_N(k) = \frac{N^2}{2}\lambda\left[1 - \ln(\lambda) - \frac{\lambda}{2}\right]$$

    što upućuje na termodinamičku normalizaciju sa N^2, a i konkavna je funkcija (slika) što je konzistentno



Konfiguracijski model - drugačiji pogled (1)

- što ako se svi Hamiltonijani izraze preko gustoća λ_i kao udjela stupnja u maksimalnom stupnju? (implicitno se zadaje niz tih gustoća, a stupnjevi rastu s brojem vrhova)
  - unipartitni grafovi:
$$d = \frac{1}{2}\left(\frac{\overline{\lambda^2}}{\overline{\lambda}}\right)^2$$
    ali $\lambda_i \to 0$ u granici rijetkih grafova, pa je $d = 0$
  - za slučaj k-regularnih (unipartitnih) grafova:
$$S_N(k) = \frac{N^2}{2}\lambda\left[1 - \ln(\lambda) - \frac{\lambda}{2}\right]$$
    što upućuje na termodinamičku normalizaciju sa N^2, a i konkavna je funkcija (slika) što je konzistentno



Konfiguracijski model - drugačiji pogled (2)

- ako se isto napravi za bipartitne grafove rezultati su još očitiji:

$$S_{N,M}(\vec{\lambda}_i) = -M \sum_{i=1}^{N} \left(\lambda_i \ln \lambda_i + (1-\lambda_i)\ln(1-\lambda_i)\right) -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \ln\left(2\pi M \lambda_i (1-\lambda_i)\right)$$

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

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

- mikrokanonska entropija je samo suma onih za jednostavan model i mora biti konkavna
- od kanonske se razlikuje samo za treći član u Stirlingovom razvoju što stvarno ne bi trebalo činiti razliku
- nameće se da u termodinamičkoj granici treba normalizirati sa NM, a tako se i izbjegavaju slučajevi i neobičnosti kod raznih odnosa N naspram M

Konfiguracijski model - drugačiji pogled (2)

- ako se isto napravi za bipartitne grafove rezultati su još očitiji:

$$S_{N,M}(\vec{\lambda}_i) = -M\sum_{i=1}^{N}(\lambda_i \ln \lambda_i + (1-\lambda_i)\ln(1-\lambda_i)) -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\ln(2\pi M\lambda_i(1-\lambda_i)$$

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

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

  - mikrokanonska entropija je samo suma onih za jednostavan model i mora biti konkavna
  - od kanonske se razlikuje samo za treći član u Stirlingovom razvoju što stvarno ne bi trebalo činiti razliku
  - nameće se da u termodinamičkoj granici treba normalizirati sa NM, a tako se i izbjegavaju slučajevi i neobičnosti kod raznih odnosa N naspram M

Diskusija i zaključci (1)

- **termodinamička granica**
  - trebala bi biti takva da je u njoj energija po "čestici" konačna
  - možda treba podijeliti sa dodatnim faktorom zbog ekstenzivnosti Hamiltonijana u članovima, a možda je ispravno bridove, a ne vrhove, gledati kao čestice, s obzirom da se model zapravo na njih referira
  - u svakom slučaju, izražavanje preko prikladnih veličina jasno pokazuje što bi normalizacijski faktor trebao biti da bi specifična entropija bila konačna (a što je nužan uvjet)
- **aditivnost**
  - jednostavan model pokazuje nedovoljnost uvjeta neaditivnosti da bi ansambli bili neekvivalentni $\rightarrow$ što je razlog tome? Možda je do svojstva grafova (ne dobro definirani pojmovi površine i volumena, pa i dimenzionalnosti)?
  - konfiguracijski model na jednoj skupini vrhova bipartitnog grafa - aditivan sustav ili ne?

Diskusija i zaključci (1)

- **termodinamička granica**
  - trebala bi biti takva da je u njoj energija po "čestici" konačna
  - možda treba podijeliti sa dodatnim faktorom zbog ekstenzivnosti Hamiltonijana u članovima, a možda je ispravno bridove, a ne vrhove, gledati kao čestice, s obzirom da se model zapravo na njih referira
  - u svakom slučaju, izražavanje preko prikladnih veličina jasno pokazuje što bi normalizacijski faktor trebao biti da bi specifična entropija bila konačna (a što je nužan uvjet)
- **aditivnost**
  - jednostavan model pokazuje nedovoljnost uvjeta neaditivnosti da bi ansambli bili neekvivalentni $\rightarrow$ što je razlog tome? Možda je do svojstva grafova (ne dobro definirani pojmovi površine i volumena, pa i dimenzionalnosti)?
  - konfiguracijski model na jednoj skupini vrhova bipartitnog grafa - aditivan sustav ili ne?

Diskusija i zaključci (1)

- **termodinamička granica**
  - trebala bi biti takva da je u njoj energija po "čestici" konačna
  - možda treba podijeliti sa dodatnim faktorom zbog ekstenzivnosti Hamiltonijana u članovima, a možda je ispravno bridove, a ne vrhove, gledati kao čestice, s obzirom da se model zapravo na njih referira
  - u svakom slučaju, izražavanje preko prikladnih veličina jasno pokazuje što bi normalizacijski faktor trebao biti da bi specifična entropija bila konačna (a što je nužan uvjet)
- **aditivnost**
  - jednostavan model pokazuje nedovoljnost uvjeta neaditivnosti da bi ansambli bili neekvivalentni $\rightarrow$ što je razlog tome? Možda je do svojstva grafova (ne dobro definirani pojmovi površine i volumena, pa i dimenzionalnosti)?
  - konfiguracijski model na jednoj skupini vrhova bipartitnog grafa - aditivan sustav ili ne?

Diskusija i zaključci (1)

- **termodinamička granica**
  - trebala bi biti takva da je u njoj energija po "čestici" konačna
  - možda treba podijeliti sa dodatnim faktorom zbog ekstenzivnosti Hamiltonijana u članovima, a možda je ispravno bridove, a ne vrhove, gledati kao čestice, s obzirom da se model zapravo na njih referira
  - u svakom slučaju, izražavanje preko prikladnih veličina jasno pokazuje što bi normalizacijski faktor trebao biti da bi specifična entropija bila konačna (a što je nužan uvjet)
- **aditivnost**
  - jednostavan model pokazuje nedovoljnost uvjeta neaditivnosti da bi ansambli bili neekvivalentni $\rightarrow$ što je razlog tome? Možda je do svojstva grafova (ne dobro definirani pojmovi površine i volumena, pa i dimenzionalnosti)?
  - konfiguracijski model na jednoj skupini vrhova bipartitnog grafa - aditivan sustav ili ne?

Diskusija i zaključci (1)

- **termodinamička granica**
  - trebala bi biti takva da je u njoj energija po “čestici” konačna
  - možda treba podijeliti sa dodatnim faktorom zbog ekstenzivnosti Hamiltonijana u članovima, a možda je ispravno bridove, a ne vrhove, gledati kao čestice, s obzirom da se model zapravo na njih referira
  - u svakom slučaju, izražavanje preko prikladnih veličina jasno pokazuje što bi normalizacijski faktor trebao biti da bi specifična entropija bila konačna (a što je nužan uvjet)
- **aditivnost**
  - jednostavan model pokazuje nedovoljnost uvjeta neaditivnosti da bi ansambli bili neekvivalentni $\rightarrow$ što je razlog tome? Možda je do svojstva grafova (ne dobro definirani pojmovi površine i volumena, pa i dimenzionalnosti)?
  - konfiguracijski model na jednoj skupini vrhova bipartitnog grafa - aditivan sustav ili ne?

Diskusija i zaključci (2)

- **ekstenzivnost broja uvjeta**
  - je li takav Hamiltonijan "dobar"? U svakom slučaju je na neki način nefizikalan ...
  - moguća redefinicija:

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

    Ima li više smisla? Je li korisna?
- **interpretacija neekvivalentnosti ako je i ima**
  - Što bi značila neekvivalentnost na cijelom području parametara?
  - Bi li entropija takvog sustava bila potpuno konveksna? Ima li to smisla?
  - Bi li se u tom slučaju uopće smjelo upotrebljavati kanonski ansambl i uz koja ograničenja?

Diskusija i zaključci (2)

- **ekstenzivnost broja uvjeta**
  - je li takav Hamiltonijan "dobar"? U svakom slučaju je na neki način nefizikalan ...
  - moguća redefinicija:

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

    Ima li više smisla? Je li korisna?
- **interpretacija neekvivalentnosti ako je i ima**
  - Što bi značila neekvivalentnost na cijelom području parametara?
  - Bi li entropija takvog sustava bila potpuno konveksna? Ima li to smisla?
  - Bi li se u tom slučaju uopće smjelo upotrebljavati kanonski ansambl i uz koja ograničenja?

Hvala na pažnji :)

Pitanja?

- Jaynes E. T., **Information Theory and Statistical Mechanics**, 1957, Physical Review 106(4), American Physical Society
- Campa A., Dauxois T., Ruffo S., **Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions**, 2009, Physics Reports 480, Elsevier
- Touchette H., **The large deviation approach to statistical mechanics**, 2009, Physics Reports 478, Elsevier
- Touchette H., **Equivalence and Nonequivalence of Ensembles: Thermodynamic, Macrostate and Measure Levels**, 2015, Journal of Statistical Physics 159, Springer
- Newman M. E. J., **The structure and function of complex networks**, 2003, SIAM Review 45(2), Society for Industrial and Applied Mathematics
- Park J., Newman M. E. J., **Statistical mechanics of networks**, 2004, Physical Review E 70, American Physical Society

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

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

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