

fizikai szemle

Statisztikus fizikai kalandozások



2025/4

nka

Fizikai Szemle

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A Matematikai és Természettudományi Értesítőt az Akadémia 1882-ben indította
A Matematikai és Fizikai Lapokat Eötvös Loránd 1891-ben alapította

SZERKESZTŐSÉG:

Felélő szerkesztő: Iglói Ferenc főszerkesztő

Olvasószerkesztő: Bodrog Zoltán

Technikai szerkesztő: Hock Gábor

SZERKESZTŐBIZOTTSÁG:

Asbóth János, Bíró László Péter, Csengeri Kamilla, Czitrovszky Aladár, Gyürky György, Horváth Dezső, Horváth Gábor, Járjai-Szabó Ferenc, Kiss Ádám, Kopasz Katalin, Neda Zoltán, Ormos Pál, Pálfalvi László, Pásztor Gabriella, Sándor Bulcsú, Simon Ferenc, Simon Péter, Sódor Ádám, Sükösd Csaba, Szabó Gábor, Takács Gábor, Trócsányi Zoltán, Ujvári Sándor

A beküldött tudományos, ismeretterjesztő és fizikatanítási cikkek a Szerkesztőbizottság, illetve az általa felkért, a témában elismert szakértő jóváhagyó véleménye után jelenhetnek meg.

Kiadja és terjeszti az Eötvös Loránd Fizikai Társulat,
1092 Budapest, Ráday utca 18. földszint III.
Telefon/fax: (1) 201-8682
Felélő kiadó: Groma István főtítká

A Társulat és a folyóirat honlapja:

<http://fizikaiszemle.elft.hu>,

e-postacím: elft@elft.hu

A folyóirat szerkesztőségi e-mail címe:

fsz_szerkesztok@elft.hu. A lapba szánt írásokat erre a címre kérjük. Kéziratokat nem őrünk meg és nem küldünk vissza. A szerzőknek tiszteletpéldányt küldünk.



Nyomdai előkészítés: Hock Gábor. Nyomdai munkálatok: OOK-PRESS Kft., felélő vezető: Szathmáry Attila ügyvezető igazgató. Előfizethető a Társulatnál vagy postautalványon a 10200830-32310274-00000000 számú egyszámlán. Az egyes számok ára: 1800,- Ft (a dupla számoké 3600,- Ft) + postaköltség.

HU ISSN 0015-3257 (nyomtatott)

HU ISSN 1588-0540 (online)

A lapot az MTA Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT) archiválja



A címlapon:

A repedező vékonyréteg időfejlődése

(Lásd: Kun F. és Szatmári R. írása, 121. o.)

TARTALOM

STATISZTIKUS FIZIKAI KALANDOZÁSOK – TEMATIKUS BLOKK

Vendégszerkesztő: Szabó György

- Szabó György: Bevezető – Kalandozás a statisztikus fizikában 109
- Takács Gábor: Ergodicitás és termalizáció zárt kvantumrendszerekben 110
- A Boltzmann-féle ergodikus hipotézis teljesülése és általánosítása kvantumrendszerekre számos olyan kérdést és lehetőséget hozott felszínre, amelyeket korábban nem vizsgáltak, és erősen kötődnek a termikus jellegű egyensúlyi állapotok létezéséhez a kvantum-mechanikai rendszerekben.
- Kormos Márton: Statisztikus fizika tiszta állapotokkal 114
- A kvantummechanika törvényeinek alkalmazásával a sokrészecske rendszerekben a statisztikus fizika hatáskörébe tartozó alapvetően fontos kérdések, illetve összefüggések jönnék felszínre és válnak bizonyíthatóvá néhány esetben.
- Bíró Tamás Sándor: Gintropia – Egyenlőtlenségmérték entropikus tulajdonságokkal 119
- A gintropia bevezetése lehetővé teszi a statisztikus fizikai entrópia és a közgazdaságtanban az egyenlőtlenség számszerűsítésére használatos Gini-index közötti általános összefüggések elemzését.
- Kun Ferenc, Szatmári Roland: Repedési zaj zsugorodó vékonyrétegekben 121
- A cikk áttekinti a vékonyrétegek zsugorodása által okozott repedezések folyamatát és vizsgálati módszereit. Elemzi a repedezési folyamatok tulajdonságait, és rávilágít az általános tulajdonságokat kiváltó körülmények hátterére.
- Kolok Balázs Csegő, Ódor Gergely, Keliger Dániel, Karsai Márton: Paradox járványdinamika viselkedésvezérelt hálózatokon 128
- A COVID-19-járvány terjedésének vizsgálata matematikai modellek segítségével lehetővé tette olyan jelenségek értelmezését és hasznosítását a védekezésben, amelyek ellentétesek a naív jóslatokkal.
- Szabó György: Az evolúciós játékelmélet és a statisztikus fizika összefonódása 135
- A statisztikus fizika módszereinek sikeres alkalmazását az evolúciós játékelmélet területén számos példa igazolja, és jelzi egyúttal azokat a fontos kölcsönhatásokat és érdekes jelenségeket, amelyek az élő rendszerek sokszínű viselkedését okozzák.

A FIZIKA TANÍTÁSA

- Nógrádi Zsófia: A szennyeződések terjedésének modellezése a középiskolában 141
- Egy középiskolai projekt bemutatása, amelyben az informatika segítségével a fizikaórán helyet kap a környezeti nevelés és a kaoszelmélet. A diákok az érdeklődési körüknek megfelelően a kaotikus mozgás elemzéséből kapott eredményeket felhasználva készítették tudományos esszéit.

HÍREK, ESEMÉNYEK

- A HUN-RENEK és a tanítványok: Az egy kultúra gyönyörűsége, avagy rendszertelen köszöntő a statisztikus fizika ürügyén B3
- Schiller Róbert professzor urat mint szellemi életünk kiemelkedő alakját köszöntjük 90. születésnapja alkalmából. Munkássága egyfajta híd a múlt és a jövő között, amely segíthet kultúránk megértésében és felemelésében, egy összetettebb és árnyaltabb világtérkép kialakításában.

STATISTICAL PHYSICS ADVENTURES – THEMATIC BLOCK

- Gy. Szabó: Foreword – Adventure in statistical physics
- G. Takács: Ergodicity and thermalization in closed quantum systems
- M. Kormos: Statistical physics with pure states
- T. S. Bíró: Gintropy – Inequality measure with entropic properties
- F. Kun, R. Szatmári: Cracking noise in shrinking thin films
- B. Cs. Kolok, G. Ódor, D. Keliger, M. Karsai: Paradoxical epidemic dynamics in behavior-driven networks
- Gy. Szabó: Entanglement of evolutionary game theory and statistical physics

TEACHING PHYSICS

- Zs. Nógrádi: Modeling the spread of pollution in high school

NEWS, EVENTS

- HUN-RENEK and colleagues: The beauty of a culture, or an irregular greeting under the pretext of statistical physics

A jelen szám színes nyomtatását a HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont támogatta.

Fizikai Szemle
MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

megjelenését támogatják:



KULTURÁLIS ÉS
INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM

nka
Nemzeti Kulturális Alap



BEVEZETŐ – KALANDOZÁS A STATISZTIKUS FIZIKÁBAN

Szabó György^{1,2},

¹HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest

²HUN-REN Evolúciótudományi Intézet, Budapest

E-mail: szabo.gyorgy@ek.hun-ren.hu



A statisztikus fizika a nagyon sok kis részből álló rendszerek makroszkopikus tulajdonságainak számszerűsített vizsgálatához, illetve a makroszkopikus jellemzők közötti összefüggések felderítéséhez ad egy általános matematikai háttérrel. Kezdetben az atomokból álló gázok, folyadékok és szilárd anyagok

termodinamikai tulajdonságainak megértését és a külső feltételek változásának eredményeképpen kialakuló állapotváltozások általános törvényeinek feltárását segítette. Ez a kutatási terület természetes módon bővült ki az egyensúlyi állapot elérése során megfigyelt folyamatok (ilyen például a doménnövekedés vagy a spinüvegek lelassult fejlődése) és az ergodicitással kapcsolatos jelenségek vizsgálatával. A külső hatások következtében kialakuló állandósult állapotok elméleti vizsgálata már a nemegyensúlyi statisztikus fizika hatáskörébe tartoznak.

Ez utóbbi terület hasznos ismeretekkel szolgált a külső hatások és a következményeik között megfigyelt összefüggések (pl. vezetési jelenségek) értelmezésénél. Fogalmainak és módszereinek alkalmazhatóságát és sikerességét jól jellemzi, hogy az utóbbi évtizedekben a módszereket átvevő különböző kutatási területek skálája jelentősen kibővült, és ma már magában foglalja az atommagok belsejében lejátszódó jelenségek vizsgálatát, az anyagtudomány segítségével feltárt ismeretek hasznosítását a modern technológiáknál, a biológiai élőlények kölcsönhatásának eredményeképpen kialakuló ökológiai rendszerek tulajdonságainak megértését és a társadalmi folyamatoknál is jelenlévő összefüggések feltárását. A társadalmi és biológiai jelenségek vizsgálatának egyik jellegzetes következménye, hogy a kölcsönható egyedek kapcsolatrendszerét különböző gráfok, illetve hálózatok esetére is ki kellett terjeszteni. A vizsgált jelenségek körének kibővülése együtt járt új matematikai modellek kidolgozásával, korábban ismeretlen jelenségek felfedezésével és a módszerek skálájának jelentős bővülésével, amit a számítógépes szimulációk tovább erősítettek. A *Fizikai Szemle* áprilisi tematikus száma ebből a széles választékból ad ízelítőt.

A statisztikus fizika jelentőségét és töretlen fejlődését jól jellemzi, hogy a Magyar Tudományos Akadémia Fizikai Tudományok Osztályán belül a Statisztikus Fizi-

kai Tudományos Bizottság önálló testületként működik. A bizottság által évenként megszervezett Statisztikus Fizikai Napon a statisztikus fizikával foglalkozó magyar kutatók beszámolnak legújabb eredményeikről, és egyúttal tájékoztatót adnak és kapnak a legfontosabb nemzetközi eredményekről is. Az áprilisi tematikus szám szerzői ehhez a kutatói közösséghez tartoznak. A kiválasztott témák jól tükrözik a statisztikus fizika szemléletmódjának elterjedését és hasznosságát a különböző tudományterületeken, de a terjedelmi korlátok miatt ennek ismertetése néhány területre korlátozódik.

A kvantummechanikai rendszerekben a Boltzmann-féle ergodikus hipotézis érvényesülését és sajátosságait *Takács Gábor* foglalja össze, megemlítve az ergodicitás sérülésének eddig ismeretlen lehetőségeit az egyensúlyi állapotban. Hasonló rendszerekben az egyensúlyi állapot elérésének néhány sajátosságát *Kormos Márton* ismerteti. A *Bíró Tamás Sándor* terjedelmesebb munkájáról készített kivonat szintén a statisztikus fizika gyökereit érintő matematikai fogalmakat és összefüggéseket taglalja, amikor rávilágít a különböző entrópiafogalmak és az egyenlőtlenség számszerűsítésére bevezetett közgazdasági jellemzők általános tulajdonságaira. *Kun Ferenc* és *Szatmári Roland* áttekintést ad arról, hogy hogyan érvényesül a statisztikus fizika szemléletmódja az egyszerű matematikai modellek segítségével vizsgált különböző repedezési jelenségeknél és még néhány olyan folyamatnál, amelyeket a hasonló matematikai háttér kapcsol össze. Az utóbbi években mindannyiunk életét befolyásoló járványok terjedését, illetve korlátozási lehetőségeit elemzi *Kolok Csegő*, *Ódor Gergely*, *Keliger Dániel* és *Karsai Márton*. Ez a munka bemutatja, ahogy a résztvevők közötti térbeli és rövid hatótávolságú kapcsolatrendszer kiterjesztése különböző – esetenként folyamatosan változó – hálózatokra képes értelmezni paradox jelenségeket is. Végül az evolúciós játékelmélet és a statisztikus fizika összefonódásáról szóló cikk rámutat arra, hogy a különböző szakterületek között kialakuló együttműködés milyen eredményeket hoz, illetve hozhat felszínre, amikor az élettelen anyag megismerésére kifejlesztett matematikai módszereket társadalmi és biológiai rendszerek megismerésére használjuk.

A tematikus szám szerzőinek és a szerkesztőinek a célja az volt, hogy felvillantsák azokat az eredményeket, amelyeket ezen a dinamikus fejlődő tudományterületen értek el a magyar kutatók, és egyúttal tovább erősítik az olvasók bizalmát a természettudományos gondolkodásmódban.

ERGODICITÁS ÉS TERMALIZÁCIÓ ZÁRT KVANTUMRENDSZEREK BEN

Takács Gábor

BME Elméleti Fizika Tanszék, Budapest

E-mail: takacs.gabor@ttk.bme.hu

Boltzmann ergodik hipotézise [1] szerint kellően hosszú időtartam alatt tekintve egy zárt dinamikai rendszer által a fázistér adott tartományában eltöltött idő arányos a tartomány fázistér-fogatával. Más megfogalmazásban, hosszú időn át tekintve az összes mikroállapot egyenletes valószínűséggel fordul elő. Az ergodik hipotézis jelentősége, hogy ebben az esetben az egyensúly statisztikus leírását a mikrokanonikus sokaság adja. Ennek egyik legfontosabb következménye, hogy egy nagyméretű környezettel („hőtartály”) energiát cserélő rendszer egyensúlyi állapota termális, azaz statisztikus leírását a kanonikus sokaság adja meg; ezt nevezzük hőmérsékleti egyensúlynak.

A fent leírt ergodik hipotézis klasszikus hamiltoni dinamikai rendszerekre vonatkozik. Természetesen vetődik fel: mi történik akkor, ha a mikroszkopikus dinamikát a kvantummechanika törvényei írják le? Kiterjeszthető-e az ergodik hipotézis a kvantumos esetre is? Megalapozható-e ebben az esetben is, hogy az egyensúlyi állapot hőmérsékleti egyensúlynak felel meg?

A klasszikus ergodik hipotézis

Egy zárt hamiltoni rendszer dinamikáját kanonikusan konjugált q_i koordinátákkal és p_i impulzusokkal írhatjuk le, amelyek időfüggését a Hamilton-egyenletek adják:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (1)$$

ahol H az összenergiát megadó Hamilton-függvény, ami egyben megmaradó mennyiség. A dinamikai rendszerek elméletének egyik alapvető eredménye Liouville tétele, miszerint a

$$dq_1 \dots dq_N dp_1 \dots dp_N \quad (2)$$

kanonikus térfogatelemet a Hamilton-féle időfejlődés megőrzi, ami azt jelenti, hogy ez egy természetes mértéket ad meg a fázistéren. Az ergodik hipotézis szerint ez a mérték az, amire nézve a mikroállapotok egyenlő

valószínűségűek, ami azt jelenti, hogy az egyensúlyban a fizikai mennyiségek időátlagai megkaphatóak a fázistér-fogat szerinti átlagolással. Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy az egyetlen releváns megmaradó mennyiség a rendszer összenergiája, ekkor az átlagolást egy vékony energiahéjra kell elvégezni:

$$A_i = \frac{\int_{W(E, \Delta E)} A(q, p) d^N q d^N p}{\int_{W(E, \Delta E)} d^N q d^N p}, \quad (3)$$

ahol az energiahéj a

$$W(E, \Delta E) = \{(q, p) : E - \Delta E \leq H(q, p) \leq E + \Delta E\} \quad (4)$$

által megadott fázistérbeli tartomány.

Az ergodicitás fontos feltétele, hogy a rendszer Liouville-értelemben nem integrálható¹ legyen. Továbbá az itt tárgyalt fizikai alkalmazásokban csak az ún. termodinamikai határesetben van rá szükség, amikor a szabadsági fokok N száma végtelennek tekinthető.

A klasszikus megközelítésben az ergodicitás az ezen feltételek mellett fellépő dinamikai káosz következménye.² Ugyanakkor érdemes megjegyezni, hogy a fenti érvelések nagymértékben heurisztikusak. A kérdéskör precízebb tárgyalása azonban nagyon messzire vezetne, így ettől itt eltekintünk. Annyit érdemes megjegyezni, hogy a (3) feltevésben egy kritikus kérdés, hogy milyen A fizikai mennyiségekre vonatkoztatjuk. Ez a kérdés a kvantumrendszerek esetén is előkerül, amint az alábbiakban látni fogjuk.

Zárt kvantumrendszerek dinamikája

Amennyiben a fenti megfontolásokat kvantumrendszerekre próbáljuk általánosítani, komoly problémák merülnek fel. A klasszikus ergodicitáshoz ugyanis szükséges volt a dinamikai káosz, ami nemlineáris dinamikai rendszerekben lép fel. A kvantumrendszerek időfejlődését leíró Schrödinger-egyenlet azonban lineáris, vagyis a kvantumállapot (hullámfüggvény) szintjén nem beszélhetünk kaotikus viselkedésről.

¹ A rendszer akkor Liouville-integrálható, ha létezik pontosan N darab, egymással involúcióban álló (Poisson-kommutáló) I_i megmaradó mennyiség. Ekkor át lehet térni olyan kanonikus koordinátákra (hatás-szög változók), amikben a dinamika egymástól független kváziperiodikus egydimenziós mozgásokra esik szét. Ebben az esetben a trajektóriák nem járják be a $2N - 1$ dimenziós energiahéjat, hanem az $I_1, \dots, I_N$ megmaradó mennyiségek által meghatározott N -dimenziós tóruszokon maradnak; ez okozza a (3) ergodik hipotézis sérülését.

² A Boltzmann-féle H -tétel levezetésében a dinamikai káoszt az ún. molekuláris káosz (Stoßzahlansatz) feltevése helyettesíti.



Takács Gábor a BME Elméleti Fizika Tanszék egyetemi tanára, az MTA doktora, 2020 és 2024 között a BME Fizika Tudományok Doktori Iskola vezetője, 2024 óta a BME Fizikai Intézet igazgatója. 2012-ben elnyerte az MTA Lendület pályázatát, amivel megalapította a BME-MTA „Lendület” Statisztikus Térelméleti Kutatócsoportot. Kutatási területe az alacsony dimenziós kvantumrendszerek, a kvantumtérelmélet és alkalmazásai a kondenzált anyagok elméletében és a statisztikus fizikában.

A továbbblépéshez érdemes a kérdést dinamikailag vizsgálni. Ehhez érdemes bevezetni a kvantumkvens protokollt, ami egyfelől kibillenti a rendszert az egyensúlyból [2], másfelől pedig rutinszerűen megvalósítható pl. csapdázott ultrahideg atomokkal, tehát kísérletileg is jól vizsgálható.

A legegyszerűbb esetben a rendszert a $\hat{H}_0$ Hamilton operátor alapállapotában preparáljuk:

$$\hat{H}_0 |\psi_0\rangle = E_0 |\psi_0\rangle. \quad (5)$$

Ezután a kezdeti ($t = 0$) időpillanatban a rendszer valamilyen paraméterét hirtelen megváltoztatjuk, és a rendszer az új $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ Hamilton-operátorral fejlődik tovább, amit a kvantumelmélet szerint a következő állapot ír le:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi_0\rangle. \quad (6)$$

Az időfejlődés további vizsgálatához fejtsük ki a kiinduló állapotot a $\hat{H}$ Hamilton operátor E_n energiájú $|n\rangle$ sajátállapotainak bázisán:

$$|\psi_0\rangle = \sum_n C_n |n\rangle, \quad (7)$$

ahol $\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle$, és

$$\sum_n |C_n|^2 = 1. \quad (8)$$

Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban az alapállapot energiáját vesszük referenciapontnak, azaz $E_0 = 0$.

Az állapot időfejlődése a következőképpen adódik:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n e^{-iE_n t} |n\rangle. \quad (9)$$

Egy $\hat{A}$ operátorral leírt fizikai mennyiség várható értékének időbeli változását a

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_{n,m} C_n C_m^* e^{-i(E_n - E_m)t} \langle m | \hat{A} | n \rangle \quad (10)$$

formulával számíthatjuk ki. Amennyiben az időfejlődés egyensúlyi helyzethez vezet, akkor az egyensúlyi érték megegyezik az időátlaggal, amiből kiesnek az oszcilláló tagok. Következésképpen az egyensúlyban a mennyiség várható értéke a következő alakot ölti:³

$$\langle \hat{A}_{\text{eq}} \rangle = \sum_n |C_n|^2 \langle n | \hat{A} | n \rangle. \quad (11)$$

Ebben az állapotban az energia várható értékére

$$\bar{E} = \langle \hat{H} \rangle_{\text{eq}} = \sum_n |C_n|^2 E_n, \quad (12)$$

míg a varianciára

$$\begin{aligned} \Delta E^2 &= \langle \hat{H}^2 \rangle_{\text{eq}} - \langle \hat{H} \rangle_{\text{eq}}^2 \\ &= \sum_n |C_n|^2 E_n^2 - \left(\sum_n |C_n|^2 E_n \right)^2 \end{aligned} \quad (13)$$

adódik.

³ Itt az egyszerűség kedvéért feltételeztük, hogy az energiaszintek nem degeneráltak, azaz $E_n \neq E_m$, ha $n \neq m$.

A klasszikus eset mintájára azt várjuk, hogy az egyensúlyban a várható értékeket a mikrokanonikus sokaság adja meg. A fenti formula azonban nemcsak nem egyezik ezzel, hanem az egyensúlyi átlag függ a kiinduló állapot C_n átfedéseitől is az $|n\rangle$ energia-sajátállapotokkal – szemben a klasszikus eredménnyel, ami csak a mikrokanonikus eloszláshoz tartozó energiahéj E energiájának a függvénye.

Tételezzük fel továbbá, hogy a Hamilton-operátor $\hat{W}$ megváltozása olyan tagok összege, amelyek mindegyike lokalizált kölcsönhatást ír le, azaz minden egyes tagja legfeljebb d -test kölcsönhatásnak felel meg, ahol d egy természetes szám (pl. kéttest kölcsönhatások esetén $d = 2$); ez a fizikai rendszerek esetében tipikus esetben számít. Konkrét példaként tekinthetünk rácson ugráló, kemény törzsű (angolul „hard-core”) bozonokat, amelyekre a Hamilton-operátor

$$\hat{H}_{\text{hcb}} = -J \sum_{i,j} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i) + U \sum_{i,j} \hat{n}_i \hat{n}_j, \quad (14)$$

ahol az első tag az ugrálást („hopping”) írja le, $\langle i, j \rangle$ a szomszédos rácshelyekre vett összegzést jelzi, a bozon-operátorok pedig két eltérő rácsponton felcserélnek

$$i \neq j: [\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j] = 0. \quad (15)$$

A hard-core tulajdonság miatt egy rácsponton két bozon egyszerre nem lehet, azaz

$$(\hat{b}_i)^2 = 0 = (\hat{b}_i^\dagger)^2. \quad (16)$$

A második tagban $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ a bozonok száma az i rácsponton, és az $U > 0$ a szomszédos rácsponton lévő bozonok közötti taszítást írja le. Feltehetjük, hogy mind a kiinduló $\hat{H}_0$, mind pedig az időfejlődést leíró $\hat{H}$ Hamilton-operátor (14) alakú. Általánosabban azt tesszük fel, hogy ezek a (14)-hez hasonlóan olyan tagok összegeként állnak elő, amelyek külön-külön csak kevés (pl. szomszédos) szabadsági fokok közti kölcsönhatást tartalmaznak.

Ekkor bebizonyítható [3], hogy mind az energia várható értéke, mind pedig a varianciájának négyzete a rendszer méretével extenzíven skálázik

$$\bar{E} \sim N \quad \text{és} \quad \Delta E^2 \sim N, \quad (17)$$

ahol N a rendszert alkotó szabadsági fokok száma. Ennek következtében az energia relatív fluktuációira igaz a klasszikus statisztikus mechanikából ismert

$$\frac{\Delta E}{\bar{E}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (18)$$

összefüggés; ami a termodinamikai határesetben zérushoz tart. Ez azt jelenti, hogy a C_n együtthatók olyan állapotokra koncentrálódnak, amelyek energiája az átlagos $\bar{E}$ körüli relatíve keskeny, tipikusan⁴ ΔE szélességű

⁴ A „tipikusan” kifejezés itt azt jelenti, hogy a ΔE szélességű sávon kívül a C_n átfedések exponenciálisan gyorsan csökkennek. Ezért az összegzés megszorítható egy ΔE -vel összemérhető szélességű sávra, és az ezzel

energiasávba esik. Ezen az intervallumon felírható a mikrokanonikus átlag megfelelője:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{mc}} = \frac{1}{\mathcal{N}(\bar{E}, \Delta E)} \sum_{n | E_n - \bar{E} \leq \Delta E} \langle n | \hat{A} | n \rangle, \quad (19)$$

ahol $\mathcal{N}(\bar{E}, \Delta E)$ az $[\bar{E} - \Delta E, \bar{E} + \Delta E]$ intervallumba eső E_n energiaszintek száma. Ugyanakkor a (11) egyensúlyi átlag felírható

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} \approx \sum_{n | E_n - \bar{E} \leq \Delta E} |C_n|^2 \langle n | \hat{A} | n \rangle \quad (20)$$

alakban, ahol az összegzést megszorítottuk a fent jelzett energiasávban lévő $|n\rangle$ sajátállapotokra, hiszen a C_n átfedések is ide koncentrálnak. Ha feltételezzük, hogy a megfigyelhető mennyiség várható értéke az energiasajátállapotokban csak az energia-sajátérték sima függvénye:

$$\langle n | \hat{A} | n \rangle = f_A(E_n), \quad (21)$$

akkor egyfelől a sáv keskeny volta miatt

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{mc}} \approx f_A(\bar{E}) \quad (22)$$

másfelől pedig (7)-et felhasználva

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{mc}} \approx f_A(\bar{E}) \sum_n |C_n|^2 = f_A(\bar{E}), \quad (23)$$

azaz

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} \approx \langle \hat{A} \rangle_{\text{mc}}. \quad (24)$$

Ez az egyenlőség annál pontosabban teljesül, minél kisebb az energiasáv relatív szélessége, azaz a termodinamikai határesetben ($N \rightarrow \infty$) egzakt lesz.

A sajátállapot-termalizációs hipotézis (STH)

A (20) alatt megfogalmazott feltevés, ami szerint az energiasajátállapotokban az $\hat{A}$ megfigyelhető mennyiség várható értéke az energiasűrűség sima függvénye:

$$\langle n | \hat{A} | n \rangle = f_A(E_n), \quad (25)$$

*sajátállapot-termalizációs hipotézis (STH)*⁵ néven ismert [4, 5], ami nem más, mint a (3) alatt felírt ergodikus hipotézis kvantumozott megfelelője. Fontos észrevenni, hogy ez a hipotézis nem teljesülhet tetszőleges állapotban, sem pedig tetszőleges $\hat{A}$ mennyiségre.

Az állapot tekintetében olyan sajátállapotokról van szó, amiknek a gerjesztési energiája extenzív, azaz (17)-nek megfelelően

$$E_n \sim N \quad (26)$$

okozott hiba az $N \rightarrow \infty$ termodinamikai határesetben exponenciálisan gyorsan eltűnik. Az egyszerűség kedvéért ezt úgy jelezzük, hogy az összegzést megszorítjuk az $[\bar{E} - \Delta E, \bar{E} + \Delta E]$ intervallumra; ez az egyszerűsítés a lényegét nem érinti.

⁵ A kifejezés angol megfelelője Eigenstate Thermalisation Hypothesis, rövidítése ETH.

Az $\hat{A}$ operátor sem lehet tetszőleges. Ha például egy energia-sajátállapotra vetítő $\hat{P}_m = |m\rangle\langle m|$ projektort veszünk, akkor

$$\langle n | \hat{P}_m | n \rangle = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}, \quad (27)$$

ami nagyot ugrik két egymáshoz nagyon közeli energiájú sajátállapot között is. Egy jó választás olyan $\hat{A}$ operátorokra koncentrálni, mint pl. a kemény törzsű bozonok esetében az $\hat{n}_i$ helyi betöltési szám, ami egy kevés szabadság foktól függő (lokális) operátor, vagy mint a (14) Hamilton-operátor, ami ilyenek összegeként áll elő. Ilyen esetekben numerikus vizsgálatokkal azt találták, hogy az STH teljesül [3], és emellett sok rendszer esetén erős elméleti érvek is felhozhatók.

A sajátállapot-termalizációs hipotézis általános érvényű igazolása (a klasszikus ergodicitáshoz hasonlóan) nem egyszerű feladat. Egyfelől alátámasztható direkt numerikus vizsgálatokkal [3], ez azonban csak relatíve kis rendszerekre végezhető el, mert a releváns mátrixok mérete a szabadsági fokok N számával exponenciálisan nő. Egy másik lehetőség véletlenmátrix-módszerek használata [4], amik segítségével az általános (nem integrálható) Hamilton-operátor matematikailag modellezhető; ez azonban figyelmen kívül hagyja, hogy a (14)-hez hasonló mátrixok nem triviális (pl. lokális) struktúrával rendelkeznek. A vizsgálatok során az is kiderült, hogy az STH kibővítendő a nem diagonális $\langle n | \hat{A} | m \rangle$ mátrixelemekre tett feltevéssel [5], mivel ez garantálja, hogy a rendszer az időfejlődése során az egyensúlyhoz tart.

A jelzett nehézségek ellenére mára komoly bizonyíték gyűlt össze arra vonatkozólag, hogy az STH a kvantumrendszerek termalizációjának feltétele, azaz az STH az ergodikus hipotézis helyes általánosítása kvantumrendszerekre [6].

Az STH folyományai

Az STH számos érdekes következtetésre vezet. Az első érdekesség, hogy nem mindegy, milyen $\hat{A}$ megfigyelhető mennyiséget tekintünk. Amint ezt fentebb jeleztük, az STH természetes módon működik olyan mennyiségekre, amik kevéstesttagok összegei. A termodinamikában használt állapotjelzők, mint pl. a belső energia, vagy a részecskeszám pont ilyenek. Ez összecseng Khinchin⁶ megközelítésével, amit a klasszikus rendszerek ergodicitására dolgozott ki [7].

A másik érdekesség, hogy mivel az $\hat{A}$ mennyiségek kevés szabadsági fokból álló részrendszertől függenek csak, a rendszer többi szabadsági foka hőfürdőként jelenik meg, vagyis a mikrokanonikus sokaság egybeesik a kanonikus sokasággal. Az ehhez tartozó egyensúlyi

⁶ A. Ya. Khinchin (1894–1959) szovjet matematikus, az A. N. Kolmogorov (1903–1987) által alapított szovjet valószínűségelméleti iskola neves képviselője.

hőmérséklet könnyen kiszámítható: az energiamegmaradás miatt a Hamilton-operátor kezdő állapotban vett és egyensúlyi várható értéke ugyanaz, ahonnan a következő egyenletet kapjuk:⁷

$$\langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle = \frac{\sum_n E_n e^{-E_n/T}}{\sum_n e^{-E_n/T}}, \quad (28)$$

ami egy egyenletet ad az egyensúlyi T hőmérsékletre.

A harmadik érdekesség, hogy az energiahéjon vett (19) mikrokanonikus átlag megegyezik az egyes sajátállapotokban vett (25) átlaggal, azaz minden egyes olyan sajátállapot, aminek a gerjesztési energiája (26)-nak megfelelően extenzív, maga is hőmérsékleti egyensúlynak felel meg, amennyiben méréseink a fentebb tárgyalt megfigyelhető mennyiségek osztályán belül maradnak. Az időfejlődés során tulajdonképpen anynyi történik, hogy a nem diagonális tagok fázisai véletlenszerűen forogva kiátlagolódnak, és a kapott (11) diagonális sokaság azért ekvivalens a hőmérsékleti egyensúllyal, mert minden egyes tagja már eleve külön-külön annak felel meg.

Az STH sérülése

A fentiekben láttuk, hogy az STH a kvantumrendszerek termalizációjának elégséges feltétele. Az irodalomban ugyan javasoltak alternatívákat, azonban eddig minden jel arra mutat, hogy az STH egyben a termalizáció szükséges feltétele is [8].

Ugyanakkor az STH nem minden rendszerre igaz; a bevezetésekor láttuk, hogy bizonyos feltevésekkel kellett élnünk a Hamilton-operátorra, és a releváns mennyiségek osztályára is, továbbá, hogy az STH még ezen feltételek mellett sem igazolt mint matematikai tétel. Több olyan mechanizmus is felmerült, amelyek az STH sérüléséhez, és ezzel a termalizáció megakadályozásához vezetnek. Az egyik ilyen mechanizmus az integrálhatóság, amikor a klasszikus Liouville-integrálhatóság általánosítása történik meg kvantumos soktest-rendszerekre;⁸ ebben az esetben a rendszer ugyan relaxál, de az STH nem teljesül, és így az egyensúlyi állapot nem termikus [10]. Egy másik mechanizmus a rendezetlenségből ered, ez a soktest-lokalizáció, ami az Anderson-lokalizáció kiterjesztése kölcsönható soktest-rendszerekre [11].

Az integrálhatóság, valamint a rendezetlenség a klasszikus rendszerekből is ismert, ergodicitást sértő mechanizmusok. Egy másik érdekes mechanizmus az ún. kvantumsebhelyek [12] létezése, aminek a klasszikus megfelelői az instabil periodikus pályák. A kvantumrendszerekben azonban újfajta, az STH-t sértő mechanizmusok is felmerültek. Ilyen pl. a bezáró kölcsönhatások hatása [13], amiről az érdeklődő olvasó a *Fizikai*

Szemle korábbi számában olvashat [14], valamint a Hilbert-tér fragmentációja [15].

Összefoglalás

A közelmúlt kutatásai nyomán megerősítést nyert, hogy a Boltzmann-féle ergodikus hipotézis általánosítása kvantumrendszerekre a sajátállapot-termalizációs hipotézis. A klasszikus esethez képest ennek számos újszerű vonása van; az egyik, hogy maguk az egyedi sajátállapotok is termikusak. Egy másik újszerű aspektus a megfigyelhető mennyiségek osztályának hangsúlyos szerepe is. Végül pedig a kvantumrendszerekben az ergodicitás sértésének új, a klasszikus statisztikus fizikában nem ismert mechanizmusai merültek fel.

Ebben a cikkben elsősorban az egyensúlyi állapottal foglalkoztunk, fő kérdésként azt vizsgálva, hogy mi biztosítja az egyensúly termikus jellegét. Azzal a kérdéssel kapcsolatban, hogy milyen értelemben és hogyan kerülnek egyensúlyba a sok szabadsági fokú kvantumrendszerek, a jelen számból *Kormos Márton* cikkét ajánljuk az érdeklődő olvasó figyelmébe.

Irodalom

1. Boltzmann L. (1898): Vorlesungen über Gastheorie. Leipzig: J. A. Barth. [Angolul: Lectures on Gas Theory (Dover Books on Physics), Dover Publications (1995).]
2. Calabrese P., Cardy J. (2007): Quantum quenches in extended systems. J. Stat. Mech. P06008.
3. Rigol M., Dunjko V., Olshanii M. (2008): Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems. Nature 452, 854–858.
4. Deutsch J. M. (1991): Quantum statistical mechanics in a closed system. Phys. Rev. A 43: 2046.
5. Srednicki M. (1994): Chaos and quantum thermalization. Phys. Rev. E 50, 888.
6. D'Alessio L., Kafri Y., Polkovnikov A., Rigol M. (2016): From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. Adv. Phys. 65: 239.
7. Khinchin A. Ya. (1949): Mathematical Foundations of Statistical Mechanics, Dover, New York.
8. Rigol M., Srednicki M. (2012): Alternatives to eigenstate thermalization. Phys. Rev. Lett. 108, 110601.
9. Caux J.-S., Mossel J. (2011): Remarks on the notion of quantum integrability. J. Stat. Mech. (2011) P02023.
10. Rigol M., Dunjko V., Yurovsky V., Olshanii M. (2007): Relaxation in a completely integrable many-body quantum system: An ab initio study of the dynamics of the highly excited states of 1D lattice hard-core bosons. Phys. Rev. Lett. 98, 050405.
11. Nandkishore R., Huse D. A. (2015): Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics. Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 6, 15–38.
12. Turner C. J., Michailidis A. A., Abanin D. A., Serbyn M., Papić Z. (2018): Weak ergodicity breaking from quantum many-body scars. Nature Phys. 14, 745–749.
13. Kormos M., Collura M., Takács G., Calabrese P. (2017): Real-time confinement following a quantum quench to a non-integrable model. Nature Phys. 13, 246–249.
14. Takács G. (2025): Elérlik-e az egyensúlyt a zárt kvantum-rendszerek? – amikor a „fénykúp” bezárul. Fizikai Szemle 2025/3, 74–78.
15. Sala P., Rakovszky T., Verresen R., Knap M., Pollmann F. (2020): Ergodicity-breaking arising from Hilbert space fragmentation in dipole-conserving Hamiltonians. Phys. Rev. X10, 011047.

⁷ Itt a hőmérséklet skáláját úgy választottuk meg, hogy a Boltzmann-állandó értéke 1 legyen.

⁸ Megjegyezzük, hogy az integrálhatóság precíz definíciója kvantumos esetben egyáltalán nem egyszerű feladat, ld. [9].

A statisztikus fizika tárgya a sok szabadsági fokkal rendelkező rendszerek leírása, mely így hidat képez a mikroszkopikus törvények és a makroszkopikus rendszerek termodinamikai viselkedése között. Ez a fizika egyik legsikeresebb és talán a leguniverzálisabb elméleti keretrendszere. Ennek az elméleti építménynek az alapjainál viszont zavarba ejtően sok kérdésbe ütközünk, melyek nagy része még ma is viták és diszkussziók tárgyát képezi. Ennek köszönhetően a statisztikus fizika felépítésére több eltérő megközelítés, iskola létezik, így például különböző tankönyvek bevezető fejezetei akár lényegesen eltérhetnek egymástól.

Az alapvető kérdés az, hogy hogyan tud egy egyedi rendszer pillanatnyi állapota statisztikus tulajdonságokat mutatni, azaz miért írható le bizonyos átlagok segítségével. A bayesiánus megközelítés szerint a makrorendszernek csak néhány tulajdonságát ismerjük, és ez alapján a legkevesbé részrehajló valószínűségi eloszlással kell leírunk. De a valóságban természetesen a rendszerünk egy adott időpillanatban egy bizonyos állapotban van. Gibbs ezt a sokaság fogalmának bevezetésével igyekezte formalizálni, de a gyakorlatban csak egy rendszerrel állunk szemben. Alapozhatunk az ergodicitásra, azaz arra a feltételezésre, hogy a rendszer végtelen idő alatt bejárja a rendelkezésére álló állapotteret. Az egyedi klasszikus mechanikai rendszerek ergodicitását viszont nagyon nehéz bizonyítani további feltételezések nélkül. Továbbá érdemes észrevenni, hogy a mérést nem azonosíthatjuk a végtelen időátlaggal, hiszen ez lehetetlenné tenné a nem egyensúlyi viselkedés megfigyelését és az egyensúly felé tartás folyamatát, ami pedig tapasztalati tény.

Természetesen nem akarjuk azt a látszatot kelteni, mintha a felsorolt problémákra semmilyen válasz nem született volna az elmúlt másfél évszázad során, de azt elmondhatjuk, hogy ezek a megoldások a matematikai szigorúság meglehetősen széles skáláján mozognak, és nem adnak végleges, a kérdéskört lezáró válaszokat.

Az elmúlt években azonban egy új megközelítés térnyerése figyelhető meg, mely a *kvantummechanika* keretein belül bizonyítható, meglepően általános, egzakt tételeken alapul, és azzal kecsegtet, hogy sokaságok és

átlagok nélkül megmagyarázza a statisztikus fizika sikerét. A kulcs a kvantummechanikában jelenlévő „objektív tudatlanság”, ami kiváltja a statisztikus fizika felépítésében szerepet játszó szubjektív információhiányt. Ennek megértéséhez azonban fel kell elevenítenünk a tiszta és kevert állapotok fogalmát.

Tiszta és kevert állapotok

A legtöbb olvasó jól tudja, hogy a kvantummechanikában a rendszer bizonyos állapotait egy komplex Hilbert-tér elemeivel, a $|\psi\rangle$ állapotvektorokkal¹ írjuk le. Azért írtunk bizonyos állapotokat, mert ez a leírás az állapotok egy osztályára, az úgynevezett *tiszta állapotokra* alkalmazható. Ha egy rendszer tiszta állapotban van, az annak felel meg, hogy mindent tudunk a rendszerről, ami a kvantumfizika szabályai szerint tudható. Például a fizikai mennyiségek várható értékét a hozzájuk rendelt önadjungált operátorok „szendvicselésével” kaphatjuk meg: $\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$. Ezt úgy is írhatjuk, hogy $\langle \hat{A} \rangle_\psi = \text{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}\}$, ahol $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ a $|\psi\rangle$ vektorra vetítő operátor (projektor), a „Tr” pedig a kapcsos zárójelben lévő operátor nyoma.² A $\hat{\rho}$ operátor az ún. *sűrűségoperátor*. Ezt a nyelvet használva általánosíthatjuk az állapot fogalmát olyan esetekre, amikor nincs a teljes információ a birtokunkban. Ezeket az ún. *kevert állapotokat* olyan sűrűségoperátor írja le, amely nem egy egydimenziós projektor, hanem ilyenek összege: $\hat{\rho} = \sum_a p_a |\alpha\rangle\langle\alpha|$, ahol a p_a -k 0 és 1 közé eső valós számok, melyek összege 1. Ezt az állapotot úgy értelmezhetjük, hogy a rendszer p_a valószínűséggel van az $|\alpha\rangle$ tiszta állapotban.

Mikor találkozunk kevert állapotokkal? A statisztikus fizika Gibbs-sokaságai kevert állapotoknak felelnek meg, melyekben az $|\alpha\rangle$ tiszta állapotok energia-sajátállapotok. A mikrokanonikus sokaságban az összes $p_a = 1/d$ egyenlő egy d dimenziós energiahéjon belül, a kanonikus sokaságban pedig $p_a = \exp\{-E_a/(k_B T)\} / \sum_a \exp\{-E_a/(k_B T)\}$. A kevert állapotok a részrendszerek leírásakor is megjelennek. Tekintsük a Hilbert-tér valamilyen felhasítását részrendszerre és környezetre, azaz írjuk a $\mathcal{H} = \mathcal{H}_R \otimes \mathcal{H}_K$ direktorzat-alakban! Ha például a rendszerünket N spin alkotja, akkor bármely k rögzített spin részrendszert alkot, és a $\mathcal{H}_R$, illetve $\mathcal{H}_K$ Hilbert-terek dimenziója $d_R = 2^k$, illetve $d_K = 2^{N-k}$. Azt a kérdést tesszük fel, hogy ha az egész rendszer a $|\psi\rangle$ tiszta állapotban van, hogyan tudjuk leírni a részrendszeren végzett méréseket csupán a rész-



Kormos Márton a BME Elméleti Fizika Tanszékének tudományos főmunkatársa, a HUN-REN Kvantumtechnológia Kutatócsoport tagja. Külföldi posztdoktori tapasztalatszerzést követően 2013-ban tért haza Marie Curie Ösztöndíjjal, 2016-ban elnyerte az MTA Prémium Posztdoktori Ösztöndíját. AZ ELFT Jánossy Lajos-díjjal tüntette ki (2016), valamint megkapta az MTA Fizikai Díját (2022). Kutatásait a kvantumos soktest-rendszerek, kvantumtérelméletek és integrálható rendszerek területén végzi, főként ezen rendszerek dinamikájára és nemegyensúlyi viselkedésére fókuszálva.

¹ Az állapotvektort hely bázisban kifejtve kapjuk a hullámfüggvényt: $\langle x | \psi \rangle$.

² $\text{Tr}\{\hat{O}\} = \sum_n \langle n | \hat{O} | n \rangle$, ahol az $|n\rangle$ vektorok egy tetszőleges ortonormált bázis elemei. A mondatban szereplő állításhoz vegyük azt a bázist, amelynek egyik eleme $|\psi\rangle$, a többi pedig ortogonális rá.

rendszer szabadsági fokainak segítségével. Van-e például olyan $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_R$ állapotvektora a részrendszernek, mellyel minden $\mathcal{H}_R$ -en élő $\hat{A}_R$ operátor várható értéke az $\langle \hat{A}_R \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle$ módon számolható? A válasz általában *nem*,³ kivéve ha a $|\psi\rangle$ szorzatállapot, azaz $|\psi\rangle = |\phi\rangle_R \otimes |\chi\rangle_K$ alakú. Általában ez nem teljesül, azaz a részrendszer *össze van fonódva* a környezetével. Ekkor a részrendszeren végzett mérések tiszta állapotvektorral nem, de sűrűségoperátorral leírhatók: $\langle \hat{A}_R \rangle = \text{Tr}\{\hat{\rho}_R \hat{A}_R\}$, ahol a $\mathcal{H}_R$ -en élő $\hat{\rho}_R$ redukált sűrűségoperátor úgy kapható, hogy a teljes rendszer sűrűségoperátorában „*kitrace-elünk*”⁴ a környezetet szabadsági fokaira:

$$\hat{\rho}_R = \text{Tr}_K |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Ez azt jelenti, hogy bár az egész rendszer leírható tiszta állapottal, a részrendszer kevert állapotban van! Tehát arra a nem túl intuitív eredményre jutottunk, hogy a teljes rendszerről maximális tudással rendelkezünk, de a részrendszerről csak részleges a tudásunk. Vegyük észre, hogy a klasszikus fizikában ez nem lehetséges! A kvantummechanikában viszont igen, és ez a „tudatlanság” objektív, mértéke egyértelműen meghatározható például az összefonódási entrópia segítségével, melyet a Neumann–Gibbs-féle $S = -k_B \text{Tr}\{\hat{\rho}_R \ln \hat{\rho}_R\}$ képlet ad meg.

A továbbiakban olyan precíz eredményeket fogunk bemutatni, melyek tetszőleges véges dimenziós⁵ kvantummechanikai rendszerre érvényesek, spinrendszerekre éppúgy, mint bozonok vagy fermionok rendszerére. Ennélfogva nincs szükség arra, hogy a Hamilton-operátort rögzítsük.

Tipikussági tételek

A kvantummechanikai kitérő után térjünk vissza a statisztikus fizikához! Ennek felépítésében alapvető jelentőségű az *egyenlő valószínűségek elve*, mely szerint egy vékony energiahéjon belül minden állapot ugyanolyan valószínűségű. Ez a mikrokanonikus eloszlás, amelyből kiindulva levezethetők a kanonikus, nagykanonikus stb. Gibbs-sokaságok, melyek olyan rendszereket írnak le, melyek egy sokkal nagyobb környezettel állnak kölcsönhatásban. A levezetések során a rendszert és környezetét egy nagy, izolált rendszernek feltételezzük, melyre érvényes az egyenlő valószínűségek elve.

A statisztikus fizikában szokásos energiahéj általánosításaként vegyük a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér egy tetszőleges $\mathcal{H}_a$ alterét, melyet valamilyen globális kényszer (pl. energia, részecskeszám, mágnesezettség) jelöl ki. A mikrokanonikus sokaságnak megfelelő kevert ál-

lapotot az $\mathcal{E} = \mathbb{I}_a/d_a$ sűrűségoperátor írja le, amely az egységoperátorral arányos az altéren. De annak posztulálása helyett, hogy a rendszert ezzel a maximálisan kevert állapottal kell leírunk, induljunk ki abból, hogy az egyedi, izolált rendszerünk tiszta állapotban van! Hogyan lesz ez összeegyeztethető a statisztikus fizikával? Az ún. *tipikusság* révén, ami azt jelenti, hogy a legtöbb tiszta állapot valamilyen értelemben tipikusan viselkedik a statisztikus fizika szempontjából.

A *mikrokanonikus tipikusság* [1, 2] nyilvánul meg abban a tételben, mely szerint annak a valószínűsége, hogy egy tetszőleges $\hat{A}$ megfigyelhető mennyiség várható értéke egy $\mathcal{H}_a$ -ból véletlenszerűen választott⁶ tiszta állapotban és a mikrokanonikus sokaságban jelentősen eltér, exponenciálisan kicsi:

$$P[|\langle \hat{A} \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\mathcal{E}| \geq \epsilon] \leq 2 \exp\{-C d_a \epsilon^2 / \Delta_A^2\},$$

ahol $\langle \hat{A} \rangle_\mathcal{E} = \text{Tr}\{\mathcal{E} \hat{A}\}$, Δ_A az $\hat{A}$ operátor sajátértékeinek a tartománya, C pedig egy állandó. Nagy-e vagy kicsi a jobb oldal? Egy realiztikus mérés eredménye nem lehet tetszőlegesen pontos, mondjuk 20 értékes jegynél nem adhat pontosabb eredményt, azaz δ/Δ_A , ahol δ a mérés pontossága. Ez azt jelenti, hogy ha $d_a \gg 10^{40}$, akkor a tiszta állapotok nagy részére az $\hat{A}$ mennyiség várható értéke mérési hibán belül meg fog egyezni a mikrokanonikus átlaggal. Belegondolva, hogy egy mólnyi spin Hilbert-terének dimenziója kb. $10^{10^{23}}$, láthatjuk, hogy makroszkopikus rendszerekben az atipikus állapotok elképzelhetetlenül ritkák.

Egy ennél is erősebb állítás tehető a kanonikus elrendezésben, azaz részrendszereket vizsgálva. Osszuk fel tehát a Hilbert-terünket az előző fejezetben látott $\mathcal{H} = \mathcal{H}_R \otimes \mathcal{H}_K$ módon! A *kanonikus tipikusság* [3, 4] azt mondja, hogy majdnem minden tiszta állapot olyan, hogy a részrendszeren végzett tetszőleges méréssel megkülönböztethetetlen a mikrokanonikus sokaságtól. Pontosabban fogalmazva, a tiszta állapotból származtatott $\rho_R = \text{Tr}_K |\psi\rangle\langle\psi|$ és az $\mathcal{E}$ kevert állapotból számolt $\mathcal{E}_R = \text{Tr}_K \mathcal{E}$ redukált sűrűségoperátorok, melyek a részrendszer állapotát hivatottak leírni, nagyon közel vannak egymáshoz: $\rho_R \approx \mathcal{E}_R$. A közelség a

$$D(\rho_R, \mathcal{E}_R) = (1/2) \text{Tr} |\rho_R - \mathcal{E}_R| \quad (1)$$

távolság szerint értendő, amely a két állapot megkülönböztethetőségét méri. Ez egy 0 és 1 közé eső valós szám, és a $p = 1/2 + 1/2 D(\rho_R, \mathcal{E}_R)$ képlet szerint megadja annak a maximális valószínűségét, hogy egy tetszőleges mérésből jól tippeljük meg, hogy melyik állapottal van dolgunk. Az alábbi tétel szerint ez a távolság egy véletlenszerűen húzott $|\psi\rangle$ esetén szinte biztosan nagyon kicsi:

$$P\left[D(\rho_R, \mathcal{E}_R) \geq \epsilon + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{d_R}{d_K^{\text{eff}}}}\right] \leq 4e^{-C d_a \epsilon^2},$$

³ Példa: A $|\psi\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ (Bell-pár) állapot esetén nincs olyan tiszta állapota az első spinnek, mely mindhárom spinvetületet leíró Pauli-mátrix $|\psi\rangle$ állapotban számolt várható értékét helyesen adná meg.

⁴ Sajnos a magyar „kinyomozunk” kifejezés épp ellentétes jelentést hordozna.

⁵ A véges dimenziószám egy technikai feltevés. Végtelen dimenziós rendszerek véges dimenzióssá tehetők egy tetszőlegesen magas energia-levegés bevezetésével, amitől nem várjuk a termodinamikai viselkedés megváltozását.

⁶ A valószínűségi eloszlás az egyenletes eloszlás a $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ által definiált gömb felületén (Haar-mérték).

ahol $d_K^{\text{eff}} \geq d_a/d_R$ a környezet ún. effektív dimenziója.⁷ Tehát ha a környezet sokkal nagyobb a részrendszerénél, akkor a gyökös kifejezés nagyon kicsi, és annak a valószínűsége, hogy ennél messzebb lesz a két redukált sűrűségoperátor, exponenciálisan kicsi a szóban forgó $\mathcal{H}_a$ altér d_a dimenziójában. Ne feledjük, hogy a képletekben szereplő dimenziók exponenciálisan függnek a szabadsági fokok számától, azaz gyorsan csillagászati nagyságú számokkal találjuk szemben magunkat. Azt kaptuk tehát, hogy a teljes rendszer tiszta állapotainak elsöprő többségében a részrendszeren végzett mérésekkel nem tudjuk megkülönböztetni őket a mikrokanonikus állapottól.

Érdemes néhány megjegyzést tennünk:

1. Ez az állítás független attól, hogy milyen és mekkora a kölcsönhatás a részrendszer és környezete között. A kölcsönhatás akár hosszú távú is lehet, sőt az energiának nem is kell extenzívnek lennie! A kanonikus Gibbs-eloszlás levezetéséhez további, a statisztikus fizikai tankönyvekből ismert feltételezéseket kell tennünk (gyenge kölcsönhatás, elég gyorsan növekvő állapotsűrűség stb.).
2. Az, hogy egy mennyiség várható értéke megegyezik két állapotban, még nem jelenti azt, hogy nem lehet őket ennek a mennyiségnek a mérésével megkülönböztetni. Ha például egy mennyiség az egyik állapotban mindig 0, a másikban pedig 1/2 valószínűséggel plusz és mínusz 1, akkor a várható érték mindkét esetben 0 lesz, de a két állapot triviálisan megkülönböztethető egyetlen méréssel. Többek között ezért is előnyös a megkülönböztethetőséggel dolgozni.
3. A fenti állítás nemcsak meglepően általános, de hihetetlenül erős is: a megkülönböztethetlenség *tetszőleges* mérésre fennáll, nemcsak makroszkopikus, durvaszemcsés mennyiségekre, sőt, nemcsak realiztikusan elvégezhető mikroszkopikus mérésekre, hanem a részrendszer összes szabadsági fokára kiterjedő, nyilvánvalóan nem realizztikus mérésekre is.

Összefoglalva, a tipikussági tételek szerint tetszőleges véges dimenziós kvantummechanikai rendszer tiszta állapotainak nagyon nagy többségét nem lehet megkülönböztetni a mikrokanonikus állapottól az egész rendszeren végzett realizztikus méréssel vagy kellően kicsi részrendszereken végzett tetszőleges méréssel. Erényünk, hogy matematikai szigorúsággal fogalmazza meg, hogy mikor és miért nem számítanak a részletek. Azáltal, hogy rámutatnak arra, hogy a legtöbb állapot ugyanúgy vagy nagyon hasonlóan viselkedik, egy heurisztikus, de meggyőző érvet jelentenek a statisztikus fizikai sokaságok alkalmazása mellett.

Az egyensúly felé

Az előző fejezetből kiderült, hogy a nem egyensúlyi állapotok nagyon ritkák. De tudjuk, hogy vannak ilyenek, hiszen mindennapi tapasztalat az egyensúlyon kívüli

rendszerek egyensúly felé tartása, amelyet jobb híján relaxációnak fogunk nevezni. Azért nem hívjuk termalizációnak,⁸ mert a relaxáció csak az utóbbinak az egyik aspektusa. A termalizáció alatt ugyanis több jelenség együttesét szokás érteni:

1. *Relaxáció*: egy rendszer egyensúlyba kerül, ha egy bizonyos egyensúlyi állapot felé tart, majd annak közelében marad az idő nagy részében. Azért nem örökké, mert egyrészt makrorendszerekben is megfigyelhetők fluktuációk, másrészt a véges dimenziós kvantumrendszerek egy idő után visszatérnek a kezdőállapotukba (pontosabban tetszőlegesen közel kerülnek hozzá).
2. *Függetlenség a kezdeti feltételektől*: a magára hagyott kávéscsésze ugyanabba az állapotba jut függetlenül attól, hogy a szoba levegője hogyan mozog, vagy hogy kezdetben megkavartuk-e. Tehát egy részrendszer egyensúlyi állapota független mind a környezet kezdeti mikroszkopikus jellemzőitől, mind pedig a részrendszer kezdeti állapotától.
3. *Gibbs-állapot*: Az egyensúlyi állapot vagy a releváns fizikai mennyiségek a statisztikus fizika megfelelő sokaságával írhatók le.

Az alábbiakban ezen aspektusok közül csak az elsővel fogunk foglalkozni, vagyis azzal, hogy milyen értelemben és hogyan kerülnek egyensúlyba a makroszkopikus rendszerek. Arról, hogy az egyensúlyi állapot mikor írható le valamilyen termális Gibbs-sokasággal, Takács Gábor cikkét ajánljuk.

A statisztikus fizika felépítése az izolált rendszereken alapul, azaz joggal várjuk el, hogy az izolált, autonóm rendszerek is egyensúlyba kerüljenek. Igen ám, de egy tiszta állapotból indított rendszer a Schrödinger-egyenlet által diktált uniter időfejlődés alatt soha nem fejlődhet kevert állapotba, azaz egy statisztikus fizikai sokaságba. Az előző fejezet tapasztalataival felvértezve sejthetjük, hogy alapvetően két lehetőség áll előttünk. Az egyik, hogy korlátozzuk az egész rendszeren végzett méréseket a realizztikus mérésekre, és belátjuk, hogy ezen mérésekre nézve relaxációt tapasztalunk. A másik, hogy elegendően kis részrendszerekre koncentrálnunk.

Mindkét esetben nagyon általános érvényű állításokat lehet bizonyítani lényegében egyetlen tulajdonságot feltételezve az időfejlődést generáló Hamilton-operátorról: megköveteljük a spektrumtól, hogy a (potenciálisan degenerált) energianívókból számolt energiakülönbségek ne legyenek degeneráltak, azaz minden energiakülönbség egyetlen energiaszint-párhoz tartozzon (de a nívókon belüli degenerációt megengedjük). Ez a feltétel biztosítja, hogy a rendszerünk nem hasítható szét két, egymással nem kölcsönható részre,⁹ amely esetben nem is várható el a relaxáció.

⁸ Az angol nyelvű szakirodalomban erre az „equilibration” szó használatos, de az „ekvilibráció” még a relaxációnál is magyartalanabbul cseng.

⁹ Ekkor az energia a két rész (A és B) energiáinak összegeként kapható, $E_T = E_T^{(A)} + E_T^{(B)}$, így az $E_{ik} - E_{jk}$ energiakülönbség a B rész minden k nívója esetén ugyanaz lesz.

⁷ $d_K^{\text{eff}} = 1/(\text{Tr} \mathcal{E}_K)$, ahol $\mathcal{E}_K = \text{Tr} \mathcal{E}$ a környezet redukált sűrűségoperátora a mikrokanonikus állapotban.

A relaxáció megértéséhez első lépésként írjuk fel egy tetszőleges mennyiség kvantummechanikai várható értékének időfüggését! Az egyszerűség kedvéért szorítkozunk arra az esetre, amikor a rendszer tiszta állapotban van! Ekkor a $|\psi\rangle_0$ kezdeti állapotot az energia $|n\rangle$ sajátállapotain kifejtve $|\psi\rangle_0 = \sum_n c_n |n\rangle$, és bármely későbbi időpillanatban az állapot a

$$|\psi\rangle_t = e^{-i\hat{H}t} |\psi\rangle_0 = \sum_n c_n e^{-iE_n t} |n\rangle$$

alakot ölti. Így bármely $\hat{A}$ mennyiség időfüggő várható értéke

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle_t = \sum_{n,m} c_m^* c_n e^{-i(E_n - E_m)t} \langle m | \hat{A} | n \rangle.$$

Ha a rendszer eléri az egyensúlyt, akkor ez a várható érték az idő nagy részében egy állandó érték körül fluktuál. Ez az állandó viszont éppen ezért nem lehet más, mint a várható érték $\langle \hat{A} \rangle$ végtelen időátlaga,

$$\overline{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle_t} = \sum_n |c_n|^2 \langle n | \hat{A} | n \rangle = \text{Tr} \{ \hat{\rho}_e \hat{A} \},$$

ahol

$$\hat{\rho}_e = \overline{|\psi\rangle\langle\psi|} = \sum_n |c_n|^2 |n\rangle\langle n|$$

az egyensúlyi sűrűségoperátor. Ezekben a kifejezésekben a végtelen időátlag miatt csak az energiában diagonális, nem oszcilláló tagok maradtak meg, ezért a $\hat{\rho}_e$ által leírt kevert állapotot *diagonális sokaságnak* is szokás nevezni.

Ha a várható érték az idő nagy részében közel van az egyensúlyi értékhez, akkor az eltérés nagyságának végtelen időátlaga nem lehet túl nagy. Erre a mennyiségre egy pár soros levezetéssel az alábbi egzakt felső korlát adható [5]:

$$\left| \langle \hat{A} \rangle_t - \langle \hat{A} \rangle \right|^2 \leq \frac{\Delta_A^2}{4d_{\text{eff}}}, \quad (2)$$

ahol $\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle_t$, Δ_A a már korábban használt jelölés az $\hat{A}$ mennyiség lehetséges értékeinek tartományára, és

$$d_{\text{eff}} = \frac{1}{\text{Tr} \hat{\rho}_e^2} = \frac{1}{\sum_n |c_n|^4}$$

pedig az egyensúlyi diagonális $\hat{\rho}_e$ effektív dimenziója, mely megadja, hogy a kezdeti állapothoz hány energia-sajátállapot járul hozzá.¹⁰ Makroszkopikus rendszerekben az energiaszintek sűrűsége exponenciálisan nagy a szabadsági fokok számában, így a legmondosabb kísérleti preparációval sem lehet elérni, hogy a kezdőállapotban csak néhány energiaszint legyen betöltve. Korábbi példánkat használva, miszerint 20 értékes jegynél nem tudunk pontosabban mérni ($\Delta_A/\delta \leq 10^{20}$), a (2) egyenlőtlenség jobb oldalán már pár száz kétállapotú rendszer esetén is kisebb szám fog állni, mint a mérési pontosság négyzete, hát még 10^{23} szabadsági fok esetén! Azt kaptuk tehát, hogy lényegében tetszőleges megfigyelhető mennyiség realisztikus mérése során a

¹⁰ Az effektív dimenziót tisztaságnak (purity) is szokás nevezni. Ha a kezdeti állapotban N állapot vesz részt azonos súllyal, akkor $c_n = 1/\sqrt{N}$ és így $d_{\text{eff}} = N$, ha egyetlen egy, akkor $d_{\text{eff}} = 1$.

kvantummechanikai várható érték relaxációját fogjuk tapasztalni, amennyiben az energiakülönbségek nem degeneráltak. Érdekes hangsúlyozni, hogy itt többről van szó annál a statisztikus fizikában olykor heurisztikusan alkalmazott tipikussági érvnél, miszerint sokkal több olyan „egyensúlyi” állapot van, melyben bizonyos megfigyelhető mennyiségek ugyanazt az egyensúlyi értéket adják, ezért *várhatóan* az időfejlődés elvisz ebbe a halmazba. A (2) tétel szerint ez nemcsak várhatóan, de *biztosan* meg fog történni!

Láttuk azonban, hogy a várható értékek nem elegendőek két állapot megkülönböztetésére. Ráadásul időben változhat, hogy mely mérésekkel tudjuk megkülönböztetni a tényleges és a $\hat{\rho}_e$ egyensúlyi állapotot. Az erről is számot adó mennyiség a két állapot távolsága, melyet az (1) egyenletben definiáltunk. Ezt a mennyiséget módosítani lehet úgy, hogy a lehetséges mérések körét egy adott M halmazra korlátozzuk. Megmutatható, hogy az M -ben található mérések általi megkülönböztethetőség az idő nagy részében kicsi lesz, ugyanis a végtelen időátlagára az alábbi egyenlőtlenség teljesül [6]:

$$\overline{D_M[\hat{\rho}(t), \hat{\rho}_e]} \leq \frac{N(M)}{4\sqrt{d_{\text{eff}}}},$$

ahol $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ a rendszer valódi, időfejlesztett (tiszta) állapota, $N(M)$ pedig az M -be tartozó mérések összes lehetséges kimeneteleinek a száma. Azaz hacsak nem tudunk pl. tízmilliárd mérést végezni egyenként tízmilliárd lehetséges kimenetellel, egy realisztikus módon preparált makroszkopikus rendszer időben fejlődő állapotát az idő nagy részében nem tudjuk megkülönböztetni az egyensúlyi diagonális sokaságtól.

Ahogy a tipikusság esetén, itt is erősebb állítások tehetők elegendően kis részrendszerekre vonatkozóan. Vegyük megint a Hilbert-tér $\mathcal{H} = \mathcal{H}_R \otimes \mathcal{H}_K$ felosztását! Az R részrendszeren adott időben végzett összes mérés leírható a részrendszer redukált sűrűségoperátorával, mely a teljes rendszer időfüggő sűrűségoperátorából kapható: $\hat{\rho}_R(t) = \text{Tr}_K \hat{\rho}(t)$. Az a kérdés, hogy ezt meg tudjuk-e különböztetni az egyensúlyi állapottól, azaz a $\hat{\rho}_{e,R} = \text{Tr}_K \hat{\rho}_e$ redukált sűrűségoperátortól. Az alábbi tétel szerint nem, ha a részrendszer nem túl nagy [7]:

$$\overline{D[\hat{\rho}_R(t), \hat{\rho}_{e,R}]} \leq \frac{d_R}{2\sqrt{d_{\text{eff}}}}. \quad (3)$$

A kezdőállapot d_{eff} effektív dimenziója tipikusan a teljes rendszer dimenziószámával összemérhető, d_R pedig a részrendszer dimenziója. Vegyük észre, hogy a bal oldalon tetszőleges mérésre vonatkozó (1) távolság szerepel!

Foglaljuk össze ennek a fejezetnek az eredményeit! A Hamilton-operátortól csupán azt megkövetelve, hogy az energiaszint-különbségei ne legyenek degeneráltak, be lehet bizonyítani, hogy ha a rendszert elég sok energia-sajátállapotra kiterjedő, azaz realisztikus kezdőállapottól indítjuk, akkor elegendően hosszú idő után realisztikus méréseket végezve az idő nagy részében nem tudjuk megkülönböztetni a rendszer állapotát a végtelen

időátlag által adott egyensúlyi állapottól. Bár a „realisztikus mérés” fogalma emlékeztet a szokásos makroszkopikus állapotjelzőkre és durvaszemcsés mérésekre, valójában ezeknél sokkal többet engedünk meg: olyan méréseket is, melyeknek tíz a sokadikon különböző eredménye lehet, és amelyek így joggal nevezhetők mikroszkopikus méréseknek.

Nem túl nagy részrendszerekre megegyező feltételek mellett még erősebb eredmény kapható: az idő nagy részében *semmilyen* méréssel sem tudjuk eldönteni, hogy az egész rendszer az egyensúlyi állapotban vagy pedig a kezdőállapotból fejlődő, akár tiszta állapotban van-e. Ez az állítás eléggé meglepő. A klasszikus mechanikában úgy képzeljük, hogy a makroszkopikus egyensúlyban is van mikroszkopikus mozgás, amelyet nem tudunk vagy nem akarunk nyomon követni. Ha a teljes rendszert nézzük, akkor ez a kvantumos esetben is így van, hiszen ha bármilyen mikroszkopikus mérést végezhetünk, természetesen feltérképezhetjük a teljes sűrűségmátrixot (vagy tiszta esetben a hullámfüggvényt). Ezzel éles ellentétben a *részrendszerekre* vonatkozó (3) tétel azt mondja, hogy nincs olyan mérés, amivel tetten érhető ez a „mikroszkopikus nyüzsgés”, azaz a részrendszerek egyensúlyának egy valóban statikus képét adja.

Még egyszer hangsúlyozzuk, hogy nem foglalkoztunk azzal a kérdéssel, hogy a végtelen időátlag által definiált egyensúlyi állapot milyen feltételek mellett fog megfelelni a statisztikus fizikából ismert sokaságoknak. Egy másik nagyon fontos aspektus, amelyről az idézett tételek hallgatnak, az időskála kérdése. Az állításokban végtelen időátlagok szerepeltek, ami megenged csillagászatian hosszú ideig tartó „fluktuációkat”, melyek során a rendszer messze elkalandozik az időátlagtól. A relaxációs időre és a fluktuációk időskálájára vonatkozó eredményekhez további feltételeket kell szabni a Hamilton-operátorra és a megfigyelhető mennyiségekre. Ezek azonban túlmutatnak a jelen cikk keretein.

Összefoglalás

Célunk annak a bemutatása volt, hogy a kvantummechanika keretein belül erős és pontos állítások tehetők a tipikus viselkedéssel és az egyensúlyba kerüléssel kap-

csolatban, melyek a (kvantum-) statisztikus fizika alapjait érintik. Ezek az állítások már-már hihetetlenül általánosak, hiszen függetlenek a rendszer alkotóelemeitől (spinek, részecskék stb.) és a köztük lévő kölcsönhatás részleteitől. Ráadásul a precíz bizonyításuk legtöbbször elfér néhány sorban vagy néhány oldalon!

Amint láttuk, nem minden eredménynek van párja a klasszikus mechanika keretein belül. Amelyiknek van (pl. a (2) állításnak), annak a levezetéshez további nem triviális feltételeket kell tenni a rendszer ergodicitásáról és keverési tulajdonságairól [8], bár nem zárható ki, hogy újabb eredmények születnek még ezen a régóta kutatott területen. A kvantumos eredmények sajnos nem vihetők át közvetlenül a klasszikus tartományba: a $\hbar \rightarrow 0$ klasszikus határeset nem cserélhető fel a $t \rightarrow \infty$ hosszú idejű határesettel, mert szükség van az energiaszintek kvantáltságára.

Úgy tűnik tehát, hogy a statisztikus fizika megalapozása könnyebb lehet a kvantumos, mint a klasszikus esetben. Ha a cikkben bemutatott eredmények nem adnak is mindenre végleges válaszokat, és nem teszik is feleslegessé a többi megközelítést, mindenképpen egy új nézőponttal gazdagítják a statisztikus fizika megalapozását [9].

Irodalom

1. Reimann P. (2007): Typicality for generalized microcanonical ensembles. Phys. Rev. Lett. 99, 160404.
2. Gogolin C. (2010): Pure State Quantum Statistical Mechanics. MSc thesis, arXiv:1003.5058
3. Popescu S., Short A. J., Winter A. (2005): Entanglement and the foundations of statistical mechanics. Nature Physics 2, 754.
4. Goldstein S., Lebowitz J., Tumulka R., Zanghi N. (2006): Canonical typicality. Phys. Rev. Lett. 96, 050403.
5. Reimann P. (2008): Foundation of statistical mechanics under experimentally realistic conditions. Phys. Rev. Lett. 101, 190403.
6. Short A. J. (2011): Equilibration of quantum systems and subsystems. New J. Phys. 13, 053009.
7. Linden N., Popescu S., Short A. J., Winter A. (2008): Quantum mechanical evolution towards thermal equilibrium. Phys. Rev. E 79, 061103.
8. Reimann P., Evstigneev M. (2013): Quantum versus classical foundation of statistical mechanics under experimentally realistic conditions. Phys. Rev. E 88, 052114.
9. Gogolin C., Eisert J. (2016): Equilibration, thermalisation, and the emergence of statistical mechanics in closed quantum systems. Rep. Prog. Phys. 79, 056001.

Az Eötvös Loránd Fizikai Társulat jelen van a **facebook**-on!



<https://www.facebook.com/people/Eötvös-Loránd-Fizikai-Társulat/100057390380604/>

GINTRÓPIA – EGYENLŐTLENSÉGMÉRTÉK ENTROPIKUS TULAJDONSÁGOKKAL*

Bíró Tamás Sándor^{1,2}

¹HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest

²Complexity Science Hub, Wien

E-mail: biro.tamas@wigner.hun-ren.hu

1. A gintrópia definíciója

A gintrópia (gintropy) kifejezést a jelen sorok szerzője alkotta meg, a Gini-index kiszámításában szereplő fontos mennyiséget, az $\bar{F}(x)$ kumulatív vagyonszázalék és a $\bar{C}(x)$ kumulatív tulajdonos- (népesség-) százalék, különbségét jelölendő:

$$\sigma = \bar{F}(x) - \bar{C}(x).$$

A Gini-index a jövedelmi vagy vagyoni különbségeket jellemző egyetlen szám nulla és egy (azaz nulla és száz százalék) között, eredeti megalkotója Corrado Gini közgazdász volt az 1920-as években [1]. Ez lényegében a különbségek abszolút értékének a várható értékét osztja el az összeg várható értékével. Bár eredetileg a vagyoni egyenlőtlenség mértékének szánták, világos, hogy bármilyen más valószínűségi változó esetén kiszámítható. Ugyanabból az eloszlásból kiragadva két értéket, x -et és y -t, a képlet így alakul

$$G = \langle |x - y| \rangle / \langle |x + y| \rangle.$$

Ezek az értékek sosem negatívak. A várható értéket ugyanazon eloszlás szerint képezzük mind az x , mind az y változó esetében, azaz:

$$\langle f(x, y) \rangle = \int dx \int dy f(x, y) P(x) P(y).$$

A Gini-index egyetlen számban foglalja össze a $P(x)$ eloszlás egy bizonyos tulajdonságát: az általa leírt egyenlőtlenség mértékét, a nagy különbségek relatív jelenlétét tükrözi. Érthetően, ebből az információból nem lehet a teljes eloszlást rekonstruálni. Viszont a kumulatív függvényekből igen.

A kumulatív populáció, $\bar{C}(x) = \int_x^\infty dy P(y)$, és a skálázott kumulatív vagyon, $\bar{F}(x) = (1/\langle x \rangle) \int_x^\infty dy y P(y)$ olyan mennyiségek, amelyek értéke szintén nulla és egy között változik, ráadásul monoton módon. Ezekből az eredeti valószínűség-eloszlás deriválással visszanyerhető:

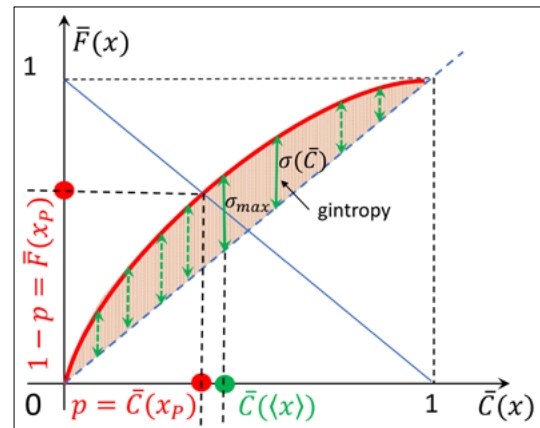
* A budapesti Statisztikus Fizikai Napon, 2024. október 25-én elhangzott előadás alapján.



Bíró Tamás fizikus és biofizikus diplomáját 1980-ban és doktori fokozatát 1982-ben szerezte az Eötvös Loránd Tudományegyetemen. Dolgozott az elméleti nehézionfizikában a KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézetében, majd a koppenhágai Niels Bohr Intézetben és a darmstadti GSI-ben, valamint a Giesseni Egyetem Elméleti Fizika Tanszékén folytatta kutatásait. A Wigner Fizikai Kutatóközpont Részecske- és Magfizikai Intézetének igazgatóhelyettese volt 2013-tól 2019-ig. Jelenleg a nanoplazmonikus fúziós kutatásokat vezeti (NAP-LIFE) a Wigner FK-ban és a nemzeti laboratóriumok program keretében (2020–2025).

$$P(x) = -\frac{d\bar{C}}{dx} \quad \text{és} \quad \frac{x}{\langle x \rangle} P(x) = -\frac{d\bar{F}}{dx}.$$

Ebből következik, hogy $d\bar{F}/d\bar{C} = x/\langle x \rangle$ vagyis az $\bar{F}(\bar{C})$ görbe érintője az eredeti x véletlen mennyiség saját várható értékével skálázott változata. Ez az alapja annak, hogy a sokszor a végtelenbe nyúló $P(x)$ eloszlás ábrázolása mellett a véges egységnyezetbe leképezett görbét érdemes tanulmányozni. Ezt a görbét Lorenz-görbének nevezik, első bevezetője Max O. Lorenz közgazdász után [2]. Egy tipikus Lorenz-görbét és a hozzá kapcsolódó mennyiségeket mutatja az 1. ábra.



1. ábra. A Lorenz-térképen egy tipikus görbe a nagy értékek felé kumulatív mennyiségek esetén mindig az átló felett fut. A gintrópia a görbe és az átló különbsége. A Gini-index a köztes terület aránya a felső háromszöghöz. A Pareto-pont a görbének azon pontja, ahol a két kumulatív mennyiség összege éppen 1

A gintrópia a Lorenz-görbe és az átló távolsága. Ez akkor maximális, amikor éppen az átlagos értéknél vagyunk: $x_{\max} = \langle x \rangle$. Ez a megfelelő első deriváltból következik:

$$\frac{d\sigma}{d\bar{C}} = \frac{d\bar{F}}{d\bar{C}} - 1 = \frac{x}{\langle x \rangle} - 1 = 0.$$

Ugyanakkor a második gintrópiaderivált segítségével könnyen látható, hogy annak az előjele rögzített

$$\frac{d^2\sigma}{d\bar{C}^2} = \frac{dx}{d\bar{C}} \frac{1}{\langle x \rangle} = \frac{-1}{\langle x \rangle P(x)} < 0.$$

Összefoglalva, a $\sigma(\bar{C})$ gintrópiafüggvény tulajdonságai nagyon emlékeztetnek az entrópia axiomatikus tulajdonságaira.

1. A gintrópia sohasem negatív. Csak egy kivételes eloszlásra azonosan nulla.

2. Egyértelmű maximuma van, éppen az átlagos értéknek megfelelő kumulatív népességnél.
3. Konvexitása (második deriváltja) mindenütt negatív.

Egyedül azt nem tudjuk, hogy érvényes-e rá a termodinamika második főtételéhez hasonló kijelentés, miszerint zárt rendszerben spontánul nem csökkenhet. Természetesen a vagyoni vagy ezzel analógiában a népszerűségi mutatók – mint a Facebook like-ok – pozitívak és képesek halmozódni. Azonban nem alkotnak zárt rendszert.

A Lorenz-görbe és az átló közötti terület pedig pontosan a Gini-index fele. A maximum értéke a teljes bal felső háromszög területe, azaz $\frac{1}{2}$, ami $G = 1$ -nek felel meg. A minimuma természetesen nulla. A gintrópia integrálja a kumulatív népesség szerint szintén ezt az értéket adja:

$$G/2 = \int_0^1 \sigma d\bar{C} = \int_0^\infty \sigma(x)P(x)dx.$$

Ez egyben a gintrópia várható értéke is a tanulmányozott eloszlás szerint. Ugyanakkor a gintrópia sima x szerinti integrálja a „nem possionitást” adja, a négyzetes szórás eltérését a Poisson-eloszlásra jellemző skálázástól:

$$\int \sigma(x)dx = \frac{\delta x^2}{\langle x \rangle}.$$

2. Példák a gintrópiára

Az analógia a gintrópia és az entrópia között ezzel nem ér véget. Számos, viszonylag egyszerű és a statisztikában gyakran előforduló eloszlásra olyan képlet adódik, ami az entrópia klasszikus formáját, illetve annak néhány általánosítását megadó képlettel azonos. Az alábbiakban ezeket a példákat tekintjük át, mindegyik példa egyben egy-egy társadalmi jövedelemelosztási modellt is reprezentál.

Kezdjük a triviális példával: csak egyetlen $x = a$ érték megengedett, mindenkinek ugyanaz a jövedelme: $P(x) = \delta(x - a)$. Ebben az esetben, mint az könnyen belátható, a gintrópiafüggvény azonosan nulla. Ezt a modellt hívhatjuk kommunizmusnak.

A következő példa két értéket enged meg: egy szegényebb, $x = a$ és egy gazdagabb $x = b > a$ értéket. A szegények frakciója a népességben legyen w , a gazdagoké ekkor természetesen $1 - w$. Az eloszlás sűrűségfüggvénye (PDF) ekkor

$$P(x) = w\delta(x - a) + (1 - w)\delta(x - b).$$

A kumulatívok ugrásfüggvényeket tartalmaznak, a nem nulla gintrópia azonban csak az $a < x < b$ intervallumra korlátozódik. Ott az értéke konstans. Ezen intervallum szélessége a kumulatív népesség szerint éppen $\bar{C}(a) - \bar{C}(b) = 1/2$. Ezért a plató értéke pontosan a megfelelő Gini-index

$$G = \sigma_{\max} = \frac{b - a}{aw + b(1 - w)}w(1 - w).$$

Ebben a kétosztályos modellben (eliten belüliek és kívüliek, pl. párttagok és pártönkívüliek elképzelt társadalmában) a gintrópia szintén speciális, nem folytonos függvény. Azonban a konvexitása összességében megfelelő. A Gini-index – s ezzel a gintrópiaplátó értéke – igazából csak az $y = b/a$ aránytól függ. Ha az alsó osztály nincstelen ($a = 0$), vagy az elit mérhetetlenül gazdag ($b = \infty$), ugyanaz a gintrópia, és megegyezik a szegények arányával mindkét esetben: $G = w$. Az előző kommunisztikus esetet (amikor mindenki egyenlő vagyonnal rendelkezik) a $b = a$ értéknél kapjuk vissza: $G = 0$.

Következő példánkban a jövedelem szintén két korlát, a és b közé szorított, de ebben az intervallumban minden értéknek azonos a valószínűsége. Ez általában a progresszív adózás utáni jövedelem céleloszlása; minél laposabb a PDF annál „skandinávabb” az eredmény. Ezt „eco-window”-nak, gazdasági ablaknak is hívjuk, az eloszlás alakjára célozva. Ebben az esetben

$$P(x) = \frac{1}{b - a} \theta(x - a) \theta(b - x),$$

és a kumulatív népesség

$$\bar{C}(x) = \frac{b - x}{b - a}$$

a köztes részen, 1 az $x < a$ értékekre, és $x > b$ esetén 0. A kumulatív jövedelem hasonlóan viselkedik, a közbülső intervallumban

$$\bar{F}(x) = \frac{b^2 - x^2}{b^2 - a^2}.$$

A gintrópia e két kumulatív képlet különbsége, amit még kifejezünk a $\bar{C}$ függvényeként:

$$\sigma = \frac{b^2 - x^2}{b^2 - a^2} - \frac{b - x}{b - a} = \frac{b - a}{b + a} \bar{C}(1 - \bar{C}).$$

A Gini-index ezen kifejezés integráljának (várható értékének) a kétszerese:

$$G = 2 \int_0^1 \sigma d\bar{C} = \frac{1}{3} \frac{b - a}{b + a} \leq \frac{1}{3}.$$

Az ENSZ-statisztikákban jellemzően ilyen értékeket közölnek államonként (25% és 33% között). Az igazán nagy vagyonok eloszlása azonban más szabályt követ. Példaképpen még érdemes megnézni a természetes („natural”) eloszlást, ha az x mennyiség Boltzmann-eloszlású lenne. Ekkor $P(x) = \beta e^{-\beta x}$, és a gintrópia

$$\sigma = \beta x e^{-\beta x} = -\bar{C} \ln \bar{C}.$$

Végezetül az igazi vadkapitalizmusban a Pareto-eloszlás érvényes a nagy jövedelmekre és vagyonokra, amely hatványos lecsengésű:

$$P(x) = ab(1 + ax)^{-b-1}.$$

A kumulatívok és a gintrópia is viszonylag egyszerűen számíthatók. A végeredmény

$$\sigma = abx(1+ax)^{-b} = b(\bar{C}^{1-1/b} - \bar{C}).$$

Ha alkalmazzuk a $q = 1 - 1/b$ jelölést, akkor ez az eredmény a Tsallis-entrópia képletében szereplő [3] ún. deformált logaritmusra vezet, ami a „természetes” exponenciális eloszlásból adódó képlet egy általánosítása:

$$\sigma = \frac{1}{1-q}(\bar{C}^q - \bar{C}).$$

A Gini-index egyszerűen $G = 1/(q+1)$. A $q = 1$ érték az exponenciális PDF eredményét, a $q = 2$ érték a skandináv eredmény maximumát ($b \gg a$) adja.

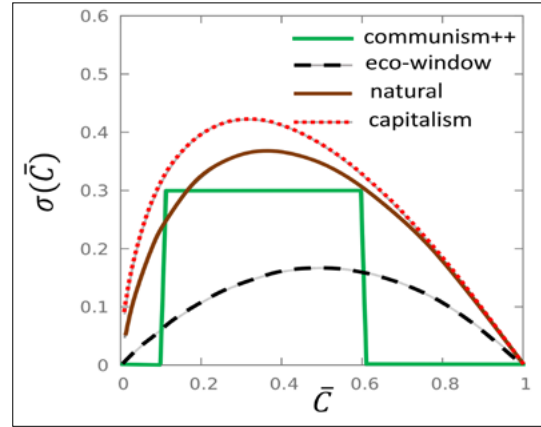
A 2. ábra mutatja a fenti négy példa gintrópiáinak a grafikus képét. Alakjuk általában emlékeztet a bináris (kétállapotú rendszerre érvényes) entrópiáformákra, itt azonban nem az elemi valószínűség, hanem a kumulált népesség függvényében ábrázolunk [4, 5].

Végül megjegyezzük, hogy bár a gintrópia számos képlete emlékeztet másutt javasolt entrópiaképletek alakjára, igazából ez egy másik mennyiség. Viszont miután a gintrópia ismeretében a teljes PDF rekonstruálható, pl. a Boltzmann-entrópia is kifejezhető a gintrópiával:

$$S_{BG} = \ln x + \int_0^1 d\bar{C} \ln(-\sigma''(\bar{C})).$$

Természetesen a gintrópia használata nincs a jövedelemeloszlásokra korlátozva. Például tudományos cikkek idézettségére vagy a földrengések erősségének eloszlására is kiszámítható, s ezáltal érdekes összevetést kínál a közgazdaságtani egyenlőtlenségindexekkel.

Végezetül ajánlom a tisztelt olvasók figyelmébe nemrég megjelent (angol nyelvű) könyvemet a gintrópiáról



2. ábra. Különböző jövedelemeloszlási modellek gintrópia-függvényei. Az egyetlen maximum mindegyik görbe sajátja

[6], amelyben kitalált történetek és tudósok beszélgetései kapcsán igyekeztem egy olvasmányos bevezetést adni a fentiekben röviden ismertetett képletek háttérébe.

Irodalom

1. Gini C. (1912): Variabilità e mutabilità: contributo allo studio delle distribuzioni e delle relationi statistiche. Bologna, Di P. Cuppini.
2. Lorenz M. O. (1905): Methods of measuring the calculation of wealth. Publ. Am. Stat. Assoc. 19, 209.
3. Tsallis C. (2009): Nonadditive entropy: The concept and its use. EPJ A 40, 257.
4. Biró T. S., Neda Z. (2020): Gintropy: A Gini index based generalization of entropy. Entropy 22, 879.
5. Biro T. S., Telcs A., Jakovac A. (2024): Analogies and relations between non-additive entropy and gintropy. Entropy 26, 185.
6. Tamás Sándor Biró (2024): Gintropy – A fiction on inequality. HUN-REN Wigner RCP, All colors of Physics No. 1, Budapest.

REPEDÉSI ZAJ ZSUGORODÓ VÉKONYRÉTEGEKBEN

Kun Ferenc[®], Szatmári Roland

Debreceni Egyetem, Elméleti Fizikai Tanszék, Debrecen

[®]E-mail: ferenc.kun@science.unideb.hu

1. Repedési mintázatok zsugorodó rétegekben

A természetben és a mindennapi életben gyakran találkozhatunk olyan repedési mintázatokkal, amelyeket száradás során fellépő zsugorodás okoz. Ilyen jelenségek figyelhetők meg a kiszáradó agyagban, a repedező

festékben, az aszály sújtotta földfelszínen vagy akár a sárguló falevelekben is. Amikor egy anyag kiszárad, elveszíti nedvességtartalmát, ezért a térfogata csökken. Ez a zsugorodás azonban nem mindig történik egyenletesen: a külső réteg gyorsabban veszít vizet, mint az alsóbb rétegek, így eltérő zsugorodási arányok alakulnak ki, ami belső feszültségeket hoz létre az anyagban. Amikor ezek



Kun Ferenc a Debreceni Egyetem Elméleti Fizikai Tanszékének egyetemi tanára, az MTA levelező tagja. Kutatási területe a statisztikus fizika és a számítógépes anyagtudomány, különös tekintettel a heterogén szilárdtestek törési és fragmentációs folyamataira. A statisztikus fizika eszköztárát felhasználva törekszik a jelenségek mélyebb megértésére, valamint olyan módszerek kidolgozására, amelyek lehetővé teszik katasztrofális törések előrejelzését.



Szatmári Roland a Debreceni Egyetemen szerzett fizikus diplomát, 2020 óta az Elméleti Fizikai Tanszék PhD-hallgatója. 2022-től tanársegédként aktívan részt vesz az egyetemi oktatásban, elméleti és gyakorlati kurzusok vezetésével támogatva a hallgatók szakmai fejlődését. Doktori témája a zsugorodó vékonyrétegek repedezésének elméleti vizsgálata.

a feszültségek meghaladják az anyag lokális teherbíró képességét, repedések keletkeznek, amelyek relaxálják a feszültséget, és lehetővé teszik a térfogatváltozás kompenzálását. Egy hordozó felületére felvitt réteg – mint például festék vagy sűrű paszta – esetén a zsugorodás hatására kialakuló feszültségtér inhomogenitását tovább erősíti, hogy a réteg szabad felülete könnyen elmozdulhat, míg az alja a letapadás miatt közel mozdulatlan marad [1].

A zsugorodásos repedések nagyon jellegzetes mintázatokat hoznak létre, amelyek szerkezete az anyag tulajdonságaitól, a hordozóhoz történő tapadás erősségétől, valamint a száradás körülményeitől is függ. A kiszáradó iszap vagy festék gyakran poligonális szerkezetű repedésrendszert alakít ki [1, 2]. Ha egy körszimmetrikus objektum, például egy csepp festék vagy egy kiszáradó gélcsepp zsugorodik, a repedések sugárirányban terjednek kifelé, mert a térfogatcsökkenés középről indul [1]. Előfordulhat, hogy a repedések először nagyobb darabokra osztják fel az anyagot, majd ezek a kisebb részek tovább repedeznek, így egyfajta hierarchikus mintázat alakul ki. Ilyet figyelhetünk meg például egyes kerámiák repedezésében, vagy sűrű paszták rétegeinek száradása esetén [1, 2].

Természetesen térfogatváltozást és ennek hatására fellépő repedezést nemcsak száradás okozhat. Vulkánkitöréskor a lehűlés következtében zsugorodó lávaréteg felületén a kiszáradt tómederhez hasonló repedési mintázatok jönnek létre, de ezzel a mechanizmussal keletkeznek az úgynevezett hatszöges lávaoszlopok is [1]. Hordozóra felvitt vékonyrétegek esetén a két anyag eltérő hőtágulási együtthatója melegítés vagy hűtés hatására relatív térfogatváltozást okoz a két komponens között, ami szintén repedések keletkezését eredményezi. Amikor egy anyag diffundál egy másik anyagba, az a befogadó anyag térfogatának megváltozását idézheti elő, amely ugyancsak mechanikai feszültséghez és repedések kialakulásához vezethet [1].

A zsugorodás okozta repedezés nemcsak látványos természeti jelenség, hanem gyakorlati jelentősége is nagy. A beton, az agyag vagy festékek száradás közbeni repedezése csökkentheti az anyag tartósságát és esztétikai értékét. Ennek elkerülése érdekében olyan adalékokat és szárítási technikákat fejlesztenek, amelyek egyenletesebb zsugorodást biztosítanak. Kísérleti és elméleti vizsgálatok megmutatták, hogy a zsugorodás által keltett repedések útvonalatát, valamint a létrejövő mintázat szerkezetét kontrollálni lehet, ami kiaknázható a mikroelektronikai gyártástechnológiában [1–3, 7]. A zsugorodás által okozott repedezés nagyon fontos szerepet játszik az akkumulátorok degradációs folyamataiban is. Például egy lítiumion-akkumulátor töltési ciklusa során lítiumionok diffundálnak az elektróda anyagába, ami a felületi rétegek jelentős térfogat-növekedését eredményezi. Kisütéskor a fordított folyamat játszódik le, ami a felületi rétegek zsugorodásával jár. A töltés-kisütés ciklusai mi-

att fellépő tágulás és zsugorodás ciklikus mechanikai terhelést eredményez, amely repedésekhez, anyagfáradáshoz és az elektróda degradációjához vezethet. Ez a jelenség az elektróda mechanikai stabilitásának egyik kritikus kihívása a lítiumion-akkumulátorokban [6].

2. Zajos repedezés

Kísérleti vizsgálatok megmutatták, hogy a rendezetlen mikroszkopikus tulajdonságokkal rendelkező anyagok repedezése időben nem sima, hanem egy intermittens folyamat: ha lassan növekvő mechanikai terhelésnek tesszünk ki egy testet, a repedések a leggyengébb pontokon keletkeznek, majd fokozatosan növekednek. A repedések terjedése azonban hirtelen lépésekben, változatos méretű ugrásokkal történik, amint egy gyengébb anyagdarabban elindult repedés egy lokálisan erősebb tartományba behatolva megáll, majd újra aktiválódik egy magasabb terhelésen [4].

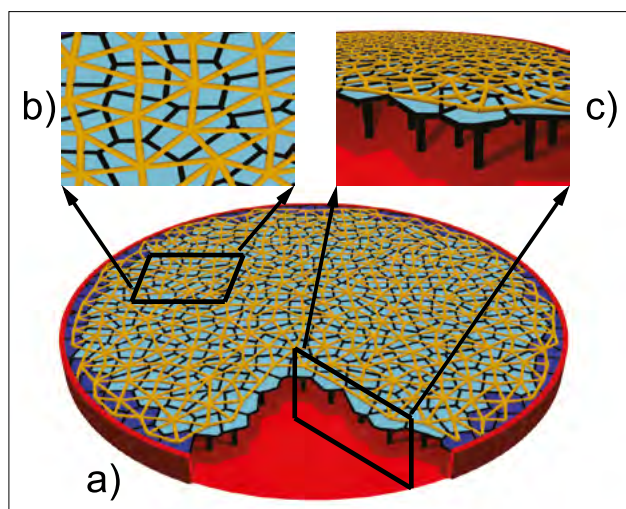
A repedések keletkezése és terjedése hanghullámok keltésével jár, amelyeket megfelelő érzékelőkkel zajcsomagok formájában regisztrálni lehet. A módszer segítségével a törési folyamat egyedi repedési események sztochasztikus sorozatára bontható. Ez az úgynevezett akusztikus emissziós (AE) mérési technika az egyik elsődleges információforrás heterogén anyagok repedezésének mikroszkopikus folyamatáról. A legkülönbözőbb heterogén anyagokon végzett mérések megmutatták, hogy a repedési események fluktuáló mennyiségei, mint például az eseményben felszabadult energia és az esemény időtartama hatványfüggvény eloszlásokkal jellemezhetők. Az exponensek nagyfokú univerzalitást mutatnak abban az értelemben, hogy értékük jó közelítéssel független az anyagi minőségtől és a terhelés pontos módjától [4].

Laboratóriumi vizsgálatok arra a megállapításra jutottak, hogy az AE technika a zsugorodás által hajtott repedezési folyamatok vizsgálatára is alkalmas. Friss beton száradása során azt találták, hogy a repedési események energiaeeloszlása egy hatványfüggvény szerint alakul, de az eloszlás exponense nem univerzális, mert az értéke a száradás előrehaladtával nő [5]. A közelmúltban kimutatták, hogy akkumulátorok elektródáinak repedezése szintén követhető az AE technikával úgy, hogy az érzékelőket az akkumulátor külső felületére helyezik el. Ezek a vizsgálatok rávilágítottak arra, hogy akusztikus emissziós mérésekkel monitorozni lehet akkumulátorok degradációs folyamatát [6].

Kutatómunkánk során arra kerestük a választ, hogy mi okozza a zsugorodásos repedezést kísérő repedési zaj statisztikájának skálafüggetlen, de nem univerzális viselkedését. Szerettük volna megérteni, hogy a rendszer jellemzői – mint a zsugorodás sebessége és a rendszer mérete – hogyan befolyásolja a generált repedési zaj statisztikus tulajdonságait.

3. Repedező vékonyréteg számítógépes szimulációja

A heterogén anyagok repedezési folyamatainak vizsgálata során az analitikus megközelítés lehetőségei a probléma komplexitása miatt meglehetősen korlátozottak. Kutatómunkánk során ezért kidolgoztuk a zsugorodás által kiváltott repedezési jelenségeknek egy diszkrét-elem-modelljét (DEM) és számítógépes szimulációval végeztünk vizsgálatokat [7–9]. Modellünkben egy korong alakú mintadarabot tekintünk, amelyben a réteg anyagát egy véletlen szerkezetű rácson diszkrétizáljuk. Ehhez elsőként egy négyzetet Voronoi-konstrukció segítségével felbontunk véletlenszerű alakú konvex poligonokra, majd az így kapott mozaikból kivágunk egy R sugarú korongot. A poligonok mezoszkopikus méretű anyagdarabokat reprezentálnak, amelyek között úgy definiálunk kölcsönhatásokat, hogy a részecskerendszer mechanikai válasza reprodukálja a kísérleti eredményeket. Ehhez a kezdeti mozaikos szerkezetben a szomszédos poligonokat rugalmas, de törhető rúdelemekkel kapcsoljuk össze, amelyek a poligonok elmozdulásának hatására nyújtást, összenyomást, hajlítást, nyírást szenvedhetnek el. (A modell konstrukcióját az 1. ábra szemlélteti.) A réteg zsugorodását úgy modellezzük, hogy a rudak nyugalmi hosszát egy állandó s sebességgel csökkentjük, amely a t idő előrehaladtával egyenletesen növekvő $\varepsilon = st$ homogén deformációt eredményez.



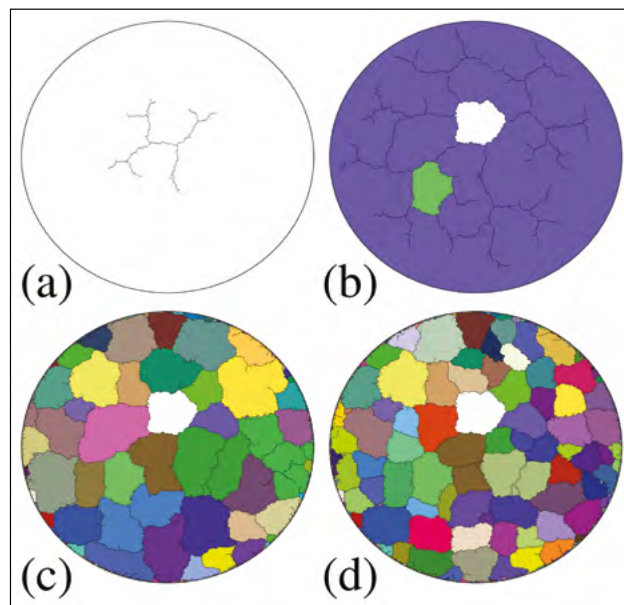
1. ábra. Zsugorodó vékonyréteg diszkrét-elem-modelljének illusztrációja. A korong alakú réteget konvex poligonok véletlen szerkezetű rácsán diszkrétizáljuk (a). A mezoszkopikus anyagdarabokat reprezentáló poligonokat rugalmas, törhető rúdelemekkel kapcsoljuk össze (b). Az adhézió figyelembevételére a poligonokat rugók kapcsolják az alatta lévő síkhoz (c) [7, 8]

A réteg hordozófelülethez való tapadását úgy vesszük figyelembe, hogy minden poligon középpontja egy rugalmas rugóval kapcsolódik az alatta lévő síkhoz. Ezek a rugók kezdetben feszültségmentesek, de a poligonok elmozdulásakor egy visszatérítő erőt fejtenek ki. Mivel a poligonok nem tudnak szabadon elmozdulni, zsugo-

rodás közben a rudak egyre jobban megfeszülnek, és ha a feszültségük átlép egy küszöbértéket, eltörnek. Fontos megjegyezni, hogy csak a rétegbeli kohezív kölcsönhatást reprezentáló rudak törhetnek el, a hordozó felületéhez kapcsolódó rugók nem, ezért a modellben nem következhet be delamináció (rétegleválás).

A zsugorodó réteg időbeli fejlődését számítógépes szimulációval állítjuk elő úgy, hogy a poligonok transzlációs és forgási szabadsági fokaira felírt mozgásegyenlet-rendszert numerikusan megoldjuk. Ehhez egy ötödrendű prediktor-korrektor módszert alkalmazunk, ami kellő pontosságot és stabilitást biztosít. A törési feltételt minden iterációs lépésben kiértékeljük, és a túlfeszült rudakat kivesszük a rendszerből. Az eltört rudaknál a poligonok élei mentén mikropredések keletkeznek a rétegben, amelyekből a szomszédos élek mentén kiterjedt repedések tudnak felépülni.

A zsugorodó vékonyréteg szimulációval előállított időfejlődését a 2. ábra szemlélteti egy $R = 120$ sugarú rendszerre (a hosszúságot mindig az l_0 átlagos poligonméret egységben adjuk meg). Megfigyelhető, hogy a repedések véletlenszerűen elhelyezkedő gyenge pontokon keletkeznek és szimultán növekednek (2a. ábra). A réteg szerkezeti rendezetlensége, valamint nagyfokú homogenitása és izotrópiája következtében a repedések véletlenszerű irányokban terjednek, találkozáskor pedig többnyire közel merőlegesen csatlakoznak egy úttjukba eső repedéshez (2b. ábra). A repedések fokozatos keletkezésének és összeolvadásának eredményeként egy összefüggő repedéshálózat jön létre, amely mentén a réteg darabokra esik szét, fragmentálódik (2c. ábra). Mivel a fragmenseket repedések határolják, egymástól függet-



2. ábra. A repedező vékonyréteg időfejlődése egy $R = 120$ sugarú rendszerben. Az első repedések a leggyengébb pontokon indulnak el (a), majd fokozatos növekedésük és összeolvadásuk (b) eredményeként egy összefüggő repedési hálózat jön létre, amely mentén a réteg darabokra esik szét (c). A további zsugorodás a fragmensek fokozatos darabolódását eredményezi (d). A fragmensekhez eltérő színeket rendeltünk

lenül tudnak zsugorodni, ami ismét feszültséghalmozódással és további fokozatos darabolódással jár (2d. ábra). A modellünk számítógépes szimulációjával nyert repedési mintázatok izotrop, celluláris szerkezete, valamint a fragmensek poligonális alakja és lognormális tömegeloszlása nagyon jó kvalitatív és számos esetben kvantitatív egyezést mutat sűrű paszták száradása során kapott repedési mintázatok jellemzőivel [2, 7–9].

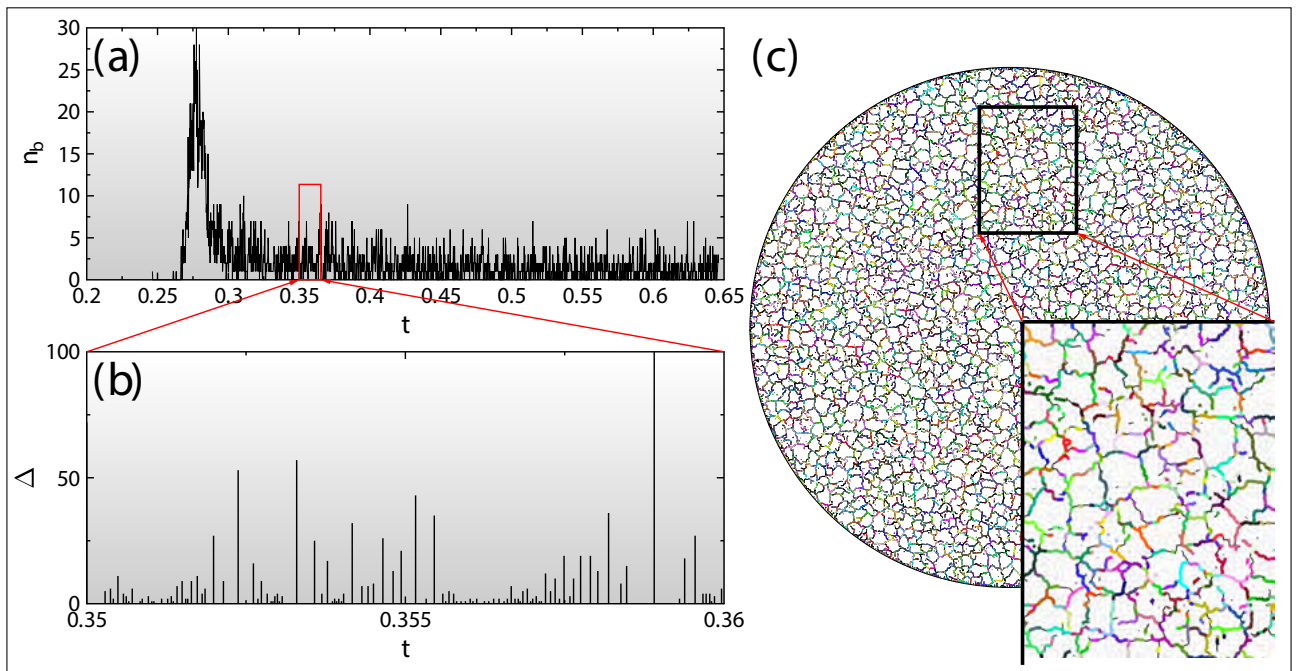
4. A repedési folyamat időfejlődése

Annak megértésére, hogyan keletkezik az akusztikusan mért repedési zaj a zsugorodó anyagi rétegekben, számítógépes szimulációval vizsgáltuk a repedési folyamat időfejlődését. Mivel a laboratóriumi kísérletek során az akusztikus érzékelők a próbatest kiterjedt tartományáról, vagy akár az egész test térfogatából gyűjtenek információt, a szimulációkban meghatároztuk az egyenlő Δt hosszúságú időintervallumokban eltört rudak, azaz mikrorepedések n_p darabszámát a t idő függvényeként.

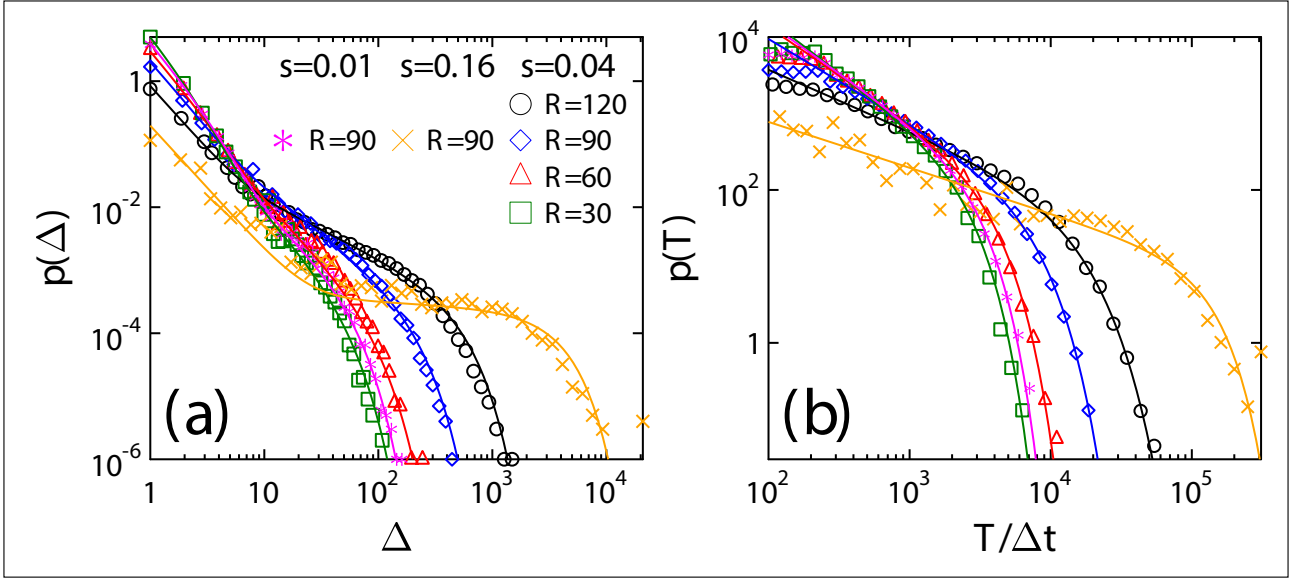
A 3. ábrán látható $n_p(t)$ görbe csúcsokkal és völgyekkel tagolt, sztochasztikus jellege azt mutatja, hogy a réteg deformációjának lassú, homogén növekedése ellenére a károsodás halmozódása szakaszosan zajlik. A repedési aktivitás kitéréseinek, pulzusainak azonosítása érdekében bevezettünk egy t_c korrelációs időt, és feltételeztük, hogy két egymást követő mikrorepedés ugyanahhoz a töréssorozathoz tartozik, ha t_c időn belül követik egymást. Ily módon a mikrorepedések időbeli sorozata jelentős számú rúdtörést tartalmazó

aktivitáspulzusokra bomlik, amelyeket csendes időszakok választanak el, amikor nem történik törés. Ezeket az aktivitáspulzusokat szemlélteti a 3b. ábra, ahol a 3a. ábra idősorának egy kis szegmensében azonosított pulzusokat emeltük ki. Az aktivitás időbeli alakulásának jellemzésére három mennyiséget vezettünk be: egy pulzus Δ mérete a törési események sorozatában eltört rúdelemek darabszáma, a T időtartama pedig a sorozat első és utolsó rúdtörése között eltelt idő. Az egymást követő pulzusok közötti csendes időszak t_w időtartama az úgynevezett várakozási időt definiálja. A globális repedésaktivitás ilyen módon azonosított pulzusai megfeleltethetők a zsugorodással végzett laboratóriumi kísérletek akusztikus eseményeinek, így a pulzusmennyiségek statisztikája összehasonlítható az AE mérések megfelelő eredményeivel [5, 6].

A pulzusméretek $p(\Delta)$ valószínűségi eloszlását a 4a. ábra mutatja be négy különböző R rendszerméretre, rögzített s zsugorodási sebesség mellett, két további adatsorral együtt egy alacsonyabb és egy magasabb s értéknél az $R = 90$ sugárnál. Megfigyelhető, hogy a $p(\Delta)$ eloszlás nagyon érdekes viselkedést mutat R és s különböző értékeinél: a legkisebb, $R = 30$ sugárnál $p(\Delta)$ hatványfüggvény szerint csökken, amit exponenciális levágás követ. Nagyobb rendszerek esetén azonban a pulzusok nagyobb méretűvé válnak, és a nagy pulzusoknál a $p(\Delta)$ eloszláson átmenet következik be egy második, alacsonyabb exponensű hatványfüggvény-tartományba, miközben a görbe meredeksége a kis Δ pulzusméreteknél gyakorlatilag állandó marad. Az s zsugorodási sebesség növelése



3. ábra. A zsugorodás által hajtott repedés időbeli fejlődése (a, b) és térbeli eloszlása (c) egy $R = 120$ sugarú rendszerre. (a) Az egyenlő időközök alatt eltört rúdelemek n_p száma a t idő függvényeként. (b) Az idősor egy kis szakaszára látható, hogy a rendszer törési aktivitása jól elkülönülő pulzusokra bontható, amelyek Δ méretét ábrázoltuk a bekövetkezésük időpontjában. A (c) ábrán a repedező réteg egy pillanatképe látható az összefüggő repedéshálózat kialakulása után. A mikrorepedések aszerint vannak színezve, hogy melyik lokális töréslavinához tartoznak. A jobb alsó sarokban lévő nagyított nézetből látható, hogy a lokális lavinák a repedések növekedésének véletlenszerű ugrásai



4. ábra. A repedezési aktivitás pulzusainak $p(\Delta)$ méret (a) és $p(T)$ időtartam (b) szerinti eloszlása az R rendszerméret és s deformációs sebesség több értéke esetén. A folytonos vonalak illesztéseket reprezentálnak az (a) diagramon az (1) függvénnyel és a (b)-n a (2)-vel. A (b) ábrán Δt a DEM szimulációk időlépését jelöli

rögzített R rendszerméret mellett hasonló hatással jár, azaz nagyobb s esetén nagyobb pulzusok keletkeznek, és ezzel párhuzamosan egy alacsonyabb exponensű második hatványfüggvény-szakasz jelenik meg. A $p(\Delta)$ pulzusz méret-eloszlás alakulásának kvantitatív leírásához a következő függvényalakot használjuk

$$p(\Delta) = A\Delta^{-\tau_l} e^{-\Delta/\Delta_l} + B\Delta^{-\tau_h} e^{-(\Delta/\Delta_h)^\delta}, \quad (1)$$

vagyis $p(\Delta)$ -t két hatványfüggvény-eloszlás összegeként közelítjük. A Δ_l és Δ_h karakterisztikus pulzusz méretek a levágásokat szabályozzák a kis és nagy méretek tartományán, τ_l és τ_h a hozzájuk tartozó hatványfüggvény exponensek, az A és B szorzófaktorok pedig az eloszlás két komponensének járulékát határozzák meg. Az illesztés során τ_l -et rögzítettük az $R = 30$ -as rendszerméretnél kapott $\tau_l = 1,95 \pm 0,05$ értéken, ahol még nincs átmenet, és csak a τ_h exponenszt használtuk illesztési paraméterként. A numerikus számolások megmutatták, hogy R és s növelésével a τ_h értéke $\tau_h = 1,96 \pm 0,05$ közeléből indulva gyakorlatilag nulláig csökken. A δ levágási exponens értéke állandónak bizonyult; $\delta = 1,50 \pm 0,06$ az egyes görbéken.

Az aktivitáspulzusok T időtartamának $p(T)$ eloszlása a 4b. ábrán egyetlen hatványfüggvénnyel jellemezhető, amit exponenciális levágás követ

$$p(T) \sim T^{-\alpha} e^{-(T/T_0)^\delta}. \quad (2)$$

Hasonlóan a $p(\Delta)$ méreteloszlás viselkedéséhez, R és s növelésével az α exponens az $\alpha = 1,40 \pm 0,06$ értékről csökken $\alpha = 0,80 \pm 0,04$ -ra, míg δ az 1,5 és 2,0 határok között változik. A pulzusok közötti várakozási idő $p(t_w)$ eloszlásának függvényalakja kvalitatíve hasonló a $p(T)$ időtartam-eloszlásához [9]. Fontos azonban hangsúlyozni, hogy mind az R rendszerméret, mind az s deformációs sebesség növelésekor a pulzusok közötti

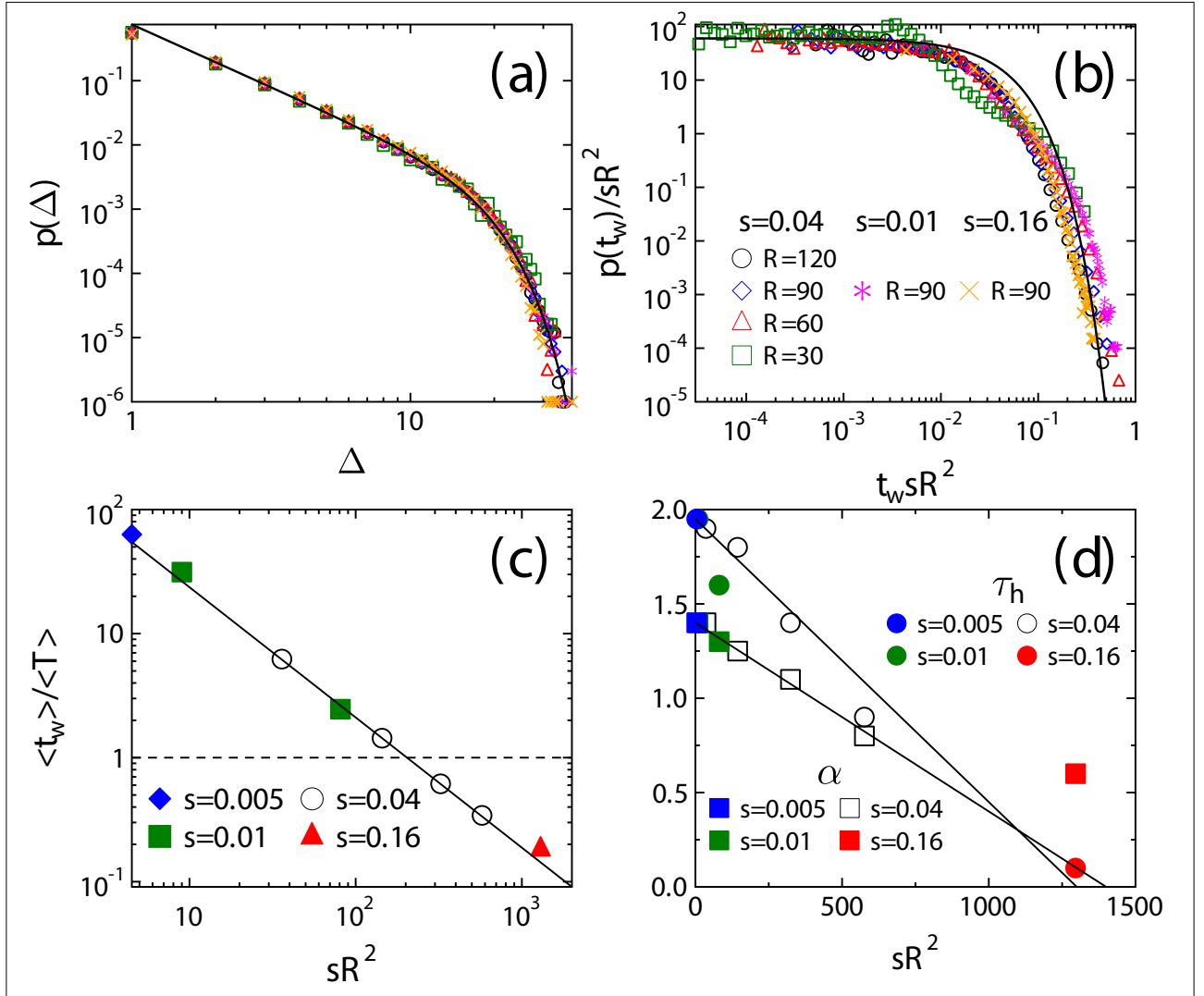
várakozási idő csökken, így a $p(t_w)$ eloszlás exponense növekszik [9].

Ezek az eredmények, összhangban a laboratóriumi mérésekkel, arra világítottak rá, hogy a zsugorodást kísérő repedezés intermittens aktivitását skálafüggetlen eloszlások jellemzik, de ezek nem univerzálisak. Az aktivitáskitörések méret- és időtartam-eloszlásainak exponensei mind a rendszer méretétől, mind a zsugorodás sebességétől komplex módon függenek.

5. Lokális repedési lavinák

Annak érdekében, hogy megértsük a pulzusstatisztikák összetett viselkedésének eredetét a rendszer R méretének és s deformációs sebességének függvényében, fontos hangsúlyozni, hogy a mikrorepedések eseményeinek aktivitáspulzusokba rendezése szigorúan a mikrorepedések időbeli sorrendjén alapul. Ez azt hivatott figyelembe venni, ahogyan a valós kísérletekben az akusztikus érzékelők a keletkező és terjedő repedések jelét kiterjedt térbeli régiókból integrálják, amelyek akár a teljes mintadarabot is érinthetik. Ezért várható, hogy a zsugorodó rétegben megfigyelt aktivitási kitörések a minta egészen véletlenszerűen elszórtan felbukkanó, nagyszámú korrelálatlan lokális mikrorepedés lavinájának szuperpozíciójaként jönnek létre.

Annak bizonyítására, hogy valóban ez a mechanizmus felelős a megfigyelt nem univerzális viselkedésért, a lokális lavinákat a mikrorepedések időben és térben korrelált sorozataiként azonosítjuk, amelyeket szigorúan meg kell különböztetni a globális aktivitás pulzusaitól. A lokális lavinák mindig egyetlen rúdtörésből indulnak ki, és mikrorepedések térben összefüggő halmazaként fejlődnek, amelyek a t_c korrelációs időn



5. ábra. A lokális lavinák $p(\Delta)$ méreteloszlása (a), valamint a lavinák között eltelt t_w várakozási idő $p(t_w)$ eloszlása (b) az R rendszerméret és az s zsugorodási sebesség több értékére. A (b) ábra demonstrálja, hogy a $p(t_w)$ eloszlásokat sR^2 -tel skálázva, a különböző R és s értékek mellett kapott eloszlások egymásra ejthetők. A folytonos vonal egy exponenciális illesztés görbéje. (c) A $\langle t_w \rangle$ átlagos várakozási idő és a lokális lavinák $\langle T \rangle$ átlagos időtartamának hányadosa sR^2 függvényeként. A különböző R és s értékeknél kapott eredmények egy egyenesre esnek kétszeres logaritmus skálán. (d) A globális aktivitás α és τ_h exponense sR^2 függvényeként

és az l_c hosszon belül követik egymást. A számítások során l_c -t a diszkretizáció átlagos l_0 poligonméretének kétszeresére állítottuk be, míg t_c a terhelés újraelosztásának a réteg anyagi tulajdonságai által meghatározott jellemző időskálája. A számítógépes szimulációk megmutatták, hogy az így azonosított lokális lavinák a növekvő repedések véletlenszerű ugrásai, amit a 2c. ábrán is megfigyelhetünk.

Az 5a. ábrán látható, hogy a lokális lavinák Δ mérete hatványfüggvény-eloszlást követ exponenciális levágással, a $p(T)$ időtartam-eloszlás függvényalakja is hasonló [9]. Fontos hangsúlyozni, hogy a lokális lavinák statisztikája nagyfokú robusztusságot mutat, azaz mindkét $p(\Delta)$ és $p(T)$ eloszlás esetében a különböző R rendszerméret és s deformációs sebességek mellett kapott eredmények teljesen egymásra esnek. Bár a Δ és T által felölelt tartományok eléggé korlátozottak, azaz a Δ_0 levágási lavi-

naméret és a hozzá tartozó T_0 időtartam kisebb, mint a pulzusok megfelelő mennyiségei, a görbék nagyon jól illeszthetők a (2) egyenletben adott függvényalakokkal, a $\tau_l = 1,96 \pm 0,06$ és az $\alpha_l = 1,40 \pm 0,04$ exponensekkel. Szimulációink megmutatták, hogy a lokális lavinákat a zsugorodó réteg olyan anyagi tulajdonságai határozzák meg, mint például a hordozóhoz való adhézió erősségének és a réteg merevségének aránya, amely a rendszerben lévő feszültségheterogenitások jellegzetes hosszskáláját szabályozza [9].

A réteg anyagának szerkezeti rendezetlensége miatt a réteg zsugorodásával fejlődő homogén deformációs tér hatására a lokális lavinák véletlenszerűen, időbeli korreláció nélkül bukkannak fel. Így a lokális lavinák időbeli előfordulása Poisson-folyamatként írható le, ahol az R rendszerméret és az s zsugorodási sebesség hatása az, hogy nagyobb rendszerben nagyobb számú gyenge

pont áll rendelkezésre, ahol a repedések nukleálódhatnak, illetve nagyobb s alakváltozási sebességnél gyorsabban elérhetők a következő lokális lavina kiváltásához szükséges deformációs növekmények. Ennek következtében egy homogén rendszerben a lavinák $\langle r \rangle$ átlagos nukleációs rátájának arányosnak kell lennie a rendszer R^2 térfogatával (itt a területével) és az s zsugorodási sebességgel, így $\langle r \rangle \sim sR^2$ érvényes. Az 5b. ábrán látható, hogy a lokális lavinák $p(t_w)$ várakozásiidő-eloszlásait sR^2 -tel átskalázva a különböző R rendszerméretek és s zsugorodási ráták mellett kapott eloszlások egymásra ejthetők. A skálafüggvény jól közelíthető exponenciális függvénnyel, ahogy az a Poisson-folyamatok esetében várható.

Az eredmények arra utalnak, hogy a globális repedezési aktivitás pulzusainak nem univerzális statisztikáját a rendszerben véletlenszerűen, korreláció nélkül felbukkanó, időben átfedő lokális repedéslavinák szuperpozíciója okozza. Az átfedés jelentőségét a $\langle t_w \rangle$ átlagos várakozási idő és a $\langle T \rangle$ átlagos lavina-időtartam arányával lehet számszerűsíteni. Az 5c. ábra azt mutatja, hogy a $\langle t_w \rangle / \langle T \rangle$ arányt az sR^2 szorzat függvényeként ábrázolva az összes szimuláció eredménye egy csökkenő, -1 exponensű hatványfüggvényre esik, azaz $\langle t_w \rangle \sim 1/sR^2 \sim 1/\langle r \rangle$ teljesül, ami megerősíti a lokális lavinák időbeli előfordulásának homogén Poisson-statisztikáját. Az ábrából az is látható, hogy kellően kis R rendszerméretek és s terhelési sebességek esetén az átlagos várakozási idő jelentősen nagyobb lehet, mint a lavinák időtartama $\langle t_w \rangle / \langle T \rangle \gg 1$, ami azt jelenti, hogy a lavinák jól elkülönülő események sorozatát alkotják, amelyek időbeni átfedésének alig van lehetősége. A nagy R és s esetén kapott $\langle t_w \rangle / \langle T \rangle \ll 1$ érték azonban a lokális lavinák erős időbeli átfedésére utal. Az sR^2 szorzat nagyon nagy értékei esetén ez az átfedés annyira domináns lehet, hogy gyakorlatilag az összes lokális lavina egyetlen vagy csak néhány pulzusba kerülhet. Ezt alátámasztja a pulzusok $p(t_w)$ várakozásiidő-eloszlásának alakulása is az R rendszermérettel és az s deformációs sebességgel [9].

Numerikus eredményeink alapján feltételezzük, hogy a pulzusmennyiségek eloszlásainak τ_h és α karakterisztikus exponensei lineárisan függnek a lokális lavinák $\langle r \rangle$ nukleációs rátájától

$$\tau_h = \tau_l - a \langle r \rangle, \quad (3)$$

$$\alpha = \alpha_l - b \langle r \rangle, \quad (4)$$

ahol a és b illesztéssel nyerhető konstansok. A fenti összefüggések kifejezik azt is, hogy a zérus hajtás $\langle r \rangle \rightarrow 0$ határesetében a τ_h és α exponenseknek a lokális lavinák megfelelő τ_l és α_l exponenséhez kell konvergálniuk. Az 5d. ábrán látható, hogy a (3) és (4) összefüggések az R rendszerméret és az s zsugorodási sebesség együttes hatásának kielégítő leírását adják az integrált jel exponenseire az $a = 0,0015 \pm 0,0003$ és $b = 0,0010 \pm 0,0004$ értékekkel.

6. Összefoglalás

Kimutattuk, hogy a rendezetlen anyagok homogén rétegének zsugorodása a repedezés szakaszos időbeli fejlődéséhez vezet. Ez a folyamat csendes időszakokkal elválasztott aktivitási kitörések, vagyis pulzusok sorozataként írható le. A pulzusok mérete és időtartama skálafüggetlen statisztikát követ, hasonlóan más repedésjelenségekhez, azonban az univerzális viselkedéstől eltérően a rendszer méretétől és a zsugorodás sebességétől függő, nem univerzális exponensekkel jellemezhető.

Számításaink feltártak egy nagyon érdekes univerzális mikroskálájú folyamatot, amely az integrált jel nem univerzális tulajdonságainak hátterében áll. Megállapítottuk, hogy a mikropredések lokális lavinait univerzális skálázási törvények jellemzik. A deformációs tér homogenitása és a réteg korrelálatlan térbeli rendezetlensége miatt a lokális lavinák időbeli előfordulása Poisson-folyamatot követ. Ugyanakkor a globális repedésaktivitás nem univerzális jellegét az időben átfedő lokális mikropredés-lavinák szuperpozíciója okozza. Elemzésünk azt mutatja, hogy az integrált jel pulzusainak méret- és időtartam-eloszlásában megfigyelhető hatványfüggvény-exponensek a lavinák nukleációs rátájának növekedésével lineárisan csökkennek a lokális lavinák univerzális exponenseitől indulva.

Eredményeink magyarázatot adnak a zsugorodási folyamat során fellépő repedési zaj nem univerzális statisztikai jellemzőire, és hozzájárulhatnak új, roncsolásmentes eljárások fejlesztéséhez, például akkumulátorok degradációs folyamatainak monitorozása terén.

Irodalom

- Goehring L., Nakahara A., Dutta T., Kitsunezaki S., Tarafdar S. (2015): Desiccation Cracks and their Patterns: Formation and Modelling in Science and Nature. John Wiley & Sons.
- Nakahara A., Hiraoka T., Hayashi R., Matsuo Y., Kitsunezaki S. (2019): Mechanism of memory effect of paste which dominates desiccation crack patterns. Phil. Trans. R. Soc. A 377, 20170395.
- Nam K. H., Park I. H., Ko S. H. (2012): Patterning by controlled cracking. Nature 485, 221.
- Sethna J. P., Dahmen K. A., Myers C. R. (2001): Crackling noise. Nature 410, 242.
- Xia Q., et al. (2017): Cracking behaviour of restrained cementitious materials with expansive agent by comprehensive analysis of residual stress and acoustic emission signals. Adv. Cem. Res. 29, 81.
- Lee S.-M., Kim J.-Y., Lee J., Byeon J.-W. (2023): Evaluation of cracking damage in electrode materials of a LMO/Al-Lix lithium-ion battery through analysis of acoustic emission signals. J. Mat. Res. Tech. 24, 5235.
- Szathmári R., Halász Z., Nakahara A., Kitsunezaki S., Kun F. (2024): Discrete element model for the anisotropic cracking of shrinking material layers. Int. J. Sol. Struct. 299, 112890.
- Szathmári R., Halász Z., Nakahara A., Kitsunezaki S., Kun F. (2021): Evolution of anisotropic crack patterns in shrinking material layers. Soft Matter 17, 10005.
- Szathmári R., Nakahara A., Kitsunezaki S., Kun F. (2024): Scale-free bursting activity in shrinkage induced cracking. Sci. Rep. 14, 7101.

PARADOX JÁRVÁNYDINAMIKA VISELKEDÉSVEZÉRELT HÁLÓZATOKON

Kolok Balázs Csegő^{1,2}, Ódor Gergely^{2,3}, Keliger Dániel^{2,4}, Karsai Márton^{2,3,@}

¹ELTE Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Matematikai Intézet, Budapest

²HUN-REN Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet, Egészségbiztonság Nemzeti Laboratórium, Budapest

³Department of Network and Data Science, Central European University, Vienna, Austria

⁴Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Természettudományi Kar, Matematikai Intézet, Budapest

@E-mail: karsai.marton@gmail.com

Nem is olyan régen saját bőrünkön tapasztalhattuk meg, hogy egy súlyos járványhelyzet mennyire fel tudja forgatni életünket. Egy világjárvány mindennapi cselekedeteinkre, társas kapcsolatainkra és a gazdasági folyamatokra is nagy hatást gyakorol [1, 5]. A COVID-19 alatt volt alkalmunk megismerkedni különböző védekezési formákkal, melyeket hol hatósági utasításra, hol saját elhatározásunkból követtünk [3, 16]. Sokunk számára most először mindennaposá vált a maszkviselés [15], a fokozott higiénia gyakorlása [11], a távolságtartás [2, 14] vagy az összejövetelek létszámkorlátja [6, 29]. Bár ilyenfajta elővigyázatosságra ma már ritkábban kell odafigyelnünk, a prevenciós viselkedés és a járványterjedés kapcsolata továbbra is fontos kutatási téma maradt. Ebben a cikkben olyan *óvatosságfüggő* adaptív hálózati járványmodellekkel [9, 30–32] foglalkozunk, amelyben az egyes emberek aktuális védekezési szintje dinamikusan függ attól, hogy az adott pillanatban milyen súlyosnak érzékelik a körülöttük kialakult járványhelyzetet.

Ebben a kontextusban *lokális óvatosságnak* [34] hívjuk azt a mechanizmust, amikor az emberek közvetlen környezetük hatására változtatják meg viselkedésüket. Például, ha családjukban vagy baráti körükben növekszik a betegek száma, akkor fokozottan elővigyázatosak lesznek, ami jelentősen csökkentheti a betegség terjedésének esélyét. Sok járványterjedési modellben foglalkoztak már korábban a lokális óvatosság hatásaival [8, 13,

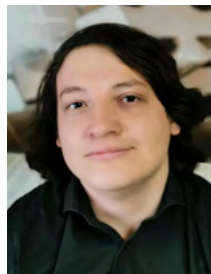
18, 26], mi több, a COVID-19-járvány alatt valós adatokon is mérték ezeket a szokásokat [24]. Kutatásunk ezen modellek definíciójából indul ki, de egy korábban még nem megfigyelt jelenségre fókuszál.

Az emberek különböző okok miatt változtathatnak a lokális óvatosságukon, ahogy ezt korábbi, a COVID-19-járvánnyal kapcsolatos kutatásokból is megtudhatjuk. Ezek az eredmények azt mutatták meg, hogy a járvány során a fiatalabbak inkább mások megfertőzésétől tartottak, míg az idősebbek elsősorban saját maguk védelmére koncentráltak [10, 28]. Emellett a foglalkozás és a társadalmi vagy gazdasági státusz szintén befolyásolhatta a védekezésre való hajlandóságot [25].

Érdeemes tehát olyan modelleket építeni, amelyekben meg tudjuk vizsgálni ezen motivációs különbségek hatását. Ehhez az egyik legáltalánosabb járványterjedési modellt, az úgynevezett susceptible-infected-susceptible (SIS) járványmodell módosított verzióját használjuk. Ez a modell azt feltételezi, hogy a járvány során egy egyén kizárólag két egészségi állapotban lehet: fogékony (susceptible) vagy fertőzött (infected); és azt írja le, hogy egy adott pillanatban hány ember tartózkodik ezekben az állapotokban. A modellezett járvány során, ha egy fogékony (S állapotban lévő) egyén egy fertőzött (I állapotban lévő) másik egyénnel találkozik, akkor β_0 rátával kapja el tőle a fertőzést. Azonban egy fertőzött egyén μ rátával spontán módon meggyógyulhat minden



Kolok Csegő az ELTE alkalmazott matematikus PhD-hallgatója. Kutatási területe a járvány- és véleményterjedés modellezése; illetve további érdeklődési körébe tartoznak még a gráfalgoritmusok és a hipergráfok. Alap- és mesterszakos diplomáját is az ELTE-n szerezte alkalmazott matematikából. Munkáját az Egészségbiztonság Nemzeti Laboratórium támogatja.



Keliger Dániel BME-n végzett alkalmazott matematika szakon, jelenleg ugyanitt matematikus PhD-hallgató, a HUN-REN Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet kutatási segédmunkatársa a Dynasnet kutatócsoportban. Kutatási területe a sztochasztikus részecske-rendszerek vizsgálata nagy méretű gráfokon. Publikációi járvány modellek átlagtér-közelítésének pontosságával foglalkoznak.



Ódor Gergely a svájci SNSF Postdoc Mobility Fellowship által támogatott posztdoktori kutató (Central European University, Bécs). Kutatási területei: a járványterjedés modellezése és adatvezérelt vizsgálata. Doktori disszertációjában (EPFL, 2022) matematikai bizonyításokat és adatlapú elemzéseket végzett az első fertőző egyének eloszlása és lokalizációja kapcsán.



Karsai Márton az MTA doktora, a Central European University (Bécs) Hálózat és Adattudományi Tanszékének tanszékvezető docense, valamint a HUN-REN Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet kutatóprofesszora. Fő kutatási területe a hálózattudomány, a számítástudomány, és az adattudomány metszetébe esik, ahol az emberi dinamika számos területének, valamint járványterjedési folyamatok és társadalmi-gazdasági hálózatok adatvezérelt megfigyelésével és modellezésével foglalkozik.

időlépésben, és így újra fogékonyá válik a fertőzésre. Ebben a modellben tehát a meggyógyult egyének nem tesznek szert immunitásra. Az egyének között kialakult kapcsolatokat egy hálózat segítségével írjuk le, ami azt mondja meg, hogy egy adott pillanatban ki-kivel lépett kapcsolatba. Ez a hálózat az egyszerűség kedvéért nem változik az idővel, tehát minden időpontban ugyanazok az egyének kerülnek kapcsolatba egymással.

A lokális óvatosságot egy függvény segítségével modellezzük (amit később vezetünk be pontosan), de effektív módon azt adja meg, mekkora mértékben csökkenti egy egyén a kapcsolatainak a számát, ha egy adott számú fertőző van a szomszédságában. Ezt a viselkedést három különböző módon vezetjük be az alapmodellbe: i) *S-óvatos*, amikor csak a fogékony egyének figyelnek környezetükre egészségük védelme érdekében; ii) *I-óvatos*, amikor csak az adott pillanatban lévő fertőzöttek óvatosak a környezetük érdekében; és iii) *SI-óvatos*, amikor mind a fogékony, mind a fertőzött egyének, tehát mindenki figyel a környezetében lévő fertőzöttek számára. Egyértelmű, hogy ha bárki óvatos a hálózatban, az általában növeli a járvány küszöbértékét [20, 22, 27, 34], azaz azt a legalacsonyabb vírusterjedési rátát, amire a járvány már tartósan fennmarad a populációban. Továbbá az sem meglepő, hogy az I-óvatos modell hatékonyabban csökkentheti a járvány méretét, mint az S-óvatos modell [9].

Abban az esetben ha feltennénk a kérdést, hogy melyik óvatossági modellt válasszuk a legenyhébb járvány lefutásához, intuitív módon feltehetően az SI-óvatos modellre esne a választásunk, mivel abban az esetben védekeznek a legtöbben. Eredményeink ellenben egy meglepő jelenséget tárnak elénk: bizonyos feltételek mellett (részletek később), az I-óvatos modell – amikor csak a fertőzöttek óvatosak – alacsonyabb fertőzési számhoz vezethet, szemben az SI-óvatos modellel. Máshogy megfogalmazva, előfordul, hogy több óvatos ember paradox módon nagyobb járványt eredményez. Elsőre hihetetlennek tűnik az állítás, de néhányunk fejében mégis felderenghet hasonló jelenség a Braess-paradoxon kapcsán [4]. Dióhéjban Braess játékelméleti paradoxonja arról szól, hogy hiába épít valaki egy új, gyorsforgalmi sztrádát egy úthálózatban, nem biztos hogy ezzel csökkenti a menetidőt, ha azt éppen rossz helyre tervezi. A járványok és a Braess-paradoxon közötti kapcsolatot játékelméleti környezetben már vizsgálták [36], azonban ezzel szemben mi egy hálózati jelenséget tárunk fel. Eredményeinket (korábban angol nyelven is megjelent [19]) elméleti módszerekkel és az SIS modell metastabil állapotának intuitív elemzésével támasztjuk alá a három fajta óvatossági modell esetében.

Modellek és módszerek

A cikk során rendszeresen fogunk használni bizonyos aszimptotikus egyenlőségeket. Feltételezzük, hogy ha a_n, b_n sorozatok, akkor:

$$a_n \sim b_n \quad \text{ha} \quad a_n/b_n \rightarrow 1$$

és

$$a_n \asymp b_n \quad \text{ha} \quad c_1 \leq a_n/b_n \leq c_2$$

valamely c_1, c_2 konstansokra.

Mint írtuk, az emberi társadalmat egy hálózattal reprezentáljuk. Az egyéneket a csúcsok V és a köztük fellépő kapcsolatokat az élek E halmaza határozza meg. A hálózat előállítására a Chung–Lu-modellt [7, 33] használjuk, amely az Erdős–Rényi-féle véletlengráf-modell egyik általánosítása. A modell a következő: egy n csúcsmű hálózatban minden lehetséges i és j csúcspár között $w_{ij} := \kappa(d_i d_j)/D$ valószínűséggel behúzzunk egy élt, ahol $D = \sum_i d_i$ a fokszámok összege, $\kappa > 0$ a hálózat sűrűségét szabályozó paraméter, és d_i egy γ kitevőjű hatványtörvény-eloszlásból kapott fokszámsorozat [7]. Így egy skálafüggetlen hálózatot kapunk, ahol annak a valószínűsége, hogy egy véletlenül választott csúcs éppen k fokú, $P(k) \asymp k^{-\gamma}$. Tehát sokkal több kis fokszámú csúcs van a hálózatban, mint nagy fokszámú. Megjegyezzük, hogy az így kialakult hálózatban egy tetszőleges i csúcs várható foka κd_i -vel egyenlő. A γ paraméter csökkentésével egyre inhomogénebb hálózatokat kapunk. Ha $\gamma \in (2, 3)$ akkor bár az átlagos fokszám véges, a fokszám varianciája végtelenhez tart, ha n -nel végtelenbe tartunk, vagyis így bizonyos csúcsoknak extrém sok kapcsolata lesz. Ellenben, $\gamma > 3$ esetén a variancia is véges marad.

Az SIS-folyamat kevés fertőzött csúcspontból elindítva bizonyos idő elteltével egy egyensúlyi helyzetbe kerül, ahol – csekély fluktuációtól eltekintve – ugyanannyian fertőződnek meg, mint ahányan meggyógyulnak egy időlépésen belül. Szigorúan véve ez az állapot nem áll fenn a $t \rightarrow \infty$ határesetben, mivel egységnyi idő alatt habár kicsi, de pozitív eséllyel véletlenül az összes fertőzött csúcs meggyógyulhat. Végtelen idő alatt pedig a kis valószínűségű események is előbb-utóbb megtörténnek. Ezután a folyamat megáll, mivel ha minden csúcs már csak fogékony, nincs fertőzött, amely megfertőzhetné őket. Ez azonban nagy populációk esetén csak nagyon későn valósul meg, és hosszú időn keresztül egy egyensúlyhoz hasonló állapotban marad a rendszer, melyet *metastabil* állapotnak nevezünk. Annak a valószínűségét, hogy az i -edik csúcs fertőzött a metastabil állapotban, u_i -vel jelöljük.

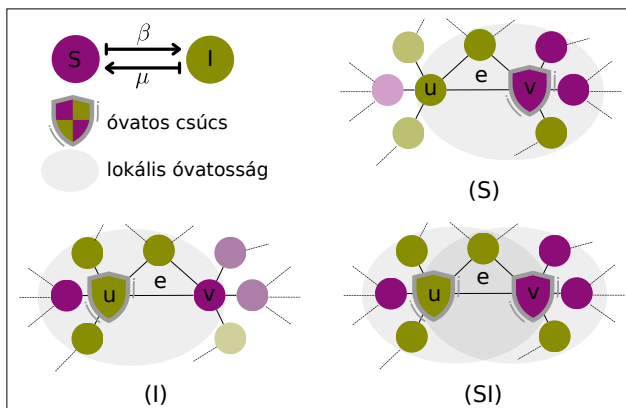
Ahhoz, hogy a lokális óvatosságot figyelembe vegyük egy *óvatossági függvényt* vezetünk be, hasonlóan a [34, 35] cikkekhez. Ha egy u fertőzött és egy v fogékony csúcs között létezik él, akkor u a v -t a következő valószínűséggel fertőzi meg:

$$\beta(u, v, t) = \beta_0 a(v, t)^{a_s} a(u, t)^{a_i}, \quad (1)$$

ahol az óvatos v csúcs óvatosságfüggvénye $a(v, t) = \exp\{-N_I(v, t)\}$, és a v csúcs fertőző szomszédainak száma t időpontban $N_I(v, t)$. Hasonlóan, $a(u, t) = \exp\{-N_I(u, t)\}$. Ebben a definícióban az a_s és a_i konstansok a lokálisóvatosság-modell típusát határozzák meg:

- i) S-óvatos (M_S), ahol $a_s = 1$ és $a_i = 0$ (csak a fogékony csúcsok figyelnek),

- ii) I-óvatos (M_I), ahol $\alpha_S = 0$ és $\alpha_I = 1$ (csak a fertőzött csúcsok figyelnek),
 iii) SI-óvatos (M_{SI}), ahol $\alpha_S = \alpha_I = 1$ (mindenki tudatosan figyel a környezetére).



1. ábra. Lokális óvatosság a társadalomban. Az SIS modell állapotai és átmeneti paraméterei: S – fogékony; I – fertőző; β – terjedési ráta; μ – gyógyulási ráta. Az ábrán az óvatos csúcsokat egy pajzzsal, az óvatosságfüggvények kitevőiben szereplő csúcsokat pedig árnyékolt területtel szemléltetjük az (S) S-óvatos (M_S), (I) I-óvatos (M_I) és (SI) SI-óvatos, (M_{SI}) modellek esetén

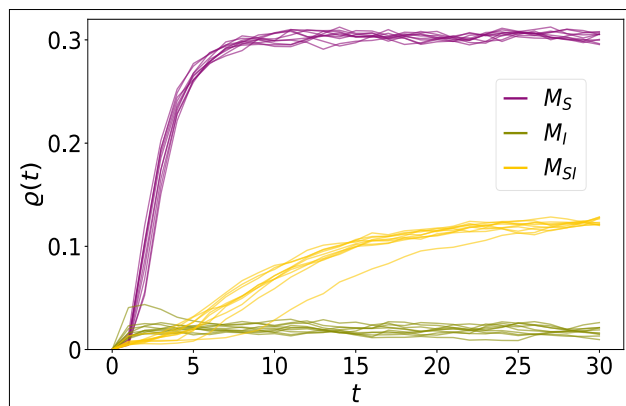
Ezeket az eseteket az 1. ábrán szemléltetjük, azt demonstrálva, hogy hogyan számoljuk az óvatosságfüggvény kitevőiben szereplő fertőzött szomszédok számát a különböző modellekben.

Eredmények

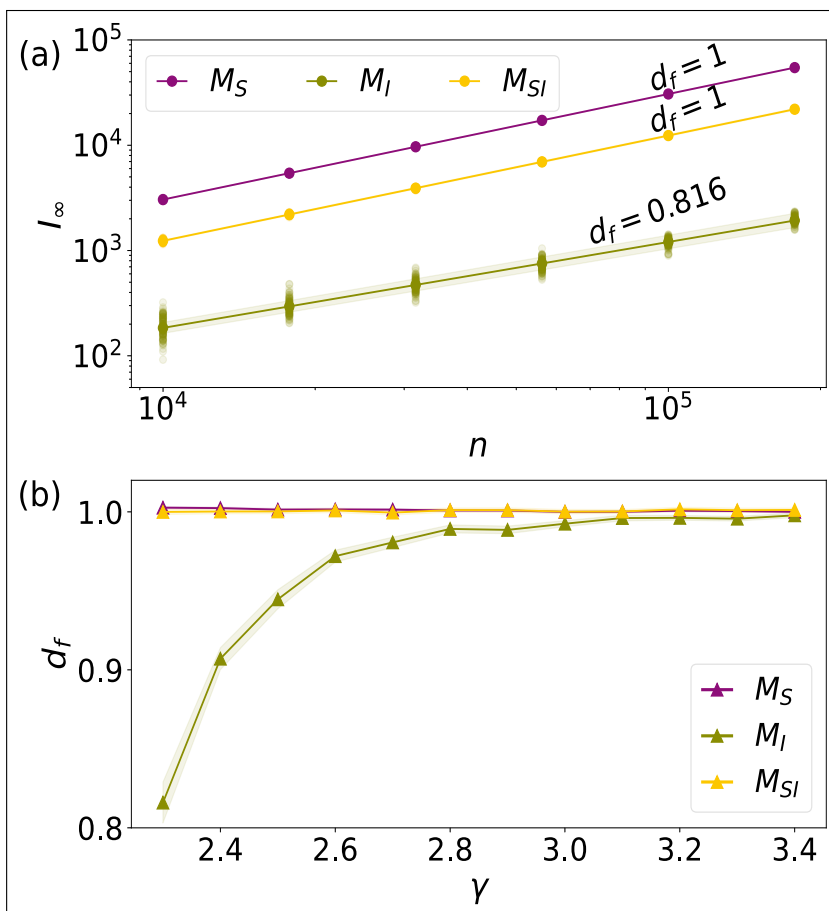
A három különböző modell vizsgálatához egy számítógépes járványszimulátort fejlesztettünk. A szimulációk során eredetileg azt várnánk, hogy az M_{SI} modellben, amelyben minden csúcs óvatos, rendszerint a legkevesebb fertőzött jelenjen meg, szemben a M_S és M_I modellekkel, amelyekben kevesebben óvatosak a folyamat során. Azonban érdekes módon a megfigyeléseink alapján ez nem mindig igaz.

A 2. ábrán láthatjuk, hogy $\gamma = 2,3$ és $\kappa = 10$ hálózati paraméterek mellett az M_I modell vezet a legkevesebb fertőzéshez a folyamat metastabil állapotában. Ez egy rendkívül ellentmondásos eredmény: annak ellenére, hogy kevesebb az óvatos csúcs az M_I modellben, a járvány enyhébb lesz, mint az M_{SI} modellben, amikor minden csúcs óvatos. Mielőtt magyarázatot adnánk a jelenségre, járjuk körbe a járványméret aszimptotikus visel-

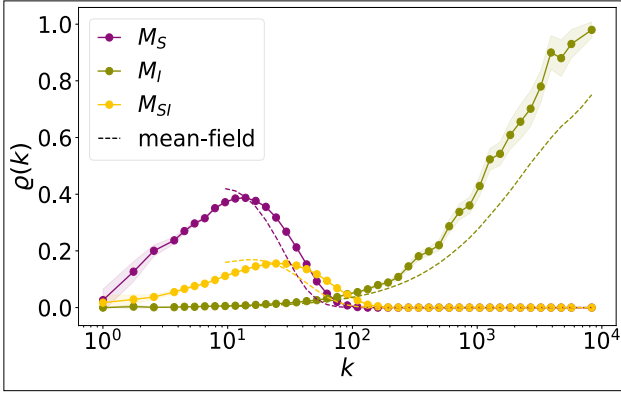
kedését, hogy kizárjuk annak lehetőségét, hogy csak kis hálózatokra kapunk paradox eredményt, és nagyobbakra eltűnik a jelenség.



2. ábra. A fertőzés sűrűsége az idő függvényében. A sztochasztikus szimulációk szerint az első iterációk alatt az M_I modellben a legmagasabb a sűrűség, ezután következik az M_{SI} és az M_S . Néhány lépés után azonban a sorrend megfordul és stabilizálódik a folyamat. Ezután paradox módon a fertőzési sűrűség az M_I modellben a legalacsonyabb. Az ábrán 10 futás látható 10^4 csúcsból álló $\gamma = 2,3$ exponensű skálafüggetlen hálózaton, $\kappa = 10$, $\beta = 0,6$, $\mu = 0,3$ paraméterekkel



3. ábra. (a) A d_f fraktáldimenzió meghatározása az I_∞ metastabil járványméret és az n hálózati méret között egy logaritmus skálán való egyenes illesztésével történik. A Chung–Lu-hálózat paraméterei: $\gamma = 2,3$ és $\kappa = 10$; terjedési paraméterek: $\beta = 0,6$, $\mu = 0,3$. A fraktáldimenziót az illesztett egyenes meredeksége adja meg. (b) Ha a fókusz eloszlás exponense $\gamma < 3$, akkor az M_I modell fraktáldimenziója 1-nél kisebb, míg az M_S és M_{SI} modelleké 1 marad. Paradox módon az M_I modellben a fertőzés kisebb, annak ellenére, hogy az M_{SI} modellben többen védekeznek



4. ábra. A metastabil állapotban lévő fertőzés $\rho(k)$ sűrűsége a k fokszám függvényében, szimulációkban (folytonos vonal) és átlagtér numerikus közelítésben (szaggatott vonal). Az M_S és M_{SI} modellekben a fertőzés főként az alacsony fokszámú csúcsokon koncentrálódik, míg az M_I modellben a magas fokszámú csúcsokon

A metastabil állapotban a fertőzöttek teljes száma: $I_\infty = \sum_i u_i$. A hálózat méretét, n -et növelve I_∞ növekedését vizsgáljuk úgy, hogy az úgynevezett d_f *fraktáldimenzióját* mérjük, melynek definíciója

$$d_f := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log I_\infty(n)}{\log n}.$$

Szemléletesebben, d_f a fertőzés hálózati méret-függésének kitevőjét írja le, hiszen $I_\infty \approx n^{d_f}$. Nagy méretű járványok esetén tehát a kisebb d_f nagyságrendekkel kisebb metastabil fertőzésszámot is jelent. A fraktáldimenzió mérését a 3a. ábrán mutatjuk be részletesebben.

Az óvatosság nélküli superkritikus SIS modellekben, ahol a járvány nem hal ki nagyon hamar, I_∞ lineárisan függ a hálózat méretétől [23]. Ez azt jelenti, hogy a fraktáldimenziója a legnagyobb értéket veszi fel ($d_f = 1$). A 3b. ábra azt mutatja, hogy ugyanez igaz az M_S és M_{SI} modellekre is, minden γ értéknél, ami arra utal, hogy ezen óvatossági mechanizmusok aszimptotikus értelemben nem csökkentik a járvány méretét. Az ábráról azt is leolvashatjuk, hogy meglepő módon az M_I modell fraktáldimenziója szigorúan kisebb, mint 1, ha a fokszámeloszlás kitevője $\gamma < 3$. Azaz a járvány szublineárisan növekszik, ami azt jelenti, hogy elég nagy hálózatok esetén a fertőzés sűrűsége a metastabil állapotban bármely pozitív értéknél alacsonyabb lehet, sokkal alacsonyabb, mint az M_S és M_{SI} modellekben. Tehát nagyobb hálózatokra nem eltűnik a paradox jelenség, hanem inkább éppen felerősödik.

Ha a fertőzés sűrűségét megmérjük az egyes fokszám-csoportokra (lásd 4. ábra), akkor a három óvatosságmódel jelentősen különböző görbéket produkál. Ebből az eredményből egy intuitív magyarázatot találhatunk a paradoxonra. Az M_S és M_{SI} modellekben a fertőzöttek aránya az alacsony fokszámú csúcsoknál a legnagyobb (10–50 fokszámúak), következésképpen a fertőzöttek száma magas, mivel ezen csúcsok alkotják a hálózat nagy részét. Ezzel szemben az M_I modellben a fertőzések a magas fokszámú csúcsokon összpontosulnak (1000 fokszám felett),

míg az alacsony fokszámú csúcsok alig fertőződnek meg, ami alacsony fertőzési számhoz vezet. Más szavakkal kifejezve, a lokális óvatosság a metastabil fertőzés eloszlása miatt nagyobb hatást vált ki az M_I modellben, mint az M_{SI} modellben, ahol a potenciálisan nagyobb óvatosság alakulhatna ki.

Az M_I modellben a kevés nagy fokú csúcs a hozzájuk kapcsolódó alacsonyabb fokú csúcsok számára megnöveli a fertőzöttség érzékelt mértékét, így egyfajta figyelmeztető jelként védve meg a populációt a betegség terjedésétől. Azonban ha ezek a csúcsok inkább saját maguk védelmében érdekeltek, mint az M_{SI} és M_S modellekben, akkor ezek a nagy fokú csúcsok szinte soha sem fertőződnek meg, és így nem is figyelmeztetik a szomszédait. Bár a nagy fokú csúcsok hatásának hiánya lelassítja a betegség terjedését a fertőzés nélküli nullmodellhez képest, az alacsony fokú csúcsok kapcsolatai megmaradnak, és a csúcsok egy pozitív hányada fertőzött marad a stacionárius állapotban. Így az óvatosság hatása jóval kisebb ezekben az esetekben.

Hogy az M_I modell fertőzési eloszlásának kialakulásáról is említést tegyünk, vegyünk egy fogékony nagy fokú csúcsot. Mivel ebben a modellben csak a betegek védekeznek, ez a nagy fokszámú csúcs eleinte nem óvatoss, de viszonylag sok fertőzött szomszédja miatt nagy valószínűséggel fertőzött lesz a következő iterációra. Ezért az M_I modellben a nagy fokú csúcsok majdnem mindig betegek lesznek, amiből már az említett módon a nagy óvatosság miatt a kis fokú csúcsok között nem alakul ki magas fertőzöttségi arány.

Szemléletesen képzeljük el, hogy az M_I modellhez hasonlóan valami oknál fogva egy járvány alatt a népszerű, híres emberek között magasabb arányban lesznek fertőzöttek. Ez feltehetően sok embert motiválna fokozott védekezésre a járvány ellen, ami nagyban csökkentené a betegség terjedését a társadalomban. Ellenben vegyük azt az esetet, amikor a népszerű emberek könnyen el tudják kerülni a fertőzést. Ekkor az M_{SI} és M_S modellekhez hasonlóan alacsonyabb lenne a fertőzés közöttük, ami jóval kisebb hatást gyakorolna a társadalom védekezésére, és egy nagyobb járványhoz vezetne.

Elméleti eredmények

A paradox jelenséget eddig intuitívan, szimulációk segítségével igyekeztünk megérteni, azonban igazi bizonyosságot matematikailag precíz tételek bizonyításán keresztül érhetnénk el. Sajnálatos módon a modell explicit képletek levezetéséhez túlságosan is bonyolult, így kompromisszumként további egyszerűsítéseket kell alkalmaznunk, majd egy így kapott közelítő modelltől tudunk bizonyítani állításokat. A levezetés részletei egy korábbi cikkben jelentek meg [19], így az alábbiakban csak egy áttekintést nyújtunk az elméleti eredményekről.

Először is feltesszük, hogy a hálózatunk *izzított*, vagyis a véletlen egyszerű gráf adjacencia- (azaz szomszédsági) mátrixát a várható értékével helyettesítjük, és

az i, j csúcsok közé determinisztikus κw_{ij} élsúlyokat helyezünk.

Ezenkívül feltesszük az átlagtér közelítést, amely a csúcsok állapotát statisztikailag függetlennek kezeli. Az u_i kiszámításához szükségünk van például annak az eseménynek a valószínűségére, hogy az i -edik csúcs fogékony, a j -edik pedig fertőzött. Függetlenség esetén ez a valószínűség $(1 - u_i)u_j$ -vel egyenlő. Általánosabb esetben a csúcsok valószínűségeinek meghatározásához szükségünk lenne a párok valószínűségeire, amelyhez pedig a hármasok valószínűségeire, amelyekhez a négyesek valószínűségeire, és így tovább.

Jelölje a fertőzött félélek (élek, melyeknek csak egyik vége van lekötve egy csúcsponthoz) arányát

$$\theta = \frac{1}{D} \sum_i d_i u_i,$$

ahol $D = \sum_i d_i$. Érdekes módon a ChungÜLu-modellben a fertőzött félélek aránya egy véletlenül választott csúcs fertőzött szomszédainak arányát közelíti, tehát θ a járvány „érzékel” méretét írja le.

Az első eredményünk θ aszimptotikus nagyságrendjére vonatkozik. Mindhárom óvatosságmodellben igaz, hogy

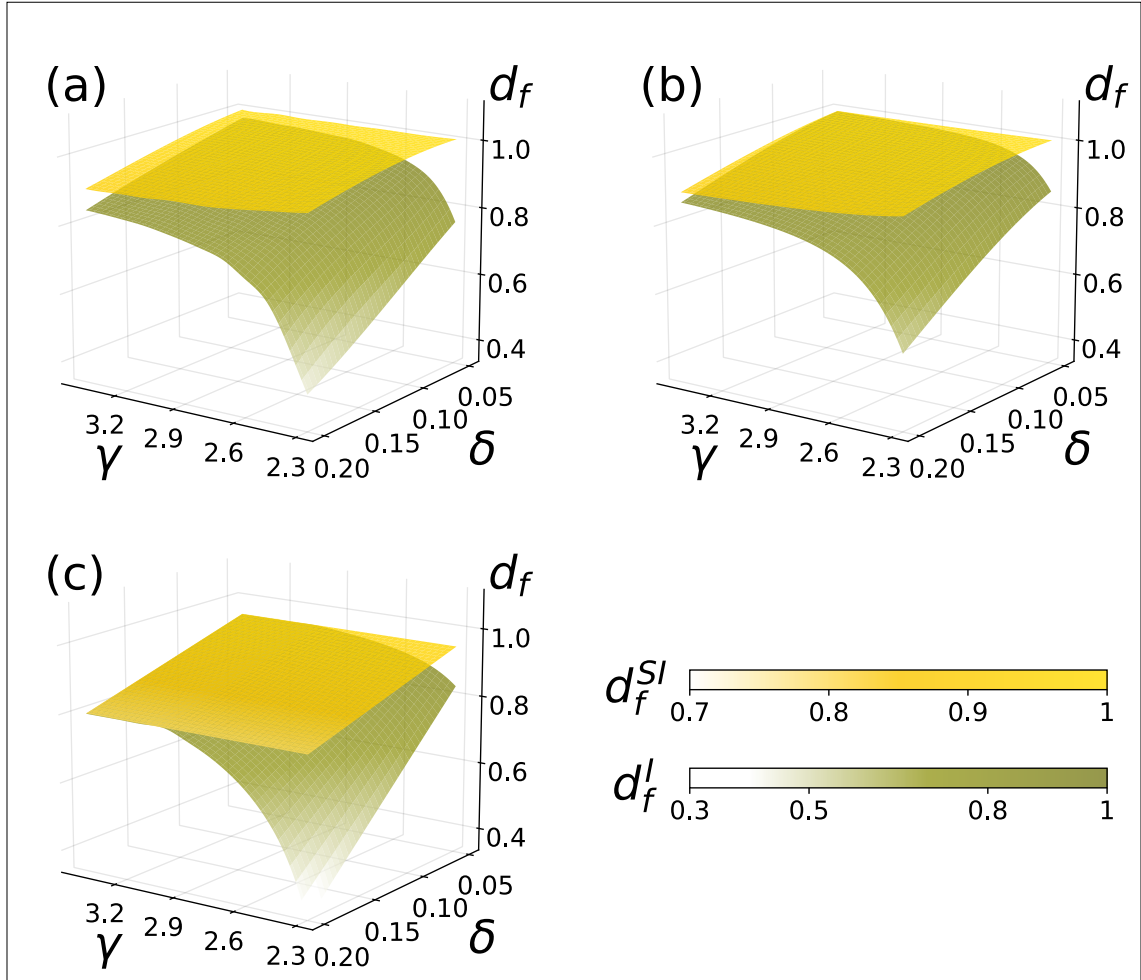
$$\theta \sim \frac{1}{\alpha_s + \alpha_i} \frac{\log \kappa}{\kappa}. \quad (2)$$

Ez az eredmény egyezik az első intuíciónkkal, hogy magasabb $\alpha_s + \alpha_i$ alacsonyabb fertőzési arányt kellene hogy eredményezzen. Más szóval, a járvány érzékelt méretében nincs paradoxon. Azonban a meglepő jelenség a járvány tényleges méretére vonatkozik.

A fertőzött csúcsok számát a fertőzött félélek számából számoljuk ki. Amikor főleg alacsony fokszámú csúcsok fertőzöttek, a fertőzési arány (I_∞/D) és a fertőzött félélek aránya (θ) hasonló méretűek. Mi több, θ felülről becsli I_∞/D -t, mivel

$$\theta = \frac{1}{D} \sum_i d_i u_i \geq \frac{1}{D} \sum_i u_i = \frac{1}{D} I_\infty. \quad (3)$$

A (3) képletben csak akkor szerepel egyenlőség, ha $u_i = 0$ minden egynél nagyobb i -re, vagyis csak akkor,



5. ábra. A fertőzöttek számának fraktáldimenziója (d_f) a fokszámeloszlás exponense (γ) és az átlag fokszám exponense (δ) függvényében az I-óvatos és az SI-óvatos modellekben. Az (a) sztochasztikus szimuláció, (b) numerikus közelítés és a (c) analitikus (6) egyenlet hasonló felületeket eredményeznek. Mindhárom megközelítésnél $\gamma \in (2, 3)$ esetén a fraktáldimenzió az I-óvatos modellben szigorúan kisebb, mint az SI-óvatos modellben

ha a levelek szinte az egyedüli fertőzött csúcsok a hálózatban. Korábban a 4. ábrán már láttuk, hogy ez a közelítés megállja a helyét az M_{SI} modellben, mely alapján ebben a modellben a (3) egyenlőtlenség is aszimptotikusan éles. Ezt az intuíciót formalizálva:

$$I_{\infty}^{SI} \sim D\theta_{SI} \asymp n\theta_{SI}. \quad (4)$$

Ezzel ellentétben az M_I modellben az u_i fertőzési valószínűségek nagy foks számokra növekednek, amitől a (3) képlet lazává válik, és I_{∞}^I aszimptotikusan kisebb lesz, mint I_{∞}^{SI} . Ezt az intuíciót formalizálva megmutatjuk, hogy a (3) képlet feszessége fázisátalakuláson megy keresztül a foks számeloszlás hatványkitevőjének függvényében. A kritikus pont $\gamma = 3$ -nál figyelhető meg, ahol a foks számeloszlás szórása végtelenné válik:

$$I_{\infty}^I \asymp \begin{cases} n\theta_I & \text{ha } 3 < \gamma, \\ n\theta_I^{\frac{1}{\gamma-2}} & \text{ha } 2 < \gamma < 3. \end{cases} \quad (5)$$

Mivel $\theta_I \asymp \theta_{SI}$ és $\theta_{SI} \rightarrow 0$, ha $\kappa \rightarrow \infty$, az (5) egyenletből következik, hogy I_{∞}^I valóban aszimptotikusan kisebb, mint I_{∞}^{SI} a $\gamma \in (2, 3)$ tartományban. Ennek eredményeképp kellően nagy hálózatok esetén igazgá válik az $I_{\infty}^I < I_{\infty}^{SI}$ egyenlőtlenség, bizonyítva a paradox eredményt.

Az egyenlőtlenség bizonyításán túl az M_I és M_{SI} modellek fraktáldimenzióit mint a foks szám és az átlagos foks szám exponensének paramétereit számszerűsíthetjük. Így a $\gamma \in (2, 3)$, $\delta \in [0, 1]$ és $\kappa = n^{\delta}$ jelöléseket alkalmazva az alábbi eredményre jutunk:

$$\begin{aligned} d_f^{SI} &= 1 - \delta, \\ d_f^I &= 1 - \frac{1}{\gamma - 2} \delta. \end{aligned} \quad (6)$$

A (6) egyenlet alapján ismételten levonhatjuk a következtetést, hogy a járvány fraktáldimenziója szigorúan kisebb az M_I modellben az M_{SI} modellhez képest heterogén ($\gamma \in (2, 3)$) és sűrű ($\delta > 0$) foks számeloszlás esetén, így demonstrálva ismét a paradoxont.

Az 5. ábrán szereplő eredmények jól demonstrálják a sztochasztikus szimulációk, a numerikus közelítés és a (6) képlet közötti egyezést. Így ezek a kvalitatív eredmények megerősítik a korábbi megfigyeléseinket, melyek szerint a paradoxon az inhomogén, sűrű hálózatokon a legerősebb.

Összefoglalás

Ebben a cikkben egy különösen meglepő, paradox jelenséget mutattunk be, ami a járványterjedés és a lokális óvatosság összjátékának eredménye. Miszerint *kevesebb* potenciálisan óvatos csúcs *jobb*an képes megfékezni a járványt, aszimptotikusan *szublineáris* fertőzésszámot eredményezve. Ezt abban az esetben tapasztaljuk, ha csak a fertőzött csúcsok óvatosak a hálózatban. Ez meglepő módon hatásosabb stratégiánk bizonyul, mint *bármely* más védekező stratégia (vagyis további lokális, globális óvatosság, állami lezárások stb.), melyek lineáris

fertőzésszámot eredményeznek. A megfigyelt paradoxon alapján az óvatos viselkedés akkor okozza a legnagyobb társadalmi hasznot, amikor mások védelmére fókuszál. Ehhez hasonló állítást már korábban is megfogalmaztak a járványküző esetére [9], azonban nekünk a metastabil állapotban kialakuló fertőzöttszámra sikerült ezt az állítást demonstrálnunk. Magyarázatunk során arra jutottunk, hogy a paradoxon a hálózat heterogenitásának, a betegség hálózaton belüli megoszlásának és az emberi óvatosságnak közös eredménye.

Bár a megfigyeléseket szimulációkkal és matematikai elemzésekkel demonstráltuk, ezen eszközöknek is vannak korlátaik. Az implementált óvatossági modellek csupán közelítései a valóságnak. Például a modellezés során feltesszük, hogy mindenki ugyanazon óvatossági függvény szerint védekezik, ami nem feltétlen igaz. Ezért a pontosabb modellezés érdekében további tanulmányokra van szükség az emberi viselkedés és a járványok kapcsolatának területén.

További limitáció, hogy a foks számeloszlás a valós kontakthálózatokban gyakran homogénebb, mint a modellekben használt hatványeloszlás. Ráadásul a betegségről szóló információ akár egy teljesen más hálózaton is terjedhet, mint a betegség maga. Ezen kérdések miatt a következő kutatásainkban egy olyan hálózaton keressük majd a paradox jelenséget, ahol a kapcsolati hálózat homogénebb, míg az információs hálózati réteg, ahol az emberek tájékozódnak egymás állapotáról, heterogénebb fokeloszlást követ [12, 17, 21].

Munkánk talán legfontosabb tanulsága, hogy a nagy fokú, befolyásos csúcsok kitüntetett szerepet játszanak a járvány hosszú távú dinamikájában. Zhang óvatosságvázelt járványmodelljében [35] a nagy fokú csúcsokat „kétélű kardként” említi, mivel felgyorsíthatják és le is lassíthatják a járvány terjedését attól függően, hogy a fertőzést vagy az információt terjesztik-e gyorsabban. Mi azt vizsgáltuk, hogy a befolyásos csúcsok védekezési motivációja milyen következményekkel jár a populáció egészére. Megmutattuk, hogy ha a népszerű csúcsok elsősorban mások védelmére összpontosítanak, képesek jelentősen megnövelni a járvány érzékelt méretét, aminek hatására szomszédai sokkal óvatosabbak lesznek. Az erősebb óvatosság pedig jobban kordában tudja tartani a járványt. Azt gondoljuk, hogy ez az érdekes jelenség, a matematikai háttér megértésén túl fontos támpontot adhat a járványhelyzeti védekezés vagy a kommunikációs stratégiák tervezéséhez is.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozunk Király Z., Ráth B., valamint Lovász L. tanácsaiért a kutatás során. Kolok Cs. és Karsai M. az Egészségbiztonsági Nemzeti Laboratórium (RRF-2.3.1-21-2022-00006) támogatásával vett részt a kutatásban; Ódor G.-t a Swiss National Science Foundation (P500PT-211129) támogatta, valamint Keliger D. a Dynasnet ERC Synergy projekt (Grant No. 810115) támogatottja.

1. Charles Abraham, Paschal Sheeran (2015): The health belief model. Predicting health behaviour: Research and practice with social cognition models, 2, 30–55.
2. Martin Andersen (2020): Early evidence on social distancing in response to Covid-19 in the united states. SSRN Electronic Journal, 35.
3. Przemysław Borkowski, Magdalena Jążdżewska-Gutta, Agnieszka Szmelter-Jarosz (2021): Lockdowned: Everyday mobility changes in response to Covid-19. Journal of Transport Geography, 90, 102906.
4. Dietrich Braess (1968): Über ein Paradoxon aus der Verkehrsplanung. Unternehmensforschung, 12, 258–268.
5. Victoria L. Champion, Celette Sugg Skinner, et al. (2008): The health belief model. Health behavior and health education: Theory, research, and practice, 4, 45–65.
6. Shahul H. Ebrahim, Ziad A. Memish (2020): Covid-19 – the role of mass gatherings. Travel Medicine and Infectious Disease, 34, 101617.
7. Dario Fasino, Arianna Tonetto, Francesco Tudisco (2021): Generating large scale-free networks with the Chung-Lu random graph model. Networks, 78(2), 174–187.
8. Sebastian Funk, Erez Gilad, Chris Watkins, Vincent A. A. Jansen (2009): The spread of awareness and its impact on epidemic outbreaks. Proceedings of the National Academy of Sciences, 106(16), 6872–6877.
9. Sebastian Funk, Marcel Salathe, Vincent A. A. Jansen (2010): Modelling the influence of human behaviour on the spread of infectious diseases: A review. Journal of the Royal Society Interface, 7(50), 1247–1256.
10. Alessandro Germani, Livia Buratta, Elisa Delvecchio, Claudia Mazzeschi (2020): Emerging adults and Covid-19: The role of individualism collectivism on perceived risks and psychological maladjustment. International Journal of Environmental Research and Public Health, 17(10), 3497.
11. Jilly Gibson Miller, Todd K. Hartman, Liat Levita, Anton P. Martinez, Liam Mason, Orla McBride, Ryan McKay, Jamie Murphy, Mark Shevlin, Thomas V. A. Stocks, et al. (2020): Capability, opportunity, and motivation to enact hygienic practices in the early stages of the Covid-19 outbreak in the united kingdom. British Journal of Health Psychology, 25(4), 856–864.
12. Clara Granell, Sergio Gomez, Alex Arenas (2013): Dynamical interplay between awareness and epidemic spreading in multiplex networks. Physical Review Letters, 111(12), 128701.
13. Thilo Gross, Carlos J. Dommar D’Lima, Bernd Blasius (2006): Epidemic dynamics on an adaptive network. Physical Review Letters, 96, 208701.
14. Sumedha Gupta, Kosali I. Simon, Coady Wing (2020): Mandated and voluntary social distancing during the Covid-19 epidemic: A review. Working Paper 28139, National Bureau of Economic Research.
15. Michael H. Haischer, Rachel Beilfuss, Meggie Rose Hart, Lauren Opielinski, David Wrucke, Gretchen Zirgaitis, Toni D. Uhrich, Sandra K. Hunter (2020): Who is wearing a mask? Gender-, age, and location-related differences during the Covid-19 pandemic. PLoS One, 15(10), 1–12, 10.
16. Regi Jose, Meghana Narendran, Anil Bindu, Nazeema Beevi, Manju L., P. V. Benny (2021): Public perception and preparedness for the pandemic Covid-19: A health belief model approach. Clinical Epidemiology and Global Health, 9, 41–46.
17. Jia-Qian Kan, Hai-Feng Zhang (2017): Effects of awareness diffusion and self-initiated awareness behavior on epidemic spreading-an approach based on multiplex networks. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 44, 193–203.
18. Istvan Z. Kiss, Jackie Cassell, Mario Recker, Peter L. Simon (2010): The impact of information transmission on epidemic outbreaks. Mathematical Biosciences, 225(1), 1–10.
19. Cseő Balázs Kolok, Gergely Ódor, Dániel Keliger, Márton Karsai (2025): Epidemic paradox induced by awareness driven network dynamics. Phys. Rev. Res., 1(7), L012061.
20. Can Liu, Jia-Rong Xie, Han-Shuang Chen, Hai-Feng Zhang, Ming Tang (2015): Interplay between the local information based behavioral responses and the epidemic spreading in complex networks. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 25(10), 103111, 09.
21. Emanuele Massaro, Franco Bagnoli (2014): Epidemic spreading and risk perception in multiplex networks: A self-organized percolation method. Physical Review E, 90(5), 052817.
22. Antoine Moinet, Romualdo Pastor-Satorras, Alain Barrat (2018): Effect of risk perception on epidemic spreading in temporal networks. Physical Review E, 97, 012313.
23. Mark Newman (2018): Networks. Oxford University press.
24. Gergely Ódor, Márton Karsai (2024): Epidemicinduced local awareness behavior inferred from surveys and genetic sequence data. arXiv preprint, arXiv:2406.09983.
25. Soa Pappa, Nikolaos Athanasiou, Nikolaos Sakkas, Stavros Patrinos, Elpitha Sakka, Zafeiria Barmparessou, Stamatoula Tsikrika, Andreas Adraktas, Athanasia Pataka, Ilias Migdalis, et al. (2021): From recession to depression? Prevalence and correlates of depression, anxiety, traumatic stress and burnout in healthcare workers during the Covid-19 pandemic in Greece: A multi-center, cross-sectional study. International Journal of Environmental Research and Public Health, 18(5), 2390.
26. Nicola Perra, Duygu Balcan, Bruno Gonçalves, Alessandro Vespignani (2011): Towards a characterization of behavior-disease models. PLoS One, 6(8), e23084.
27. Faryad Darabi Sahnneh, Fahmida N. Chowdhury, Caterina M. Scoglio (2012): On the existence of a threshold for preventive behavioral responses to suppress epidemic spreading. Scientific reports, 2(1), 632.
28. Akihiro Shiina, Tomihisa Niitsu, Osamu Kobori, Keita Idemoto, Tasuku Hashimoto, Tsuyoshi Sasaki, Yoshito Igarashi, Eiji Shimizu, Michiko Nakazato, Kenji Hashimoto, et al. (2020): Relationship between perception and anxiety about Covid-19 infection and risk behaviors for spreading infection: A national survey in Japan. Brain, Behavior, & Immunity-Health, 6, 100101.
29. Guillaume St-Onge, Vincent Thibeault, Antoine Allard, Louis J. Dube, Laurent Hebert-Dufresne (2021): Social connement and mesoscopic localization of epidemics on networks. Physical Review Letters, 126, 098301.
30. Alexandra Teslya, Thi Mui Pham, Noortje G. Godijk, Mirjam E. Kretzschmar, Martin C. J. Bootsma, Ganna Rozhnova (2020): Impact of self-imposed prevention measures and short-term government-imposed social distancing on mitigating and delaying a Covid-19 epidemic: A modelling study. PLoS Medicine, 17(7), e1003166.
31. Frederik Verelst, Lander Willem, Philippe Beutels (2016): Behavioural change models for infectious disease transmission: A systematic review (2010–2015). Journal of The Royal Society Interface, 13(125), 20160820.
32. Zhen Wang, Michael A. Andrews, Zhi-Xi Wu, Lin Wang, Chris T. Bauch (2015): Coupled disease – behavior dynamics on complex networks: A review. Physics of Life Reviews, 15, 1–29.
33. Fan Chung William Aiello, Linyuan Lu (2001): A random graph model for power law graphs. Experimental Mathematics, 10(1), 53–66.
34. Qingchu Wu, Xinchu Fu, Michael Small, Xin-Jian Xu (2012): The impact of awareness on epidemic spreading in networks. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 22(1), 013101.
35. Hai-Feng Zhang, Jia-Rong Xie, Ming Tang, Ying-Cheng Lai (2014): Suppression of epidemic spreading in complex networks by local information based behavioral responses. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 24(4), 043106, 10.
36. Hai-Feng Zhang, Zimo Yang, Zhi-Xi Wu, Bing-Hong Wang, Tao Zhou (2013): Braess’s paradox in epidemic game: Better condition results in less payo. Scientific Reports, 3(1), 3292.

AZ EVOLÚCIÓS JÁTÉKELMÉLET ÉS A STATISZTIKUS FIZIKA ÖSSZEFONÓDÁSA

Szabó György

HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest

E-mail: szabo.gyorgy@ek.hun-ren.hu

Evolúciós játékelmélet

A sokszereplős evolúciós játékelméleti modellek legegyszerűbb változataiban a játékosok közötti párkölcsönhatást a hagyományos játékelmélet nyereménymátrixa definiálja. A játékelmélet Neumann János által kidolgozott matematikai leírásában [1] két intelligens és önző játékos n lehetséges döntés (továbbiakban stratégia) valamelyikét választva kívánja saját nyereményét maximálni. Mindkét játékos valós számmal jellemzett nyereménye függ a saját maga, illetve a társa által választott stratégiától. Pontosabban, a nyereménymátrix i -edik sorának j -edik eleme az első játékos nyereményét számszerűsíti, ha ő az i -edik, társa pedig a j -edik stratégiát választotta. Szimmetrikus játék esetén a játékosok ekvivalensek, emiatt azonos stratégia választása esetén a nyereményük is azonos lesz. Különböző stratégia választása esetén a nyereményük lehet különböző, de ha stratégiát cserélnek, akkor a nyereményük is felcserélődik. A lehetséges kölcsönhatások halmaza jelentősen szűkül a szimmetrikus játékokon belül, amikor a játékosok nyereménye minden lehetséges stratégiapárnál azonos. Ilyenkor az egyéni és a közösségi érdek egybeesik, ami leegyszerűsíti az optimális stratégiapár meghatározását. Az ennek megfelelő evolúciós játékelméleti modellekben az optimális stratégiaeloszlás kiszámítása egybeesik a sokrészecskés fizikai rendszerek alapállapotának meghatározásával, ahol a maximális nyereményű állapot meghatározása helyett a minimális energiájú állapotot keressük.

Az evolúciós játékelmélet alap gondolata az elméleti biológia területéről indult hódító útjára. Price és Maynard Smith [2] felismerte, hogy játékelmélet nyereménymátrix-fogalma használható az egymással kölcsönható biológiai fajoknál a versengés eredményeképpen kialakuló utódlétrehozó-képesség matematikai leírására. Erre a kapcsolatra épülnek azok a populációdinamikai modellek, amelyek egy bilineáris differenciálegyenlet-rendszerrel írják le a fajok gyakoriságának időfüggését [3].



Szabó György a HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont nyugdíjas kutatója, ahol korábban a Komplex Rendszerek osztály kutatásait irányította. Kutatóként részt vesz a HUN-REN Evolúciótudomány Intézet munkájában is. Fizikus diplomáját és PhD-fokozatát oktatóként az ELTE-n szerezte. Fő kutatási területe kezdetben a szilárdtest-fizikai jelenségek elméleti vizsgálata volt. Az utóbbi 35 évben az itt megszerzett ismereteket az evolúciós játékelmélettel leírható jelenségek elemzésénél használja. Eredményeit 2021-ben Széchenyi-díjjal jutalmazták.

Az evolúciós játékelmélet további fejlődésének eredménye, hogy a játékosok közötti párkölcsönhatás paramétere mellett figyelembe kellett venni a kölcsönhatási kapcsolatrendszer és a dinamikai szabályt, ami definiálja, hogy miképpen módosítják stratégiájukat a szereplők [4, 5]. Ezek a szabályok természetesen függenek attól, hogy a játékosok stratégiája egy baktériumfajta különböző mutáns változatait, növényeket, állatokat, intelligens embereket vagy azok csoportjainak magatartását képviselik.

A szilárdtest-fizikai modellekben az atomok fajtáját, állapotát (pl. a mágneses momentum irányát), illetve az atom jelenlétét vagy annak hiányát jellemezhetjük a játékelméleti stratégia fogalmával. Ez a lehetőség indította el az anyagtudományokban kiemelkedően sikeres matematikai módszerek alkalmazását az evolúciós játékelméletben. Kezdetben ezek a módszerek erősen kötődtek a kristályos anyag tulajdonságaihoz, illetve a fizika törvényei által megengedett lehetőségekhez.

Az első térbeli evolúciós játékelméleti modellben [6] a játékosok egy négyzetrácson helyezkedtek el, és azonos stratégiát használtak a szomszédok elleni azonos játékokban. A kölcsönhatás egy szűk környezetre (pontosabban első- és esetenként másodsomszédokra) korlátozódott. A játékosok stratégiájának módosításánál a sejtautomaták dinamikai szabályát használták. Ennél az evolúciós dinamikánál a játékosok diszkrét időpontokban (pl. $t = 0, 1, 2, 3$ stb.) meghatározták az összegzett nyereményeiket, majd mindenki átvette a legsikeresebb szomszéd stratégiáját. Ezt követően a valóságnak jobban megfelelő modellezés igénye két jelentős módosítást kényszerített ki, amelyek semlegesítik az egyidejű stratégiaváltás mesterséges következményeit és megengedik a hibázást. A manapság leggyakrabban használatos dinamikai szabályoknál egy véletlenül kiválasztott játékos módosítja a stratégiáját, és ezt az elemi lépést ismételjük – hasonlóan ahhoz, ahogyan a kinetikus Ising-modellben változnak az állapotok az egyes rácspontokon [7].

A kinetikus Ising-modellben a Glauber-dinamika biztosítja azt, hogy a nagyon sok „játékosból” álló rendszer a termodinamikai egyensúly felé fejlődik. Ennél a dinamikai szabálynál a spinállapotok választásának valószínűsége az energia és a hőmérséklet arányának olyan függvénye, ami biztosítja, hogy az elegendően sok spinválogatás után kialakuló egyensúlyi állapotban egy adott mikroszkopikus állapot valószínűségét a Boltzmann-eloszlás írja le. Ebben a termodinamikai állapotban teljesül a részletes egyensúly, miszerint két mikroszkopikus állapot között az oda-vissza átmenet

valószínűsége megegyezik. Ezt a dinamikai szabályt használjuk különböző közelítő módszereknél és a Monte Carlo-szimulációkban, amikor a sokrészeszkés rendszerekben az egyensúlyi állapot makroszkopikus jellemzőit vizsgáljuk. Ezzel a dinamikai szabállyal azonos az evolúciós játékelmélet ún. „logit” dinamikája [8] azzal a különbséggel, hogy egy új stratégia választásának valószínűsége az adott játékos lehetséges új nyereményeinek és egy „hőmérséklettel” jellemzett zaj hányadosának függvénye. Az egyetlen említésre méltó különbség, hogy a sokrészeszkés fizikai rendszerben a Glauber-dinamika az alacsonyabb energiájú állapot választását támogatja. Ezzel szemben a hasonló evolúciós játékelméleti modellben a magasabb nyereményű stratégia választása érvényesül. A matematikai módszerek alkalmazásánál ez a különbség lényegtelen, és emiatt a statisztikus fizika módszereivel számszerűsítve értelmezhetőek a megfelelő evolúciós játékelméleti modellek jelenségei. Például a kétdimenziós Ising-modellben a mágnesezettség hőmérsékletfüggése leírja a stratégiák arányának zajfüggését egy olyan evolúciós játékelméleti modellben, ahol az ún. koordinációs játék definiálja a kölcsönhatást, és emellett a játékosok térbeli elhelyezkedése és kölcsönhatási kapcsolatrendszere is hasonló. A modellek hasonlósága természetesen kiterjeszthető olyan többstratégias koordinációs játékokra is, amelyek azonosak a Q-állapotú Potts-moddal [9] vagy az Ashkin-Teller-moddal [10]. Érdemes kiemelni azokat a kölcsönhatásokat, amelyek a fizikában egy külső (pl. mágneses) térnek megfelelő kölcsönhatást írnak le. Ez utóbbi esetben a szereplők egymástól függetlenül választják a külső tér által diktált stratégiát, és a stratégiák választásának valószínűségét az átlagtér-közelítés számszerűsíti.

Az anyagtudományban nagyon hasznosnak bizonyult a Kawasaki-dinamika használata, ami figyelembe veszi az anyagmegmaradást; és megfelelő rácsgázmodellekkel olyan állapotábrákat származtathatunk, amelyek a hőmérséklet és az összetétel függvényében mutatják az egyensúlyi állapotokat. A Kawasaki-dinamikánál két szomszédos atom cserélhet helyet megfelelő valószínűséggel. A hasonló játékelméleti modell egy ökológiai rendszerben két élőlény helycseréjének következményeit képes számszerűsíteni.

A Price és Maynard Smith által elindított evolúciós játékelmélet olyan biológiai rendszerek leírásának felelt meg, ahol a kölcsönhatás bármelyik két szereplő között azonos valószínűséggel befolyásolja a fejlődési folyamatot. Ez a feltétel teljesül azokban a rendszerekben, ahol a résztvevők állandó keveredése biztosított. A fizikai rendszerekben ez az idealizált kölcsönhatás jelenik meg az átlagtér-közelítésekben, ami sok esetben képes elfogadható pontossággal számot adni a folyamatokról. A szilárdtestfizikán belül a kristályos anyagoknál a szomszédságra lokalizált kölcsönhatás következményeinek pontosabb leírására számos olyan módszer (pl. a párközelítést) fejlesztettek ki, amelyek hasznosnak bizonyultak a térbeli evolúciós játékelmélet-modellek

tanulmányozásánál is. Ezzel párhuzamosan mindkét tudományterületen belül megindultak ezen módszerek sikeres továbbfejlesztései olyan esetekre, amikor a kristályrács helyett egy gráffal jellemezzük a kölcsönhatási kapcsolatrendszerrel. Ezt a folyamatot természetes módon katalizálta a hálózatkutatás fejlődése, aminek előnyei, illetve hasznossága a társadalmi és biológiai jelenségek értelmezésénél érvényesülnek.

Újdonságok a termodinamikai rendszerekhez képest

Az előző fejezet legfontosabb üzenete, hogy az evolúciós játékelméleti modellek egy részhalmaza azonos egy megfelelő kölcsönhatással jellemzett sokrészeszkés fizikai rendszerrel, ahol a termodinamikai állapot vizsgálatánál a statisztikus fizika módszerei sikeresek. Az evolúciós játékelméleti modellek azonban tartalmazhatnak számos olyan tulajdonságot, amelyeknél az alkalmazhatóság eredeti feltételei nem teljesülnek. Korábbi vizsgálatok kiderítették, hogy a nyereménymátrix (a vektorokhoz hasonlóan) felbontható olyan ortogonális elemi komponensek összegére, amelyek négyféle, alapvetően különböző jellegű kölcsönhatást képviselnek [11]. Az egyik ilyen kölcsönhatástípus az Ising-modellnek megfelelő koordinációs kölcsönhatások lineáris kombinációja a lehetséges stratégiapárok között. Emellett létezik két olyan (ortogonális) kölcsönhatástípus, amikor a játékosok nyereménye csak az egyik játékos stratégiájától függ. Az egyik ilyen esetben a játékos nyereménye csak a saját döntésétől függ. A másik esetben a nyeremény nagyságát csak a játékos társ döntése határozza meg.

Az utóbbi két ortogonális „kölcsönhatás” nyereménymátrixában azonos értékek találhatók a mátrix soraiban illetve oszlopaiban. Ezen kölcsönhatások hiánya a fizikai rendszerekben kötődik a Hamilton-operátorok hermitikus voltahoz. Pontosabban fogalmazva, az ön- és társfüggő nyereményű játékok összegének szimmetrikus komponensei jelen vannak, és számszerűsítik a külső tér hatását. Ha csak ez a komponens írja le a „kölcsönhatást”, akkor valójában nincs is kölcsönhatás a szereplők között, akik emiatt egymástól függetlenül és azonos módon követik a külső tér, illetve zaj által meghatározott választást.

Ugyanakkor az ön- és társfüggő nyereményű játékok összegének antiszimmetrikus komponense felelős az olyan *társadalmi csapdahelyzetek* (vagy társadalmi dilemmahelyzetek) kialakulásáért, amikor az egyéni érdekek által diktált stratégiapár választásánál a játékosok nyereménye kisebb lehet annál, mint amit a közös érdek érvényesítésénél kaphatnának [12, 13]. Ilyen párkölcsönhatást ír le az adományozó játék, amikor a játékosok arról döntenek, hogy hajlandóak-e befizetni egységnyi költséget azért, hogy a játékos társ ennél nagyobb ($r > 1$) nyereményt kapjon. Ebben a kétszemélyes kétstratégias játékban mindkét szereplő két lehetőség valamelyikét választhatja, amelyek az önzetlen (C stratégia), illet-

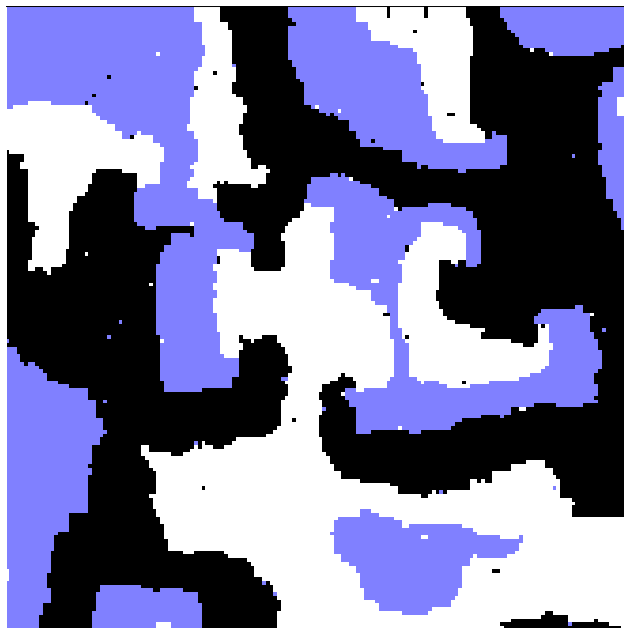
ve az élősödő vagy potyázó magatartást (D stratégia) képviselik. Az önzetlen játékos befizeti az egységni jövedelmet azért, hogy a társa ennél magasabb jövedelmet kapjon. Az élősödő játékos nem hoz ilyen áldozatot, és emiatt nem növeli társa (vagy társai) jövedelmét. Ilyen élethelyzetekben az egyéni érdek az önző magatartás választását diktálja mindkét szereplő számára, akik emiatt nem részesülnek a kölcsönös önzetlenség esetén megérdemelt magasabb jövedelemből. Ez a társadalmi csapda többstratégiás játékoknál is létezhet, mert mindkét önző játékosnál az ön- és társfüggő nyereseményű komponensek összegének antiszimmetrikus része ugyanazon stratégia választását diktálja, amikor viszont mindkét játékos nyeresége nulla lesz. Ez az ámításra hasonlító hajtóerő akkor is működik, amikor koordinációs komponensek megléte magasabb nyeresémet biztosítana egy másik stratégiapár választásánál, és elegendően erős hatásnál az összesített nyeresemény csökkenését okozza. Természetesen létezhet olyan kölcsönhatás is, amikor mindkét komponens ugyanazt a választást támogatja. Ebben az esetben az antiszimmetrikus komponens hasznos lehet, mert csökkenti a zaj által okozott társadalmi veszteséget.

Mindhárom eddig említett ortogonális komponensnél és lineáris kombinációjuknál létezik egy potenciál [14, 15], ami a stratégiapárok (mikroszkopikus állapotok) terében az egyoldalú stratégiaválasztások hajtóerejét (a nyeresemény növekedését) összesíti hasonlóan a fizikai rendszerekben definiált potenciális energiához. Valójában ezek azok a kölcsönhatások, amelyeknél a rendszer a Boltzmann-eloszlásba fejlődik, és érvényesülnek a termodinamika törvényei, ha logit dinamika írja le a fejlődést. Érdeemes megemlíteni, hogy koordinációs játékoknál a párpotenciál és a nyereséymátrix azonos, és a sokszereplős rendszereknél a megfelelő párpotenciálok összege felel meg a teljes rendszer potenciáljának.

A játékelméleti kölcsönhatások különleges tulajdonsága, hogy a társfüggő nyereseményű elemi komponensek nem adnak járulékot a potenciál értékéhez, mert nem befolyásolják az egyoldalú stratégiaváltoztatás hajtóerejét. Emiatt, ha logit dinamika vezérli a fejlődést, akkor ezek a komponensek a stratégiák gyakoriságát változtatlanul hagyják, miközben a résztvevők átlagos nyeresége növekedhet vagy csökkenhet. Ez a tulajdonság összhangban van társadalmi csapdahelyzetek létezésével.

A negyedik típusú ortogonális kölcsönhatás a ciklikus dominancia lehetőségeit összegzi olyan módon, hogy tartalmazza a kő-papír-olló játékra jellemző körbeverést az egymástól független stratégiahármasok között. Ez a kölcsönhatástípus három vagy annál több stratégia esetén létezik, megakadályozza a potenciál létezését, és ezzel együtt a termodinamikai viselkedést. A nyereséymátrixa antiszimmetrikus, és a mátrixelemek összege nulla minden sorban és oszlopban. További általános tulajdonsága, hogy segíti a stratégiák együtt létezését és a térbeli stratégiatársulások kialakulását szinte mindegyik evolúciós dinamikai szabály esetében. Az

egyik legismertebb ilyen jelenség az önszervező térbeli mintázatok kialakulása, amit az 1. ábra illusztrál.



1. ábra. Három stratégia (fehér, kék, és fekete) tipikus térbeli eloszlása egy olyan evolúciós játékelméleti modellben, ahol a négyzetrácson elhelyezkedő szomszédos játékosok között a háromállapotú Potts-modell és egy kő-papír-olló játék összege definiálja a kölcsönhatást, az egymást követő egyéni stratégiaváltoztatást pedig a Monte Carlo-szimulációkban gyakran használt Glauber- (vagy logit) dinamika vezérli

A háromállapotú Potts-modell tekinthető három olyan Ising-típusú koordinációs kölcsönhatás összegének, ahol a lehetséges három különböző stratégiapár között azonos erősségű az egyforma stratégia választásának a támogatottsága. Egy kritikus hőmérséklet alatt a véletlen kezdőállapotból indított rendszerben olyan folyamatosan növekvő (rendezett) tartományokat figyelhetünk meg, amelyekben belül az egyik stratégia többségben van. Véges méret esetén előbb-utóbb uralkodóvá válik a három rendezett eloszlás valamelyike, és kialakul a spontán szimmetriasérülés, aminek mértéke (rendparamétere) függ a hőmérséklettől, és egy kritikus hőmérséklet felett eltűnik. Ha a megfelelő evolúciós játékelméleti modellben a kölcsönhatást kiegészítjük egy gyenge kő-papír-olló típusú komponenssel, akkor a rendezett tartományok növekedését leállítja a közöttük kialakuló ciklikus invázió. Az 1. ábrán a fekete tartományok terjeszkednek a fehér tartományok kárára. Hasonló módon hódítja el a fehér tartomány a szomszédos kék területet és a kék a feketét. A kialakuló önszervező mintázat jellegzetessége, hogy a háromféle tartományt elválasztó határvonalak találkozási pontja körül jobbra vagy balra forgó spirálkarokat figyelhetünk meg, ha követjük a mintázat időbeli fejlődését. A szakirodalomban ezeket a forgó spirálkarokat „vortex”-nek illetve „antivortex”-nek nevezik, mert a részecske-antirészecske párokhoz hasonlóan keletkeznek, illetve semmisülnek meg.

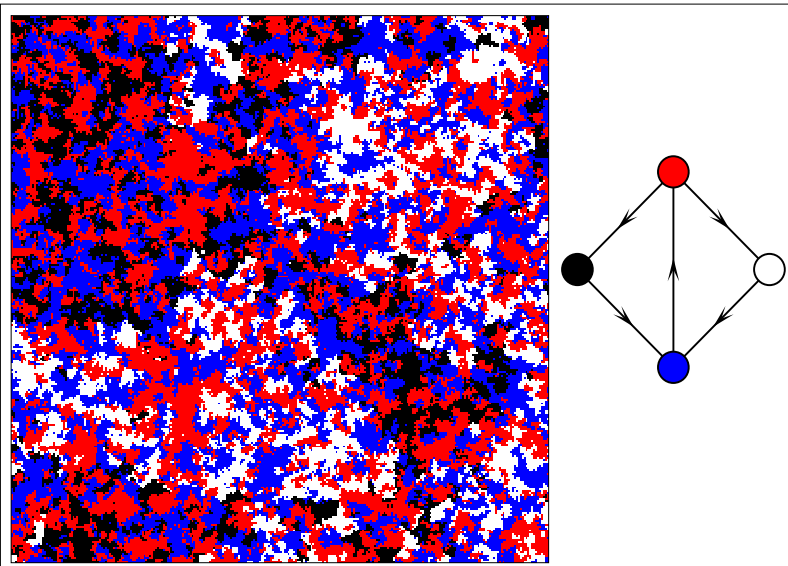
A kő-papír-olló játékra jellemző ciklikus dominancia megfigyelhető a Petri-csésze táptalaján tenyésztett egysejtűek között [16], ha azok képesek olyan mérgező anyag termelésére, amivel megölhetik azokat a szomszédos társaikat, akik képtelenek a megfelelő ellenanyag termelésére. Ebben az ökológiai rendszerben egy sejt három mutánsa között zajlik a vegyi háború. A „mérgező” mutáns előállít egy olyan mérgező anyagot, ami elpusztítja azokat a sejteket, amelyek nem rendelkeznek a mérge hatását semlegesítő molekulákkal. Ezt az ellenmérget természetesen a mérgező sejtnek is termelnie kell, hogy ne ölje meg önmagát. Az „ellenálló” mutáns azonban csak ezt az ellenanyagot termeli, emiatt felépítése egyszerűbb, és gyorsabban képes osztódni, ami előnyt jelent a mérgezővel szemben a terület (élelem) megszerzéséért folytatott küzdelemben. A harmadik (ún. „érzékeny”) mutáns a legegyszerűbb, mert szerkezetéből hiányzik a mérge és annak ellenanyagát előállítani képes biokémiai háttér. Ennek következtében a gyorsabb sejtosztódás miatt előnyt élvez az ellenálló mutánsokkal szemben, de elpusztul a „mérgező” mutánsok szomszédságában. Egy ilyen biológiai rendszerben a sejtek mutánsai több mérge és ellenanyag előállítására is képesek lehetnek, aminek eredménye egy olyan ragadozó-zsákmány viszony, ami számos kő-papír-olló jellegű hármas körbeverést tartalmaz. A hasonlóan több hármas ciklust tartalmazó ragadozó-zsákmány modellek vizsgálata olyan térbeli stratégiatársulások és védelmi szövetségek kialakulását mutatta, amelyek között szintén megfigyelhető a ciklikus dominancia, ami már képes fenntartani nagyon sok faj együttlétét.

A kő-papír-olló játékok kombinálása a többstratégias modellekben a jelenségek olyan széles skáláját hozza felszínre, amelyek részletes elemzése meghaladja egy ismeretterjesztő cikk lehetőségeit. A legegyszerű-

rűbb példában négy stratégia (A, B, C, D) szerepel, ahol kő-papír-olló típusú körbeverés létezik az A-B-C és az A-D-C stratégiák között. Hasonló kölcsönhatás vezérelheti egy négyfajos ragadozó-zsákmány modellben a fajok kétdimenziós térbeli eloszlásának fejlődését, ha a B és D fajok nem eszik meg egymást. A biológiában gyakran használt ragadozó-zsákmány modellek egy újabb lehetséges evolúciós dinamikát képviselnek. A legegyszerűbb evolúciós szabálynál kiválasztunk két szomszédot egy rács pontjain helyet foglaló egyedek közül. Ha az egyik ragadozója a másiknak, akkor a ragadozó megeszi a zsákmány szomszédját és az üresen maradt helyet a ragadozó utódja foglalja el. Ezen elemi folyamat ismétlődése eredményezi a 2. ábrán bemutatott komplex mintázatképződést, ahol a négyzetláncra elhelyezett fajok két (jól megkülönböztethető, háromfajús és növekvő) térbeli társulást hoznak létre. Makroszkopikus skálán a rendszer viselkedése hasonlít a kétállapotú szavazó modellre, ami a kétdimenziós rendszerekben egy nagyon lassú doménnövekedést jósol. Ennek következtében ebben a rendszerben előbb vagy utóbb a B (fekete) vagy D (fehér) faj kihal.

A harmadik példa az evolúciós játékelmélet leggyakrabban tanulmányozott kérdéséhez, az élősködés és az önzetlenség evolúciós versengéséhez kötődik két faj között, amelyek egyedei két egymás feletti négyzetláncra helyezkednek el egy legegyszerűsített matematikai modellben [17]. Itt a szereplők közötti párkölcsonhatást az előző fejezetben ismertetett adományozó játékkal definiáljuk. A kétfajos matematikai modell különlegessége, hogy a felső négyzetláncra elhelyezkedő faj egyedei ezt a játékot az alsó rétegen hozzájuk legközelebb eső öt olyan egyeddel játsszák, akik a másik fajhoz tartoznak. Ehhez hasonlóan, az alsó réteg egyedeinek jövedelme a felső négyzetláncra található öt legközelebbi játékosal játszott adományozó játékból származik. Ez a térbeli szerkezet lehetőséget ad annak tanulmányozására, hogy mi történik akkor, amikor a sikeresebb szomszéd stratégiájának utánzására épülő evolúciós szabály az azonos fajhoz tartozó egyedekre vonatkozik, ami ebben az esetben az azonos rétegben található négy legközelebbi szomszédra korlátozódik.

A legtöbb utánzásra épülő dinamikai szabálynál az utánzás valószínűségét egy olyan Fermi-Dirac-függvény definiálja, amiben az energia helyett a két játékos nyereménkülönbsége szerepel, a hőmérsékletnek megfelelő paraméter pedig a döntés bizonytalanságát (vagy a külső körülményekből származó zajt) jellemzi. Ez a modell olyan élethelyzeteket képvisel, amikor a kölcsönhatási és utánzási kapcsolatrendszer különbözik a sokszereplős rendszerben.

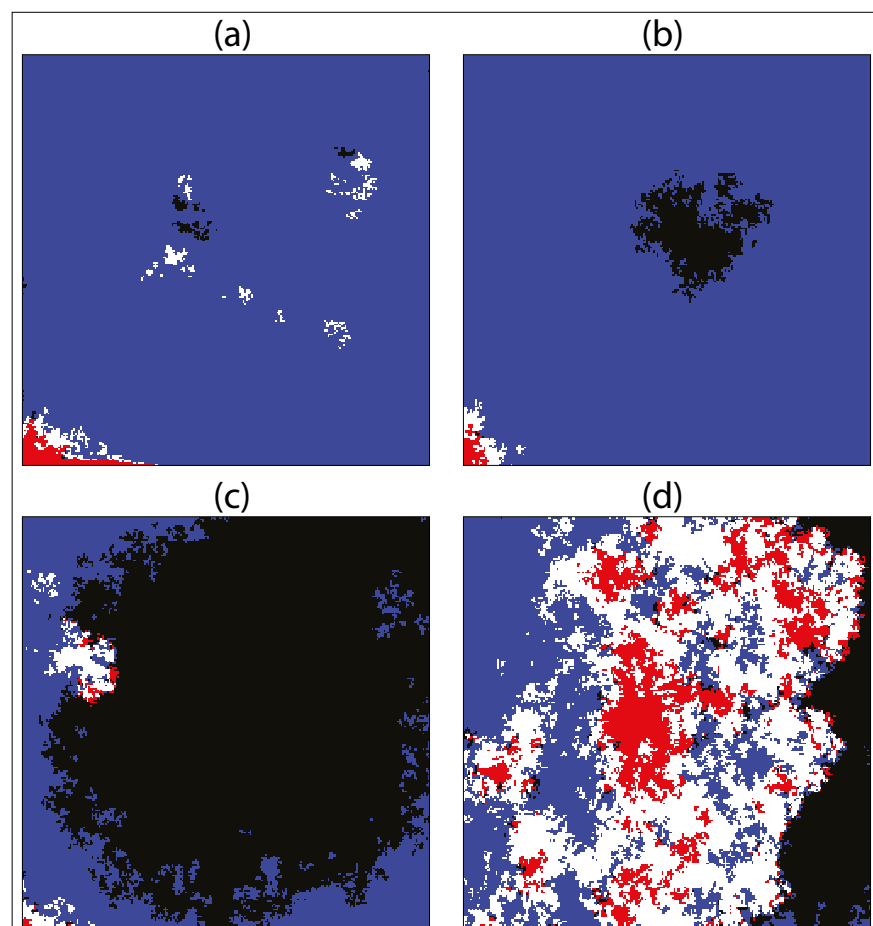


2. ábra. Jellegzetes térbeli eloszlás a négyzetláncra egy olyan négyfajos ragadozó-zsákmány modellben, ahol a ragadozó-zsákmány viszonyokat a jobb oldali táplálékhálózat mutatja. Az idő múlásával együtt növekszik azon tartományok mérete, ahol a fehér vagy a fekete faj hiányzik a megfelelő kő-papír-olló jellegű ciklikus társulásból

A szomszédos játékosok stratégiájának utánzására épülő dinamikai szabályoknak vannak természetes következményei. A legfontosabb, hogy az evolúciós folyamat leáll, ha a rendszer eléri valamelyik homogén (abszorbeáló) állapotot. A térbeli modelleknél további általános tulajdonság, hogy ez a dinamika támogatja az olyan homogén nagyméretű tartományok kialakulását is, amelyek belsejében nincs változás, és ilyenkor a stratégiák változása a különböző abszorbeáló állapotokat elválasztó határ környékére korlátozódik. Ebben a modellben négy abszorbeáló állapot létezik, amelyeknél a két rétegben a játékosok azonos stratégiát (C vagy D) választanak. Emiatt nem meglepő, hogy a szimulációs vizsgálatok a paraméterek változtatása esetén több lehetséges állapotot, illetve állapotváltozást mutattak. Ennek a kétfajos rendszernek az egyik legérdekesebb tulajdonsága, hogy a paraméterek értékétől függően képes leírni olyan élethelyzeteket, amikor az egyik faj (például a felső réteg) egyedei kizsákmányolják a másik faj tagjait. A szimmetrikus kölcsönhatás miatt azonban a kizsákmányolás iránya ellentétes is lehet ahhoz hasonlóan, ahogyan a kétdimenziós Ising-modellben kialakul a mágnesezettség (spontán szimmetriasérülés) alacsony hőmérsékleten. A hasonlóság következménye, hogy a

zajszint növelése során a stratégiák eloszlása azonossá válik a két rétegben, és a C stratégia választásának gyakorisága eltűnik egy kritikus érték felett. A várakozásokkal összhangban ez utóbbi fázisátalakulás ugyanolyan tulajdonságokkal rendelkezik, mint amit a kétdimenziós irányított perkolációs univerzalitási osztály képvisel.

Ezzel szemben elegendően alacsony zajszint esetén az említett szimmetriasérülés és a folytonos fázisátalakulás jellemzőinek (rendparaméter, fluktuációk, korrelációs távolság stb.) zajfüggése hasonlít az Ising-modellel leírt univerzális tulajdonságokra – annak ellenére, hogy alapvetően különböző folyamatok vezérlik az állapotváltozást. Ezek a különbségek felerősödnek még alacsonyabb zajszintnél, amikor a szimmetriasérülés úgy jelenik meg a stratégiák kétdimenziós eloszlásában, hogy a kétfajta élősködés megfigyelhető elegendően nagy méretű tartományok belsejében, de ezeknek a tartományoknak az összterülete különböző. Az ellentétes irányú élősködést elválasztó határvonal mentén „zajlik az élet”, és innen indulnak el azok a lavinajelenségek, amelyeket a 3. ábrán négy egymást követő pillanatfelvétel segítségével mutatunk be egy nagyméretű rendszer 240×240 rácspontot tartalmazó részén.



3. ábra. Lavinajelenség illusztrálása a négyzet rácson négy egymást követő stratégiaeloszlás segítségével a két faj közötti evolúciós adományozó játéknál. A fekete és piros színek olyan stratégiapárt jelölnek, amelynél az egyik réteg szereplője a C, a másik a D stratégiát választotta; a fekete, illetve fehér négyzetek a DD és CC stratégiapár jelenlétét jelzik

A 3. ábra pillanatfelvételein a kék tartományokon belül a felső réteg egyedei élősködnek az alattuk elhelyezkedő egyedeken. A 3a. ábra bal alsó részén látható piros tartományban az élősködés iránya ellentétes. A piros és kék tartományok határán képződnek azok a kicsi fehér (mindenki C), illetve fekete (mindenki D), méretüket változtató és mozgó szigetek, amelyek mélyen behatolhatnak a kék (vagy piros) tartományok belsejébe. Az egymást segítő (fehér) tartományai viszonylag rövid időn belül kihálnak. A vándorló kis fekete szigetek azonban növekedésnek indulhatnak, ha méretük nagyobb lesz, mint egy kritikus érték. Ez a folyamat hasonlít a kristályosodásnál megfigyelt csíráképződési folyamatokra, amelyek a stabil állapot kialakulásának dinamikáját jellemzik a termodinamikai rendszerekben. A fekete tartomány növekedését az állítja meg, ha a határát eléri az egymást kölcsönösen segítő kis (fehér) csoportja, melyek utódai a háttértől kapott támogatás miatt eltűntetik a fekete tartományt. Ebben az esetben az élősködés egyéni haszna azonban elegendően magas ahhoz, hogy az

egyik faj újból az élőkódést válassza (3d. ábra), és a peremfeltételek hatására nagy valószínűséggel visszaáll az élőkódés eredeti változata, amit a 3a. ábrán látható stratégiaeloszlás képvisel.

Ez az ismétlődő folyamat egyre nagyobb és ritkább lavinák kialakulását és eltűnését okozza, ha csökkentjük a zaj vagy az r nagyságát. A hasonló lavinajelenségek megfigyelése számítógépes szimulációkkal azért nehéz, mert a nagyméretű lavinák megjelenésére esetenként hónapokat kell várni. Ez az oka annak, hogy a jelenség univerzális tulajdonságainak feltárása még nem teljes annak ellenére, hogy ilyen jelenségeket korábban más modellek numerikus vizsgálatánál is megfigyeltek. A jelenség legegyszerűbb változatai jelen vannak azokban a háromfajos populációdinamikai modellekben is, ahol az evolúciós folyamat egy olyan állapot (határeloszlás) felé tereli a fejlődést, ami instabil bizonyos zavarok megjelenése esetén. Nagyon alacsony r értékeknél a lavinajelenségek szerepe erősödik, aminek eredménye, hogy a rendszer valamelyik homogén (abszorbeáló) állapotba fejlődik olyan valószínűséggel, ami függ a kezdőfeltételektől és a rendszer méretétől.

A 2. és 3. ábrán vázolt jelenségek modelljeinek kiválasztását néhány közös tulajdonság illusztrálása indokolta. Mindkét modellben négy abszorbeáló állapot létezik, és ezek doménjei között ugyanolyan területhódítási folyamat figyelhető meg, mint amit a 2. ábra tápláléklánc jellemmez. A hasonlóság mellett azonban hangsúlyozni kell a különbségeket is, amelyek a paraméterek függvényében a statisztikus fizikai modellekre általánosan jellemző univerzális fázisátalakulási tulajdonságok helyett a folytonos fázisátalakulás jellemzőinek változását is eredményezhetik. Ez utóbbi jelenségre példa a négyállapotú Ashkin–Teller-modell, ami a lehetséges hat stratégiapár közötti koordinációs kölcsönhatást három paraméterrel jellemzi. A koordinációs kölcsönhatásokra korlátozott sokstratégias evolúciós játékelméleti modellek számos olyan lehetőséggel rendelkeznek, amelyek elemzése még hiányos, és amelyek újdonságok sokaságát kínálják a termodinamikai rendszerek statisztikus fizikájával foglalkozók számára [18].

Távlati lehetőségek

Az evolúciós játékelméleti modelleket vizsgáló biológusok, közgazdászok, orvosok és viselkedéskutatók számára nagyon hasznosak azok az általános ismeretek, amelyek a statisztikus fizika területéről származnak. Érdekes kiemelni a folytonos fázisátalakulások felderítése során felszínre került univerzális tulajdonságokat és az univerzalitási osztályok létezését, mert a paraméterek változtatása során a stratégiák gyakoriságában megfigyelt változások hasonló tulajdonságokkal rendelkeznek. A folytonos fázisátalakulásokat kísérő jelenségek (a rendparaméter, a fluktuációk, a válaszfüggvények, a korrelációs távolság, a relaxációs idő hatványfüggvény-szerű viselkedése) ismeretének átadása segítheti az élő

rendszereket szimulációs módszerekkel vizsgáló kutatókat a megbízható numerikus eredmények kiszámításánál. A statisztikus fizikában használt közelítő módszerek (pl. párközelítés) a jelenségek gyorsabb feltérképezését teszik lehetővé. Hasonlóan hasznos lehet a méreteffektusok és lavinajelenségek (például a sok szálból álló kötelek szakadásánál [19]) statisztikai elemzésére kifejlesztett módszerek hasznosítása az említett kutatási területeken. A fizika módszereinek hasznosságát hűen tükrözik az ipari technológiák területén elért sikerek az elmúlt száz évben. A különböző tudományterületek közötti együttműködés ezt a folyamatot támogatja más területeken is. Ugyanakkor ez az együttműködés a statisztikus fizika számára is kínál számos olyan új és érdekes jelenséget, amelyek felbecsülhetetlen mértékben gazdagítják az élettelen anyagoknál eddig feltárt összefüggéseket. Ez a gazdagság jelenik meg a koevolúciós játékelméleti modellekben, ahol a stratégiaeloszlás mellett változhat a játékosok száma, a közöttük meglévő kapcsolatrendszerek, a dinamikai szabályok és a kölcsönhatás is. Mindez együtt a kihívások sokaságát kínálja a statisztikus fizika számára, mert a vizsgált jelenségek megértése jelentősen javíthatja az emberiség, a velünk együtt élő földi élőlények és a következő generációk életminőségét és fennmaradási esélyeit.

Irodalom

1. von Neumann J., Morgenstern O. (1944): Theory of Games and Economic Behaviour. Princeton University Press.
2. Maynard Smith J., Price G. R. (1973): The logic of animal conflicts. Nature 246, 15.
3. Hofbauer J., Sigmund K. (1998): Evolutionary Games and Population Dynamics. Cambridge University Press.
4. Szabó G., Fáth G. (2007): Evolutionary games on graphs. Phys. Rep. 446, 97.
5. Tanimoto J. (2015): Fundamentals of Evolutionary Game Theory and its Application. Springer.
6. Nowak M. A., May R. M. (1992): Evolutionary games and spatial chaos. Nature 359, 826.
7. Glauber R. J. (1963): Time-dependent statistics of the Ising model. J. Math. Phys. 4, 294.
8. Blume L. E. (1993): The statistical mechanics of strategic interactions. Games Econ. Behav. 5, 387.
9. Potts R. B. (1952): Some generalized order-disorder transformations. Proc. Camb. Phil. Soc. 48, 106.
10. Ashkin J., Teller E. (1943): Statistics of two-dimensional lattices with four components. Phys. Rev. 64, 178.
11. Szabó G., Borsos I. (2016): Evolutionary potential games on lattices. Phys. Rep. 624, 1.
12. Poundstone W. (1992): Prisoner's Dilemma. Doubleday.
13. Sigmund K. (2010): The Calculus of Selfishness. Princeton University Press.
14. Monderer D., Shapley L. S. (1996): Potential games. Games Econ. Behav. 14, 124.
15. Candogan O., Menache I., Ozdaglar A., Parrish P. A. (2011): Flows and decomposition of games: Harmonic and potential games. Math. Oper. Res. 36, 474.
16. Czárán T. L., Hoekstra R. H., Pagie L. (2002): Chemical warfare between microbes promotes biodiversity. PNAS 99, 786.
17. Hauert C., Szabó G. (2024): Spontaneous symmetry breaking of cooperation between species. PNAS Nexus 3, 326.
18. Király B., Szabó G. (2017): Evolutionary games combining two or three pair coordinations on a square lattice. Phys. Rev. E 96, 042101.
19. Kun F., Allan L., Batool A., Danku Z., Pál G. (2024): Failure process of fiber bundles with random misalignment. Phys. Rev. Res. 6, 033344.

A SZENNYEZŐDÉSEK TERJEDÉSÉNEK MODELLEZÉSE A KÖZÉPISKOLÁBAN

Nógrádi Zsófia
ELTE Radnóti Miklós Gyakorló Általános Iskola és Gyakorló Gimnázium, Budapest
E-mail: nogradi.zsofia@radnoti.elte.hu

Bevezető

A légköri szennyeződések és terjedésük az emberiség számára komoly és növekvő problémát jelentenek. A modern iparosodás és az egyre növekvő gépjárműforgalom miatt a légkörbe bocsátott szennyező anyagok mennyisége folyamatosan növekszik. Ez a folyamat a globális környezeti kihívásoknak is része, mivel a légszennyezés hatásai jelentősen befolyásolják az élővilág mindennapjait. A levegő összetétele nemcsak a látási viszonyokat befolyásolja, de az egészségre is hatással van. Napjainkban több kutatás is foglalkozik azzal, hogy a légszennyezettség milyen sok ember halálát okozza [1, 2, 4].

A cikk a továbbiakban arra a fontos kérdésre összpontosít, hogy hogyan lehet a középiskolában modellezni a légköri szennyeződések terjedését. A probléma tárgyalásával kaotikusdinamika-órán találkoztam Tél Tamás professzor jóvoltából, aki sokat segített a téma feldolgozásában és értelmezésében.

A témáról általánosan

A levegőszennyezés mindennapjaink nagy környezeti problémája, melyet nemzetközi összefogással és a károsanyag-kibocsátásra irányuló szabályozással próbálnak visszafogni. A probléma globális mivoltát mutatja, hogy a levegőbe kerülő szennyező anyagok nem csak a kibocsátás helyén okoznak problémákat. Az egyik példa, ami ezt mutatja, az az izlandi vulkánkitörés okozta, Európa nagy részére kiterjedő, a légiközlekedést érintő lezárás volt. Kevésbé nagy horderejű, de jelentős károkat okozó probléma a nyári időszakban fellépő saras eső vagy a nagy üzemek kipufogógázainak terjedése. Ezek a folyamatok is mutatják, hogy mennyire fontos a levegőbe kerülő szennyeződések terjedésének modellezése, megfigyelése és előrejelzése [3].

A projekthez kapcsolódó iskolai háttér

A szennyező részecskék mozgásának modellezése egy 9. évfolyamos diákokkal véghez vitt projekt keretében történt. A csoport 18 főből állt, de az első órán 17-en vettek részt, a többin szerencsére teljes volt a csoportlétszám. A projekt mindössze 3 tanórát vett igénybe, a hidrosztatika témaköre után, egy órában tervezett „áramlások”

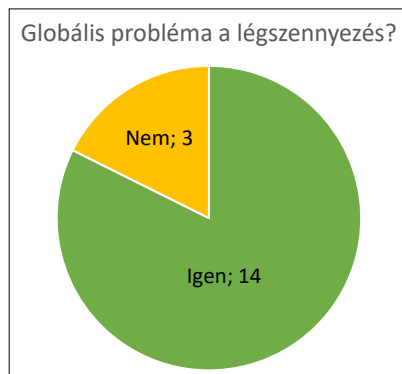
témához kapcsolódóan. A feladatokat közösen, tanári vezetéssel végezték el, de végső produktumként önállóan létrehozott beadandót kellett készíteniük. A projekt megalapozása az áramlástani alapismeretekkel kezdődött: a Stokes-féle közegellenállási erő megismertetésével és a részecskékhez köthető sebességértékek becslésével. Felelevenítették a Brown-mozgásnál tanultakat, és azt a következőkben átvezették egy összetett mozgás számítógépes modellezésére. A számítógépes modellezés során beszéltünk arról, hogy mennyire meghatározott egy részecske mozgása, és mivel ellenőrizhető, hogy a közeli pontokból indított részecskék esetén milyen távra jutnak a szimuláció alapján a részecskék. Majd a projekt eredményeinek értékelése közösen történt. Végül egy másfél oldalas esszét kellett készíteniük, melyben a szimuláció adatait felhasználva három cím közül kellett egyet választaniuk, és azt kifejteniük. A három cím: „A láthatatlan veszély, a légszennyezettség”, „Globális feladat a levegő védelme” és az „Az Európai Unió a levegőminőség javításáért”.

A projekt előkészületei

Az első órán az áramlástani alapokon túl egy előzetes felmérés is történt, melynek célja annak kiderítése volt, hogy mennyire gondolják globális problémának a levegőszennyezést.

Kísérleti megfigyeléseket alapul véve közösen foglalmaztuk meg a Bernoulli-féle áramlási törvényt, ami az áramló közeg sebessége és nyomása közti összefüggést mondja ki. Ezen kísérletek után felelevenítették a Brown-mozgásról tanultakat, majd megmaradva a részecske golyómodellje mellett, különböző keresztmetszetű csövekben vizsgálták, hogy milyen az áramlás sebessége, vagyis a kontinuitási összefüggést foglalmazták meg. Ezekben több részecske együttes mozgásáról, áramlásáról van szó, a későbbiekben pedig egyetlen részecske mozgását vizsgálták kinematikai, részecske-szemlélettel. Az óra végén egy, az előzetes ismeretek felméréséhez kapcsolódó tesztort kellett kitölteniük, aminek eredményeire az utolsó órán tértünk vissza.

Az első kérdés, hogy globális problémának gondolják-e a légszennyezést, vagy inkább lokálisnak. A diagramon a számok a beküldött válaszok darabszámát jelölik. Jól látható, hogy a válaszadók között van 3 diák, akik



1. ábra. A projekt előtti felmérés első kérdése

úgy gondolták, hogy a levegőszennyezés csak lokális problémákat okozhat.

A második kérdés a levegőminőség és az egészség kapcsolatára kérdezett rá. Azért volt fontos ez az irány, mert a csoportban több, az orvosi pálya iránt érdeklődő diák volt.



2. ábra. A projekt előtti felmérés második kérdése

Látható, hogy erre a kérdésre már kevésbé egyhangú választ adtak a diákok. Azoktól, akik igennel válaszoltak, azt is kérte a teszt, hogy írjanak olyan megbetegedéseket, amelyeket kiválthat, erősíthet a levegő szennyezettsége. Válaszként nyolcan írták az allergiát, ketten az asztmát és egy diák összefoglalóan a légzőszervi megbetegedéseket. A kérdésnél nemcsak egy választ lehetett beírni; ezért szerepel több válasz, mint ahányan válaszoltak erre a kérdésre.

Az utolsó kérdést ismét mindenkinek meg kellett válaszolnia: milyen hatásai vannak a rossz levegő minőségnek? A válaszokban visszaköszöttek a korábban biológia- és földrajzórán tanult fogalmak. Érdeemben négyféle válasz érkezett, melyek a gyenge látási viszonyok, a savas eső, az eutrofizáció és az egészségre gyakorolt hatás voltak.

A kérdőív célja az volt, hogy felmérje, a diákok mennyire vannak tisztában a levegőszennyezéshez kapcsolódó veszélyekkel, és impliciten az is kiderüljön, hogy mennyire tartják veszélyesnek. A beérkezett válaszaik adtak alapot arra is, hogy esszé témáknak, -címeknek miket érdemes választani.

A szennyeződések terjedésének szimulálása

A feladatok fő része a szennyeződések terjedésének szimulálása, amit közösen végeztünk egy gépteremben, ahol mindenki saját gépen tudta végezni a szimulálást, hogy később fel tudja használni a programból generált képeket.

A programozáshoz választott nyelv a Python volt, mivel ebben tanultak már programokat írni, így ez nem volt teljesen ismeretlen számukra.

A szimulálni kívánt áramlást determinisztikusan adtuk meg. Az áramlás 5 percig x irányú, állandó sebességű mozgást végzett $v_x = 0,06 \sin 2\pi y$ sebességgel, majd a következő 5 másodpercben y irányú, állandó sebességű mozgást végzett $v_y = 0,06 \sin 2\pi x$ sebességgel.

Kilencedikes diákok még nem ismerték a szögfüggvények kiterjesztését, de derékszögű háromszögben már használtak szögfüggvényeket, így nem érte őket teljesen ismeretlenül ez az írásmód. Pár esetre megnézték, hogy a program kiszámolja a szögfüggvények értékét bármilyen érték esetén. Majd a kiterjesztett szögfüggvények függvényalakjait is megnézték.

Bár először egy részecskére nézték meg a részecske mozgását, a későbbiek megsegítésére a következő paramétereket adtuk meg:

n – részecskeszám,

dt – időegység a számolás pontosításához (0,05 s),

T – periódusidő (10 s),

t – a mozgás ideje,

Δ – a pontok közti távolság,

$x_0; y_0$ – kezdőpontok.

Ezekkel a paraméterekkel az egész áramlást egy kinematikai feladatra lehetett visszavezetni, aminek szimulálásához csak egyszerű ciklusokra volt szükség. Mindössze a `for` és a `while` ciklusok kellettek, ahhoz, hogy a kiszámított x, y értékeket listákba rendezzék. A későbbiekben az elkészített listákat ábrázolták.

```
for i in range(n):
    T0=t
    x=x0+i*delta
    y=y0
    mx.append(x)
    my.append(y)
    m=int(5/dt)
    while T0>0:
        for j in range(m):
            omega=2*pi*y
            dx= U*sin(omega)*dt
            x=x+dx
            j=j+1
        for j in range(m):
            omega=2*pi*x
            dy= U*sin(omega)*dt
            y=y+dy
            j=j+1
        T0=T0-T
        mx.append(x)
        my.append(y)
    i=i+1
```

A teljes programhoz készült jegyzetek letölthetőek a jobbra látható QR-kódról (bővebb, mint az órai).

Egy-egy részecske esetén nem mutatott különösebben érdekes képet a mozgás, viszont ha több (10 db) részecskét indítottak egy egy-ségnegyzetből, akkor a mozgás egy kiterjedt szennyezés időbeli terjedését mutatta.

Ezek az ábrák már látszik, hogy pár iteráció után is elég nagy kiterjedése lehet a szennyező részecskék felhőjének.



A részecskék távolodása a kaoszelmélethez kapcsolódó fátyladiagramon még jobban szemléltethető. A diákoktól függően akár beszélhetünk a kaoszelmületről is, de ennél a társaságnál, ebbe az időkeretbe ez nem fért bele. Ugyanakkor azt könnyen megértették, hogy egy olyan diagram használata, amin az látható, hogy adott számú periódus után mennyire távolodnak el a részecskék a kezdeti helyzetéhez képest, fontos információt ad, amit az esszében könnyen felhasználhattak.

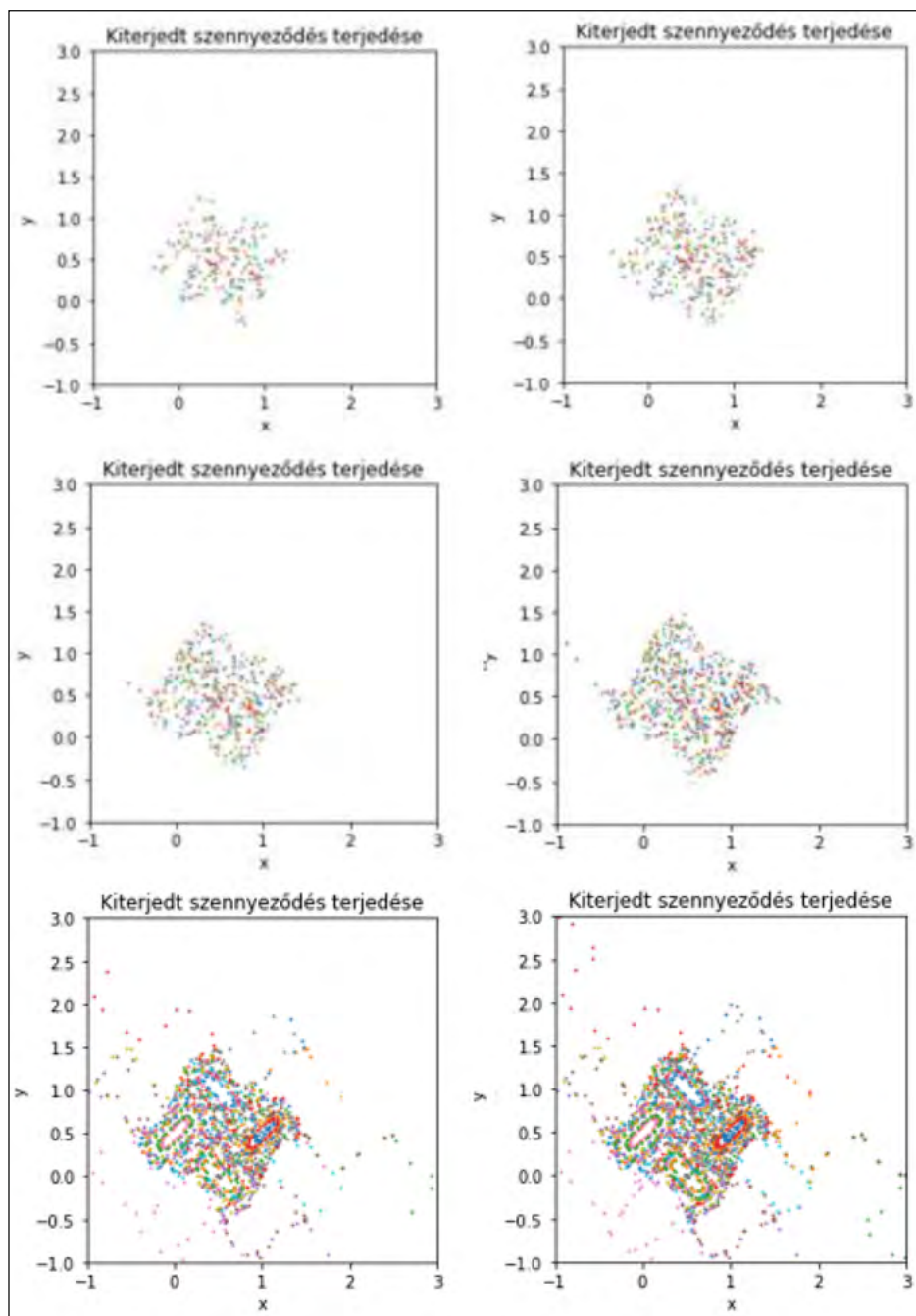
Ezzel az alapprogrammal indulhattak neki annak, hogy elkészítsék az esszét, aminek témáit ezen az órán meg is kapták.

A projekt értékelése

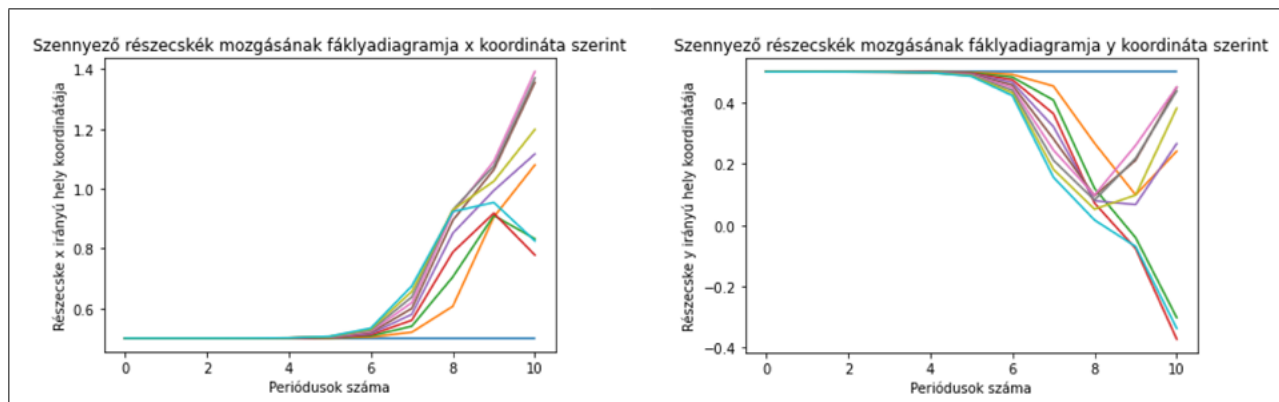
Egy tanóra telt azzal, hogy kiértékeljük az előző órai szimulációk eredményeit. Hangsúlyoztuk, hogy a részecskék mozgása során, pár periódus után az egymáshoz közelről indított részecskék is különböző helyekre jutnak, és útvonaluk jelentősen eltér a kis kezdeti különbség esetén is. Ehhez kapcsolódóan tértünk vissza a levegőszennyezéshez mint globális problémákhoz – hangsúlyozva, hogy a levegőbe jutó káros, szennyező anyagok, a levegőben több száz kilométert is meg tudnak tenni. Ehhez kapcsolódó példaként szó esett az izlandi Eyjafjallajökul vulkán kitörésének [7] hatásairól az európai légtérre. Ehhez kapcsolódóan online szimulációkat és a RePLaT [5, 6] szimulációs programot is megismertük.

Szóba kerültek a levegőminőség védelmének nehézségei, amik főleg a kiterjedés miatt nemzetközi összefogást igényelnek.

Az utolsó 15 percben a visszajelzésekre volt a fókusz. A 18 diákból mind úgy gondolták, hogy tanultak valami újat, és 3 diákon kívül a többiek hasznosnak is találták, hogy erről a témáról beszéltek. Negatívumokról nem igazán érkeztek jelzések, de pár diáknak



3. ábra. Az első sorban az 1., 2., a másodikban a 3., 4. iteráció, a harmadikban, pedig 15., és 20. iteráció utáni kiterjedés látható



4. ábra. A fáklyadiagramok a felhő x (balra) és y (jobbra) irányú kiterjedéséhez

a programozás nehézséget jelentett. Többen először megrémültek, hogy a fizikaórán programot kell készíteniük, de pozitívan értékelték, hogy az alapprogramot közösen csináltuk meg, így nem ítélték túl nehéznek. A visszajelzéseknél arra is rákérdeztem, hogy mi az, ami tetszett nekik a projekttel kapcsolatban.

Összegzés

A projektről való visszajelzések alapján a diákoknak elnyerte a tetszését, főleg, mivel többek állítása szerint ezeken az órákon nem fizikával foglalkoztunk. Pedig pusztán kinematikai ismereteket felhasználva készítették szimulációt. A másik fontos előnye, hogy a környezeti nevelésnek is helyet adott, és a beadandók elkészítése során sokkal mélyebb tudást szerezhettek a levegőszennyezést érintő kérdésekben.



5. ábra. A diákok visszajelzéseiből készített szófelhő

A szimuláció csak a mozgás sebességének komponensekre bontását követelte meg – így az áramlások témakör helyett akár a kinematika témakör óráit is színesítheti. Elsősorban azokban a csoportokban ajánlom, ahol már korábban foglalkoztak programozással, és akik szeretnek kisebb kutatásokat végezni, esetleg kevésbé szeretik a számolás példákát. Így azokban a csoportokban is előnyös lehet, ahol a diákok kevésbé „reál” beállítottságúak.

Irodalom

1. WHO – Ambient (outdoor) air pollution [https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/ambient-\(outdoor\)-air-quality-and-health?gclid=Cj0KCQjwqP2pBhDMA-RIIsAJQ0CzqmizZkNGeL0yMA6pHkWBmgoPoSG8mN-1az-nIxKM0bRr8CTyGVGLiMaAi9IEALw_wcB](https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/ambient-(outdoor)-air-quality-and-health?gclid=Cj0KCQjwqP2pBhDMA-RIIsAJQ0CzqmizZkNGeL0yMA6pHkWBmgoPoSG8mN-1az-nIxKM0bRr8CTyGVGLiMaAi9IEALw_wcB)
2. AQLI – Air Quality Life Index – Most of the world breathes unsafe air, taking more than 2 years off global life expectancy <https://aqli.epic.uchicago.edu/news/most-of-the-world-breathes-unsafe-air-taking-more-than-2-years-off-global-life-expectancy/>
3. HungaroMet - Magyar Meteorológiai Szolgálat Nonprofit Zrt. – Levegőszennyezettség – modellezés: <https://legszenyeyzettseg.met.hu/modellezes/terkep>
4. Európai Számvevőszék: Légszennyezés: egészségünk védelme még mindig nem elégséges <https://op.europa.eu/webpub/eca/special-reports/air-quality-23-2018/hu/>
5. Haszpra T., Kiss M., Izsa É.: Replat-Chaos-edu: an interactive educational tool for secondary school students for the illustration of the spreading of volcanic ash clouds. Journal of Physics: Conference Series, Vol. 1929, GIREP-ICPE-EPEC-MPTL 2019, 1–5 July 2019, Budapest, Hungary
6. RePLaT-Chaos-edu: szimulációs program online <https://hatimi.web.elte.hu/RePLaT/#edu>
7. Haszpra T.: Világjáró részecskék a légkörben: Az Eyjafjallajókull vulkán kitörésének és a fukushimai balesetnek a tanulságai. A Természet világa, 2013/II. különszám 67–72. <http://elmfiz.elte.hu/Kutcsop/edu/Haszpra.pdf>

fizikaiszemle.elft.hu

A honlapon megtalálhatja régebbi és új lapszámainkat, valamint számos mellékletet!

AZ EGY KULTÚRA GYÖNYÖRŰSÉGE, AVAGY RENDSZERTELEN KÖSZÖNTŐ A STATISZTIKUS FIZIKA ÜRÜGYÉN

„Mi mégis tudjuk, hogy az ember nem csak mechanikai konstrukció. A társadalom sem pusztán statisztikus fizikai objektum.” Mégis, Schiller Róbert professzor úr számára a statisztikus fizika jelenti mindennek az alfáját, míg az ómega az „egy kultúra”, ami társadalmunk esszenciája – kellene, hogy legyen. A kettő között ott találhatjuk a kémiai rendszereket, amit Schiller professzor úr a statisztikus fizika alapjain kíván megérteni. A statisztikus fizika az egyedi részecskék kaotikus mozgása és a makroszkopikus törvényszerűségek közötti összefüggéseket tárja fel, a kémia a természet szépségét és bonyolultságát írja le, míg az „egy kultúra” ezen természettudományos ismeretek és a művészetek kapcsolatát mutatja be. Ahogyan a statisztikus fizika hidat képez az egyedi és a kollektív viselkedés között, úgy a tudományterületek és a művészetek közötti párbeszéd is képes áthidalni a kulturális szakadékokat, és új, holisztikus megértési módokat teremteni.

Schiller Róbert életműve tele van ilyen áthallásokkal. Természettudományos munkái fontos tudományos eredményekről és a tudomány megismertetéséről, megszerettetéséről szólnak. Mögöttük azonban fellelhető a statisztikus fizika óriásainak tisztelete és munkásságuk megértése, és ami még izgalmasabb, szépirodalmi és ismeretterjesztő műveiben munkásságuk összekötése a művészetek legkiválóbbjainak munkásságával. Hogyan kapcsolódik például Boltzmann és Kosztolányi, Onsager és Arthur Schnitzler, vagy Maxwell és Max Frisch? A választ a tisztelt olvasó Schiller professzor úr könyveiben találja meg.

Schiller Róbert a mai napig a magyar tudományos élet aktív résztvevője, a HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont professzor emeritusa. Napi rendszerességgel bejár dolgozni a Felületkémia és Katalízis Laboratóriumba. Két éve a fiatalabb kollégák felkérésére szeminárium-sorozatot tartott az elektrokémia szépségeiről. Az anekdotákkal színesített előadássorozat nemcsak szakmai szempontból volt hasznos, hanem a lenyűgöző előadásmód mellett példát is kaphattak a munkatársak az önmagára, kifejezőmódjára és a munkájára maximálisan igényes kutatói hozzáállásból.



Schiller Róbert

Schiller Róbert a kémiai és fizikai tudományok számos területén ért el kimagasló eredményeket, melyeket Széchenyi Professzori Ösztöndíjjal is elismertek (2000–2003). A tudomány határterületein szerzett mély, de ugyanakkor átfogó tudása révén hathatós segítséget tud nyújtani tanácsadóként az atomerőművek biztonságos üzemeltetéséhez, melyet 2001-ben Wigner-díjjal ismertek el.

Schiller Róbert kutatómunkája mellett rendszeresen oktat is több egyetemünkön. Címzetes egyetemi tanár az Eötvös Lóránd Tudományegyetemen és magántanár a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen. Diákok nemzedékei nőttek fel előadásain, szemináriumain és tankönyvein. Schiller Róbert a tudomány népszerűsítésének is elkötelezett harcosa. Írásai szinte mesészerűek, de ugyanakkor tényszerűek és pontosak. Munkásságát az év ismeretterjesztő tudósa címmel ismerték el 2012-ben.

Schiller Róbert azonban legfontosabb küldetésének talán a tudomány és a művészetek között önkényesen létrehozott szakadék áthidalását tekinti. Könyvei és esszéi mind-mind arról adnak tanúbizonyságot, hogy nem létezik „két kultúra”: a legnagyobb tudósok mindig is vonzódtak a művészetekhez, és sokszor maguk is kimagasló művészek voltak, de a legnagyobb művészek is mindig merítettek a tudomány ihletet adó tengeréből. Schiller Róbert egész munkássága bizonyítja, hogy kultúránk csak a tudományok és a művészetek együttes művelésével képes kiteljesedni.

Nem túlzás tehát, ha Schiller Róbert professzor urat mint szellemi életünk kiemelkedő alakját köszöntjük most 90. születésnapja alkalmából. Munkássága egyfajta híd a múlt és a jövő között, amely segíthet kultúránk megértésében és felemelésében, egy összetettebb és árnyaltabb világértelmezés kialakításában. Ennek elismerésképpen kapta meg 2015-ben a Magyar Érdemrend lovagkeresztjét.

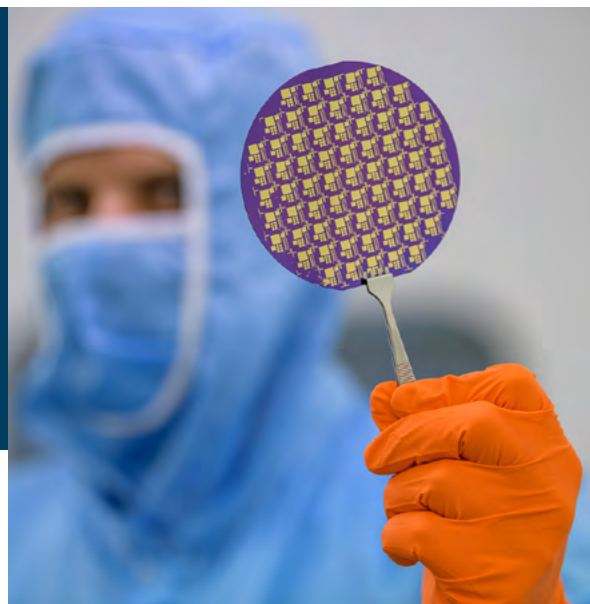
*A HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont
és a volt tanítványai nevében*

A **HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont** (HUN-REN EK) a Magyar Kutatási Hálózat jelentős tagja, kiemelkedő eredményeket ér el az energiakutatás, a nukleáris technológia, az anyagtudomány és a környezettudomány területén.

A HUN-REN EK

- három intézetében színvonalas, hazai és nemzetközi projektekhez kapcsolódó kutatásokat végeznek,
- működteti a Budapesti Kutatóreaktort, amely Magyarországon egyedülálló módon kínál lehetőséget speciális kutatások elvégzésére,
- sokoldalú tudósokból, kreatív mérnökökből és gyakorlott szakértőkből álló csoportokat foglalkoztat, akik jelentős tapasztalattal rendelkeznek a kutatás-fejlesztés és tanácsadás terén,
- **a fiatalok számára is érdekes kutatási és munkalehetőségeket kínál.**

A HUN-REN EK több éve szervez fiataloknak szóló rendezvényeket az „Alakítsd a jövőt” program-sorozatok keretében, miközben sikeresen működteti az egyetemistákat támogató pályázati rendszerét (EK²-pályázatok), amely a természettudományos képzésekben és a HUN-REN EK kutatásaiban való részvételt segíti.



Látogass el hozzánk!

ek.hun-ren.hu



Kövess minket!



Elérhetőségeink

E-MAIL:

info@ek.hun-ren.hu

vagy

kommunikacio@ek.hun-ren.hu

CÍM:

1121 Budapest, Konkoly Thege
Miklós út 29-33.

