

Klaszterezés és fázisátalakulás frusztrált hálózatokban

Coalition formation and phase transition in frustrated network

NÉDA Zoltán¹, RAVASZ Mária¹, FLORIAN Răzvan¹, LIBÁL András²
és GYÖRGYI Géza³

¹Babes-Bolyai University, Dept. of Theoretical Physics, Cluj-Napoca, Romania

²Center for Nonlinear Studies, Los Alamos National Laboratory, U.S.A.

³Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Fizika Tanszék, Budapest, Magyarország

ABSTRACT

The ground-state of an infinite-range Potts glass-type model with $\pm J$ bonds and unrestricted number of states is used to investigate coalition formation. As a function of the q probability of $+J$ bonds in the system it is found that the r relative size of the largest cluster (a cluster being the group of elements in the same state) shows a percolation like behavior. By simple analytical approaches and several numerical optimization methods we investigate the $r(q)$ curves for finite systems sizes. Non-trivial consequences for social percolation problems are discussed.

ÖSSZEFOGLALÓ

Egy végtelen hatótávolságú Potts-üvegszerű modell alapállapotát vizsgáljuk szociális klaszterezési és koalíció kialakulási folyamatok jellemzésére. A modellben a pozitív és negatív kötések együttes jelenléte az optimális klaszterezés szempontjából egy frusztrációt okoz, amelynek következtében a feladatot jellemző költségfüggvény optimalizációja egy komplex, NP nehéz feladat. Meglepő eredményként azt kapjuk, hogy a pozitív kötések valószínűségének a függvényében az optimális állapotban a legnagyobb klaszter relatív mérete egy perkoláció-szerű fázisátalakulást mutat. Ezen geometriai fázisátalakulás-szerű jelenséget véges rendszerekben analitikus és számítógép-szimulációs módszerekkel vizsgáljuk. A jelenségnek számos érdekes és nemtriviális szociológiai következményét tárgyaljuk.

Kulcsszavak: Potts-üveg, klasztereződés, frusztrált hálózatok, optimalizáció

1. BEVEZETŐ

Nap mint nap észlelhetjük a politikában, a gazdaságban, a társadalomban a különböző koalíciók, csoportok közti versengéseket. Természetesen ezen koalíciók kialakulása leginkább az országok vagy pártok közti politikai kapcsolatok, a cégek közti gazdasági viszonyok, és a kis társaságok, illetve egyének közti kapcsolatok jellegétől függ. Ezek a társadalmi kapcsolatok egy hierarchikus struktúrájú, nagyon bonyolult topológiával rendelkező frusztrált hálózatot alkotnak. Ezeknek a hálózatoknak a lényeges tulajdonságai aránylag egyszerű fizikai modellek segítségével tanulmányozhatók. Ha leegyszerűsítjük a kölcsönhatásokat pozitív (vagy vonzó) és negatív (vagy taszító) kapcsolatokra (pozitív kapcsolatról beszélünk barátok vagy partnerek esetén, negatív kapcsolatról ellenségek vagy vetélytársak esetében) belátható, hogy a rendszer koalíciókra szakad, hogy minél jobban megfeleljen az egyének – vagy gazdasági hálózatok esetében a cégek – közti kötéseknek [1]. Ideális csoport-szerveződés (klasztereződés) esetén az egy csoportban levő egyének közt csak vonzó, a különböző csoportokban levők között pedig csak taszító kölcsönhatás létezik. Természetesen ilyen ideális állapot nem mindig lehetséges, de statisztikus fizikai módszerekkel meghatározható az optimális konfiguráció a rendszerben [2-3].

Ez az optimális állapot nagyon különbözhet annak függvényében, hogy a rendszerben a pozitív vagy negatív kötések dominálnak. Ha a rendszerben a pozitív kapcsolatok vannak túlsúlyban, vagyis ha a társadalomban a kollaborációs hajlam nagy, akkor egy nagy klaszter (angolul cluster: fűrt) alakul ki. Ha viszont sok a negatív kötés a rendszerben, vagyis a konfliktusok nagyon gyakoriak, akkor minden egyén külön csoportot

alkot. Nagyon kis rendszerek esetén a két véglet közti átmenet fokozatos, de nagy rendszerekben ez az átmenet nagyon gyorsan történik, és amint majd tárgyalni fogjuk egy érdekes fázisátalakulás mutatható ki.

A probléma ami feltevődik, egy frusztrált rendszer optimalizálása. A feladat komplexitása hasonlít más érdekes és közismert NP nehéz problémához: fehérjeláncok egyensúlyi tekeredése, spinűvegek, az utazó-ügynök feladat vagy a gráf-színezési feladathoz. Ezek a feladatok azért bonyolultak, mert a megoldásukhoz szükséges idő nagyon gyorsan nő a rendszer méretével (bármilyen fokú polinomfüggvényénél gyorsabban). Ilyen feladatok tanulmányozására gyakran közelítő módszereket kell alkalmazni [4].

2. EGY EGYSZERŰ MODELL

Tekintsünk egy egyszerű modellt, amely segítségével szociális rendszerek klasztereződését, koalíciókra való szakadását vizsgáljuk [4]. A valóságban a társadalmi, politikai, gazdasági, stb. kapcsolatok folyton változnak, a modell viszont az egyszerűsítés kedvéért feltételezi, hogy a folyamat során (amíg a rendszer eljut az optimális állapotba) a kapcsolatok állandóak.

Legyen egy N egyedből álló globálisan csatolt rendszerünk. Két elem között a kötés lehet pozitív, ha az egyének szívesen kollaborálnak vagy lehet negatív ha konfliktusban vannak. A valóságban a kapcsolatok különböző erősségűek lehetnek és nem mindig szimmetrikusak: vagyis az egyének egymáshoz való viszonya nem mindig kölcsönös (pl. A nagyon kedveli B-t, de B szóba se áll vele). Itt azt az egyszerűbb esetet tekintjük, mikor szimmetrikus és egyforma erősségű kötéseink vannak. Az egyszerűség kedvéért ugyanakkor azt is feltételezzük, hogy az egyének egyforma súlyfaktoral rendelkeznek. A súlyfaktor a valóságban fontos lehet, mert sokszor figyelembe kell vennünk, hogy a különböző fontossággal rendelkező egyedek kötései különböző mértékű frusztrációt jelentenek a rendszerben. Elég a politikára gondolunk: ha az Egyesült Államok van konfliktusban egy másik országgal, sokkal nagyobb az általános frusztráció mintha esetleg Togo és Benin kerülne konfliktusba.

A fentebb értelmezett ideális rendszerben koalíciók fognak kialakulni, úgy, hogy minden egyén szeretne egy csoportba kerülni azokkal, akikkel pozitív kapcsolata van, és távol szeretne maradni azoktól, akikhez negatív kötés fűzi. Felmerül az a kérdés, hogyan fognak csoportokba rendeződni az egyének ahhoz, hogy legjobban kielégüljenek a kapcsolatok. Ideális klasztereződés esetén minden klaszteren belül csak pozitív, a csoportok között pedig csak negatív kötések kellene, hogy legyenek. Rögtön belátható azonban, hogy ez nem mindig (sőt nagyobb rendszerek esetén szinte soha nem) lehetséges. A feladat matematikai megfogalmazásához definiálható egy költségfüggvény (a rendszer energiája), amely annál nagyobb, minél erősebb a frusztráció a rendszerben. Ha a költségfüggvényt jól választjuk meg, feltételezhetjük, hogy ideális klasztereződés esetén ez minimális, így a rendszer „energiáját” minimalizálva találhatjuk meg az optimális állapotot. A rendszer energiájának felírása pár nagyon egyszerű megfontoláson alapszik. Mint már említettük az energia a rendszerben létező frusztráció mértéke. Sorra véve a kötéseket, mindig eldönthető, hogy a jelenlegi állapot eleget tesz-e a kötés jellegének vagy nem, és definiálható-e egy egyszerű költségfüggvény (energia) amely jellemzi a rendszer ellentmondás-mentességét. Így N globálisan kapcsolt egyed esetén a számunkra fontos K energiafüggvény alakja a következő lesz:

$$K = -\sum_{i < j} T_{ij} \delta_{\sigma(i)\sigma(j)} \quad (1)$$

ahol, $T_{ij} = \pm 1$ és $\sigma(i) \in \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$, vagyis azt az esetet vizsgáljuk, amikor $p=N$ állapot (klaszter) létezhet a rendszerben (a koalíciók számát nem korlátozzuk). A T_{ij} kötések eloszlásfüggvénye:

$$P(T_{ij}) = q \delta(T_{ij} - 1) + (1 - q) \delta(T_{ij} + 1), \quad (2)$$

ahol a q a pozitív kötések előfordulási valószínűsége, vagy ezek gyakorisága a rendszerben. Könnyen belátható, hogy a T_{ij} kötések kiosztása után az optimális állapotban a rendszer K energiája (költségfüggvénye) minimális lesz, így ennek az energiának a minimalizálásával keressük az optimális állapotot.

3. ÉRDEKES FÁZISÁTALAKULÁS

Az optimális állapotot különböző mennyiségekkel jellemezhetjük, mint pl. a kialakult koalíciók száma, a koalíciók átlagos mérete vagy a legnagyobb koalíció mérete. Természetesen ezen mennyiségek kiszámolásakor mindig a T_{ij} kötések nagyon sok realizációjára kell megkeresnünk az optimális állapotot, és az ezekben kapott értékek átlagát kell tekintenünk (egy statisztikai átlaggal kell dolgoznunk). A legérdekesebb viselkedést mutató paraméter, amely egyértelmű fázisátalakulásra utal a pozitív kötések valószínűségének a függvényében

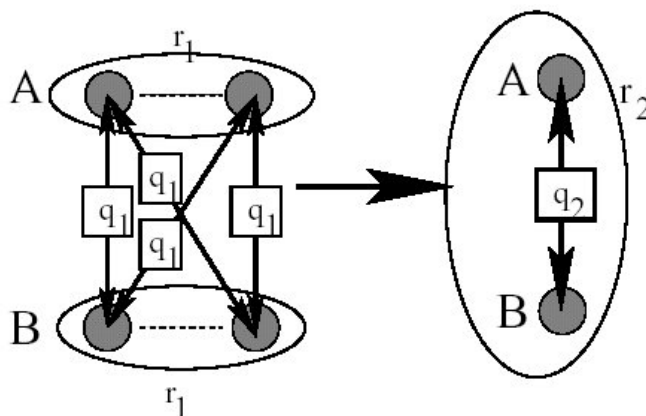
az a legnagyobb klaszternek a teljes rendszerhez viszonyított mérete, r , amit röviden a legnagyobb klaszter relatív méretének nevezünk. Ez a mennyiség 0 és 1 között van, és ez lesz a számunkra érdekes rendparaméter. Könnyen belátható, hogy ha csak pozitív kötések vannak ($q=1$), akkor egyetlen klaszter fog kialakulni ($r=1$), ha pedig csak negatív kötések ($q=0$) vannak, akkor egyáltalán nem alakulnak ki koalíciók ($r=1/N$), vagyis minden egyén egy külön csoportot képez az optimális (energiát minimalizáló) állapotban. Úgy gondolnánk, hogy ezen két szélső eset között lassú, fokozatos átmenet van. Meglepő módon azonban egy fázisátalakulás észlelhető a q paraméternek egy kritikus értéke körül. A feladat, amint már említettük egy komplex optimalizálási feladat, amit különböző analitikus vagy numerikus közelítő módszerekkel tanulmányozhatunk véges rendszerek esetén. Szigorú értelemben vett fázisátalakulás azonban csak végtelen nagy rendszer esetén létezik, és így a tanulmányaink során a véges rendszerekben kapott eredményekből kell következtetnünk arra, hogy mi történne végtelen nagy rendszer esetén. A következőkben röviden bemutatunk néhány analitikus és numerikus megközelítő módszert, amelyekkel a feladatot tanulmányoztuk [4].

3.1. A renormalizációs módszer

Első megközelítésként egy egészen egyszerű renormalizációs módszert mutatunk be. A módszer lényege, hogy mindig megduplázzuk a rendszer méretét és a rendparaméter előbbi értékéből megbecsüljük az új értékét. Eredetileg egy két elemből álló rendszerből indulunk ki. Ha a két elem között a kötés $q_1=q$ valószínűséggel pozitív, azt jelenti, hogy az optimális állapotban a legnagyobb klaszter relatív mérete q_1 valószínűséggel 1 illetve $1-q_1$ valószínűséggel $1/2$. Tehát:

$$r_1 = q_1 + (1 - q_1)/2 \quad (3)$$

Második lépésben veszünk két ilyen, két elemből álló rendszert (**A**,**B**), amelyekben a legnagyobb klaszter mérete r_1 , és összekötjük az elemeket egymással. (1. ábra)



1. ábra

A renormalizáció grafikus vázlatja

Most ki kell számítanunk annak a valószínűségét (q_2), hogy az új, **A** és **B** közti kötés pozitív legyen. Ahogy az ábrán is látható, az **A** és **B** elemei között összesen négy kötés létezik, ezért az új kötést pozitívnak vesszük a következő esetekben: (i) ha mind a négy kötés pozitív, ennek a valószínűsége q_1^4 , (ii) ha három pozitív és egy negatív, mivel négy ilyen eset van ennek a valószínűsége $4q_1^3(1-q_1)$, (iii) amikor két pozitív és két negatív kötés van (összesen hat ilyen kombináció létezik) akkor az esetek felében vesszük pozitívnak az új kötést. A valószínűség így $3q_1^2(1-q_1)^2$. Tehát

$$q_2 = q_1^4 + 4q_1^3(1 - q_1) + 3q_1^2(1 - q_1)^2, \quad (4)$$

a legnagyobb klaszter mérete pedig

$$r_2 = q_2 + (1 - q_2)r_1/2, \quad (5)$$

mivel q_2 valószínűséggel **A** és **B** egy klasztert alkot, vagyis a rendparaméter 1, $(1 - q_2)$ valószínűséggel pedig a legnagyobb klaszter az **A** vagy a **B** legnagyobb klasztere lesz, amelynek az eddigi relatív mérete r_1 volt, de mivel a rendszer méretét megdupláztuk, most ehelyett $r_1/2$ -t kell írunk a képletbe.

Ezután végtelen sokszor megismételhetjük ezt a lépést, megkétszerezve a rendszer méretét. k lépés után a rendszer mérete $N_k = 2^k$, és felírhatjuk a renormalizációs egyenletek általános formáját.

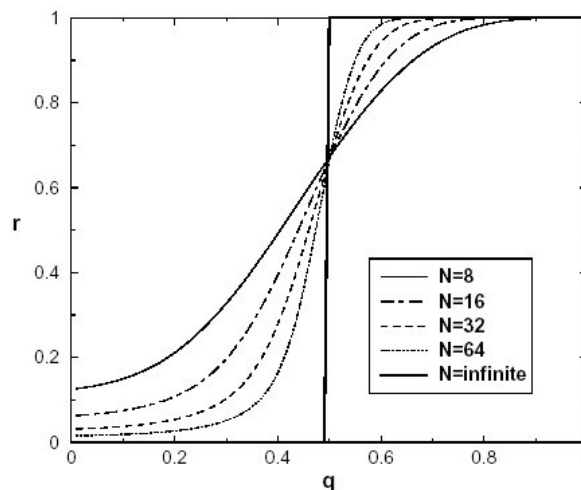
$$q_{k+1} = q_k^4 + 4q_k^3(1 - q_k) + 3q_k^2(1 - q_k)^2, \quad (6)$$

$$r_{k+1} = q_{k+1} + (1 - q_{k+1})^k / 2. \quad (7)$$

Érdekel minket, hogy milyen értékhez tart a rendparaméter végtelen lépés után, annak függvényében, hogy milyen kezdeti q valószínűségi értékből indultunk ki. A fenti egyenletnek két stabil iterációs fixpontja van 0 és 1 , illetve egy instabil fixpontja az $1/2$. Ha $q \in [0, 1/2)$ értékből indulunk ki, akkor $\lim_{k \rightarrow \infty} q_k = 0$ és

$\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = 0$, ha pedig egy $q \in (1/2, 1]$ értéktől indulunk el, akkor $\lim_{k \rightarrow \infty} q_k = 1$ illetve $\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = 1$. Az eredmények

alapján elmondhatjuk, hogy végtelen rendszer esetében két különböző fázis létezik, a fázisátalakulás pedig a $q_c = 1/2$ értéknél történik. Ha a rendszerben egy kötés $q < 1/2$ valószínűséggel pozitív, vagy másképpen megfogalmazva, a rendszerben a kötéseknek kevesebb mint fele pozitív, akkor végtelen nagy rendszer esetén a legnagyobb klaszter relatív mérete tart a nullához. Ha a rendszerben $q > 1/2$, tehát a kapcsolatok több mint fele pozitív, akkor a legnagyobb klaszter relatív mérete 1 -hez tart. A renormalizációs egyenletek alapján ábrázolhatjuk a rendparaméter változását a q valószínűség függvényében, a termodinamikai határesetben illetve különböző véges méretű rendszerek esetén. (2. ábra) Az ábrán látható, hogy valóban egy perkolációra emlékeztető fázisátalakulásról van szó.

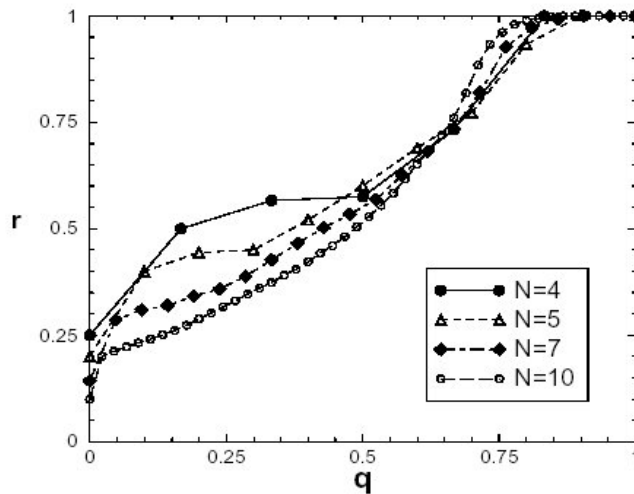


2. ábra

A renormalizációs módszerrel nyert eredmények

3.2. Egzakt eredmények kis rendszerek esetén

Kis rendszerekben a kötéseknek egy adott eloszlása esetén számítógép segítségével feltárható a $\sigma(i)$ koalíciók összes lehetséges konfigurációja. Mindegyik konfigurációnál kiszámítva a rendszer energiáját, egzakt módon megkaphatjuk a minimális energiát és a hozzátartozó optimális konfigurációt illetve a rendparamétert. A rendparaméter viszont változhat a kötések különböző eloszlása esetén, ezért átlagolnunk kell. $N \leq 7$ méretű rendszerekben a kötések eloszlásának összes konfigurációja is, tehát itt teljesen egzakt eredményeink vannak. $7 < N \leq 10$ méretű rendszereknél a számítógép által igényelt memória és futtatási idő nagyon megnő, ezért már nem számoljuk ki a rendparamétert a kötések összes lehetséges eloszlása esetén, de egy elég nagy számú (5000) konfigurációra átlagolunk. Az eredmények a 3. ábrán láthatók. Annak ellenére, hogy csak nagyon kis méretű rendszerekre tudtunk egzakt eredményeket kapni, szükségesnek tartottuk, elvégezni ezeket a számolásokat, hogy ellenőrizhessük a többi módszer által nyújtott eredményeket. Az ábrán látható, hogy az $r(q)$ görbék meredeksége (a q_c körül) egyre nő a rendszer méretének növelésével. Ugyanezt mutatják az előbbi megközelítésekkel kapott ábrák is. Az eredmények alátámasztják elvárásainkat.



3. ábra
Egzakt eredmények

3.3. Monte Carlo féle optimalizációs módszerek

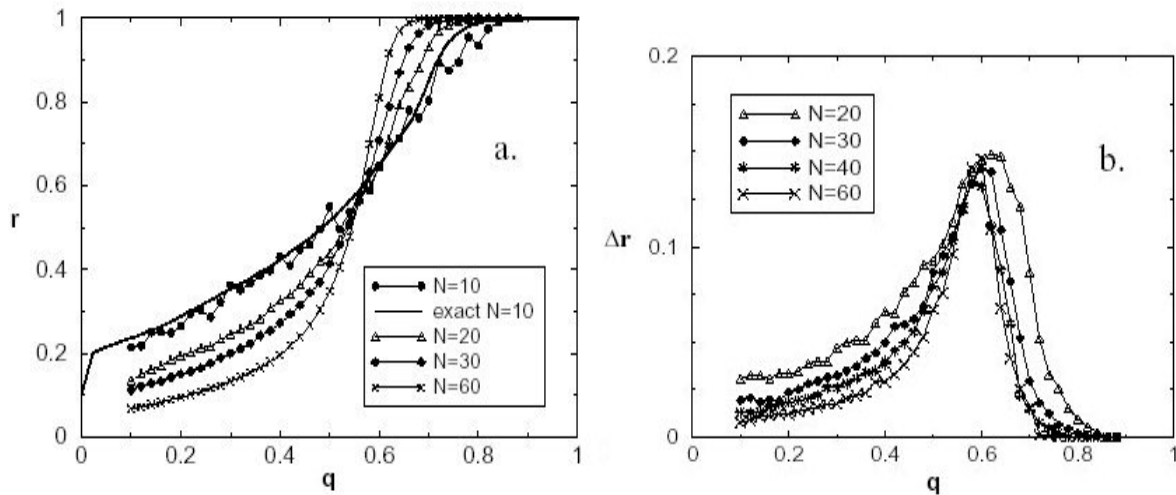
A statisztikus fizikában frusztrált rendszerek esetén leggyakrabban a Monte Carlo típusú optimalizációs módszereket használják. A mi feladatunk, hogy a rendszer energiáját minimalizálva keressük a rendszer optimális alapállapotát. Erre a klasszikus szimulációs hűtési módszert alkalmazzuk (*simulated annealing* [5]). Kezdetben az elemeket véletlenszerűen különböző állapotokba helyezzük, és a kötéseket q valószínűséggel vesszük pozitívnak. A rendszert egy T hőmérsékleti értékkel jellemezzük, amelynek értékét az időlépések során nagyon lassan csökkentjük. Egy időlépésben nagyon sokszor elvégezzük a következő lépéseket: (i) véletlenszerűen kiválasztunk egy elemet a rendszerből, (ii) áthelyezzük a legmegfelelőbb koalícióba, úgy, hogy a rendszer összenergiája a lehető legkisebb legyen, (iii) ha áthelyezéssel nem lehet csökkenteni a rendszer energiáját, megkeressük, hogy melyik koalícióba helyezve az elemet nőne a legkevesebbet a rendszer energiája és ezt a lépést $\exp(-\Delta K/T)$ valószínűséggel végrehajtjuk. Az időlépés végén csökkentjük a hőmérséklet értékét, majd a következő időlépésben ismét elvégezzük ezeket a lépéseket. Így megközelítjük a kötések egy adott eloszlása esetén a rendszer optimális állapotát. Látható, hogy bizonyos valószínűséggel a rendszer energiáját növelő lépéseket is megengedünk, és ez a valószínűség a hőmérséklettől függ. A hűtési módszert frusztrált rendszerek esetén alkalmazzák. A mi modellünk is frusztrált és az energiának nagyon sok lokális minimuma létezik. Ha csak az energiát csökkentő lépéseket engedélyezzük, a rendszer könnyen bekerül egy ilyen lokális minimumba és nem kerülhet ki onnan. A hűtési módszer lényege az, hogy a hűtés elején, amíg nagy a hőmérséklet, viszonylag nagy energiaváltozások megengedettek a rendszerben, majd nagyon lassan csökkentve a hőmérsékletet, egyre kisebb és kisebb fluktuációkat engedélyezünk, így ha jól kikísérletezzük a szimulációs paramétereket, akkor elérhető, hogy a rendszer a globális minimumba kerüljön. Sajnos soha nem lehetünk teljesen biztosak, hogy az energia elérte a minimumot, de jelenleg ez a módszer a legáltalánosabban használt a hasonló komplexitású feladatok megoldására.

A 4. ábrán a szimulációs hűtéssel nyert eredmények láthatók. Mivel a módszer csak közelítő módszer, és mint már említettük nagyon érzékeny a szimulációs paraméterek megválasztására, szükségünk volt az előbb alkalmazott egzakt numerikus módszerre, hogy eredményeinket megalapozhassuk. A 4a. ábrán látható, hogy $N=10$ esetén az egzakt eredmények tökéletesen találnak a Monte Carlo féle optimalizációs módszerekkel nyert eredményekkel. A 4b. ábrán láthatjuk, hogy a rendparaméter varianciája a fázisátalakulási pont körül a legnagyobb.

4. KÖVETKEZTETÉSEK

Módszereink egyértelműen bizonyítják, hogy a vizsgált rendszerben a $q_c=0.5$ körül egy perkolációra emlékeztető fázisátalakulás van. Ez a fázisátalakulás azonkívül, hogy a véletlenszerű frusztrált háló fontos tulajdonsága, statisztikus fizikai vonatkozások mellett érdekes lehet bizonyos szociológiai jelenségek szempontjából is. Erre a legjobb példa talán egy osztályközösség. Az osztályokban is észlelhető a kis csapatok kialakulása, ugyanakkor vannak osztályok, ahol a gyerekek nagyon jól egyeznek, az egész osztály egyetlen társaságot alkot, és vannak esetek amikor szinte egyáltalán nem alakulnak ki csoportok, maximum két-három

főből álló kis baráti körök. Kis rendszerek esetén (amint a szimulációs eredmények is mutatják) az észlelt fázisátalakulás nem „éles”, és inkább egy folytonos átmenet tapasztalható, mint egy ugrás. A legkiszámíthatatlanabb szociológiai rendszerek azok, amelyekben a pozitív és negatív kötések megközelítőleg egyenlő számban vannak, vagyis a $q=0.5$ körül. Ilyenkor a pozitív kapcsolatok számának legkisebb változása is nagy ugrást okozhat a legnagyobb klaszter méretében.



4. ábra

*A szimulációs hűtési módszer eredményei
a) a rendparaméter (a legnagyobb klaszter) és b) a rendparaméter deviációja
a q pozitív kötések koncentrációjának függvényében*

Ez a modell természetesen egy első közelítés. A valós szociológiai rendszerek nagyon komplex rendszerek, a társadalmi kapcsolatok nagyon bonyolult topológiával rendelkező hálózatot alkotnak, és elsősorban nem globálisan csatolt rendszerek. Ezenkívül a modell a kötések és a társadalmi szerepeket időben állandónak tekinti és mindig egy adott konfiguráció esetén kell megkeressük az optimális állapotot. Tudjuk jól, hogy a valóságban viszont a kapcsolatok és a szerepek folyton változnak, az optimális állapot kialakulása közben is, bár ezek a változások valószínűleg nem olyan nagy mértékűek. A modell ugyanakkor elhanyagolja a rendszer dinamikáját, feltételezve, hogy mindig az optimális állapot felé tart. Valós rendszerek esetén nem lehetünk biztosak abban, hogy a rendszer eljut az optimális állapotba. Mivel ezek mind frusztrált rendszerek, az energiának sok lokális minimuma van, és könnyen megtörténhet, hogy a rendszer bekerül egy ilyen állapotba és nem éri el az optimális állapotot (nem a globális minimumba kerül). Ennek egyik oka az lehet, hogy általában az egyének a saját érdekeiket nézik, a saját energiájukat próbálják csökkenteni és nem a „globális” optimalizációra törekcszenek. Vannak esetek, amikor az egész rendszer energiáját nem lehet csökkenteni egy-egy egyén egyeztetés nélküli koalíció váltásával, csak úgy, hogy egy lépésen belül több egyént helyezünk át más klikkbe.

Habár egy ilyen modell még nem alkalmas valós koalíciók kialakulásának magyarázatára, hasznos lehet majd hasonló, komplexebb, a valós rendszereket jobban megközelítő optimalizációs modellek tanulmányozásánál. Az észlelt fázisátalakulás meg elvi jelentőségű a frusztrált véletlenszerű rácsok szemszögéből. Még felderítésre vár, hogy nem globálisan csatolt rendszerekben hogyan történik a koalíciók kialakulása. Ez már egy jobb megközelítést jelentene a társadalomra vagy más nagyobb szociális rendszerekre vonatkozóan.

HIVATKOZÁSOK

- [1.] R. Axelrod, S. Bennet, *Br. J. Political Science*, **23** (1993) 211
- [2.] S. Galam, *Physica A*, **230** (1996) 174; *Physica A* **238** (1997) 66
- [3.] R. Florian, S. Galam, *Eur. Phys. J. B*, **16** (2000) 189
- [4.] Z. Neda et al., *Physica A*, **362** (2006) 357
- [5.] S. Kirckpatrick, C.D. Gelatt and M.P. Vecchi, *Science* **220** (1983) 671