RENDEZETLENSÉG, KOMPLEXITÁS ÉS KÁOSZ: MINDENNAPOS FOGALMAK A MODERN STATISZTIKUS FIZIKÁBAN

Temesvári Tamás
PhD, tudományos főmunkatárs, MTA–ELTE Elméleti Fizikai Tanszéki Kutatócsoport
temtam@helios.elte.hu

Tél Tamás
a fizikai tudomány doktora, egyetemi tanár, ELTE Elméleti Fizikai Tanszék
tel@general.elte.hu

Bevezetés

A statisztikus módszerek alkalmazása a makroszkopikus rendszerek vizsgálatában a 19. század fizikájának jelentős újítása volt. A makroszkopikus folyamatokhoz képest szinte végtelen gyors, bonyolult, rendezetlen atomi mozgások, a mikroszkopikus dinamika nyomon követése elvileg lehetetlen – makroszkopikus mérőműszereink nem tudnak mikroszkopikus részleteket mérni –, de tulajdonképpen nincs is szükségünk erre a feldolgozhatatlan adathalmazra. Ez a helyzet, amit nevezhetünk a „lehetetlen, de egyben fölösleges is” elvének, kényszeríti ki a valószínűség-számítás módszereinek bevezetését: a mikroszkopikus dinamika részletei helyett a mikroszkopikus állapotok általa generált valószínűségi eloszlása, illetve az ebből származtatható átlagok és momentumok az elméleti vizsgálódások tárgya.

Látjuk, hogy a rendezetlenség a statisztikus tárgyalásmód alapja, mégis a mai terminológia a rendezetlen rendszerek fogalmát más értelemben használja (lásd a következő fejezetben). A James Clerk Maxwell és Ludwig Eduard Boltzmann által kifejlesztett elmélet, amit később Josiah Willard Gibbs rendszerezett és tökéletesített, egyszerű egykomponensű rendszerekre szinte receptszerűen alkalmazható: kiszámítjuk az állapotösszeget, alkalmazzuk a disszipáció-fluktuáció tételt … stb. A rendezetlenség ekkor tisztán hőmérsékleti jellegű, a Hamilton-operátor alapállapota (ahova a rendszer zérus hőmérsékleten, azaz $T = 0$-ra eljut) nem elfajult, a kisenergiájú gerjesztések számossága pedig az exponenciálisnál kisebb. A termodinamika harmadik főtétele nyilvánvalóan érvényes ilyenkor: az entrópia – a „rendezetlenség mértéke” – nullához tart a hőmérséklettel együtt.

Rendezetlenség

Azok a rendszerek, amiket manapság rendezetleneknek nevezünk, a rendezetlenséget magában a Hamilton-operátorban hordozzák – azaz a mikroszkopikus energia-kifejezésben, ami meghatározza a dinamikát –, illetve ha nem, akkor bizonyos kísérleti körülmények esetén ehhez hasonlóan viselkednek (ilyenek az „igazi” üvegek, mint az ablaküveg, lásd az alábbi (b) példát). A statisztikus fizikai kutatások igen jelentős hányada – mind kísérleti, mind pedig elméleti szinten – irányult, a múlt század hetvenes éveitől kezdve, ezen rendszerek legfontosabb tulajdonságainak a megértésére. Mindazonáltal a probléma nehézségét jelzi, hogy három évtized igen intenzív kutatása után, a prototípusnak tekinthető spinüvegek (Mézard et al., 1987) ([a] példa) néhány alapvető kérdése még napjainkban sem tisztázott (De Dominicis et al., 1998). Tekintsünk meg három tipikus példát:

(a) A spin üvegek Edwards–Anderson-féle modelljének Hamilton-függvénye

$$-\Sigma J_{ij} S_i S_j$$

ahol az $S_i = \pm 1$ Ising spinek egy tökéletes kristály rácspontjaiban helyezkednek el, a J_{ij} -k viszont véletlenszerű kölcsönhatási energiák (váltakozó előjellel) a mágneses momentumok között. Ez utóbbiak szimulálják a valódi spinüvegekben (például CuMn) a véletlenszerűen elhelyezkedő mágneses momentumok (Mn) közötti oszcilláló – hol ferro-, hol pedig antiferromágneses kölcsönhatást.

(b) Túlhűtött folyadékok elkerülhetik a kristályosodást. Ilyenkor alacsony hőmérsékleten egy rendezetlen atomi konfiguráció körüli lokális oszcillációk jelentik a termikus mozgást. Ez az üvegállapot valójában metastabil, a rendkívül lassú folyamatok a metastabil állapotok közötti aktivációs dinamika következményei.

(c) Fehérjemolekulák rendezetlenségét azok elsődleges szerkezete, azaz az aminosavak véletlenszerű sorrendje okozza.

A rendezetlen, illetve komplex rendszerek fogalmát ma már szinte szinonimaként használjuk, habár vannak olyan esetek, amikor a rendezetlenség nem jár együtt komplex viselkedéssel. (Gondoljunk egy kristályos kettős ötvözetre: a benne $T = 0$ -n megmaradó, ún. reziduális entrópia pusztán a keveredés következménye.) Habár nincs elfogadott általános definíciója annak, hogy mit nevezünk komplex rendszernek, a „lehetetlen, de egyben fölösleges is” elv egy magasabb szintű érvényesülése látszik annak a közös aspektusnak, ami ezeket az annyira különböző jelenségeket összefogja: egy ilyen rendszer konkrét realizációja lényegében tárgyalhatatlan (elsősorban az inhomogenitások miatt), de az eredmények esetlegessége miatt szükségtelen is. Újra csak a valószínűség-számításra van szükség, most azonban a makroszkopikus mennyiségek realizációk közötti eloszlása szolgáltatja a *tipikus* információkat (szemben az *esetlegesekkel*). A „mikroszkopikusan bonyolult dinamikát”[1] most a makroszkopikus mennyiségek rendkívüli érzékenysége kíséri a rendszer paramétereinek csekély megváltoztatására.

A teljesség igénye nélkül tekintsünk néhány olyan jelenséget, amelyek rendezetlen rendszerekben széleskörűen előfordulnak:

(a) Az egyensúlyi termodinamika nem írható le egyszerű Gibbs-eloszlás alkalmazásával: bonyolult ergodicitássértés lép fel, és/vagy az alacsony energiájú metastabil állapotok szerepe jelentős (az ún. komplexitás – vagy más néven konfigurációs entrópia –, ami az adott energiájú metastabil állapotok számának logaritmusa, makroszkopikussá válik).

(b) A – fentebb említett – nagyfokú érzékenység a rendszer mikroszkopikus paramétereinek kis megváltozására nem az egyetlen káoszszerű jelenség (a káosz definícióját a következő részben adjuk meg). Az ún. *sztatikus* káosz esetén egy kontrollparaméter infinitezimális megváltoztatása egy olyan új termodinamikai állapotot ad, amelyik teljesen korrelálatlan az előzőhöz képest (például a metastabil állapotok átrendeződnek) (Bray – Moore, 1987). Példaként említhetjük a spinüvegeket, amelyekben a *hőmérsékleti* káosz (vagyis az a sztatikus káosz, ahol a hőmérséklet a megfelelő kontrollparaméter) divatos és máig nem teljesen tisztázott probléma.

[1] Ludwig Boltzman kinetikus elmélet kidolgozásakor bevezetett szóhasználatában „molekuláris káoszt” említ.

(c) Az egyszerű statisztikus fizikai rendszerek egy véges relaxációs idő eltelte után egyensúlyi dinamikát követnek: az ún. kétidőfüggő mennyiségek mint a korrelációs- és válaszfüggvények, csak a két idő különbségétől függnek (időeltolási invariancia), és mindig teljesül a fluktuáció-disszipáció tétel. Ezzel szemben a komplex rendszerek tulajdonképpen soha nem jutnak el a termikus egyensúly állapotába, a relaxációs idők egy végtelen spektrumával rendelkeznek. Mindennapos kísérleti tapasztalat, hogy az ilyen rendszerek viselkedése függ a preparációs időtől (ezt hívják várakozási időnek). Az időeltolási invarianciának ez a sérülése egy permanens öregedési folyamat (aging), a polimerek világában régtől fogva ismert.

A komplex fizikai rendszerek újszerű fogalmai, elméleti megközelítései, a kifejlesztett számítógépes szimulációs eljárások és kísérleti protokollok más tudományokat is elértek. Nem törekedvén teljességre, elsősorban az ideghálózatokat és az optimalizációs problémákat említhetjük (Mézard et al., 1987), de fontos alkalmazások születtek a biológiában (evolúcióelmélet, illetve makromolekulák) (Stein, 1992), vagy akár a pénzügytudományban (Bouchaud –Potters, 1997).

Dinamikai káosz

A nagy szabadsági fokú rendszerek bonyolult mikroszkopikus dinamikáját, a boltzmanni értelemben vett molekuláris káoszt, manapság a *zaj* szinonimájaként használjuk. A zajos mozgás a nagyon sok összetevőből álló rendszerek valamely komponensének véletlenszerű viselkedése (például egy részecske Brown-mozgása, termikus zaj), mely a környezettel való bonyolult kölcsönhatás következménye. Ennek fényében meglepő az a megfigyelés, hogy bonyolult mozgás *egyszerű* rendszerekben is kialakulhat. A bonyolultság ilyenkor nem az igen sok összetevő jelenlétéből adódik, hanem a kevés komponens erős (de egyszerű törvényt követő) kölcsönhatásából, a *belső* dinamikából. Az 1980-as évek óta a tudományos szóhasználatban elterjedt „káosz" fogalma (Gleick, 1999; Szépfalusy – Tél, 1982) a szó eredeti értelmében ezért időbeli folyamatokra utal. A kaotikus viselkedés az egyszerű, kevés változóval leírható rendszerek olyan mozgása, melynek fő tulajdonságai (Götz, 2001; Tél – Gruiz, 2002):

(a) időben szabálytalan, nem áll elő véges számú periodikus mozgás összegeként sem, aperiodikus;
(b) hosszú távon előre jelezhetetlen, és érzékeny a kezdőfeltételre;
(c) a fázistérben komplex, de rendezett: fraktál szerkezetű.

Káosz már minden háromváltozós, elsőrendű, autonóm differenciál-egyenletrendszer esetén megjelenik, ha az kellően általános, pontosabban *nemlineáris*. Ennek megfelelően bármelyik gerjesztett egydimenziós nemlineáris mozgás lehet kaotikus. Az egyik tipikus és egyben legegyszerűbb példa kaotikus mozgásra ezért az

$$\ddot{x} = -\alpha\dot{x} - \omega_0^2 x - \varepsilon x^3 + A\cos(2\pi t/T)$$

egyenlettel leírt szinuszosan gerjesztett anharmonikus oszcillátoré.

A káoszt a fent felsorolt tulajdonságok közül gyakran a másodikkal definiálják. Egy rendszer akkor érzékeny a kezdőfeltételeire, ha a közeli kezdőpontokból induló mozgások időben exponenciális ütemben válnak szét, azaz kis kezdeti különbségek jelentős végállapotbeli különbségre vezetnek. A szétválás átlagos erősségét mérő mennyiség az ún. átlagos Ljapunov-exponens. Érdemes rámutatni azonban arra, hogy a fenti tulajdonságok általában egymást feltételezik, egyszerre vannak jelen. Ha tehát egy fizikai rendszer hosszú távon aperiodikus, akkor időbeli fejlődése előre jelezhetetlen, és egyben alkalmas ábrázolásban fraktál szerkezetű. Talán éppen e tulajdonságok együttes jelenléte miatt szokás időnként a kaotikus viselkedésű rendszereket is komplex rendszereknek tekinteni.

E tulajdonságok mögött egyetlen közös vonás áll: az, hogy a hosszú idejű viselkedés csak *valószínűségi* fogalmakkal írható le. A kezdeti feltételekre való érzékenység miatt a hosszú idejű állapot ugyanis még a lehető legkisebb, de óhatatlanul véges kezdeti pontatlanság esetén sem adható meg pontosan. A hosszú idő után beálló lehetséges állapotok száma igen nagy, ezért ismét a „lehetetlen, de egyben fölösleges is" elvének követésével járunk el. Érdemes annak a valószínűségét vizsgálni, hogy egy mozgó pont a fázistér egy pontjának közelébe esik. Elegendően hosszú idő után ez az eloszlás független az időtől (stacionárius), és kiderül, hogy tetszőleges pontossággal megadható. Periodikusan gerjesztett rendszerekben érdemes ezt az eloszlást a T gerjesztési idő egész számú többszöröseinek megfelelő pillanatfelvételeken vizsgálni. A gerjesztett anharmonikus oszcillátor esetén ez az eloszlás az $(x, v \equiv \dot{x})$ kétdimenziós fázistér egy fraktál részhalmazán, az ún. kaotikus attraktoron ül. Az eloszlás rendkívül egyenetlen, nagyon nagy és kis értékek tetszőlegesen közel kerülhetnek (Tél – Gruiz, 2002). Az eloszlás maga is fraktál, végtelen sok, de különböző súlyú Dirac-delta összege. Az átlagos Ljapunov-exponens a lokális távolodási rátáknak ezzel az eloszlással képzett átlaga.

Érdemes hangsúlyozni, hogy csak azok a bonyolult időbeli viselkedések tekintendők kaotikusnak, melyek egyszerű törvényekből következnek. *A káosz átmenet a szabályos* és *a zajos mozgás között*. A zajos mozgások a fázisteret egyenletesen töltik ki, bennük fraktál struktúrák nem alakulhatnak ki, eloszlásuk sima.

A kaotikus mozgások egy további tulajdonsága, hogy *paramétereinek* csekély megváltoztatása jelentős viselkedésbeli különbségekre vezet (akár a valószínűség-eloszlás jellege is alapvetően megváltozhat, a mozgás kaotikusból szabályosba válthat). Ez az a tulajdonság, mely a rendezetlen rendszerek elméletében a sztatikus káosz fogalmához vezetett.

Kaotikus mozgással számos hétköznapi jelenség is kapcsolatos, mint például a tésztagyúrás, melynek során az egyes anyagok (só, vaj stb.) részecskéi kaotikusan sodródnak, s éppen ez vezet a jó keveredéshez. A turmixgép annál hatékonyabb, minél kaotikusabb benne a folyadékelemek mozgása. Ma még kevesen tudják, hogy a környezeti szennyezések nagyskálájú terjedése is kaotikus folyamat.

A káosz jelensége számos tudományban a matematikától kezdve (Szász, 2000), a mérnöki tudományokon (Károlyi – Domokos, 1999; Stépán, 1991), a meteorológián (Götz, 2001) és biológián (Cushing et al., 2003; Scheuring et al., 2003) keresztül az égi mechanikáig (Érdi, 2001) alapvető szemléletváltásra vezetett. A káosszal járó gondolkodásmód a társadalomtudomány számos területét is új megvilágításba helyezi (Fokasz, 2003).

Térbeli és időbeli káosz

Hosszú ideig tartó kaotikus viselkedés csak a termodinamikai egyensúlytól távol eső rendszerekben alakulhat ki, melyeken energia- vagy részecskeáram folyik keresztül. Az ilyen rendszerekben a térbeli kiterjedés is gyakran fontos szerepet játszik. Minden parciális differenciálegyenlettel leírt térbeli és időbeli folyamatban (pl. áramlások, kémiai reakciók, ingerületvezetés) nem túl nagy energiabefektetés esetén előfordulhat, hogy a mozgásban a szabadsági fokok bizonyos csoportjai vesznek csak részt, így a mozgás effektíven alacsony dimenziós. Egyszerű példa az égés elméletében használt Kuramoto–Sivasinszkij-egyenlet:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = a\Delta\psi - b\Delta^2\psi + c(\nabla\psi)^2$$

A megfigyelő számára a véges sok szabadsági fok szereplése azt jelenti, hogy többé-kevésbé szabályos *térbeli mintázatok* (például hullámok) vonulnak át a rendszeren, de ezek ismétlődése időben sohasem pontosan periodikus. Az ilyen térbeli és időbeli káosz (spatiotemporal chaos) tehát első közelítésben bizonyos térbeli struktúrák előfordulási gyakoriságában mutatkozik meg (Pandit et al., 2002). Az ilyen folyamathoz alacsony dimenziós kaotikus attraktor is tartozhat. Ugyanakkor a jellemző térbeli struktúra megjelenése számos új jelenséggel (nemlineáris hullámok, csúcsok, frontok, határréteg, szinkronizált viselkedés) kapcsolatos. A determinisztikus káoszhoz hasonlóan a térbeli és időbeli káosz jelenléte sem dönthető el az egyenletek és paraméterek ismeretében, csak méréssel vagy szimulálással. Mára sok, első közelítésben tisztán időbeli káosznak tűnő jelenségről (mint például a populációk viselkedése, járványok) derült ki, hogy pontosabban megfigyelve térbeli káoszt is mutatnak.

Összefoglalás, kitekintés

A komplexitásnak számos megjelenési formája lehetséges. E fogalom pontos definíciójának megadását ezért meg sem kíséreljük, csupán jelezzük, hogy az itt felsorolt jelenségeken kívül sok más összefüggésben is megjelenik (Kocarev – Vattay, 2005). A komplex rendszerek vizsgálata kétségtelenül igen jelentős modern kutatási terület.

Ennek illusztrálására egyetlen példa: a komplex viselkedés szabályozása. Az egyszerű időbeli káosz kontrollálható, azaz a mozgás alkalmas külső beavatkozással egyszerűvé, periodikussá tehető (Petrov et al., 1993). Ennek analógiájára remélhető, hogy a térbeli és időbeli káoszt mutató rendszerek is periodikussá tehetők, azaz bizonyos térbeli mintázatok stabilizálhatók (Pandit et al., 2002). Még általánosabban: az a kérdés merül fel, hogy a sokkomponensű komplex rendszerek, például egy repülőgép esetében található-e olyan munkapont, ahol *bármelyik* összetevő kis megváltozása esetén a rendszer visszatér az eredeti állapotba, vagyis globálisan stabil. Ennek megválaszolása a jövő feladata.

Kulcsszavak: *mikroszkopikus dinamika, rendezetlenség, termodinamika, komplex rendszerek, káosz, nemlinearitás, valószínűségi leírás*

IRODALOM

Bouchaud, Jean-Philippe – Potters, Marc (1997): Théorie des risques financiers. Aléa-Saclay (coll.) CEA, Paris

Bray, Alan J. – Moore, Michael A. (1987): Chaotic Nature of the Spin-glass Phase. Physical Review Letters. **58**, 57.

Cushing, J. M. et al., (2003): *Chaos in Ecology: Experimental Nonlinear Dynamics.* Academic Press, NY

De Dominicis, Cyrano – Kondor, I. – Temesvári, T. (1998): In Spin Glasses and Random Fields. In: Young, A. P. (ed.): *Series on Directions in Condensed Matter Physics.* Vol. 12. World Scientific, Singapore

Érdi Bálint (2001): *A Naprendszer dinamikája.* Eötvös, Budapest

Fokasz Nikosz (szerk) (2003): *Káosz és nemlineáris dinamika a társadalomtudományokban.* Typotex, Budapest

Gleick, James (1999): *Káosz, egy új tudomány születése.* Göncöl, Budapest

Götz Gusztáv (2001): *Káosz és prognosztika.* Országos Meteorológiai Szolgálat, Budapest

Károlyi Görgy – Domokos Gábor (1999): Symbolic Dynamics of Infinite Depth: Finding Invariants for BVP's. Physica D. **134**, 316.

Kocarev, Ljupco – Vattay Gábor (eds.) (2005): *Complex Dynamics in Communication Networks.* Springer, Berlin

Mézard, Marc – Parisi, G. – Virasoro, M. A. (1987): *Spin Class Theory and Beyond.* World Scientific, Singapore

Pandit, Rahul et al. (2002): Spiral Turbulence and Spatiotemporal Chaos: Characterization and Control in Two Excitable Media. Physica A. **306,** 211.

Petrov, Valery – Gáspár Vilmos et al. (1993): Controlling Chaos in the Belousov-Zhabotinsky Reaction. Nature. **361,** 240.

Scheuring István et al. (2003): Spatial Models of Prebiotic Evolution: Soup before Pizza? Origins of Life and Evolution of the Biosphere. **33,** 319.

Stépán Gábor (1991): Chaotic Motion of Wheels. Vehicle System Dynamics. **20**, 341.

Stein, Daniel L. (ed.) (1992): *Spin Glasses and Biology.* Series on Directions in Condensed Matter Physics. Vol. 6. World Scientific, Singapore

Szász Domokos (ed.) (2000): *Hard Ball Systems and the Lorentz Gas.* Springer, Berlin

Szépfalusy Péter – Tél Tamás (szerk.) (1982): *A káosz.* (Akadémiai, Budapest

Tél Tamás – Gruiz Márton (2002): *Kaotikus dinamika.* Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest