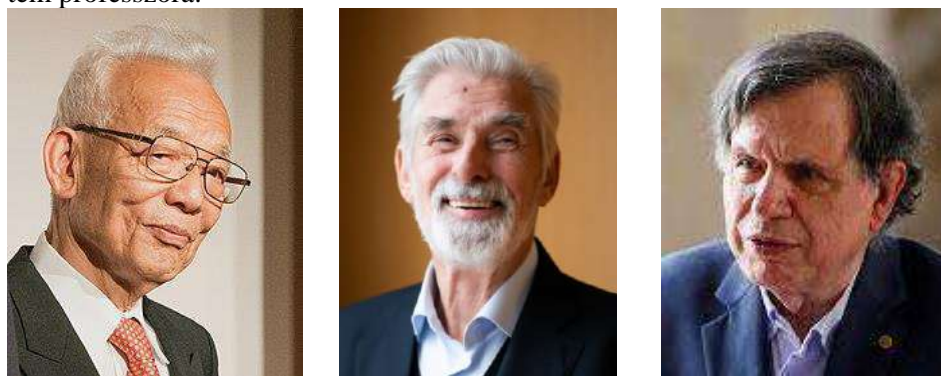


## Klíma modellezés, illetve rendeződés fagyott rendezetlenség esetében: Fizikai Nobel-díj 2021

**Gulácsi Zsolt**

fizikus, ny. egyetemi tanár, Debreceni Egyetem

A 2021-es fizikai Nobel-díjat, megfogalmazás szerint „*Úttörő hozzájárulás a komplex rendszerek megértéséhez*” okából, három személy kapta (1. ábra): Syukuro Manabe ( $\frac{1}{4}$  rész), Klaus Hasselmann ( $\frac{1}{4}$  rész), illetve Giorgio Parisi ( $\frac{1}{2}$  rész). Syukuro Manabe 1931-ben született Japánban, a Tokiói Egyetemen szerzte meteorológiai végzettségét. Mitután az USA-ban és Japánban is kutató, 2002-től a Princetoni egyetemen dolgozott, és egyidejűleg, 2007-től a Nagoyai egyetem meghívott professzoraként is oktatott. Klaus Hasselmann szintén 1931-ben született Hamburgban, a Hamburgi Egyetemen szerzte fizikusi és matematikusi végzettségét, majd PhD fokozatát a Göttingeni Egyetemen kapta, végül fizikából habilitált. A Hamburgi egyetemen és a Max Planck intézetben, valamint egyidőben, 2018-ig, az Európai Klíma Fórum alelnökeként is dolgozott. Giorgio Parisi 1948-ban született Rómában, a Római La Sapiencia egyetemen fizikából szerzett oklevelet majd PhD fokozatot, és ma is a La Sapiencia egyetem professzora.

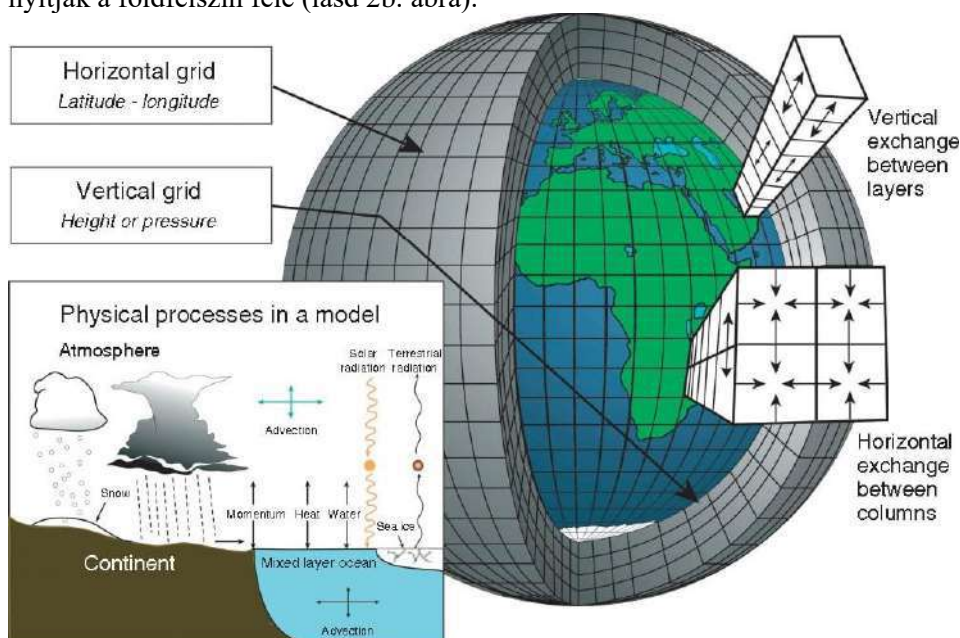


1. ábra. Syukuro Manabe, Klaus Hasselmann, Giorgio Parisi

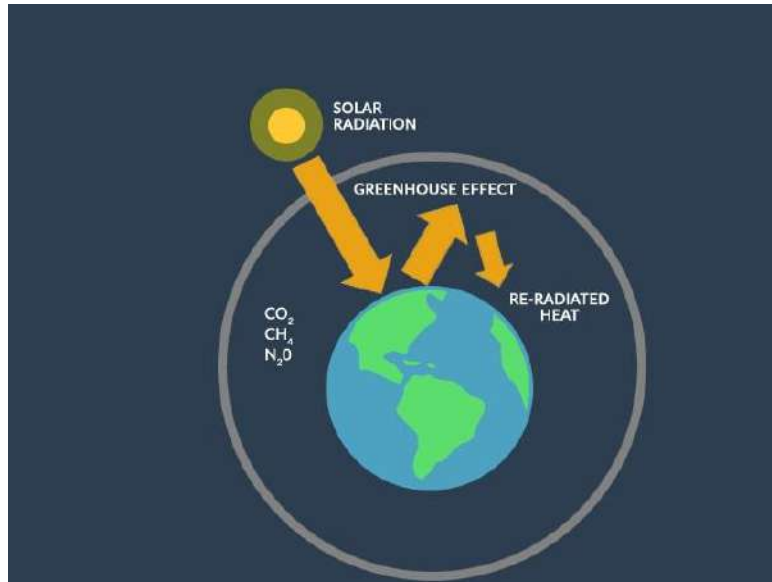
A Nobel-díj tulajdonképpen két különböző témán osztozott, melyek bemutatása külön-külön lehetséges. A díj felén,  $\frac{1}{4}$  és  $\frac{1}{4}$  arányban Syukuro Manabe és Klaus Hasselmann osztozott. Ezt a részt a klímamodellezés nyerte el, indoklás szerint „A Földi klíma fizikai modellezéséért, a változékonyság számszerűsítése és a globális felmelegedés megbízható előrejelzése mellett”. Ez a Nobel-díj rész

szimbolikus jelentésű, hiszen az emberiséget ma érintő egyik legfontosabb kérdésre: „Az emberiség tevékenysége okozza az átlagos hőmérséklet emelkedést?” – igennel válaszol.

Az induló klímamodellek oroslánrészt Manabe munkásságának köszönhetőek. A Föld felszínén elhelyezett rácson egymással érintkező vertikális oszlopok alkotják az alapját (lásd 2a. ábra). Az oszlopok rétegekre vannak osztva, melyekben a folyamatok zajlanak, és amelyek, mind vízszintesen, mind függőlegesen érintkeznek egymással. Az oszlopok az energiaáramlást mutatják, a napenergia (kis hullámhossz mellett) fentről lefele, a földfelületi kisugárzás (nagy hullámhossz mellett) lentől felfele. A rétegekben, a magasságnak megfelelő koncentrációban elhelyezkedő üvegházhatást előidéző gázok (széndioxid, metán, nitrogén oxidok stb.), a felfele áramló energiának egy részét visszairányítják a földfelszín felé (lásd 2b. ábra).

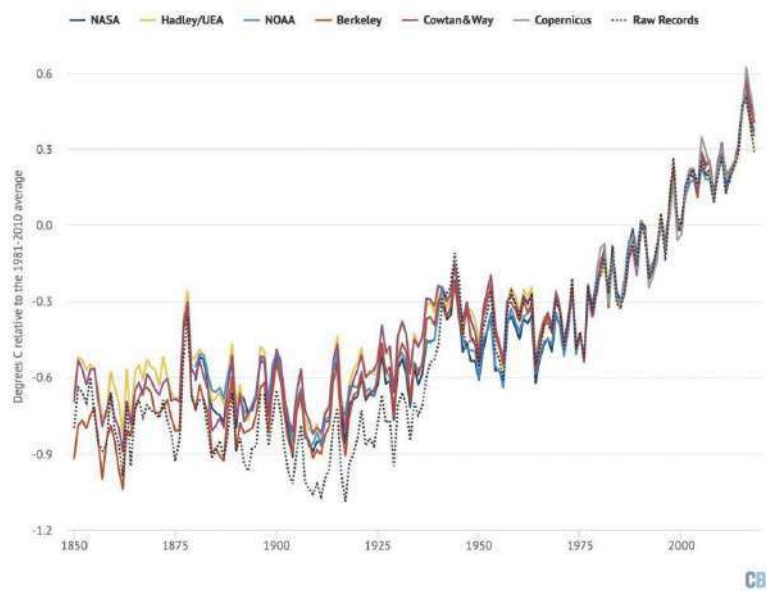


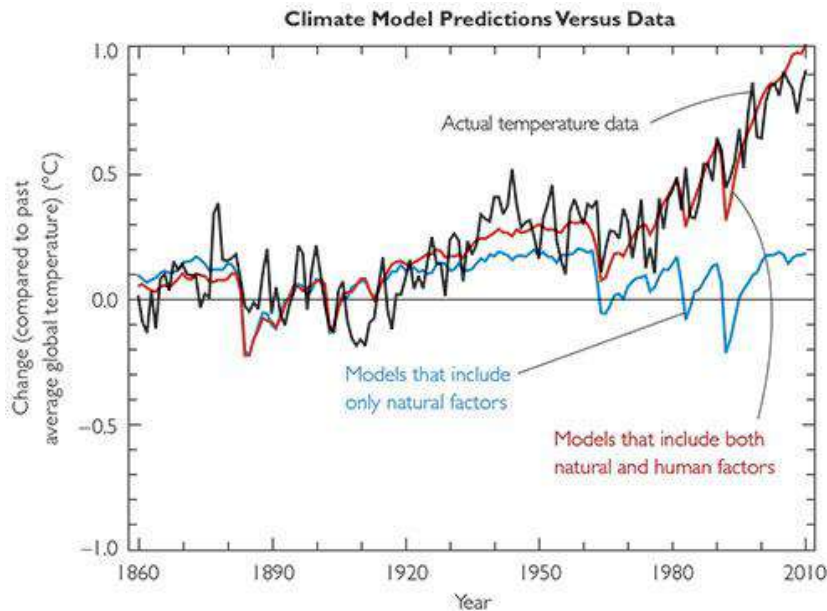
2a. ábra. A klímamodellezés elvi menete:  
Egymással érintkező oszlopok modellje a Föld felszínén



2b. ábra. A klímamodellzés elvi menete: az üvegházhatást előidéző gázok szerepe az energiaáram irányváltoztatásában.

Global surface temperature records, 1850-2018





3. ábra. A klímamodellzés lényegi eredménye: az átlagos hőmérséklet emelkedés az emberi tevékenység eredménye. FENT: a mért átlagos hőmérsékletértékek, LENT: a számolt átlagos hőmérsékletértékek (kék: emberi tevékenység nélkül, piros szín: emberi tevékenység jelenlétében, fekete szín: a mért adatok).

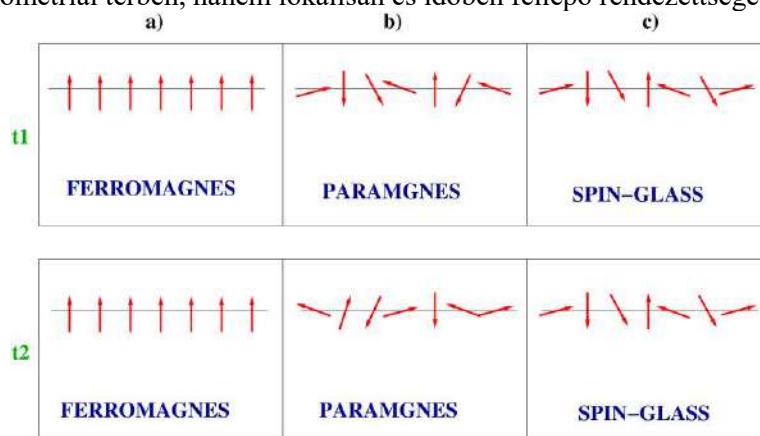
A kezdeti klímamodellek determinisztikusak voltak. Hasselmann tevékenységének révén azonban ezen modellekbe sztochasztikus járulékok is kerültek ugyanis lokális időjárási jellemzőket sztochasztikus input formában vettek figyelembe. Ezért került be az odaítélés megfogalmazásába a „változékonyság számszerűsítése” indoklás. Az odaítélés hatások időskálája kicsi a klímaváltozások időskálájához képest és negatív visszacsatolási mechanizmusok kompenzálják általában őket.

A klímamodellzés lényegi eredményét a 3. ábra mutatja. Fent a mért átlaghőmérséklet-értékek láthatók, lent pedig a modelleredmények. A kék görbék az emberi tevékenység figyelembevétele nélkül voltak levezetve. Látható, hogy ezek nem eredményeznek növekvő átlaghőmérsékletet. Ezzel ellentétben, a piros görbéket az emberi tevékenység figyelembevétele mellett vezették le. Egyértelműen látszik, hogy az átlagos hőmérsékletemelkedés az emberi tevékenységnek köszönhető. (Lásd Hasselmann 2003; Manabe, Broccoli 2020).

A Nobel-díj másik  $\frac{1}{2}$  részét Giorgio Parisi kapta. A megfogalmazás szerint „A rendezetlenség és fluktuációk közötti egymásra hatás felfedezéséért fizikai rendszerekben, atomi méretektől kezdődőleg planetáris skáláig.” Giorgio Parisi nagyon komplex személyiség: A statisztikus fizika és térelmélet közötti kapcsolat aktív ismerője és alkalmazója. PhD disszertációja a gyenge kölcsönhatással

volt kapcsolatos, QCD-ben is dolgozott, majd szilárdtestfizikában is. A Nobel-díj első felével kapcsolatos tevékenysége is volt, hiszen klímamodellezés javítására vezeti be a sztochasztikus rezonancia fogalmat. Publikált még folyadék dinamikában (turbulencia megszakítás), biológiában (kollektív mozgás tanulmányozása), illetve jellemzi a spin-üvegeket. Látható miért került be Giorgio Parisi eredményeinek hangsúlyozásában az „Atomi méretektől a planetáris skáláig” értékelés.

Mivel Parisi eredményei közül a spin-üvegek jellemzése kimagaslóan első helyen áll, ezzel foglalkozunk az elkövetkezőkben. A spin-üveg (spin-glass) fázis fagyott rendezetlenség jelenlétében létrejövő rendezett fázis. A rendezettség nem geometriai térben, hanem lokálisan és időben fellépő rendezettséget jelent.

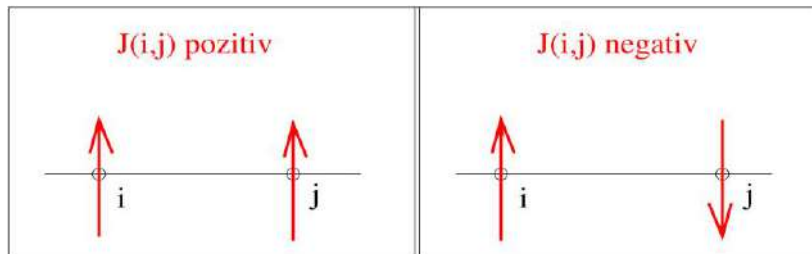


4. ábra. A spin-üveg fázis mibenlétének szemléltetése.

Hogy szemléltetni lehessen ezen fázis mibenlétét, figyeljük meg a 4. ábrát, amely egy lokalizált mágneses momentum (itt spin) rendszerben mutatja a háromdimenzióban megjelenő mágneses fázisokat. A felső sor szemlélteti a rendszert egy  $t_1$  időpillanatban, az alsó sor pedig egy későbbi  $t_2$  időpillanatban. Az első a) oszlop a ferromágneses állapotot mutatja, hol a geometriai térben hosszútávú térbeli rendezettség áll fenn, ami időben megmarad. A második b) oszlop a paramágneses (teljesen rendezetlen, magas hőmérsékleten létező) fázist szemlélteti, hol a lokális spinek irányítása véletlenszerűen tetszőleges, és időben változó. Ezzel ellentétben, a harmadik c) oszlopban a spin-glass fázis jellemzése látszik, hol a pontról-pontra elhelyezkedő lokális spin irányítás rendezetlen marad, de, egy adott csomóponton elhelyezkedő spin irányítása időben megmarad. Ami tehát az eddig elmondottak alapján megállapítható, az a következő: I. Öt évvel a topologikus fázisátalakulás Nobel-díjjal való kitüntetése után a Svéd Akadémia 2021-ben újból egy új fázisátalakulási formát jutalmaz Nobel-díjjal. II. Ez nem geometriai térben vett rendezettség (hosszútávú térbeli rend), nem szimmetriasérüléssel kapcsolatos, nem topológiai tranzíció, hanem lokálisan, időben vett ren-

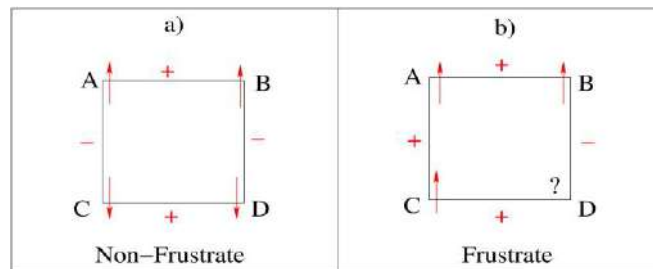
deződésel kapcsolatos. III. Ez az állapot fagyott rendezetlenséghez kötött, és a fagyás miatt, mivel a mikroállapotok paraméterterében (klasszikus rendszerekre ez a fázistér), nagy időintervallumon, nem juthatunk el egy tetszőleges ponthoz tetszőleges közel, az, ami itt sérül, az az ergodicitás. IV. Következésképpen, ez esetben ergodicitás sérülés által okozott fázisátalakulásról van itt szó.

Hogy az elmondottakat könnyebben meg lehessen érteni a fagyott rendezetlenség fogalmát szeretnénk bemutatni először. Kvantummechanikai szinten a rendszerek mikroszkopikus jellemzője a Hamilton operátor ( $H$ ).  $H$  additív tagok összegéből áll, melyek a rendszerben szereplő kölcsönhatásokat, illetve mozgásokat jellemzik. Minden  $H$  tag ( $H_i$ ) előtt egy csatolási állandó ( $g_i$ ) áll amely az illető  $i$ -dik tag erősségét jellemzi.



5. ábra. A pozitív és negatív Heisenberg csatolási állandó jelenlétének következménye.

Például az  $i$  és  $j$  csomópontokon elhelyezkedő  $S_i$  és  $S_j$  spinek közötti Heisenberg kölcsönhatás  $-J(i,j) S_i S_j$  formájú, ahol  $J(i,j)$  jelenti a csatolási állandót. Úgy ahogy azt az 5. ábra mutatja,  $J(i,j)$  előjele határozza meg, hogy az  $S_i$  és  $S_j$  egymással párhuzamosan áll be (ekkor  $J(i,j) > 0$ ), vagy ellentétesen (ez esetben  $J(i,j) < 0$ ). Ezen a szinten a rendezetlenség a  $g_i$  csatolási állandóban vett rendezetlenséget jelenti. Maga a rendezetlenség lehet hőkezelt, vagy fagyott. A rendezetlenség akkor fagyott, ha frusztrált. Ha frusztráció nincs jelen, a rendezetlenség hőkezelt.



6. ábra. Frusztráció jelenléte a rendszerben.

Az  $i$  és  $j$  csomópontokat összekötő vonalat, amely mentén  $J(i,j)$  hat, nevezzük szakasznak. Frusztráció akkor áll fenn, ha van szakaszokból álló zárt görbe a rendszerben, amely mentén a  $J(i,j)$  csatolási állandók szorzata negatív. Ezt a 6. ábra szemlélteti. A baloldalon egy frusztráció nélküli rendszer látható. Ez esetben a  $J(i,j)$  tagok előjelének megfelelően minden egyes rács csomópontban egyensúlyban elhelyezhetők a spinek, úgy, hogy irányításuk a csatolási állandók előjelének megfelelően. Ezzel ellentétben a jobboldali rajz egy frusztrált rendszert ábrázol. Itt megfigyelhető, hogy ha az A,B,C. pontokban a csatolási állandók előjelének megfelelően elhelyezzük a spineket, a D pontba kerülő spin egyszerűen „nem tudja” hogyan helyezkedjen el, mert hiszen a BD szakasz szerint lefele, a CD szakasz szerint felfele kéne irányítódnia. Itt a  $J(i,j)$  értékek rögzítettek (fagyottak) és a rendszer viselkedésének egyik alapjellemezője ez. Megjegyzendő, hőkezeléssel a frusztráció eltüntethető, így kapunk hőkezelt rendezetlenséget. A spin-üveg esetében azonban a frusztráció jelen van.

Ha a rendezetlenség a rendszerben jelen van, a mérhető fizikai mennyiségek kiszámításakor a rendezetlenségre is átlagolni kell. A sokrészecskés rendszerek esetében a mikroszkopikus jellemzőt (ami a  $H$ ) és a makroszkopikus jellemzőt (ami a termodinamikai potenciál, itt  $F$  a szabad energia) az állapotösszeg ( $Z$ ) köti össze mely  $H$ -ból kiszámítható, és  $F = -KT \ln(Z)$  adja az  $F$  értékét, hol  $K$  a Boltzmann állandó,  $T$  pedig a hőmérséklet. Ha rendezetlenség van a rendszerben és a rendezetlenség hőkezelt, a rendezetlenségen vett átlagolást (jelölje  $\langle \dots \rangle_r$ ) direkt  $Z$ -n kell végezni, és ekkor  $F = -KT \ln(\langle Z \rangle_r)$  adja a szabadenergiát. A fagyott rendezetlenséggel rendelkező rendszerek elméleti leírásában az a nehéz, hogy az előbb bemutatott eljárás nem alkalmazható, ugyanis a rendezetlenségre vett átlagolást az állapotösszeg logaritmusán kell végezni, azaz a spin-üvegek esetében  $F = -KT \langle \ln(Z) \rangle_r$  áll fenn. Hogy ezen utóbbi átlagolást a  $Z$  átlagolására lehessen visszavezetni egy számítási fogást alkalmaznak, amelyet a szakirodalom replica-trick (replika fogás) formában emleget. Ennek alapja a  $\ln(Z) = \lim_{n \rightarrow 0} (Z^n - 1)/n$ , ahol  $Z^n$  a  $Z$ -nek  $n$ -dik hatványát jelenti, és  $n \rightarrow 0$  határesetben kell a határértéket számolni. Ebben a kifejezésben szereplő  $Z^n$ -et pedig  $Z^n = Z_1 * Z_2 * \dots * Z_n$  szorzat formában értelmezik, ahol  $Z_k$  az állapotösszeg  $k$ -dik replikában vett értékét jelenti. A replika, a rögzített csatolási állandó értékek mellett a dinamikus változók (itt spinek) sokaságának egy lehetséges értékét jelöli. Például,  $S(i,k)$  az  $i$ -dik csomópontban elhelyezkedő spin  $k$ -dik replikában vett értékét adja. Megjegyzendő továbbá, hogy ha  $S(i,k)$  és  $S(i,m)$  értékeket nézzük, ahol  $k$  és  $m$  különböző replikákat jelölnek, akkor  $S(i,k)$  és  $S(i,m)$  az  $i$  csomóponton elhelyezkedő spin két különböző időpontban vett értékének tekinthető.

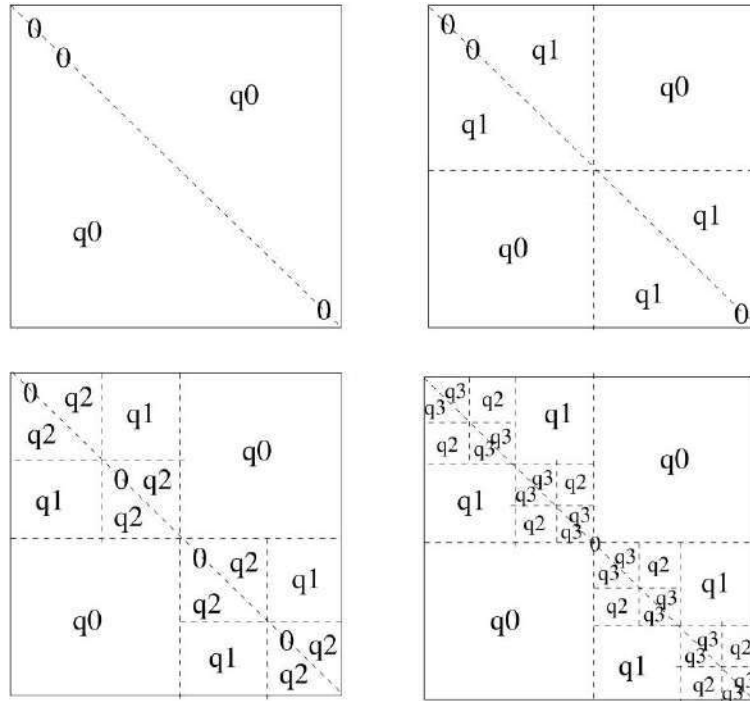


7. ábra. Phil Anderson, Sir Samuel Edwards, Giorgio Parisi.,

A spin-üvegek tanulmányozását Edwards és Anderson kezdték el (lásd 7. ábra első két személye). Az általuk megalkotott leírás Edwards-Anderson modell nevet viseli (Edwards, Anderson 1975), melyben a spin-üveg fázis megjelenését a  $q = \langle S(i,k1) S(i,k2) \rangle$  Edwards-Anderson (EA) rendparaméterrel próbálták leírni, amelyben  $i$  egy tetszőleges de rögzített csomópont,  $k1$  és  $k2$  két különböző replika, illetve az átlagolás egy dupla (termodinamikai, és a rendezetlenségre vett) átlagolást jelenti. Megfigyelhető, hogy  $q$ -nak nincs replika indexe, tehát amellet, hogy különböző replikákat vesz figyelembe, az EA rendparaméter replika szimmetrikus. Az elméletről viszont kiderült, hogy  $T=0$  hőmérsékleten negatív entrópiát eredményez, ami termodinamikailag elfogadhatatlan. Ez volt az a pillanat, amikor Parisi (lásd 7. ábra jobboldali képe, ami a 80-as évek elején készült, amikor Giorgio Parisi a Parisi megoldást publikálta a spin-üvegekre) bekapcsolódott a spin-üvegek elméleti leírásába.

A Parisi féle megoldás első lépése az volt, hogy replika szimmetria sérülést tételezett fel. Azaz, a skalár  $q$  rendparaméter helyett  $q(k1,k2) = \langle S(i,k1) S(i,k2) \rangle$  kétindexes rendparamétert tételezett fel, ami egy mátrix. Mindezek után azt kellett tisztázni, hogy ezen mátrixnak milyen struktúrája van. Erre a kérdésre adott Parisi választ a 8. ábra szemlélteti. A struktúrát fokozatos lépések alapján lehet megérteni. Először is, mivel  $q(k1,k2)$ -be különböző replikák lépnek be,

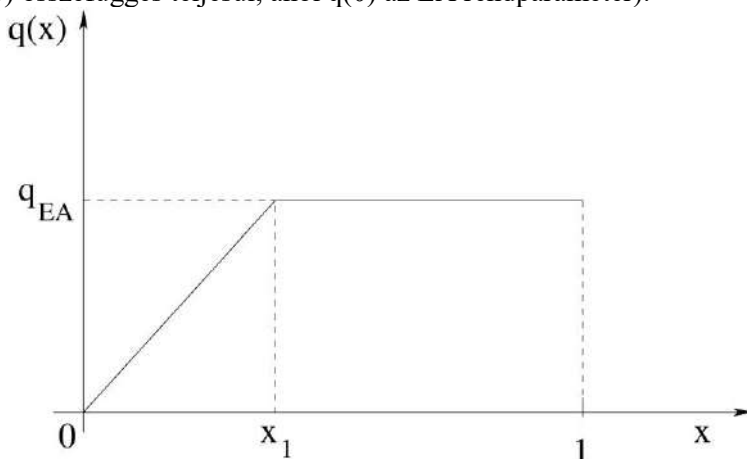




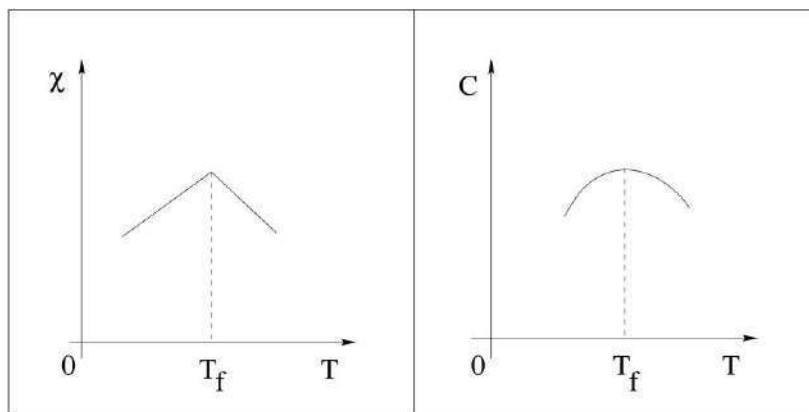
8. ábra. A Parisi rendparaméter mátrix struktúrája.

mátrixának fődiagonálisra mentén zérók találhatók. Most első lépésben az összes nem-diagonális mátrixelem értékét  $q_0=q$  (az EA rendparaméter) mennyiségre állítjuk be (felső sor, bal ábra). Mindezek után a mátrixban két egyenlő nagyságú diagonális blokkot hozunk létre, és ezek belsejében a  $q_0$  értékeket  $q_1$ -gyel helyettesítjük (felső sor, jobboldali ábra). Ez után a diagonális blokkokban végzünk el ugyanazt a műveletet. A diagonális blokkokban két egyenlő blokk-diagonális elemet hozunk létre, és ezek belsejében a  $q_1$  értéket  $q_2$ -vel helyettesítjük (alsó sor, baloldali ábra). A következő lépésben kapott struktúra (mely  $q_3$  értéket vezet be), az alsó jobboldali rajzon látható. Képzeltben, az eljárást végtelenig folytatjuk. Mindez azért lehetséges, mert termodinamikai határesetben dolgozunk, azaz a spinek száma  $N$  végtelen fele tart. Ekkor viszont a replikák száma is nagy, és a  $q(k_1, k_2)$  mátrix  $n \times n$  dimenziójú, ahol  $n$  a replikák száma. Tehát a számolást nagy  $n$ -el végezzük, majd a számolás végén toljuk  $n \rightarrow 0$  határesetbe az eredményt. Végeredményben ezen eljárás következtében, mindaddig amíg a replikák száma nagy, egy végtelen sok elemből álló sort kapunk:  $q_0, q_1, q_2, q_3, q_4, \dots$  tagokkal. Ha a spin értékét egységnek választjuk, a  $q_i$  értékek nem lesznek egynél nagyobbak. És mivel a  $q_i$  tagok végtelen sokan vannak, Parisi nyomán, összesüket együtt egy  $q(x)$  függvényként kezelhetjük, mely folytonosan változik  $[0, 1]$  intervallumon (Parisi, 1980).

Az elmondottak következtében az  $F$  termodinamikai potenciál minden rögzített  $T$  hőmérsékleten a  $q(x)$  függvény funkcionáljává válik. Ezáltal, minden rögzített  $T$  érték mellett minimalizálni kell  $F$  értékét a  $q(x)$  függvény szerint. Példaként, a 9. ábra mutatja a  $q(x)$  függvény formáját a kritikus hőmérséklet (melyet a területen  $T_f$  fagyási hőmérsékletnek neveznek) közvetlen közelében (megjegyzendő, hogy  $x_1=2q(0)$  összefüggés teljesül, ahol  $q(0)$  az  $EA$  rendparaméter).



9. ábra.: A  $q(x)$  formája  $T \rightarrow T_f$  esetében, ahol  $T_f$  a kritikus hőmérséklet.



10. ábra.: A mágneses szuszceptibilitás és fajhő viselkedése  $T_f$  körül a spin-üveg esetében.

A Parisi megoldásban az entrópia értéke  $T=0$ -ban zéró, a megoldás energetikailag stabil. A fázisátalakulás rendje nem egyeztethető össze az Ehrenfest-féle rend skálával. A mérhető fizikai mennyiségekben divergencia nincs jelen, a mágneses szuszceptibilitásban (10. ábra, baloldal)  $T_f$ -ben szögpont található (a fázisátalakulás rendje ezek szerint három lenne), de a fajhő (10. ábra jobb oldal)

maximumot mutat a kritikus hőmérsékleten (a fázisátalakulás rendje ezek szerint négy vagy ennél nagyobb).

A spin-üvegek leírását a témakör fontossága tette híressé. Kiderült ugyanis, hogy nagyon sok rendezetlen rendszer frusztrált, és ezen új területeken is mind alkalmazhatóak a spin-üvegek leírási technikái. Ilyen témakörök például: ideghálózatok, agyműködés modellezése, utazó ügynök probléma, kombinatorikus optimalizációk, polimerizációs folyamatok, gélesedés, gráfelmélet, biológiai folyamatok, ultrametrikus terek tanulmányozása stb. Ezen túlmenően, a frusztráció miatt, a spin-üvegek termodinamikai potenciálja nagyon sok, közel elhelyezkedő, nagyságban közelálló minimumból áll, melyek között megkeresni az állapotot adó minimumot, speciális kihívást jelent. Erre a célra készített numerikus szoftverek számos más területen alkalmazhatóak, ahol optimalizáció, vagy minimalizálás szükségeltetik. Ezen alkalmazások a közgazdaságtant és bankszférát is érintik (Mezard,Parisi,Virasoro 1987; Fischer,Hertz 1991).

#### Bibliográfia

- Edwards S.F., Anderson P.W., *Theory of spin glasses*, Jour. Phys. F5, 965 (1975).
- Fischer K. H, Hertz J. A., *Spin glasses*, Cambridge studies in magnetism Vol.1, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- Hasselmann K., *The challenge of long-term climate change*, Amer. Assoc. for the Adv. of Sci. (AAAS) 302, 1923 (2003).
- Manabe S, Broccoli A.J., *Beyond Global Warming: How numerical models revealed the secrets of climate change*, Princeton University Press, Princeton, 2020.
- Mezard M, Parisi G, Virasoro M. A., *Spin glass theory and beyond*, World Scientific Lecture Notes in Physics Vol.9, World Scientific, Singapore, 1987.
- Parisi G., *The order parameter for spin-glasses: a function on the interval 0–1*, Jour. of Phys: Math. Gen. 13, 1101 (1980).