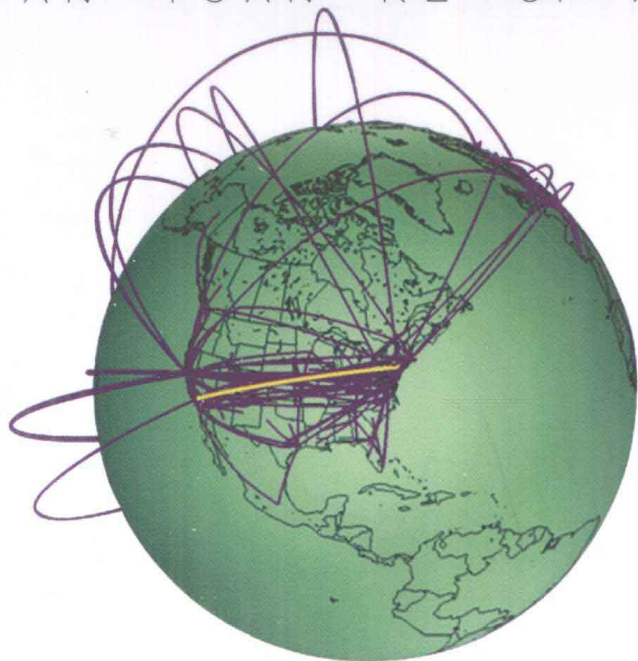


燕园科技学术文库

YAN YUAN KE JI XUE SHU WEN KU



网络科学与 统计物理方法

Network Science and Statistical Physics

毕 桥 方锦清 著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

燕园科技学术文库

网络科学与统计物理方法

毕 桥 方锦清 著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

内 容 简 介

本书是关于网络科学和非平衡统计物理最新发展的学术论著,由3大部分共30章构成,集作者及国内外该领域的主要研究成果,涉及网络科学和统计物理的重要论题,两大主题各有千秋、相互交融,范围从天到地,从宏观到介观、微观,乃至宇观,跨度之大实属少见,揭示如此大跨度的不同领域存在着内在联系,具有相当的普适性和内在的逻辑性,这使得本书不仅能够提供一些明确的研究结果,而且具有前瞻性、引导性、交叉性和应用性。本书力求尽可能深入浅出,尽量使读者在具有普通大学本科知识的基础上就能读懂本书主要内容。同时,本书富有特色和独创性,还有许多涉及学科前沿的内容是首次发表的。

本书不仅适合作为高年级大学生和研究生学习网络科学和统计物理知识的教材或参考著作,而且不失为一本供跨领域科学工作者参考的高水平专著。

Abstract

This is an academic book about the latest developments in the network science and the non-equilibrium statistical physics. A total of thirty chapters by the three major compositions, gathered main achievements from authors, domestic and abroad in this field, involving important topics for the network science and the statistical physics, two major themes show respectively advantages, interacting with each other, ranging from sky to land, from macroscopy to mesoscopic or microscopic world, until macrocosm. The large span is rare, revealing such a large span of different areas is intrinsically linked, with considerable universal and inherent logic. This makes the manuscript not only provide some definite findings but with forward-looking, leading, crossing and applications. The book seeks to easier way as much as possible and as far as possible with readers on the basis of ordinary undergraduate to be able to read the main content of the book. Meanwhile, the book is distinctive and original, there are many disciplines involved in frontier content firstly published.

This book is very suitable for senior undergraduate or graduate studying as a textbook or a reference for the network science and the statistical physics, and also will be the reference as a high level of monograph for the cross-scientists.

图书在版编目(CIP)数据

网络科学与统计物理方法/毕桥,方锦清著. —北京:北京大学出版社,2011.10

(燕园科技学术文库)

ISBN 978-7-301-19165-1

I. ①网… II. ①毕…②方… III. ①计算机网络—研究②计算机网络—应用—统计物理学
IV. ①TP393②O414.2

中国版本图书馆CIP数据核字(2011)第125227号

书 名: 网络科学与统计物理方法

著作责任者: 毕 桥 方锦清 著

责任编辑: 赖 青

标准书号: ISBN 978-7-301-19165-1/N·0040

出 版 者: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区成府路205号 100871

网 址: <http://www.pup.cn> <http://www.pup6.cn>

电 话: 邮购部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62750667 出版部 62754962

电子邮箱: pup_6@163.com

印 刷 者: 北京鑫海金澳胶印有限公司

发 行 者: 北京大学出版社

经 销 者: 新华书店

787毫米×1092毫米 16开本 32.75印张 768千字

2011年10月第1版 2011年10月第1次印刷

定 价: 80.00元

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究

举报电话: 010-62752024

电子邮箱: fd@pup.pku.edu.cn

前 言

本书突出了两大主题——网络科学与统计物理及其交叉性、前瞻性、引导性和应用性，系统总结了近年来作者团队及国内外最新的主要研究成果。本书分3大部分，共30章组成，第一部分是基础理论篇(1~11章)，第二部分是宏观网络的若干研究进展(12~17章)，第三部分是微观网络和统计物理的若干研究进展(18~30章)。本书内容丰富翔实，风格独具特色，课题跨越前沿，创新极富远见，意在深刻揭示如此大跨度的不同领域之间的内在关联性、逻辑性与适用性。

本书在策划初期，得到了北京大学出版社的积极支持和出版基金资助，使本书能按照计划在北京大学出版社如期出版，在此作者对北京大学出版社特表谢忱。

在本书完成之际，作者欣悉全国复杂系统与复杂网络专业委员会已经组织策划了中国“网络科学与工程丛书”，将从2011年起由高等教育出版社出版系列著作，我们在此深表衷心祝贺！

显然，本书与“网络科学与工程丛书”相互呼应，同样给我国广大读者送来一个福音，并与已出版的国内多部复杂网络著作汇成万紫千红的景象，呈现出我国该领域“百花齐放，百家争鸣”的大好态势和发展前景。让广大有志之士共同努力，促进我国科教事业的繁荣昌盛。

作者写于北京
2010年11月8日

目 录

绪论	1
----------	---

第一部分 基础理论篇	13
------------------	----

第 1 章 网络科学概论——与统计物理关系	15
-----------------------------	----

1.1 网络科学的发展简史：三个发展时期	15
1.2 网络科学研究的若干特点	21
1.3 统计物理方法概貌	23
1.4 平衡态统计物理与网络科学之间的联系	24
1.5 平均场理论方法	25
1.6 郎之万方程	29
1.7 主方程	31
1.8 马氏链方法	33
1.9 福克和普朗克(F-P)方程	34
1.10 环境噪声或外部随机力的作用和影响	35
1.11 玻色-爱因斯坦凝聚与复杂网络	37
1.12 渗流理论方法在网络中的应用	39
参考文献	40

第 2 章 复杂网络的基本理论模型与实证研究	42
------------------------------	----

2.1 随机图模型	42
2.2 小世界网络	47
2.3 无标度网络	49
2.4 可导航网络模型	53
2.5 若干有权网络模型	57
2.6 演化的加权网络模型	59

2.7 社会网络的实证研究	62
2.8 生物网络的实证研究	66
2.9 技术网络的实证研究	67
参考文献	68

第 3 章 复杂网络的统计物理基础	70
-------------------------	----

3.1 宏观量和微观动力学函数	70
3.2 Hamilton 函数和粒子数密度	71
3.3 约化分布函数	73
3.4 经典 Liouville 方程	74
3.5 BBGKY 方程链	76
3.6 量子系统可观测量与算符	79
3.7 量子统计算子	81
3.8 Liouville 空间	82
3.9 量子 Liouville 方程	84
参考文献	85

第 4 章 平衡态系综理论	86
---------------------	----

4.1 熵极值原理	86
4.2 一些讨论	87
4.3 指数随机网络的统计系综理论	89
4.4 例子	90
参考文献	91

第 5 章 Liouville 算子的复本征值和系统的不可逆演化	93
--	----

5.1 Liouville 方程的形式解和系统的不可逆演化	93
5.2 预解式求解 Liouville 方程	95
5.3 预解式的基本关系式	97
5.4 Liouville 算子的复本征谱	99
参考文献	103

第 6 章 复杂网络的熵	104	10.2 状态空间的代数结构	157
6.1 网络的熵	104	10.3 线性拓扑空间	159
6.2 开放网络的 Liouville 方程	105	10.4 Φ 的对耦空间	161
6.3 解的分析	106	10.5 原子核谱定理	162
6.4 度和熵的关系	106	10.6 复谱分析理论说明	163
参考文献	109	参考文献	165
第 7 章 不可积系统的子动力学	111	第 11 章 显含时间系统的关联子动力学	166
7.1 子动力学初期思想	111	11.1 显含时间的动力学系统的 $\Pi(t)$...	166
7.2 Π 投影算符的引进	112	11.2 C 、 D 算符的基本方程	168
7.3 Π 关联动力学	114	11.3 密度算符的演化	171
7.4 时间演化和广义谱的分解	119	11.4 新的相似共轭关系	174
7.5 碰撞算符和中介算符	123	11.5 系统对含外场的非线性响应	175
参考文献	126	参考文献	183
第 8 章 映射系统的演化	127	第二部分 宏观网络的若干研究进展 ...	185
8.1 时间离散动力系统	127	第 12 章 网络科学中统一混合理论模型	187
8.2 Markov 算子和 F-P 算子	128	12.1 引言	187
8.3 Koopman 算符	130	12.2 有权演化网络模型	187
8.4 不变测度和保测映射	131	12.3 统一混合网络模型理论的三步曲	191
8.5 遍历性、混合性和正合性	133	12.4 总结	204
8.6 时间连续的动力学系统	134	参考文献	205
8.7 最小产生子及其与动力学系统的关系	135	第 13 章 广义 Farey 组织的无权	
参考文献	138	和加权网络金字塔	206
第 9 章 一般动力系统的子动力学 ...	139	13.1 从生命金字塔到网络金字塔 ...	206
9.1 产生和消灭关联算符的引入	139	13.2 广义 Farey 树	211
9.2 产生和消灭算子的基本算子方程	141	13.3 广义 Farey 组织的网络金字塔 ...	213
9.3 编时法则	142	13.4 GFONP 的网络特性	216
9.4 中介算子和非么正相似关系	143	13.5 三类确定性的加权广义 Farey 组织的加权网络金字塔	220
9.5 本征谱的分解	146	13.6 三类确定性加权广义 Farey 组织的网络金字塔的主要特性	223
9.6 三角算子	149	13.7 讨论与总结	229
参考文献	154	参考文献	230
第 10 章 谱分解的意义和广义函数空间	156		
10.1 Rigged Hilbert 空间	156		

第 14 章 若干核科技网络	231	17.5 重大网络工程研究, 关注 “网络中心战”	306
14.1 束流传输网络	231	17.6 信息推荐系统的研究	309
14.2 全球核电站网络	243	17.7 人类行为动力学研究	311
14.3 连续渗流网络模型特性	245	17.8 若干其他重要课题	314
14.4 能量核武器综合网络与网络 中心战	250	参考文献	320
14.5 核辐射监测与反核恐怖网络 ..	254	第三部分 微观网络和统计物理的 若干研究进展	323
14.6 核衰变网络	255	第 18 章 关联动力学的新进展	325
14.7 相关的挑战性课题	257	18.1 BBKGY 的关联动力学的 新表述	325
参考文献	257	18.2 关联子动力学和 Boltzmann 方程	330
第 15 章 确定性复杂网络	259	18.3 Schrödinger 关联子动力学 方程	333
15.1 确定性均匀递归树	259	18.4 广义 Liouville 方程一种表述和 系综理论	334
15.2 确定性小世界网络	260	参考文献	337
15.3 加权的确定性无标度网络	268	第 19 章 量子信息的关联动力学 方程	338
15.4 总结与展望	270	19.1 量子信息 Liouville 方程	338
参考文献	273	19.2 量子信息关联子动力学方程 ..	339
第 16 章 探索大脑网络	274	19.3 狭义相对论体系的量子信息 方程	339
16.1 探索大脑之路	274	19.4 广义相对论体系的量子信息 方程	340
16.2 大脑网络的构建方法和 描述方式	276	19.5 量子互信息	342
16.3 大脑皮层功能网络	279	参考文献	346
16.4 大脑网络研究的新趋势	280	第 20 章 量子信息网络	347
16.5 结构性与功能性连接之间的 关系及其计算模型	283	20.1 信息密度量子位	347
16.6 大脑网络引起的若干思考 问题	287	20.2 量子计算	348
16.7 挑战和展望	288	20.3 量子信息密度隐形传输	348
参考文献	289	20.4 量子 Gauss 信道	349
第 17 章 网络科学的若干前沿与 重要课题	291	20.5 量子网络连接	352
17.1 一个前沿课题: 动力学、功能 与结构之间的关系	291	20.6 度分布的性质	354
17.2 复杂动力网络结构其他识别 方法	295	20.7 结论和讨论	358
17.3 复杂网络的中尺度问题	299		
17.4 复杂网络链路预测	303		

参考文献	358	25.4 虚熵的计算	399
第 21 章 量子信息网络抗退相干	359	25.5 虚熵的特征	401
21.1 物理模型	359	参考文献	403
21.2 抗消相干三角子空间	361	第 26 章 时空网络的凝聚和演化	404
21.3 由三角构建的广义抗消相干子空间	364	26.1 自旋网络的连接性	404
21.4 几点讨论	365	26.2 时空网络凝聚	406
参考文献	365	26.3 连接度分布	407
第 22 章 反量子信息密钥传输的方案	366	26.4 几点结论	408
22.1 信息密钥和 RHS	366	参考文献	408
22.2 RHS 规则	367	第 27 章 投影空间的格林函数	409
22.3 方案机制的特征	368	27.1 开放系统的广义动力学方程 ...	409
22.4 低效率的不可克隆的性质	371	27.2 非线性刘维尔方程	411
22.5 广义态例子	372	27.3 投影格林函数	413
22.6 实现 Hardy 空间下的 RHS	374	27.4 开放量子体系的格林函数	415
22.7 几点讨论	375	27.5 GKB 方程和 Keldysh 方程	417
参考文献	376	27.6 PGF 和 GF 之间的关系	418
第 23 章 纳米网络	377	27.7 子空间中的移相	419
23.1 一般公式	377	27.8 投影子空间的纠错码	423
23.2 量子相干网络	378	27.9 控制消相干的强场	424
23.3 六边形纳米线网络	379	参考文献	429
23.4 纳米网络连接	384	第 28 章 非线性格林函数	430
参考文献	385	28.1 假设和非线性算符	430
第 24 章 纳米网络电导	386	28.2 孤立子的量子化	431
24.1 物理模型	386	28.3 传播子算符、S 算符和生成算符	433
24.2 广义 Kubo 方程	389	28.4 非线性格林函数	434
24.3 非线性电导系数	391	28.5 非线性生成泛函	435
24.4 特征讨论	392	28.6 广义维克定理	437
参考文献	394	28.7 生成泛函的微扰展开	438
第 25 章 生命网络的虚熵	395	28.8 非线性响应	439
25.1 物理模型	395	28.9 利用量子孤子和退相干控制的量子计算	440
25.2 格林函数切断近似	396	参考文献	442
25.3 有关子动力学公式	398	第 29 章 网络关联子动力学方程的解法	443
		29.1 一般程序	443

29.2 微扰解法	446	30.2 基于关联子动力学方程的 系综理论	458
29.3 非微扰解法	446	30.3 在量子强关联网络中的应用 ...	460
29.4 戴松方程的非微扰解法	448	30.4 非平衡态统计力学系综的 探索	463
29.5 应用强场控制消相干	451	参考文献	469
参考文献	454	参考文献(按字母顺序)	470
第 30 章 非平衡统计系综和 量子网络	455	后记 网络科学与统计物理面临的挑战 与思考	509
30.1 关联动力学方程同各种各样的 动力学方程	455		

绪 论

从科学发展史看，数个世纪以来，物理学在无穷大和无穷小的领域留下了浩似烟海和犹如满天繁星般的灿烂辉煌。一直到了 20 世纪后半期和 21 世纪初，两大领域的实质性进展逐渐缓慢下来，而引人瞩目的非线性科学、复杂性科学和网络科学作为新兴科学陆续兴起，开辟了崭新的天地，这是一个介于无穷大和无穷小之间并相互交叉的非常广阔领域，它与宏观尺度的世界有着密切的关系。新兴科学的发展之迅猛，内涵之新颖，愈来愈激动人心，前沿课题越来越吸引人们关注。今天，非线性、复杂性、复杂网络、混沌等名词已成为现代众多学科，特别是交叉科学的关键词和常用术语。在千禧之交，在复杂性科学和互联网技术革命中诞生的网络科学(R. Albert and A-L Barabási, 2002)，立即从物理学、数学、计算机科学到生命科学及工程技术领域，开拓到社会科学、管理学，甚至经济学、医学以及人文艺术等众多不同的学科，十二年来，引起了各国科学界和政府的广泛重视和高度关注。网络科学理论的突破性进展，不仅发现了一些引人注目的崭新结果(小世界效应、无标度特性、可导航网络、模块性、层次性等)，而且为各种领域研究提供了新思想、新方法和新途径，自然成为探索新的交叉科学的广阔平台和解开复杂系统之迷的有力武器。

不同于一般的“图论”，现代复杂网络具有许多新的特点，学者最关心的科学问题之一是复杂性及其产生机制。究竟什么是复杂性呢？迄今，国内外还是难以准确回答这个问题，因为复杂系统和复杂性科学的定义目前尚无一个统一和公认的科学表述，在不同学科里说法不一，侧重点不同，恰似：“横看成岭侧成峰，远近高低各不同”。对于探索中的新兴科学，自然统一定义并不重要，重要的是揭示其复杂性的特点、表现形式与规律。目前能够一一对应映射复杂系统的定义本身也许就是复杂的。法国哲学家埃德加·莫兰是当代系统地提出复杂性方法的第一人，他的复杂性方法主要是用“多样性统一”的概念模式来纠正经典科学的还原论的认识方法，用关于世界基本性质是有序性和无序性统一的概念来批判机械决定论，提出把认识对象加以背景化，反对在封闭系统中追求完满认识，主张整体和部分共同决定系统来修正传统系统观的单纯整体性原则。其主要复杂性思想可表述在他 1973 年发表的《迷失的范式：人性研究》一书之中。1979 年，比利时著名科学家普利高津首次提出了“复杂性科学”的概念。普利高津实质上是把复杂性科学作为经典科学的对立物和超越者提出来的。他在其名著《从混沌到有序》中说道：“在经典物理学中，基本的过程被认为是决定论的和可逆的。”而今天，“物理科学正在从决定论的可逆过程走向随机的和不可逆的过程。”普利高津紧紧抓住的核心问题就是经典物理学在它的静态的、简化的研究方式中从不考虑“时间”这个参量的作用，无视自然变化的“历史”性，是没有演化的科学。他所提出的关于复杂性理论就是不可逆过程的物理学的理论，主要是揭示物质进化机制的耗散结构理论。普利高津说这个理论“研究了物理、化学中的导致复杂过程的自组织现象”。因此，可以认为普利高津所说的“复杂性”意味着不可逆的进化的物理过程所包含的那些现象的总体：在热力学分岔点出现的多种发展可能性和不确定性，动

态有序结构的不断增长和多样化等。1984 年美国圣塔菲研究所成立,它接过了“复杂性科学”的旗帜,由于它实力雄厚,现在被视为世界复杂性问题研究的中枢。圣塔菲研究所的学术带头人、诺贝尔物理奖获得者盖尔曼在其著作《夸克与美洲豹》中如此提及圣塔菲研究所的研究宗旨:“现代科学的一个重大挑战是沿着阶梯从基本粒子物理学和宇宙学到复杂系统领域,探索兼具简单性与复杂性、规律性与随机性、有序与无序的混合性事件。”圣塔菲研究所的研究对象是复杂适应系统,它提出“适应性造就复杂性”,表明它主要研究能够学习的系统在适应环境的过程中涉及自身所发生的结构,以及行为方式从简单到复杂的演变。复杂适应系统的共同特征是,它们能够通过处理信息从经验中提取有关客观世界的规律性的东西作为自己行为的参照,并通过实践活动中的反馈来改进对世界规律性的认识,从而改善自己的行为方式。这反映了生物、社会等高级系统的能动的自组织的机制。

值得提出的是,我国最早明确提出探索复杂性巨系统的是著名科学家钱学森,他在 20 世纪 80 年代复杂性研究刚刚兴起的时候,就提出开放的“复杂巨系统”的概念,其中系统是由相互作用和相互依赖的若干组成部分结合成的、具有特定功能的有机整体;如果组成系统的子系统种类很多并有层次结构,它们之间关联关系又非常复杂,则称该系统为复杂巨系统;如果这个系统又是开放的,则称之为开放的复杂巨系统。开放的复杂巨系统的主要特征表现在:①由巨量的节点或子系统组成,并有多种层次结构;②系统是开放的,受外界影响,与外界环境有物质、能量和信息的交换;③在特定条件下,节点/子系统之间产生相互作用;④节点/子系统之间的相互作用和系统之间存在复杂的非线性关系。例如:人体系统、生态系统和社会系统等,这些可视为复杂巨系统,这些巨系统无论在结构、功能、行为和演化方面都是很复杂的,故统称其具有复杂性。

复杂性科学就是运用非还原论方法研究复杂系统产生复杂性的机理及其演化规律的科学^[6],它最强调的是关联。还原论指的是采取研究单一个体的方法,例如核物理的研究,是以原子核为对象。而对于复杂系统,不能只研究单一个体,还需要对总体系统进行动态整合研究,例如金融股市中除了要对单个股票进行了解外,还得分析总体股市大盘的趋势。复杂性科学打破了线性、均衡、简单还原的传统范式,而致力于研究非线性、非均衡和关联带来的种种新问题。复杂系统的复杂性有多种具体表现形式,如非线性、混沌、分形、时空斑图、激发孤立子、突变等。这些已经在 20 世纪展开了许多研究,形成了相应的几门复杂性科学的分支学科,并取得了一批有意义的成果,例如复杂系统常常具有自组织现象,而自组织临界性可导致系统发生突变;个体(节点)的简单动力学规则可能导致复杂的整体行为,即涌现,因此整体不等于个体之和,这就是说整体可能大于或小于总体之和;混沌的发现说明了长期演化后复杂系统(如天气预报)的不可预见性(这是因为混沌在确定性的动力学系统里产生了内在随机性);至于孤立子的概念,极大地影响了量子场论之后的新理论的构建,往往被认为是高深部分的主题。例如人们往往在超弦理论专著的最后几章可以发现引入孤立子的概念(Michio Kaku, 1999; Pierre Deligne, David Kazhdan, et al. 1999.)等。

实际上,复杂网络是反映复杂系统的一种网络形式,它是从复杂系统中高度抽象出来的框架性表示,是对复杂系统相互作用的一种本质抽象,并且逐渐形成为一门科学——网络科学。网络科学是专门研究自然和社会中复杂系统的定性和定量规律的一门广泛交叉的

科学,它以复杂网络为研究对象,研究复杂网络的各种拓扑结构及其性质,网络的动力学特性或系统功能,及其两者之间相互的内在关系,探索复杂网络系统的各种涌现现象(突变行为)、动力学(信息反馈)等的物理机制,研究复杂网络上的各种动力学行为和信息的传播、预测(搜索)与控制,以及实际工程和社会所需的网络设计及其各种应用。

现实世界中很多自然、社会系统都可以用复杂网络来描述。在某种意义上,世上万事万物都可以用网络来模拟。很多老的问题或传统学科现在用复杂网络的观点来建模处理和重新认识,很可能产生意料不到的惊人新成果。问题是合适的程度的“度”在哪里?大、中、小尺度?随着研究的深入,不同层次和尺度的发展网络规律必将被揭示。不管怎样,网络科学的概念和模型具有极大的普适性确是毫无疑义的。通常网络由一些基本单元(通常称之为节点, node)和它们之间的连接(通常称为边, edge)所组成。例如, Internet 是由节点为路由器、边是路由器之间的物理通信线路所组成的网络(G. Siganos, M. Faloutsos, 1999); 万维网(WWW)是由网页之间的超链接组成的网络(R. Albert, H. Jeong, A. Barabasi, 1999); 脑是由神经元组成的网络(L. Lago - Fern Ndez, R. Huerta, F. Corbacho, et al. 2000); 还有诸如:不同物种之间的捕食关系(J. Camacho, R. Guimer, L. A. Nunes Amaral, 2002); 语言中词与词之间的语义联系(R. Cancho, R. SOL, 2001); 科研文章之间的引用关系(S. Redner, 1998); 科学家之间的合作关系(J. Newman, 2001; M. Newman, 2001); 人们之间通过电话建立的通话网络联系(G. Pallla, A. Barabasi, T. Vicsek, 2007); 以及化学反应之间的网络(H. Jeong, B. Tombor, R. Albert, et al. 2000); 等等。这些网络的复杂性来自于网络的结构复杂性、连接复杂性、演化复杂性和隐含相互作用复杂性等多种关联因素。

网络科学模型和处理方法,其中统计物理方法发挥了重要作用,它是刻画和研究复杂系统的结构和行为的关键,近年来,它迅速成为了科学界的一个研究热点,与之相关的基础和应用研究已经渗透到许多学科之中,在信息通信、网络搜索、信号传输、传染病传播与控制、网络中心战,以及社会学中对突发事件的预报和处理等方面都具有重要的意义(Li Menghui, Wang Dahui, Fan Ying, Di Zengru and Wu Jinshan, 2006, 2007; M. E. J. Newman, 2004; Potts J. Reichardt, S. Bornholdt, 2004)。

事实上,网络首先是得益于图论和拓扑学等应用数学方法的发展。历史上,多位杰出数学家各自独立地建立和研究过图论,他们的贡献功不可没。早在 200 多年前,关于图论的文字记载最早出现在欧拉 1736 年的论著中,他所考虑的原始问题具有很强的实际背景。在数学上,关于哥尼斯堡七桥问题、多面体的欧拉定理、四色问题等都是拓扑学发展史的重要问题。

首先,图论起源于著名的哥尼斯堡七桥问题。哥尼斯堡是东普鲁士的首都,今俄罗斯加里宁格勒市,普莱格尔河横贯其中。18 世纪在这条河上建有七座桥,将河中间的两个岛和河岸联结起来。人们闲暇时经常在这上边散步,有人提出:能不能每座桥都只走一遍,最后又回到原来的位置。这个看起来很简单却很有趣的问题吸引了大家,很多人在尝试各种各样的走法,然而无数次的尝试都没有成功。谁也没有做到,看来要得到一个明确、理想的答案绝非那么容易。1736 年,有人带着这个问题找到了当时的大数学家欧拉,欧拉经过一番思考,很快就用一种独特的方法给出了解答。欧拉证明了这个问题没有解,并且推广了这个问题,给出了对于一个给定的图可以某种方式走遍的判定法则,欧拉图有

解的充要条件是图中所有节点的度均为偶数。欧拉图的研究开创了“图论”这门新的数学分支,因此,这是第一代科学家对网络的开创性贡献,于是欧拉被誉为图论之父。

网络科学研究的另外一个具有里程碑贡献的是 ER 随机图模型,它的数学理论研究始于 1960 年前后,由当时著名的数学家 Paul Erdős 和 Alfred Rényi (J. Duch, A. Arenas, Phys. Rev. E 72 2005) 提出。在随机图论出现之前,图论的工作主要是解决单个图的性质;而随机图论把图论和概率论结合,并考虑了大量统计性质结果。

此后将近 40 年里由于缺乏有关大型网络详细的拓扑信息,ER 随机图论一直是研究网络科学的基本模型。但是近年来,随着大型和快速计算能力的日益提高,世界上已逐渐建立起了一些有关大型网络科学拓扑结构的数据库,进而激发起了人们从理论、仿真和实际数据验证 3 个方面研究网络科学的浓厚兴趣。不同学科之间的相互交叉和融合趋势在不断加强,使得人们有能力在对各种不同类型网络的数据分析的基础上,揭示复杂网络的一些共有的特征和性质。网络科学的兴起促使人们开始用网络理论去研究复杂网络的拓扑结构、产生机理以及动力学行为。很快,复杂网络受到了不同学科的广泛关注,在千禧之交取得了突破性进展,其标志是两项开创性发现:小世界 (small world) 和无标度 (scale-free),由此诞生了网络科学,并在全世界掀起了网络科学研究的热潮。

1998 年 Watts 和 Strogatz 在 Nature 上发表文章,利用 WS 模型引入了小世界这个概念。在现实生活中,小世界现象非常普遍。“海内存知己,天涯若比邻”,经常两个陌生人遇到后通过交谈发现他们之间竟然有共同的朋友,这时人们通常会惊叫道:“世界真小!”。实际上,在社会网络中每个人都是通过一条很短的关系链连接着。小世界模型描述了从完全规则网络到完全随机网络的转变。定义节点的度为该节点和网络中其他节点所连接的边数。ER 随机模型和 WS 小世界模型的一个共同特性就是网络的连接度分布在平均值处有一个峰值,然后呈指数下降,这种网络称为“指数网络”。指数网络本质上是均匀网络:所有的点都有几乎相同数目的连接边。另外一个开创性工作是 1999 年 Barabási 和 Albert 在 Science 上发表的文章,指出许多现实世界中的网络科学连接度分布具有某种幂函数的形式,称为无标度网络。无标度网络的度分布却是不均匀的:大部分的点有很少连接而小部分的点连接度很高。

网络科学的上述二大发现,以及随后许多真实网络的实证研究表明,真实世界网络既不是规则网络,也不是随机网络,而是兼具小世界和无标度特性,具有与规则网络和随机图完全不同的统计特性。不仅如此,两项开创性工作还给出了两种网络模型:小世界 WS 网络模型和无标度 BA 网络模型,来解释绝大多数现实网络都具有小世界现象,无标度行为,群聚性的特性。这在全世界学术界激起了千重浪,复杂网络文章铺天盖地,网络科学的综述和专著不断涌现 (S. N. Dorogovtsev, J. F. F. Mendes, 2001; R. Albert, A - L. Barabasi, 2002; 汪小帆,李翔,陈关荣. 复杂网络理论及其应用 [J]. 清华大学出版社),涉及从物理学到生物学,从社会科学到技术网络,从工程技术到经济管理等众多领域。人们把复杂网络不依赖于节点的具体位置和连线的具体形态所表现出来的性质称为网络的拓扑性质,相应的结构叫网络的拓扑结构。实证数据表明,绝大多数现实网络都具有小世界现象、无标度行为、群聚性等特性。为了解释拓扑特征,从而引发了人们对现实世界复杂网络的研究热潮,导致网络科学的理论及其应用这一前沿的交叉性科学在十年来获得了迅速发展,吸引了许多不同学科领域(如物理学、社会学、生物学、计算机和数学

等)的学者进入研究行列中。

网络科学主要用来研究复杂系统中抽象出的复杂网络的定性和定量的规律。许多现实网络不但具有许多复杂系统的结构形态,还可直接作为系统结构拓扑特性的模型,目前已利用网络科学的相关理论,特别是统计物理对这些现实网络进行了统计研究。具有各种网络特征的复杂系统与日常生活密切相关,这就需要深入研究和更深刻地理解这些复杂网络的拓扑结构、演化过程、动力学行为及其机制等,以便更好地设计和控制这些实际的复杂网络。无标度、小世界网络模型揭示了几乎所有复杂系统的网络结构都具有一种深层次的基本秩序,显示了网络建模的规范,启示网络建模能够捕捉网络形成的动态特性,能够准确获得各种微观机制对网络最终结构的影响,发现网络演化的规律,从而达到认识现实系统的目的。另外,网络建模对人们掌握网络功能与动力学关系有着重要的作用,对真实网络的结构与性能设计,以及安全保护等具有重要的理论指导意义。目前,复杂网络的建模研究一直是学术界广泛关注的一个热点方向。复杂网络大体有以下几种类型。

(1) 社会网络是人或人的群体的集合,这些人之间具有某一接触或相互作用模式。许多社会网络被广泛进行了研究,其中科学家合作网是一个有趣的例子,可以更好地理解科学家之间合作规律的社会机理;网络传播研究传染病(A. Barabasi, R. Crandall, 2003; M. Weeks, S. Clair, S. Borgatti, et al. 2002)在人群中的传播(通过性接触、吸毒者共用针管等),在某些情况下(如 HBV 和 HIV),在网络连接的分析中通过对高危地区的检测有助于提出预防和控制疾病的措施;通过博弈模型(Y. Tu, A. Sousa, L. Kong, et al. 2005; P. Resnick, H. Varian, 1997)的研究,可以解读人类合作行为的涌现;讨论网络上的舆论传播的多种意见动力学模型,该研究将有助于了解和理解一些国家的民意、政府决策和政治选举等问题。

(2) 信息网络也称为“知识网络”,经典之例是学术论文之间的引文网络。其很大优势在于可获得丰富且准确的数据,由于大部分学术论文都经由相关主题的其他文章来引用以前做的工作,网络中没有环状结构;而对于万维网,包含由超链接连接各种信息的网页,可以有循环结构;通过比较个体偏好和其他人偏好的基础上预测新的喜好和厌恶,称为偏好网络(J. Schafer, J. Konstan, J. Riedi, 1999),已被许多电子交友网站等广泛采用。

(3) 技术网络也称为人造网络,其设计的典型目的是分配一些商品或资源,广泛存在于世界性与全国性的一些基础设施,如因特网、交通网络(P. Sen, S. Dasgupta, A. Chatterjee, et al. 2002)、电力网、电话呼叫网络、强流束晕网络等,各种输运过程中的流量可以自然地转化为权重。其中信息资源的传播与日常生活紧密相连,它的高效处理和传送成为最重要的实际问题之一。随着物理网络和用户的数量的连续增长,理解这些网络形成的根本机制并开发设计成本最小、效率最高的网络模型,具有十分重大的意义。

(4) 生物和医学复杂网络,如神经网络、化学反应之间的网络、分子成分之间的相互作用网(L. Hartwell, J. Hopfield, S. Leibler, et al. 1999)和新陈代谢网络(D. Fell, A. Wagner, 2000)。现代生物学不但可以解释单个细胞成分的功能,而且可以解释这些成分怎样通过相互作用的复杂网络互相连接而形成活细胞的功能。在细胞网络、基因相互作用网络、蛋白质网络以及其他的细胞分子调控行为中,拓扑结构起着重要作用,节点之间相互作用强度也非常关键。该领域建有许多数据库以供研究使用,具体可参阅文献。另

外,近年来,科学而系统地研究人类的行为已然成为另一个热点领域(T. Zhou, X. P. Han, B. H. Wang, 2008)。

从上面介绍不难看出,网络科学取得突破性进展一直首先来源于网络模型的研究,理论建模之后,能不能有合适的数学物理方法特别是统计物理方法来求解问题,也一直是网络科学研究最重要和最富挑战性的课题之一。Barabási 和 Albert 通过追踪万维网的动态演化过程,发现了许多复杂网络具有大规模的高度自组织特性,形成无标度特性的主要机制是网络增长和随机择优连接两条规则,而且随机择优(偏好)是产生无标度特性的最重要的机制。然而,随着网络研究的深入,考察现实世界的许多网络越来越发现:现实世界中实际网络节点之间相互作用并非相同,重要性和影响程度各异,实际网络几乎都是有权网络,因此,不仅需要研究无权网络,更需要研究有权网络,这样才能更好地捕捉和揭示真实网络上动力学特征与拓扑结构之间的联系,以及权重变化对网络特性的影响。

此外,无论是随机择优的 BA 模型还是其他网络模型,都属于广义随机模型,主要利用随机性来构建网络;许多学者根据层次迭代关系提出网络模型,从确定性的角度构建网络。但是现实生活中随机性和确定性是共存于复杂系统中,例如科学家合作网络,一个作者和本单位的其他学者之间有确定的合作关系;同时通过学术交流等活动,根据具体工作内容,可能随机性地与外单位学者有暂时的合作。如何较好地在网络模型中把随机性和确定性两种截然不同的方式结合起来,显然是有意义的。

迄今,开创网络科学新局面的两大支柱性理论(图论和统计物理)已经运行了十多年,在最初的新奇发现之后,网络科学发现网络的世界越来越复杂,“庐山真面目”远未揭开。为了进一步推进网络科学的基本理论,特别是建立统一的理论体系,这类网络科学的前沿课题的任务越来越艰巨。12年前的今天人们激动地谈论无标度和小世界,如果现在仍然谈论无标度特性和小世界效应,是不是多少有点老生常谈了?因此,自然会提出一个重要的想法,是不是该考虑建立在图论和统计物理之上的网络科学的理论基础进行更新升级的时候了?这是因为复杂网络是由大量的节点(子系统)所组成,具有组织结构和时空演化的复杂性,复杂网络本身一般具有非线性、非平衡性、混合性(确定与随机)、开放性和不可逆性等特点。迄今还缺乏对复杂网络的非平衡态进行全面深入的研究,目前大多数工作只停留在平衡态的统计物理分析,这对于揭示复杂网络的实际演化过程和内在深层次的规律及其发展机制等问题相去甚远,显然目前理论已远不能满足当前和今后继续发展的需要了,因此,创新非平衡统计物理的方法是一个紧迫的任务,它事关继续推进网络科学未来的发展的一个大方向问题。

追述统计物理的发展历程,J. W. 吉布斯把整个系统作为统计的个体,提出研究大量系统构成的系综在相宇中的分布,克服了气体动理论的困难,建立了平衡态统计物理系综理论。他提出在平衡态统计理论中,对于能量和粒子数固定的孤立系统,采用微正则系综;对于可以和大热源交换能量但粒子数固定的系统,采用正则系综;对于可以和大热源交换能量和粒子的系统,采用巨正则系综。平衡态系综理论取得了巨大的成功,成为现代物理的重要基础之一。

目前,非平衡态统计物理研究远未发展为成熟的学科。尽管非平衡态分布函数及其演化方程的建立,不仅成为输运过程微观统计理论的基础,而且由它定义的 H 函数及其遵循的 H 定理对理解宏观过程的不可逆性及趋于平衡的过程起过重要作用。熵增加原理的

微观统计解释表明统计理论已从平衡态向非平衡态发展,已经从对某些宏观概念和规律的微观统计解释发展到对热力学第二定律这样的普遍规律作出微观统计解释,并对离平衡不太远,维持温度差、浓度差、电势差等而经历各种输运过程系统的线性输运系数、涨落等平衡态附近的非平衡过程现象的研究中,取得了许多有意义的结果。

20 世纪 60 年代以后国际上出现了著名的三论:耗散结构理论、协同学和突变理论。1969 年,以比利时普利高津为首的布鲁塞尔学派,研究远离平衡状态开放系统时提出非平衡热力学和统计物理学中的耗散结构理论,用来研究远离平衡态的开放系统从无序到有序的演化规律。1973 年以后,原西德理论物理学家赫尔曼·哈肯发现不同系统之间共同存在着同一系统的要素之间的协同现象,创立了协同论。1972 年法国数学家勒内·托姆勒内·托姆提出突变论:《结构稳定性和形态发生学》。在自然界和人类社会活动中,除了渐变的和连续光滑的变化现象外,还存在着大量的突变和跃迁现象,如地震、海啸、战争、经济危机等。突变论可用来认识和预测复杂系统/复杂网络的突发行为。

随后,非线性科学及其混沌理论、复杂性科学的兴起,犹如春风吹遍五洲四海,非常强劲地影响着当今和未来的科学研究和发展,当然也为网络科学提供了极其重要的理论基础。

上述理论对非平衡统计物理的发展起到了很大的推动作用,这些理论方法与众多科学达到了广泛的交叉融合。值得提及的是远离平衡的突变,有序结构的出现的耗散结构理论。它是由比利时布鲁塞尔学派著名的统计物理学家普利高津建立的,用来研究远离平衡态的开放系统从无序到有序的演化规律。

耗散结构是指处在远离平衡态的复杂系统在外界能量流或物质流的维持下,通过自组织形成的一种新的有序结构。“耗散”一词起源于拉丁文,强调与外界有能量和物质交流这一特性。耗散结构是普利高津于 1969 年在理论物理和生物学国际会议上提出的一个概念。这是普利高津学派 20 多年从事非平衡热力学和非平衡统计物理学研究的成果。1971 年普利高津等人写成著作《结构、稳定和涨落的热力学理论》,比较详细地阐明了耗散结构的热力学理论,并将它应用到流体力学、化学和生物学等方面,引起了人们的重视。1971—1977 年耗散结构理论的研究有了进一步的发展。这包括用非线性数学对分岔的讨论,从随机过程的角度说明涨落和耗散结构的联系,以及耗散结构在化学和生物学等方面的应用。1977 年普利高津等人所著的《非平衡系统中的自组织》一书就是这些成果的总结。

耗散结构理论之后,研究又有了新的发展,主要是用非平衡统计方法,考察耗散结构形成的过程和机制,讨论非线性系统的特性和规律,以及耗散结构理论在社会经济系统等方面的应用。耗散结构理论把复杂系统的自组织问题当作一个新方向来研究。在复杂系统的自组织问题上,人们发现有序程度的增加随着所研究对象的进化过程而变得复杂起来,会产生各种变异。针对进化过程时间方向不可逆问题,借助于热力学和统计物理学用耗散结构理论研究一般复杂系统,提出非平衡是有序的起源,并以此作为基本出发点,在决定性和随机性两个方面建立了相应的理论。

然而一个重要的物理悖论经常在布鲁塞尔学派中流传:基本的动力学规律,牛顿、薛定谔和爱因斯坦方程的时间可逆性同热力学第二定律所指出的时间不可逆方向是矛盾的。可逆性和不可逆性的矛盾表现为对系统微观动力学表述的时间可逆性和宏观热力学描述的

不可逆性矛盾。

1988—2003 年,布鲁塞尔学派发展了子动力学理论和扩张函数空间的理论,试图从量子统计的基础上来协调热力学第二定律同量子力学的矛盾。

在这里我们愿意提到另外一种不同的观点:量子力学的基本方程描述的是单个粒子的运动,与热现象没有关系,因此量子力学的基本方程同热力学第二定律不可逆性没有矛盾。这种观点忽略了量子统计的基本方程 Liouville 方程就是对密度算子求导,然后代入薛定谔方程而获得的。没有薛定谔方程,量子 Liouville 方程是不可能成立的。

子动力学的框架是由普利高津和他的一位合作者 C. Geoge 于 1970 年左右提出的。从 1970 年到 2003 年布鲁塞尔学派在完善和发展子动力学理论方面作了很多工作,发表了大量文章。其中涉及利用子动力学理论求解、分析 Liouville 方程复本征谱的表达以及相联的 Hilbert 或 Liouville 空间扩张的理论。子动力学是布鲁塞尔学派在 20 世纪 90 年代后期的主要理论武器(毕桥·子动力学理论及其在复杂系统中的应用 [M]. 武汉:武汉工业大学出版社,1999)。

子动力学作为一种广义的统计物理投影算子理论在过去的十几年中取得了重要进展。在混沌映射的演化算子谱分析方面,在量子 Friedrichs 系统方面,在大规模 Poincare 系统方面, Liouville 算子复本征谱的分析方面都取得了成功,揭示了系统不可逆和复杂性的特性。

1997 年至 2010 年,本书第一作者建立了多种子动力学基本方程,引进了建立在子动力学基本方程上的投影格林函数,非线性投影格林函数,并发展了非微扰求解 Hamiltonian 和 Liouville 算子本征谱的方法。成功地把子动力学和所发展的理论应用于量子信息抗消相干、纳米系统、有关传输特性,量子网络或纳米网络的构造和特性分析上(Bi Qiao, H. E. Ruda, Z. D. Zhou, Fang Jingqing, Physica A 2006)。

在过去 30 多年里,特别在上世纪七八十年代,中国科学界很重视非平衡统计物理及其应用的研究,学术活动相当活跃,当时引人关注的有:非线性科学与混沌学、伊·普利高津(I. Prigogine)的耗散结构理论、赫尔曼·哈肯的协同学和法国数学家勒内·托姆勒内·托姆的“突变论”,有关这些新兴学科的全 国学术会议盛况不亚于当今的网络科学会议。我国在相变、非平衡统计和耗散结构理论等方面,开展了大量研究工作,并取得了长足的进展,出现一些在国内外颇有影响的工作:1978—1990 年,中国科学院理论物理所周光召、苏肇冰、郝柏林等完成了“关于非平衡量子统计的闭路格林函数研究”,对 20 世纪 60 年代由 Schwinger 建立的闭路格林函数理论框架做了系统分析,提出了一套有效的理论表述方案,并应用于临界动力学、非线性量子输运、淬火无序系统、激光、等离子体等问题中,得到了一些新的结果。反映在郝柏林和于渌等编著的“统计物理学进展”之中。郝柏林还建立了实用符号动力学,对混沌理论作出了贡献。在 1980—1986 年,北京师范大学黄祖洽与丁鄂江完成了“玻耳兹曼方程的奇异扰动解法”。他们用奇异扰动方法消去玻耳兹曼方程求解中的久期项,解决了历史上长期无法讨论的长时间弛豫行为和远离平衡态的气体的弛豫问题。1978—1983 年,北京师范大学方福康首先将 I. Prigogine 的耗散结构理论介绍到国内,得到了非线性系统随机求近似的一般处理方法。并将非平衡系统理论推广到研究复杂系统一般演化机制的领域,并应用于社会经济系统,形成了独特新颖的研究方向。1987 年中国科学院等离子体研究所的霍裕平首先出版了“非平衡态统计理论”一书,对