Consiglio Nazionale delle Ricerche

Progetto COORDINATO - AGENZIA2001

codice: CNRC012FF2

---

1. Dati registrati

Cognome	*MARINARI*
Nome	*VINCENZO*
Sesso	*M*
Data di nascita	*07/07/1957*
Luogo di nascita	*avellino*
Nazionalità	*ITALY*
Istituzione di appartenenza	*dipartimento di fisica, universita' di roma "la sapienza"*
Qualifica	*Professore ordinario*
Matricola CNR (se dipendente)	
Codice Fiscale	*MRNVCN57L07A509N*

---

2. Titolo del progetto

Testo italiano

Transizioni di fase nella fisica dei sistemi disordinati : un approccio statistico e di ottimizzazione.

Testo inglese

Phase Transitions in the physics of disordered systems: an approach based on statistical mechanics and optimization.

---

3. Contesto nazionale ed internazionale della ricerca

Testo italiano

Nell'ultimo periodo la meccanica statistica dei sistemi disordinati ha assunto un ruolo piu' e piu' cruciale, aprendo prospettive nuove, probabilmente difficili ad immaginarsi solo pochi anni fa. Uno dei momenti cruciali e' stato certamente nella realizzazione che formalismi sviluppati per la comprensione di materiali disordinati possono da un lato permettere una migliore *comprensione dello stato amorfo, in cui il disordine si autogenera dinamicamente a causa dell'elevata complessita' della funzione Hamiltoniana, e dall'altro costituire un paradigma che porta ad una descrizione quantitativa di fenomeni complessi in diverse situazioni (agenti sociali, economici, finanziari, biologici). Insieme a questo la realizzazione dell'importanza delle dinamiche vetrose, dinamiche lente che appaiono in numerosi contesti, e descrivono e definiscono questi contesti in modo estremamente piu' preciso di quel che si sarebbe potuto immaginare.*

I nostri gruppi sono all'avanguardia in questi campi. Il gruppo della Sapienza ha studiato in dettaglio, mediante tecniche analitiche e numeriche, sistemi di vetri di spin (il prototipo piu' tipico di sistema disordinato di alta complessita') in dimensionalita' finita. Di recente e' divenuto uno degli ispiratori dell'uso di tecniche di calcolo di stati fondamentali. Ha analizzato ed identificato i rapporti (stretti) fra analisi di tipo statico ed analisi di tipo "fuori equilibrio" di sistemi complessi. Ha discusso la meccanica statistica di sistemi di tipo biologico, individuando la possibilita' di una fase vetrosa in sistemi di tipo RNA.

Il gruppo di Napoli si e' mosso su linee parzialmente analoghe: alcuni fra i lavori piu' importanti nell'individuare il nesso fra proprieta' statiche e dinamiche vengono dalla collaborazione fra i due gruppi. Il concetto di temperature effettive nei sistemi complessi viene dal lavoro del gruppo di Napoli, con studi dettagliati e quantitativi di sistemi modello. Contributi sono stati dati anche sulla transizione di denaturazione nel DNA, e sui cosidetti esperimenti di unzipping (ancora una volta, si tratta di individuare ed analizzare caratteristiche universali della transizione vetrosa).

Il gruppo CNR-IAC e' stato leader nell'applicazione di queste idee a problemi collegati all'efficienza dei mercati (correlazioni in serie storiche, problemi di prezzature), e nello studio delle dinamiche di sistemi complessi con tecniche di tipo reticolari, dove si e' cominciato di recente ad indagare il ruolo di una fase vetrosa.

Il gruppo CNR-IASI e' uno dei piu' importanti esperti mondiali di tecniche di ottimizzazione per sistemi di tipo spin glass: proprio in questo periodo queste tecniche, disponibili ai nostri gruppi grazie al CNR-IASI, stanno permettendo notevoli passi avanti su questioni fisiche cruciali come quella della dimensione critica inferiore dei vetri di spin.

Testo inglese

In the last period Statistical Mechanics of Disordered Systems has been playing a more and more crucial role, opening new perspectives, *that one could probably not even imagine up to a few years ago.*

One of the crucial moments has surely been in the understanding that formalisms developed for the comprehension of disordered systems can on one side be used to allow a better understanding of the amorphous state, where disorder is not present in the Hamiltonian H, but is dynamically generated because of the high complexity of H. On the other side they can form a paradigm that leads to a quantitative description of complex phenomena in different situations (social, economical, financial, biological agents).

Together with that the understanding of the importance of glassy dynamics, i.e. slow dynamics appearing in multiple, different contexts, and that describe and define such contexts in a way far more precise of what one could have imagined.

Our groups are very advanced in these fields. The La Sapienza group has studied in detail, by using both analytical and numerical techniques, spin glass systems (the most typical prototype of a disordered system of high complexity) in finite number of dimensions. Recently it become one of the leaders in the use of algorithms to compute ground states. It has analyzed and identified the (strong) relations among static and dynamic (out of equilibrium) approach to complex systems. It has discussed the Statistical Mechanics of biological systems, finding among other things the possible existence of a glassy phase in RNA.

The Napoli group has been working on similar lines: some of the most relevant contributions towards establishing a relation among static and dynamic properties come from the collaboration among the two groups. The concept of effective temperature in complex systems comes from the work of Napoli group, with detailed and quantitative analysis of model systems. There are also important contributions on the DNA denaturation transition, and about the so-called unzipping DNA experiments (once again the problem is in finding and analyzing the universal features of a glassy transition).

The CNR-IAC group has been leader in applying these ideas to problems connected to the market efficiency (correlations in historical time series, problems of pricing) and in the study of dynamics in complex systems with lattice like techniques, where an investigation of the possibility of producing a glassy phase has just started.

The CNR-IASI group is one of the most important world experts in optimization techniques for spin glass like systems: just in this period these techniques, that our groups can use thanks to the CNR-IASI, are allowing many steps forward in the direction of crucial physics issues, like the one of the lower critical dimension of spin *glasses.*

---

4. Descrizioni obiettivi, programmi e metodologia della ricerca

Testo italiano

Come abbiamo cominciato a discutere nella sezione contesto della ricerca ci sembra questo progetto sia caratterizzato dall'interazione fra quattro gruppi con un elevatissimo livello di sinergie, in atto e potenziali: e' in queste forze ed in queste sinergie che abbiamo trovato la motivazione per strutturarci in questo progetto di collaborazione.

I nostri obiettivi possono essere elencati a partire, forse, dalla comprensione della struttura della fase vetrosa nei prototipali vetri di spin, e dalla applicazione di queste idee al comportamento di solidi amorfi. Useremo tecniche analitiche (rottura della simmetria delle repliche, analisi e sviluppi delle teorie di "mode-coupling", tecniche dinamiche), simulazioni numeriche basate su metodi Monte Carlo ottimizzati, calcoli di stati fondamentali. Gia' fra questi obiettivi sono chiare le forti sinergie dei nostri gruppi: senza il contributo del gruppo CNR-IASI non ci sarebbe possibile analizzare sistemi reticolari abbastanza grandi da individuare i veri comportamenti asintotici (pensiamo qui ad esempio al caso dei vetri di spin in 2 dimensioni, ove e' aperta la questione cruciale della dimensione critica inferiore, e dove le tecnologie possedute dal gruppo CNR-IASI consentono calcoli su reticoli di tipo generale con taglie di ordine 150 per 150). Un'altra forte sinergia e' quella fra il gruppo della Sapienza e quello di Napoli, che hanno dato forti contributi congiunti alla questione dei rapporti fra comportamenti dinamici e paesaggio delle fasi statico nei sistemi disordinati e complessi.

L'applicazione di queste tecniche a sistemi di vetri strutturali resta di importanza fondamentale, ed uno dei nostri obiettivi piu' determinanti. Anche qui abbiamo in mente l'impiego sia di tecniche analitiche, basate su idee di rottura della simmetria delle repliche, che di simulazioni numeriche: anche qui lo sviluppo di algoritmi numerici ottimizzati potra' esser favorito da una stretta interazione fra i nostri quattro gruppi.

Riteniamo anche di riuscire a dare nuovi contributi alla comprensione dello scenario basato su temperature effettive, cosi' importante nella comprensione della transizione vetrosa. Anche qui useremo tecniche di dinamica fuori dall'equilibrio, simulazioni numeriche e repliche.

Un ulteriore contributo originale che speriamo di riuscire a dare e' nello studio di comportamenti vetrosi mediante equazioni di tipo "Lattice Boltzmann".

Un campo che intendiamo far crescere fortemente e' quello della comprensione del ruolo della transizione vetrosa e delle dinamiche lente nei sistemi biologici. Qui ci sara' un'interazione che coinvolgera' tutti i nostri gruppi. Citiamo i soli punti piu' importanti: evoluzione di quasi-specie in un paesaggio complesso, transizione di denaturazione del DNA, RNA folding (mediante metodi Monte Carlo, di ottimizzazione e di repliche), individuazione di funzioni di sequenze di DNA e nuove proteine. Speriamo anche di riuscire ad introdurre e sfruttare metodi di ottimizzazione per modelli biologici (soprattutto modelli reticolari di tipo "Go model").

Il paradigma nato dai vetri di spin si applica ormai, come abbiamo gia' discusso, ad una miriade di situazioni di grande complessita' e grande interesse. Intendiamo fra l'altro continuare ad applicare queste idee a modelli di interazioni economiche e sociali, in cui la complessita' delle interazioni genera dinamiche lente.

Ripetiamo infine che consideriamo l'uso di metodi di ottimizzazione avanzati (tipo ad esempio metodi di "max cut" applicati al calcolo di stato fondamentale e funzione di partizione dello spin glass di Ising bidimensionale) come una delle caratteristiche notevoli del nostro progetto. Questa sinergia fra informatica e fisica potra' consentirci di ottenere notevoli progressi.

Testo inglese

As we have started discussing in the section about the research context we believe that this proposal is characterized by the interaction of four groups with a very high level of synergies, both existing and, even more important, potential. It is in these forces and in these synergies that we have found the motivation to set up this collaboration project.

Our objectives are best listed, maybe, starting from the understanding of the structure of the glassy phase in the prototypical spin glasses, together with the application of these ideas to amorphous solid materials. We will use analytic techniques (replica symmetry breaking, analysis and development of mode-coupling theories, dynamical techniques), numerical simulations based on optimized Monte Carlo methods, computations of ground states. Already in this list of objectives there are clear the synergies among our groups: without the contribution of the CNR-IASI group it would be impossible for us to analyze lattice systems large enough to expose the true asymptotic *behavior (we are thinking here to two dimensional spin glasses, where the crucial question of the lower critical dimension is open, and where the technologies mastered by the CNR-IASI group allow computations on lattices of general type of sizes up to order 150 times 150). A further strong synergy is the one among the La Sapienza and the Napoli groups, that have given important contributions to the problem of the relation among dynamic behavior and static phase space in disordered and complex systems.*

The application of these techniques to structural glasses stays of a very large importance, and it is one of our more crucial goals. Also here we have in mind both the use of analytical techniques, based on ideas of replica symmetry breaking, and of numerical simulations: also here the development of optimized algorithms will be favored by a close interaction among our four groups.

We also believe we will succeed to give new contributions to the understanding of the scenario based on effective temperatures, so important in the understanding of the glassy transition. Also here we will use techniques of out of equilibrium dynamics, numerical simulations and replicas.

A further original contribution that we hope we will be able to give is in the study of glassy behavior by using "lattice Boltzmann" like equations.

A field that we want to strongly develop is the understanding of the role of the glassy transition and of slow dynamics in biological systems. Here there will be an interaction that will involve all the four groups. We only quote here the most important issues: evolution of quasi-species in a complex landscape, denaturation transition of DNA, RNA folding (by using replica, Monte Carlo and optimization methods), sequence alignment, i.e. finding functions of sequences of newly found DNA and proteins. We also hope to be able to introduce and use methods of optimization for biological models (mainly "Go like" lattice models).

The paradigm born from spin glass physics is applicable nowadays, as we have already discussed, to a large number of situation of big complexity and great interest. We want also to continue applying these ideas to models of economic and social interactions, where complexity of interaction can generate slow dynamics.

We repeat also, to end, that we consider the use of advanced optimization approaches (like for example max cut methods applied to the computation of the ground state and the partition function of the 2d Ising spin glass) like one of the very interesting features of our project. This synergy among informatics and physics will hopefully allow us interesting progresses.

5. Descrizione particolareggiata della ricerca.

Testo italiano

Introdurremo qui in qualche dettaglio il campo nel quale svilupperemo la nostra ricerca, i nostri contributi precedenti e l'approccio che useremo nella nostra ricerca. Sottolineeremo il potenziale di questa collaborazione, ed il valore aggiunto che pensiamo sia contenuto nel nostro lavoro comune.

Dinamica Lenta e Materiali Amorfi

Abbiamo un notevole esperienza su dinamiche lente, disordine e complessita', sia dal punto di vista numerico che da quello analitico. I primi lavori del campo sono di circa 20 anni fa. Discutiamo qui solo gli sviluppi piu' recenti nel campo.

Uno dei risultati piu' importanti in questi anni recenti in meccanica statistica e' stato l'emergere di una nuova definizione di temperatura in sistemi fuori dall'equilibrio: la temperatura dipende dalla scala di tempo dell'osservazione. Analogamente la teoria predice che le usuali relazioni di fluttuazione e dissipazione non siano piu' valide nella regione di "aging", e siano sostituite da nuove relazioni di fluttuazione e dissipazione generalizzatein funzione di questa temperatura fuori dall'equilibrio. Questi risultati hanno grande interesse, perche' le nuove relazioni possono essere osservate in esperimenti. Siamo stati i primi a studiare queste relazioni in molti sistemi disordinati, vetri di spin, ferromagneti disordinati e vetri strutturali. La base teorica di queste nuove relazioni e le profonde connessioni con la termodinamica di equilibrio e' stata chiarita in dettaglio.

Abbiamo studiato con cura il comportamento di vetri di spin tridimensionali. Ci siamo chiesti se le caratteristiche principali della soluzione di campo medio siano in accordo con le simulazioni numeriche. Abbiamo studiato sia la versione semplificata di tipo Ising, sia un piu' realistico modello di Heisenberg (utilizzando la corretta forma di anisotropia). Abbiamo utilizzato simulazioni numeriche su grande scala, e ci siamo concentrati sulle proprieta' di equilibrio a temperatura finita, sullo studio dell'approccio all'equilibrio e sul calcolo esatto di stati fondamentali in campioni contenti migliaia di spin. Quest'ultimo metodo e' molto efficiente, e permette un raffronto dettagliato con le previsioni teoriche.

Abbiamo anche cercato di imparare di piu' sullo stato vetroso, dal punto di vista del formalismo delle strutture inerenti (che in questo caso coincide con l'approccio delle repliche, se viene assunta una rottura della simmetria delle repliche ad un passo). Come d'abitudine abbiamo usato due strumenti principali: calcoli analitici e simulazioni numeriche.

Il primo problema che abbiamo affrontato e' il comportamento del sistema a basse temperature, nella fase vetrosa. Un calcolo da principi primi della temperatura di transizione vetrosa e dell'entropia configurazionale in semplici modelli e' stato fatto usando strumenti come la "hyper netted chain approximation". I risultati del calcolo sono stati confrontati con successo a quelli delle simulazioni numeriche.

Per ottenere una descrizione termodinamica appropriata dei liquidi super-raffreddati dobbiamo controllare il numero di bacini nella superfice di energia potenziale campionata dal liquido, e l'energia libera intra-bacino. La possibilita' di scrivere l'energia libera del liquido come un termine di entropia conifgurazionale (numero di bacini) e di un termine intra-bacino chiarifica la connessione fra i due contributi all'energia libera ed il rilassamento a due gradini che caratterizza la dinamica e permette un raffronto molto preciso della teoria con la risposta del sistema nel regime di aging.

Teniamo a sottolineare che abbiamo anche in programma di interagire con gruppi sperimentali.

Aging, Temperature Efficaci ed Effetti di Memoria

Studi recenti teorici, numerici e sperimentali hanno mostrato che nel regime di aging c'e' una temperatura effettiva che controlla la dinamica fuori dall'equilibrio del sistema: questa temperatura e' piu' grande di quella usuale. Il nostro obiettivo e' estendere la teoria di cui disponiamo ad oggi per produrre predizioni teoriche piu' precise ed universali per la dipendenza della temperatura effettiva dai parametri che caratterizzano il sistema. Allo stesso tempo confrontiamo la temperatura effettiva misurata negli esperimenti alla teoria dettagliata che abbiamo sviluppato. Queste misure sono molto delicate, dato che e' necessario misurare le fluttuazioni termiche (che sono molto piccole) nel regime di aging, che e' non stazionario: questo raffronto e' di cruciale importanza.

Se teoria ed esperimenti risulteranno in buona accordo, questo sara' un passo in avanti cruciale: sara' una prova sperimentale della correttezza dell'approccio teorico che e' stato sviluppato in modo consistente negli ultimi venti anni per vetri di spin e vetri.

Un fallimento sperimentale delle predizioni teoriche renderebbe necessaria una profonda revisione e forse un abbandono di alcune delle idee che dominano oggi il nostro approccio teorico. Indipendentemente dal successo della teoria, un raffronto dettagliato fra previsioni teoriche e risultati sperimentali per quel che riguarda la temperatura effettiva sara' un passo molto importante nell comprensione dei materiali vetrosi.

Recentemente e' stato mostrato sperimentalmente che i vetri di spin in regime di "aging" mostrano notevoli ed inaspettati effetti di memoria. Al momento non esiste una teoria dettagliata di questi effetti di memoria, ma siamo fiduciosi di aver elaborato gli strumenti necessari a costruirla. E' anche necessari ricavare una caratterizzazione fenomenologica piu' precisa di questi effetti di memoria: vogliamo studiarne la dipendenza da vari parametri (ad esempio le scale di tempi sperimentali).

La gran parte degli effetti di memoria sono stati osservati dopo un cambiamento di temperatura. Studi di effetti di memoria dopo un cambiamento di campo magnetico daranno informazioni complementari. Cercheremo anche effetti di memoria in materiali diversi dai vetri di spin. Una teoria di questi fenomeni che sia fenomenologicamente corretta, costruita a partire da basi microscopiche, sarebbe un progresso rilevante.

Comportamento Vetroso in Modelli Reticolari

Le descrizione numerica del comportamento di materiali vetrosi e' basata principalmente su tecniche tipo Dinamica Molevolare o Monte Carlo. Queste tecniche tengongo in conto molti dettagli della regione microscopica, ma tipicamente non riescono a raggiungere la scale spazio-temporali di interesse macroscopico.

Stiamo cercando di capire se approcci in cui si adotta uno scenario molecolare realistico, insieme alla semplicita' dell'approccio reticolare, possano essere usati per capire la fase vetrosa. Baseremo i nostri sforzi su un approccio di tipo "Lattice Boltzmann", dove abbiamo gia' dato contributi importanti.

Il Paradigma del Disordine e della Complessita'

Una delle maggiori tendenze della fisica statistica nell'ultimo ventennio e' stata quella di sviluppare nuove tecniche e concetti per lo studio del comportamento cooperativo in sistemi frustrati e

disordinati fornendo gli strumenti per un utilizzo ottimale di tali sistemi. Questi sistemi possiedono la caratteristica distintiva di essere composti, in prima approssimazione, da entita' elementari (siano essi cellule, particelle o esseri umani) le quali, nonostante funzionalmente simili se prese singolarmente, sono capaci di generare un comportamento complesso quando accoppiate in gran numero e in un certo ambiente che ne favorisca l'interazione.
Questa evoluzione, favorita dal progresso nello studio di sistemi lontani dall'equilibrio, ha ridisegnato nuove aree tematiche per le quali l'applicazione delle tecniche proprie della fisica statistica rappresenta un grosso potenziale. D'altra parte, lo sviluppo della fisica statistica stessa e' stata largamente beneficiata dall'applicazione delle sue tecniche nello studio dei sistemi menzionati, in una vera e propria simbiosi tra applicazione e teoria.

I problemi computazionalmente difficili sono spesso direttamente connessi con i concetti generali della fisica statistica, come ad esempio quelli di profili di energia frastagliati (dove si cerca di minimizzare), la dinamica in questi casi, termalizzazione (per ottenere il superamento di barriere mediante metodi probabilistici) e processi lontani dall'equilibrio. La nozione di transizione di fase e di fenomeno critico si e' rivelata di cruciale importanza per la descrizione della complessita' computazionale di alcuni problemi di ottimizzazione. Inoltre, il comportamento di algoritmi probabilistici, genuinamente lontani dall'equilibrio, e' connesso a molte questioni estremamente interessanti e tipiche della fisica statistica, come ad esempio l'esistenza e la caratterizzazione di stati asintoticamente stabili ed il tempo di raggiungimento di tali stati (rilassamento).

Ottimizzazione

Lo studio dei sistemi complessi dal punto di vista della teoria dell' ottimizzazione e' di grande inetresse. In questo campo un ruolo di primaria importanza e' giocato dalla meccanica statistica del problema chiamato K-soddisfacibilita' (K-SAT), che e' stato l'oggetto di molteplici studi negli ultimi anni.
Il K-SAT e' stato il primo problema che e' stato dimostrato appartenere alla classe di complessita' NP-completa. L'importanza di questo modello e' nel rappresentare un prototipo per la classe del problemi Non-deterministici Polinomiali (NP) completi nella teoria della Complessita' in Informatica, cosi' come nella meccanica statistica dei sistemi disordinati, dei vetri, nella biologia computazionale ed in altri campi della scienza.
(La classe dei problemi NP e' identificata con quei problemi la cui soluzione, conosciuta o ipotizzata tale, puo' essere, nel caso peggiore, trovata in un tempo di calcolo che cresce piu' velocemente di un polinomio rispetto al numero di variabili N).

In questo modello si osserva sia una transizione dalla soddisfacibilita' alla insoddisfacibilita' che una transizione tra una struttura chiamata Simmetria di Repliche ed una struttura in cui la simmetria e' distrutta. In questo contesto e' estremamente interessante studiare in dettaglio la relazione tra questi due tipi di transizione. Cio' puo' essere fatto usando sia tecniche analitiche che numeriche.

Sistemi Biologici

I sistemi biologici (ed in particolare l'RNA-folding, il ripiegamento del RNA) costituiscono una sorgente di problemi interessanti che possono essere trattati con successo dalla fisica statistica. Ad esempio l'accumulazione di dati sul sequenziamento del corredo genetico umano correlato al problema di scovare la relazione con l'espressione di questi stessi geni fornisce un validissimo motivo per lo sviluppo di nuovi metodi per l'analisi e la classificazione di tali informazioni. In particolare, l'esperienza accumulata dalla fisica statistica per lo studio di sistemi disordinati puo' essere usata per formulare ipotesi e validare tesi relative a reti biologiche al livello molecolare (delle proteine), a livello genetico oppure a livello ecologico.

Quanto detto richiedera' lo sviluppo di nuovi strumenti concettuali poiche' i sistemi biologici formati da un gran numero di entita' interagenti sono estremamente lontani dall'equilibrio ed esibiscono comportamenti spaziali e temporali molto complessi.
E' nostro intenzione sviluppare tali concetti in modo tale da ottenere una maggiore comprensione quantitativa delle correlazioni in queste reti di entita' interagenti.

RNA

Il comportamento lento e vetroso e' piuttosto comune in natura. Tanto per citare qualche esempio: fenomeni di ricoprimento, DNA, RNA e la struttura delle proteine.

E' possibile usare le tecniche descritte prima per studiare questi problemi. Infatti questo e' gia' stato fatto in passato. Per poter progredire si dovrebbe identificare un problema che sia sufficientemente complesso (a livello macroscopico) e semplice allo stesso tempo (a livello microscopico) in modo da favorirne lo studio. Il problema del ripiegamento dell'RNA sembra un ottimo candidato.

Noi abbiamo gia' ottenuto qualche risultato preliminare sviluppando un semplice modello che prevediamo di investigare nel prossimo futuro.

Sistemi Sociali, Mercati ed Altro come Sistemi Complessi

Negli ultimi anni un nuovo ambito di ricerca ha ottenuto una certa importanza tra scienziati e fisici teorici. I fisici, specialmente quelli provenienti dalla meccanica statistica, complessita' e biofisica, stanno cominciando ad applicare idee e metodi tipici delle loro discipline in campi che non sono tradizionalmente associati alla fisica come ad esempio la dinamica dei mercati finanziari, del traffico veicolare e della struttura di Internet.

A questo proposito e' opportuna una precisazione: mentre la maggior parte dei modelli economici prende in considerazione agenti "rappresentativi", nell'approccio ispirato alla fisica statistica si considerano un insieme molto grande di agenti eterogenei, i quali agiscono in base alle loro strategie, generalmente con capacita' di previsione limitata, ma con conseguenze collettive e quindi risultanti in una forte correlazione. Da questo punto di vista ci si trova ad analizzare fenomeni sintetici che sono molto piu' ricchi e dove concetti fondamentali come il comportamento irrazionale o l'equilibrio macroscopico assumono un significato del tutto nuovo.

La meccanica Statistica dei Sistemi Complessi e' diventata uno strumento importante per la comprensione di un ampio insieme di problemi nel campo delle interazioni sociali, dei mercati finanziari e delle relazioni economiche. Basti pensare ad esempio alla recente applicazione dell'idea della rottura di simmetria di replica al classico gioco del minority game: si minimizza una hamiltoniana il cui minimo puo' essere calcolato analiticamente dal metodo delle repliche.

Noi prevediamo di contribuire in vari modi in questo ambito. Per esempio abbiamo gia' sviluppato una certa esperienza nello studio delle fluttuazioni del prezzo del mercato dei titoli di stato, cosi' come su problemi correlati alla gestione degli investimenti e delle passivita' per le compagnie assicurative. Quest'ultimo caso puo' essere visto come un tipico problema di ottimizzazione vincolata (in altre parole una sorta di sistema frustrato). E' nei nostri propositi estendere ulteriormente l'uso delle nostre tecniche di tipo numerico e/o analitico a questa classe di problemi.

Ottimizzazione e la Fisica della Transizione Vetrosa

Calcolare stati fondamentali sta diventando sempre piu' importante per comprendere la fisica dei vetri di spin. Lavorare direttamente a T=0 permette di essere sicuri di vedere gli effetti dei reali punti fissi: ancora una volta, pero', e' necessario studiare reticoli di grandi dimensione, e quindi avere a disposizione dei buoni algoritmi. Nel caso bidimensionale (molto importante per la fisica perche' si e' vicini o esattamente alla dimensione critica) e' possibile far ricorso ad algoritmi tipo "max cut". Questi permettono di calcolare gli stati fondamentali su reticoli molto grandi (fino a 400x400). Noi siamo stati tra i primi in questo campo, disegnando ed implementando algoritmi tra i piu' efficienti. Siamo anche in grado di calcolare esattamente la funzione di partizione: prevediamo di usare questo risultato per chiarire il problema della dimensione critica minima dei vetri di spin. Studieremo inoltre il comportamento a varie scale di grandezza e le eccitazioni che determinano il comportamento fisico del sistema nel regime asintotico.

Gli strumenti e gli algoritmi che il gruppo IASI-CNR sta mettendo a disposizione agli partecipanti alla collaborazione, sono potenti e vanno dalla capacita' di calcolare lo stato fondamentale in due e tre dimensioni, alla valutazione della funzione di partizione in due dimensioni, fino al calcolo dell'energia e della magnetizzazione in funzione di un singolo campo.

Interazioni e Sinergie fra i Nostri Gruppi

Ci piace sottolineare come questa proposta nasce sulla base di una vera interazione tra i nostri gruppi che crescera' grazie alle linee di ricerca che abbiamo descritto e sara' capace di sfruttare un gran numero di potenziali sinergie.

I nostri gruppi hanno un passato, un presente (ed un futuro) di intense collaborazioni. Il gruppo de "La Sapienza" (LS) ha sviluppato con il gruppo di Napoli importanti idee circa la relazione tra il comportamento statico e dinamico nella dinamica vetrosa lenta; LS ed il gruppo IAC-CNR stanno lavorando su modelli di vetri su reticolari; LS e il gruppo IAC-CNR stanno lavorando insieme anche sulla fisica della transizione vetrosa su reticoli mesoscopici. Ci aspettiamo che il gruppo di Napoli sfruttera' la tecnologia di ottimizzazione sviluppata dal gruppo IASI-CNR e che interagisca con il gruppo IAC-CNR su problemi nel campo biologico. I due gruppi CNR (IAC e IASI) hanno gia' scambi intensi su problemi che riguardano il comportamento dei sistemi complessi.
Noi crediamo che questa proposta rafforzi notevolmente le sinergie potenziali tra i nostri gruppi: lavorando insieme moltiplicheremo il nostro potenziale individuale di un fattore notevole!

Testo inglese

We will introduce here in some detail the field we are working in, our previous contributions and the approach we will use in our research. We will stress the potential of this collaboration, and the added value we believe is contained in our common work.

Slow Dynamics and Amorphous Materials.

We have a longtime experience on slow dynamics, disorder and complexity, both from numerical as well as from an analytical point of view. The first works in this field date to more than 20 years ago. Here we report only the most recent of our achievements on this field.

One of the most important results in these recent years in statistical mechanics has been the emergence of a new definition of the temperature in off-equilibrium systems: the temperature depends on the time scale of the observation. Correspondingly the theory predicts that the usual fluctuation-dissipation relations are no more valid in the aging regime and there are substituted by new generalized fluctuation relations as function of this off-equilibrium temperature. These results are very interesting, because these new relations can be observed experimentally. We have been the first to study these relations in many disordered systems, spin glasses, disordered ferromagnets and structural glasses. The theoretical basis of these new relations and the deep connections with equilibrium thermodynamics has been elucidated in details.

We have studied with care the behavior of three-dimensional spin glasses. We have been asking if the main features of the mean field solution are in agreement with the numerical simulations. We have investigated both the simplified Ising version and a more realistic Heisenberg one (taking care of the anisotropies), We have used large scale numerical methods and we have concentrated our attention on the equilibrium properties at finite temperature, on the study of the approach to equilibrium and on the exact computations of the ground state in samples containing thousands of spins. This last method is quite effective and it allows a very detailed comparison of the theory.

We have also tried to understand more about the glassy state, from the point of view of the inherent structure formalism (which in this case coincide with the replica approach, if one assumes one step Replica Symmetry Breaking). As usual we have used two tools: analytic computations and numerical simulations.

The first problem we studied is the behavior of the systems at low temperatures, in the glassy phase. A first principle computations of the glass transition temperature and of the configurational entropy in simple atomic models has been done using tools like the Hyper-netted Chain approximation. The results of the computations have been successfully compared to simulations.

In order to have a proper thermodynamic description of super-cooled liquid we must control the number of basins in the potential energy surface sampled by the liquid and the intra-basin free energy. The possibility of writing the free energy of the liquid as a configurational entropy term (number of basins) and of an intra-basin term clarifies the connection between the two contributions to the free energy and the two-step relaxation which characterize the dynamics and allows a very precise comparison of the theory with the response of system in the aging regime.

It is important to stress that we also plan to interact with experimental groups.

Aging, Effective Temperatures and Memory Effects

Recent theoretical, numerical and preliminary experimental work have shown that in the aging regime there is an effective temperature that controls the off-equilibrium dynamics of the system: this temperature is greater than the usual temperature. Our aim is to extend the present day theory in order to make more precise and universal theoretical predictions for the dependence of the effective temperature on the various parameters of the system. Simultaneously we compare this effective temperature as measured in experiments to the detailed theory we have developed. These measurements are very delicate as one has to measure thermal fluctuations (that are very small) in the aging regime which is not stationary: the comparison is crucial.

If theory and experiment are in good agreement, this will be a very important breakthrough; it will be the experimental proof of the correctness of the theoretical approach that has been consistently developed in the last twenty years both for spin glasses and structural glasses. An experimental failure of the theoretical prediction would imply a profound revision and may be a dismissal of some current theoretical ideas. Independently from the success of the theory, a detailed comparison of theory with the experimental data for the effective temperature will be a crucial step in our understanding of glassy materials.

Recently it has been experimentally proven that aging spin glasses display remarkable and unexpected memory effects. At present a detailed theory of these memory effects does not exist but we are confident that we have in our hands the instruments that are needed to construct it. A more precise phenomenological characterization of these memory effects is also needed: we want to study the dependence of the memory effects on different parameters (e.g. the time scale of the experiment).

Most memory effects have been seen after a temperature change. The study of memory effects after changes of the magnetic field will give complementary information. We will also look for memory effects in others materials than spin glasses. A microscopically based, phenomenologically correct theory of these memory effects would be a major progress.

Glassy Behavior on Lattice Models

The numerical description of the behavior of glassy materials is mainly based on techniques like Molecular Dynamics and Monte Carlo. These techniques take in account many details of the microscopic region, but cannot typically reach the space-time scale of macroscopic interest.

We are trying to understand if approaches where one can keep a molecular realistic picture, together with the simplicity of the lattice approach can be used to understand the glassy phase. We will base this approach on extensions of the Lattice Boltzmann approach, where our groups have given important contributions.

The Paradigm of Disorder and Complexity

One of the main trends of statistical physics in the last two decades has been the emergence of new concepts and techniques to study the cooperative behavior of disordered and frustrated systems and provide the means for their fruitful application. These are systems where the elementary microscopic objects (whether they are for instance spins or particles or human beings), while usually similar to one another in isolation exhibit complex cooperative behavior and acquire distinction in their individual compromises with their fellows and their environments. This evolution, augmented and intertwined with the progress in the study of out-of-equilibrium systems, has defined new areas where statistical physics has great potential for very fruitful *application and has demonstrated this utility. Additionally, there has been significant complementary stimulation of statistical physics through these mathematical and conceptual analogies and extensions, leading to a symbiotic amplification of progress throughout.*

Hard combinatorial optimization are naturally related to ubiquitous concepts and to questions that are typical of statistical physics, like for example rugged energy landscapes (where one seeks minima), dynamics in these landscapes, thermalization (to provide probabilistic overcoming of barriers) and out-of-equilibrium processes, ... The notions of phase transition and critical phenomena have been found to be of basic relevance in understanding the onset of computational complexity in hard combinatorial optimization problems. The out-of-equilibrium behavior of randomized optimization algorithms is connected to many interesting questions related to statistical physics, such as the existence and the characterization of asymptotic stationary states, and the question of relaxation times.

Optimization

The study of complex systems from the point of view of optimization theory is of great interest. In this field a prominent role is played by the statistical mechanics of the random K-satisfiability (K-SAT) problem, that has been the object of many studies in the last years. The K-SAT was the first problem to be shown to be NP complete and the importance of such a model is that it provides a prototype for all the Non-deterministic Polynomial (NP) complete problems in complexity theory of computer science as well as in statistical mechanics of disordered and glassy systems, in computational biology and in other fields (NP complete problems are those problems whose solution, or the certainty that they have no solutions, can only be found in the worst case by algorithms with a running time of computation that likely grows faster than polynomially with the number of variables N of the system.).

In this model one observes both a transition from satisfiability to unsatisfiability and and the transition between a Replica Symmetric structure and a structure where the symmetry is broken. It is extremely interesting to study in details the relations among these two transitions. This can be done both using analytic techniques and numerical ones.

Biological Systems

Biological systems (we will discuss in better detail about RNA folding) are a source of interesting and relevant problems that can be successfully treated by methods of statistical physics. The recent accumulation of data on genetic sequence and on gene expression signals the existence of complex correlations in these systems, and calls for the development of new methods of analysis and classification. In particular, the experience obtained in the study of the statistical physics of disordered systems can be used to gain insight on the working of complex biological networks, on the molecular (proteic), genetical and ecological levels. This will need the development of new conceptual tools, since biological systems are strongly out of equilibrium and exhibit a complex spatio-temporal pattern of many interacting units. We will develop such concepts in order to gain a more quantitative understanding of correlations and networks in biology.

RNA

Slow and glassy behavior is quite common in nature, just to cite few examples: tiling, DNA, RNA and protein structure.

It is possible to use the techniques described before to study these problems and this has been done in the past. In order to make further progresses one should identify a problem which is enough complex (at the microscopic level) in order to be interesting and simultaneously simple enough (at the microscopic level) in order to be studied in details. The problem of RNA folding seems to be particular interesting in this respect. We have already done some progresses in this field: we have used a simple model for RNA folding and we plan to further investigate it in greater detail.

Social Systems, Markets and More as Complex Systems

Interacting agents in financial markets and socio-economic systems. In the last few years a new research activity has been gathering importance among scientists in theoretical physics. Physicists, especially those working in statistical mechanics, complexity and biophysics, are realizing that ideas and tools of their discipline are of relevance for a range of topics much larger than that identified by the traditional boundaries of physics: the examples that are most relevant here range from economics and financial markets to vehicular traffic and the structure of

Internet. Let us stress the difference: while most of the modeling in economy deals with representative agents, in the approach inspired from the statistical physics one considers a large set of heterogeneous agents, where everyone acts according to his own set of allowed strategies, normally with finite foresight, but with collective consequence and resultant correlation. When taking this point of view one deals with a much richer situation, where fundamental concepts such as irrational behavior or macroscopic equilibrium acquire a new meaning.

Statistical Mechanics of Disordered and Complex Systems is becoming a relevant tool for the understanding of a large body of problems in the fields of social interactions, financial markets, economical relations. We have in mind for example the recent applications of replica symmetry breaking ideas to the classical minority games: one minimizes a disordered Hamiltonian whose minima can be calculated analytically by the replica method.

We plan to contribute in different ways to this field. We have been working for example on studying price fluctuations in the US Treasury fixed income market, and on problems related to assets and liabilities management for insurance companies. The latter can be seen as a typical optimization problem with contraints (i.e. a sort of frustrated system). We plan to continue in applying our techniques of choice, numerical and analytical, to this class of problems.

Optimization and the Physics of the Glass Transition

Computing ground states is playing more and more an important role in trying to understand spin glass physics. Working directly at T=0 makes one sure to feel the effects of the correct fixed point: again, one needs to study large lattice sizes, so good algorithms to compute ground states are mandatory. In the two dimensional case (where important physics is going on, since one is at the lower critical dimension or very close to it) max cut algorithms can be used, and they allow to compute ground states on very large lattice sizes (up to four hundred square). We have been leader in this kind of research, establishing effective algorithms and performing implementations. We have also the technology that allows to compute the full partition function: we plane to use it for clarifying the issue of the lower critical dimension of spin glasses. We will also study the nature of the scaling behavior, and of the relevant excitations that determine the physical behavior of the system in the asymptotic scaling regime.

The algorithmic tools that the CNR-IASI group is providing to the rest of the collaboration are powerful, and range from ground state *calculations in two and three dimensions, to the computation of the partition function in two dimension, to the computation of energy and magnetization as a function of a single field.*

Interactions and Synergies among Our Groups

At last we want to stress that this proposal comes from a real interaction among our groups, that will grow thanks to the research lines we have described here, and will be able to exploit a large number of potential synergies.

Our groups have a past and a present (and a future) of intense collaboration. The La Sapienza (LS) group has developed with the Napoli group important ideas about relation of static and dynamical behavior in slow glassy dynamics; (LS) and CNR-IAC are working together on the lattice glassy models; (LS) and CNR-IASI are working together on the physics of the glass transition on mesoscopic lattices. Probably the Napoli group will be to exploit some of the optimization technology set up by the CNR-IASI group, and to interact with the CNR-IAC group on biological problems. The two CNR groups have already intense exchanges about common issues concerning the behavior of complex systems. We believe that this proposal is strongly strengthening the potential synergies among our groups: working together we will multiply our individual potential output by a large factor!

---

6. Area Scientifica/Linea tematica/Settore

Area Scientifica	*Scienze di base*
Linea tematica	*Fisica dei sistemi disordinati e della transizione vetrosa: solidi amorfi, liquidi sottoraffreddati, sistemi colloidali e materiali granulari*
Settore	*FIS/02 - Fisica teorica, modelli e metodi matematici*

---

7. Codici NABS

Ricerche non orientate *- Scienze fisiche*

---

8. Parole chiave

Testo italiano

Parola chiave 1 *SISTEMI DISORDINATI*

Parola chiave 2 *TRANSIZIONI DI FASE*

Parola chiave 3 *FENOMENI CRITICI*

Parola chiave 4 *OTTIMIZZAZIONE*

Parola chiave 5 *COMPLESSITA'*

Testo inglese

Parola chiave 1 *DISORDERED SYSTEMS*

Parola chiave 2 *PHASE TRANSITIONS*

Parola chiave 3 *CRITICAL PHENOMENA*

Parola chiave 4 *OPTIMIZATION*

Parola chiave 5 *COMPLEXITY*

---

9. Prodotti previsti

Pubblicazioni scientifiche,
Programmi software,
Metodologie

---

10. Elenco delle Unità di ricerca

nº	Responsabile di Unità di ricerca	Ente	Mesi persona	Importo (in milioni di lire)
1.	*MARINARI VINCENZO*	*dipartimento di fisica, universita' di roma "la sapienza"*	*28*	*200*
2.	*PELITI LUCA*	*Università "Federico II" Napoli*	*12*	*140*
3.	*BERNASCHI MASSIMO*	*Istituto per le Applicazioni del Calcolo*	*62*	*140*
4.	*RINALDI GIOVANNI*	*IASI-CNR*	*40*	*140*

---

11. Mesi persona

Mesi persona previsti progetto *142*

12. Ripartizione finanziaria

Titolo	Quota 1 anno	Quota cofinanziamento	Quota 2 anno	Quota cofinanziamento
Personale: dipendente e non dipendente	*180* *(92962 Euro)*	*145* *(74886 Euro)*	*180* *(92962 Euro)*	*155* *(80051 Euro)*
Spese generali	*32* *(16527 Euro)*	*30* *(15494 Euro)*	*32* *(16527 Euro)*	*30* *(15494 Euro)*
Attrezzature	*80* *(41317 Euro)*	*80* *(41317 Euro)*	*45* *(23241 Euro)*	*45* *(23241 Euro)*
Viaggi e missioni	*35* *(18076 Euro)*	*45* *(23241 Euro)*	*40* *(20658 Euro)*	*40* *(20658 Euro)*
Prestazioni di terzi	*15* *(7747 Euro)*	*15* *(7747 Euro)*	*15* *(7747 Euro)*	*15* *(7747 Euro)*
Materiali	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*
TOTALE	**352** ***(181793 Euro)***	**325** ***(167848 Euro)***	**322** ***(166299 Euro)***	**295** ***(152355 Euro)***

13. Segnalazione Referee

	Referee 1	Referee 2	Referee 3
Nome	*SERGIO*	*OLIVIER*	*SILVIO*
Cognome	*CARACCIOLO*	*MARTIN*	*FRANZ*
Qualifica	*Professore ordinario*	*Professore ordinario*	*ALTRO*
Posta elettronica	*Sergio.Caracciolo@sns.it*	*martino@ipno.in2p3.fr*	*franz@ictp.trieste.it*
Istituzione di appartenenza	*Universita' Italiana*	*ALTRO*	*Organizzazione Internazionale*
Nome istituzione	*Scuola Normale Superiore*	*Universite Paris-Sud*	*ICTP*
Città	*Pisa*	*Orsay (Paris)*	*Trieste*
Cap	*56100*	*91406*	*34100*
Telefono	*+39 050 509 095*	*+33 169 157 324*	*+39 040 2240379*
Settore	*FIS/02-Fisica teorica, modelli e meto*	*FIS/02-Fisica teorica, modelli e meto*	*FIS/02-Fisica teorica, modelli e meto*
Parola chiave	*DISORDINE*	*SISTEMI DISORDINATI*	*SIMMETRIA DELLE*

1			*REPLICHE*
Parola chiave 2	*TEORIA DI CAMPO*	*OTTIMIZZAZIONE*	*VETRI DI SPIN*
Parola chiave 3	*SIMULAZIONI NUMERICHE*	*MATCHING*	*VETRI STRUTTURALI*

---

14. Settore di contesto REFEREE

nº	Nome Cognome	Settore	Settore di contesto REFEREE
1.	*CARACCIOLO SERGIO*	*FIS/02-Fisica teorica, modelli e metodi matematici*	*fisica teorica*
2.	*MARTIN OLIVIER*	*FIS/02-Fisica teorica, modelli e metodi matematici*	*modelli, metodi matematici e computazionali della fisica*
3.	*FRANZ SILVIO*	*FIS/02 Fisica teorica, modelli e metodi matematici*	*fisica teorica*

---

15. Durata

Durata progetto 2 anni

Firma ____ Data 14/09/2001 11:30

Per la copia da depositare presso il Rappresentante legale dell'Ente di appartenenza. - Se istituto del Cnr, presso il Direttore - per l'assenso alla diffusione via internet dei dati e la loro elaborazione necessaria al processo di Valutazione CL. 675/96 "Tutela dei dati personali" e per la veridicita' delle informazioni fornite.

.