

**MINISTERO DELL'ISTRUZIONE, DELL'UNIVERSITÀ E DELLA RICERCA
DIPARTIMENTO PER LA PROGRAMMAZIONE IL COORDINAMENTO E GLI AFFARI
ECONOMICI - SAUS
PROGRAMMI DI RICERCA SCIENTIFICA DI RILEVANTE INTERESSE NAZIONALE
RICHIESTA DI COFINANZIAMENTO**

(DM n. 20 del 19 febbraio 2002)

**PROGETTO DI UNA UNITÀ DI RICERCA - MODELLO B
Anno 2002 - prot. 2002027759_001**

Parte: I

1.1 Programma di Ricerca di tipo: *interuniversitario*

Area Scientifico Disciplinare: *Scienze Fisiche*

1.2 Durata del Programma di Ricerca: *24 mesi*

1.3 Coordinatore Scientifico del Programma di Ricerca

PARISI

(cognome)

**Università degli Studi di
ROMA "La Sapienza"**

(università)

FIS/02

(settore scient.discipl.)

GIORGIO

(nome)

**Facoltà di SCIENZE MATEMATICHE
FISICHE e NATURALI**

(facoltà)

Dipartimento di FISICA

(Dipartimento/Istituto)

Giorgio.Parisi@roma1.infn.it

(E-mail)

1.4 Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca

PARISI

(cognome)

Professore ordinario

(qualifica)

**Università degli Studi di ROMA
"La Sapienza"**

(università)

FIS/02

(settore scient.discipl.)

04/08/1948

(data di nascita)

**Facoltà di SCIENZE MATEMATICHE FISICHE
e NATURALI**

(facoltà)

Dipartimento di FISICA

(Dipartimento/Istituto)

GIORGIO

(nome)

PRSGRG48M04H501M

(codice di identificazione personale)

06/49913481

06/4463158

Giorgio.Parisi@roma1.infn.it

1.5 Curriculum scientifico del Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca

Testo italiano

Giorgio Parisi e' nato a Roma il 4 agosto 1948, ed ha compiuto gli studi universitari a Roma, laureandosi in fisica nel 1970, sotto la direzione di Nicola Cabibbo.

Ha svolto la sua attivita' di ricerca presso i Laboratori nazionali di Frascati, prima come borsista del Consiglio Nazionale delle Ricerche (1971-1973) e successivamente come ricercatore dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (1973-1981). In questo periodo ha effettuato lunghi soggiorni all'estero: Columbia University, New York (1973-1974), Institut des Hautes Etudes Scientifiques, Bures-sur-Yvettes (1976-1977), Ecole Normale Superieure, Paris (1977-1978).

E' (o e' stato) membro dei comitati di redazione di numerose riviste (Nuclear Physics Field Theory and Statistical Mechanics, Communications in Mathematical Physics, Journal of Statistical Mechanics, Europhysics Letters, International Journal of Physics, Il Nuovo Cimento, Journal de Physique), dei consigli scientifici dell'Institut des Hautes Etudes Scientifiques, dell'Ecole Normale Superieure (per quanto riguarda la Fisica), della Scuola Normale di Pisa (classe di scienze), della SISSA di Trieste, dell'Human Frontiers Science Program Organization, dei comitati consultivi del CUN, della Scuola di Fisica di Les Houches e dell'INFM.

Chiamato quale professore di ruolo nell'universita' di Roma nel febbraio 1981, e' stato dal 1981 al 1992 Professore di Istituzioni di Fisica Teorica presso l'Università di Roma II, Tor Vergata. Attualmente (dal 1992) e' professore di Teorie quantistiche presso l'Università di Roma "La Sapienza". Dal 1987 e' socio corrispondente e dal 1993 socio nazionale dell'Accademia dei Lincei; dal 1992 e' socio straniero della Accademia Francese. Nel 1992 ha ricevuto la medaglia Boltzmann (assegnata ogni tre anni dalla I.U.P.A.P. per la termodinamica e la meccanica statistica) per i suoi contributi alla teoria dei sistemi disordinati. Nel 1999 ha ricevuto la medaglia Dirac per la fisica teorica.

Testo inglese

He graduated from Rome University in 1970, the supervisor being Nicola Cabibbo. He has worked as researcher at the Laboratori Nazionali di Frascati from 1971 to 1981. In this period he has been in leave of absence from Frascati at the Columbia University, New York (1973-1974), at the Institut des Hautes Etudes Scientifiques (1976-1977) and at the Ecole Normale Superieure, Paris (1977-1978).

He became full professor at Rome University in 1981, from 1981 he was to 1992 full professor of Theoretical Physics at the University of Roma II, Tor Vergata and he is now professor of Quantum Theories at the University of Rome I, La Sapienza. He received the Feltrinelli prize for physics from the Accademia dei Lincei in 1986, the Boltzmann medal in 1992, the Italgas prize in 1993, the Dirac medal and prize in 1999. In 1987 he became correspondent fellow of the Accademia dei Lincei and fellow in 1992; he is also fellow of the French Academy from 1993.

He gave in 1986 the Loeb Lectures at Harvard University, in 1987 the Fermi lectures at the Scuola Normale (Pisa) in 1993 the Celsius lectures at Upsala University.

He is (or he has been) member of the editorial board of many reviews (Nuclear Physics Field Theory and Statistical Mechanics, Communications in Mathematical Physics, Journal of Statistical Mechanics, Europhysics Letters, International Journal of Physics, Il Nuovo Cimento, Networks, Journal de Physique, Physica A, Physical Review E) and of the scientific committees of the Institut des Hautes Etudes Scientifiques, of the Ecole Normale Supérieure (Physique), of the Scuola Normale (Pisa), of the Human Frontiers Science Program rganization, of the scientific committee of the INFN and of the French National Research Panel and head of the Italian delegation at the IUPAP.

1.6 Pubblicazioni scientifiche più significative del Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca

1. CAVAGNA A., GIARDINA I., GRIGERA T., PARISI G. (2002). **Geometric Approach to the Dynamic Phase Transition**. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*. vol. 88, pp. 055502-055504.
2. KRZAKALA F., HOUDAYER J., MARINARI E., MARTIN O. C., PARISI G. (2001). **Zero-Temperature Responses of a 3D Spin Glass in a Magnetic Field**. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*. vol. 87, pp. 197204-197206.
3. ANGELANI L., DI LEONARDO R., PARISI G., RUOCCO G. (2001). **Topological Description of the Aging Dynamics in Simple Glasses**. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*. vol. 87, pp. 085502-085505 preprint cond-mat/0011519.
4. GRIGERA T., MARTIN-MAYOR V., PARISI G., VERROCCHIO P. (2001). **Vibrational Spectrum of Topologically Disordered Systems**. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*. vol. 87, pp. 085502-085505.
5. MARINARI E., PARISI G. (2000). **On the Effects of Changin the Boundary Conditions on the Ground State of Ising Spin Glasses**. *PHYSICAL REVIEW B*. vol. 62, pp. 11677.

1.7 Risorse umane impegnabili nel Programma dell'Unità di Ricerca

1.7.1 Personale universitario dell'Università sede dell'Unità di Ricerca

| N° | Cognome | Nome | Dipart./Istituto | Qualifica | Settore scient. | Mesi uomo | |
|---------------------------|--------------------|----------|------------------|-----------------|-----------------|-------------------------|-------------------------|
| | | | | | | 2002 | 2003 |
| Personale docente: | | | | | | | |
| 1 | PARISI | GIORGIO | FISICA | Prof. ordinario | FIS/02 | 9 <i>(ore: 1233)</i> | 9 <i>(ore: 1233)</i> |
| 2 | MARINARI | VINCENZO | FISICA | Prof. ordinario | FIS/02 | 9 <i>(ore: 1233)</i> | 9 <i>(ore: 1233)</i> |
| 3 | PELISSETTO | ANDREA | FISICA | Prof. associato | FIS/02 | 9 <i>(ore: 1233)</i> | 9 <i>(ore: 1233)</i> |
| 4 | RICCI TERSENGHI | FEDERICO | FISICA | Ricercatore | FIS/02 | 9 <i>(ore: 1233)</i> | 9 <i>(ore: 1233)</i> |
| Altro personale: | | | | | | | |

1.7.2 Personale universitario di altre Università

| N° | Cognome | Nome | Università | Dipart./Istituto | Qualifica | Settore scient. | Mesi uomo | |
|---------------------------|---------|------|------------|------------------|-----------|-----------------|-----------|------|
| | | | | | | | 2002 | 2003 |
| Personale docente: | | | | | | | | |
| Altro personale: | | | | | | | | |

1.7.3 Titolari di assegni di ricerca

| N° | Cognome | Nome | Dipart./Istituto | Anno del titolo | Mesi uomo | |
|----|----------|-----------------|------------------|-----------------|-------------------------|-------------------------|
| | | | | | 2002 | 2003 |
| 1 | GIARDINA | IRENE ROSANA | Dip. FISICA | 2002 | 9 <i>(ore: 1233)</i> | 9 <i>(ore: 1233)</i> |
| 2 | PAGNANI | ANDREA | Dip. FISICA | 2001 | 9 <i>(ore: 1233)</i> | 9 <i>(ore: 1233)</i> |

1.7.4 Titolari di borse per Dottorati di Ricerca e ex L. 398/89 art.4 (post-dottorato e specializzazione)

| N° | Cognome | Nome | Dipart./Istituto | Anno del titolo | Mesi uomo |
|----|------------|----------|------------------|-----------------|-------------------|
| 1. | CILIBERTI | STEFANO | FISICA | 2005 | 22 (ore: 3025) |
| 2. | CORREALE | LOREDANA | FISICA | 2003 | 11 (ore: 1507) |
| 3. | MAIORANO | ANDREA | FISICA | 2004 | 22 (ore: 3025) |
| 4. | RATIEVILLE | MATHIEU | FISICA | 2003 | 11 (ore: 1507) |

1.7.5 Personale a contratto da destinare a questo specifico programma

| N° | Qualifica | Costo previsto | Mesi uomo |
|----|---------------------------|----------------|-------------------|
| 1. | Supporto segreteria | 36000 | 22 (ore: 3025) |
| 2. | Borsista (post-dottorato) | 36000 | 22 (ore: 3025) |
| 3. | Borsista (post-dottorato) | 36000 | 22 (ore: 3025) |

1.7.6 Personale extrauniversitario dipendente da altri Enti

| N° | Cognome | Nome | Ente | Qualifica | Mesi uomo |
|----|--------------|---------|------|-------------|-------------------|
| 1. | CAVAGNA | ANDREA | INFM | Ricercatore | 18 (ore: 2475) |
| 2. | KRZAKALA | FLORENT | EEC | Ricercatore | 22 (ore: 3025) |
| 3. | MARTIN-MAYOR | VICTOR | EEC | Ricercatore | 18 (ore: 2475) |

Parte: II

2.1 Titolo specifico del programma svolto dall'Unità di Ricerca

Testo italiano

Disordine e Complessità in Meccanica Statistica: dalla Struttura della Materia, Sistemi Amorfi e Vetri, all'Ottimizzazione, alla Teoria dell'Informazione, ai Sistemi Biologici ed alle Aggregazioni di Individui.

Testo inglese

Disorder and Complexity in Statistical Mechanics: from the Structure of Matter, the Amorphous State and Glasses to Optimization, to Information Theory, to Biological Systems and to Aggregations of Individuals.

2.2 Settori scientifico-disciplinari interessati dal Programma di Ricerca

- *FIS/02 - FISICA TEORICA, MODELLI E METODI MATEMATICI*
-

2.3 Parole chiave

Testo italiano

*MECCANICA STATISTICA ; VETRI ; AMORFI ; VETRI DI SPIN ; OTTIMIZZAZIONE ;
SIMULAZIONI NUMERICHE ; TEORIA DELLE REPLICHE ; SISTEMI COMPLESSI*

Testo inglese

*STATISTICAL MECHANICS ; GLASSES ; AMORPHOUS STATE ; SPIN GLASSES ;
OPTIMIZATION ; NUMERICAL SIMULATIONS ; REPLICIA THEORY ; CPMPLEX
SYSTEMS*

2.4 Base di partenza scientifica nazionale o internazionale

Testo italiano

Le referenze citate nella sezione 2.4.a sono probabilmente un buon punto di partenza per la discussione delle basi da cui muove la nostra ricerca. Si tratta delle sole pubblicazioni prodotte negli ultimi due anni (a partire dal gennaio 2000) dai soli 4 membri permanenti universitari del gruppo. Vincoli di spazio ci hanno costretti ad eliminare un altro gran numero di lavori di componenti di questo progetto assegnisti, ricercatori di altri enti, dottorandi (fra cui, ad esempio, vari lavori in cui la fisica dei sistemi disordinati viene applicata a studiate modelli di mercati e di agenti in interazione). I lavori citati sono 82, tutti pubblicati o in pubblicazioni negli ultimi due anni su riviste internazionali con referee.

Cercheremo qui, costretti di nuovo da severi vincoli di spazio, di descrivere brevemente le linee principali della ricerca del gruppo di Roma. Nel titolo del progetto locale abbiamo cercato di chiarire, in una frase un po' lunga, la fondamentale unita' ma anche l'ampio spettro della nostra ricerca. Le idee sviluppate nello studio della fisica dei sistemi disordinati si applicano a descrivere la struttura di materiali "veri" (anche senza disordine: il tentativo di descrizione dello stato amorfo e' basato proprio sull'analogia fra disordine e complessita') ma anche alla costruzione di un paradigma piu' generale e quindi alla spiegazioni di fenomeni molto vari, fuori dal quadro tradizionale delle "teorie fisiche".

Analizziamo in breve alcuni punti chiave dei risultati ottenuti di recente dal nostro gruppo. Dovremo affrontare diverse tematiche... Cercheremo di avere in questo sintetico

resoconto dei riferimenti alle referenze citate nella sezione 2.4.a, e rimandiamo per un'analisi piu' ragionata degli obiettivi del gruppo alla sezione 2.5. Speriamo che questa breve discussione aiuti a dare un'idea sullo spirito e sui risultati del nostro lavoro degli ultimi due anni.

I punti chiave sviluppati dal nostro gruppo saranno caratterizzati e divisi in vari campi di interesse. Traceremo in primo luogo il bilancio dei nostri studi dei vetri strutturali e dello stato amorfo. In secondo luogo i vetri di spin, in origine una delle idee ispiratrici di questa linea di ricerca. Discuteremo poi di applicazioni della meccanica statistica, della teoria dei campi e della teoria delle repliche a problemi di ottimizzazione (tipo K-SAT o "matching"). Illustreremo poi i contributi dati dal nostro gruppo allo studio di dinamica e statica di gas reticolari, di equazioni di tipo KPZ, ed in generale di problemi di teoria di campo (compresi alcuni sviluppi relativi alle teorie di cammini autoevitanti). Discuteremo in ultimo alcuni contributi relativi a modelli di interesse biofisico (struttura secondaria del RNA) ed a modelli di mercati economici.

Cominciamo dal tentativo di comprensione dello stato amorfo. Articoli generali sono ad esempio il 36 ed il 37. Le idee alla base di questo tentativo di spiegazione dello stato amorfo nasce dalla corrispondenza fra sistemi disordinati e sistemi di alta complessita': in questi casi il disordine si crea dinamicamente, e metodi analitici analoghi a quelli usati nell'analisi di sistemi disordinati aiutano a comprendere la situazione. Citiamo il tentativo di comprensione dell'origine del cosiddetto "boson peak" (3), degli spettri vibrazionali nei vetri (11,14), del fattore di struttura dinamico (24), della suscettivita' non-lineare (31) usando fra gli altri metodi di "random matrices" (2). Modelli reticolari sono discussi in (5), ed un nuovo modello con transizione vetrosa e' analizzato in (75). Dinamica, ruolo dei punti di sella, paesaggio energetico sono analizzati in (7,20,8,10,12). La rottura di FDT e' studiata in (13), sistemi di sfere dure in (21,34), l'approccio di "strutture inerenti" e' usato in (33) e (41). Concetti di temperature effettive sono analizzati in (38).

La seconda linea di rilievo analizza materiali del tipo "vetri di spin". Concetti dinamici sono analizzati in (1,44,76,78). La fisica di $T=0$ e della linea dAT (transizione in campo) sono discusse in (25,29,81,32,35). La rottura di FDT e' discussa in (82). In (42) sono discussi concetti relativi alle valli nel paesaggio di energia libera, in (45) modelli tipo Heisenberg, in (16) sono sviluppate nuove idee di Gruppo di Rinormalizzazione, in (18,39,80) idee sul chaos in temperatura. (27) discute la stabilita' stocastica.

In terzo luogo i problemi di ottimizzazione. Abbiamo affrontato vari problemi relativi a K-SAT: in (4) il limite di un gran numero di condizioni, e poi altri sviluppi in (26,75,77). Problemi di "matching" sono stati discussi in (17), un approccio per creare "problemi difficili" e' contenuto in (71), problemi su grafi sono discussi in (72,73). Una discussione molto generale di problemi sull'albero di Bethe e' in (23).

Come quarto punto citiamo i gas reticolari e le dinamiche, ad esempio, di tipo Kawasaki: si veda (43,58).

Al quinto posto le superfici di tipo KPZ. Citiamo qui (9,30) in cui e' stato un metodo di simulazione ottimizzato, e dove sono stati calcolati gli esponenti critici con alta precisione.

Al sesto posto le analisi di tipo teoria dei campi e serie di alte temperature. Da un lato vari lavori hanno toccato molti aspetti generali , che non abbiamo spazio per descrivere in dettaglio qui: pensiamo per esempio a (46,47,49,50,55,56,60,62-69). In (51) e' contenuta un'accurata espansione di alte temperature. mentre (48,52,53) si occupano del calcolo di fattori di struttura. L'ultimo argomento che citiamo in questo filone di ricerca sono le analisi di cammini autoevitanti (Self Avoiding Walks, SAW) in (54,59).

Settimo i modelli con connotazione biologica. Citiamo qui alcuni risultati relativi alla formazione della struttura secondaria dell'RNA, (54,59).

All'ottavo ed ultimo posto (ma non certo il meno importante) citiamo modelli di mercati e di agenti in interazione. Citiamo qui, visto che non abbiamo avuto spazio nella sezione 2.4.a, ad esempio A. Cavagna, J. P. Garrahan, I. Giardina e D. Sherrington, "A thermal model for adaptive competition in a market", Phys. Rev. Lett 83, 4429 (1999) e I. Giardina, J.-P. Bouchaud e M. Mezard, "Microscopic Models for Long Ranged Volatility Correlations", Physica A (2002).

Va' ricordato infine che in questi due anni i componenti del nostro gruppo hanno anche partecipato a numerose conferenze internazionali, ospitato collaboratori di molte nazionalita' e visitato laboratori di molti paesi. Abbiamo inoltre organizzato conferenze, sugli argomenti discussi qui, che hanno avuto un notevole impatto. Negli ultimi due anni (ci riferiamo sempre al progetto cofinanziato dal MIUR) abbiamo formato un gran numero di studenti di Laurea e di dottorato, ed ospitato numerosi giovani assegnisti post-dottorali, oltre a visitatori italiani e stranieri per periodi di breve e media durata.

Testo inglese

The references of section 2.4.a are likely a good starting point to discuss the concepts forming the basis for our research. These are just publications produced in the past two years (starting January 2000) by the four group members with permanent university positions. Due to space constraints we have omitted a large number of publications by other members of the group (postdocs, researches from other institutions and PhD students), among them, for instance, several articles applying concepts of the physics of disordered systems to market models and interacting agents. All 82 articles cited are published or in the press in refereed international journals.

We try now, again severely constrained by space, to briefly describe the main lines of research of the Rome group. In the title of the local project we have tried to clarify (in a somewhat long statement) the underlying unity as well as the broad spectrum of our research. The ideas developed in the study of the physics of disordered systems are applied to describe the structure of "real" materials (even without disorder: the attempt to describe the amorphous state is based precisely on the analogy between disorder and complexity), but also to build a more general paradigm, and hence to explain various phenomena outside the traditional frame of "physical theories".

Let us briefly analyze some key points of our recent results. We must deal with various issues, so we will attempt a highly condensed review of the references cited in section 2.4.a

while referring the reader to section 2.5 for a deeper discussion of the goals of our research. We hope that this brief review will furnish some idea of the spirit and main results of our work in the last two years.

The key points developed by our group will be classified according to field of interest. We will start with a summary of our studies of structural glasses and the amorphous state. In second place we shall mention spin glasses, originally one of the inspiring ideas for the whole research line. We discuss next applications of statistical mechanics, field theory and replica theory to optimization problems (matching or K-SAT). We go on with our group's contributions to the study of the statics and dynamics of lattice gases, of KPZ-type equations and field theory problems in general (including some developments related to theories of self-avoiding walks). Finally, we discuss some contributions to models of biophysical interest (RNA secondary structure) and market models.

Let us begin with the attempt to understand the amorphous state; articles of general scope are for instance 36 and 37. The basic idea in this attempt stems from the correspondence between disordered systems and systems with high complexity: in these cases the disorder is created dynamically, and analytical tools analog to those used for disordered systems are helpful to understand the situation. We can cite the attempt to understand the Boson peak (3) of the vibrational spectrum of glasses (11, 14), of the dynamic structure factor (24) and of the nonlinear susceptibility (31) using, among others, methods of random matrix theory. Lattice models are discussed in (5), and a new model with a glassy transition is analyzed in (75). Dynamics, role of saddle points and energy landscape are studied in (7, 20, 8, 10, 12). FDT violations are studied in (13), hard-sphere systems in (21, 34), the inherent structures approach is used in (33) and (41). Concepts of effective temperatures are used in (38).

The second important line concerns materials of the spin glass type. Dynamic concepts are analyzed in (1, 44, 76, 78). The physics at $T=0$ and of the dAT line (transition with field) are discussed in (25, 29, 81, 32, 25). FDT violations are studied in (82). In (42), concepts concerning valleys in the free energy landscape are discussed, in (45), Heisenberg-type models, in (16) new renormalization group ideas are developed, in (18, 39, 80) ideas on temperature chaos. (27) discusses stochastic stability.

In third place, optimization problems. We have dealt with several problems related to K-SAT: in (4) the limit of a large number of constraints, and further developments in (26, 75, 77). Matching problems are discussed in (17), an approach to create "difficult" problems is contained in (71), problems on graphs are discussed in (72, 73). A very general discussion of problems on the Bethe lattice is in (23).

As a fourth point we cite lattice gases and the different dynamics, for instance of the Kawasaki type: see (43, 58).

Fifth, surfaces of the KPZ type. We cite here (9, 30), where a simulation method has been optimized, and the critical exponents have been computed with high precision.

In the sixth place, field-theoretic-type analysis and high temperature expansions. On one hand, several works have dealt with many general aspects, which cannot be described in detail here: we mean for instance (46,47,49,50,55,56,60,62-69). (51) does an accurate high-temperature expansion, while (48, 52, 53) deal with computing structure factors. The

last subject we cite here is the analysis of self-avoiding walks (SAW) of (54, 59).

Seventh, biologically relevant models. We cite some results relevant to the RNA secondary structure (54, 59).

Eighth, and last (but certainly not least important), we cite market models and interacting agents. We mention here, in view of the lack of space in section 2.4.a, for instance A. Cavagna, J. P. Garrahan, I. Giardina e D. Sherrington, "A thermal model for adaptive competition in a market", Phys. Rev. Lett 83, 4429 (1999) e I. Giardina, J.-P. Bouchaud e M. Mezard, "Microscopic Models for Long Ranged Volatility Correlations", Physica A (2002).

Finally, it should be mentioned that in these two years the members of our group have also participated in many international conferences, hosted collaborators of different nationalities and visited laboratories in various countries. We have further organized conferences on the subjects here discussed, which have had a remarkable impact. In the last two years (we mean always the project co-financed by MIUR) we have been advisors to many MSc ("Laurea") and PhD students, and hosted numerous young postdocs as well as short- and medium-time visitors, both Italian and foreign.

2.4.a Riferimenti bibliografici

1. *cond-mat/0203316:*

E. Marinari, G. Parisi, J. J. Ruiz-Lorenzo

2. *cond-mat/0110441:*

T.S. Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, P. Verrocchio

3. *cond-mat/0110129:*

T.S. Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, P. Verrocchio

4. *cond-mat/0108433:*

A. Crisanti, L. Leuzzi, G. Parisi

J. Phys. A: Math. Gen. 35, 481-497 (2002)

5. *cond-mat/0108120:*

S. Franz, R. Mulet, G. Parisi

6. *cond-mat/0107366:*

F. Krzakala, J. Houdayer, E. Marinari, O.C. Martin, G. Parisi

Phys. Rev. Lett. 87, 197204 (2001)

7. *cond-mat/0107198:*
T. S. Grigera, A. Cavagna, Irene Giardina, G. Parisi
Phys. Rev. Lett. 88, 055502 (2002)
8. *cond-mat/0106214:*
R. Di Leonardo, L. Angelani, G. Parisi, G. Ruocco, A. Scala, F.Sciortino
9. *cond-mat/0105158:*
E. Marinari, A. Pagnani, G. Parisi, Z. Racz
10. *cond-mat/0104537:*
A. Cavagna, I. Giardina, G. Parisi
J. Phys. A: Math. Gen. 34, 5317 (2001)
11. *cond-mat/0104433:*
T.S.Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, P. Verrocchio
12. *cond-mat/0104382:*
P. Scheidler, W. Kob, K. Binder, G. Parisi.
13. *cond-mat/0103450:*
F. Ricci-Tersenghi, G. Parisi, D. A. Stariolo, J. J. Arenzon
Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 4717
14. *cond-mat/0102230:*
T.S. Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, P. Verrocchio
Phys. Rev. Lett. 87, 085502 (2001)
15. *cond-mat/0101293:*
G. Parisi
16. *cond-mat/0101038:*
G. Parisi, R. Petronzio, F. Rosati

- Eur. Phys. J. B* 21, 605-609 (2001)
17. *cond-mat/0012326*:
G. Parisi, M. Ratierville
18. *cond-mat/0012296*:
R. Mulet, A. Pagnani, G. Parisi
Phys. Rev. B 63, (2001) 184438
19. *cond-mat/0012070*:
A. Pagnani, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi
Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 1383
20. *cond-mat/0011519*:
L. Angelani, R. Di Leonardo, G. Parisi, G. Ruocco
Phys. Rev. Lett. 87, 055502 (2001)
21. *cond-mat/0011074*:
T. S. Grigera, G. Parisi
Phys. Rev. E 63, 045102(R) (2001)
22. *cond-mat/0011039*:
E. Marinari, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, F. Zuliani
J. Phys. A 34 (2001) 383
23. *cond-mat/0009418*:
Marc Mezard, G. Parisi
Eur. Phys. J. B 20, 217 (2001)
24. *cond-mat/0008472*:
V. Martin-Mayor, M. Mezard, G. Parisi, P. Verrocchio
J. Chem. Phys., 114 (2001) 8068
25. *cond-mat/0007493*:

E. Marinari, G. Parisi

Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 3887-3890.

26. *cond-mat/0007364:*

L. Leuzzi, G. Parisi

J STAT PHYS 103, 679-695 (2001)

27. *cond-mat/0007347:*

G. Parisi

28. *cond-mat/0007144:*

B. Coluzzi, G. Parisi, P. Verrocchio

29. *cond-mat/0006188:*

Silvio Franz, G. Parisi

30. *cond-mat/0005105:*

E. Marinari, A. Pagnani, G. Parisi

J. Phys. A: Math. Gen. 33 (2000) 8181

31. *cond-mat/0005095:*

Silvio Franz, G. Parisi

J. Phys.: Condens. Matter 12 (2000) 6335

32. *cond-mat/0005047:*

E. Marinari, G. Parisi

Phys. Rev. B 62 (2000) 11677

33. *cond-mat/0003287:*

B. Coluzzi, E. Marinari, G. Parisi, H. Rieger

J. Phys. A 33, 2851 (2000)

34. *cond-mat/0003205:*

- G. Parisi, Frantisek Slanina*
Phys. Rev. E 62, 6554 (2000)
35. *cond-mat/0002457:*
E. Marinari, G. Parisi
36. *cond-mat/0002128:*
Marc Mezard, G. Parisi
37. *cond-mat/0001335:*
G. Parisi
38. *cond-mat/0001311:*

R. Di Leonardo, L. Angelani, G. Parisi, G. Ruocco
Phys. Rev. Lett. 84, 6054 (2000)
39. *cond-mat/0202473:*
A. Billoire, E. Marinari
40. *cond-mat/0111172:*
E. Marinari, A. Pagnani, F. Ricci-Tersenghi
Phys. Rev. E 65, 041919 (2002)
41. *cond-mat/0105391:*
A. Crisanti, E. Marinari, F. Ritort, A. Rocco
42. *cond-mat/0103534:*
E. Marinari, O. C. Martin, F. Zuliani
Phys. Rev. B. 64, 184413 (2001)
43. *cond-mat/0103197:*
G. Favrin, E. Marinari, F. Martinelli
J. Phys. A (2001)

44. *cond-mat/0101177:*
A. Billoire, E. Marinari
45. *cond-mat/0002327:*
E. Marinari, V. Martín-Mayor, A. Pagnani
Phys. Rev. B, 62 (2000) 4999
46. *cond-mat/0203533:*
P. Calabrese, A. Pelissetto, E. Vicari
47. *cond-mat/0202506:*
S. Caracciolo, A. Pelissetto
48. *cond-mat/0202393:*
Victor Martin-Mayor, A. Pelissetto, E. Vicari
49. *cond-mat/0202292:*
P. Calabrese, A. Pelissetto, E. Vicari
50. *cond-mat/0201310:*
M. Campostrini, Martin Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari
51. *cond-mat/0201180:*
M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari
52. *cond-mat/0111512:*
P. Calabrese, A. Pelissetto, E. Vicari
53. *cond-mat/0111160:*
P. Calabrese, A. Pelissetto, E. Vicari
54. *cond-mat/0110455:*
S. Caracciolo, Mauro Papinutto, A. Pelissetto
55. *cond-mat/0110336:*
M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari

56. *cond-mat/0106525:*
A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari
57. *cond-mat/0106372:*
Michele Caselle, Martin Hasenbusch, A. Pelissetto, E. Vicari
58. *cond-mat/0106221:*
S. Caracciolo, A. Gambassi, Massimiliano Gubinelli, A. Pelissetto
59. *cond-mat/0105160:*
S. Caracciolo, M. S. Causo, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari
Phys.Rev. E64 (2001) 046130
60. *hep-th/0104024:*
A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari
Nucl.Phys. B607 (2001) 605-634
61. *cond-mat/0012164:*
A. Pelissetto, E. Vicari
62. *cond-mat/0011305:*
M.Caselle, M.Hasenbusch, A.Pelissetto, E.Vicari
J.Phys. A34 (2001) 2923-2948
63. *cond-mat/0010479:*
S. Caracciolo, A. Gambassi, M. Gubinelli, A. Pelissetto
Eur.Phys.J. B20 (2001) 255-265
64. *cond-mat/0010360:*
M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari
Phys.Rev. B63 (2001) 214503
65. *cond-mat/0007389:*

A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari

Phys.Rev. B63 (2001) 140414

66. *hep-th/0005254:*

P.Calabrese, M.Caselle, A.Celi, A.Pelissetto, E.Vicari

J.Phys. A33 (2000) 8155-8170

67. *hep-th/0003049:*

M. Caselle, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, E. Vicari

J.Phys. A33 (2000) 8171-8180

68. *cond-mat/0002402:*

A. Pelissetto, E. Vicari

Phys.Rev. B62 (2000) 6393-6409

69. *cond-mat/0001440:*

M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari

Phys.Rev. B62 (2000) 5843-5854

70. *cond-mat/0203613:*

A. Braunstein, M. Leone, F. Ricci-Tersenghi, R. Zecchina

71. *cond-mat/0111153:*

W. Barthel, A.K. Hartmann, M. Leone, F. Ricci-Tersenghi, M. Weigt, R. Zecchina

72. *cond-mat/0105345:*

M. Marsili, R. Mulet, F. Ricci-Tersenghi, R. Zecchina

Phys. Rev. Lett 87, 208701 (2001)

73. *cond-mat/0103328:*

S. Franz, M. Leone, F. Ricci-Tersenghi, R. Zecchina

Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 127209

74. *cond-mat/0103200:*

M. Leone, F. Ricci-Tersenghi, R. Zecchina

J. Phys. A 34 (2001) 4615

75. *cond-mat/0103026:*

S. Franz, M. Mezard, F. Ricci-Tersenghi, M. Weigt, R. Zecchina

Europhys. Lett. 55 (2001) 465

76. *cond-mat/0102248:*

M. Picco, F. Ricci-Tersenghi, F. Ritort

Eur. Phys. J. B 21, 211 (2001)

77. *cond-mat/0011181:*

F. Ricci-Tersenghi, M. Weigt, R. Zecchina

Phys. Rev. E 63, 026702 (2001)

78. *cond-mat/0009338:*

J. J. Arenzon, F. Ricci-Tersenghi, D. A. Stariolo

Phys. Rev. E 62, 5978 (2000)

79. *cond-mat/0008444:*

P. Simon, F. Ricci-Tersenghi

J.Phys. A33 (2000) 5985

80. *cond-mat/0005541:*

M. Picco, F. Ricci-Tersenghi, F. Ritort

Phys. Rev. B 63, 174412 (2001)

81. *cond-mat/0004438:*

F. Ricci-Tersenghi, R. Zecchina

Phys. Rev. E 62 (2000) R7567

82. *cond-mat/0002074:*

2.5 Descrizione del programma e dei compiti dell'Unità di Ricerca

Testo italiano

Nel chiarire i compiti ed il programma che la nostra Unità di Ricerca intende svolgere nel corso del progetto partiremo da una breve giustificazione (alla luce, appunto, dei nostri interessi e delle nostre capacità scientifiche) delle richieste di fondi che presentiamo.

In primo luogo gli assegnisti. Una delle nostre preoccupazioni principali, forse la dominante, è formare giovani ricercatori di valore. E' per questo che chiediamo due assegni di ricerca biennali: vista la taglia del nostro gruppo ci sembra ragionevole prevedere la formazione, all'interno di questo progetto, di due giovani che abbiano conseguito il dottorato di ricerca annunciandosi come ricercatori potenziali di alto livello. Per quel che riguarda il personale abbiamo anche chiesto un contratto per un supporto segretariale per i due anni del progetto: la gestione infatti di un progetto di questo tipo prevede un gran numero di compiti di segreteria (dalla gestione dei fondi alle pagine web al seguire la burocrazia riguardante i giovani ed i visitatori stranieri ed a molto altro) che ci sarebbe impossibile svolgere senza un aiuto.

In secondo luogo chiediamo un contributo che consenta partecipazioni a conferenze e collaborazioni con altri laboratori italiani ed esteri. Pensiamo anche di organizzare un convegno (di taglia non enorme, con caratteristiche di incontro di lavoro) in sede, per dibattere le tematiche che sono alla base del nostro progetto. Chiediamo anche un supporto minimo per tre computer da tavolo e del materiale di consumo.

Citiamo in ultimo, a questo proposito, la nostra richiesta di grandi attrezzature, cioè un cluster Beowulf per i nostri calcoli numerici. Una lettura del nostro progetto rende subito chiaro che la parte numerica gioca un ruolo molto importante. Negli ultimi due anni abbiamo sviluppato algoritmi, simulato sistemi di dinamica molecolare, utilizzato grandi simulazioni Monte Carlo di sistemi reticolari (basate su metodi di simulazione ottimizzati), utilizzato metodi di annealing per investigare proprietà di basse temperature di sistemi disordinati, utilizzato tecniche di ottimizzazione (sia algoritmi genetici che algoritmi esatti) per calcolare lo stato fondamentale di sistemi di tipo vetro di spin. Grazie allo scorso progetto cofin abbiamo costruito un cluster parallelo basato su Pentium ad 800 MHz, che l'anno venturo sarà almeno parzialmente obsoleto. Abbiamo intenzione, in questo settore, di restare assolutamente competitivi, ed è per questo che chiediamo di poter realizzare un nuovo cluster Beowulf, che sarà probabilmente basato su processori di tipo Pentium 4 e su una rete di comunicazione veloce.

Per quel che riguarda il nostro programma scientifico discuteremo adesso soltanto i punti chiave del nostro futuro lavoro, e non cercheremo di entrare in tutti gli argomenti che prevediamo di trattare: cercheremo però di entrare in qualche dettaglio nella discussione dei punti di maggior rilievo.

Cominciamo una discussione piu' dettagliata occupandoci, come nel punto 2.4, di vetri.

Attraverso i metodi della teoria statistica dei campi (TSC) studieremo dal punto di vista teorico le proprieta' dinamiche dei vetri strutturali. Cercheremo di spiegare le spettacolari proprieta' fisiche di questi sistemi attraverso una comparazione dettagliata di teoria ed esperimenti. I recenti sviluppi delle tecniche di scattering inelastico di raggi X hanno permesso uno studio dettagliato della dinamica di alta frequenza (0.1 THz) dei vetri strutturali. Cercheremo di comprendere analiticamente le caratteristiche universali comuni ad un vasto gruppo di materiali: la reale esistenza del suono di alta frequenza, lo scaling della larghezza di linea, il picco bosonico e la presenza di altri picchi nel fattore di struttura dinamico. Studieremo inoltre il ruolo delle eccitazioni trasverse in questa fenomenologia e le proprieta' di localizzazione (nel senso dato da Anderson) delle vibrazioni. Questi sviluppi, a parte il loro interesse intrinseco, sono una chiave fondamentale per comprendere la transizione vetrosa.

Useremo principalmente i metodi della TSC (modelli effettivi, approssimazione di campo medio, espansioni diagrammatiche, e metodi Montecarlo). Lavoreremo in approssimazione armonica, in un regime descritto da matrici random (con la complicazione delle correlazioni dovute all'invarianza traslazionale). Estenderemo le equazioni per la self-energia ottenute in uno sviluppo di alta densita' al caso con eccitazioni longitudinali e trasverse, e al caso di particelle correlate. Considereremo approssimazioni che interpolino l'espansione di alta densita' con quella di bassa densita'. L'espansione di alta densita' e' la piu' naturale per i vetri, ma la localizzazione delle vibrazioni (sempre nel senso di Anderson) e' piu' accessibile in uno sviluppo di bassa densita'. La formulazione in termini di teoria dei campi sara' cruciale per questo sviluppo. A questo punto studieremo la transizione vetrosa, la viscosita' dei liquidi sopraraffreddati e l'origine del picco bosonico.

I primi sei mesi saranno impiegati per la generalizzazione e lo studio delle equazioni integrali di alta densita' per le vibrazioni vettoriali. La generalizzazione al caso di particelle correlate richiederanno altri sei mesi per la realizzazione di misure molto accurate della funzione di correlazione di coppia statica, per mezzo di simulazioni di dinamica molecolare. Per ultimo stimiamo ulteriori dodici mesi per l'interpolazione tra regime di alta e bassa densita'.

Lo studio delle vibrazioni armoniche vettoriali chiarificheranno il ruolo dei modi trasversi nelle differenti caratteristiche spettrali riscontrate. Una buona approssimazione che tenga conto degli effetti di correlazione in sistemi con potenziali realistici permettera' un confronto piu' significativo con gli spettri sperimentali. Il trattamento unificato del regime di bassa ed alta densita' daranno un quadro di riferimento utile per il suono di alta frequenza e la localizzazione. Infine riteniamo che il confronto con questi problemi e queste tecniche siano la via per una piu' profonda comprensione della transizione vetrosa attraverso l'attacco per via analitica dei modi normali istantanei e del panorama energetico.

Un altro argomento che per noi risulta di grande importanza e' quello dei vetri di spin. Conviene probabilmente citare tre argomenti sui quali speriamo di dare dei contributi nei prossimi due anni.

- *In primo luogo esperimenti numerici che tentino di riprodurre gli interessantissimi risultati degli esperimenti veri. Gli effetti di memoria e di memoria multipla, ad esempio, non sono stati ancora spiegati dal punto di vista teorico. Si pongono qui questioni fondamentali: un vetro di spin di tipo Ising descrive l'evidenza sperimentale dalla quale siamo partiti? O forse e' necessario avere modelli di tipo Heisenberg per osservare comportamenti di questo tipo?*
- *In secondo luogo citiamo calcoli di stati fondamentali di vetri di spin, e, per quel che riguarda il caso bidimensionale anche il calcolo esatto dell'intera funzione di partizione (interagiamo a questo proposito con gruppi di matematici applicati che hanno forti competenze in questo tipo di tecniche).*
- *Citiamo in ultimo l'annosa questione della descrizione teorica dei modelli di tipo vetro di spin in dimensione finita. Sia con tecniche Monte Carlo, che tecniche di stati fondamentali che tecniche analitiche cercheremo di chiarire le proprieta' tipiche della fase di basse temperature di questi sistemi.*

Discutiamo ora in un qualche dettaglio di "complessita'". La complessita' computazionale di un problema indica come devono crescere le risorse computazionali (per esempio, tempo di CPU e memoria) richieste per risolvere tale problema all'aumentare del numero N delle variabili del problema stesso. La classificazione di problemi, sia decisionali che di ottimizzazione, in classi equivalenti di complessita' ha portato alla definizione delle classi P ed NP . La prima contiene problemi per cui e' noto almeno un algoritmo che li risolva in un tempo polinomiale in N . Nella classe NP (o meglio ancora nella classe degli NP -completi) troviamo, invece, tutti quei problemi che attualmente richiedono risorse esponenziali in N . Allo stato attuale i problemi NP non possono essere studiati in maniera soddisfacente visto che la crescita esponenziale della loro complessita' computazionale permette di trovarne la soluzione solo per taglie piccole.

Nell'ambito dello studio della complessita' computazionale si e' sviluppato negli ultimi anni un interesse molto grande per degli ensemble di problemi random che presentano, al variare di un qualche parametro, delle vere e proprie transizioni di fase (il modello maggiormente studiato in questa categoria e' la random 3-SAT). In corrispondenza di tali transizioni si accumulano i problemi piu' duri. La strada per la loro risoluzione passa da una comprensione dettagliata delle cause fondamentali che rendono i problemi intorno alla transizione cosi' difficili da risolvere.

Alcuni importanti passi in avanti sono stati fatti negli ultimi anni grazie all'uso di alcune tecniche analitiche di meccanica statistica (metodo delle repliche e metodo della cavita') e di alcuni concetti fisici (transizione di fase disordinata del primo ordine, transizione dinamica, ...) ben noti nello studio dei sistemi disordinati. In particolare, per modelli quali la random 3-SAT, e' stato possibile capire la tipologia della transizione (disordinata del

primo ordine) e il fenomeno fisico che rallenta ed eventualmente blocca gli algoritmi di ricerca di soluzioni: la nascita di stati metastabili vetrosi in vicinanza del punto critico ha l'effetto di intrappolare ogni dinamica locale di rilassamento.

Visti i validi risultati ottenuti negli ultimi anni nel campo della complessità computazionale grazie all'uso di tecniche di meccanica statistica precedentemente sviluppate nell'ambito dello studio dei sistemi disordinati, vorremmo portare avanti questa linea di ricerca su più fronti.

Da un lato vorremmo risolvere altri problemi di alto interesse non solo per i fisici, ma anche e soprattutto per le comunità scientifiche della "Computer Science" e della "Information Technology": esempi sono il (bi-)coloring di grafi ed ipergrafi random e simili problemi di ottimizzazione, e i codici di correzione di errori.

Sfruttando l'ottima descrizione dei problemi che è stata raggiunta, vorremmo proporre un metodo di ricerca delle soluzioni che lavori usando delle variabili di rilevanza fisica (i campi di cavità). Questo permetterebbe un controllo molto accurato delle proprietà di convergenza dell'algoritmo. Il nostro obiettivo finale è quello di sviluppare un algoritmo di risoluzione che riesca a superare gli stati metastabili vetrosi (stati di soglia) e che quindi possa essere usato anche nelle condizioni in cui quelli attuali falliscono.

Da un altro lato vorremmo iniziare lo studio sistematico di alcuni rilevanti sistemi disordinati (ad esempio vetri di spin) lavorando sulla singola realizzazione del disordine, invece che, come al solito, sull'ensemble. Analogamente a come gli esperti di tecnologia dell'informazione analizzano i loro problemi, noi vorremmo studiare i singoli campioni dei nostri sistemi disordinati, alla ricerca di una descrizione più accurata di aspetti fisici quali ad esempio le eterogeneità.

Questo approccio sul singolo campione potrebbe risultare molto efficace anche per il calcolo degli stati di bassa energia, ed eventualmente anche ground states, nei vetri di spin in dimensioni finite.

Un'altra linea per noi fondamentale è quella della teoria dei campi. È utile elencare qui brevemente i punti principali che stiamo investigando:

- 1. Studio di sistemi di spin: determinazione degli esponenti critici e delle equazioni di stato per sistemi con $N = 1, 2, 3$.*
- 2. Studio di sistemi di spin diluiti con disordine quenched: determinazione degli indici critici con metodi di teoria di campo.*
- 3. Elimagneti ed antiferromagneti triangolari stacked: studio del comportamento critico con metodi di gruppo di rinormalizzazione.*
- 4. Polimeri in fase diluita: sviluppo di nuovi algoritmi per simulazioni in fase compatta.*

5. *Studio della operator-product-expansion su reticolo.*
6. *Studio di perturbazioni geometriche in modelli sigma bidimensionali.*

Ci interessera' nel prossimo periodo affrontare una serie di nuove problematiche. Abbiamo in mente fra l'altro:

1. *Studio Monte Carlo di proprieta' critiche di liquidi: calcolo della viscosita' in regime critico.*
2. *Studio perturbativo di sistemi complessi tridimensionali: in particolare, i fenomeni di crossover in sistemi antiferromagnetici in campo magnetico ed in superconduttori nell'ambito del modello SO(5).*
3. *Polimeri in fase diluita: fattore di struttura per varie conformazioni polimeriche.*

Testo inglese

In clarifying the program that our research unit intends to develop in the frame of this project, we shall start with a brief justification (in the light of our interests and our scientific expertise) for the request of funds.

In the first place we think of fellowships/scholarships. One of our main goals is to aid the formation of young valuable scientists. It is for this reason that we request two biannual postdoctoral fellowships: given the size of the group, we deem it reasonable to host within this project two young researches with a PhD and prospective of becoming high level researches. Regarding personnel, we also request a contract for secretarial support during the two-year period of the project: in fact, the management of a project of this kind implies a lot of clerical work (from managing funds to maintaining web pages to following the paperwork regarding fellows and foreign visitors, and more) which we couldn't possibly carry out without additional help.

In the second place, we ask for funds for participation in conferences and collaboration with other researches, both foreign and Italian. We think of organizing a conference (of medium size, with the characteristics of a workshop), to debate the issues at the base of our project. We also ask for a small amount for three desktop computers and support materials.

Finally, we mention our request for large equipment, i.e. a Beowulf cluster for our numerical work. From reading the project it should immediately be clear that the numerical part plays a very important role. In the last two years we have developed algorithms, done molecular dynamics simulations and big Monte Carlo simulations of lattice systems (with optimized simulation methods), used annealing method to investigate low temperature properties of disordered systems, used optimization techniques (with both genetic and exact algorithms) to compute the fundamental state of spin-glass-like systems. With funds from the last COFIN project, we have built a parallel cluster based on 800 MHz Pentium machines, which will become partially obsolete during the next year. We intend to remain absolutely competitive in this sector, and for this reason we ask to build a new Beowulf cluster, probably based on Pentium 4 processors and a high-speed network.

Regarding our scientific programme, we discuss now only the key points of our future work,

without attempting to explain all the problems we expect to deal with: we prefer rather to give some detail of the most relevant points.

We begin, as in point 2.4, by discussing structural glasses.

We shall investigate theoretically, using statistical field theory (SFT) the dynamic properties of structural glasses. We shall try to understand the spectacular physical properties of these systems, to attempt detailed theory/experiment comparisons and/or to propose new experiments. The recent developments in inelastic X-ray scattering techniques have allowed a detailed study of the high frequency dynamics (0.1 THz) of structural glasses. We shall try to understand theoretically the features that are universal within this vast group of materials: the very existence of a high-frequency sound, the scaling of the line-width, the Boson-peak and the presence of secondary peaks in the dynamic structure factor. We shall study the role of transverse excitations in this phenomenology and the localization properties (in the Anderson sense) of the vibrations. These development, besides their high intrinsic interest, will open the door to the study of the glass-transition.

We shall use the tools of the SFT (effective models, mean-field approximation, diagrammatic expansions, Monte Carlo calculations). We shall work in the harmonic approximation, where random-matrices (correlated due to translational invariance) appear. We shall extend the equations for the self-energy obtained in the high-density expansion to the case of longitudinal and transverse excitations and to the case of correlated particles. We shall consider approximations that interpolate between the high-density expansion and the low density one. The high-density expansion is the most natural for glasses, but localization of vibrations (a la Anderson) is more accessible to the low density one. The Field Theory formulation will be crucial for this. At this point we will study the glass transition, the supercooled liquid viscosity and the origin of the Boson Peak.

The first six months will be devoted to the generalization and study of the high-density integral equations to vectorial vibrations. The generalization to the case of correlated particles is a 6 month task, which will require a very accurate calculation of the static pair-correlation function, using Molecular Dynamics. Finally, the interpolation between high and low densities will probably require 12 months.

The study of vectorial harmonic vibrations will clarify the role of the transverse modes in giving rise to the different spectral features. A good approximation to the effects of correlations in systems with realistic potentials will allow a more detailed comparison with experimental spectra. A unified treatment of the high and low density limits will provide a framework suitable to the study of high frequency sound and localization. Finally, mastery of these problems and techniques will open the door to a deeper study of the glass transitions via an analytic attack of the instantaneous normal modes and energy landscape.

Another subject of great importance is that of spin glasses. It is better to cite three areas in which we expect to make contributions in the next two years.

- *In the first place, numerical experiments that try to reproduce the very interesting results of real experiments. Memory effects, and multiple memory effects, for instance, have not yet been explained theoretically. Fundamental issues: does an Ising spin*

glass describe the experimental phenomenology which it was conceived to explain? Or maybe Heisenberg models are required?

- *Second, we mention calculations of the fundamental state of spin glasses and, for 2-D systems, also the exact computation of the whole partition function (for this problem, we interact with applied mathematics groups with a strong background in this kind of techniques).*
- *Finally, we cite the old question of the theoretical description of finite-dimensional spin glass models. We shall attempt to clarify the properties of the low temperature phase of these systems with fundamental state as well as Monte Carlo and analytical techniques.*

Let us now give some details on the issue of complexity. The computational complexity of a problem is related to the way computational resources required for its solution (as CPU time and memory) grow when the number of variables N in the problem increases. Classification of problems, both decisional than optimization ones, in equivalence classes brought to the definition of classes P and NP . The former contains problems which can be solved with a known algorithm in a time growing polynomially with N . In the NP class (and still more in the NP -complete class) we find all those problems that require, at present, resources at least exponential in N . Currently NP problems can not be studied in a satisfactory way, since the exponential grow of their complexity allows one to find solutions only for small sizes.

In the contest of computational complexity, the last years have seen a growing interest in those ensemble of random problems which undergo a sharp phase transition when some parameter is changed (the random 3-SAT model is certainly the most studied in this category). Close to these phase transitions the hardest problems can be found. The path leading to the resolution of these hard instances goes through a detailed comprehension of the physical reasons making problems so hard close to the transition.

Important advances has been made in the very last years thanks to the application of some statistical mechanics analytical techniques (replica methods and cavity method) and physical concepts (disordered phase transitions, dynamical transition, ...), already well known in the study of disordered systems. In particular, for models like random 3-SAT, it has been possible to understand the nature of the phase transition (disordered first order) and the physical mechanism which does not allow algorithms to find solutions close to the transition: The presence of glassy metastable states which trap any local relaxing dynamics.

Given the large number of relevant results obtained in the last years in the field of computational complexity thanks to the use of some statistical mechanics techniques previously known in the study of disordered systems, we would like to push forward this research line along different directions.

On one side we would like to solve more problems of large interest not only for physicists, but also and mainly for the scientific communities of Computer Science and Information Technology: Examples are (bi-)coloring of random graphs and hypergraphs and related optimization problems, and error correcting codes.

Exploiting the accurate physical description of the phase transition achieved recently, we

would like to propose a new algorithm for searching solutions, working with physical variables, like cavity fields. This method would allow a deeper control on the convergence properties of the algorithm. Our final aim is to develop a searching algorithm which would be able to relax below the metastable glassy states (threshold states) and to find solution in situations where current algorithms fail.

On the other side we would like to start a systematic study of some relevant disordered systems (like spin glasses) working on a single disorder realization, instead on the whole ensemble as usual. In analogy with the way information technologists analyze their problems, we would like to study single samples of a disorder model, looking for a better description of some physical aspects, like e.g. heterogeneities.

This 'single sample' approach may be very useful also for the calculation of low energy states, and eventually ground states too, in finite-dimensional spin glasses.

Another fundamental line is that of field theory. It is useful to mention briefly the main points we are researching:

1. *Studies of spin systems: determination of critical exponents and the equation of state for systems with $N = 1,2,3$.*
2. *Study of diluted spin system with quenched disorder: determination of critical indices with field-theoretic methods.*
3. *Elimagnets and stacked triangular antiferromagnets: study of the critical behaviour with renormalization group techniques.*
4. *Polymers in dilute phase: development of new algorithms for simulations in the condensed phase.*
5. *Study of the operator-product-expansion on the lattice.*
6. *Study of geometric perturbations in bidimensional sigma models.*

We shall undertake new problems in the upcoming period. Among others, we have in mind:

1. *Monte Carlo studies of critical properties of liquids: computation of the viscosity in the critical regime.*
2. *Perturbative study of tridimensional complex systems: in particular, crossover phenomena in antiferromagnets in a magnetic field and in superconductors in the context of the $SO(5)$ model.*
3. *Polymers in the dilute phase: structure factor for several polymer conformations.*

2.6 Descrizione delle attrezzature già disponibili ed utilizzabili per la ricerca proposta

| N° | Anno di acquisizione | Descrizione | |
|----|----------------------|---|--|
| | | Testo italiano | Testo inglese |
| 1. | 2000 | <i>Cluster Beowulf "idra" (Pentium3 800 MHz). Ne chiediamo un forte update.</i> | <i>"Idra" beowulf cluster. We are asking for a substantial update/improvement.</i> |
| 2. | 2000 | <i>Varie workstations , acquistate anche dal 1998 al 2002.</i> | <i>A number of workstations, bought from 1998 to 2002.</i> |
| 3. | | | |
| 4. | | | |
| 5. | | | |

2.7 Descrizione della richiesta di Grandi attrezzature (GA)

Attrezzatura I

Descrizione

Testo italiano

Computer Beowulf, basato su schede biprocessore Pentium 4, sistema Linux, software di compilazione Intel e di comunicazione MPI (tutto public domain), rete di comunicazione veloce tipo Gigabit Ethernet.

Testo inglese

Beowulf computer, based on Pentium 4 biprocessor boards, Linux OS, Intel compiler and MPI parallel communication software, fast communication network of the type Gigabit Ethernet.

valore presunto 100000 (Euro) percentuale di utilizzo per il programma 100%

Attrezzatura II

Descrizione

valore presunto (Euro) percentuale di utilizzo per il programma

2.8 Mesi uomo complessivi dedicati al programma

| | numero | mesi uomo |
|--|---------------|----------------------------|
| Personale universitario dell'Università sede dell'Unità di Ricerca (docenti) | 4 | 72 (ore: 9900) |
| Personale universitario dell'Università sede dell'Unità di Ricerca (altri) | 0 | 0 |
| Personale universitario di altre Università (docenti) | 0 | 0 |
| Personale universitario di altre Università (altri) | 0 | 0 |
| Titolari di assegni di ricerca | 2 | 36 (ore: 4950) |
| Titolari di borse dottorato e post-dottorato | 4 | 66 (ore: 9075) |
| Personale a contratto | 3 | 66 (ore: 9075) |
| Personale extrauniversitario | 3 | 58 (ore: 7975) |
| Totale | 16 | 298 (ore: 40975) |

Parte: III

3.1 Costo complessivo del Programma dell'Unità di Ricerca

| Voce di spesa | Spesa, Euro | Descrizione | |
|--|-------------|---|--|
| | | Testo italiano | Testo inglese |
| Materiale inventariabile | 15.000 | <i>Tre computer tipo desktop di potenza medio-alta. Dischi raid per configurazioni.</i> | <i>Three desktop computer of medium-high power. RAID system for safe data storage.</i> |
| Grandi Attrezzature | 100.000 | <i>Computer parallelo di tipo Beowulf (vedi descrizione al punto 2.7.</i> | <i>Beowulf parallel computer. See description at item 2.7.</i> |
| Materiale di consumo e funzionamento | 11.000 | <i>Cartoleria, toner, materiale vario.</i> | <i>Paper, toner, general perishable material.</i> |
| Spese per calcolo ed elaborazione dati | | | |

| | | | |
|--|---------|--|---|
| Personale a contratto | 108.000 | <i>Due contratti post-dottorali ed un addetto di segreteria scientifica. Il gruppo di ricercatori stabili ha dimensioni tali da rendere il numero di 2 postdoc ideale. Un supporto di segreteria e' necessario per il buon andamento del progetto.</i> | <i>Two post-doctoral fellows, two years each, and one secretary. The dimensions of the group are such that two post-doctoral fellows is an ideal number. Also a secretarial support is necessary.</i> |
| Servizi esterni | | | |
| Missioni | 30.000 | <i>Missioni a conferenze, convegni e per collaborazioni scientifiche.</i> | <i>Scientific collaborations, participation to conferences and meetings.</i> |
| Pubblicazioni | | | |
| Partecipazione / Organizzazione convegni | 20.000 | <i>Organizzazione di un convegno in sede sui temi della ricerca.</i> | <i>We will organize a conference in Rome on the subject of the reserach project.</i> |
| Altro | | | |

Il progetto e' gia' stato cofinanziato da altre amministrazioni pubbliche o private (art. 4 bando 2002)? NO

Amministrazioni cofinanziatrici:

| | |
|--|----------------|
| | Euro |
| Costo complessivo del Programma dell'Unità di Ricerca | 284.000 |
| Costo minimo per garantire la possibilità di verifica dei risultati | 200.000 |
| Fondi disponibili (RD) | 88.000 |
| Fondi acquisibili (RA) | 0 |
| Cofinanziamento di altre amministrazioni pubbliche o private (art. 4 bando 2002) | 0 |
| Cofinanziamento richiesto al MIUR | 196.000 |

Parte: IV

4.1 Risorse finanziarie già disponibili all'atto della domanda e utilizzabili a sostegno del Programma

QUADRO RD

| Provenienza | Anno | Importo disponibile, Euro | Note |
|----------------|------|---------------------------|-----------------------------|
| Università | 2000 | 35.000 | Ateneo Marinari 2000 e 2001 |
| Dipartimento | | | |
| CNR | | | |
| Unione Europea | 2002 | 40.000 | STIPCO+DIGLAGEMEM+Curie |
| Altro | 2002 | 13.000 | I.N.F.M. - S. M. C. |
| TOTAL | | 88.000 | |

4.1.1 Altro

INFM CRS SMC (centro di ricerca e sviluppo "Statistical Mechanics and Complexity")

4.2 Risorse finanziarie acquisibili in data successiva a quella della domanda e utilizzabili a sostegno del programma nell'ambito della durata prevista

QUADRO RA

| Provenienza | Anno della domanda o stipula del contratto | Stato di approvazione | Quota disponibile per il programma, Euro | Note |
|-----------------------|---|------------------------------|---|-------------|
| Università | | | | |
| Dipartimento | | | | |
| CNR | | | | |
| Unione Europea | | | | |
| Altro | | | | |
| TOTAL | | | 0 | |

4.2.1 Altro

4.3 Certifico la dichiarata disponibilità e l'utilizzabilità dei fondi di cui ai punti 4.1 e 4.2: *SI*

Firma _____

(per la copia da depositare presso l'Ateneo e per l'assenso alla diffusione via Internet delle informazioni riguardanti i programmi finanziati; legge del 31.12.96 n° 675 sulla "Tutela dei dati personali")

Firma _____

21/04/2002 10:24:35

