

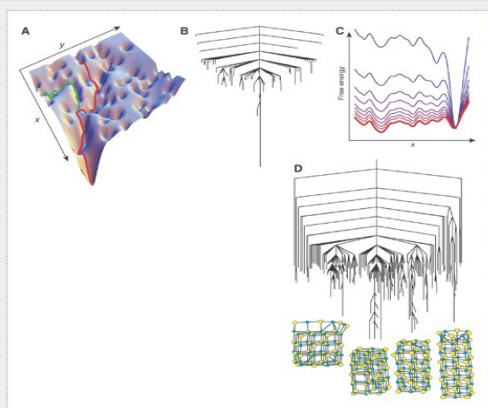
Complexidade da superfície de energia do p-spin glass

Dhagash Mehta, Syracuse University, USA

Michael Kastner, University of Stellenbosch, South Africa

Daniel Adrián Stariolo, UFRGS, Brazil

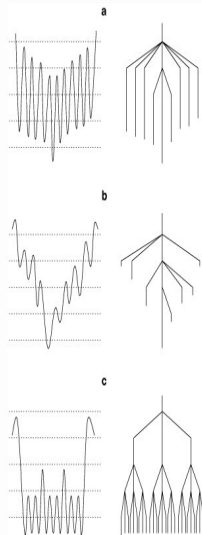
Superfícies de energia



Making sense of potential energy surfaces.

The model two-dimensional potential energy surface (A) corresponds to the "palm tree" disconnection graph in (B) and the free energy profiles in (C). Two paths linking high energy local minima to the global minimum are superimposed on the surface in (A). In (C), the color of the free energy curve changes from blue to red with increasing temperature. At low temperature, the

global free energy minimum and the global potential energy minimum are the same, but at high temperature the system is more likely to be found in higher lying local minima. (D) The multifunnel character of the disconnection graph for a small rock salt cluster with 213 degrees of freedom and four competing nanocrystal morphologies. Multiple funnels produce separation of time scales for relaxation, explaining the experimental separation of time scales for relaxation to a nanocrystal of any kind compared with relaxation to the true global minimum.



Vidros vs. cristais

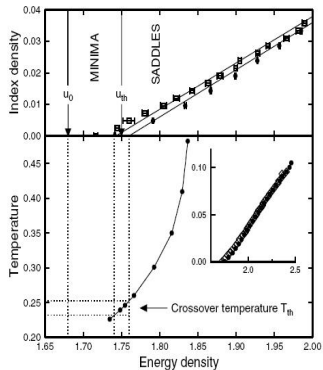
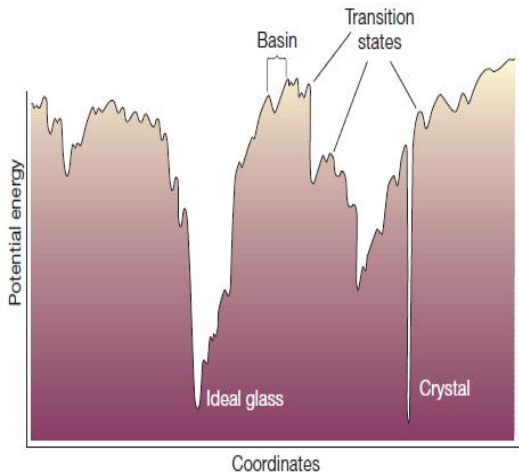


FIG. 1. Top: Average instability index density k vs potential energy density u of the stationary points. Bottom: Temperature vs equilibrium bare potential energy density, $u_b = u_{eq} - 3/2k_bT$. Inset: $k(u)$ on the whole range sampled. Open symbols: $N = 140$; filled symbols: $N = 70$.

O vidro de spin p -spin esférico

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{p!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_p=1}^N J_{i_1, i_2, \dots, i_p} \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \cdots \sigma_{i_p}$$

J_{i_1, i_2, \dots, i_p} variáveis aleatórias Gaussianas com

$$\langle J_{i_1, i_2, \dots, i_p} \rangle = 0 \quad \langle J_{i_1, i_2, \dots, i_p}^2 \rangle = p! / 2N^{p-1}$$

Vínculo esférico:

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N \quad \Longrightarrow \quad L = H + \sigma_0 \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 - N \right)$$

Para $p \geq 3$ solução exata com uma quebra da simetria de réplicas \Longrightarrow “duas escalas” (semelhante a vidro molecular)

Numerical polynomial homotopy continuation method

Para $p = 3$, os pontos estacionários (“saddles”) solução de:

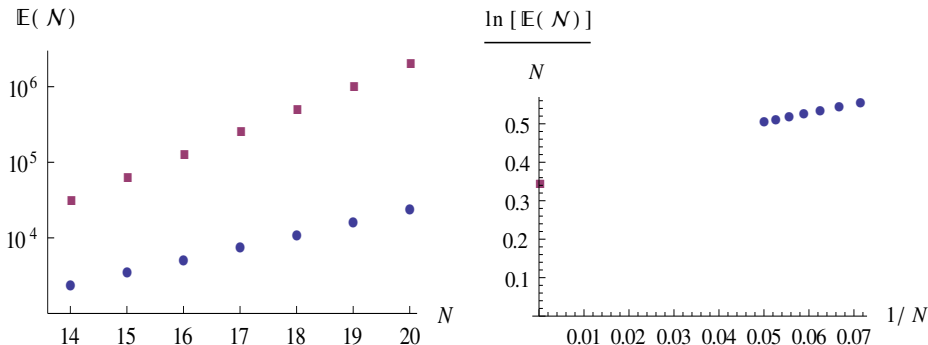
$$\frac{\partial L}{\partial \sigma_i} = 0 \quad \implies \quad \sum_{j,k=1}^N J_{i,j,k} \sigma_j \sigma_k + 6e \sigma_i = 0$$

$e = H/N$: densidade de energia no ponto estacionário.

O *numerical polynomial homotopy continuation method* permite calcular **TODOS** os pontos estacionários, reais e complexos, de um sistema de equações polinomiais.

A. J. Sommese e C. W. Wampler, *The Numerical Solution of Systems of Polynomials Arising in Engineering and Science*, (World Scientific, Singapore, 2005)

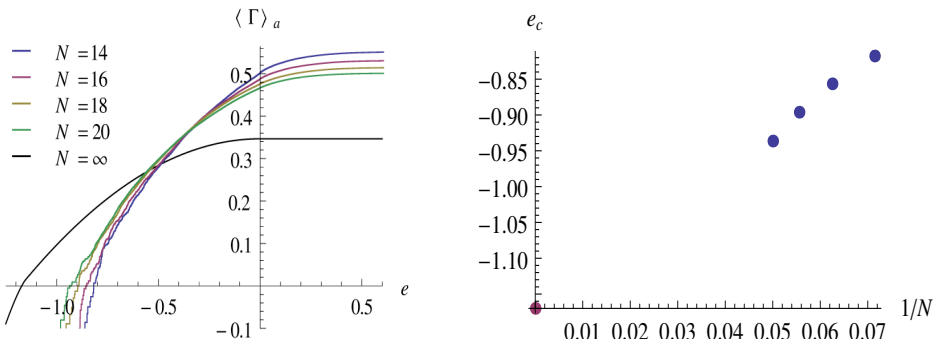
Número de pontos estacionários



Esquerda: Média na desordem $\mathbb{E}(N)$ do número total N de pontos estacionários complexos (quadrados vermelhos) e reais (pontos azuis) em escala logarítmica, em função do tamanho do sistema N . Os dois números crescem exponencialmente com N . *Direita:* Densidade logarítmica do número de pontos estacionários reais vs. a inversa do tamanho (pontos azuis). O resultado analítico no limite termodinâmico é indicado por um quadrado vermelho.

Complexidade vs energia

Complexidade integrada: $\langle \Gamma(e) \rangle_a = \frac{1}{N} \ln \mathbb{E}(\mathcal{M}(e))$

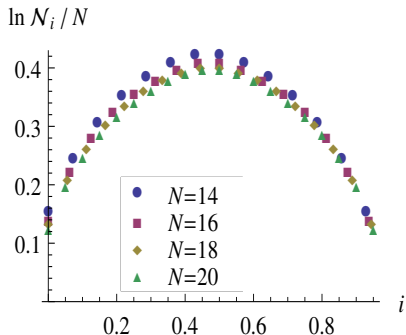
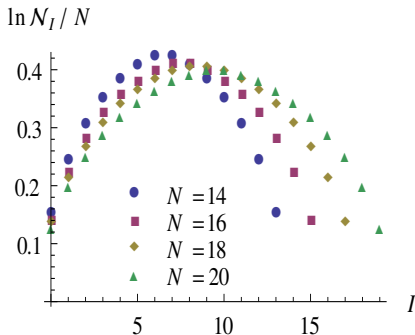


Esquerda: Média “annealed” da complexidade integrada Γ vs. densidade de energia e e para diversos tamanhos N . Para comparação, o resultado analítico para $N \rightarrow \infty$ se mostra na linha preta. *Direita:* Energias críticas dos sistemas finitos e_c , determinadas como os valores da energia onde $\langle \Gamma \rangle_a$ na figura da esquerda muda de sinal. Para comparação, o resultado analítico no limite termodinâmico $e_c \approx -1.17$ aparece como o ponto em vermelho.

Número de estados estacionários de dado índice

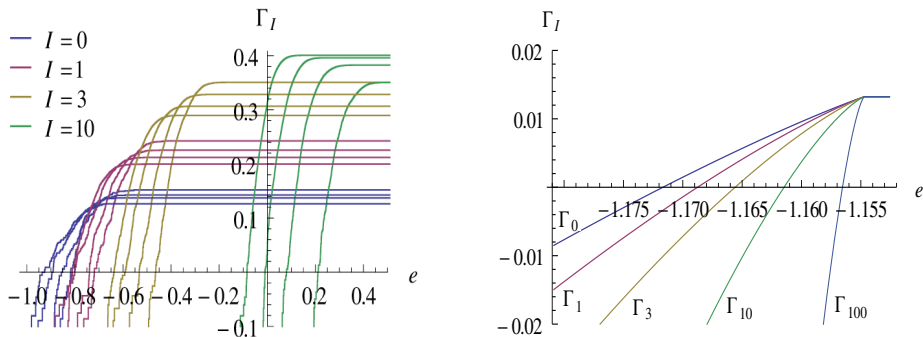
Matriz Hessiana:

$$\tilde{\mathcal{H}}_{lm} \equiv \frac{\partial^2 L}{\partial \sigma_l \partial \sigma_m} = - \sum_{k=1}^N J_{k,l,m} \sigma_k - p \mathbf{e} \delta_{l,m}$$



O número total de pontos estacionários vs. índice I (esquerda) e vs. densidade i (direita) para diferentes tamanhos N .

Complexidade para dado índice

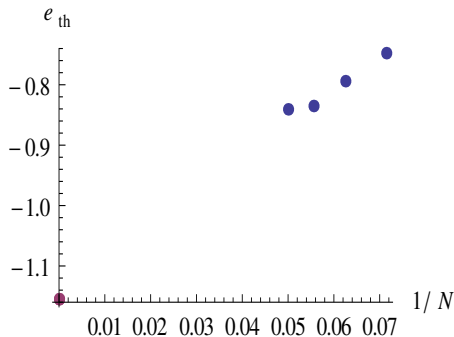
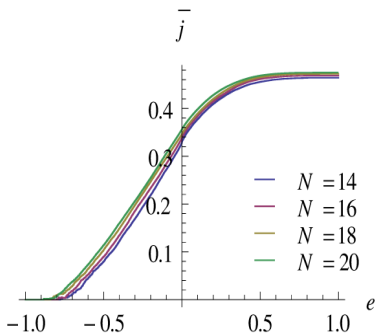


Esquerda: Complexidades integradas Γ_I dos pontos estacionários de índice $I = 0, 1, 3$ e 10 vs. densidade de energia e para tamanhos $N = 14, 16, 18$ e 20 . Dentro das curvas de dado índice I , a energia e_c^I onde Γ_I muda de sinal decresce com tamanhos crescentes, permitindo assim determinar facilmente os tamanhos para as diferentes curvas no gráfico. *Direita:* resultados correspondentes no limite termodinâmico.

Índice médio vs energia

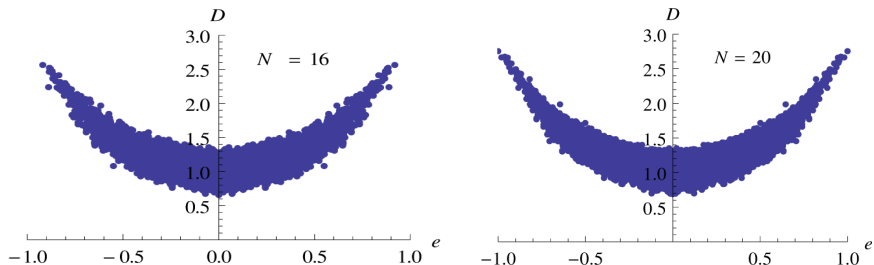
Índice médio cumulativo

$$\bar{j}(e) = \sum_{\{\sigma^s: H(\sigma^s) \leq Ne\}} \frac{I(\sigma^s)}{N}$$



Esquerda: Índice médio integrado \bar{j} vs. densidade de energia e para diversos tamanhos N . Direita: Energias "threshold" e_{th} obtidas a partir de fits nas curvas do índice integrado médio $\bar{j}(e)$ da figura da esquerda. O ponto em vermelho representa o resultado analítico no limite termodinâmico $e_{th} = -2/\sqrt{3} \approx -1.155$.

Determinante Hessiano



Pares (D, e) para todos os pontos estacionários σ^S das 10 amostras de desordem analisadas. $e = H(\sigma^S)/N$ é a densidade de energia e $D = |\det \mathcal{H}(\sigma^S)|^{1/N}$ é o determinante de Hesse rescalado em cada ponto estacionário. *Esquerda: $N = 16$, Direita: $N = 20$.*

Conclusões e perspectivas

- O NPHCM permite uma caracterização exaustiva, exata, de superfícies de energia (S.E.) em sistemas finitos.
- Permite verificar os efeitos de tamanho finito e a aproximação ao limite termodinâmico.
- É possível correlacionar as características da S.E. com propriedades dinâmicas, por exemplo, através do computo de barreiras de energia e estabilidade de pontos estacionários.
- Aplicação a sistemas biológicos, como enovelamento de proteínas e outros sistemas que possam ser caracterizados por uma S.E. longe do limite termodinâmico parece promissor.