

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

Modelos de vidros de spin com interações de ordem alta

Viviane Moraes de Oliveira

*Tese apresentada ao Instituto de Física de
São Carlos, Universidade de São Paulo, para
obtenção do Título de Doutor em Ciências: ^{OK}
Física Básica*

USP/IFSC/SBI



8-2-001346

ORIENTADOR: *Prof. Dr. José Fernando Fontanari*

SÃO CARLOS

2000

IFSC-USP

SERVIÇO DE BIBLIOTECA
INFORMAÇÃO

Oliveira, Viviane Moraes de

"Modelos de vidros de spin com interações de ordem alta" / Viviane Moraes de Oliveira – São Carlos, 2000

Tese (Doutorado) – Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2000 – páginas: 112

Área: Física Básica

Prof. Dr. José Fernando Fontanari

1. Modelos de vidros, 2. Interações de spin, 3. Ordem alta

I. Título



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE VIVIANE MORAES DE OLIVEIRA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 27 DE JULHO DE 2000.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. José Fernando Fontanari/IFSC-FFI-USP

Profa. Dra. Rita Maria Zorzenon dos Santos/UFF

Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody/IFSC-FFI-USP

Prof. Dr. Nestor Felipe Caticha Alfonso/IF-USP

Prof. Dr. Sérgio Galvão Coutinho/UFPe

e-mail: wladerez@if.sc.usp.br

Agradecimentos

- Agradeço ao Prof. Dr. Fontanari pela paciência e orientação desta tese;
- aos queridos colegas Daniela e Domingos pelo estímulo e acolhimento nos primeiros dias em São Carlos;
- aos colegas de grupo Ana, Camilo, Cláudia, Crepaldi, Fernandinho e Milton, por tornar nosso ambiente de trabalho mais alegre;
- aos meus pais por tudo;
- ao Paulo pela ajuda, compreensão e carinho;
- a Deus, por nos propiciar um objeto de estudo tão belo;

Por fim, gostaria de agradecer ao CNPq pelo apoio financeiro nos primeiros 6 meses de doutorado e à FAPESP nos 42 meses seguintes.

Conteúdo

1	Introdução	11
2	Estados Meta-estáveis	19
2.1	Meta-estabilidade em modelos com interações de alcance infinito	20
2.2	Cálculo do número médio de pares de mínimos	30
2.3	Correções ao alcance infinito	41
3	Termodinâmica de vidros de spin com interações de multispins	49
3.1	Número médio de estados	50
3.2	Número médio de pares de estados	53
3.3	Entropia	59
3.3.1	Simetria de Réplicas	61
3.3.2	Análise de estabilidade	66
3.3.3	Primeira quebra de simetria de réplicas	68
3.4	Linhas de Transição	77
3.4.1	Linha de transição contínua	77
3.4.2	Linha de transição descontínua	82
4	Replicadores com interações de ordem alta	85
4.1	Energia Livre	87
4.1.1	Simetria de Réplicas	89

CONTEÚDO	3
4.1.2 Estabilidade da Solução com Simetria de Réplicas	96
4.1.3 Distribuição de probabilidade das concentrações	100
5 Conclusão	106
Bibliografia	110

Lista de Figuras

2.1	O expoente f em $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle \approx e^{Nf}$ como função de ϵ para $p = 2$, $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 e $\kappa = 0$. Apenas as regiões em que f é positivo são mostradas.	25
2.2	ϵ_m como função de h para $p = 2$ a 10 (de cima para baixo). A linha pontilhada é $\epsilon_m = -h$	26
2.3	$\partial f / \partial m$ como função de m para três valores de h : $5, 4.2$ e 3.5 (da esquerda para a direita). Para valores intermediários de h , $\partial f / \partial m$ possui três raízes.	26
2.4	ϵ_m como função de κ para $p = 2$ a 10 (da esquerda para a direita).	27
2.5	f_m como função de κ para $p = 2$ a 10 (da esquerda para a direita).	27
2.6	f_m em função de h para p entre 2 e 10 (da esquerda para a direita) e $\kappa = 0$	28
2.7	ϵ_0 em função de h para $p = 2, 3, 4, \infty$ (de baixo para cima) e $\kappa = 0$	30
2.8	Densidade de pares de mínimos g_m como função de q para $p = 7$ e $h = 0, 1, 2, 2.5, 3, 3.3, 3.6, 3.8, 4$ e 4.2 (de cima para baixo).	37
2.9	ϵ_m como função de q para $p = 7$ e $h = 0, 1, 2, 2.5, 3, 3.3, 3.6, 3.8, 4$ e 4.2 (de baixo para cima).	37
2.10	q_m como função de h para $p = 2$ a $p = 8$ (da esquerda para a direita).	38
2.11	q_m como função de ϵ para $p = 2$ e $h = 0, 0.5, 1, 1.5$. Os pontos na figura correspondem a $g = 0$. A região entre os pontos corresponde a g maior que zero.	39
2.12	q_m em função de ϵ para $p = 3$ e $h = 0, 0.27, 0.5, 1$ e 1.5	39
2.13	g como função de q para $p = 3$, $h = 0$ e $\epsilon = -0.73, -0.75, -0.77, -0.79$ e -0.81 (de cima para baixo).	40

2.14	α_0 como função de p	47
2.15	α_1 como função de p	48
3.1	O expoente f como função de ϵ para $p = 2$ e $h = 0, 0.5$ e 1.0 (da esquerda para a direita).	52
3.2	Limite inferior para a densidade de energia do estado fundamental, ϵ_0 , como função de h para $p = 2, 3$ e 4 (de baixo para cima).	52
3.3	q_m como função de ϵ para $p = 2$ e $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 (da esquerda para a direita).	56
3.4	q_m como função de ϵ para $p = 3$ e $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 (da esquerda para a direita).	56
3.5	g como função de q para $p = 2, h = 1.5$ e $ \epsilon = 0, 1.5, 2.0, 2.5, 2.84$ e 3.0 (de cima para baixo).	57
3.6	As regiões em que: a) $g(q = 0)$ é o único máximo; b) há dois máximos e $g(q = 0) > g(q \neq 0)$; c) há dois máximos e $g(q \neq 0) > g(q = 0)$	58
3.7	Descontinuidade em q com o aumento de h para $p = 2, 3$ e 4	58
3.8	Diagrama de fase no plano (T, h) para $p = 2$. A solução de simetria de réplicas é instável dentro da região delimitada pela curva sólida, que coincide com a linha de transição contínua entre os regimes de SR e 1 QSR. A curva tracejada delimita a região dentro da qual a entropia da solução SR é negativa.	63
3.9	Diagrama de fase no plano (T, h) para $p = 3$. A solução de simetria de réplicas é instável dentro da região delimitada pela curva sólida e coincide com a linha de transição contínua no ramo acima do ponto tricrítico localizado em $T_t \approx 0.74$ e $h_t \approx 0.57$. A linha tracejada delimita a região dentro da qual a entropia da solução SR é negativa. A linha ponto-tracejada é a linha de transição descontínua.	64

- 3.10 Diagrama de fase no plano (T, h) para $p = 10$. A solução de simetria de réplicas é instável dentro da região delimitada pela curva sólida e coincide com a linha de transição contínua no ramo acima do ponto tricrítico localizado em $T_t \approx 1.01$ e $h_t \approx 3.07$. A linha tracejada delimita a região dentro da qual a entropia da solução SR é negativa. A linha ponto-tracejada é a linha de transição descontínua. 65
- 3.11 Os parâmetros m (curva sólida), q_1 (curva tracejada), q_0 (curva pontilhada) e q (curva ponto-tracejada) como função da temperatura para $p = 2$ e (a) $h = 0$; (b) $h = 0.5$; (c) $h = 1.0$ e (d) $h = 1.5$ 73
- 3.12 Os parâmetros m (curva sólida), q_1 (curva tracejada), q_0 (curva pontilhada) e q (curva ponto-tracejada) como função da temperatura para $p = 5$ e (a) $h = 0$; (b) $h = 0.5$; (c) $h = 1.0$ e (d) $h = 1.5$ 74
- 3.13 Os parâmetros m (curva sólida), q_1 (curva tracejada), q_0 (curva pontilhada) e q (curva ponto-tracejada) como função da temperatura para $p = 10$ e (a) $h = 0$; (b) $h = 0.5$; (c) $h = 1.5$ e (d) $h = 2.0$ 75
- 3.14 Os parâmetros m (curva sólida), q_1 (curva tracejada), q_0 (curva pontilhada) e q (curva ponto-tracejada) como função da temperatura para $p = \infty$ e (a) $h = 0$; (b) $h = 0.5$; (c) $h = 1.5$ e (d) $h = 2.0$. Lembremos que $q_1 = 1$ neste limite. . . . 76
- 3.15 Parâmetro m na linha de transição contínua para $p = 2, 2.01, 2.1, 10$ e 3 (de baixo para cima). 81
- 3.16 A temperatura do ponto tricrítico como função de p . Apenas os valores de p inteiros têm significado físico. 83
- 3.17 O campo magnético no ponto tricrítico como função de p . Apenas os valores inteiros de p têm significado físico. 83
- 3.18 $(1 - q_t)$ no ponto tricrítico como função de p . Apenas os valores inteiros de p têm significado físico. 84

4.1	Energia do estado fundamental ϵ_0 em função de u para $p = 2, 3, 5, 7$ e 10	95
4.2	O parâmetro de ordem q em função de u para $p = 2, 3, 5$ e 10	95
4.3	Curva de estabilidade para $p = 2, 3, 3.2, 3.5, 4, 5$ e 7	99
4.4	Distribuição acumulada C como função da concentração x para $p = 2$ e $u = 0.4,$ $0.7, 1.0$ e 1.7	102
4.5	Distribuição acumulada C como função da concentração x para $p = 3$ e $u = 0.1,$ $0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8$ e 1.5	103
4.6	Limite inferior para a concentração das espécies x_t como função de u para $p = 3,$ $5, 7, 9, 11$ e 13	104
4.7	Fração de espécies extintas $C(0)$ em função de u para $p = 2, 3, 5, 7$ e 9	105

Lista de Tabelas

2.1	Valores de α_0 e α_1 para $p = 2, 3, 4, 5, 6$ e 10	47
-----	--	----

Resumo

Investigamos analiticamente as propriedades estatísticas dos mínimos locais (estados metaestáveis) de vidros de spin de Ising com interações de p -spins na presença de um campo magnético h . O número médio de mínimos, assim como a sobreposição típica entre pares de mínimos idênticos são calculados para qualquer valor de p . Para $p > 2$ e h pequeno mostramos que a sobreposição típica q_t é uma função descontínua da energia. O tamanho na descontinuidade em q_t cresce com p e decresce com h , indo a zero para valores finitos do campo magnético [1]. Investigamos as correções ao alcance infinito para o caso em que $h = 0$ e encontramos que o número de estados metaestáveis aumenta quando o efeito de conectividade finita é considerado e esse aumento torna-se mais pronunciado à medida que p aumenta [2]. Ainda, estudamos a termodinâmica deste modelo utilizando o método das réplicas. Damos ênfase à análise da transição entre os regimes de simetria de réplicas e o primeiro passo de quebra de simetria de réplicas. Em particular, derivamos condições analíticas para o início da transição contínua, assim como para a localização do ponto tricrítico onde a transição entre os dois regimes torna-se descontínua [3].

Como aplicação de interações de ordem alta em sistemas de spins contínuos, estudamos analiticamente as propriedades estatísticas de um ecossistema composto de N espécies interagindo através de interações Gaussianas aleatórias de ordem $p \geq 2$ e auto-interações determinísticas $u \geq 0$. Para o caso $u \neq 0$, o aumento na ordem das interações faz com que o sistema se torne mais cooperativo. Para $p > 2$ há um limite inferior para a concentração de espécies sobreviventes, prevenindo a existência de espécies raras e, conseqüentemente, aumentando a robustez do ecossistema contra perturbações externas [4].

Abstract

The statistical properties of the local optima (metastable states) of the infinite range Ising spin glass with p -spin interactions in the presence of an external magnetic field h are investigated analytically. The average number of optima as well as the typical overlap between pairs of identical optima are calculated for general p . For $p > 2$ and small h we show that the typical overlap q_t is a discontinuous function of the energy. The size of the jump in q_t increases with p and decreases with h , vanishing at finite values of the magnetic field [1]. We study the corrections to the infinite range model for $h = 0$ and find that the number of local optima increases as the effect of the finite connectivity is considered, and that this increase becomes more pronounced for large p [2]. Furthermore, we study analytically the thermodynamics of this model using the replica method, giving emphasis to the analysis of the transition between the replica symmetric and the one-step of replica symmetry breaking regimes. In particular, we derive analytical conditions for the onset of the continuous transition, as well as for the location of the tricritical point at which the transition between those two regimes becomes discontinuous [3].

As an application of high-order interactions in systems of continuous spins, we study the statistical properties of an ecosystem composed of N species interacting via random Gaussian interactions of order $p \geq 2$, and deterministic self-interactions $u \geq 0$. For nonzero u the increase of the order of the interactions makes the system more cooperative. We find that for $p > 2$ there is a threshold value which gives a lower bound to the concentration of the surviving species, preventing then the existence of rare species and, consequently, increasing the robustness of the ecosystem to external perturbations [4].

Capítulo 1

Introdução

No processo evolutivo de organismos replicadores assexuados a geração de diversidade é obtida através de mutações [5, 6]. Estas podem se dar, por exemplo, através de substituição, inserção ou retirada de um nucleotídeo em seqüências de DNA ou RNA que constituem o genoma. Cada genótipo possui um certo número de genótipos que diferem por 1-mutação, ou seja, aqueles que são acessíveis através da mutação de um nucleotídeo no genótipo inicial. Assim, pode-se definir um espaço de genótipos, onde cada um deles é representado por um ponto nesse espaço e têm como vizinhos mais próximos os pontos representando os vizinhos por 1-mutação. A cada genótipo estão associados certos atributos que compõem o fenótipo, e a cada fenótipo está associada uma adaptação. A distribuição dessas adaptações no espaço de genótipos é chamada de relevo de adaptação ou simplesmente função adaptação. Esses conceitos básicos são devidos a Sewall Wright [7, 8] que trouxe também valiosas contribuições à genética de populações, como o clássico modelo de Wright-Fischer [9].

Cada genótipo possui um grande número de vizinhos que podem ter valores maiores ou menores de adaptação. A evolução adaptativa em sua forma mais simples pode ser vista como um passeio direcionado no espaço de genótipos via vizinhos mais adaptados até que um máximo local ou global seja alcançado. Portanto, algumas propriedades da função adaptação tais como o número de máximos locais e globais, e a distância média

entre esses máximos podem ter conseqüências importantes sobre a evolução dos organismos.

A fim de verificar essas idéias, Kauffman [5, 6, 10, 11, 12, 13] introduziu uma família de funções adaptação denominada de modelo NK. Neste modelo, N representa o número de partes de um sistema como, por exemplo, o número de genes que constituem um genótipo. Cada uma dessas partes dá uma contribuição à função adaptação, que depende dela e de outras K partes do sistema. Essas dependências são chamadas de interações epistáticas. Portanto, K descreve o grau de interligação do sistema. À medida em que esses parâmetros são alterados, o modelo gera tanto funções com apenas um máximo, como funções com vários máximos descorrelacionados. Em particular, no caso limite em que K é igual a zero não há interações epistáticas e a função adaptação possui apenas um genótipo como máximo global. O relevo de adaptação é então altamente correlacionado, isto é, os pontos que são vizinhos neste espaço possuem valores de adaptação muito próximos. Já no limite em que K é igual a $N - 1$, cada gene interage epistaticamente com todos os outros. Neste caso, a alteração de um único gene afeta cada um dos outros $N - 1$ genes. Portanto, os valores de adaptação de vizinhos próximos são totalmente descorrelacionados. Assim, à medida que K cresce de 0 até $N - 1$ a rugosidade do relevo de adaptação também cresce. Uma característica interessante desse modelo é que quando N cresce, a adaptação dos ótimos locais tende ao valor médio de adaptação do sistema, fenômeno este denominado de catástrofe da complexidade.

Certos aspectos do modelo NK, como o enorme número de ótimos locais, nos lembram dos modelos de vidros de spin da Física Estatística de sistemas desordenados. Vidros de spin são materiais magnéticos em que a interação entre os spins é algumas vezes ferromagnética e outras antiferromagnética, dependendo da distância entre eles. Esta característica gera o efeito de frustração, originando muitos mínimos locais separados por altas barreiras de energia. Num vidro de spin de Ising com N spins há 2^N configurações

diferentes, cada qual com N vizinhos por uma única inversão de spin. Dessa forma, pode-se interpretar uma configuração de spins como o genótipo de um organismo, onde os sítios são os genes e o estado do spin em cada sítio é o alelo associado àquele gene. Uma interpretação alternativa, mais relevante para a biologia molecular, é considerar a configuração de Ising como uma seqüência de nucleotídeos que evolui de uma única seqüência ancestral e difere desta através de mutações em alguns sítios. Por exemplo, $s_i = 1$ indica que o nucleotídeo na posição i é igual ao do seu ancestral enquanto que $s_i = -1$ indica que ocorreu uma mutação naquele sítio e, portanto, o nucleotídeo naquela posição difere de seu correspondente no ancestral. Essa interpretação devida a Kimura, conhecida como modelo de infinitos sítios, é bastante popular em biologia molecular [14].

No contexto de vidros de spin, a introdução das interações epistáticas surge muito mais naturalmente, conforme observado por Amitrano et al [15]. De fato, as interações de multispins são o análogo das interações epistáticas em genética. O paradigma de sistema desordenado com interações de multispins é o modelo proposto por Derrida [16, 17, 18], cujo Hamiltoniano é

$$\mathcal{H}_p(s) = - \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 i_2 \dots i_p} s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_p} - h \sum_i s_i, \quad s_i = \pm 1, \quad (1.1)$$

onde os acoplamentos $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ são variáveis gaussianas aleatórias estatisticamente independentes com média nula e variância $p!/2N^{p-1}$, e h é o campo magnético externo. Aqui, o parâmetro p controla a rugosidade do relevo de energia ou de adaptação (note que a função adaptação deve ser definida como $-\mathcal{H}_p$, de forma que os mínimos de energia correspondem aos máximos de adaptação): para $p = 1$ o relevo de \mathcal{H}_p possui apenas um mínimo; $p = 2$ e $h = 0$ corresponde ao clássico modelo de Sherrington & Kirkpatrick (SK) [19, 20]; e $p \rightarrow \infty$ e $h = 0$ resulta no célebre modelo de energias aleatórias de Derrida [16, 17, 18], onde há um grande número (da ordem de 2^N) de mínimos descorrelacionados.

Para p qualquer, pouco é conhecido sobre a estatística do relevo de energia gerado pela função (1.1). Um resultado que deve ser mencionado é que, para $h = 0$, a correlação entre valores de \mathcal{H}_p para configurações diferentes é dada por [15, 21]

$$\langle \mathcal{H}_p(s^a) \mathcal{H}_p(s^b) \rangle = [q(s^a, s^b)]^p, \quad (1.2)$$

onde

$$q(s^a, s^b) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^a s_i^b \quad (1.3)$$

é a sobreposição entre dois estados s^a e s^b e a média $\langle \dots \rangle$ é tomada sobre a distribuição de probabilidade dos acoplamentos. Assim, as correlações entre os níveis de energia se anulam para $p \rightarrow \infty$.

Os primeiros trabalhos envolvendo o cálculo do número de estados meta-estáveis em vidros de spin foram realizados por Tanaka e Edwards [22], Bray e Moore [23, 24] e De Dominicis et al [25]. Eles realizaram o cálculo do número médio de estados meta-estáveis com densidade de energia ϵ , denotado por $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle$, para $p = 2$ e $h = 0$. Mais tarde, Dean [26] generalizou este cálculo para campos magnéticos não-nulos. Rieger [27] realizou este cálculo para p geral e $h = 0$, enquanto que Stadler e Krakhofer [28] realizaram simulações numéricas para esta mesma situação. A notação $\langle \dots \rangle$ indica uma média sobre os acoplamentos. Este procedimento é conhecido como aproximação ‘annealed’. Como $\mathcal{N}(\epsilon)$ cresce exponencialmente com N , devemos tomar a média de $\ln \mathcal{N}(\epsilon)$, pois esta quantidade é extensiva (isto é, cresce linearmente com N) e, conseqüentemente, auto-mediante. Roberts [29] calculou $\langle \ln \mathcal{N}(\epsilon) \rangle$ para $p = 2$ e campos magnéticos não-nulos utilizando o formalismo de réplicas simétricas.

Outra grandeza de interesse é o número de pares de estados com densidades de energia ϵ^a e ϵ^b e sobreposição q , denotado por $\mathcal{M}(\epsilon^{ab}, q)$, que pode ser utilizada para

calcular, por exemplo, a sobreposição típica entre mínimos locais. Gross e Mezard [30] calcularam $\langle \mathcal{M}(\epsilon^{ab}, q) \rangle$ para $p \rightarrow \infty$, obtendo $\langle \mathcal{M}(\epsilon^{ab}, q) \rangle = \langle \mathcal{N}(\epsilon^a) \rangle \langle \mathcal{N}(\epsilon^b) \rangle$ para $q < 1$, ou seja, os estados meta-estáveis são descorrelacionados, e $\langle \mathcal{M}(\epsilon^{ab}, q) \rangle = \langle \mathcal{N}(\epsilon^a = \epsilon^b) \rangle$ para $q = 1$. Ainda, realizando um estudo sobre os estados meta-estáveis para $p = 2$ e $h = 0$, Nemoto [31] e Vertechi e Virasoro [32] encontraram como resultado que o número de barreiras de energia entre os estados meta-estáveis cresce com a distância de Hamming, dada por $(1 - q)/2$, entre esses estados.

No capítulo 2, vamos estudar as propriedades estatísticas dos estados meta-estáveis de vidros de spin de Ising com interações de p-spins de alcance infinito na presença de um campo magnético externo h [1]. Além dos cálculos de $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle$ e $\langle \mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle$ vamos investigar as correções ao alcance infinito para o caso em que $h = 0$ [2]. Os resultados obtidos mostram que a introdução do campo magnético leva a mudanças qualitativas na estatística dos mínimos locais, como o aparecimento de descontinuidades nas grandezas que caracterizam os mínimos locais típicos. Esses resultados motivam-nos a estudar a termodinâmica do modelo de multispins com maior profundidade.

A termodinâmica do modelo de vidros de spin de Ising com interações de p-spins foi investigada dentro do formalismo de réplicas. O modelo SK [19, 20] ($p = 2$ e $h = 0$) e o modelo das energias aleatórias [16, 17, 18] ($p \rightarrow \infty$ e $h = 0$) são hoje bem entendidos. Para $p = 2$ e $h = 0$ a função parâmetro de ordem $q(x)$, onde $x = T/T_c$, tende a zero continuamente quando a temperatura se aproxima do valor crítico $T_c(p = 2) = 1$, no qual se dá a transição entre as fases de alta temperatura (desordenada) e vidro de spin [33, 34, 35, 36]. Para $p \rightarrow \infty$ e $h = 0$ há uma temperatura crítica $T_c(p = \infty) = 1/2\sqrt{\ln 2}$ na qual o sistema congela: $q(x)$ é uma função degrau com valores 0 e 1 [16, 30]. A adição do campo magnético externo h não modifica qualitativamente esses resultados. Para o modelo SK, a temperatura crítica decresce monotonicamente quando h cresce, enquanto que a transição permanece contínua. Para o modelo de energias aleatórias a temperatura

crítica cresce quando h cresce, e a descontinuidade na função degrau $q(x)$ decresce com o aumento de h , desaparecendo no limite $h \rightarrow \infty$ [16, 30]. O caso $p > 2$ é mais complicado e a termodinâmica para o modelo de p-spin foi investigada apenas para $h = 0$ [37, 38]. Neste caso há uma transição da fase desordenada (paramagnética) para uma fase parcialmente congelada (vidro de spin I) caracterizada por uma função degrau $q(x)$ com valores 0 e $q_1 < 1$. Reduzindo a temperatura, uma segunda transição ocorre, conduzindo a uma fase descrita por uma função parâmetro de ordem contínua (vidro de spin II) [37, 38].

No capítulo 3, vamos utilizar o método de réplicas para estender estudos anteriores da termodinâmica do modelo de vidros de spin de Ising com interações de p-spins para tratar o caso em que o campo magnético h é não nulo. Vamos nos concentrar nos efeitos de h sobre a transição entre os regimes de simetria de réplicas e do primeiro passo de quebra de simetria de réplicas. Em particular, mostraremos que, para $p > 2$, a transição descontínua relatada em trabalhos anteriores torna-se contínua para h maior que um certo valor crítico h_t . Determinaremos, também, a localização da linha de transição contínua, assim como o ponto tricrítico onde essa transição torna-se descontínua.

Embora tenha sido apresentada uma motivação biológica para os estudos desenvolvidos nos capítulos 2 e 3, os resultados obtidos são de interesse apenas dentro do contexto da mecânica estatística de sistemas desordenados.

Na segunda parte desta tese, vamos continuar a utilizar interações de multispins, mas, agora, para estudar um modelo de co-evolução de espécies. Em um sistema ecológico onde algumas espécies evoluem, as interações podem ocorrer por diferentes formas: competição, simbiose ou parasitismo. Alguns argumentos em favor da biodiversidade supõem a existência de relações complexas entre espécies que aparentemente não se relacionam diretamente, de modo que a intensidade da interação entre um certo par de espécies dependeria das concentrações de outras espécies no ecossistema [39]. Devido à falta de modelos matemáticos, ainda não está claro se interações de ordem mais alta entre as

espécies trazem alguma vantagem ao ecossistema.

O modelo que estudaremos no capítulo 4 é uma generalização do modelo de replicadores introduzido por Diederich & Oppen [40, 41], que considera apenas interações entre pares de espécies. Este modelo pode ser expresso em termos do seguinte sistema de equações diferenciais não-lineares

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = x_i(f_i - \bar{f}), \quad i = 1, \dots, N \quad (1.4)$$

onde f_i é o valor da adaptação ('fitness') da espécie i , x_i é a concentração de indivíduos da espécie i e \bar{f} é a adaptação média da população, $\bar{f} = \sum_i x_i f_i$. O vínculo $\sum_i x_i = N$ é responsável pela competição entre as espécies. Neste modelo, as adaptações f_i são definidas por derivadas de um funcional adaptação $f(x_1, x_2, \dots, x_N)$, isto é, $f_i = \partial f / \partial x_i$ que deve ser maximizado no equilíbrio.

No modelo de replicadores de Diederich & Oppen, o funcional adaptação introduz interações aleatórias entre cada par de espécies, sendo dado por

$$f = -H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} x_i c_{ij} x_j, \quad (1.5)$$

onde os parâmetros c_{ij} ($i \neq j$) são variáveis aleatórias estatisticamente independentes definidas por uma distribuição de probabilidade Gaussiana de média nula e variância $1/N$. Por outro lado, as auto-interações c_{ii} não são aleatórias, sendo dadas por $c_{ii} = u$ para todo i . O parâmetro u tem o objetivo de limitar o crescimento e a supremacia de uma única espécie, atuando então como uma pressão cooperativa.

No capítulo 4, vamos apresentar um estudo analítico do modelo de replicadores com interações de p -espécies utilizando o formalismo de réplicas. Mostraremos que o efeito das interações de alta ordem no estado estacionário é eliminar espécies raras do ecossistema e tornar o sistema mais cooperativo no sentido de reduzir o número de espécies extintas.

Finalmente, no capítulo 5, vamos apresentar nossas conclusões e discutir possíveis extensões dos problemas abordados nesta tese.

Capítulo 2

Estados Meta-estáveis

A compreensão de que muitas das propriedades peculiares observadas nos sistemas desordenados conhecidos como vidros de spin deve-se à existência de frustração e, conseqüentemente, ao aparecimento de um número muito grande de estados meta-estáveis, motivou o estudo analítico das propriedades estatísticas desses estados, tais como o número desses estados, sua energia típica (mais provável) e a distância média entre eles. (No que segue, dizemos que um estado é meta-estável ou mínimo local se a energia aumenta com a inversão de qualquer um dos spins). De fato, a análise dos estados meta-estáveis de modelos de vidros de spin passou a ser quase tão importante quanto o estudo termodinâmico tradicional. O objetivo deste capítulo é realizar essa análise para o modelo de vidro de spin de Ising com interações de p -spins na presença de um campo magnético externo. Veremos que a introdução desse campo leva a mudanças qualitativas na distribuição dos estados meta-estáveis. Na seção 2.1, estudamos como o número médio de mínimos locais depende da densidade de energia desses mínimos. Na seção 2.2, vamos nos concentrar no número de pares de mínimos locais com uma dada sobreposição. Nessas seções o modelo estudado apresenta interações de alcance infinito e o campo magnético é não-nulo. Na seção final, investigamos as correções ao alcance infinito para o caso mais simples no qual não há campo magnético presente.

2.1 Meta-estabilidade em modelos com interações de alcance infinito

Consideremos o Hamiltoniano de um vidro de spin de Ising com interações de p-spins de alcance infinito

$$H_p(s) = - \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 i_2 \dots i_p} s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_p} - h \sum_i s_i, \quad (2.1)$$

onde os acoplamentos $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ são variáveis aleatórias estatisticamente independentes distribuídos de acordo com a distribuição gaussiana

$$P(J_{i_1 i_2 \dots i_p}) = \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p!}} \exp \left[-\frac{(J_{i_1 i_2 \dots i_p})^2 N^{p-1}}{p!} \right] \quad (2.2)$$

e h é o campo magnético. A mudança de energia causada pela inversão ('flip') do spin s_i é dada por $\partial H_p = 2\Delta_i$ onde

$$\Delta_i = \sum_{i_2 < \dots < i_p} J_{i i_2 \dots i_p} s_{i_2} \dots s_{i_p} + h s_i \quad (2.3)$$

é denominado de estabilidade do sítio ou locus s_i . Portanto, a condição para que uma dada configuração tenha estabilidade maior que κ é que $\Delta_i > \kappa$ para todo i . Em particular, um estado é dito meta-estável se $\Delta_i > 0$ para todo i , ou seja, a inversão de qualquer um dos N spins sempre leva a um estado de maior energia.

Seja a quantidade Y_s definida como

$$Y_s = \begin{cases} 1 & : \text{ se } \epsilon N = H_p(s) \text{ e } \Delta_i > \kappa \quad \forall i \\ 0 & : \text{ outro caso.} \end{cases} \quad (2.4)$$

O número de estados com densidade de energia ϵ e estabilidade κ é dado por $\mathcal{N}(\epsilon, \kappa) = \text{Tr}_s Y_s$, onde Tr_s denota a soma sobre os 2^N estados do sistema. O n-ésimo momento de $\mathcal{N}(\epsilon, \kappa)$ é dado por

$$\langle [\mathcal{N}(\epsilon, \kappa)]^n \rangle = \left\langle \prod_{a=1}^n Tr_{s^a} Y_{s^a} \right\rangle = \left\langle \prod_{a=1}^n Tr_{s^a} \delta[\epsilon N - H_p(s^a)] \prod_i \Theta(\Delta_i^a - \kappa) \right\rangle, \quad (2.5)$$

onde $\Theta(x) = 1$ se $x > 0$ e 0 se $x < 0$. Estaremos interessados principalmente no primeiro momento ($n = 1$)

$$\langle \mathcal{N}(\epsilon, \kappa) \rangle = \langle Tr_s \delta[\epsilon N - H_p(s)] \prod_i \Theta(\Delta_i - \kappa) \rangle. \quad (2.6)$$

Para iniciar os cálculos, vamos escrever primeiramente a energia H_p em função das estabilidades Δ_i :

$$\sum_i \Delta_i = p \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} + h \sum_i s_i = -p \left(H_p(s) + h \sum_i s_i \right) + h \sum_i s_i, \quad (2.7)$$

o que resulta em

$$H_p(s) = -\frac{1}{p} \sum_i [\Delta_i + h(p-1)s_i]. \quad (2.8)$$

Voltando à equação (2.6) e utilizando a representação integral da função delta obtemos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N}(\epsilon, \kappa) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}}{2\pi} \exp(iN\epsilon\tilde{\epsilon}) \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Delta_i d\tilde{\Delta}_i}{2\pi} \Theta(\Delta_i - \kappa) \exp(i\Delta_i \tilde{\Delta}_i) \\ &\quad \times Tr_s \exp \left[-ih \sum_i \tilde{\Delta}_i s_i + \frac{i\tilde{\epsilon}}{p} \sum_i (\Delta_i + h(p-1)s_i) \right] \\ &\quad \times \left\langle \exp \left(-i \sum_i \tilde{\Delta}_i \sum_{i_2 < \dots < i_p} J_{i i_2 \dots i_p} s_{i_2} \dots s_{i_p} \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Para efetuar a média sobre os acoplamentos utilizamos a distribuição gaussiana (2.2) e no limite $N \rightarrow \infty$, encontramos

$$\langle \dots \rangle = \exp \left\{ -\frac{p!}{4N^{p-1}} \sum_{i_1 < \dots < i_p} [\tilde{\Delta}_{i_1} + \dots + \tilde{\Delta}_{i_p}]^2 \right\} \quad (2.10)$$

que, após algumas manipulações, é reescrito como

$$\langle \dots \rangle = \exp \left\{ -\frac{p}{4} \sum_i \tilde{\Delta}_i^2 - \frac{p(p-1)}{4N} \left(\sum_i \tilde{\Delta}_i \right)^2 \right\}. \quad (2.11)$$

Substituindo este resultado na expressão (2.9) obtemos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N}(\epsilon, \kappa) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}}{2\pi} \exp(iN\tilde{\epsilon}\epsilon) \\ &\times \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Delta_i d\tilde{\Delta}_i}{2\pi} \Theta(\Delta_i - \kappa) \exp \left\{ i\Delta_i \tilde{\Delta}_i + \frac{i\Delta_i \tilde{\epsilon}}{p} - \frac{p\tilde{\Delta}_i^2}{4} \right\} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{p(p-1)}{4N} \left(\sum_i \tilde{\Delta}_i \right)^2 \right\} \\ &\times \text{Tr}_s \exp \left\{ i \sum_i \left[\frac{\tilde{\epsilon}(p-1)h}{p} - \tilde{\Delta}_i h \right] s_i \right\}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

O traço sobre os spins pode agora ser facilmente efetuado. Introduzindo a variável auxiliar $\mu = \frac{1}{N} \sum_i \tilde{\Delta}_i$ para desacoplar os sítios obtemos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N}(\epsilon, \kappa) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu d\tilde{\mu}}{2\pi/N} \exp \left(iN\tilde{\mu}\mu - \frac{Np(p-1)m^2}{4} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}}{2\pi} \exp(iN\tilde{\epsilon}\epsilon) \\ &\times \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\Delta} d\Delta}{2\pi} \Theta(\Delta - \kappa) \exp \left(\frac{i\tilde{\epsilon}\Delta}{p} + i\tilde{\Delta}\Delta - \frac{p\tilde{\Delta}^2}{4} - i\tilde{\mu}\tilde{\Delta} \right) \right. \\ &\times \left. \left[\exp \left(\frac{i\tilde{\epsilon}(p-1)h}{p} - ih\tilde{\Delta} \right) + \exp \left(-\frac{i\tilde{\epsilon}(p-1)h}{p} + ih\tilde{\Delta} \right) \right] \right\}^N. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Integrando em μ e $\tilde{\Delta}$ e fazendo $i\tilde{\epsilon} = \hat{\epsilon}$, a equação anterior resulta em

$$\langle \mathcal{N}(\epsilon, \kappa) \rangle = C \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\mu} \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{\epsilon} \exp \left\{ N \left[-\frac{\tilde{\mu}^2}{p(p-1)} + \hat{\epsilon}\epsilon + \log G \right] \right\}, \quad (2.14)$$

onde C é uma constante da ordem de $N^{1/2}$ e

$$\begin{aligned}
G &= \frac{1}{\sqrt{\pi p}} \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \Theta(\Delta - \kappa) \exp\left(\frac{\hat{\epsilon}\Delta}{p}\right) \\
&\times \left[\exp\left(\frac{\hat{\epsilon}(p-1)h}{p} - \frac{(\tilde{\mu} - \Delta + h)^2}{p}\right) \right. \\
&\left. + \exp\left(-\frac{\hat{\epsilon}(p-1)h}{p} - \frac{(\tilde{\mu} - \Delta - h)^2}{p}\right) \right]. \quad (2.15)
\end{aligned}$$

Como N é grande, a integral em (2.14) pode ser efetuada pelo método de ponto de sela:

$$I(N) = \int_C e^{NF(t)} dt = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{-2\pi}{NF''(t_0)}} e^{NF(t_0)}, \quad (2.16)$$

onde t_0 é determinado pela equação $F'(t_0) = 0$. O resultado final é

$$\begin{aligned}
f &= \frac{1}{N} \ln \langle \mathcal{N}(\epsilon, \kappa) \rangle \\
&= -\frac{M^2}{p(p-1)} + \frac{M\hat{\epsilon}}{p-1} - \frac{\hat{\epsilon}^2}{4(p-1)} + \hat{\epsilon}\epsilon \\
&\quad + \ln \left[e^{\hat{\epsilon}h} \operatorname{erfc}\left(-\frac{M+h-\kappa}{\sqrt{p}}\right) + e^{-\hat{\epsilon}h} \operatorname{erfc}\left(-\frac{M-h-\kappa}{\sqrt{p}}\right) \right] - \ln 2, \quad (2.17)
\end{aligned}$$

onde $M = \tilde{\mu} + \hat{\epsilon}/2$. Fazendo a mudança de variáveis $M = \kappa + m$ escrevemos finalmente

$$\begin{aligned}
f &= -\frac{m^2}{p(p-1)} + \frac{m\hat{\epsilon}}{p-1} - \frac{\hat{\epsilon}^2}{4(p-1)} + \hat{\epsilon}\epsilon - \frac{\kappa^2}{p(p-1)} - \frac{2m\kappa}{p(p-1)} + \frac{\kappa\hat{\epsilon}}{p-1} \\
&\quad + \ln \left[e^{\hat{\epsilon}h} \operatorname{erfc}\left(-\frac{m+h}{\sqrt{p}}\right) + e^{-\hat{\epsilon}h} \operatorname{erfc}\left(-\frac{m-h}{\sqrt{p}}\right) \right] - \ln 2. \quad (2.18)
\end{aligned}$$

De forma a obter os valores dos parâmetros de ponto de sela m e $\hat{\epsilon}$, devemos resolver as equações $\partial f/\partial m = 0$ e $\partial f/\partial \hat{\epsilon} = 0$ simultaneamente. Isso resulta no seguinte par de equações transcendentais acopladas

$$\frac{\kappa + m}{p-1} - \frac{\hat{\epsilon}}{2(p-1)} + \epsilon$$

$$+h \left\{ \frac{\exp(\hat{\epsilon}h)\operatorname{erfc}\left[-\frac{1}{\sqrt{p}}(m+h)\right] - \exp(-\hat{\epsilon}h)\operatorname{erfc}\left[-\frac{1}{\sqrt{p}}(m-h)\right]}{\exp(\hat{\epsilon}h)\operatorname{erfc}\left[-\frac{1}{\sqrt{p}}(m+h)\right] + \exp(-\hat{\epsilon}h)\operatorname{erfc}\left[-\frac{1}{\sqrt{p}}(m-h)\right]} \right\} = 0 \quad (2.19)$$

e

$$\left(-\frac{2(m+\kappa)}{p(p-1)} + \frac{\hat{\epsilon}}{p-1} \right) \frac{\sqrt{\pi p}}{2} + \frac{\exp\left[\hat{\epsilon}h - \left[-\frac{1}{\sqrt{p}}(m+h)\right]^2\right] + \exp\left[-\hat{\epsilon}h - \left[-\frac{1}{\sqrt{p}}(m-h)\right]^2\right]}{\exp(\hat{\epsilon}h)\operatorname{erfc}\left[-\frac{1}{\sqrt{p}}(m+h)\right] + \exp(-\hat{\epsilon}h)\operatorname{erfc}\left[-\frac{1}{\sqrt{p}}(m-h)\right]} = 0. \quad (2.20)$$

Na prática, vamos considerar $\hat{\epsilon}$ como um parâmetro externo e ϵ como uma variável que pode ser facilmente obtida através da equação (2.19). Assim o problema reduz-se à solução da equação (2.20) para m .

O comportamento de f como função de ϵ para $p = 2$, $\kappa = 0$ e $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 é mostrado na figura 2.1. Observamos um decréscimo no número de mínimos locais com o aumento do campo externo, indicando que o relevo de energia torna-se menos rugoso. O comportamento para $p > 2$ é similar ao anterior, com exceção de que os picos são mais altos e levemente mais largos, ou seja, com o aumento de p o relevo de energia torna-se mais rugoso. Apresentamos, na figura, apenas as regiões de energia com f positivo, pois pode-se mostrar facilmente que não existem mínimos locais nas regiões em que f é negativo, isto é, $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle \rightarrow 0$. De fato, omitindo o argumento de \mathcal{N} para simplificar a notação, temos

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \sum_{n=1}^{2^n} n \operatorname{Prob}(\mathcal{N} = n) \geq \sum_{n=1}^{2^n} \operatorname{Prob}(\mathcal{N} = n) = 1 - \operatorname{Prob}(\mathcal{N} = 0), \quad (2.21)$$

ou seja,

$$\operatorname{Prob}(\mathcal{N} = 0) \geq 1 - \langle \mathcal{N} \rangle. \quad (2.22)$$

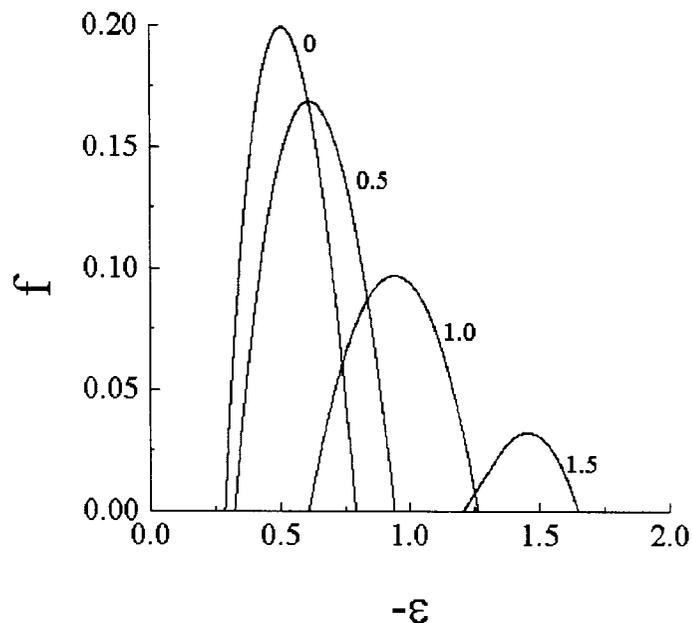


Figura 2.1: O expoente f em $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle \approx e^{Nf}$ como função de ϵ para $p = 2$, $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 e $\kappa = 0$. Apenas as regiões em que f é positivo são mostradas.

Daí, se $\langle \mathcal{N} \rangle = e^{-N|f|} \rightarrow 0$ temos $\text{Prob}(\mathcal{N} = 0) = 1$ e portanto não existem mínimos locais nas regiões do espaço de parâmetros em que $\langle \mathcal{N} \rangle < 1$.

Maximizando f com respeito a ϵ , encontramos que o seu valor máximo, f_m , é obtido tomando-se $\hat{\epsilon} = 0$. A densidade de energia correspondente a este valor é denotada por ϵ_m . A figura 2.2 mostra ϵ_m como função de h para valores de p entre 2 e 10. A densidade de energia ϵ_m aumenta com p e diminui com o acréscimo em h . Podemos observar uma descontinuidade em ϵ_m para $p \geq 7$. Isto se dá devido ao aparecimento de três raízes na equação (2.20) para valores intermediários de h . Para valores pequenos e grandes de h , esta equação possui apenas uma única raiz (ver figura 2.3). Naturalmente, no caso de haver mais de um ponto de sela escolhemos aquele que maximiza o expoente f . Para $p \rightarrow \infty$ e valores finitos de h , o valor de ϵ_m tende a zero, o que equivale ao valor esperado da energia de um estado escolhido aleatoriamente, revelando assim o fenômeno conhecido por catástrofe da complexidade [5]. Na figuras 2.4 e 2.5, apresentamos ϵ_m e f_m

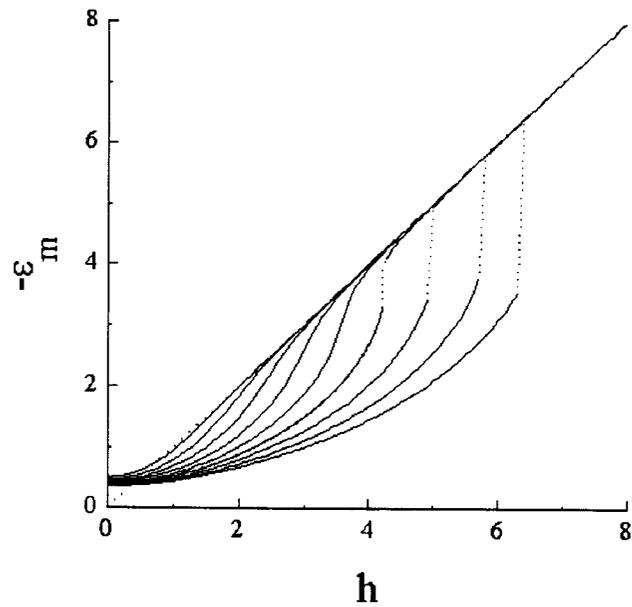


Figura 2.2: ϵ_m como função de h para $p = 2$ a 10 (de cima para baixo). A linha pontilhada é $\epsilon_m = -h$.

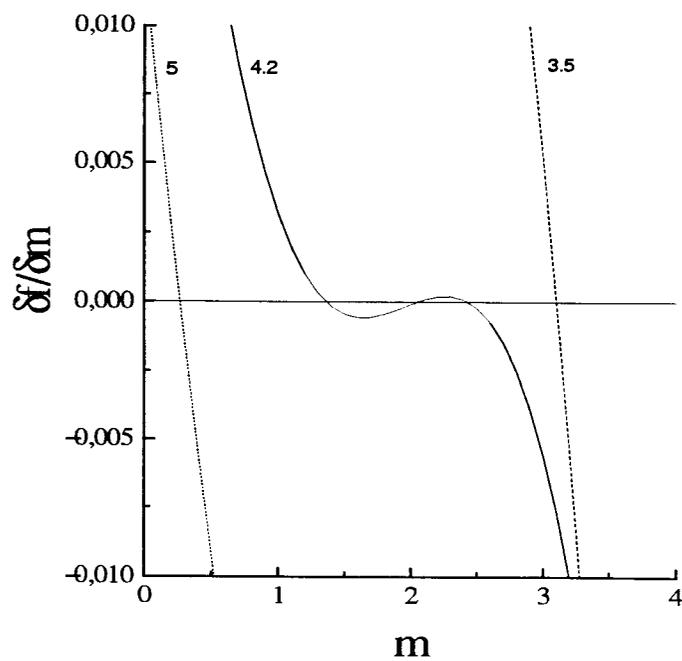


Figura 2.3: $\partial f/\partial m$ como função de m para três valores de h : 5, 4.2 e 3.5 (da esquerda para a direita). Para valores intermediários de h , $\partial f/\partial m$ possui três raízes.

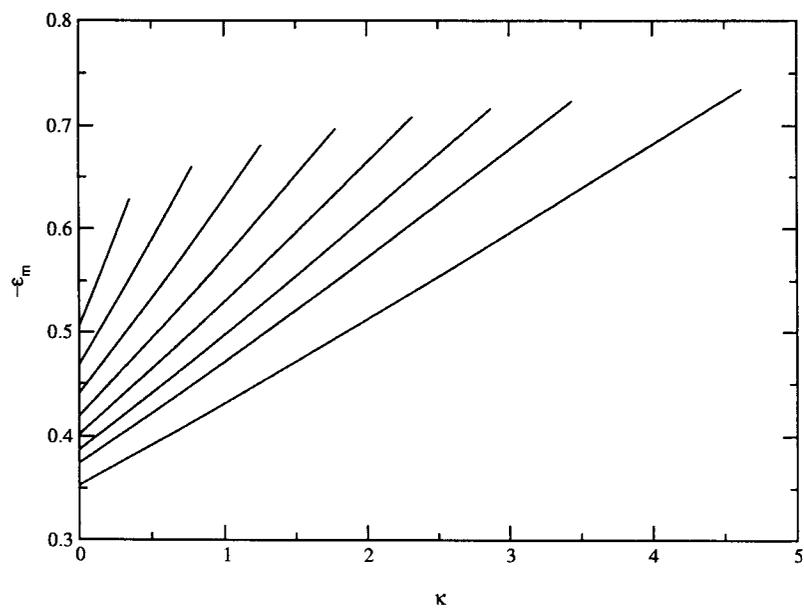


Figura 2.4: ϵ_m como função de κ para $p = 2$ a 10 (da esquerda para a direita).

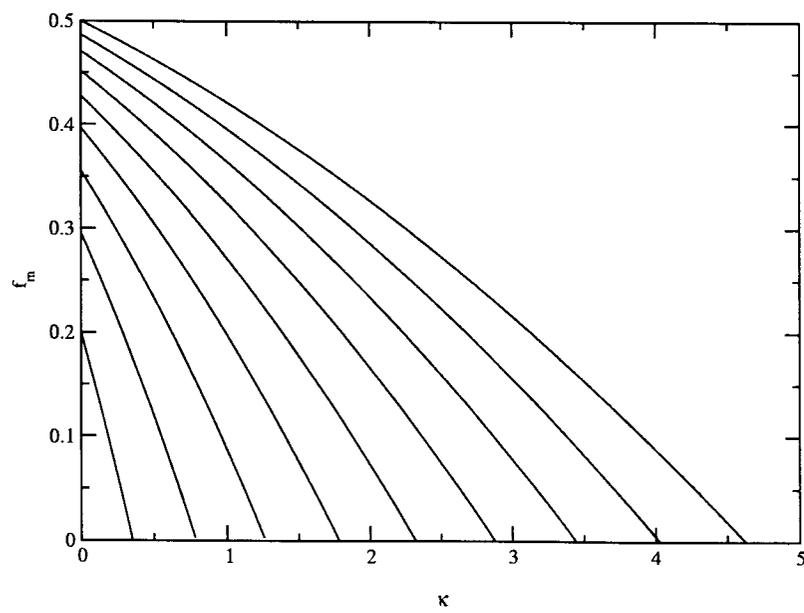


Figura 2.5: f_m como função de κ para $p = 2$ a 10 (da esquerda para a direita).

como funções de κ para $h = 0$ e valores de p entre 2 e 10, respectivamente. Podemos observar que com o aumento de κ o valor de ϵ_m é diminuído, assim como o número de estados com estabilidade maior que κ , ou seja, o relevo de energia torna-se mais suave. Na figura 2.6, temos f_m em função de h para valores de p entre 2 e 10 e $\kappa = 0$. Podemos ver claramente, nesta figura, que quando o valor de p é aumentado, o número de mínimos locais também cresce, ou seja, o relevo de energia torna-se mais rugoso. Entretanto, este número é reduzido com o aumento de h : para campos muito grandes temos apenas um mínimo (global) dado por $s_i = 1$ para todo i .

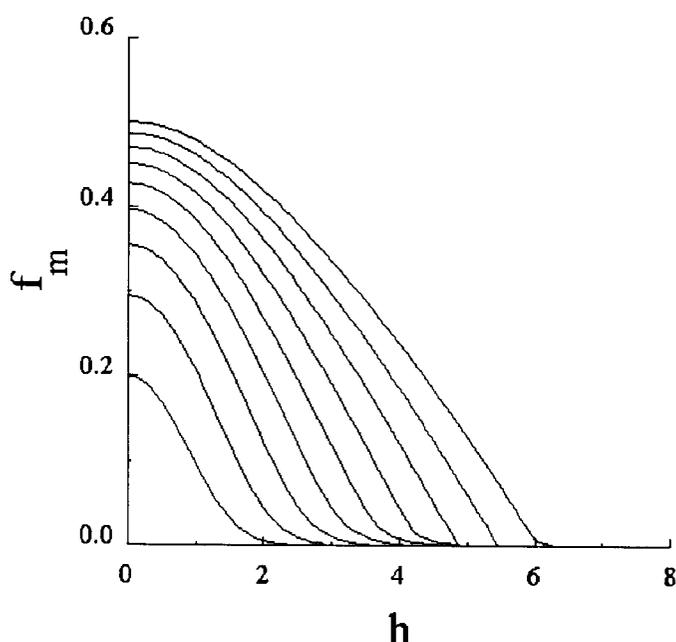


Figura 2.6: f_m em função de h para p entre 2 e 10 (da esquerda para a direita) e $\kappa = 0$.

Uma estimativa (limite inferior) para a densidade de energia do estado fundamental ϵ_0 é obtida calculando-se o menor valor de ϵ para o qual f se anula. Para esclarecer esse procedimento devemos notar que a grandeza média que possui significado físico é $\langle \ln \mathcal{N}(\epsilon) \rangle$, pois é extensiva (ou seja, escala linearmente com N) e portanto auto-mediante

no limite termodinâmico. Por auto-mediante entendemos que a variância de $\ln \mathcal{N}(\epsilon)$ também escala com N de modo que a razão entre o desvio em relação à média (raiz quadrada da variância) e a média anula-se no limite $N \rightarrow \infty$. Daí, podemos escrever $\frac{1}{N} \langle \ln \mathcal{N}(\epsilon) \rangle \approx \frac{1}{N} \ln \mathcal{N}(\epsilon) + O(N^{-1/2})$. Fica claro então que podemos definir a densidade de energia do estado fundamental ϵ_{ef} como a densidade de energia tal que

$$\langle \ln \mathcal{N}(\epsilon) \rangle = \begin{cases} \rightarrow -\infty & : \text{ se } \epsilon < \epsilon_{ef} \\ \geq 0 & : \text{ se } \epsilon \geq \epsilon_{ef}. \end{cases} \quad (2.23)$$

Utilizando a desigualdade de Jensen (ver prova na pg. 153 da ref. [42])

$$\langle \ln \mathcal{N}(\epsilon) \rangle \leq \ln \langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle, \quad (2.24)$$

concluimos que se para um dado valor de ϵ , $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle$ for menor que 1 então $\epsilon < \epsilon_{ef}$. Logo, se ϵ_0 é tal que $\langle \mathcal{N}(\epsilon_0) \rangle = 1$, podemos afirmar que $\epsilon_0 \leq \epsilon_{ef}$.

A variação de ϵ_0 com o campo magnético externo h para $\kappa = 0$ e valores de $p = 2, 3, 4$ e ∞ é mostrada na figura 2.7. À medida que p cresce o valor de ϵ_0 diminui, ou seja, surgem estados meta-estáveis com menor energia que aqueles verificados para valores pequenos de p . Os valores de ϵ_0 para $p = 2$ ($\epsilon_0 \approx -0.791$) e $p \rightarrow \infty$ ($\epsilon_0 = -\sqrt{\ln 2} \approx -0.832$) com campo nulo estão de acordo com os obtidos por Bray e Moore [23] e Derrida [16], respectivamente. Como mencionado anteriormente, para campos grandes temos $\epsilon_0 \approx -h$. Observamos também que, contrariamente a ϵ_m , ϵ_0 não tende a zero quando p cresce. Logo, a catástrofe da complexidade só atinge mínimos locais típicos. Ainda, notemos que a dependência de ϵ_0 com h não apresenta as descontinuidades observadas em ϵ_m (ver figura 2.2).

Concluindo essa seção, devemos enfatizar que o elemento original da análise apresentada é a presença do campo magnético h em modelos com interações de p -spins. Mostramos que a inclusão de h não leva, apenas, a diferenças quantitativas em relação

ao caso de campo nulo [43], mas, também, a diferenças *qualitativas* como o aparecimento de descontinuidades na energia típica dos estados meta-estáveis. Na seção seguinte, vamos aprofundar ainda mais esse estudo, considerando como a similaridade entre mínimos locais é afetada pelo campo externo.

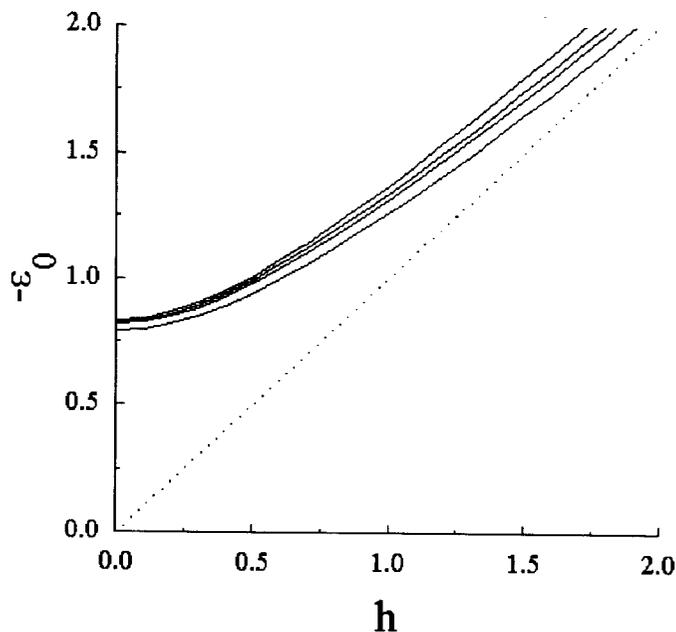


Figura 2.7: ϵ_0 em função de h para $p = 2, 3, 4, \infty$ (de baixo para cima) e $\kappa = 0$.

2.2 Cálculo do número médio de pares de mínimos

Nesta seção, vamos tentar caracterizar a distribuição dos mínimos locais no espaço de configurações através do cálculo do número médio de pares de mínimos locais com uma sobreposição q fixa. Notemos que q está diretamente relacionado com a distância de Hamming d entre as configurações: $d = (1 - q)/2$. Com essa abordagem poderemos, por exemplo, calcular a distância típica entre pares de mínimos locais.

O número de pares de mínimos locais com sobreposição q e densidade de energia ϵ é definido por

$$\mathcal{M}(\epsilon, q, \kappa) = \frac{1}{2} Tr_{s^1} Tr_{s^2} Y_{s^1} Y_{s^2} \delta \left(Nq, \sum_i s_i^1 s_i^2 \right), \quad (2.25)$$

onde $\delta(n, m)$ é a delta de Kronecker. Segundo a equação (2.5), a média sobre $\mathcal{M}(\epsilon, q)$ com $\kappa = 0$ é dada por

$$\langle \mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle = \frac{1}{2} \left\langle Tr_{s^1} Tr_{s^2} \delta \left(Nq, \sum_i s_i^1 s_i^2 \right) \prod_{a=1}^2 \delta [N\epsilon - H_p(s^a)] \prod_i \Theta(\Delta_i^a) \right\rangle. \quad (2.26)$$

Utilizando a representação integral da função delta de Dirac e da delta de Kronecker reescrevemos essa equação como

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\tilde{q}}{2\pi} \exp(iNq\tilde{q}) \prod_a \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^a}{2\pi} \exp(iN\epsilon^a \tilde{\epsilon}^a) \\ &\times \prod_{ia} Tr_{s^a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Delta_i^a d\tilde{\Delta}_i^a}{2\pi} \Theta(\Delta_i^a) \exp(i\Delta_i^a \tilde{\Delta}_i^a) \\ &\times \exp \left[-i\tilde{q} \sum_i s_i^1 s_i^2 - ih \sum_{ia} \tilde{\Delta}_i^a s_i^a + \frac{i}{p} \sum_{ia} \tilde{\epsilon}^a (\Delta_i^a + h(p-1)s_i^a) \right] \\ &\times \left\langle \exp \left(-i \sum_{ia} \tilde{\Delta}_i^a \sum_{i_2 < \dots < i_p} J_{ii_2 \dots i_p} s_i^a s_{i_2}^a \dots s_{i_p}^a \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Como na seção anterior, para efetuar a média sobre os acoplamentos utilizamos a identidade

$$\sum_i \tilde{\Delta}_i \sum_{i_2 < \dots < i_p} J_{ii_2 \dots i_p} s_i s_{i_2} \dots s_{i_p} = \sum_{i_1 < \dots < i_p} \left(\sum_{k=1}^p \tilde{\Delta}_{i_k} \right) J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} \quad (2.28)$$

obtendo

$$\langle \dots \rangle = \exp \left\{ -\frac{p!}{4N^{p-1}} \sum_{i_1 < \dots < i_p} \left[\sum_{a=1}^2 \left(\sum_{k=1}^p \tilde{\Delta}_{i_k}^a \right) s_{i_1}^a \dots s_{i_p}^a \right]^2 \right\}. \quad (2.29)$$

Após algumas manipulações algébricas, o argumento da exponencial é reescrito no limite $N \rightarrow \infty$ como

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle = & -\frac{p}{4} \sum_{a=1}^2 \left[\sum_i (\tilde{\Delta}_i^a)^2 + \frac{p-1}{N} \left(\sum_i \tilde{\Delta}_i^a \right)^2 \right] \\ & - \frac{pq^{p-1}}{2} \sum_i \tilde{\Delta}_i^1 \tilde{\Delta}_i^2 s_i^1 s_i^2 - \frac{p(p-1)q^{p-2}}{2N} \left(\sum_i \tilde{\Delta}_i^1 s_i^1 s_i^2 \right) \left(\sum_i \tilde{\Delta}_i^2 s_i^1 s_i^2 \right). \end{aligned} \quad (2.30)$$

A fim de efetuar o traço sobre s_i^a e as integrações sobre $\tilde{\Delta}_i^a$ devemos desacoplar as variáveis s_i^a e $\tilde{\Delta}_i^a$ com índices de sítios i diferentes. Para isso, introduzimos os parâmetros $Nm_1 = \sum_i \tilde{\Delta}_i^1$, $Nm_2 = \sum_i \tilde{\Delta}_i^2$, $Nv_1 = \sum_i \tilde{\Delta}_i^1 s_i^1 s_i^2$, $Nv_2 = \sum_i \tilde{\Delta}_i^2 s_i^1 s_i^2$, $Nr = \sum_i \tilde{\Delta}_i^1 \tilde{\Delta}_i^2 s_i^1 s_i^2$ juntamente com seus multiplicadores de Lagrange, obtendo

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(q, \epsilon) \rangle = & \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\tilde{q}}{2\pi} \exp(\mathbf{i}Nq\tilde{q}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^1}{2\pi} \exp(\mathbf{i}N\epsilon^1 \tilde{\epsilon}^1) \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^2}{2\pi} \exp(\mathbf{i}N\epsilon^2 \tilde{\epsilon}^2) \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm_1 d\tilde{m}_1}{2\pi} \exp \left[\mathbf{i}m_1 \tilde{m}_1 - \frac{Np(p-1)m_1^2}{4} \right] \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dm_2 d\tilde{m}_2}{2\pi} \exp \left[\mathbf{i}m_2 \tilde{m}_2 - \frac{Np(p-1)m_2^2}{4} \right] \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dr d\tilde{r}}{2\pi} \exp \left[\mathbf{i}r \tilde{r} - \frac{Nprq^{p-1}}{2} \right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv_1 d\tilde{v}_1}{2\pi} \exp(\mathbf{i}v_1 \tilde{v}_1) \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv_2 d\tilde{v}_2}{2\pi} \exp \left[\mathbf{i}v_2 \tilde{v}_2 - \frac{Np(p-1)v_1 v_2 q^{p-2}}{2} \right] \\ & \times Tr_{s^1} Tr_{s^2} \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Delta_i^1 d\tilde{\Delta}_i^1 d\Delta_i^2 d\tilde{\Delta}_i^2}{4\pi} \Theta(\Delta_i^1) \Theta(\Delta_i^2) \\ & \times \exp \left[\mathbf{i}\Delta_i^1 \tilde{\Delta}_i^1 - \mathbf{i}\tilde{\Delta}_i^1 h s_i^1 - \frac{\mathbf{i}\tilde{m}_1 \tilde{\Delta}_i^1}{N} - \frac{\mathbf{i}\tilde{v}_1 \tilde{\Delta}_i^1 s_i^1 s_i^2}{N} + \frac{\mathbf{i}\tilde{\epsilon}^1 \Delta_i^1}{p} \right. \\ & - \frac{p\tilde{\Delta}_i^1{}^2}{4} + \mathbf{i}\tilde{\Delta}_i^2 \Delta_i^2 - \mathbf{i}\tilde{\Delta}_i^2 h s_i^2 - \frac{\mathbf{i}\tilde{r} \tilde{\Delta}_i^1 \tilde{\Delta}_i^2 s_i^1 s_i^2}{N} - \frac{\mathbf{i}\tilde{m}_2 \tilde{\Delta}_i^2}{N} \\ & \left. - \frac{\mathbf{i}\tilde{v}_2 \tilde{\Delta}_i^2 s_i^1 s_i^2}{N} + \frac{\mathbf{i}\tilde{\epsilon}^2 \Delta_i^2}{p} - \frac{p\tilde{\Delta}_i^2}{4} + \frac{\mathbf{i}\tilde{\epsilon}^1 (p-1) h s_i^1}{p} \right] \end{aligned}$$

$$+\frac{\mathbf{i}\tilde{\epsilon}^2(p-1)hs_i^2}{p}-\frac{\mathbf{i}\tilde{q}s_i^1s_i^2}{N}]. \quad (2.31)$$

Integrando em m_1 e m_2 e fazendo $\mathbf{i}\tilde{q} = \hat{q}$, $\mathbf{i}\tilde{\epsilon}^a = \hat{\epsilon}^a$, $\tilde{m}^a = N\hat{m}^a$, $\tilde{v}_1 = N\hat{v}_1$, $\tilde{v}_2 = N\hat{v}_2$ obtemos

$$\langle \mathcal{M}(q, \epsilon) \rangle = L \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{m}_1 d\hat{m}_2 d\hat{v}_1 d\hat{v}_2 d\hat{\epsilon}^1 d\hat{\epsilon}^2 d\hat{q} \\ \times \exp \left\{ N \left[-\frac{\hat{m}_1^2}{p(p-1)} - \frac{\hat{m}_2^2}{p(p-1)} - \frac{2\hat{v}_1\hat{v}_2}{p(p-1)q^{p-2}} + \hat{\epsilon}^1\hat{\epsilon}^1 + \hat{\epsilon}^2\hat{\epsilon}^2 + \hat{q}q + \ln F \right] \right\}, \quad (2.32)$$

onde L é uma constante da ordem de N^3 , e

$$F = Tr_{s^1} Tr_{s^2} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta^1 d\tilde{\Delta}^1 d\Delta^2 d\tilde{\Delta}^2 \Theta(\Delta^1) \Theta(\Delta^2) \\ \times \exp \left\{ \frac{\hat{\epsilon}^1(p-1)hs^1}{p} + \frac{\hat{\epsilon}^2(p-1)hs^2}{p} - \frac{pq^{p-1}\tilde{\Delta}_i^1\tilde{\Delta}_i^2s_i^1s_i^2}{2} \right. \\ \left. - \hat{q}s^1s^2 + \mathbf{i}\tilde{\Delta}^1\Delta^1 - \tilde{\Delta}^1hs^1 - \mathbf{i}\hat{m}_1\tilde{\Delta}^1 - \mathbf{i}\hat{v}_1\tilde{\Delta}^1s^1s^2 + \frac{\hat{\epsilon}^1\Delta^1}{p} - \frac{p\tilde{\Delta}^1}{4} \right. \\ \left. + \mathbf{i}\tilde{\Delta}^2\Delta^2 - \tilde{\Delta}^2hs^2 - \mathbf{i}\hat{m}_2\tilde{\Delta}^2 - \mathbf{i}\hat{v}_2\tilde{\Delta}^2s^1s^2 + \frac{\hat{\epsilon}^2\Delta^2}{p} - \frac{p\tilde{\Delta}^2}{4} \right\}. \quad (2.33)$$

Neste estágio já podemos efetuar as integrais através do método de ponto de sela, no limite $N \rightarrow \infty$. O resultado final é

$$g = \frac{1}{N} \ln \langle 2\mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle \\ = -\frac{\hat{m}_1^2}{p(p-1)} - \frac{\hat{m}_2^2}{p(p-1)} - \frac{2\hat{v}_1\hat{v}_2}{p(p-1)q^{p-2}} + \hat{\epsilon}^1\hat{\epsilon}^1 + \hat{\epsilon}^2\hat{\epsilon}^2 + \hat{q}q + \ln F. \quad (2.34)$$

Finalmente, vamos efetuar explicitamente as integrais e o traço sobre s^1 e s^2 que aparecem na expressão de F , obtendo

$$\begin{aligned}
g = & -\frac{(X_1 + Y_1)^2}{4(p-1)} - \frac{(X_2 + Y_2)^2}{4(p-1)} + \frac{\hat{\epsilon}^1(X_1 + Y_1)\sqrt{p}}{2(p-1)} + \frac{\hat{\epsilon}^2(X_2 + Y_2)\sqrt{p}}{2(p-1)} \\
& - \frac{(\hat{\epsilon}^1)^2}{4(p-1)} - \frac{(\hat{\epsilon}^2)^2}{4(p-1)} - \frac{(X_1 - Y_1)(X_2 - Y_2)}{2(p-1)q^{p-2}} + \frac{(X_1 - Y_1)\hat{\epsilon}^1 q\sqrt{p}}{2(p-1)} \\
& + \frac{(X_2 - Y_2)\hat{\epsilon}^2 q\sqrt{p}}{2(p-1)} - \frac{\hat{\epsilon}^1 \hat{\epsilon}^2 q^p}{2(p-1)} + \hat{\epsilon}^1 \epsilon^1 + \hat{\epsilon}^2 \epsilon^2 + qw + \ln F,
\end{aligned} \tag{2.35}$$

onde

$$\begin{aligned}
F = & \frac{1}{2} \exp [\hat{\epsilon}^1 h + \hat{\epsilon}^2 h - w] \int_{-X_1 - \bar{h}}^{\infty} Dt \operatorname{erfc} \left\{ -\frac{(X_2 + \bar{h} + q^{p-1}t)}{\sqrt{1 - q^{2(p-1)}}} \right\} \\
& + \frac{1}{2} \exp [\hat{\epsilon}^1 h - \hat{\epsilon}^2 h + w] \int_{-Y_1 - \bar{h}}^{\infty} Dt \operatorname{erfc} \left\{ -\frac{(Y_2 - \bar{h} - q^{p-1}t)}{\sqrt{1 - q^{2(p-1)}}} \right\} \\
& + \frac{1}{2} \exp [-\hat{\epsilon}^1 h + \hat{\epsilon}^2 h + w] \int_{-Y_1 + \bar{h}}^{\infty} Dt \operatorname{erfc} \left\{ -\frac{(Y_2 + \bar{h} - q^{p-1}t)}{\sqrt{1 - q^{2(p-1)}}} \right\} \\
& + \frac{1}{2} \exp [-\hat{\epsilon}^1 h - \hat{\epsilon}^2 h - w] \int_{-X_1 + \bar{h}}^{\infty} Dt \operatorname{erfc} \left\{ -\frac{(X_2 - \bar{h} + q^{p-1}t)}{\sqrt{1 - q^{2(p-1)}}} \right\}
\end{aligned} \tag{2.36}$$

com

$$X_{1(2)} = \frac{1}{\sqrt{p}} \left[\hat{m}_{1(2)} + \hat{v}_{1(2)} + \frac{\hat{\epsilon}^{1(2)}}{2} + \frac{\hat{\epsilon}^{2(1)} q^{p-1}}{2} \right], \tag{2.37}$$

$$Y_{1(2)} = \frac{1}{\sqrt{p}} \left[\hat{m}_{1(2)} - \hat{v}_{1(2)} + \frac{\hat{\epsilon}^{1(2)}}{2} - \frac{\hat{\epsilon}^{2(1)} q^{p-1}}{2} \right], \tag{2.38}$$

$$w = \hat{q} - \frac{\hat{\epsilon}^1 \hat{v}_1}{p} - \frac{\hat{\epsilon}^2 \hat{v}_2}{p} - \frac{\hat{\epsilon}^1 \hat{\epsilon}^2 q^{p-1}}{2p}, \tag{2.39}$$

$$Dt = \frac{dt}{\sqrt{\pi}} e^{-t^2} \tag{2.40}$$

e

$$\bar{h} = \frac{h}{\sqrt{p}}. \quad (2.41)$$

A seguir, vamos nos restringir à análise de pares de mínimos idênticos, ou seja, caracterizados pelos mesmos valores dos parâmetros de ponto de sela e com a mesma energia. Isso simplifica enormemente as equações anteriores pois, neste caso, $X_1 = X_2 = X$, $Y_1 = Y_2 = Y$ e $\epsilon^1 = \epsilon^2 = \epsilon$. Logo, a equação (2.35) reduz-se a

$$g = \frac{\epsilon \hat{\epsilon}}{\sqrt{p}} + qw - \frac{1}{2(p-1)} \left[(X+Y)^2 + q^{2-p}(X-Y)^2 + (1+q^p) \frac{\hat{\epsilon}^2}{4p} \right] + \frac{\hat{\epsilon}}{2(p-1)} [(1+q)X + (1-q)Y] + \ln \Xi(\hat{\epsilon}, X, Y, w) - \ln 2, \quad (2.42)$$

onde

$$\begin{aligned} \Xi = & e^{\hat{\epsilon}\bar{h}-w} \int_{-X-\bar{h}}^{\infty} Dt \operatorname{erfc} \left[-\frac{X+\bar{h}+q^{p-1}t}{\sqrt{1-q^{2p-2}}} \right] \\ & + e^{-\hat{\epsilon}\bar{h}-w} \int_{-X+\bar{h}}^{\infty} Dt \operatorname{erfc} \left[-\frac{X-\bar{h}+q^{p-1}t}{\sqrt{1-q^{2p-2}}} \right] \\ & + e^w \int_{-Y+\bar{h}}^{\infty} Dt \operatorname{erfc} \left[-\frac{Y+\bar{h}-q^{p-1}t}{\sqrt{1-q^{2p-2}}} \right] \\ & + e^w \int_{-Y-\bar{h}}^{\infty} Dt \operatorname{erfc} \left[-\frac{Y-\bar{h}-q^{p-1}t}{\sqrt{1-q^{2p-2}}} \right]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

O passo seguinte consiste em resolver as equações de ponto de sela $\partial g/\partial \hat{\epsilon} = 0$, $\partial g/\partial X = 0$, $\partial g/\partial Y = 0$ e $\partial g/\partial w = 0$. Determinamos, assim, o conjunto de parâmetros $\hat{\epsilon}$, X , Y e w que maximiza g . Para $q = 1$ encontramos $Y = 0$ e $g = f$, como esperado, já que os ‘pares’ são de fato um único estado. Para $q = 0$ e $h = 0$ temos $X = Y$ e $w = 0$ de forma que $g = 2f$.

Conhecido $\langle \mathcal{M}(q, \epsilon) \rangle$, podemos calcular facilmente o segundo momento $\langle \mathcal{N}^2(\epsilon) \rangle$ a partir da identidade

$$\begin{aligned} \sum_q \langle \mathcal{M}(q, \epsilon) \rangle &= \frac{1}{2} \langle \mathcal{N}^2(\epsilon) \rangle \\ &\approx \langle \mathcal{M}(q_m, \epsilon) \rangle, \end{aligned} \quad (2.44)$$

uma vez que a soma é dominada pelo valor de $q = q_m$ que maximiza o expoente g . Daí, se $q_m = 0$ e $h = 0$ temos que a variância de $\mathcal{N}(\epsilon)$ anula-se no limite termodinâmico.

O comportamento de g como função de ϵ para q fixo é similar ao observado na figura 2.1, assim como os comportamentos de ϵ_m , ϵ_0 e g_m em função de h quando $\kappa = 0$. Como no caso anterior, g_m é encontrado fazendo-se $\hat{\epsilon} = 0$. Quando a sobreposição entre os mínimos e o campo magnético externo são nulos, isto é $q = h = 0$, encontramos $g = 2f$. Este resultado é esperado desde que em um sistema com k estados possíveis o número de pares de estados descorrelacionados é proporcional a k^2 . Por outro lado, para $q = 1$ os estados são idênticos e, portanto, o número de pares é proporcional a k . Conseqüentemente, o número de pares é igual ao número de estados, como pode ser comprovado tomando $q = 1$ na equação (2.42).

Na figura 2.8, mostramos o comportamento de g_m com a variação de q para $p = 7$ e alguns valores de h . Com a introdução do campo magnético, o valor de q que maximiza g_m muda. A correlação imposta com o aumento de h faz com que a maior concentração de mínimos se desloque da região em que q é próximo de zero para a região em que q aproxima-se de seu valor máximo $q \sim 1$, indicando que ao redor de um mínimo típico existe uma região onde outros mínimos são raros. Na figura 2.9, apresentamos a energia típica de pares de mínimos, ϵ_m , como função da sobreposição q . Podemos observar que quando o campo magnético é nulo, pares de mínimos com diferentes sobreposições possuem aproximadamente a mesma energia. Com a introdução do campo magnético, a energia típica dos pares de mínimos diminui.

Vamos, agora, observar a dependência da sobreposição típica entre dois mínimos,

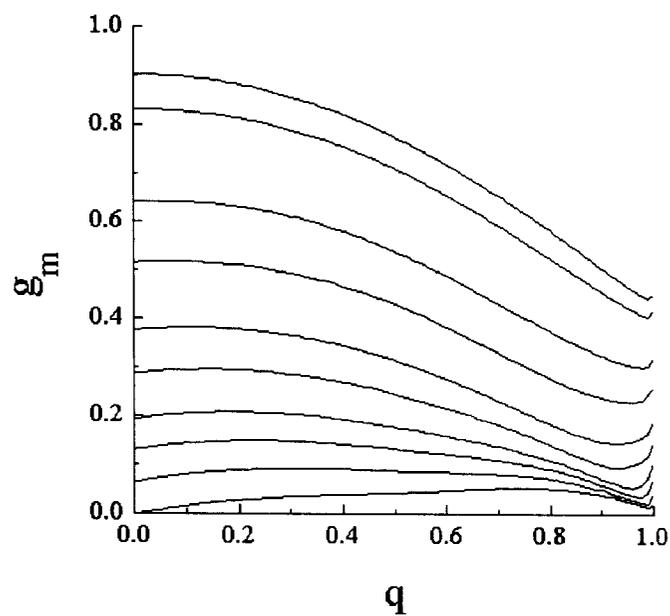


Figura 2.8: Densidade de pares de mínimos g_m como função de q para $p = 7$ e $h = 0, 1, 2, 2.5, 3, 3.3, 3.6, 3.8, 4$ e 4.2 (de cima para baixo).

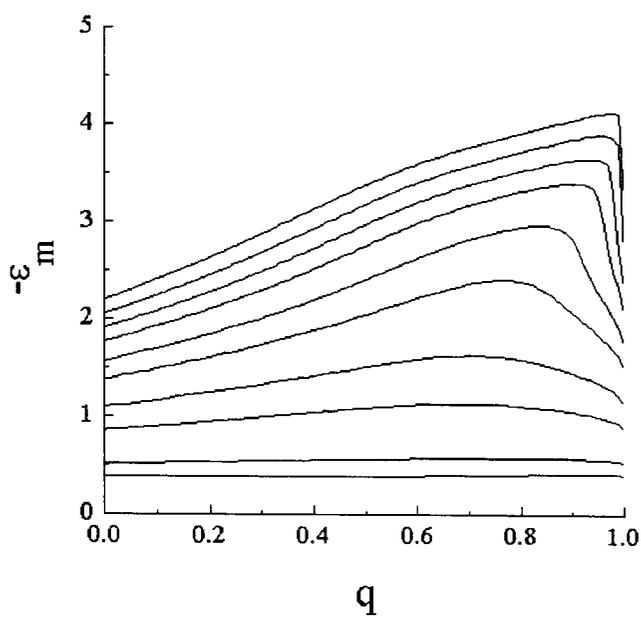


Figura 2.9: ϵ_m como função de q para $p = 7$ e $h = 0, 1, 2, 2.5, 3, 3.3, 3.6, 3.8, 4$ e 4.2 (de baixo para cima).

q_m , com o campo magnético h (ver figura 2.10) para valores de p entre 2 e 8. Para esse estudo resolvemos a equação $\partial g/\partial q = 0$ (isto é, q_m é a sobreposição que maximiza g) juntamente com as outras equações de ponto de sela. À medida que o campo aumenta, a sobreposição típica muda de 0 para 1, pois para campos muito grandes, a correlação entre os mínimos de energia é máxima. A descontinuidade que é observada para $p \geq 7$ é causada pela competição entre os dois máximos mostrados na figura 2.8.

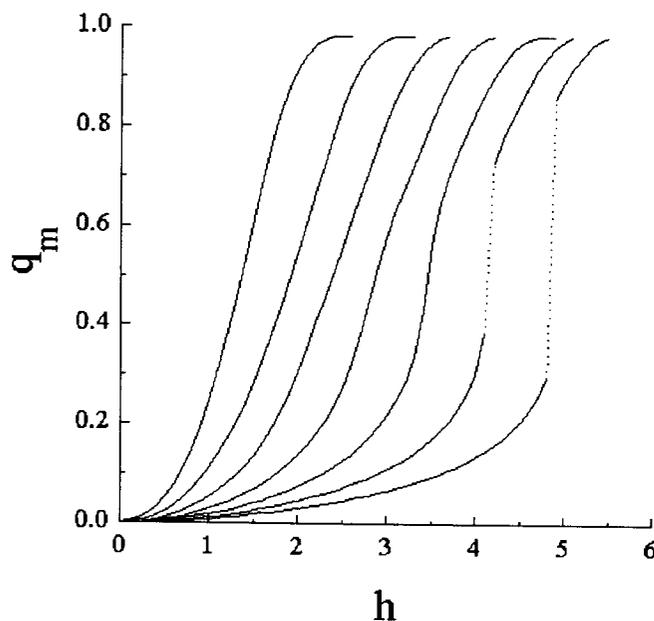


Figura 2.10: q_m como função de h para $p = 2$ a $p = 8$ (da esquerda para a direita).

Nas figuras 2.11 e 2.12, mostramos a dependência da sobreposição típica entre mínimos idênticos com suas energias para $p = 2$ e $p = 3$, respectivamente, e alguns valores do campo magnético. Para $p = 2$ e $h = 0$, o valor de q_m decresce continuamente até atingir o valor zero em $\epsilon = -0.672$ e permanece igual a zero para valores de ϵ maiores, indicando que neste intervalo $\mathcal{N}(\epsilon)$ é auto-mediante pois sua variância é zero, conforme mencionado anteriormente. Este resultado é idêntico ao obtido por Roberts [29] no cálculo de $\langle \ln \mathcal{N}(\epsilon) \rangle$ através do método de réplicas.

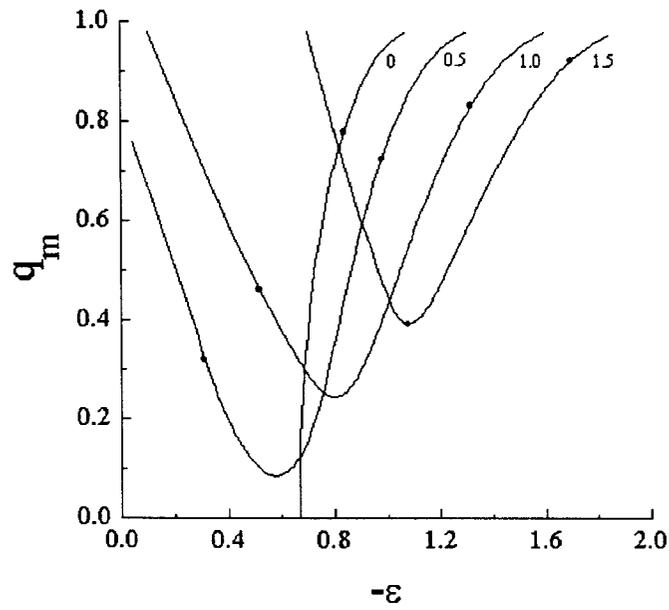


Figura 2.11: q_m como função de ϵ para $p = 2$ e $h = 0, 0.5, 1, 1.5$. Os pontos na figura correspondem a $g = 0$. A região entre os pontos corresponde a g maior que zero.

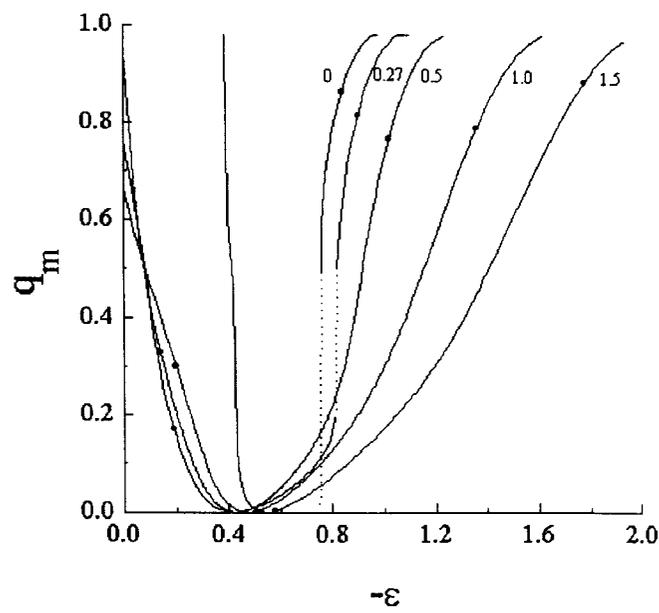


Figura 2.12: q_m em função de ϵ para $p = 3$ e $h = 0, 0.27, 0.5, 1$ e 1.5 .

Para $p = 3$ e $h = 0$, o valor de q_m vai a zero de maneira descontínua em $\epsilon = -0.792$. Vale lembrar que, nos cálculos termodinâmicos para $p > 2$ e $h = 0$, o parâmetro de ordem exibe um degrau (salto), sinalizando uma transição de fase entre as fases paramagnética e vidro de spin [37, 38]. Podemos entender melhor esta descontinuidade observando a dependência de g com q na figura 2.13, onde temos $p = 3$ e $h = 0$ para alguns valores de ϵ . À medida que ϵ varia, surge uma competição entre os máximos em $q = 0$ e $q > 0$. Assim, a descontinuidade se dá no valor de ϵ no qual os dois máximos têm a mesma ordenada.

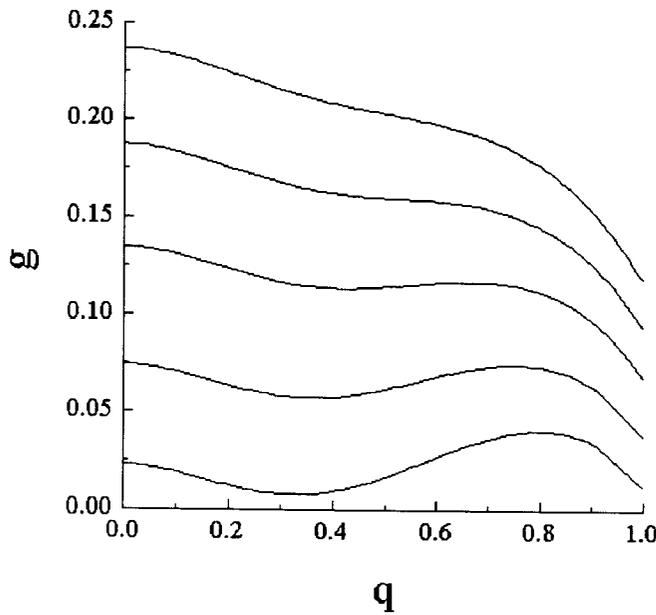


Figura 2.13: g como função de q para $p = 3$, $h = 0$ e $\epsilon = -0.73, -0.75, -0.77, -0.79$ e -0.81 (de cima para baixo).

Quando $h > 0$ as regiões nas quais $q_m = 0$ desaparecem devido às correlações introduzidas pelo campo. Logo, a auto-mediância de $\mathcal{N}(\epsilon)$ naquelas regiões é destruída. Para $p = 3$, o aumento do campo vai, aos poucos, suavizando a descontinuidade em q até que, para $h \approx 0.29$, esta desaparece. Para $p > 3$, os resultados são similares aos

encontrados para $p = 3$, exceto pelo fato de que os valores de h e $|\epsilon|$ para os quais a descontinuidade desaparece são maiores.

Nesta seção, estudamos a distribuição dos mínimos locais no espaço de configurações através do cálculo do número médio de pares de mínimos locais com densidade de energia ϵ e sobreposição q . Mostramos que q_m , a sobreposição típica entre pares de mínimos, vai a zero de maneira descontínua em um dado valor de ϵ , para $p > 2$ e pequenos valores de h . Observamos que o tamanho desta descontinuidade aumenta com p e diminui com acréscimo em h , desaparecendo quando o campo magnético atinge um valor crítico $h = h_c$.

2.3 Correções ao alcance infinito

Nesta seção, vamos generalizar os cálculos realizados por Tanaka e Edwards [22] para as correções ao alcance infinito do modelo SK introduzindo interações de p -spins. O modelo considerado é idêntico ao anterior exceto que cada spin pode interagir com z (número de coordenação) vizinhos. Naturalmente vamos trabalhar nos limites $z \gg 1$ mas $N \gg z$. O Hamiltoniano é dado por

$$H(s) = \sum_{\langle i_1 < i_2 < \dots < i_p \rangle} J_{i_1 i_2 \dots i_p} s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_p}. \quad (2.45)$$

Os acoplamentos $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ são variáveis aleatórias estatisticamente independentes com distribuição Gaussiana

$$P(J_{i_1 i_2 \dots i_p}) = \sqrt{\frac{z^{p-1}}{\pi p!}} \exp \left[-\frac{(J_{i_1 i_2 \dots i_p})^2 z^{p-1}}{p!} \right] \Theta[(i_1 < i_2 < \dots < i_p)], \quad (2.46)$$

onde $\Theta[(i_1 < i_2 < \dots < i_p)] = 1$ se $(i_1 < i_2 < \dots < i_p)$ é um padrão de interação válido e 0 em caso contrário. Como não é possível considerar um padrão de interação fixo, consideramos todos os padrões de interação possíveis com um número de coordenação

fixo, ou seja, somamos sobre todas as formas de escolher os $(p - 1)$ spins entre os z permitidos. O método que utilizaremos para abordar o problema de conectividade finita é devido a Tanaka e Edwards [22] e no que segue usaremos a notação daqueles autores.

O custo de energia necessário para inverter o spin s_i é $\partial H = 2\lambda_i$, onde

$$\lambda_i = \sum_{\langle i_2 < \dots < i_p \rangle} J_{ii_2 \dots i_p} s_i s_{i_2} \dots s_{i_p} \quad (2.47)$$

é a estabilidade de s_i . Portanto, qualquer estado que satisfaz a condição

$$\lambda_i \geq 0 \quad \forall i \quad (2.48)$$

é um mínimo local do relevo de energia definido pelo Hamiltoniano (2.45). O número de mínimos locais pode ser escrito como

$$\mathcal{N} = \text{Tr}_s \prod_i \int_0^\infty d\lambda_i \delta\left(\lambda_i - \sum_{\langle i_2 < \dots < i_p \rangle} J_{ii_2 \dots i_p} s_i s_{i_2} \dots s_{i_p}\right), \quad (2.49)$$

onde o traço é a soma sobre todas as 2^N configurações de spin e $\delta(x)$ é a função delta de Dirac.

Utilizando a representação integral da função delta escrevemos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N} \rangle &= \prod_i \int_0^\infty d\lambda_i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\phi_i}{2\pi} \exp[\mathbf{i}\phi_i \lambda_i] \\ &\quad \left\langle \text{Tr}_s \exp \left\{ \mathbf{i} \sum_i \sum_{\langle i_2 < \dots < i_p \rangle} \phi_i J_{ii_2 \dots i_p} s_i s_{i_2} \dots s_{i_p} \right\} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Vamos a seguir calcular o número médio de estados metaestáveis $\langle \mathcal{N} \rangle$ no limite de N e z grandes com $N \gg z$. Aqui, $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre os acoplamentos em todos os padrões de interação possíveis com número de coordenação z fixo. Utilizando-nos da relação

$$\sum_{i_1 < \dots < i_p} \phi_i J_{i_1 i_2 \dots i_p} s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_p} = \sum_{i_1 < \dots < i_p} (\phi_{i_1} + \phi_{i_2} + \dots + \phi_{i_p}) J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} \quad (2.51)$$

obtemos como nas seções anteriores

$$\langle \dots \rangle = 2^N \exp \left\{ -\frac{p!}{4z^{p-1}} \sum_{\langle i_1 < \dots < i_p \rangle} (\phi_{i_1} + \dots + \phi_{i_p})^2 \right\}, \quad (2.52)$$

de modo que a equação (2.50) fica reescrita como

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \prod_i \int_0^\infty d\lambda_i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\phi_i}{\pi} \exp \left\{ i\lambda_i \phi_i - \frac{p!}{4z^{p-1}} \sum_{\langle i_1 < \dots < i_p \rangle} (\phi_{i_1} + \phi_{i_2} + \dots + \phi_{i_p})^2 \right\}. \quad (2.53)$$

A expansão do termo quadrático no argumento da exponencial resulta em

$$\begin{aligned} \frac{p!}{z^{p-1}} \sum_{\langle i_1 < \dots < i_p \rangle} \phi_{i_1}^2 &= \frac{1}{z^{p-1}} z(z-1) \dots (z-p+2) \sum_i \phi_i^2 \\ &= \left[1 - \frac{1}{2z} (p-1)(p-2) + \mathcal{O}(z^{-2}) \right] \sum_i \phi_i^2 \end{aligned} \quad (2.54)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{p!}{z^{p-1}} \sum_{\langle i_1 < \dots < i_p \rangle} \phi_{i_1} \phi_{i_2} &= \frac{2}{z^{p-1}} (z-1)(z-2) \dots (z-p+2) \sum_{\langle i < j \rangle} \phi_i \phi_j \\ &= \left[\frac{2}{z} + \mathcal{O}(z^{-2}) \right] \sum_{\langle i < j \rangle} \phi_i \phi_j. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Neste estágio já podemos ver que a expansão em $1/z$ só será consistente se $z \gg p^2$.

Substituindo (2.54) e (2.55) em (2.53) obtemos

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \int_{-\infty}^\infty \prod_i d\phi_i D(\phi_i) \exp \left[-\frac{p(p-1)}{2z} \sum_{\langle i < j \rangle} \phi_i \phi_j \right] \quad (2.56)$$

onde

$$D(\phi_i) = \left[1 + \frac{p(p-1)(p-2)}{8z} \phi_i^2 + \mathcal{O}(z^{-2}) \right] \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\pi} e^{-i\lambda\phi_i - p\phi_i^2/4} \quad (2.57)$$

pode ser vista como a medida de campo ϕ_i .

Vamos agora efetuar as integrais na expressão (2.56) tomando o cuidado de coletar todos os termos de primeira ordem em $(1/z)$. Podemos fazer isto através de um método variacional introduzido por Tanaka e Edwards [22] na análise de $p = 2$. A idéia é adicionar um termo linear ao Hamiltoniano efetivo da eq. (2.56), que é reescrita como

$$\langle \mathcal{N} \rangle = [\Phi(t)]^N \left\langle \exp \left[-\frac{p(p-1)}{2z} \sum_{\langle i < j \rangle} \phi_i \phi_j - itp^{1/2} \sum_i \phi_i \right] \right\rangle_t, \quad (2.58)$$

onde a média $\langle \dots \rangle_t$ é definida por

$$\langle \dots \rangle_t = \frac{\int \prod_i d\phi_i D(\phi_i) (\dots) \exp(itp^{1/2} \sum_i \phi_i)}{\int \prod_i d\phi_i D(\phi_i) \exp(itp^{1/2} \sum_i \phi_i)} \quad (2.59)$$

e

$$\begin{aligned} \Phi(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\phi D(\phi) \exp(itp^{1/2}\phi) \\ &= \operatorname{erfc}(-t) + \frac{t}{z\sqrt{4\pi}} (p-1)(p-2)e^{-t^2} + \mathcal{O}(z^{-2}). \end{aligned} \quad (2.60)$$

Por exemplo,

$$ip^{1/2} \langle \phi_k \rangle_t = \frac{\Phi'(t)}{\Phi(t)} \quad (2.61)$$

$$-p \langle \phi_k^2 \rangle_t = \frac{\Phi''(t)}{\Phi(t)} \quad (2.62)$$

para $k = 1, \dots, N$. Aqui, t é um parâmetro variacional que será determinado de forma que $\langle \mathcal{N} \rangle$ seja maximizado.

A média em (2.58) pode ser realizada através da expansão do cumulante. Em particular, vamos supor que apenas o primeiro cumulante contenha termos de ordem zero em $(1/z)$ e esses termos determinam o valor de $t = t_m$ que maximiza $\langle \mathcal{N} \rangle$. Isto será verificado posteriormente através do cálculo de cumulantes de ordem mais alta. Avaliando o primeiro cumulante, encontramos que t_m maximiza a expressão

$$\ln \Phi(t) - \frac{p(p-1)}{4} \langle \phi_k \rangle_t^2 - itp^{1/2} \langle \phi_k \rangle_t, \quad (2.63)$$

sendo então dado por

$$t_m = \frac{1}{2}(p-1)ip^{1/2} \langle \phi_k \rangle_{t_m}. \quad (2.64)$$

A utilidade da aproximação variacional torna-se transparente apenas quando reescrevemos (2.58) trocando t por t_m e rearranjando os termos, ou seja,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N} \rangle &= \left\langle \exp \left[N \ln \Phi(t_m) + \frac{p(p-1)}{2z} \sum_{\langle i < j \rangle} \phi_i \phi_j + \frac{p(p-1)}{2} \langle \phi_k \rangle_{t_m} \sum_i \phi_i \right] \right\rangle \\ &= \exp [N \ln \Phi(t_m)] \left\langle \exp \left[-\frac{p(p-1)}{2z} \sum_{\langle i < j \rangle} \phi_i (\phi_j - 2 \langle \phi_j \rangle_{t_m}) \right] \right\rangle \\ &= \exp \left[N \ln \Phi(t_m) + \frac{Np(p-1)}{4} \langle \phi_k \rangle_{t_m}^2 \right] \langle \exp(\Xi) \rangle_{t_m} \end{aligned} \quad (2.65)$$

onde

$$\Xi = -\frac{p(p-1)}{2z} \sum_{\langle i < j \rangle} (\phi_i - \langle \phi_i \rangle_{t_m})(\phi_j - \langle \phi_j \rangle_{t_m}). \quad (2.66)$$

Como $\langle \Xi \rangle_{t_m} = 0$, torna-se fácil calcular os cumulantes de ordem mais alta na expansão do cumulante

$$\langle \exp(\Xi) \rangle_{t_m} = \exp \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle \Xi^n \rangle_{t_m;c} \right). \quad (2.67)$$

Em particular, encontramos

$$\langle \Xi \rangle_{t_m; c} = 0, \quad (2.68)$$

$$\langle \Xi^2 \rangle_{t_m; c} = N \frac{p^2(p-1)^2}{8z} \langle (\phi_k - \langle \phi_k \rangle_{t_m})^2 \rangle_{t_m}^2, \quad (2.69)$$

$$\langle \Xi^3 \rangle_{t_m; c} = -N \frac{p^3(p-1)^3}{16z^2} \langle (\phi_k - \langle \phi_k \rangle_{t_m})^3 \rangle_{t_m}^2. \quad (2.70)$$

Mais geralmente, pode-se mostrar facilmente que $\langle \Xi^n \rangle_{t_m; c}$ é da ordem de z^{1-n} . Portanto, para manter termos até a ordem de $(1/z)$ precisamos considerar apenas o segundo cumulante na equação (2.67). Além do mais, os termos de ordem zero em $(1/z)$ são aqueles fora do símbolo de média na equação (2.65). Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln \langle \mathcal{N} \rangle &= \ln \Phi(t_m) + \frac{p(p-1)}{4} \langle \phi_k \rangle_{t_m}^2 \\ &\quad + \frac{p^2(p-1)^2}{16z} (\langle \phi_k^2 \rangle_{t_m} - \langle \phi_k \rangle_{t_m}^2) + \mathcal{O}(z^{-2}). \end{aligned} \quad (2.71)$$

Vamos agora separar as contribuições de ordem zero e de primeira ordem em $(1/z)$. Lembrando que t_m é determinado apenas pelo termo de ordem zero na expansão em $(1/z)$, a equação (2.64) reduz-se a

$$t_m = \frac{p-1 \exp(-t_m^2)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(-t_m)}. \quad (2.72)$$

Substituindo este resultado em (2.60), (2.61) e (2.62), reescrevemos (2.71) como

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle \mathcal{N} \rangle = \alpha = \alpha_0 + \frac{1}{z} \alpha_1 + \mathcal{O}(z^{-2}) \quad (2.73)$$

com

p	2	3	4	5	6	10
α_0	0.1992	0.2956	0.3552	0.3965	0.4273	0.5001
α_1	0.0656	0.3393	0.7789	1.3411	1.9985	5.2894

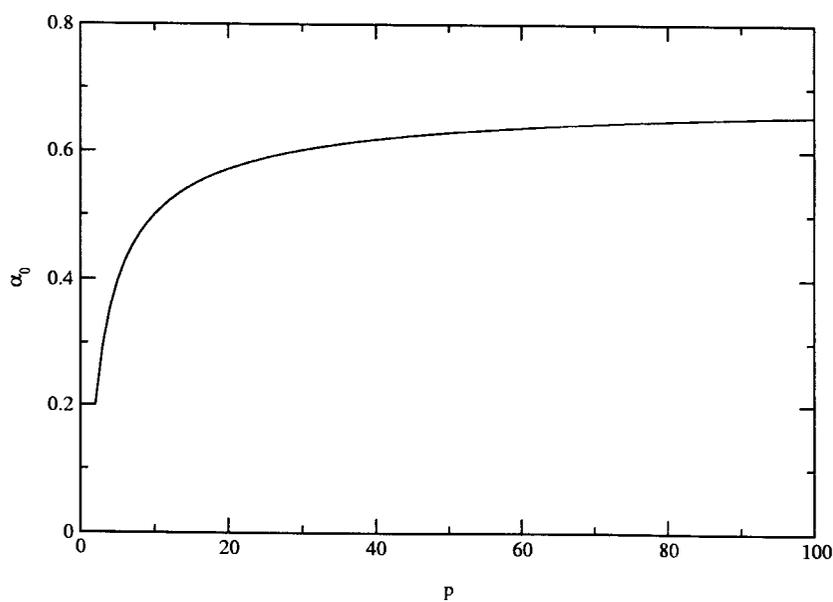
Tabela 2.1: Valores de α_0 e α_1 para $p = 2, 3, 4, 5, 6$ e 10 .

$$\alpha_0 = \ln[\operatorname{erfc}(-t_m)] - \frac{t_m^2}{p-1} \quad (2.74)$$

e

$$\alpha_1 = p^2 t_m^2 \left[\frac{t_m^2}{(p-1)^2} + \frac{p-2}{2p^2} \right]. \quad (2.75)$$

Daí, resolvendo (2.72) numericamente, obtemos α_0 e α_1 para qualquer valor de p . Alguns desses valores são apresentados na tabela 2.1. Nosso resultado para $p = 2$ está de acordo com o obtido por Tanaka e Edwards [22] e, para $p > 2$ com os resultados numéricos obtidos por Stadler e Krakhofer [28]. Nas figuras 2.14 e 2.15 apresentamos α_0

Figura 2.14: α_0 como função de p .

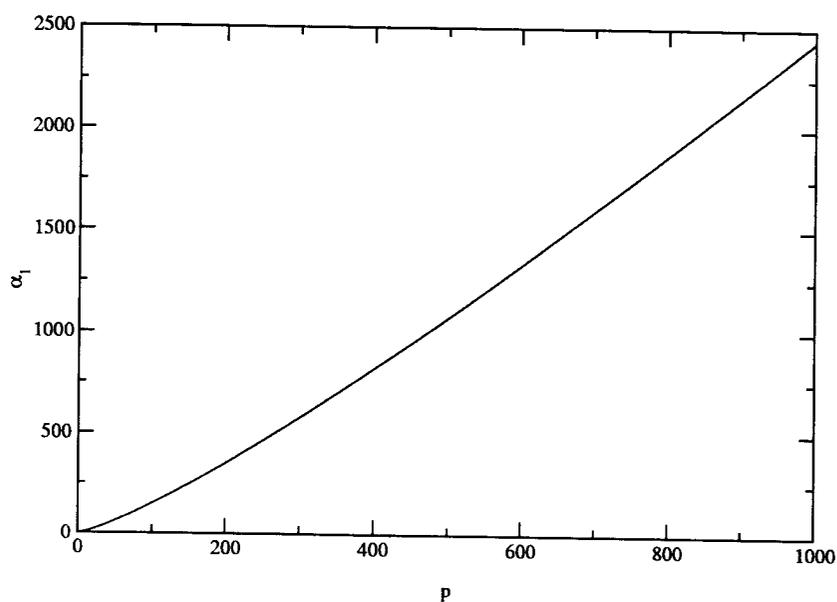


Figura 2.15: α_1 como função de p .

e α_1 como função de p . Quando $p \rightarrow \infty$ encontramos que $t_m \approx \sqrt{\ln p}$ e, conseqüentemente, $\alpha_0 \rightarrow \ln 2$ e $\alpha_1 \approx p \ln p$. Como $\alpha_1/z \ll 1$, a expansão em $1/z$ só é consistente se $z \gg p^2$.

Concluindo, o número de estados meta-estáveis aumenta ($\alpha_1 > 0$) quando consideramos o efeito de uma conectividade finita e esse aumento torna-se mais pronunciado à medida que p aumenta.

Capítulo 3

Termodinâmica de vidros de spin com interações de multispins

Motivados pelos resultados do capítulo anterior que apontam para um efeito não trivial do campo magnético na estatística dos estados meta-estáveis, neste capítulo vamos estudar a termodinâmica do modelo de vidros de spin de Ising com interações de p -spins na presença de um campo magnético h . Surpreendentemente, esse problema foi investigado apenas para $p = 2$ [44]. Os estudos do modelo de p -spins foram restritos apenas ao caso $h = 0$ [37, 38] já que, como veremos, a adição do campo dificulta consideravelmente a solução das equações de ponto de sela.

Complementando a análise anterior vamos inicialmente (seção 3.1) calcular a densidade média de estados, ou seja, o número médio de estados com densidade de energia ϵ , sem entretanto impor o vínculo de que esses estados sejam meta-estáveis. O mesmo tipo de análise é realizado para o número de pares de estados com densidade de energia ϵ (seção 3.2). A análise termodinâmica convencional, baseada no método das réplicas, é realizada na seção 3.3 com o cálculo da entropia definida como a média do logaritmo do número de estados com densidade de energia ϵ . Esse estudo é restrito a dois tipos de soluções: a primeira com simetria de réplicas (SR) e a segunda com o primeiro passo de quebra de simetria de réplicas (1 QSR). As regiões no espaço de parâmetros T , h e p onde essas soluções são estáveis determinam o diagrama de fases do modelo. Na seção

3.4, estudamos as linhas de transição entre essas duas soluções ou regimes.

3.1 Número médio de estados

Consideremos o Hamiltoniano definido na equação (2.1). Definindo a quantidade Y_s como

$$Y_s = \begin{cases} 1 & : \text{ se } \epsilon N = H_p(s) \\ 0 & : \text{ outro caso,} \end{cases} \quad (3.1)$$

o número de estados com energia ϵ é dado por $\mathcal{N} = Tr_s Y_s$, onde Tr_s denota a soma sobre os 2^N estados do sistema. O n -ésimo momento do número de estados é definido por

$$\langle [\mathcal{N}(\epsilon)]^n \rangle = \left\langle \prod_{a=1}^n Tr_{s^a} Y_{s^a} \right\rangle = \left\langle \prod_{a=1}^n Tr_{s^a} \delta[\epsilon N - H_p(s^a)] \right\rangle. \quad (3.2)$$

Assim, temos como primeiro momento ($n=1$) simplesmente

$$\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle = \langle Tr_s \delta[\epsilon N - H_p(s)] \rangle. \quad (3.3)$$

Utilizando a representação integral da função delta obtemos

$$\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle = Tr_s \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}}{2\pi} \exp\left(\mathbf{i}N\tilde{\epsilon}\epsilon + \mathbf{i}\tilde{\epsilon}h \sum_i s_i\right) \left\langle \exp\left(\mathbf{i}\tilde{\epsilon} \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p}\right) \right\rangle. \quad (3.4)$$

Para efetuar a média sobre os acoplamentos utilizamos a distribuição gaussiana (2.2) obtendo

$$\left\langle \exp\left(\mathbf{i}\tilde{\epsilon} \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p}\right) \right\rangle = \exp\left(-\frac{Np!\tilde{\epsilon}^2}{4}\right). \quad (3.5)$$

Substituindo este resultado na equação (3.4), temos

$$\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}}{2\pi} \exp\left(\mathbf{i}N\tilde{\epsilon}\epsilon - \frac{Np!\tilde{\epsilon}^2}{4}\right) Tr_s \exp\left(\mathbf{i}\tilde{\epsilon}h \sum_i s_i\right). \quad (3.6)$$

Efetuando o traço sobre os spins e fazendo $i\tilde{\epsilon} = \hat{\epsilon}$, a equação anterior resulta em

$$\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle = \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\hat{\epsilon}}{2\pi i} \exp \left\{ N \left[\hat{\epsilon}\epsilon + \frac{p! \hat{\epsilon}^2}{4} + \ln (2 \cosh(\hat{\epsilon}h)) \right] \right\}. \quad (3.7)$$

Efetuando a integração de ponto de sela obtemos finalmente

$$\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle = e^{Nf}, \quad (3.8)$$

onde

$$f = \hat{\epsilon}\epsilon + \frac{p! \hat{\epsilon}^2}{4} + \ln [2 \cosh(\hat{\epsilon}h)]. \quad (3.9)$$

Para encontrarmos o parâmetro de ponto de sela $\hat{\epsilon}$, resolvemos a equação $\partial f / \partial \hat{\epsilon} = 0$. Isso resulta na seguinte equação de ponto de sela

$$\epsilon + \frac{p! \hat{\epsilon}}{2} + h \tanh(\hat{\epsilon}h) = 0. \quad (3.10)$$

O comportamento de f como função de ϵ para $p = 2$ e $h = 0, 0.5$ e 1.0 é mostrado na figura 3.1. Podemos observar que, com a introdução do campo magnético, surgem estados com valores menores de energia. O comportamento para $p > 2$ é similar ao caso anterior, com exceção de que os valores de ϵ para os quais f é nulo são menores. Maximizando f com respeito a ϵ , encontramos que seu valor máximo, denotado por f_m , é obtido fazendo-se $\hat{\epsilon} = 0$. Substituindo este valor de $\hat{\epsilon}$ na equação (3.10) observamos que ϵ_m (densidade de energia correspondente a f_m) é sempre igual a zero e que o valor de f_m é igual a $\ln 2$, independentemente dos valores assumidos para p e h .

Calculando o menor valor de ϵ para o qual a função f se anula obtemos um limite inferior para a densidade de energia do estado fundamental ϵ_0 . A variação de ϵ_0 com o campo magnético externo h para $p = 2, 3$ e 4 é exibida na figura 3.2. À medida em que

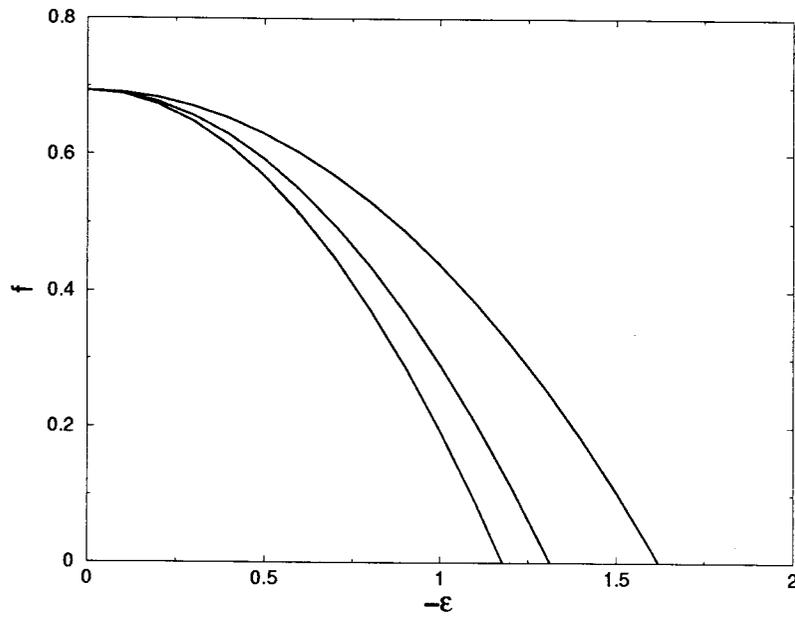


Figura 3.1: O expoente f como função de ϵ para $p = 2$ e $h = 0, 0.5$ e 1.0 (da esquerda para a direita).

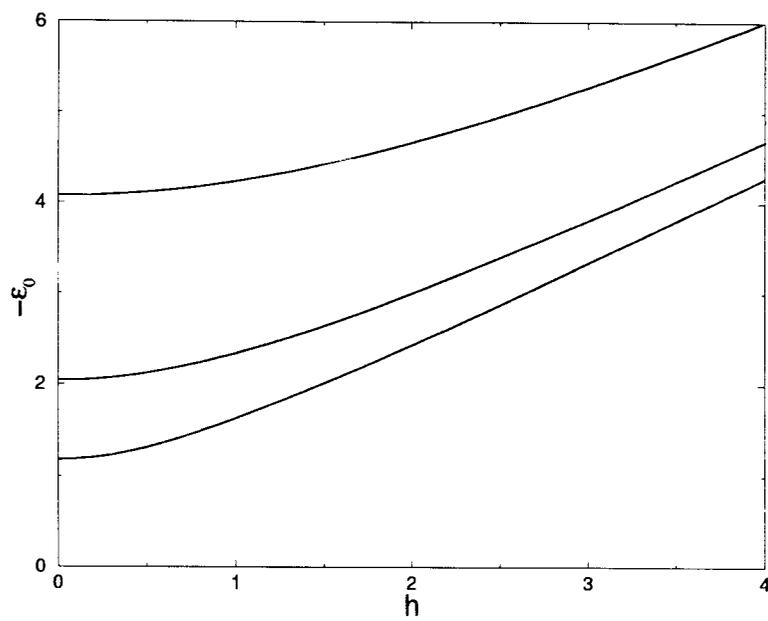


Figura 3.2: Limite inferior para a densidade de energia do estado fundamental, ϵ_0 , como função de h para $p = 2, 3$ e 4 (de baixo para cima).

aumentamos o valor de p , o valor de ϵ_0 diminui, ou seja, $|\epsilon_0|$ aumenta. Em particular, para $h = 0$ encontramos

$$\epsilon_0 = -\sqrt{p! \ln 2}. \quad (3.11)$$

3.2 Número médio de pares de estados

O número de pares de estados com sobreposição $q = -1, -1 + 2/N, \dots, 1$ e com densidade de energia ϵ é definido por

$$\mathcal{M}(\epsilon, q) = \frac{1}{2} Tr_{s_1} Tr_{s_2} Y_{s_1} Y_{s_2} \delta \left(Nq, \sum_i s_i^1 s_i^2 \right), \quad (3.12)$$

onde $\delta(n, m)$ é a função delta de Kronecker e Y_s é dado em (3.1). Segundo a equação (3.2), a média sobre $\mathcal{M}(\epsilon, q)$ é dada por

$$\langle \mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle = \frac{1}{2} \left\langle Tr_{s_1} Tr_{s_2} \delta \left(Nq, \sum_i s_i^1 s_i^2 \right) \prod_{a=1}^2 \delta [N\epsilon - H_p(s^a)] \right\rangle. \quad (3.13)$$

Utilizando a representação integral das funções delta de Dirac e delta de Kronecker reescrevemos essa equação como

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\tilde{q} dq}{2\pi} \exp(iNq\tilde{q}) \prod_a Tr_{s^a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^a}{2\pi} \exp(iN\epsilon^a \tilde{\epsilon}^a) \\ &\quad \times \exp \left(i\tilde{\epsilon}^a h \sum_i s_i^a - i\tilde{q} \sum_i s_i^a s_i^b \right) \\ &\quad \times \left\langle \exp \left(i \sum_a \tilde{\epsilon}^a \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{ii_2 \dots i_p} s_i^a s_{i_2}^a \dots s_{i_p}^a \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Efetuada a média sobre os acoplamentos obtemos

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\tilde{q}dq}{2\pi} \exp(iNq\tilde{q}) \\
&\times \prod_a Tr_{s^a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^a}{2\pi} \exp \left[iN\epsilon^a \tilde{\epsilon}^a + i\tilde{\epsilon}^a h \sum_i s_i^a - i\tilde{q} \sum_i s_i^a s_i^b \right. \\
&\quad \left. - \frac{Np!(\tilde{\epsilon}^a)^2}{4} - \frac{Np!\tilde{\epsilon}^a \tilde{\epsilon}^b}{2} \left(\frac{1}{N} \sum_i s_i^a s_i^b \right)^p \right] \\
&= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\tilde{q}dq}{2\pi} \exp(iNq\tilde{q}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^1}{2\pi} \exp \left(iN\epsilon^1 \tilde{\epsilon}^1 - \frac{Np!(\tilde{\epsilon}^1)^2}{4} \right) \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^2}{2\pi} \exp \left(iN\epsilon^2 \tilde{\epsilon}^2 - \frac{Np!(\tilde{\epsilon}^2)^2}{4} \right) \\
&\times Tr_{s^1} Tr_{s^2} \exp \left(i\tilde{\epsilon}^1 h \sum_i s_i^1 + i\tilde{\epsilon}^2 h \sum_i s_i^2 - i\tilde{q} \sum_i s_i^1 s_i^2 - \frac{Np!\tilde{\epsilon}^1 \tilde{\epsilon}^2 q^p}{2} \right). \tag{3.15}
\end{aligned}$$

Podemos agora efetuar o traço sobre s_i^1 e s_i^2 e obter

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\tilde{q}dq}{2\pi} \exp(iNq\tilde{q}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^1}{2\pi} \exp(iN\tilde{\epsilon}^1 \epsilon^1) \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^2}{2\pi} \exp(iN\tilde{\epsilon}^2 \epsilon^2) \exp \left[-\frac{Np!((\tilde{\epsilon}^1)^2 + (\tilde{\epsilon}^2)^2)}{4} - \frac{Np!\tilde{\epsilon}^1 \tilde{\epsilon}^2 q^p}{2} \right] \\
&\times \left\{ 2 \left[e^{i\tilde{q}} \cos(\tilde{\epsilon}^1 h + \tilde{\epsilon}^2 h) + e^{-i\tilde{q}} \cos(\tilde{\epsilon}^1 h - \tilde{\epsilon}^2 h) \right] \right\}^N. \tag{3.16}
\end{aligned}$$

Fazendo $i\tilde{q} = \hat{q}$, $i\tilde{\epsilon}^1 = \hat{\epsilon}^1$ e $i\tilde{\epsilon}^2 = \hat{\epsilon}^2$, reescrevemos esta equação como

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle &= \frac{1}{2} \int_{-i\pi}^{i\pi} \frac{d\hat{q}dq}{2\pi i} \exp(Nq\hat{q}) \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\hat{\epsilon}^1}{2\pi i} \exp(N\hat{\epsilon}^1 \epsilon^1) \\
&\times \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{d\hat{\epsilon}^2}{2\pi i} \exp(N\hat{\epsilon}^2 \epsilon^2) \exp \left[\frac{Np! \left(\hat{\epsilon}^{1^2} + \hat{\epsilon}^{2^2} + 2\hat{\epsilon}^1 \hat{\epsilon}^2 q^p \right)}{4} \right] \\
&\times \left\{ 2 \left[e^{\hat{q}} \cosh(\hat{\epsilon}^1 h + \hat{\epsilon}^2 h) + e^{-\hat{q}} \cosh(\hat{\epsilon}^1 h - \hat{\epsilon}^2 h) \right] \right\}^N. \tag{3.17}
\end{aligned}$$

Realizando as integrações através do método de ponto de sela encontramos

$$\begin{aligned}
g &= \frac{1}{N} \ln \langle 2\mathcal{M}(\epsilon, q) \rangle \\
&= \hat{\epsilon}^1 \epsilon^1 + \hat{\epsilon}^2 \epsilon^2 + q\hat{q} + \frac{p! (\hat{\epsilon}^{1^2} + \hat{\epsilon}^{2^2})}{4} + \frac{p! \hat{\epsilon}^1 \hat{\epsilon}^2 q^p}{2} \\
&\quad + \ln [e^{\hat{q}} \cosh(\hat{\epsilon}^1 h + \hat{\epsilon}^2 h) + e^{-\hat{q}} \cosh(\hat{\epsilon}^1 h - \hat{\epsilon}^2 h)] + \ln 2. \tag{3.18}
\end{aligned}$$

A análise a seguir será restrita a pares de estados degenerados, ou seja, com a mesma energia, $\epsilon^1 = \epsilon^2 = \epsilon$. Assim, a equação (3.18) reduz-se a

$$g = 2\hat{\epsilon}\epsilon + q\hat{q} + \frac{p!\hat{\epsilon}^2}{2}(1 + q^p) + \ln [e^{\hat{q}} \cosh(2\hat{\epsilon}h) + e^{-\hat{q}}] + \ln 2. \tag{3.19}$$

O passo seguinte consiste em resolver as equações de ponto de sela $\partial g/\partial \hat{\epsilon} = 0$ e $\partial g/\partial \hat{q} = 0$, determinando, assim, os valores dos parâmetros $\hat{\epsilon}$ e \hat{q} que maximizam g .

O comportamento de g como função de ϵ é similar ao observado na figura 3.1 para q fixo, assim como o comportamento de ϵ_0 em função de h é similar ao observado na figura 3.2. Quando a sobreposição entre os estados e o campo magnético externo são nulos, isto é, $q = h = 0$, encontramos $g = 2f$. Quando $q = 1$ o número de pares com energia ϵ é igual ao número de estados com esta energia, como pode ser comprovado tomando-se $q = 1$ na equação para g . Como na seção anterior, o valor máximo de g , denotado por g_m , é obtido quando $\hat{\epsilon} = 0$ e é independente de p e de h .

Nas figuras 3.3 e 3.4, mostramos a dependência da sobreposição típica entre estados degenerados com suas energias para $p = 2$ e 3 , respectivamente, e alguns valores do campo magnético. Para $p = 2$ e $h = 0$ o valor de q_m decresce continuamente até atingir o valor zero em $\epsilon = -0.7$, permanecendo nulo para valores maiores de ϵ . Para $h > 0$ o valor de q_m vai a zero de maneira descontínua. Podemos entender esta descontinuidade observando a dependência de g com q na figura 3.5, para $p = 2$, $h = 1.5$ e alguns valores de ϵ . Com a diminuição de ϵ (ou seja, com o aumento de $|\epsilon|$) temos situações distintas para

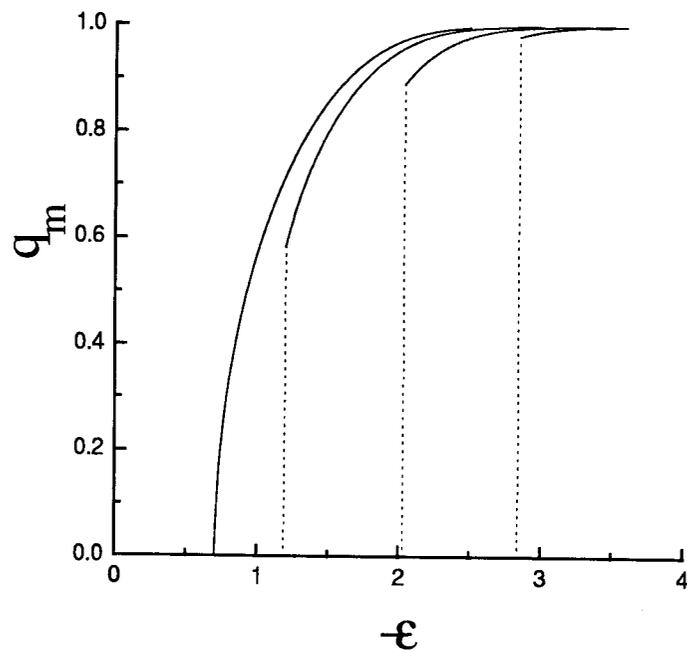


Figura 3.3: q_m como função de ϵ para $p = 2$ e $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 (da esquerda para a direita).

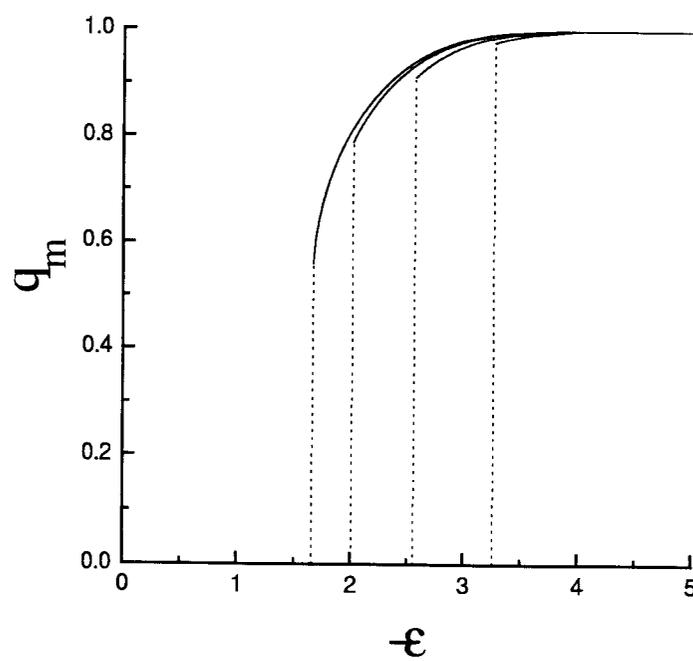


Figura 3.4: q_m como função de ϵ para $p = 3$ e $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 (da esquerda para a direita).

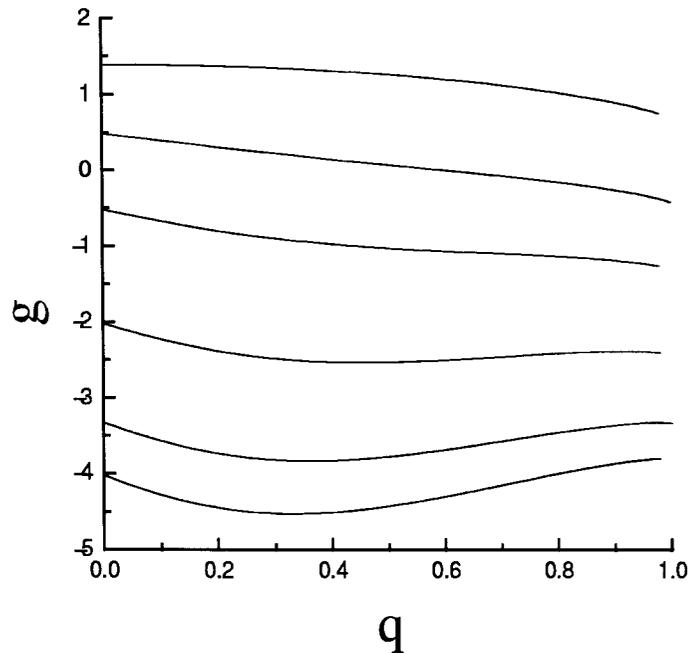


Figura 3.5: g como função de q para $p = 2$, $h = 1.5$ e $|\epsilon| = 0, 1.5, 2.0, 2.5, 2.84$ e 3.0 (de cima para baixo).

os máximos de g . Inicialmente há apenas um máximo em $q = 0$. Reduzindo o valor de ϵ encontramos uma região com mais de um máximo, embora o máximo global de g ainda ocorra para $q = 0$. Diminuindo ainda mais o valor de ϵ , encontramos uma região onde o máximo global ocorre para $q \neq 0$. A descontinuidade se dá no valor de ϵ em que os dois máximos têm a mesma ordenada. Podemos visualizar essas três regiões na figura 3.6.

Para $p = 3$ e $h = 0$ o valor de q_m vai a zero de maneira descontínua em $\epsilon = -1.67$. Já foi observado nos cálculos termodinâmicos realizados para $h = 0$ que, para o caso $p > 2$, há uma descontinuidade no parâmetro de ordem, indicando a transição de uma fase desordenada para a fase vidro de spin [37, 38]. Para $h > 0$ essa descontinuidade é também verificada para valores menores de ϵ e maiores de q_m à medida que o campo é incrementado. A descontinuidade pode ser entendida da mesma forma que no caso para $p = 2$ e $h > 0$. Os resultados para $p > 3$ são similares aos encontrados para $p = 3$, exceto

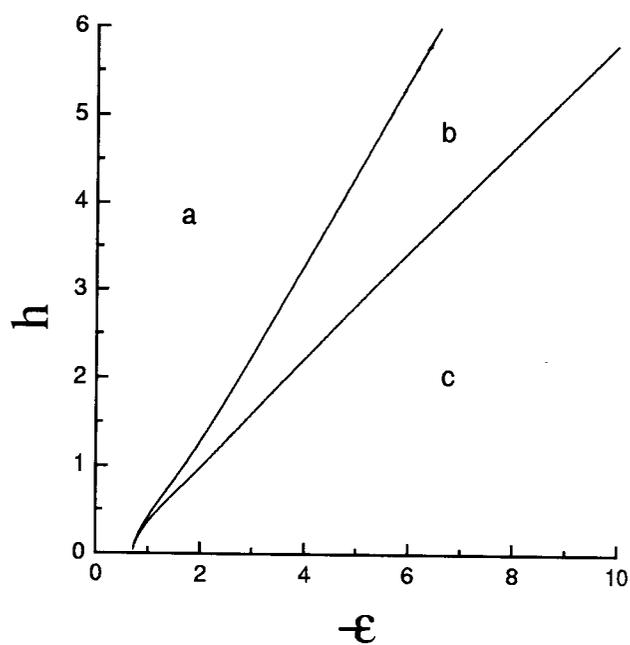


Figura 3.6: As regiões em que: a) $g(q=0)$ é o único máximo; b) há dois máximos e $g(q=0) > g(q \neq 0)$; c) há dois máximos e $g(q \neq 0) > g(q=0)$.

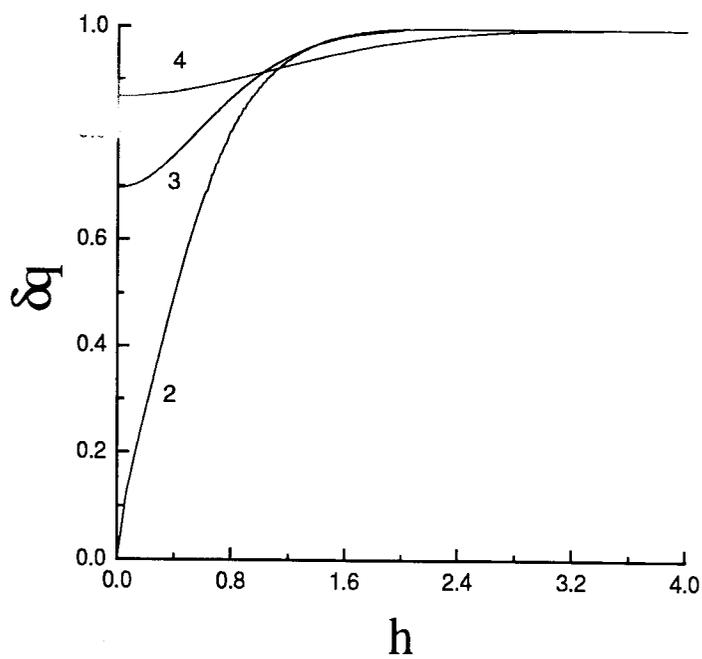


Figura 3.7: Descontinuidade em q com o aumento de h para $p = 2, 3$ e 4 .

que o valor de ϵ em que surge a descontinuidade é menor.

Na figura 3.7, exibimos o tamanho da descontinuidade em q à medida em que aumentamos o valor do campo h para valores de $p = 2, 3$ e 4 . Observamos que à medida em que p aumenta, a descontinuidade também aumenta e atinge o valor 1 com o aumento do campo magnético externo.

Nessas duas seções, calculamos o número médio de estados com densidade de energia ϵ , assim como o número de pares de estados com densidade de energia ϵ e sobreposição q , para o modelo de vidros de spin com interações de p -spins na presença de um campo magnético h . Observamos que com a introdução do campo magnético surgem estados com valores menores de energia. Calculamos o limite inferior para a densidade de energia do estado fundamental ϵ_0 e observamos que este valor diminui com o acréscimo de h . Mostramos também que a dependência da sobreposição típica q_m com a densidade de energia ϵ apresenta uma descontinuidade para $p > 2$ e que o tamanho desta descontinuidade aumenta com o acréscimo do campo magnético. Por fim, desejamos mencionar que, apesar de sua simplicidade, os resultados das figuras 3.1 a 3.7 são originais.

3.3 Entropia

Vamos utilizar o método das réplicas para calcular a entropia

$$\frac{S}{N} = \frac{1}{N} \langle \ln \mathcal{N}(\epsilon) \rangle. \quad (3.20)$$

O método das réplicas consiste em utilizar a identidade

$$\langle \ln \mathcal{N} \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \langle \mathcal{N}^n \rangle \quad (3.21)$$

calculando-se $\langle \mathcal{N}^n \rangle$ para n inteiro e realizando a continuação analítica para $n \approx 0$.

O n -ésimo momento do número de estados com energia ϵ é definido na equação

(3.2). Utilizando a representação integral da função delta reescrevemos aquela equação como

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N}^n \rangle &= \prod_a \text{Tr}_{s_i^a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^a}{2\pi} \exp \left(\mathbf{i}N\tilde{\epsilon}^a \epsilon^a + \mathbf{i}\tilde{\epsilon}^a h \sum_i s_i^a \right) \\ &\quad \times \left\langle \exp \left(\mathbf{i}\tilde{\epsilon}^a \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1}^a \dots s_{i_p}^a \right) \right\rangle, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde $a = 1, \dots, n$ é o índice de réplicas. Para efetuar a média sobre os acoplamentos utilizamos a distribuição gaussiana (2.2), obtendo

$$\langle \dots \rangle = \prod_{i_1 < \dots < i_p} \exp \left[-\frac{p!}{4N^{p-1}} \left(\sum_a \tilde{\epsilon}^a s_{i_1}^a \dots s_{i_p}^a \right)^2 \right], \quad (3.23)$$

que após algumas manipulações é reescrita como

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle &= \exp \left\{ -\frac{p!}{4N^{p-1}} \left[\sum_{i_1 < \dots < i_p} \sum_a \tilde{\epsilon}^{a^2} + \frac{1}{p!} \sum_{a \neq b} \tilde{\epsilon}^a \tilde{\epsilon}^b \left(\left(\sum_i s_i^a s_i^b \right)^p - \sum_i (s_i^a s_i^b)^p \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - \sum_{k=1}^{p-1} \frac{p!}{(p-k)!k!} \sum_{i_1, \dots, i_k} (s_{i_1}^a s_{i_1}^b)^k s_{i_{k+1}}^a \dots s_{i_p}^a s_{i_{k+1}}^b \dots s_{i_p}^b \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Definindo o parâmetro de ordem como a sobreposição entre um par de réplicas (a, b), $q^{ab} = (1/N) \sum_i s_i^a s_i^b$, tomando o limite $N \rightarrow \infty$ e substituindo na equação (3.22) temos

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N}^n \rangle &= \text{Tr}_{s_i^a} \prod_a \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{q}^{ab} d q^{ab}}{2\pi/N} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\epsilon}^a}{2\pi} \exp \left(\mathbf{i}N\tilde{q}^{ab} q^{ab} - \mathbf{i}\tilde{q}^{ab} \sum_i s_i^a s_i^b \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{i}N \sum_a \tilde{\epsilon}^a \epsilon^a + \mathbf{i}h \sum_a \tilde{\epsilon}^a \sum_i s_i^a - \frac{N}{4} \sum_a \tilde{\epsilon}^{a^2} - \frac{N}{4} \sum_{a \neq b} \tilde{\epsilon}^a \tilde{\epsilon}^b (q^{ab})^p \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Tomando $\mathbf{i}\tilde{q}^{ab} = \hat{q}^{ab}$ e $\mathbf{i}\tilde{\epsilon}^a = \hat{\epsilon}^a$

$$\langle \mathcal{N}^n \rangle = \prod_a \int_{-\mathbf{i}\infty}^{\mathbf{i}\infty} \frac{d\hat{q}^{ab} d q^{ab}}{2\pi\mathbf{i}/N} \int_{-\mathbf{i}\infty}^{\mathbf{i}\infty} \frac{d\hat{\epsilon}^a}{2\pi\mathbf{i}} \exp \left\{ N \left[\hat{q}^{ab} q^{ab} + \sum_a \hat{\epsilon}^a \epsilon^a + \frac{1}{4} \sum_a \hat{\epsilon}^{a^2} \right. \right.$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{a \neq b} \hat{\epsilon}^a \hat{\epsilon}^b (q^{ab})^p \left. \right\} \left[\sum_{s^a} \exp \left(- \sum_{a < b} \hat{q}^{ab} s^a s^b + h \sum_a \hat{\epsilon}^a s^a \right) \right]^N. \quad (3.26)$$

Efetuada a integração de ponto de sela sobre (3.26) encontramos finalmente

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln \langle \mathcal{N}^n \rangle &= \sum_{a < b} \hat{q}^{ab} q^{ab} + \sum_a \hat{\epsilon}^a \epsilon^a + \frac{1}{4} \sum_a \hat{\epsilon}^{a^2} + \frac{1}{2} \sum_{a < b} \hat{\epsilon}^a \hat{\epsilon}^b (q^{ab})^p \\ &+ \ln \sum_{s^a} \exp \left(- \sum_{a < b} \hat{q}^{ab} s^a s^b + h \sum_a \hat{\epsilon}^a s^a \right). \end{aligned} \quad (3.27)$$

3.3.1 Simetria de Réplicas

Utilizaremos agora a hipótese de simetria de réplicas, ou seja, faremos $q^{ab} = q$, $\hat{q}^{ab} = \hat{q}$, $\hat{\epsilon}^a = \hat{\epsilon}^b = \hat{\epsilon}$ e $\epsilon^a = \epsilon^b = \epsilon$ em (3.27), que então se reduz a

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln \langle \mathcal{N}^n \rangle &= -\frac{1}{2} \hat{q} q \frac{n(n-1)}{2} + \hat{\epsilon} \epsilon n + \frac{\hat{\epsilon}^2 n}{4} - \frac{1}{4} \hat{\epsilon}^2 q^p n + \frac{\hat{q} n}{2} \\ &+ n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \ln \left[2 \cosh(-iz\sqrt{\hat{q}} + h\hat{\epsilon}) \right]. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Finalmente, fazendo $\hat{q} \rightarrow -\hat{q}$, dividindo por n , onde já tomamos o limite $n \rightarrow 0$ encontramos

$$\begin{aligned} \frac{S}{N} &= \frac{1}{N} \langle \ln \mathcal{N} \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN} \ln \langle \mathcal{N}^n \rangle \\ &= \frac{q\hat{q}}{2} + \hat{\epsilon}\epsilon + \frac{\hat{\epsilon}^2}{4} - \frac{q^p \hat{\epsilon}^2}{4} - \frac{\hat{q}}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \ln \left[2 \cosh(h\hat{\epsilon} + z\sqrt{\hat{q}}) \right]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Os parâmetros de ponto de sela são obtidos através das equações $\partial S / \partial q = 0$, $\partial S / \partial \hat{q} = 0$ e $\partial S / \partial \hat{\epsilon} = 0$:

$$\hat{q} = \frac{1}{2} \hat{\epsilon}^2 p q^{p-1}, \quad (3.30)$$

$$q = 1 - \frac{1}{\sqrt{\hat{q}}} \int_{-\infty}^{\infty} Dz z \tanh(h\hat{\epsilon} + z\sqrt{\hat{q}}), \quad (3.31)$$

e

$$\epsilon = \frac{\hat{\epsilon}(q^p - 1)}{2} - h \int_{-\infty}^{\infty} Dz \tanh(h\hat{\epsilon} + z\sqrt{\hat{q}}), \quad (3.32)$$

onde $Dz = (dz/\sqrt{2\pi})e^{-z^2/2}$ é a medida gaussiana. Usando a relação fundamental

$$\frac{1}{N} \frac{\partial S}{\partial \epsilon} = \frac{1}{T} = \beta \quad (3.33)$$

obtemos $\hat{\epsilon} = \beta$. A partir daqui vamos considerar T (e portanto $\hat{\epsilon}$) como dado inicialmente (ensemble canônico). A densidade de energia passa, então, a ser uma grandeza desconhecida, a ser calculada através da equação (3.32). Ficamos então com apenas dois parâmetros de ponto de sela, a saber, q e \hat{q} .

No caso de campo nulo, $h = 0$, as equações acima têm a solução $\hat{q} = q = 0$ para todos os valores de p . Para $p = 2$, esta solução só é estável quando $T > 1$. Já para $p > 2$ ela é estável para todas as temperaturas pois satisfaz a condição de estabilidade

$$\frac{q}{(p-1)\hat{q}} - \int_{-\infty}^{\infty} Dz \operatorname{sech}^4(z\sqrt{\hat{q}}) > 0, \quad (3.34)$$

a ser derivada na seção seguinte. Entretanto, ela não é satisfatória em baixas temperaturas, pois para qualquer valor de p , a entropia $S = \ln 2 - 1/4T^2$ torna-se negativa abaixo de $T = 1/2\sqrt{\ln 2}$. Deve, então, haver uma transição de fase em uma temperatura maior que esta, envolvendo quebra de simetria de réplicas. Há outras soluções para p finito que envolvem uma descontinuidade no parâmetro de ordem mas todas são instáveis. Nas figuras 3.8, 3.9 e 3.10 apresentamos as curvas que delimitam a região em que a entropia é negativa para $p = 2, 3$ e 10 e $h \geq 0$ (curva tracejada). Vamos, agora, determinar a condição de estabilidade da solução com simetria de réplicas para o caso geral $h \geq 0$.

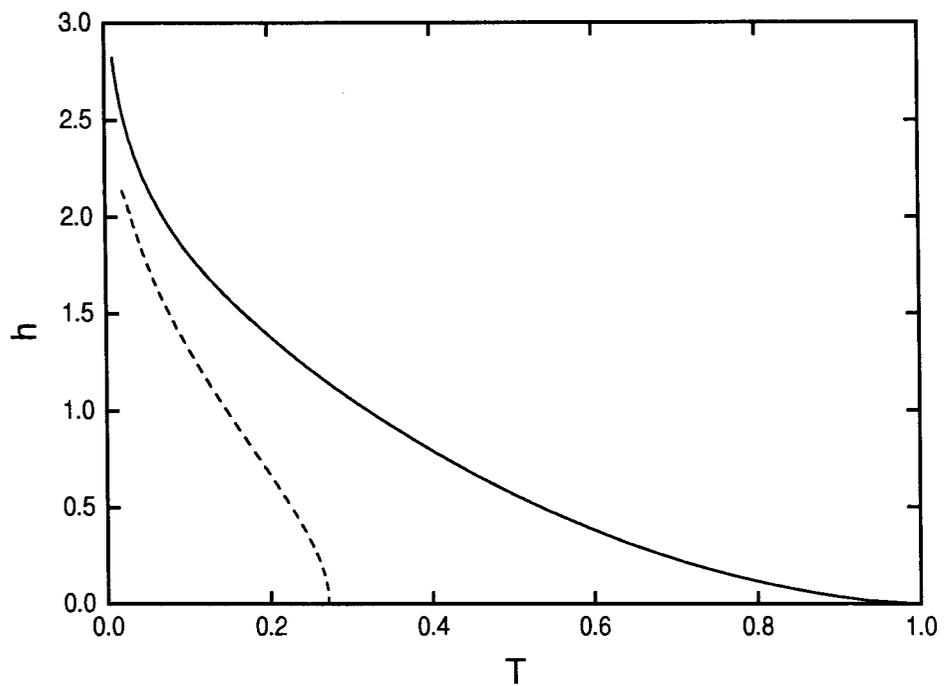


Figura 3.8: Diagrama de fase no plano (T, h) para $p = 2$. A solução de simetria de réplicas é instável dentro da região delimitada pela curva sólida, que coincide com a linha de transição contínua entre os regimes de SR e 1 QSR. A curva tracejada delimita a região dentro da qual a entropia da solução SR é negativa.

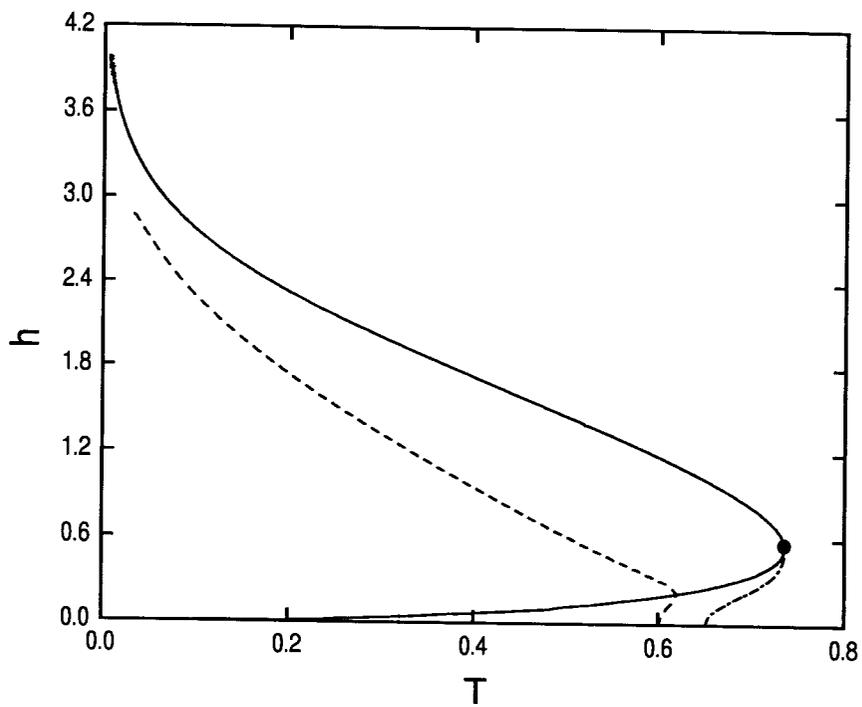


Figura 3.9: Diagrama de fase no plano (T, h) para $p = 3$. A solução de simetria de réplicas é instável dentro da região delimitada pela curva sólida e coincide com a linha de transição contínua no ramo acima do ponto tricrítico localizado em $T_t \approx 0.74$ e $h_t \approx 0.57$. A linha tracejada delimita a região dentro da qual a entropia da solução SR é negativa. A linha ponto-tracejada é a linha de transição descontínua.

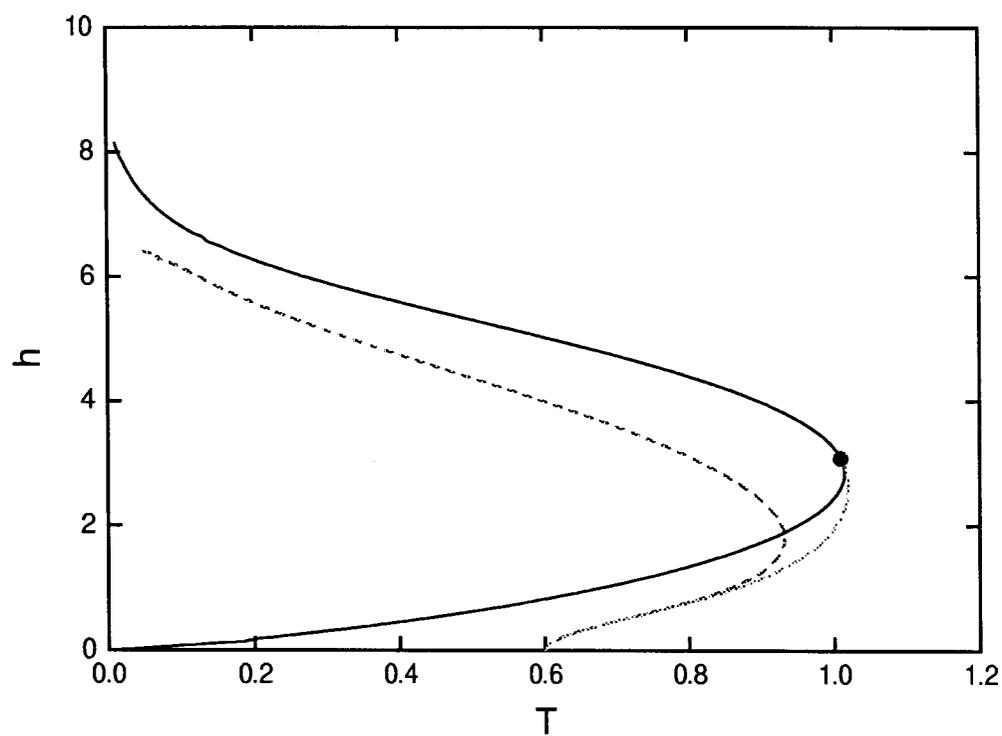


Figura 3.10: Diagrama de fase no plano (T,h) para $p = 10$. A solução de simetria de réplicas é instável dentro da região delimitada pela curva sólida e coincide com a linha de transição contínua no ramo acima do ponto tricrítico localizado em $T_t \approx 1.01$ e $h_t \approx 3.07$. A linha tracejada delimita a região dentro da qual a entropia da solução SR é negativa. A linha ponto-tracejada é a linha de transição descontínua.

3.3.2 Análise de estabilidade

Para obtermos as soluções estáveis do problema devemos nos assegurar que os autovalores da matriz hessiana $\partial S/\partial q^{ab}\partial q^{\gamma\delta}$ sejam positivos. A condição de estabilidade usual é a de que esses autovalores sejam negativos. A situação, aqui, é invertida devido ao limite $n \rightarrow 0$ que produz matrizes com dimensões negativas, invalidando, assim, a análise clássica de estabilidade local. Outras anomalias ocorrem pelo mesmo motivo: o parâmetro de ordem q da seção anterior não maximiza S (e portanto não minimiza a energia livre f) como esperado, mas sim, minimiza a entropia (maximizando assim a energia livre). Vamos então calcular esses autovalores. Primeiramente, usamos a forma generalizada da equação (3.30), isto é, $\hat{q}^{ab} = p\beta^2(q^{ab})^{p-1}/2$, que é então substituída em (3.27) levando a

$$G = \frac{1}{N} \ln \langle \mathcal{N}^n \rangle = -\frac{1}{2}(p-1)\beta^2 \sum_{a<b} (q^{ab})^p + \beta n \epsilon + \frac{1}{4}\beta^2 n + \ln \text{Tr}_{s^a} \exp \left(\frac{1}{2}p\beta^2 \sum_{a<b} (q^{ab})^{p-1} s^a s^b + h\beta \sum_a s^a \right). \quad (3.35)$$

Note que já estamos utilizando β no lugar de $\hat{\epsilon}$. Derivando G em relação a $q^{\gamma\delta}$ obtemos

$$\frac{\partial G}{\partial q^{\gamma\delta}} = -\frac{1}{2}\beta^2 p(p-1)(q^{\gamma\delta})^{p-2} \left[q^{\gamma\delta} - \frac{\text{Tr}_{s^a} s^\gamma s^\delta e^{H_0}}{\text{Tr}_{s^a} e^{H_0}} \right], \quad (3.36)$$

onde

$$H_0 = \frac{1}{2}p\beta^2 \sum_{a<b} (q^{ab})^{p-1} s^a s^b + h\beta \sum_a s^a. \quad (3.37)$$

Derivando, agora, em relação a q^{ab} :

$$\begin{aligned} B^{ab,\gamma\delta} &= \frac{\partial^2 G}{\partial q^{ab}\partial q^{\gamma\delta}} \\ &= -\frac{1}{2}\beta^2 p(p-1)(q^{\gamma\delta})^{p-2} \left[\delta_{ab,\gamma\delta} - \frac{1}{2}p(p-1)\beta^2 (q^{ab})^{p-2} \langle s^a s^b s^\gamma s^\delta \rangle \right] \end{aligned}$$

$$+\frac{1}{2}p(p-1)\beta^2(q^{ab})^{p-2}\langle s^a s^b \rangle \langle s^\gamma s^\delta \rangle \Big], \quad (3.38)$$

onde

$$\langle s^a s^b s^\gamma s^\delta \rangle = \frac{\text{Tr}_{s^a} s^a s^b s^\gamma s^\delta e^{H_0}}{\text{Tr}_{s^a} e^{H_0}} \quad (3.39)$$

e

$$\langle s^a s^b \rangle = \frac{\text{Tr}_{s^a} s^a s^b e^{H_0}}{\text{Tr}_{s^a} e^{H_0}}. \quad (3.40)$$

Daí podemos observar que existem apenas três tipos diferentes de elementos de matriz, a saber,

$$P = B^{ab,ab} = -\frac{1}{2}\beta^2 p(p-1)(q^{ab})^{p-2} \left[1 - \frac{1}{2}p(p-1)\beta^2(q^{ab})^{p-2} (1 - \langle s^a s^b \rangle^2) \right], \quad (3.41)$$

$$Q = B^{ab,a\delta} = \frac{1}{4}p^2(p-1)^2\beta^4(q^{a\delta})^{p-2}(q^{ab})^{p-2} (\langle s^\delta s^b \rangle - \langle s^a s^b \rangle \langle s^a s^\delta \rangle) \quad (3.42)$$

e

$$R = B^{ab,\gamma\delta} = \frac{1}{4}p^2(p-1)^2\beta^4(q^{\gamma\delta})^{p-2}(q^{ab})^{p-2} (\langle s^a s^b s^\gamma s^\delta \rangle - \langle s^a s^b \rangle \langle s^\gamma s^\delta \rangle). \quad (3.43)$$

Lembremos que esses elementos são calculados usando a solução com simetria de réplicas. Assim, temos $\langle s^a s^b s^\gamma s^\delta \rangle = \int Dz \tanh^4 \beta \Xi_s$ e $\langle s^a s^b \rangle = \int Dz \tanh^2 \beta \Xi_s$, onde $\Xi_s = z\sqrt{\hat{q}} + h$.

Para calcular os autovalores utilizamos a equação de autovalores

$$\sum_{\gamma\delta} B^{ab,\gamma\delta} \nu_{\gamma\delta} = \lambda \nu_{ab} \quad a < b, \gamma < \delta. \quad (3.44)$$

O primeiro autovalor é obtido realizando o cálculo para o caso

(i) $\nu_{ab} = c \quad \forall (a, b)$:

$$\lambda^{(1)} = P + 2(n-2)Q + \frac{1}{2}(n-2)(n-3)R; \quad (3.45)$$

o segundo é obtido para o caso

(ii) $\nu_{ab} = c$ para a ou $b = \theta$

$\nu_{ab} = d$ para $a, b \neq \theta$

$$\lambda^{(2)} = P + Q(n-4) - R(n-3) \quad (3.46)$$

e o terceiro para o caso

(iii) $\nu_{\theta\mu} = c$

$\nu_{\theta a} = \nu_{\mu a} = d$ para $a \neq \theta, \mu$

$\nu_{ab} = e$ para $a, b \neq \theta, \mu$

$$\lambda^{(3)} = P - 2Q + R. \quad (3.47)$$

Os dois primeiros autovalores são sempre positivos enquanto que o terceiro é negativo em algumas regiões. Portanto, a curva de estabilidade é dada por $\lambda^{(3)} > 0$, ou seja,

$$1 - (p-1) \frac{\hat{q}}{q} \int_{-\infty}^{\infty} Dz \operatorname{sech}^4(\beta \Xi_s) > 0. \quad (3.48)$$

As curvas de estabilidade para $p = 2, 3$ e 10 são também apresentadas nas figuras 3.8, 3.9 e 3.10 (curva sólida).

3.3.3 Primeira quebra de simetria de réplicas

No primeiro passo de quebra de simetria de réplicas (1 QSR) as n réplicas são agrupadas em n/m grupos com m réplicas cada. Cada par de réplicas num mesmo grupo tem

sobreposição $q^{ab} = q_1$ e as réplicas pertencentes a grupos diferentes têm sobreposição $q^{ab} = q_0 < q_1$. Esses parâmetros são definidos por

$$q_0 = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i^a \rangle_T \langle s_i^b \rangle_T \right\rangle \quad a < b, \quad (3.49)$$

$$q_1 = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i^a \rangle_T^2 \right\rangle, \quad (3.50)$$

e

$$m = 1 - \sum_a P_a^2, \quad (3.51)$$

onde a notação $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre os acoplamentos e $\langle \dots \rangle_T$, a média térmica. Portanto, q_0 é a sobreposição entre um par de estados de equilíbrio diferentes, q_1 é a sobreposição de um estado de equilíbrio com ele próprio, e m é a probabilidade de encontrar duas cópias do sistema em dois estados diferentes (P_a é a probabilidade do estado s^a). No limite $n \rightarrow 0$, o parâmetro m é restrito ao intervalo $0 \leq m \leq 1$. Utilizando essa prescrição podemos escrever

$$\sum_{a < b} \hat{q} s^a s^b = \frac{1}{2} \left[\hat{q}_0 \left(\sum_a s^a \right)^2 + (\hat{q}_1 - \hat{q}_0) \sum_{k=0}^{n/m} \left(\sum_{a \in \text{grupo}} s^{ak} \right)^2 - \hat{q}_1 n \right], \quad (3.52)$$

$$\sum_{a < b} \hat{q}^{ab} q^{ab} = \frac{1}{2} \hat{q}_1 q_1 (m - 1) n + \frac{1}{2} \hat{q}_0 q_0 n (n - m), \quad (3.53)$$

$$\sum_{a < b} \hat{\epsilon}^a \hat{\epsilon}^b (q^{ab})^p = \frac{1}{2} \hat{\epsilon}^2 q_1^p (m - 1) n + \frac{1}{2} \hat{\epsilon}^2 q_0^p n (n - m). \quad (3.54)$$

Substituindo esses resultados na equação (3.27) obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \ln \langle \mathcal{N}^n \rangle &= \frac{1}{2} \hat{q}_1 q_1 (m-1)n + \frac{1}{2} \hat{q}_0 q_0 n(n-m) + \hat{\epsilon} \epsilon n + \frac{\hat{\epsilon}^2 n}{4} + \frac{1}{4} \hat{\epsilon}^2 q_1^p (m-1)n \\
&+ \frac{\hat{q}_1 n}{2} + \frac{1}{4} \hat{\epsilon}^2 q_0^p n(n-m) + \ln \sum_{s^a} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\hat{q}_0 \left(\sum_a s^a \right)^2 \right. \right. \\
&\left. \left. + (\hat{q}_1 - \hat{q}_0) \sum_{k=0}^{n/m} \left(\sum_{a \in \text{grupo}} s^{ak} \right)^2 \right] + h \hat{\epsilon} \sum_a s^a \right\}, \tag{3.55}
\end{aligned}$$

que após algumas manipulações algébricas é reescrita como

$$\begin{aligned}
\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{N} \ln \langle \mathcal{N}^n \rangle &= \frac{1}{2} \hat{q}_1 q_1 (m-1)n - \frac{1}{2} \hat{q}_0 q_0 n m + \hat{\epsilon} \epsilon n + \frac{\hat{\epsilon}^2 n}{4} + \frac{1}{4} \hat{\epsilon}^2 q_1^p (m-1)n \\
&+ \frac{\hat{q}_1 n}{2} - \frac{1}{4} \hat{\epsilon}^2 q_0^p n m + \frac{n}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz_0}{\sqrt{2\pi}} e^{-z_0^2/2} \ln \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz_1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z_1^2/2} \\
&\times \left[2 \cosh \left(-iz_1 \sqrt{\hat{q}_1 - \hat{q}_0} - iz_0 \sqrt{\hat{q}_0} + h \hat{\epsilon} \right) \right]^m, \tag{3.56}
\end{aligned}$$

onde tomamos o limite $n \rightarrow 0$. Dividindo por n e fazendo $\hat{q}_1 \rightarrow -\hat{\epsilon}^2 \hat{q}_1$ e $\hat{q}_0 \rightarrow -\hat{\epsilon}^2 \hat{q}_0$ obtemos finalmente

$$\begin{aligned}
\frac{S}{N} &= \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{nN} \ln \langle \mathcal{N}^n \rangle \\
&= \frac{\hat{\epsilon}^2 \hat{q}_1 q_1 (1-m)}{2} + \frac{\hat{\epsilon}^2 \hat{q}_0 q_0 m}{2} + \hat{\epsilon} \epsilon + \frac{\hat{\epsilon}^2}{4} + \frac{1}{4} \hat{\epsilon}^2 q_1^p (m-1) \\
&- \frac{\hat{\epsilon}^2 \hat{q}_1}{2} - \frac{1}{4} \hat{\epsilon}^2 q_0^p m + \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz_0}{\sqrt{2\pi}} e^{-z_0^2/2} \ln \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz_1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z_1^2/2} \\
&\times [\cosh(\hat{\epsilon} \Xi)]^m + \ln 2, \tag{3.57}
\end{aligned}$$

onde

$$\Xi = z_1 \sqrt{\hat{q}_1 - \hat{q}_0} + z_0 \sqrt{\hat{q}_0} + h. \tag{3.58}$$

Lembramos que a relação fundamental $1/T = \partial S / \partial \epsilon$ nos dá $\beta = \hat{\epsilon} = 1/T$. Como na seção anterior, a partir daqui, passamos a utilizar o ensemble canônico e considerar $\hat{\epsilon} = \beta$ como

dado do problema. Resolvendo as equações de ponto de sela $\partial S/\partial \hat{q}_1 = 0$, $\partial S/\partial \hat{q}_0 = 0$, $\partial S/\partial q_1 = 0$, $\partial S/\partial q_0 = 0$ e $\partial S/\partial m = 0$ obtemos

$$\hat{q}_k = \frac{p}{2} q_k^{p-1}, \quad k = 0, 1 \quad (3.59)$$

$$q_0 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 (\tanh \beta \Xi)_z^2, \quad (3.60)$$

$$q_1 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 (\tanh^2 \beta \Xi)_z \quad (3.61)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \beta^2 (p-1) (q_1^p - q_0^p) &= -\frac{1}{m^2} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 \ln \int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \cosh^m \beta \Xi \\ &+ \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 (\ln \cosh \beta \Xi)_z, \end{aligned} \quad (3.62)$$

onde

$$\langle \dots \rangle_z = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 (\dots) \cosh^m \beta \Xi}{\int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \cosh^m \beta \Xi}. \quad (3.63)$$

No limite $p \rightarrow \infty$, essas equações ficam bastante simplificadas:

$$q_0 = \tanh^2(\beta m h), \quad (3.64)$$

$$q_1 = 1 \quad (3.65)$$

e

$$m^2 \beta^2 = 4 [\ln 2 \cosh(\beta m h) - \beta m h^2 \tanh(\beta m h)]. \quad (3.66)$$

A seguir, vamos discutir os resultados da solução numérica das equações de ponto de sela para p geral.

Nas figuras 3.11, 3.12, 3.13 e 3.14, apresentamos a dependência de q_1 , q_0 e $q(SR)$ com a temperatura para $p = 2, 5, 10$ e ∞ e $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 . Podemos observar que para $p > 2$ e $h = 0$, $q_0 = q = 0$, indicando que os estados de equilíbrio são completamente descorrelacionados. Com a presença do campo magnético, correlações são induzidas entre os diferentes estados de forma que q_0 se torna diferente de zero. Para $p = 2$ e $h = 0$, q_1 e q_0 decrescem continuamente com T até atingir o valor zero quando $T = 1$. Para $p > 2$ e $h = 0$, q_1 vai a zero de maneira descontínua. A introdução do campo magnético vai suavizando a descontinuidade do regime 1 QSR para o SR até que ela desaparece para um certo valor de $h = h_c$. Nas figuras 3.9 e 3.10 podemos observar o valor de T para um dado h onde a descontinuidade surge e também o ponto tricrítico que nos dá o valor de h onde a descontinuidade desaparece para $p = 3$ e $p = 10$. Esse efeito do campo magnético sobre o parâmetro de ordem já tinha sido observado em um estudo do modelo de vidro de spin esférico com interações de p -spins [44].

Na figura 3.11, mostramos o comportamento de m como função de T para $p = 2$ e $h = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 . Para $h = 0$, m se torna igual a zero em $T = 0$ e $T = 1$, ou seja, nessas temperaturas a probabilidade de encontrar duas réplicas do sistema em dois estados diferentes é nula. Já para $h > 0$, m cresce suavemente e não chega a atingir o valor $m = 1$. Para $p > 2$ (veja figuras 3.12, 3.13 e 3.14), m cresce quase linearmente até atingir o valor $m = 1$ para campos magnéticos menores que h_c (podemos observar que nesse intervalo de h a transição entre os regimes de simetria de réplicas e de primeira quebra de simetria de réplicas é descontínua). Para $h > h_c$, m cresce até um certo valor $m = m_c \leq 1$ que depende do valor de p e de T (para valores de $h \geq h_c$ a transição é contínua).

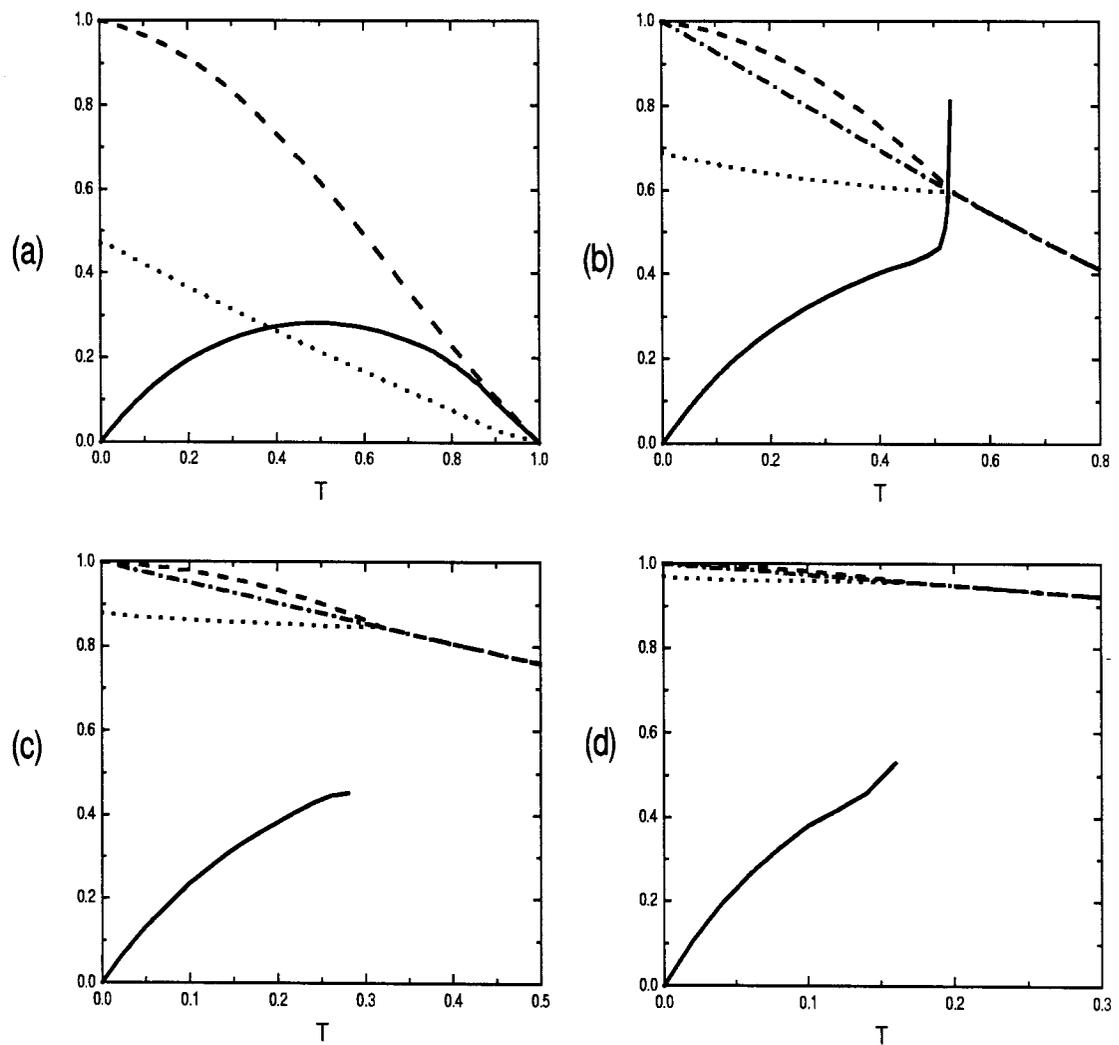


Figura 3.11: Os parâmetros m (curva sólida), q_1 (curva tracejada), q_0 (curva pontilhada) e q (curva ponto-tracejada) como função da temperatura para $p = 2$ e (a) $h = 0$; (b) $h = 0.5$; (c) $h = 1.0$ e (d) $h = 1.5$.

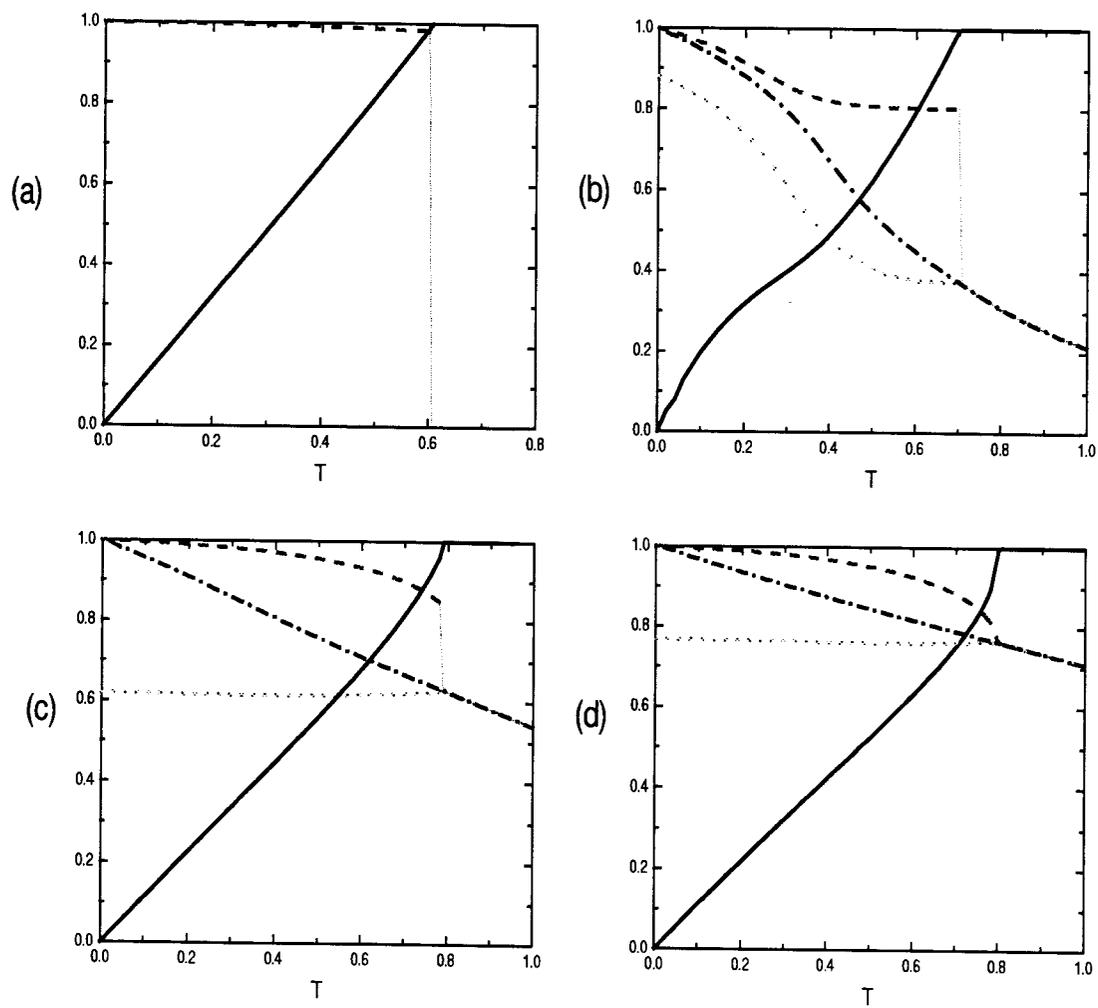


Figura 3.12: Os parâmetros m (curva sólida), q_1 (curva tracejada), q_0 (curva pontilhada) e q (curva ponto-tracejada) como função da temperatura para $p = 5$ e (a) $h = 0$; (b) $h = 0.5$; (c) $h = 1.0$ e (d) $h = 1.5$.

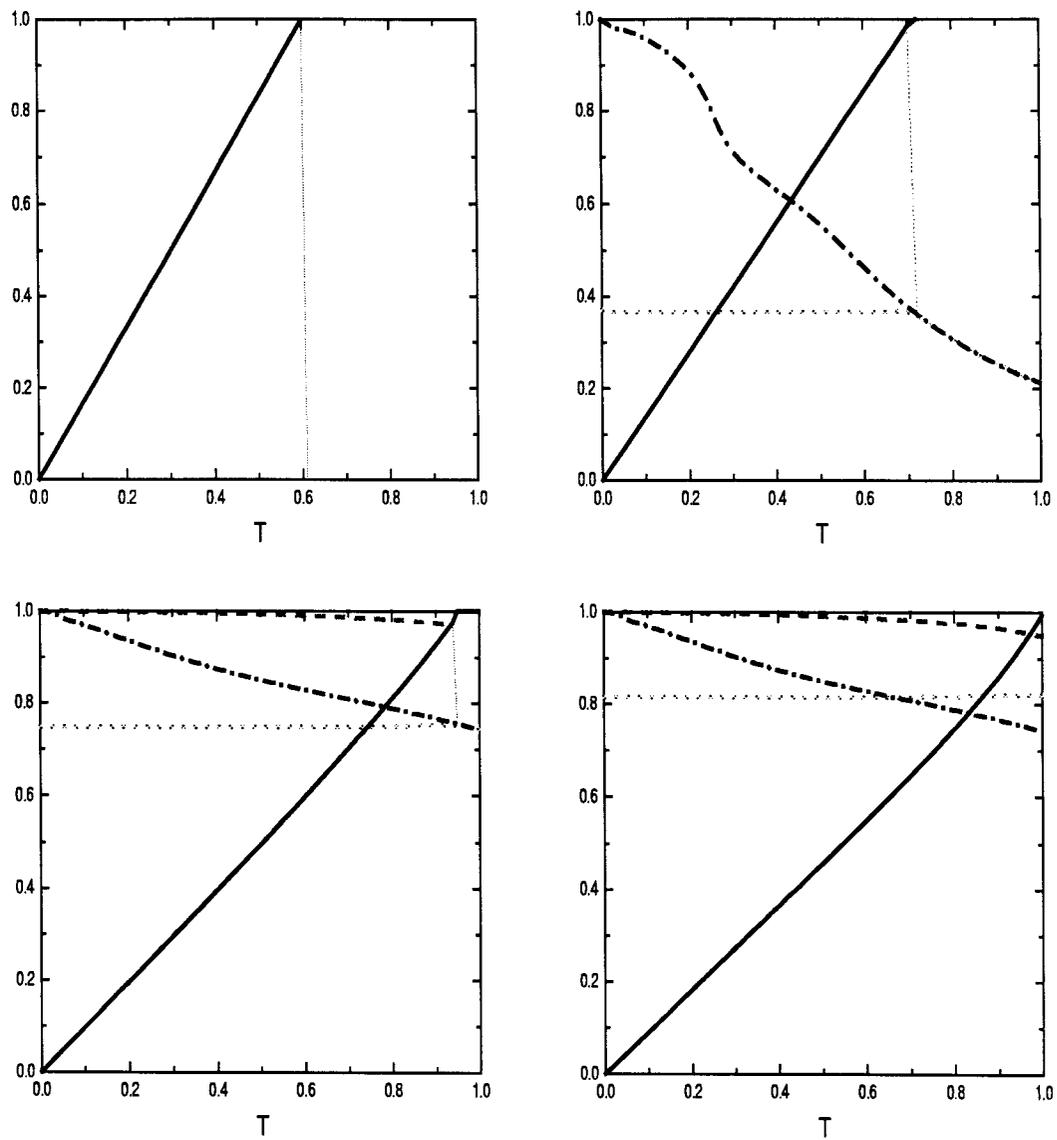


Figura 3.13: Os parâmetros m (curva sólida), q_1 (curva tracejada), q_0 (curva pontilhada) e q (curva ponto-tracejada) como função da temperatura para $p = 10$ e (a) $h = 0$; (b) $h = 0.5$; (c) $h = 1.5$ e (d) $h = 2.0$.

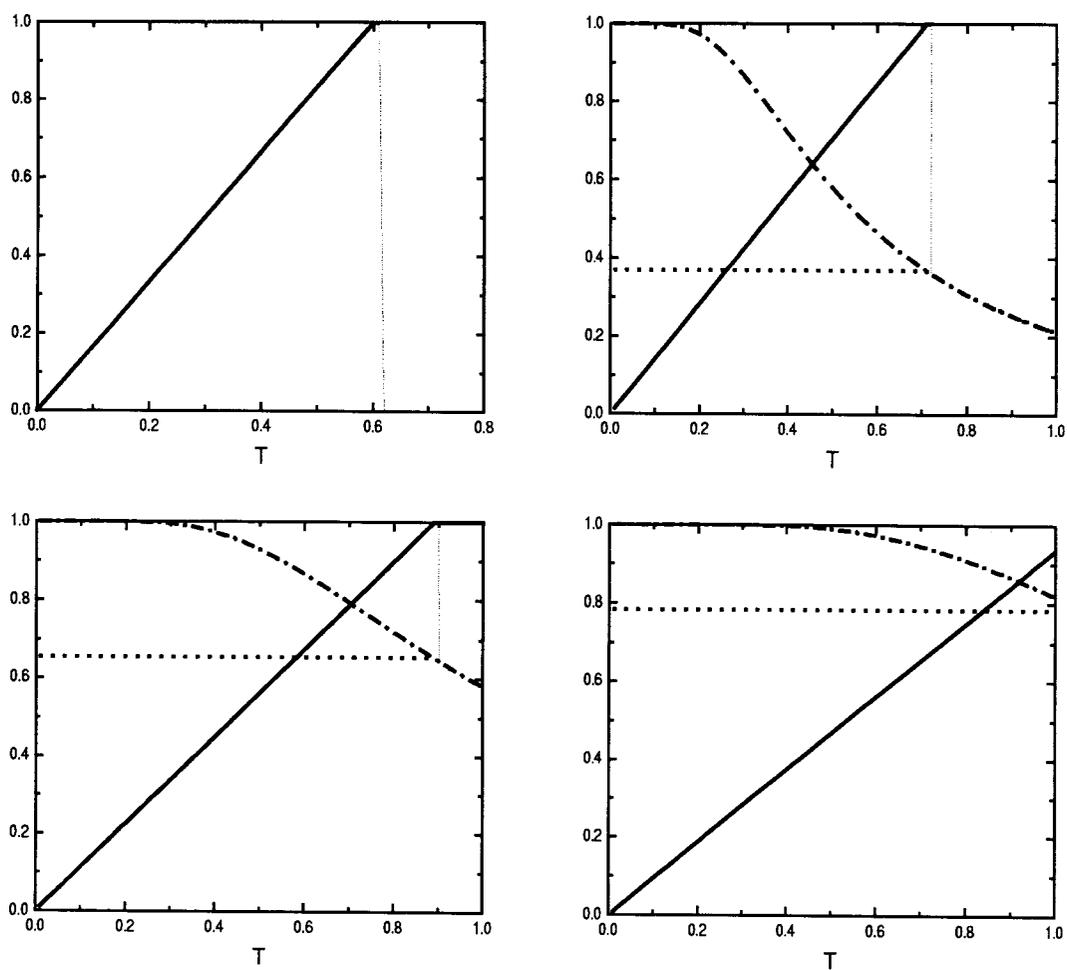


Figura 3.14: Os parâmetros m (curva sólida), q_1 (curva tracejada), q_0 (curva pontilhada) e q (curva ponto-tracejada) como função da temperatura para $p = \infty$ e (a) $h = 0$; (b) $h = 0.5$; (c) $h = 1.5$ e (d) $h = 2.0$. Lembremos que $q_1 = 1$ neste limite.

3.4 Linhas de Transição

Como vimos anteriormente, há dois tipos de transição entre os regimes de simetria de réplicas e primeira quebra de simetria de réplicas: uma transição contínua e outra descontínua. Lembremos que a linha de transição é sempre determinada pela condição de que as energias livres das duas soluções SR e 1 QSR tenham o mesmo valor. A transição será contínua se os parâmetros de ordem dessas soluções forem idênticos, isto é, $q_1 = q_0 = q$ (neste caso a igualdade das energias livres segue trivialmente). Por outro lado, a transição será descontínua se os parâmetros de ordem forem diferentes sobre a linha de transição.

3.4.1 Linha de transição contínua

A região do espaço de fase onde se dá a transição contínua entre os regimes de SR e 1 QSR é determinada resolvendo-se as equações para a solução 1 QSR no limite de $q_1 - q_0$ pequeno. Para isso, subtraímos a equação (3.60) da equação (3.61):

$$q_1 - q_0 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 \langle \tanh^2 \beta \Xi \rangle_z - \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 \langle \tanh \beta \Xi \rangle_z^2 \quad (3.67)$$

e mantemos os termos de ordem $(q_1 - q_0)^2$ da subtração acima. Precisamos então expandir os integrandos de forma que os termos em $(q_1 - q_0)$ fiquem explícitos. Expandindo termo a termo, obtemos os seguintes resultados auxiliares (nessas expressões ϵ e $\hat{\epsilon}$ são notações temporárias que nada têm a ver com a energia e seu multiplicador de Lagrange):

(i)

$$\begin{aligned} \cosh \beta \Xi &= \cosh(\epsilon + \beta \Xi') \\ &= \cosh \epsilon \cosh \beta \Xi' + \sinh \epsilon \sinh \beta \Xi' \\ &= \left(1 + \frac{\epsilon^2}{2!} + \frac{\epsilon^4}{4!}\right) \cosh \beta \Xi' + \left(\epsilon + \frac{\epsilon^3}{3!}\right) \sinh \beta \Xi' \\ &= \cosh \beta \Xi' \left(1 + \frac{\epsilon^2}{2} + \frac{\epsilon^4}{24} + \epsilon t + \frac{\epsilon^3 t}{6}\right), \end{aligned} \quad (3.68)$$

onde $\epsilon = \beta x^{1/2} z_1$, $x = \hat{q}_1 - \hat{q}_0$, $t = \tanh \beta \Xi'$ e $\Xi' = z_0 \sqrt{\hat{q}_0} + h$.

(ii)

$$\cosh^m \beta \Xi = \cosh^m \beta \Xi' \left\{ 1 + \epsilon t A_1 + \frac{1}{2} \epsilon^2 A_2 + \frac{1}{6} \epsilon^3 A_3 + \frac{1}{24} \epsilon^4 A_4 \right\}, \quad (3.69)$$

onde $A_1 = \binom{m}{1}$, $A_2 = \binom{m}{1} + 2t^2 \binom{m}{2}$, $A_3 = t \binom{m}{1} + 6t \binom{m}{2} + 6t^3 \binom{m}{3}$ e $A_4 = \binom{m}{1} + (8t^2 + 6) \binom{m}{2} + 36t^2 \binom{m}{3} + 24t^4 \binom{m}{4}$.

(iii)

$$\int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \cosh^m \beta \Xi = \cosh^m \beta \Xi' \left[1 + \frac{1}{2} \hat{\epsilon}^2 A_2 + \frac{1}{8} \hat{\epsilon}^4 A_4 \right], \quad (3.70)$$

onde $\hat{\epsilon} = \beta x^{1/2}$.

(iv)

$$\begin{aligned} \tanh \beta \Xi &= \frac{\tanh \epsilon + \tanh \beta \Xi'}{1 + \tanh \epsilon \tanh \beta \Xi'} = \frac{t + \tanh \epsilon}{1 + t \tanh \epsilon} = \frac{t + \epsilon - \epsilon^3/3}{1 + t\epsilon - t\epsilon^3/3} \\ &= t + \epsilon s^2 - \epsilon^2 t s^2 - \frac{\epsilon^3}{3} (3t^4 - 4t^2 + 1) + \frac{\epsilon^4 t}{3} (3t^4 - 5t^2 + 2), \end{aligned} \quad (3.71)$$

onde $s = \operatorname{sech} \beta \Xi'$.

(v)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \cosh^m \beta \Xi \tanh \beta \Xi &= \cosh^m \beta \Xi' \left\{ t + \hat{\epsilon}^2 \left[-ts^2(1 - A_1) + \frac{1}{2} t A_2 \right] \right. \\ &\quad \left. + \hat{\epsilon}^4 \left[t(3t^4 - 5t^2 + 2) - t A_1(3t^4 - 4t^2 + 1) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{3}{2} t s^2 A_2 + \frac{1}{2} s^2 A_3 + \frac{1}{8} t A_4 \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.72)$$

(vi)

$$\int_{-\infty}^{\infty} Dz_1 \cosh^m \beta \Xi \tanh^2 \beta \Xi = \cosh^m \beta \Xi' \left\{ t^2 + \hat{\epsilon}^2 \left[s^2(1 - 3t^2 + 2t^2 A_1) + \frac{1}{2} t^2 A_2 \right] \right. \\ \left. + \hat{\epsilon}^4 \left[(15t^6 - 30t^4 + 17t^2 - 2) + t^2 A_1(-12t^4 + 20t^2 - 8) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3}{2} s^2 A_2(1 - 3t^2) + ts^2 A_3 + \frac{1}{8} t^2 A_4 \right] \right\}. \quad (3.73)$$

Daí,

$$\langle \tanh \beta \Xi \rangle_z^2 = t^2 + 2\hat{\epsilon}^2 t^2 s^2 (A_1 - 1) + \hat{\epsilon}^4 \left[2t^2(3t^4 - 5t^2 + 2) - 2t^2 A_1(3t^4 - 4t^2 + 1) \right. \\ \left. - t^2 s^2 A_1 A_2 - 2t^2 s^2 A_2 + ts^2 A_3 + t^2 s^4 (A_1 - 1)^2 \right], \quad (3.74)$$

e

$$\langle \tanh^2 \beta \Xi \rangle_z = t^2 + \hat{\epsilon}^2 \left[s^2(1 - 3t^2 + 2t^2 A_1) \right] + \hat{\epsilon}^4 \left[s^2 A_2(1 - 3t^2) - s^2 t^2 A_1 A_2 \right. \\ \left. + t^2 A_1(-12t^4 + 20t^2 - 8) + ts^2 A_3 + 15t^6 - 30t^4 + 17t^2 - 2 \right]. \quad (3.75)$$

Finalmente, usando

$$\hat{\epsilon}^2 = \frac{\beta^2 p}{2} \left[(p-1)(q_1 - q_0) q_0^{p-2} + \frac{1}{2} (p-1)(p-2)(q_1 - q_0)^2 q_0^{p-3} \right] \quad (3.76)$$

e

$$\hat{\epsilon}^4 = \frac{\beta^4 p^2}{4} \left[(p-1)^2 (q_1 - q_0)^2 q_0^{2(p-4)} + (p-1)^2 (p-2)(q_1 - q_0)^3 q_0^{2(p-5)} \right. \\ \left. + \frac{1}{4} (p-1)^2 (p-2)^2 (q_1 - q_0)^4 q_0^{2(p-6)} \right] \quad (3.77)$$

obtemos

$$q_1 - q_0 = \frac{2q_0^2}{\beta^2(p-1)\hat{q}_0} \frac{B_1}{B_2}, \quad (3.78)$$

onde

$$B_1 = 1 - \beta^2(p-1) \frac{\hat{q}_0}{q_0} \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 \operatorname{sech}^4 \beta \Xi' \quad (3.79)$$

e

$$B_2 = [p-2 + 4\beta^2(p-1)\hat{q}_0(3-2m)] \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 \operatorname{sech}^4 \beta \Xi' - 2\beta^2(p-1)\hat{q}_0(8-5m) \int_{-\infty}^{\infty} Dz_0 \operatorname{sech}^6 \beta \Xi'. \quad (3.80)$$

Na transição contínua temos $q_1 - q_0 \rightarrow 0$, de modo que a linha de transição é obtida tomando $B_1 = 0$. Esta linha coincide com a linha de estabilidade da solução com simetria de réplicas.

Para obter o valor de m na linha de transição, expandimos a equação (3.62) no limite $q_1 - q_0$ pequeno e mantemos os termos de ordem $(q_1 - q_0)^3$, o que equivale a $\hat{\epsilon}^6$. O mesmo procedimento é adotado na eq. (3.60). O resultado desejado é obtido subtraindo-se essas duas equações. Como as expressões resultantes dessas expansões são muito longas apresentamos apenas o resultado final da subtração:

$$\begin{aligned} & (q_0 - t^2) + \beta^2 p(p-1)t^2 s^2(1-m)q_0^{p-2}(q_1 - q_0) \\ & + t^2 s^2(1-m) \left\{ \frac{\beta^2 p(p-1)(p-2)q_0^{p-3}}{2} - \frac{\beta^4 p^2(p-1)^2 q_0^{2(p-4)}}{4} \right. \\ & \left. \times [(5m-7)t^2 - 3m + 5] \right\} (q_1 - q_0)^2 = 0. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Usando as condições $B_1 = 0$ e $q_0 \rightarrow q$ obtemos

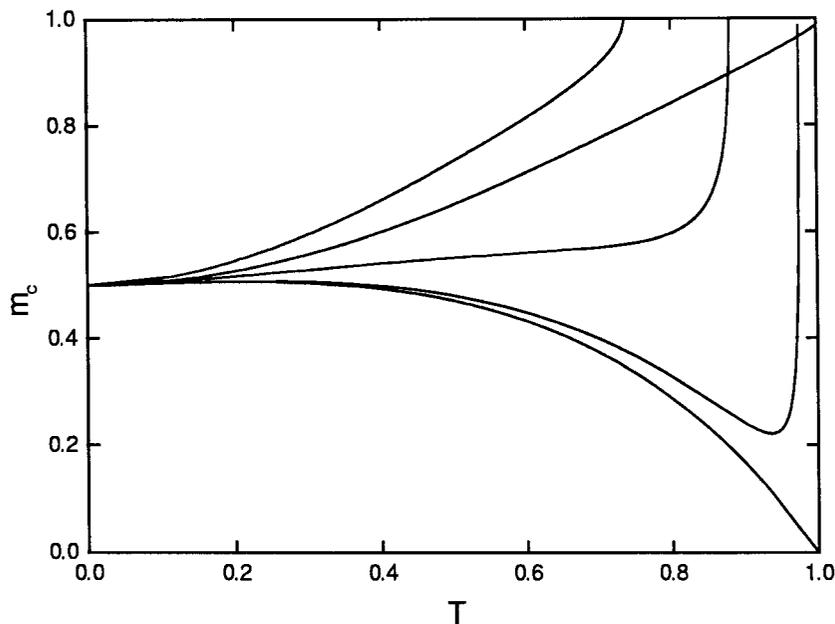


Figura 3.15: Parâmetro m na linha de transição contínua para $p = 2, 2.01, 2.1, 10$ e 3 (de baixo para cima).

$$1 - m_c = -\frac{B_2}{B_3} \quad (3.82)$$

onde

$$B_3 = 12(p-2) \int_{-\infty}^{\infty} Dz \operatorname{sech}^2[\beta \Xi_s] \tanh^2[\beta \Xi_s] + 2\beta^2(p-1)\hat{q} \int_{-\infty}^{\infty} Dz \operatorname{sech}^6[\beta \Xi_s], \quad (3.83)$$

com $\Xi_s = z\sqrt{\hat{q}}$ e \hat{q} dado pela equação (3.30). Como m é sempre menor ou igual a 1, a linha de transição contínua deve terminar exatamente no ponto em que $m = 1$, ou seja, no ponto tricrítico. De acordo com a equação (3.82), isto se dá quando $B_2 = 0$. Na figura 3.15, apresentamos o comportamento de m_c na linha de transição para $p = 2, 2.01, 2.1, 3$ e 10 . Para $p > 2$ temos $m = 1$ no ponto tricrítico. Para $p = 2$, a transição é sempre contínua.

3.4.2 Linha de transição descontínua

Neste caso, a linha de transição deve ser determinada igualando-se diretamente as energias livres das soluções de SR e 1 QSR. Isso introduziria uma equação a mais no problema e poderíamos, então, introduzir uma nova incógnita, digamos T , a temperatura onde ocorre a transição para um dado h . Felizmente, neste problema esse procedimento padrão não se faz necessário. De fato, notando que se fizermos $m = 1$ a equação (3.57) torna-se independente de q_1 e \hat{q}_1 (embora $q_1 \neq q_0$) e a equação para q_0 resulta em $q_0 = q$ temos simplesmente $f_{1QSR}(m = 1) = f_{SR}$. Assim, para h fixo, a temperatura em que se dá a transição descontínua é obtida resolvendo-se as equações de ponto de sela da solução 1 QSR com $m = 1$ e $q_0 = q$. As linhas de transição descontínua para $p = 3$ e $p = 10$ são mostradas nas figuras 3.9 e 3.10 (linha ponto-tracejada).

Nas figuras 3.16, 3.17 e 3.18 apresentamos os valores de T_t , h_t e $(1 - q_t)$ no ponto tricrítico (onde as duas linhas de transição se encontram) como função de p . Podemos observar que h_t cresce com $\sqrt{p \ln p}$, T_t com $\sqrt{p / \ln p}$ e $(1 - q_t)$ decresce com $1/p\sqrt{\ln p}$.

Concluindo, neste capítulo realizamos um estudo completo da termodinâmica do modelo de vidro de spin de Ising com interações de ordem alta na presença de um campo magnético externo. Investigamos a solução com simetria de réplicas, assim como a região no espaço de parâmetros (T, h, p) onde esta solução é estável. Efetuamos os cálculos para o primeiro passo de quebra de simetria de réplicas e analisamos a transição entre os dois regimes. Observamos que existem dois tipos de transição: uma contínua e outra descontínua. Para $p > 2$, a introdução do campo magnético leva à suavização da transição descontínua observada para $h = 0$, conduzindo finalmente a uma transição contínua através do surgimento de um ponto tricrítico.

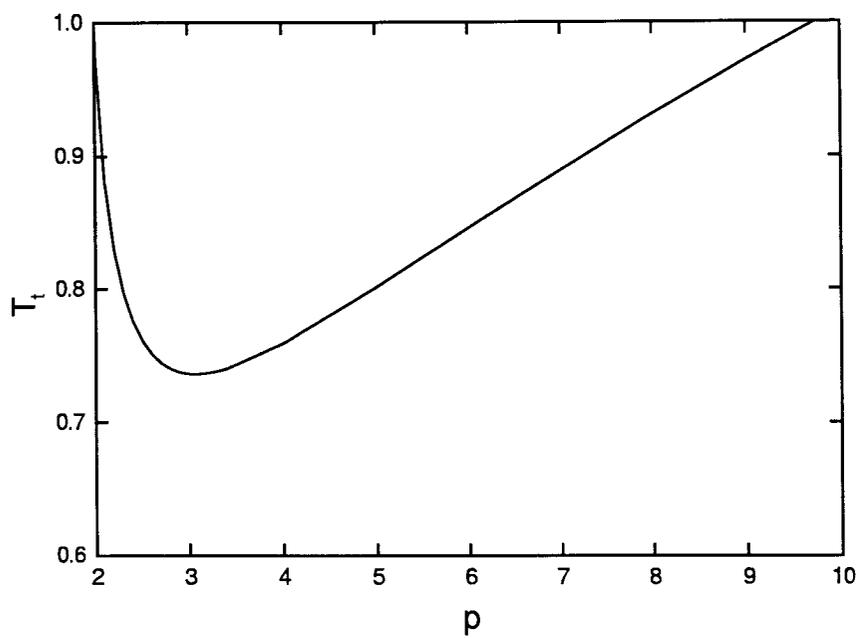


Figura 3.16: A temperatura do ponto tricrítico como função de p . Apenas os valores de p inteiros têm significado físico.

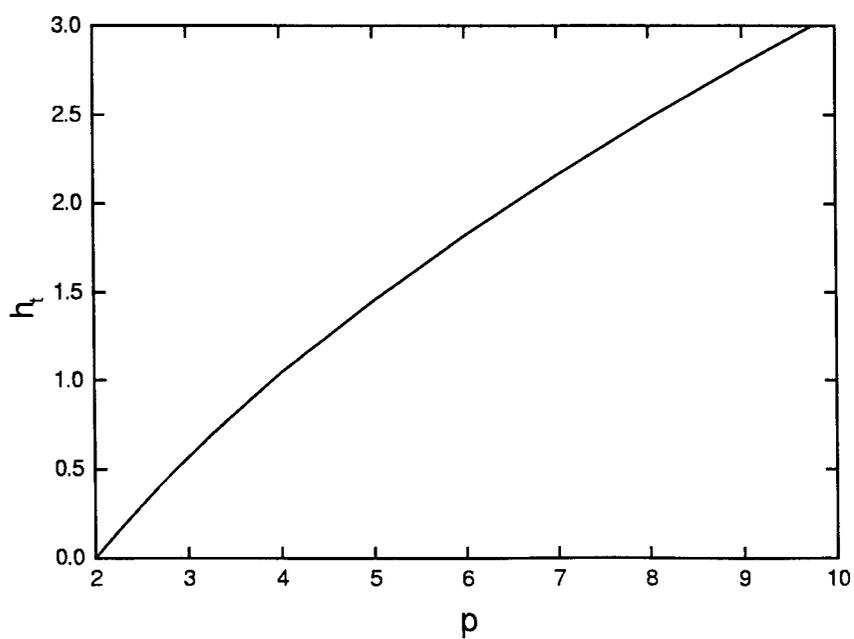


Figura 3.17: O campo magnético no ponto tricrítico como função de p . Apenas os valores inteiros de p têm significado físico.

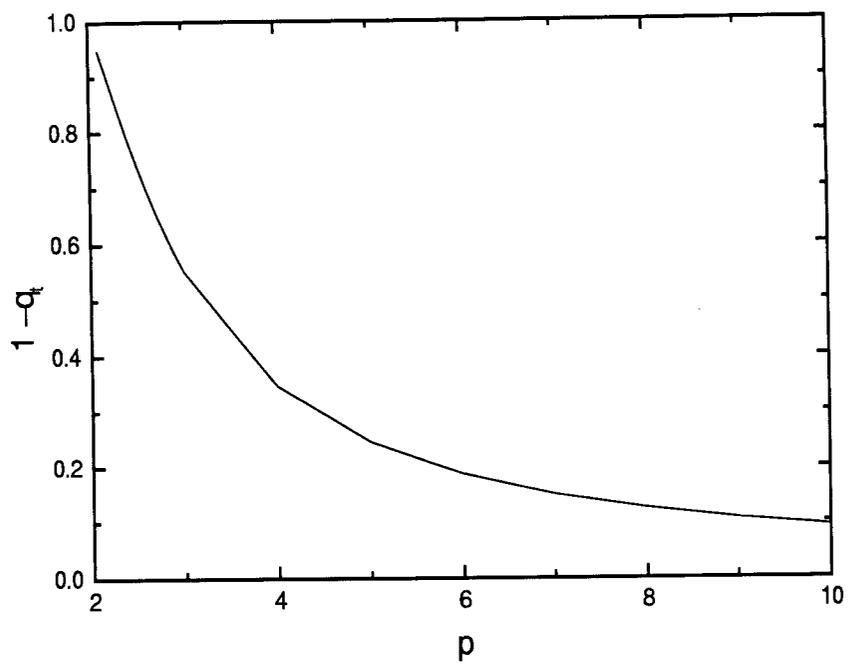


Figura 3.18: $(1 - q_t)$ no ponto tricrítico como função de p . Apenas os valores inteiros de p têm significado físico.

Capítulo 4

Replicadores com interações de ordem alta

Até agora, estivemos estudando modelos de Ising cujo interesse, sob o ponto de vista biológico, pode ser justificado interpretando-se uma configuração de spins como o genoma dos organismos e a dinâmica de inversão de spins como um passeio adaptativo, dentro do contexto de Kauffman [5, 6], conforme discutido na Introdução.

Neste capítulo, vamos investigar um modelo de spins contínuos $x_i \in [0, \infty]$ para $i = 1, \dots, N$ com ‘magnetização’ fixa

$$\sum_i x_i = N, \quad (4.1)$$

cuja interpretação biológica é muito mais direta. Mais explicitamente, os sítios i representam as espécies e x_i a concentração de espécies do tipo i em uma população infinita. Essas concentrações evoluem no tempo de acordo com o conjunto de equações diferenciais não-lineares

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = x_i(f_i - \bar{f}), \quad i = 1, \dots, N \quad (4.2)$$

onde f_i é o valor da adaptação (‘fitness’) ou produtividade da espécie i e \bar{f} é a adaptação média da população, isto é, $\bar{f} = \sum_i x_i f_i$. Note que o vínculo (4.1) estabelece uma competição efetiva entre as espécies.

Esse tipo de formulação é conhecido como modelo de replicadores, tendo sido utilizado em diferentes áreas da ciência tais como sociobiologia, ecologia, evolução pré-biótica e genética, entre outros. Um caso particularmente simples ocorre quando as adaptações f_i são derivadas de um funcional adaptação $f(x_1, \dots, x_N)$, ou seja, $f_i = \partial f / \partial x_i$. Neste caso, pode-se mostrar facilmente que a dinâmica (4.2) maximiza o funcional f e que os estados estacionários da dinâmica são pontos fixos apenas [45].

No modelo de replicadores proposto por Diederich e Oppen [40, 41, 46] o funcional adaptação introduz interações aleatórias entre pares de espécies,

$$f_2 = -H_2 = -\frac{1}{2} \sum_{ij} c_{ij} x_i x_j, \quad (4.3)$$

onde os acoplamentos $c_{ij} (i \neq j)$ são variáveis aleatórias estatisticamente independentes distribuídas de acordo com a distribuição de probabilidade gaussiana:

$$P(c_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp\left(-\frac{Nc_{ij}^2}{2}\right) \quad i \neq j. \quad (4.4)$$

Como justificativa para considerarmos interações aleatórias, podemos invocar o fato de que as interações entre as espécies em um ecossistema real são tão complexas e pouco entendidas que tomá-las como variáveis aleatórias parece ser a decisão que melhor reflete nossa falta de conhecimento. Por outro lado, as auto-interações c_{ii} não são aleatórias, sendo dadas por $c_{ii} = u \forall i$. O parâmetro u tem o objetivo de limitar o crescimento e a supremacia de uma única espécie: para valores grandes de u , o crescimento de todas as espécies é fortemente limitado pelo fator ux_i^2 e, neste caso, as interações aleatórias não diagonais tornam-se desprezíveis de modo que a configuração de equilíbrio é

$$x_i^{eq} \cong 1 \quad \forall i \quad (u \gg 1). \quad (4.5)$$

Já para valores pequenos de u , as interações entre os pares desempenham o papel principal

e poucas espécies prevalecerão, ou seja, $x_i^{eq} = 0$ para uma grande parte das espécies. Assim, u atua como uma pressão de cooperação. Ainda, esse parâmetro é essencial para a obtenção de um limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, não-trivial.

Neste capítulo, vamos generalizar o modelo de Diederich e Oppen [40, 41] para permitir interações de multi-espécies ou de ordem alta. Esse tipo de interação surge quando a intensidade do acoplamento entre um dado par de espécies depende da concentração de outras espécies. Nesse sentido essa generalização parece-nos bastante natural e, como veremos a seguir, leva a mudanças qualitativas no comportamento do sistema em relação ao caso quadrático estudado por Diederich e Oppen.

Consideremos o funcional adaptação

$$-f_p = \mathcal{H}_p(x) = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq N} c_{i_1 i_2 \dots i_p} x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_p} + u \sum_i x_i^p, \quad (4.6)$$

onde os parâmetros $c_{i_1 i_2 \dots i_p}$ são variáveis aleatórias com distribuição Gaussiana

$$\mathcal{P}(c_{i_1 i_2 \dots i_p}) = \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p!}} \exp \left[-\frac{(c_{i_1 i_2 \dots i_p})^2 N^{p-1}}{p!} \right], \quad (4.7)$$

e $u \geq 0$ é o parâmetro de auto-interação. Lembremos que $x_i \in [0, \infty)$, $i = 1, \dots, N$ e $\sum_i x_i = N$.

4.1 Energia Livre

Nosso objetivo é caracterizar os mínimos globais (estado fundamental) de \mathcal{H}_p (ou seja, os máximos globais do funcional adaptação f_p) no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Para isso, vamos calcular a densidade de energia livre do sistema,

$$\tilde{f} = -(1/N\beta) \langle \ln Z \rangle, \quad (4.8)$$

onde

$$Z = \int_0^\infty \prod_i dx_i \delta \left(N - \sum_i x_i \right) \exp \left\{ -\beta \left[u \sum_i x_i^p + \sum_{i_1 < \dots < i_p} c_{i_1 \dots i_p} x_{i_1} \dots x_{i_p} \right] \right\} \quad (4.9)$$

é a função de partição e $\langle \dots \rangle$ denota a média sobre os acoplamentos. Estaremos interessados apenas no limite de temperatura nula, $\beta \rightarrow \infty$, pois neste caso podemos garantir que apenas os estados que minimizam \mathcal{H}_p contribuem para a função de partição. O n -ésimo momento de Z , necessário para a aplicação do método das réplicas, é dado por

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle &= \int_0^\infty \left[\prod_{ia} dx_i^a \right] \int_{-\infty}^\infty \frac{d\tilde{Q}^a}{2\pi} \exp \left\{ i \sum_a \tilde{Q}^a \left[N - \sum_i x_i^a \right] - \beta u \sum_a \sum_i (x_i^a)^p \right\} \\ &\quad \times \left\langle \exp \left\{ -\beta \sum_a \sum_{i_1 < \dots < i_p} c_{i_1 \dots i_p} x_{i_1}^a \dots x_{i_p}^a \right\} \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde $a = 1, \dots, n$ é o índice de réplicas. Para efetuar a média sobre os acoplamentos utilizamos a distribuição Gaussiana (4.7) obtendo

$$\langle \dots \rangle = \exp \left\{ \frac{\beta^2 p!}{4N^{p-1}} \sum_{i_1 < \dots < i_p} \left[\sum_a x_{i_1}^a \dots x_{i_p}^a \right]^2 \right\}. \quad (4.11)$$

Expandindo o termo quadrático e mantendo apenas termos de ordem N no argumento da exponencial, reescrevemos essa equação como

$$\langle \dots \rangle = \exp \left\{ \frac{\beta^2 p!}{4N^{p-1}} \left[\frac{1}{p!} \sum_a \left(\sum_i (x_i^a)^2 \right)^p + \frac{2}{p!} \sum_{a < b} \left(\sum_i x_i^a x_i^b \right)^p \right] \right\}. \quad (4.12)$$

Definindo os parâmetros de ordem $q^{ab} = (1/N) \sum_i x_i^a x_i^b$ e $r^a = (1/N) \sum_i (x_i^a)^2$, e substituindo em (4.10), encontramos

$$\langle Z^n \rangle = \int_{-\infty}^\infty \prod_a \frac{d\tilde{r}^a dr^a}{2\pi/N} \exp \left\{ iN \sum_a \tilde{r}^a r^a + \frac{\beta^2 N}{4} \sum_a (r^a)^p \right\}$$

$$\begin{aligned}
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{a<b} \frac{d\tilde{q}^{ab} dq^{ab}}{2\pi/N} \exp \left\{ iN \sum_{a<b} \tilde{q}^{ab} q^{ab} + \frac{\beta^2 N}{2} \sum_{a<b} (q^{ab})^p \right\} \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{Q}^a}{2\pi} \exp \left\{ iN \sum_a \tilde{Q}^a \right\} \\
& \times \prod_i \int_0^{\infty} \prod_a dx_i^a \exp \left\{ -i \sum_a \tilde{r}^a (x_i^a)^2 - i \sum_{a<b} \tilde{q}^{ab} x_i^a x_i^b \right. \\
& \left. - i \sum_a \tilde{Q}^a x_i^a - \beta u \sum_a (x_i^a)^p \right\}.
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Fazendo $\hat{r}^a = i\tilde{r}^a$, $\hat{q}^{ab} = i\tilde{q}^{ab}$, $\hat{Q}^a = i\tilde{Q}^a$,

$$\begin{aligned}
\langle Z^n \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_a \frac{d\hat{r}^a dr^a}{2\pi i/N} \exp \left\{ N \sum_a \hat{r}^a r^a + \frac{\beta^2 N}{4} \sum_a (r^a)^p \right\} \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{a<b} \frac{d\hat{q}^{ab} dq^{ab}}{2\pi i/N} \exp \left\{ N \sum_{a<b} \hat{q}^{ab} q^{ab} + \frac{\beta^2 N}{2} \sum_{a<b} (q^{ab})^p \right\} \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\hat{Q}^a}{2\pi i} \exp \left\{ N \sum_a \hat{Q}^a \right\} \left\{ \int_0^{\infty} \prod_a dx^a \exp \left\{ - \sum_a \hat{r}^a (x^a)^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \beta u \sum_a (x^a)^p - \sum_{a<b} \hat{q}^{ab} x^a x^b - \sum_a \hat{Q}^a x^a \right\} \right\}^N.
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Efetutando a integração de ponto de sela no limite $N \rightarrow \infty$, temos finalmente

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \ln \langle Z^n \rangle &= \sum_a \hat{r}^a r^a + \frac{\beta^2}{4} \sum_a (r^a)^p + \sum_{a<b} \hat{q}^{ab} q^{ab} + \frac{\beta^2}{2} \sum_{a<b} (q^{ab})^p + \sum_a \hat{Q}^a \\
& + \ln \int_0^{\infty} \prod_a dx^a \exp \left\{ - \sum_a \hat{r}^a (x^a)^2 - \beta u \sum_a (x^a)^p \right. \\
& \left. - \sum_{a<b} \hat{q}^{ab} x^a x^b - \sum_a \hat{Q}^a x^a \right\}.
\end{aligned} \tag{4.15}$$

4.1.1 Simetria de Réplicas

Utilizando a hipótese de simetria de réplicas, ou seja, fazendo $q^{ab} = q$, $\hat{q}^{ab} = \hat{q}$, $r^a = r$ e $\hat{r}^a = \hat{r}$, a eq. (4.15) reduz-se a

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \ln \langle Z^n \rangle &= \hat{r} r n + \frac{\beta^2 r^p n}{4} + \frac{\hat{q} q n (n-1)}{2} + \frac{\beta^2 q^p n (n-1)}{4} + \hat{Q} n \\
&+ \ln \int_0^\infty \prod_a dx^a \exp \left\{ -\frac{\hat{q}}{2} \left(\sum_a x^a \right)^2 \right. \\
&\left. - \beta u \sum_a (x^a)^p - \left(\hat{r} - \frac{\hat{q}}{2} \right) \sum_a (x^a)^2 - \hat{Q} \sum_a x^a \right\}. \quad (4.16)
\end{aligned}$$

Fazendo uso da identidade

$$e^{-\hat{q}(\sum_a x^a)^2/2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2 - iz\sqrt{\hat{q}}\sum_a x^a} \quad (4.17)$$

encontramos

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \ln \langle Z^n \rangle &= \hat{r} r n + \frac{\beta^2 r^p n}{4} + \frac{\hat{q} q n (n-1)}{2} + \frac{\beta^2 q^p n (n-1)}{4} + \hat{Q} n \\
&+ \ln \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \int_0^\infty \prod_a dx^a \exp \left\{ -iz\sqrt{\hat{q}} \sum_a x^a - \beta u \sum_a (x^a)^p \right. \\
&\left. - \left(\hat{r} - \frac{\hat{q}}{2} \right) \sum_a (x^a)^2 - \hat{Q} \sum_a x^a \right\}. \quad (4.18)
\end{aligned}$$

Dividindo por n , tomando o limite $n \rightarrow 0$ e fazendo $\hat{q} \rightarrow -\hat{q}$ obtemos a energia livre:

$$\begin{aligned}
-\beta \tilde{f} &= \hat{r} r + \frac{\beta^2 r^p}{4} + \frac{\hat{q} q}{2} - \frac{\beta^2 q^p}{4} + \hat{Q} \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} Dz \ln \left\{ \int_0^\infty dx \exp \left[-\beta u x^p - \left(\hat{r} + \frac{\hat{q}}{2} \right) x^2 - \left(\hat{Q} + z\sqrt{\hat{q}} \right) x \right] \right\}. \quad (4.19)
\end{aligned}$$

Derivando a equação acima em relação a r e q , obtemos as equações de ponto de sela

$$\hat{r} = -\frac{\beta^2 p r^{p-1}}{4} \quad (4.20)$$

e

$$\hat{q} = \frac{\beta^2 p q^{p-1}}{2}. \quad (4.21)$$

Substituindo na equação (4.19), encontramos

$$\begin{aligned} -\beta \tilde{f} &= -\frac{\beta^2(p-1)(r^p - q^p)}{4} + \beta \hat{Q} \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} Dz \ln \left\{ \int_0^{\infty} dx \exp \left[-\beta u x^p + \frac{\beta^2 p (r^{p-1} - q^{p-1})}{4} x^2 \right. \right. \\ &\left. \left. - \beta \left(\hat{Q} + \frac{z \sqrt{p} q^{(p-1)/2}}{\sqrt{2}} \right) x \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde fizemos também $\hat{Q} \rightarrow \beta \hat{Q}$. Definindo $y = \beta(r - q)$ e tomando os limites $\beta \rightarrow \infty$ e $r \rightarrow q$, obtemos que $r^p - q^p = p y q^{p-1} / \beta$ e $r^{p-1} - q^{p-1} = (p-1) y q^{p-2} / \beta$. Substituindo em (4.22) e dividindo por β :

$$\begin{aligned} -\tilde{f} &= -\frac{p(p-1) y q^{p-1}}{4} + \hat{Q} \\ &+ \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} Dz \ln \left\{ \int_0^{\infty} dx \exp \left[-\beta u x^p + \frac{\beta p (p-1) q^{p-2} y x^2}{4} \right. \right. \\ &\left. \left. - \beta \left(\hat{Q} + \frac{z \sqrt{p} q^{(p-1)/2}}{\sqrt{2}} \right) x \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Tomando $\hat{Q} = \sqrt{p} q^{(p-1)/2} \Delta / \sqrt{2}$ obtemos

$$\begin{aligned} -\tilde{f} &= -\frac{p(p-1) y q^{p-1}}{4} + \frac{\sqrt{p} q^{(p-1)/2} \Delta}{\sqrt{2}} \\ &+ \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} Dz \ln \left\{ \int_0^{\infty} dx \exp \left[-\beta u x^p + \frac{\beta p (p-1) q^{p-2} y x^2}{4} \right. \right. \\ &\left. \left. - \frac{\beta \sqrt{p} q^{(p-1)/2} (\Delta + z) x}{\sqrt{2}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Resolvendo as equações de ponto de sela $\partial \tilde{f} / \partial y = 0$, $\partial \tilde{f} / \partial q = 0$ e $\partial \tilde{f} / \partial \Delta = 0$ encontramos

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \langle x^2 \rangle, \quad (4.25)$$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \langle x \rangle \quad (4.26)$$

e

$$(p-1)q = (p-2) \int_{-\infty}^{\infty} Dz \langle x^2 \rangle - \frac{\sqrt{2}q^{-(p-3)/2}}{y\sqrt{p}} \int_{-\infty}^{\infty} Dzz \langle x \rangle, \quad (4.27)$$

onde

$$\langle \dots \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\int_0^{\infty} dx \dots e^{-\beta \Xi}}{\int_0^{\infty} dx e^{-\beta \Xi}} \quad (4.28)$$

e

$$\Xi = ux^p - \frac{p(p-1)q^{p-2}yx^2}{4} + \frac{\sqrt{p}q^{(p-1)/2}(\Delta+z)x}{\sqrt{2}}. \quad (4.29)$$

No limite $\beta \rightarrow \infty$ podemos calcular as integrais em x através do método de ponto de sela, de modo que apenas o valor de x que minimiza Ξ , denotado por $x_s(z)$, contribui para a integral. Assim sendo, a densidade de energia do estado fundamental é escrita como

$$\epsilon_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \tilde{f} = u \int_{-\infty}^{\gamma} Dz x_s^p(z) - \frac{pyq^{p-1}}{2}, \quad (4.30)$$

onde $x_s(z)$ é a solução positiva de

$$\frac{1}{2}p(p-1)q^{p-2}x_s - pux_s^{p-1} - \left(\frac{pq^{p-1}}{2}\right)^{1/2}(\Delta+z) = 0 \quad (4.31)$$

e

$$\gamma = (p-2)q^{(p-1)/2} \left(\frac{1}{u}\right)^{1/(p-2)} \left(\frac{y}{2}\right)^{(p-1)/(p-2)} \left(\frac{p}{2}\right)^{p/2(p-2)} - \Delta \quad (4.32)$$

é o valor máximo de z para que tenhamos uma solução positiva para $x_s(z)$. Para valores maiores de z temos $x_s(z) = 0$. As equações de ponto de sela no limite $\beta \rightarrow \infty$ são então escritas como

$$1 = \int_{-\infty}^{\gamma} Dz x_s(z), \quad (4.33)$$

$$q = \int_{-\infty}^{\gamma} Dz x_s^2(z) \quad (4.34)$$

e

$$yp|p-1| = \int_{-\infty}^{\gamma} Dz \frac{1}{|yq^{p-2}/2 - ux_s^{p-2}(z)|}. \quad (4.35)$$

Para $p = 2$ podemos resolver a equação (4.31) analiticamente e, para u grande, podemos obter uma solução para as equações de ponto de sela:

$$q \approx 1 + \frac{1}{4u^2}, \quad (4.36)$$

$$y \approx \frac{1}{2u} + \frac{1}{8u^3} \quad (4.37)$$

e

$$\Delta \approx 2u \left(1 - \frac{3}{8u^2} \right). \quad (4.38)$$

Inspirados nessa solução, vamos supor que para p qualquer e u grande os parâmetros de ordem sejam dados pelas expressões

$$q = 1 + \frac{B_q}{u^2}, \quad (4.39)$$

$$y = \frac{1}{u} \left(A_y + \frac{B_y}{u^2} \right), \quad (4.40)$$

$$\Delta = -u \left(A_\Delta - \frac{B_\Delta}{u^2} \right) \quad (4.41)$$

e

$$x_s = 1 + \frac{A_x}{u} + \frac{B_x}{u^2}. \quad (4.42)$$

Substituindo essas expressões nas equações de ponto de sela e na equação para $x_s(z)$ encontramos finalmente

$$q \approx 1 + \frac{1}{2u^2 p(p-1)^2}, \quad (4.43)$$

$$y \approx \frac{1}{up(p-1)} \left[1 + \frac{1}{4u^2(p-1)} \right] \quad (4.44)$$

e

$$\Delta \approx -u(2p)^{1/2} \left[1 - \frac{p+1}{4u^2 p(p-1)} \right]. \quad (4.45)$$

Para valores finitos de u devemos resolver as equações de ponto de sela numericamente. Na figura 4.1, apresentamos o comportamento da energia do estado fundamental ϵ_0 como função da pressão de cooperação u para $p = 2, 3, 5, 7$ e 10 . Como esperado, para grandes valores de u temos $\epsilon_0 \approx u$. Já para pequenos valores de u , apenas pares de espécies com grandes acoplamentos negativos ($-c_{kl} \gg 1$) contribuem e suas concentrações são de ordem 1 (isto é, x_k e x_l são de ordem N) levando à divergência de ϵ_0 no limite de $u \rightarrow 0$. Com o aumento na ordem das interações, p , esse regime altamente competitivo (umas poucas espécies sobrevivem apenas) é praticamente eliminado, embora devemos notar que $\epsilon_0 \rightarrow -\infty$ quando $u \rightarrow 0$ para todos os valores de $p \geq 2$. De fato, com o aumento de p fica cada vez mais difícil encontrar um acoplamento $c_{ijkl\dots}$ negativo e muito grande de forma que algumas das espécies envolvidas i, j, k, l, \dots não estejam também interagindo entre elas através de acoplamentos positivos. Isso acaba por retardar o regime competitivo mencionado acima. Na figura 4.2, apresentamos o parâmetro de ordem q co-

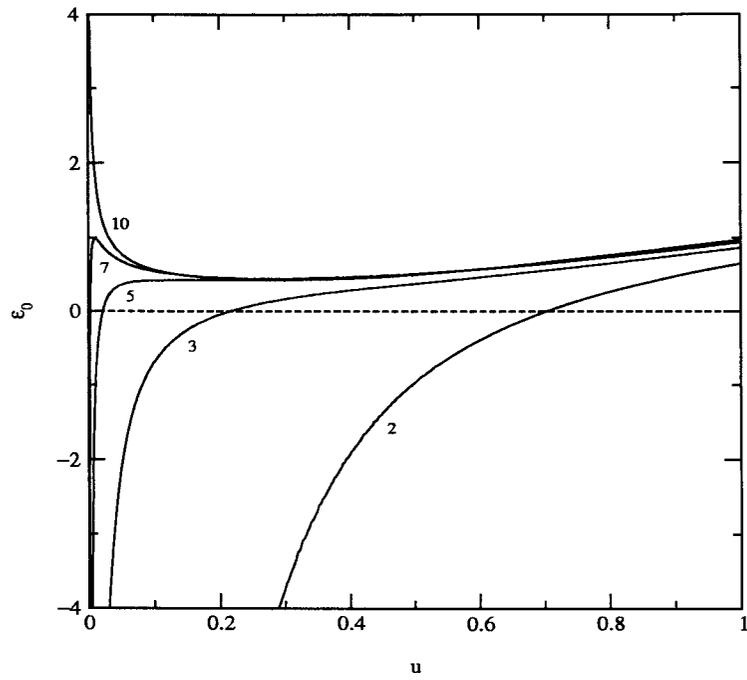


Figura 4.1: Energia do estado fundamental ϵ_0 em função de u para $p = 2, 3, 5, 7$ e 10 .

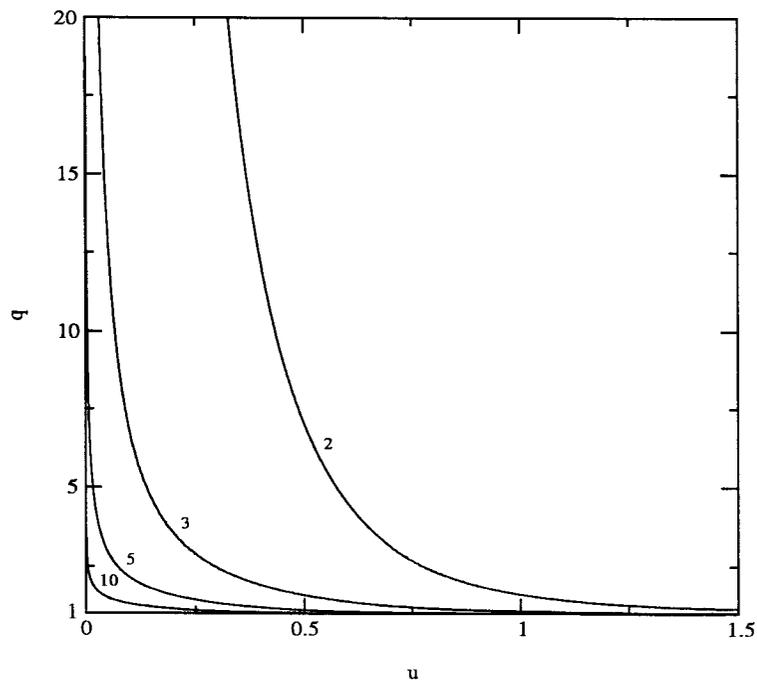


Figura 4.2: O parâmetro de ordem q em função de u para $p = 2, 3, 5$ e 10 .

mo função de u para $p = 2, 3, 5$ e 10 . O valor de q tende a 1 com o aumento de u . Neste regime temos um grande número de espécies sobreviventes, com concentrações $x \approx 1$. O valor de q se torna grande para pequenos valores de u , evidenciando a existência de poucas espécies com uma grande concentração de indivíduos. Com o aumento na ordem das interações, q decresce mais rapidamente com u , indicando que um pequeno valor de u já permite a sobrevivência de um grande número de espécies.

4.1.2 Estabilidade da Solução com Simetria de Réplicas

Para obter a região em que a solução com simetria de réplicas é estável, precisamos calcular os autovalores da matriz $\partial(-\tilde{f})/\partial q^{ab} \partial q^{\gamma\delta}$ e nos assegurar de que eles sejam negativos. Note que isso, de fato, corresponde a supor que a solução com simetria de réplicas maximiza a energia livre \tilde{f} (note que na seção 3.3.2 buscamos autovalores positivos pois a solução com simetria de réplicas minimiza a entropia). Essa inversão deve-se ao limite $n \rightarrow 0$ que torna a dimensão da matriz de segundas derivadas negativa. Começamos substituindo (4.20) e (4.21) em (4.15) a fim de reduzir o número de variáveis. Daí

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{N} \ln \langle Z^n \rangle \\ &= -\frac{\beta^2(p-1)}{4} \sum_a (r^a)^p - \frac{\beta^2(p-1)}{2} \sum_{a<b} (q^{ab})^p + \beta \sum_a \hat{Q}^a \\ &\quad + \ln \int_0^\infty \prod_a dx^a e^{H_0}, \end{aligned} \quad (4.46)$$

onde

$$H_0 = -\beta u \sum_a (x^a)^p + \frac{\beta^2 p}{4} \sum_a (r^a)^{(p-1)} (x^a)^2 + \frac{\beta^2 p}{2} \sum_{a<b} (q^{ab})^{(p-1)} x^a x^b - \beta \sum_a \hat{Q}^a x^a. \quad (4.47)$$

Seguindo o mesmo procedimento utilizado na seção 3.3.2, vamos derivar a equação (4.46) em relação a $q^{\gamma\delta}$, obtendo

$$\frac{\partial G}{\partial q^{\gamma\delta}} = -\frac{\beta^2 p(p-1)(q^{\gamma\delta})^{(p-2)}}{2} \left\{ q^{\gamma\delta} - \frac{\int_0^\infty \prod_a dx^a x^\gamma x^\delta e^{H_0}}{\int_0^\infty \prod_a dx^a e^{H_0}} \right\}. \quad (4.48)$$

Derivando mais uma vez, agora em relação a q^{ab} :

$$\frac{\partial^2 G}{\partial q^{ab} \partial q^{\gamma\delta}} = -\frac{\beta^2 p(p-1)(q^{\gamma\delta})^{(p-2)}}{2} \left\{ \delta_{ab,\gamma\delta} - \frac{\beta^2 p(p-1)(q^{ab})^{(p-2)}}{2} \left[\langle x^a x^b x^\gamma x^\delta \rangle - \langle x^a x^b \rangle \langle x^\gamma x^\delta \rangle \right] \right\}, \quad (4.49)$$

onde

$$\langle x^a x^b x^\gamma x^\delta \rangle = \frac{\int_0^\infty \prod_a dx^a x^a x^b x^\gamma x^\delta e^{H_0}}{\int_0^\infty \prod_a dx^a e^{H_0}} \quad (4.50)$$

e

$$\langle x^a x^b \rangle = \frac{\int_0^\infty \prod_a dx^a x^a x^b e^{H_0}}{\int_0^\infty \prod_a dx^a e^{H_0}}. \quad (4.51)$$

Os três diferentes tipos de elementos de matriz são

$$\begin{aligned} P &= B^{ab,ab} \\ &= -\frac{\beta^2 p(p-1)(q^{ab})^{(p-2)}}{2} \left\{ 1 - \frac{\beta^2 p(p-1)(q^{ab})^{(p-2)}}{2} \left[\langle (x^a)^2 (x^b)^2 \rangle - \langle x^a x^b \rangle^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} Q &= B^{ab,a\delta} \\ &= \frac{\beta^4 p^2 (p-1)^2 (q^{a\delta})^{(p-2)} (q^{ab})^{(p-2)}}{4} \left[\langle (x^a)^2 x^b x^\delta \rangle - \langle x^a x^b \rangle \langle x^a x^\delta \rangle \right], \end{aligned} \quad (4.53)$$

$$\begin{aligned} R &= B^{ab,\gamma\delta} \\ &= \frac{\beta^4 p^2 (p-1)^2 (q^{\gamma\delta})^{(p-2)} (q^{ab})^{(p-2)}}{4} \left[\langle x^a x^b x^\gamma x^\delta \rangle - \langle x^a x^b \rangle \langle x^\gamma x^\delta \rangle \right], \end{aligned} \quad (4.54)$$

de forma que os autovalores da matriz de segundas derivadas (4.49) são escritos como (veja seção 3.3.2)

$$\lambda^{(1)} = P + 2(n-2)Q + \frac{1}{2}(n-2)(n-3)R, \quad (4.55)$$

$$\lambda^{(2)} = P + Q(n-4) - R(n-3) \quad (4.56)$$

e

$$\lambda^{(3)} = P - 2Q + R. \quad (4.57)$$

Os dois primeiros autovalores são sempre negativos enquanto que o terceiro é positivo em algumas regiões. Portanto, a curva de estabilidade é dada por $\lambda^{(3)} = \lambda < 0$, ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\beta^2 p(p-1)(q^{ab})^{(p-2)}}{2} \left\{ -1 + \frac{\beta^2 p(p-1)}{2} \left[(q^{ab})^{(p-2)} (\langle (x^a)^2 (x^b)^2 \rangle - \langle x^a x^b \rangle^2) \right. \right. \\ \left. \left. - 2(q^{a\delta})^{(p-2)} (\langle (x^a)^2 x^b x^\delta \rangle - \langle x^a x^b \rangle \langle x^a x^\delta \rangle) \right. \right. \\ \left. \left. + (q^{\gamma\delta})^{(p-2)} (\langle x^a x^b x^\gamma x^\delta \rangle - \langle x^a x^b \rangle \langle x^\gamma x^\delta \rangle) \right] \right\} < 0. \quad (4.58) \end{aligned}$$

Utilizando simetria de réplicas esta expressão reduz-se a

$$\frac{\beta^2 p(p-1)q^{p-2}}{2} \left\{ -1 + \frac{\beta^2 p(p-1)q^{p-2}}{2} [\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2]^2 \right\} < 0, \quad (4.59)$$

onde

$$\langle x \rangle = \frac{\int_0^\infty dx x e^{H_1}}{\int_0^\infty dx e^{H_1}}, \quad (4.60)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty dx x^2 e^{H_1}}{\int_0^\infty dx e^{H_1}} \quad (4.61)$$

e

$$\overline{\langle \dots \rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \langle \dots \rangle \quad (4.62)$$

com

$$H_1 = -\beta u x^p + \frac{\beta p(p-1) y q^{p-2}}{4} x^2 - \beta \left[\hat{Q} + \frac{\sqrt{p} q^{(p-1)/2} z}{\sqrt{2}} \right] x. \quad (4.63)$$

Calculando as integrais (4.60) e (4.61) obtemos

$$\langle x \rangle = x_s(z) - \frac{u(p-2)(x_s(z))^{p-3}}{2\beta p(p-1)[u(x_s(z))^{p-2} - yq^{p-2}/2]^2} \quad (4.64)$$

e

$$\langle x^2 \rangle = (x_s(z))^2 - \frac{u(p-1)(x_s(z))^{p-2} - yq^{p-2}/2}{\beta p(p-1)[u(x_s(z))^{p-2} - yq^{p-2}/2]^2}. \quad (4.65)$$

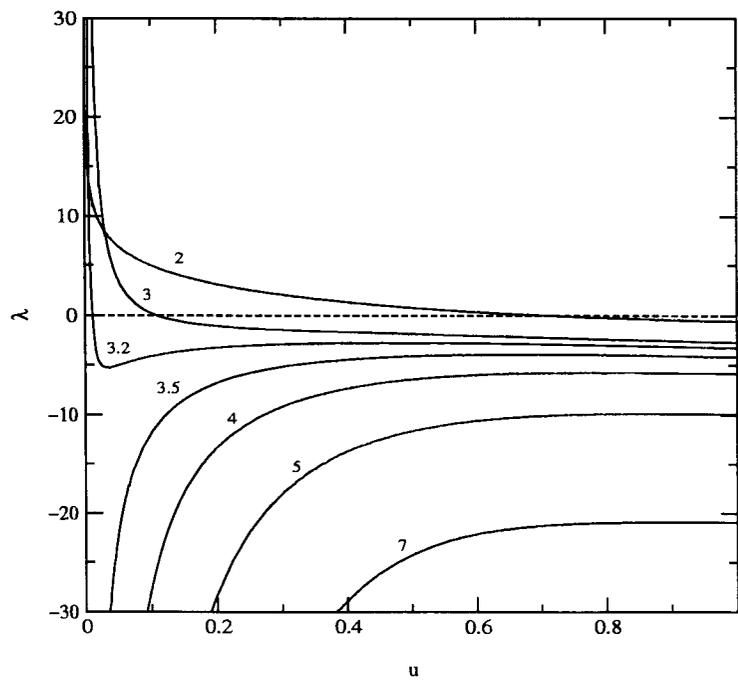


Figura 4.3: Curva de estabilidade para $p = 2, 3, 3.2, 3.5, 4, 5$ e 7 .

Efetuada o cálculo de (4.59) para $\beta \rightarrow \infty$ obtemos a expressão final para a estabilidade do sistema:

$$\lambda = \frac{p(p-1)q^{p-2}}{2} \left\{ -1 + \frac{q^{p-2}}{2p(p-1)} \int_{-\infty}^{\gamma} Dz \frac{1}{[u(x_s(z))^{p-2} - yq^{p-2}/2]^2} \right\}. \quad (4.66)$$

Na figura 4.3, apresentamos a curva da estabilidade como função de u para $p = 2, 3, 3.2, 3.5, 4, 5$ e 7 . Para $p = 2$ a solução é instável para u menor que $1/\sqrt{2} \approx 0.707$. Para $p = 3$ o valor de u em que a solução se torna instável diminui para $u \approx 0.106$ e para $p \geq 4$ a solução é instável apenas em $u = 0$. Assim, a utilização da solução com simetria de réplicas para descrever o estado fundamental de \mathcal{H}_p parece-nos perfeitamente justificável.

4.1.3 Distribuição de probabilidade das concentrações

Nesta seção, vamos abordar a seguinte questão: escolhendo aleatoriamente uma das N espécies, digamos espécie k , qual é a probabilidade de que sua concentração x_k seja igual ao valor ξ ? Obviamente essa probabilidade é dada por

$$\mathcal{P}_k(\xi) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\int_0^\infty \prod_i dx_i \delta(x_k - \xi) e^{-\beta \mathcal{H}_p(\vec{x})} \delta(\sum_i x_i - N)}{\int_0^\infty \prod_i dx_i e^{-\beta \mathcal{H}_p(\vec{x})} \delta(\sum_i x_i - N)}, \quad (4.67)$$

ou seja, integramos a distribuição de Gibbs sobre todos os valores de concentração das espécies diferentes da espécie k . Como todas as espécies são equivalentes podemos escrever

$$\mathcal{P}(\xi) = \mathcal{P}_k(\xi) = \frac{1}{N} \sum_k \mathcal{P}_k(\xi). \quad (4.68)$$

Do ponto de vista prático, vamos calcular (4.68) introduzindo o Hamiltoniano efetivo $\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}_p + h \sum_i \delta(x_i - \xi)$ de forma que

$$\mathcal{P}(\xi) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left. \frac{\partial \langle \ln Z_{eff} \rangle}{\partial h} \right|_{h=0}, \quad (4.69)$$

onde

$$Z_{eff} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i dx_i \delta(\sum_i x_i - N) e^{-\beta \mathcal{H}_{eff}}. \quad (4.70)$$

Daí, podemos efetuar os cálculos seguindo o mesmo procedimento das seções anteriores.

Definido

$$-\beta f_{eff} = \frac{1}{N} \langle \ln Z_{eff} \rangle \quad (4.71)$$

obtemos

$$\begin{aligned} -\beta f_{eff} &= -\frac{\beta p(p-1) y q^{p-1}}{4} + \beta \hat{Q} \\ &+ \int Dz \ln \left\{ \int_0^{\infty} dx' \exp \left\{ -\beta u x'^p + \frac{\beta p(p-1) y q^{p-2} x'^2}{4} \right. \right. \\ &\left. \left. - \beta \left[\hat{Q} + z \sqrt{\frac{p q^{p-1}}{2}} \right] x' - \beta h \delta(x' - \xi) \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Derivando em relação a h e tomando o limite $h \rightarrow 0$ encontramos

$$P(\xi) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\exp \left\{ -\beta u \xi^p - \frac{\beta p(p-1) y q^{p-2}}{4} \xi^2 - \beta \left[\hat{Q} + z \sqrt{\frac{p q^{p-1}}{2}} \right] \xi \right\}}{\int_0^{\infty} dx' \exp \left\{ -\beta u x'^p - \frac{\beta p(p-1) y q^{p-2}}{4} x'^2 - \beta \left[\hat{Q} + z \sqrt{\frac{p q^{p-1}}{2}} \right] x' \right\}}. \quad (4.73)$$

A distribuição acumulada correspondente é dada por

$$\begin{aligned} C(x) &= \int_0^x P(\xi) d\xi \\ &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} Dz \frac{\int_0^x d\xi \exp \left\{ -\beta u \xi^p - \frac{\beta p(p-1) y q^{p-2}}{4} \xi^2 - \beta \left[\hat{Q} + z \sqrt{\frac{p q^{p-1}}{2}} \right] \xi \right\}}{\int_0^{\infty} dx' \exp \left\{ -\beta u x'^p - \frac{\beta p(p-1) y q^{p-2}}{4} x'^2 - \beta \left[\hat{Q} + z \sqrt{\frac{p q^{p-1}}{2}} \right] x' \right\}}. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Efetuando o limite $\beta \rightarrow \infty$ encontramos

$$C(x) = \int_{\gamma}^{\infty} Dz + \int_{-\infty}^{\gamma} Dz \Theta[x - x_s(z)], \quad (4.75)$$

onde $\Theta(x) = 1$ para $x > 0$ e 0 no outro caso. Observamos que o primeiro termo nos dá a fração de espécies extintas, $C(0)$. No limite $u \rightarrow \infty$ temos $\gamma \rightarrow \infty$ e $x_s(z) = 1$. Portanto, neste limite $C(x) = \Theta(x - 1)$ para qualquer valor de p , ou seja, todas as espécies estão presentes no ecossistema e possuem a mesma concentração de indivíduos $x_i = 1 \forall i$.

Na figura 4.4, apresentamos a distribuição acumulada C como função das concentrações x para $p = 2$ e $u = 0.4, 0.7, 1.0$ e 1.7 . Podemos observar que para $u = 0.4$ apenas uma pequena parcela das espécies sobrevive (menos de 20%), enquanto que para $u = 1.7$ quase todas as espécies estão presentes no ecossistema. Além disso, podemos verificar claramente o efeito do aumento da pressão de cooperação u sobre o ecossistema.

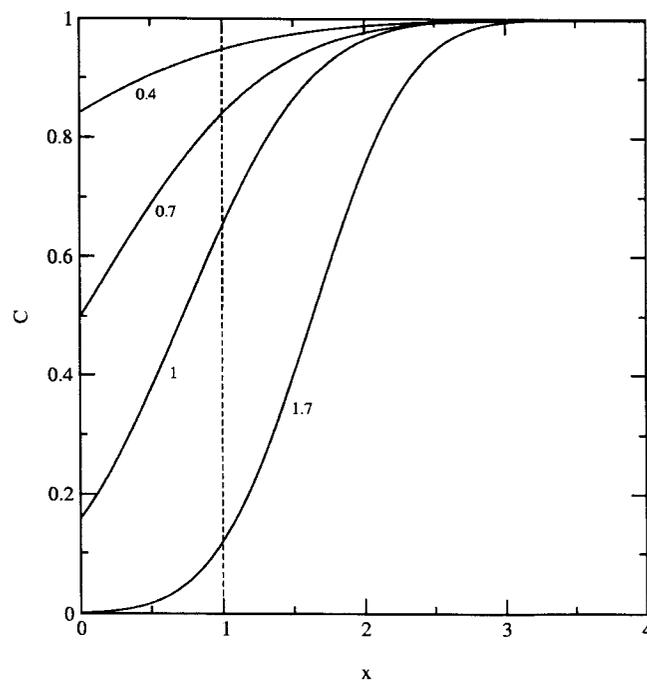


Figura 4.4: Distribuição acumulada C como função da concentração x para $p = 2$ e $u = 0.4, 0.7, 1.0$ e 1.7 .

Na figura 4.5, apresentamos a distribuição acumulada C como função das concentrações x para $p = 3$ e $u = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8$ e 1.5 . Observamos, como na figura anterior, que o número de espécies sobreviventes aumenta com u . Uma característica que surge com as interações de ordem mais alta é que $C(x)$ se mantém constante e igual a $C(0)$ até um determinado valor de $x = x_t = x_s(\gamma)$, ou seja, há um limite inferior para a concentração das espécies sobreviventes, o que impede a existência de espécies raras no ecossistema. Como $x_t = 0$ para qualquer valor finito de u quando $p = 2$, o valor não-nulo de x_t é um efeito das interações de ordem alta. Como esperado, $x_t \rightarrow \infty$ para $u = 0$, desde que $C(x) = 1$ para qualquer valor de x neste limite. Com o aumento de u , o valor de x_t diminui e para $u \rightarrow \infty$ encontramos

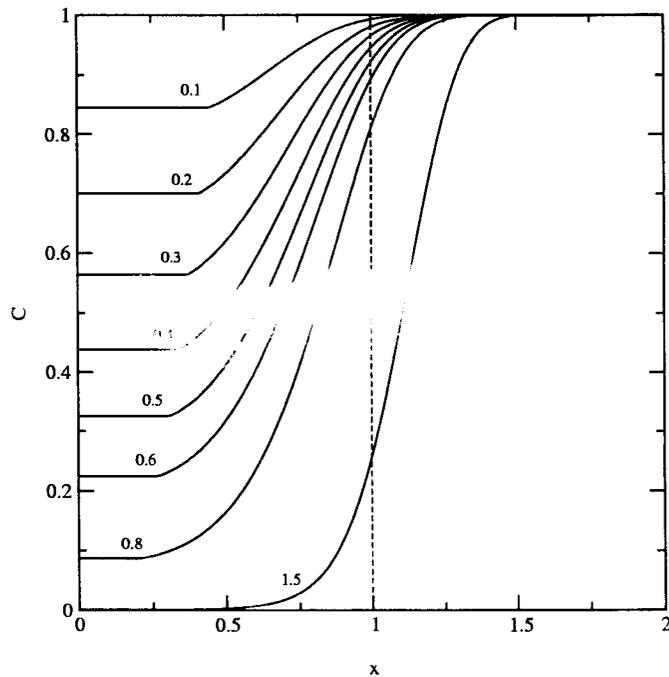


Figura 4.5: Distribuição acumulada C como função da concentração x para $p = 3$ e $u = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8$ e 1.5 .

Na figura 4.6, apresentamos x_t como função de u para $p = 3, 5, 7, 9, 11$ e 13 . Como podemos visualizar, o valor de x_t cresce com p e diminui com o aumento de u , ou seja, quando consideramos interações de ordem mais alta a população torna-se mais estável, pois as espécies sobreviventes possuem uma concentração mínima de indivíduos que se torna maior com o incremento de p .

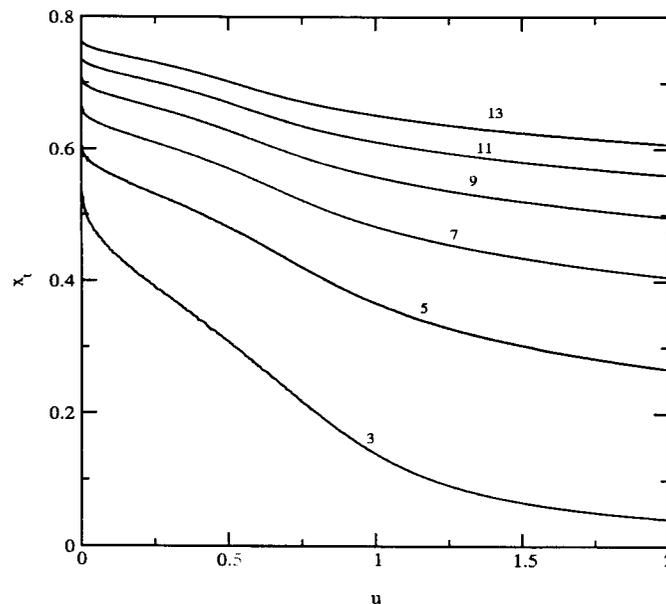


Figura 4.6: Limite inferior para a concentração das espécies x_t como função de u para $p = 3, 5, 7, 9, 11$ e 13 .

Na figura 4.7, apresentamos a fração de espécies extintas como função de u para $p = 2, 3, 5, 7$ e 9 . Para valor fixo de u , a fração de espécies extintas diminui com o aumento de p . Para valores grandes de u encontramos

$$C(0) \approx \frac{1}{(4\pi p)^{1/2}} \frac{1}{u} \exp(-pu^2), \quad (4.77)$$

que demonstra que o crescimento na ordem das interações entre as espécies torna o sistema mais cooperativo.

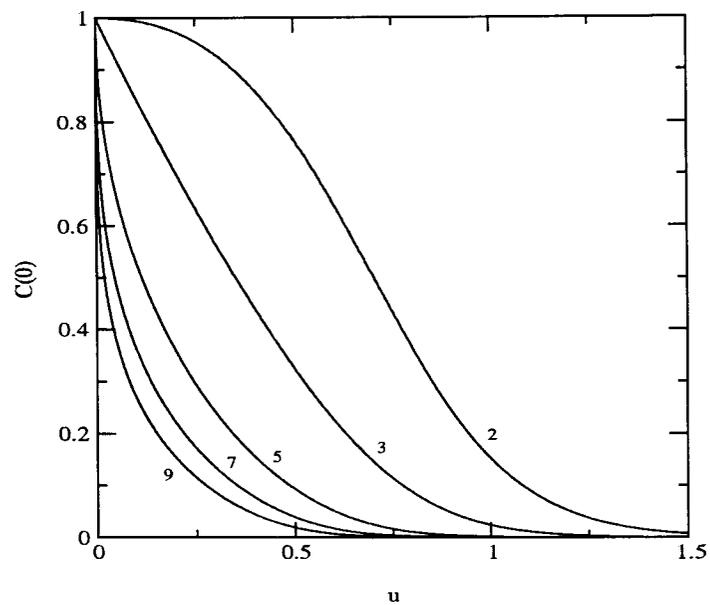


Figura 4.7: Fração de espécies extintas $C(u)$ em função de u para $p = 2, 3, 5, 7$ e 9 .

Concluindo este capítulo, enfatizamos que nossos resultados descrevem apenas as propriedades de equilíbrio da população. Algumas questões interessantes, tais como se a ausência de espécies raras no equilíbrio implica na estabilidade do ecossistema contra a invasão de espécies raras, ou se o efeito de uma perturbação diminuindo a concentração de uma única espécie para um valor abaixo de x_t conduz ao colapso de todo o ecossistema, podem ser investigadas apenas através de um estudo da dinâmica do ecossistema.

Capítulo 5

Conclusão

O estudo de algumas propriedades da função adaptação ou relevo de energia é de grande importância para o entendimento da dinâmica de sistemas replicadores. Kauffman [5] propôs uma família de funções adaptação que pode gerar tanto funções com apenas um máximo como funções com vários máximos descorrelacionados. Esta família de funções é conhecida como modelo NK. Por outro lado, Derrida [16] propôs uma família de Hamiltonianos que possui características semelhantes às do modelo NK, a saber, os vidros de spin de Ising com interações de p -spins. Na primeira parte desta tese, realizamos um estudo analítico das propriedades estatísticas do relevo de energia do modelo de vidros de spin de Ising com interações de p -spins. Essa investigação é de interesse tanto do ponto de vista da mecânica estatística de sistemas desordenados quanto da perspectiva do estudo de caminhadas adaptativas em relevos de energia rugosos.

Nesse sentido, o número médio de mínimos locais com energia ϵ , denotado por $\langle \mathcal{N}(\epsilon) \rangle$, foi calculado para p geral e campo magnético h nulo [27, 28], onde a notação $\langle \dots \rangle$ indica uma média sobre os acoplamentos. Deve-se notar que este tipo de procedimento, conhecido como aproximação ‘annealed’, não é correto. O certo seria calcular a média da grandeza extensiva $\ln \mathcal{N}(\epsilon)$ pois esta é auto-mediante. De fato, Roberts [29] calculou $\langle \ln \mathcal{N}(\epsilon) \rangle$ para $p = 2$ e $h \neq 0$ usando o método de réplicas. Uma grandeza relacionada à correlação entre dois mínimos locais com energias ϵ^a e ϵ^b é o número de pares de mínimos

locais com sobreposição q , denotado por $\mathcal{M}(\epsilon^{ab}, q)$, cujo valor médio foi calculado por Gross e Mézard para $p \rightarrow \infty$ [30]. No capítulo 2, efetuamos o cálculo do número médio de mínimos locais para p geral e campo magnético não nulo. Mostramos que a inclusão de h não leva, apenas, a diferenças quantitativas em relação ao caso de campo nulo, mas, também, a diferenças qualitativas com o aparecimento de descontinuidades na energia típica dos mínimos locais. Estudamos também a sobreposição típica q_m entre pares de mínimos idênticos, ou seja, com mesma densidade de energia ϵ . A dependência de q_m com ϵ para pequenos valores de h nos lembra a dependência do parâmetro de ordem termodinâmico com a temperatura T , ou seja, q_m vai a zero de maneira descontínua em um dado valor de ϵ . Devemos notar, entretanto, que não há relação entre T e ϵ , pois $\ln \mathcal{N}(\epsilon)$ não é a entropia do sistema. Observamos que o tamanho da descontinuidade na sobreposição típica q_m aumenta com p e diminui com h , desaparecendo quando o campo magnético atinge um valor crítico $h = h_c$ [1]. Esse efeito do campo magnético sobre as propriedades estatísticas dos mínimos locais nos motivou a estudar a termodinâmica do modelo de p -spins para campo magnético não nulo. Ainda no capítulo 2, investigamos as correções ao alcance infinito para o caso em que $h = 0$. Os resultados nos mostram que o número de estados meta-estáveis aumenta quando o efeito de conectividade finita é considerado, e que esse aumento torna-se mais pronunciado à medida que p aumenta [2].

A termodinâmica do modelo SK ($p = 2$) [19, 20] e do modelo de energias aleatórias ($p \rightarrow \infty$) [16, 17, 18] na presença do campo magnético já é bem entendida. O caso $p > 2$ é mais complicado e a termodinâmica do modelo de p -spins foi investigada apenas para $h = 0$ [37, 38], já que a adição do campo magnético dificulta consideravelmente a solução das equações de ponto de sela. No capítulo 3, utilizamos o método de réplicas para estudar o caso em que o campo magnético é diferente de zero. Em particular, calculamos a média do logaritmo do número de estados com densidade de energia ϵ , ou seja, a entropia. Investigamos a solução com simetria de réplicas, assim como a região no espaço

de parâmetros (T, h, p) onde esta solução é estável. Na seqüência, efetuamos os cálculos para o primeiro passo de quebra de simetria de réplicas (1 QSR) e analisamos a transição entre os dois regimes. Observamos que existem dois tipos de transição entre esses dois regimes: uma transição contínua e outra descontínua. A adição do campo magnético faz com que o tamanho da descontinuidade do parâmetro de ordem entre os dois regimes para $p > 2$ diminua até que esta desapareça para $h \geq h_t$. Obtivemos analiticamente a localização do ponto tricrítico onde a transição entre os dois regimes torna-se descontínua [3].

Um modelo de spins contínuos que descreve a co-evolução de espécies com interações entre pares de espécies foi proposto por Diederich & Opper [40, 41, 46]. Nesse modelo considera-se uma população infinita (ecossistema) composta por N espécies diferentes que interagem entre si através de interações aleatórias Gaussianas. Um parâmetro de auto-interação $u \geq 0$ é introduzido no modelo para atuar como uma pressão de co-operação, limitando o crescimento das espécies. Embora pareça bastante natural no contexto de co-evolução de espécies, a análise de sistemas com interações de ordem mais alta não foi ainda considerada na literatura. Essas interações surgem quando a intensidade do acoplamento entre um dado par de espécies depende da concentração de outras espécies. Mesmo que de forma implícita, esse tipo de interação é freqüentemente invocado quando se faz referência à complexidade e sutileza das relações entre diferentes espécies do ecossistema [39]. Entretanto, na ausência de modelos matemáticos para descrever esses sistemas, pouco se conhece sobre os efeitos positivos ou negativos das interações de ordem alta sobre a estabilidade do ecossistema. No capítulo 4, generalizamos o modelo de Diederich & Opper introduzindo interações de ordem mais alta entre as espécies do ecossistema. Mostramos, através de uma análise de réplicas simétricas que com o aumento na ordem das interações o regime altamente competitivo (caracterizado por uma divergência na energia do estado fundamental ϵ_0 para u pequeno) é praticamente eliminado. Analisando

a estabilidade da solução com simetria de réplicas verificamos que para $p \geq 4$ esta solução é instável apenas para $u = 0$ e, portanto, nossos principais resultados não são afetados pela instabilidade dessa solução. Estudando a distribuição de probabilidade das concentrações de indivíduos, verificamos que um efeito do aumento na ordem das interações é que $C(x)$, a distribuição acumulada, se mantém constante e igual a $C(0)$ (fração de espécies extintas) até um determinado valor de concentração $x = x_t$. Isso significa que existe um limite inferior para a concentração das espécies sobreviventes, o que impede a existência de espécies raras no ecossistema. O aumento na ordem das interações também implica em um decréscimo da fração de espécies extintas, tornando o sistema mais cooperativo [4].

Algumas questões interessantes surgem a partir desses resultados. Por exemplo, a ausência de espécies raras no equilíbrio implica na estabilidade do ecossistema com relação à invasão de espécies raras mutantes? O efeito de uma perturbação decrescendo a concentração de uma espécie leva ao colapso de todo o ecossistema? Essas questões serão investigadas futuramente a partir de um estudo da dinâmica desse ecossistema.

Bibliografia

- [1] Oliveira V. M. e Fontanari J. F. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **30(24)**, 8445, 1997.
- [2] Oliveira V. M. Fontanari J. F., Stadler P. F. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **32(50)**, 8793, 1999.
- [3] Oliveira V. M. e Fontanari J. F. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **32(12)**, 2285, 1999.
- [4] Oliveira V. M. e Fontanari J. F. *submetido a publicação*, 2000.
- [5] Kauffman S. A. *The origins of Order*. Oxford University Press, Oxford, 1993.
- [6] Kauffman S. A. e Levin S. *J. Theor. B.*, **128**, 11, 1987.
- [7] Wright S. *Genetics*, **16**, 97, 1931.
- [8] Wright S. *Proceedings of Sixth International Congress on Genetics*, **1**, 356, 1932.
- [9] Hartl D. L. e Clark A. G. *Principles of Population Genetics*. Sinauer Associates Publishers, Sunderland, Massachusetts, 1989.
- [10] Kauffman S. A. *Adaptation on rugged fitness landscapes*. In *lectures in the Sciences of Complexity*. Addison-Wesley, 1989.
- [11] Kauffman S. A. *Principles of adaptation in complex systems*. In *lectures in the Sciences of Complexity*. Addison-Wesley, 1989.
- [12] Kauffman S. A. e Stein D. *Application of the NK model of rugged landscapes to protein evolution and protein folding*. *Abstract of meeting of the American Association for the Advancement of Science on protein folding*, 1989.
- [13] Kauffman S. A. e Weinberger E. D. *J. Theor. B.*, **141**, 211, 1989.
- [14] Crow J. F. e Kimura M. *An Introduction to Population Genetics Theory*. Harper & Row Publishers, 1970.
- [15] Amitrano C. Peliti L., Saber M. *J. Mol. Evol.*, **29**, 513, 1989.

- [16] Derrida B. *Phys. Rev. B*, **24**, 2613, 1981.
- [17] Derrida B. *Phys. Rep.*, **67(1)**, 29–35, 1980.
- [18] Derrida B. *Phys. Rev. Lett.*, **45(2)**, 79, 1980.
- [19] Sherrington D. e Kirkpatrick S. *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1972, 1975.
- [20] Sherrington D. e Kirkpatrick S. *Phys. Rev. B*, **17**, 4384, 1978.
- [21] Weinberger E. D. e Stadler P. F. *J. Theor. Biol.*, **163**, 255, 1993.
- [22] Tanaka F. e Edwards S. F. *J. Phys. F: Metal Phys.*, **10**, 2769, 1980.
- [23] Bray A. J. e Moore M. A. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, **13**, L469–76, 1980.
- [24] Bray A. J. e Moore M. A. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, **14**, 1313, 1981.
- [25] De Dominics C. Gabay M. Garel T., Orland H. *J. Phys.*, **41**, 923–930, 1980.
- [26] Dean D. S. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **27**, L899–L905, 1994.
- [27] Rieger H. *Phys. Rev. B*, **46**, 14655, 1992.
- [28] Stadler P. F. e Krakhofer B. *Rev. Mex. Fis.*, **42**, 355, 1996.
- [29] Roberts S. A. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **14**, 3015, 1981.
- [30] Gross D. J. e Mézard M. *Nuc. Phys. B*, **240**, 431, 1984.
- [31] Nemoto K. *J. Phys. A*, **21**, L287, 1988.
- [32] Vertechi D. e Virasoro M. A. *J. Phys. (France)*, **50**, 2325, 1989.
- [33] Parisi G. e Virasoro M. A. Mezard M. *Spin Glass Theory and Beyond*. Singapore: World Scientific, 1987.
- [34] Binder K. e Young A. P. *Rev. Mod. Phys.*, **58**, 801, 1986.
- [35] Sherrington D. *cond-mat*, **9806289**, 1998.
- [36] Fischer K. H. e Hertz J. A. *Spin Glasses*. Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [37] Gardner E. *Nuc. Phys. B*, **257**, 747, 1985.
- [38] Stariolo D. A. *Physica A*, **166**, 622, 1990.

-
- [39] Lovelock J. E. *Gaia, A New Look at Life on Earth*. Oxford University Press, Oxford, 1979.
- [40] Diederich S. e Oppen M. *Phys. Rev. A*, **39**, 4333, 1989.
- [41] Oppen M. e Diederich S. *Comp. Phys. Comm.*, **121**, 141, 1999.
- [42] Feller W. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*. John Wiley & Sons, New York, 1966.
- [43] Parisi G. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **13**, 1101, 1980.
- [44] Parisi G. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **13**, 1887, 1980.
- [45] Crisanti A. e Sommers H. J. *Z. Phys. B*, **87**, 341, 1992.
- [46] Hofbauer J. e Sigmund K. *The Theory of Evolution and Dynamical Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [47] Biscari P. e Parisi G. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **28**, 4697, 1995.