

Prémio Nobel para Sistemas Complexos

Iveta Pimentel¹

¹ Departamento de Física e Centro de Física Teórica e Computacional, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa

irpimentel@fc.ul.pt

Resumo

O prémio Nobel da Física 2021, foi atribuído a Giorgio Parisi (1/2) “for the discovery of the interplay of disorder and fluctuations in physical systems from atomic to planetary scales” [1]. O prémio distingue o trabalho de Parisi sobre vidros de spin que são sistemas complexos. Parisi desenvolveu um novo método para descrever sistemas complexos, o qual teve um enorme impacto em física, e outras áreas, muito diversas. Neste artigo, apresentarei o estudo de vidros de spin e mencionarei alguns exemplos da sua influência em diferentes áreas.



Figura 1 - Os laureados com o Prémio Nobel da Física 2021. (© Nobel Prize Outreach).

O que são vidros de spin?

Experiências, realizadas no início dos anos 1970, revelaram a existência de um novo tipo de ordem magnética, intrigante e fascinante, em materiais que foram então designados por vidros de spin [2-4]. Vidros de spin são sistemas magnéticos desordenados, que exibem uma transição de congelação (*freezing*), a uma temperatura T_f , para uma fase a mais baixa temperatura, onde os momentos magnéticos, ou spins, dos átomos constituintes do sistema, têm orientações fixas mas aleatórias. Encontram-se vidros de spin em diferentes tipos de materiais. Os vidros de spin mais conhecidos são ligas metálicas, como CuFe, que consiste numa rede cristalina de átomos de Cu com uma pequena percentagem de átomos de Fe, que têm spin, colocados em posições aleatórias, ver Figura 2.

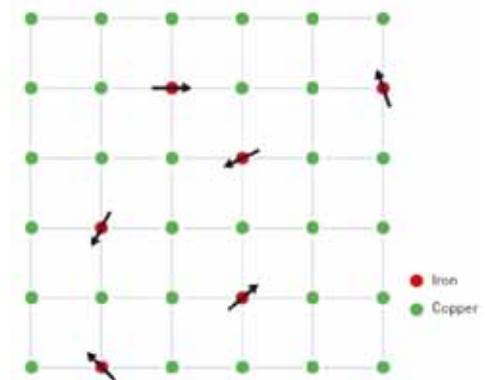


Figura 2 - Vidro de spin: liga metálica CuFe, os átomos de Fe têm spin. (© Johan Jarnestad/The Royal Swedish Academy of Sciences).

A ordem magnética, não trivial, resulta da existência de interações aleatórias, ferromagnéticas e antiferromagnéticas, entre os spins. Uma interação ferromagnética tende a alinhar os spins paralelos enquanto uma interação antiferromagnética tende a alinhar os spins antiparalelos. A competição entre as interações gera frustração na orientação dos spins, isto é, os spins recebem instruções para alinhar em sentidos contrários e consequentemente não têm uma orientação única, ver Figura 3. Desordem e frustração são duas características fundamentais dos vidros de spin.

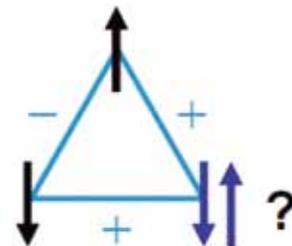


Figura 3 - Frustração: não existe uma orientação única dos spins devido a interações competitivas.

A caracterização da ordem magnética em vidros de spin é difícil. Dado os spins terem orientações fixas mas aleatórias, a magnetização local, média térmica do spin em cada sítio, é não nula, mas a magnetização global, soma da magnetização local nos vários sítios, é nula. A transição de congelação (*freezing*) dos spins é observada na medição da suscetibilidade magnética, a resposta da magnetização a um campo magnético aplicado, em função da temperatura, onde é assinalada por um pico à temperatura T_f . A suscetibilidade magnética medida quando se arrefece o sistema num campo magnético tem um valor mais elevado do que o obtido quando se arrefece o sistema em campo nulo e depois se aplica o campo. A magnetização induzida por um campo magnético, após tirar o campo, decai com tempos de relaxação muito longos. Estas observações mostram um comportamento exótico, o qual indica que os vidros de spin têm uma estrutura interna complexa.

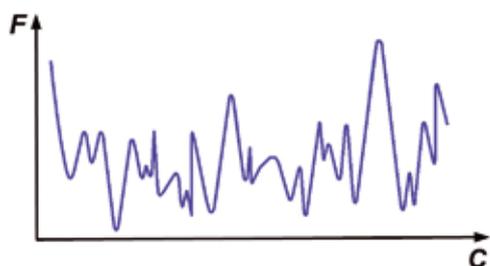


Figura 4 - Representação esquemática da energia livre de um vidro de spin em função dos estados de configuração dos spins.

Num vidro de spin, a frustração na orientação dos spins determina a existência de uma grande multiplicidade de estados de equilíbrio, com diferentes configurações dos spins, separados por barreiras de energia. Porque não existe uma configuração dos spins que satisfaz simultaneamente todas as interações, não existe um estado fundamental único. A energia livre de um vidro de spin em função dos estados de configuração dos spins, apresenta muitos mínimos, isto é, uma paisagem com muitos vales, como ilustrado na Figura 4. A existência de uma grande multiplicidade de estados de equilíbrio, constitui uma característica fundamental dos sistemas complexos. Giorgio Parisi proferiu a sua palestra do Prémio Nobel da Física 2021 com o título "Multiple equilibria" [1].

Modelo de Edwards-Anderson

Em 1975, Edwards e Anderson [5] propuseram um modelo para os vidros de spin, que é descrito pelo hamiltoniano

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1)$$

onde N spins \vec{S}_i estão colocados nos sítios i de uma rede regular tridimensional, com interações J_{ij} apenas entre spins primeiros vizinhos, as quais são variáveis aleatórias independentes, positivas e negativas com igual probabilidade, tendo considerado uma distribuição gaussiana de valor médio zero e variância J^2 .

Propuseram também um parâmetro de ordem para os vidros de spin, definido como

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_i \langle \vec{S}_i \rangle^2 \quad (2)$$

($\langle \dots \rangle$ representa a média térmica num estado e $[\dots]$ representa a média sobre a desordem nas interações), o qual mede o valor médio do quadrado da magnetização local, tendo-se $q_{EA}=0$ para $T \geq T_f$ e $q_{EA} \neq 0$ para $T < T_f$.

A desordem na interação entre os spins é *quenched*, isto é, independente do tempo. As propriedades físicas do sistema são então calculadas a partir da média da energia livre sobre a desordem nas interações

$$[F] = - \frac{1}{\beta} [\ln Z] \quad (3)$$

$\beta = 1/(k_B T)$ e a função de partição é dada por

$$Z = \text{Tr}_{\{S\}} \exp(-\beta H(J, S)) \quad (4)$$

onde $\text{Tr}_{\{S\}}$ representa a soma sobre todas as configurações dos spins. O cálculo da média de $\ln Z$ é difícil. Edwards e Anderson propuseram então o método das réplicas, o qual se baseia na igualdade

$$\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n} \quad (5)$$

A média da energia livre é agora calculada em termos da média da função de partição de n réplicas do sistema original Z^n , com n inteiro, que é fácil calcular. Obtém-se $[Z^n]$ que é a função de partição de um sistema descrito por um hamiltoniano efetivo $H_{\text{eff}}(S^\alpha)$ no espaço das réplicas, $S^\alpha = S_i^\alpha$ representa os spins na réplica α , ($\alpha = 1, \dots, n$), existindo simetria de permutação das réplicas. O cálculo das propriedades é efetuado utilizando o hamiltoniano efetivo, $H_{\text{eff}}(S^\alpha)$, tomando o limite $n \rightarrow 0$ no fim.

Na teoria desenvolvida a seguir por Edwards e Anderson, foi obtida uma solução aproximada para o modelo, a qual explica uma parte, mas não explica outra parte, das propriedades observadas nos vidros de spin.

Modelo de Sherrington-Kirkpatrick

Ainda em 1975, Sherrington e Kirkpatrick [6] propuseram um modelo para os vidros de spin, que é descrito pelo hamiltoniano

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (6)$$

onde se considera N spins de Ising, $S_i = \pm 1$, com interações J_{ij} de alcance infinito (todos os spins interagem entre si), as quais são variáveis aleatórias independentes, com uma distribuição gaussiana de valor médio zero e variância J^2/N , na presença de um campo magnético uniforme h . Este modelo é uma versão do modelo de Edwards-Anderson, menos realista devido ao alcance infinito da interação, mas tem a vantagem de se obter a sua solução exata. A solução do modelo de Sherrington-Kirkpatrick constitui uma teoria de campo médio para os vidros de spin.

Utilizando o método das réplicas e efetuando uma transformação para tratar a interação entre os spins das réplicas no hamiltoniano efetivo, $H_{\text{eff}}(S^\alpha)$, obtém-se a expressão para a energia livre do sistema, no limite $N \rightarrow \infty$,

$$[F] = \lim_{n \rightarrow 0} \min F(q^{\alpha\beta})/n \quad (7)$$

sendo a energia livre dada pelo valor mínimo de uma função $F(q^{\alpha\beta})$, onde $q^{\alpha\beta}$ são os elementos de uma matriz de dimensão $n \times n$, simétrica e com zeros na diagonal, $q^{\alpha\beta} = q^{\beta\alpha}$ e $q^{\alpha\alpha} = 0$. O parâmetro de ordem dos vidros de spin é dado pelos valores de $q^{\alpha\beta}$ que minimizam a função $F(q^{\alpha\beta})$, os quais têm a expressão

$$q^{\alpha\beta} = \langle S_i^\alpha S_i^\beta \rangle \quad (8)$$

onde a média térmica é calculada no espaço das réplicas, sendo igual para todos os sítios i . Tem-se então que o parâmetro de ordem dos vidros de spin $q^{\alpha\beta}$ representa o *overlap* dos spins nas réplicas α e β , medindo o grau de semelhança das réplicas. A forma do parâmetro de ordem é determinada pela dependência de $q^{\alpha\beta}$ nas réplicas α e β .

Sherrington e Kirkpatrick consideraram o *ansatz* de simetria das réplicas, no qual $q^{\alpha\beta}$ é igual para todas as réplicas,

$$q^{\alpha\beta} = q. \quad (9)$$

Na ausência de campo magnético, $h=0$, verifica-se a ocorrência de uma transição de fase, à temperatura $T_f = J$: $q=0$ para $T \geq T_f$ e $q \neq 0$ para $T < T_f$, com $q \propto (T_f - T)/T_f$ na proximidade de T_f . Na presença de campo magnético, $h \neq 0$, q tem um valor finito e não existe transição de fase. Surgiu, porém, um problema no modelo de Sherrington-Kirkpatrick: a entropia calculada apresenta um valor negativo à temperatura $T=0$, um resultado não físico.

Em 1978, Almeida e Thouless [7] analisaram a estabilidade da solução do modelo de Sherrington-Kirkpatrick. Verificaram que na ausência de campo magnético, $h=0$, a solução com simetria das réplicas é instável na fase de baixa temperatura, $T < T_f$, não correspondendo a um mínimo da função $F(q^{\alpha\beta})$. Na presença de um campo magnético, $h \neq 0$, observaram a ocorrência de uma transição de fase, ao longo de uma linha, $T_f(h)$, abaixo da qual a solução com simetria das réplicas é também instável. Colocou-se então a hipótese de na fase dos vidros de spin a baixa temperatura haver quebra de simetria das réplicas.

Ansatz de Parisi: quebra de simetria das réplicas

Em 1979, Giorgio Parisi [8-10] propôs um *ansatz* para a quebra de simetria das réplicas no parâmetro de ordem dos vidros de spin no modelo de Sherrington-Kirkpatrick. O *ansatz* de Parisi pode ser descrito de uma forma iterativa, como mostra a Figura 5. Como dito, $q^{\alpha\beta}$ são os elementos de uma matriz $n \times n$, simétrica e com zeros na diagonal. Começa-se com simetria das réplicas, tendo todos os elementos fora da diagonal o mesmo valor, q_0 . No passo 1, divide-se a matriz $n \times n$ em blocos de tamanho $m_0 \times m_0$ e nos blocos sobre a diagonal substitui-se q_0 por q_1 , deixando q_0 nos blocos fora da diagonal. No passo 2, cada bloco $m_1 \times m_1$ sobre a diagonal é subdividido em sub-blocos de tamanho $m_2 \times m_2$ e nos sub-blocos sobre a diago-

nal q_1 é substituído por q_2 . Este processo é repetido e após R passos de quebra de simetria das réplicas tem-se um conjunto de valores m_r e $q^{\alpha\beta} = q_r$,

$$n = m_0 > m_1 > m_2 > \dots > m_R > 1 \quad (10)$$

$$q_0 < q_1 < q_2 < \dots < q_R. \quad (11)$$

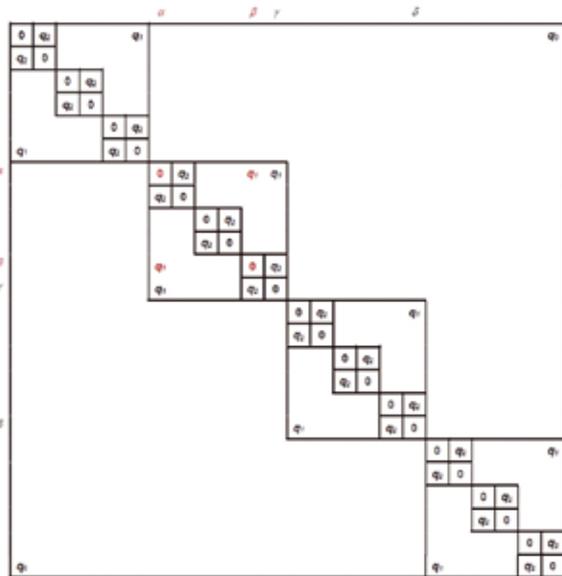


Figura 5 - Representação do Ansatz de Parisi, em forma de matriz, para $R=2$ passos de quebra da simetria das réplicas.

O *ansatz* de Parisi pode igualmente ser descrito em termos de uma árvore, como mostra a Fig. 6. As extremidades da árvore são as réplicas, $\alpha=1,2,\dots,n$, e a árvore ramifica-se nos vários níveis, $r=0,1,\dots,R$, com multiplicidade $n_r = m_r/m_{r+1}$, sendo o valor de $q^{\alpha\beta} = q_r$ determinado pelo nível r do antepassado comum mais próximo das réplicas α e β .

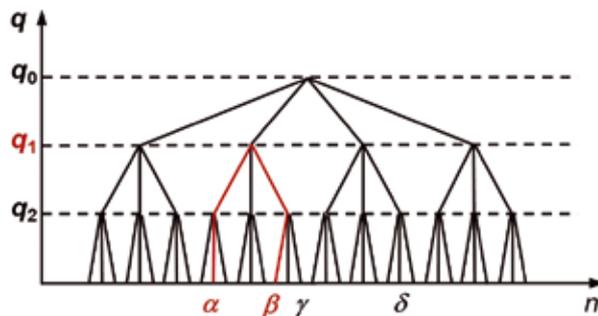


Figura 6 - Representação do Ansatz de Parisi, em forma de árvore, para $R=2$ passos de quebra da simetria das réplicas.

Observa-se então que existe uma estrutura hierárquica entre as réplicas. Verifica-se também que o espaço das réplicas tem ultrametricidade, isto é, se tomarmos três réplicas quaisquer e calcularmos os *overlaps* entre elas, pelo menos dois deles são iguais e o terceiro é maior ou igual aos outros dois: $q^{\alpha\beta} = q^{\alpha\gamma} \leq q^{\beta\gamma}$, $\forall \alpha, \beta, \gamma$. A distribuição de probabilidade das sobreposições (*overlaps*), dada pela função

$$P(q) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{\alpha \neq \beta} \delta(q - q^{\alpha\beta}) \quad (12)$$

caracteriza a estrutura do espaço das réplicas.

A solução do modelo de Sherrington-Kirkpatrick é dada pelo *ansatz* de Parisi com quebra de simetria das réplicas total, isto é, no limite $R \rightarrow \infty$. Neste caso, a variável m_r torna-se contínua e o parâmetro de ordem para os vidros de spin q_r torna-se uma função contínua

$$m_r \rightarrow x \quad (13)$$

$$q_r \rightarrow q(x) \quad (14)$$

com $0 \leq x \leq 1$, no limite $n \rightarrow 0$. A solução encontrada para o parâmetro de ordem $q(x)$ implica uma distribuição de probabilidade para os *overlaps* com a seguinte forma: $P(q)$ tem um pico no *overlap* máximo, $q(1) \propto (T_f - T) T_f$, e estende-se de forma contínua até ao *overlap* mínimo, $q(0) \propto (h/J)^{2/3}$, o qual é zero na ausência de campo magnético. O parâmetro de ordem de Edwards-Anderson corresponde ao valor máximo de $q(x)$, $q_{EA} = q(1)$. Parisi verificou que o problema da entropia negativa não existe mais com a quebra de simetria das réplicas total.

Em 1983, De Dominicis e Kondor [11] mostram que a solução do modelo de Sherrington-Kirkpatrick com o *ansatz* de Parisi é estável. Em 2006, Talagrand [12] provou que o *ansatz* de Parisi constitui a solução exata do modelo de Sherrington-Kirkpatrick e, em 2013, Panchenko [13] provou de forma rigorosa a existência de ultrametricidade no *ansatz* de Parisi.

A interpretação física do *ansatz* de Parisi não foi evidente, tendo sido dada por Parisi e os seus colaboradores, em 1983, [14,15]. Considere a energia livre de um vidro de spin em função dos estados de configuração dos spins, (ilustrada na Figura 4), e que o espaço dos estados está dividido em muitos vales, mínimos da energia livre, separados por barreiras de energia infinita, correspondendo cada vale a um estado. Cada estado, indicado com um índice a , é caracterizado por uma energia livre F_a , um peso estatístico $\omega_a \propto \exp(-\beta F_a)$ e uma magnetização local $\langle S_i \rangle_a$. Define-se o *overlap* dos estados por

$$q_{ab} = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle_a \langle S_i \rangle_b. \quad (15)$$

O *self-overlap* q_{aa} é igual para todos os estados, constitui o valor máximo de q_{ab} e identifica-se com o parâmetro de ordem de Edwards-Anderson, $q_{aa} = q_{EA}$. A distribuição de probabilidade do *overlap* dos estados é dada por

$$P(q) = \sum_{a,b} \omega_a \omega_b \delta(q - q_{ab}) \quad (16)$$

A função $P(q)$ caracteriza a estrutura do espaço de estados do sistema. Verifica-se então que existe uma relação íntima entre a presença de

múltiplos estados e a quebra de simetria das réplicas. Devido à energia livre ter muitos vales separados por barreiras de energia infinita, os vidros de spin têm um comportamento não ergódico, isto é, o sistema fica aprisionado em estados, não podendo transitar para outros estados com energia equivalente. A quebra de ergodicidade e a quebra de simetria das réplicas estão relacionadas.

O *ansatz* de Parisi, solução do modelo de Sherrington-Kirkpatrick, fornece uma descrição dos vidros de spin em teoria de campo médio, a qual prevê que o sistema é constituído por um número infinito de estados, organizados numa estrutura hierárquica que é ultramétrica. Verifica-se assim que sistemas aparentemente desordenados como os vidros de spin têm uma estrutura interna com um determinado tipo de topologia.

Parisi mostrou uma criatividade genial, ao descobrir a capacidade do método das réplicas para descrever sistemas com múltiplos estados, utilizando a técnica de quebra de simetria das réplicas, e propor uma nova forma de parâmetro de ordem para caracterizar sistemas complexos, definido em termos do *overlap* entre estados, o qual permite desvendar estruturas internas ocultas, tendo ainda apresentado um *ansatz* que mais tarde foi provado ser a solução exata do modelo de Sherrington-Kirkpatrick.

O método das réplicas, em conjunto com a técnica de quebra de simetria das réplicas, permite descrever e compreender uma enorme variedade de sistemas com múltiplos estados, pelo que constitui um instrumento fundamental da teoria de sistemas complexos.

Outros Sistemas Complexos

Os conceitos e técnicas desenvolvidas no estudo de vidros de spin tiveram um enorme impacto em física e outras áreas, muito diversas. Apresentam-se alguns exemplos de sistemas complexos estudados.

Na área da física, foram estudados vários materiais e fenómenos por Parisi e os seus colaboradores [16], utilizando o método das réplicas. Os vidros estruturais, ou frágeis, têm uma transição de fase a uma temperatura T_g , para uma fase a baixa temperatura, amorfa, onde as moléculas constituintes do sistema se encontram em posições aleatórias fixas. Estes sistemas apresentam uma multiplicidade de estados correspondentes a diferentes configurações das posições das moléculas. Foi desenvolvida a *random first order theory* para a transição de fase e fase a baixa temperatura dos vidros estruturais, que representa um avanço muito significativo no estudo daqueles materiais. Os materiais granulares têm uma transição de fase a uma densidade ρ_g , para uma fase com densidade mais elevada, onde as partículas se encontram bloqueadas (*jammed*), apresentando múltiplos estados, correspondentes a diferentes empacotamentos das partículas. Foi desenvolvida uma teoria geométrica para a transição de fase e fase de *jamming* em materiais granulares, com aplicação muito geral.

Na área de neurociência, houve um avanço importante na compreensão de redes neuronais e atividade cerebral, devido ao estudo de vidros de spin [17]. Hopfield [18] propôs um modelo para redes neuronais, que pode ser descrito da seguinte forma: os neurónios (com dois estados, ativo ou não ativo) são representados por spins de Ising e a comunicação entre os neurónios (excitatória ou inibitória) é representada por interações positivas e negativas, a atividade cerebral está inscrita nas interações, que evoluem no tempo, permitindo um processo de aprendizagem. A energia da rede neuronal em função das múltiplas configurações dos neurónios tem uma paisagem com muitos vales. No caso de memória associativa, um conjunto de memórias, representadas por padrões de neurónios, é armazenado nas interações e os vales correspondem às memórias. Um estímulo exterior seleciona um vale recuperando a memória. O modelo de Hopfield foi estudado utilizando o modelo das réplicas. As contribuições do estudo de vidros de spin na área da biologia são variadas, incluindo, evolução pré-biótica e dinâmica de proteínas [19].

Na área da matemática, o estudo de vidros de spin deu uma contribuição especial para o desenvolvimento da teoria de otimização combinatória. Mézard e Parisi [20] utilizaram o método das réplicas para estudar o problema do *traveling salesman*: qual é a distância mínima que um vendedor tem de viajar para visitar um número de cidades e voltar à cidade de origem? Define-se a função custo, como a distância percorrida na viagem em função do percurso, a qual apresenta uma paisagem com muitos vales, e procura-se o mínimo, ou mínimos, da função. Foram estudados outros problemas de otimização como, *matching*, *graph partitioning* e *satisfiability*. A aplicação do estudo de vidros de spin em teoria da informação [21] tem ganho uma enorme relevância, com o desenvolvimento de técnicas de processamento de informação, muito eficazes, que utilizam o método das réplicas para correção de erros e reconstrução de imagens.

Na área de ciência da computação, o estudo de vidros de spin levou à criação de novos algoritmos e à construção de novos computadores. Foram criados algoritmos para otimização, muito rápidos, como o de *simulated annealing* desenvolvido por Kirkpatrick, Gelatt e Vecchi [22] e o de *simulated tempering* desenvolvido por Marinari e Parisi [23]. Parisi e os seus colaboradores construíram computadores com uma arquitetura própria para a realização de simulações de Monte Carlo em vidros de spin, o Janus (2008), e uma nova geração, o Janus II (2014). *Machine learning*, um sub-domínio de *artificial intelligence*, usa algoritmos com treino para tomar decisões ou fazer previsões, de forma autónoma, podendo evoluir com a experiência. Uma das formas de implementação de *machine learning* utiliza redes neuronais artificiais. O estudo de vidros de spin tem dado um importante contributo para o desenvolvimento de redes neuronais artificiais e *machine learning* [21].

As descobertas revolucionárias de Parisi, na teoria de sistemas desordenados complexos, promoveram uma

notável fertilização de ideias em áreas muito diversas, possuindo um forte potencial para novas e surpreendentes aplicações e implicações.

Giorgio Parisi é um extraordinário cientista, trabalhou em várias áreas da física, tendo dado importantes contribuições em física de partículas, física estatística e física da matéria condensada, em especial no estudo de sistemas desordenados complexos. Estudou também uma grande variedade de fenómenos que envolvem processos aleatórios, tendo entre outros trabalhos de grande relevo, proposto um mecanismo de sincronização estocástica para explicar a periodicidade na glaciação planetária [24]. Mais recentemente, num trabalho pioneiro, desenvolveu uma análise da formação de estruturas no movimento de bandos de pássaros [25]. Citando Parisi: “*The starling flocks may seem very far from spin glasses, but there is something in common. What they share, and what is very interesting, is how complex behaviours arise*”.

Referências

- [1] The Nobel Prize in Physics 2021 (<https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2021/summary/>)
- [2] K. Binder and A. P. Young, “*Spin glasses: experimental facts, theoretical concepts, and open questions*”, Rev. Mod. Phys. 58, 801 (1986).
- [3] M. Mézard, G. Parisi and M. A. Virasoro, “*Spin Glass Theory and Beyond*”, World Scientific, Singapore (1987).
- [4] K. H. Fischer and J. H. Hertz, “*Spin Glasses*”, Cambridge University Press, Cambridge (1991).
- [5] S. F. Edwards and P. W. Anderson, “*Theory of spin glasses*”, J. Phys. F 5, 965 (1975).
- [6] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, “*Solvable model of a spin-glass*”, Phys. Rev. Lett. 35, 1792 (1975).
- [7] J. R. L. de Almeida and D. J. Thouless, “*Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model*”, J. Phys. A 11, 983 (1978).
- [8] G. Parisi, “*Infinite number of order parameters for spin-glasses*”, Phys. Rev. Lett. 43, 1574 (1979).
- [9] G. Parisi, “*The order parameter for spin glasses: a function of the interval 0-1*”, J. Phys. A 13, 1101 (1980).
- [10] G. Parisi, “*Magnetic properties of spin glasses in a new mean field theory*”, J. Phys. A 13, 1887 (1980).
- [11] C. De Dominicis e I. Kondor, “*Eigenvalues of the stability matrix for Parisi solution of the long-range spin-glass*”, Phys. Rev. B 27, 606 (1983).
- [12] M. Talagrand, “*The Parisi formula*”, Annals of Mathematics 163, 221 (2006).
- [13] D. Panchenko, “*The Parisi ultrametricity conjecture*”, Annals of Mathematics 177, 383 (2013).
- [14] G. Parisi, “*Order parameter for spin glasses*”, Phys. Rev. Lett. 50, 1946 (1983).