UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
UNIDAD CUAJIMALPA

Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas

Licenciatura en Matemáticas Aplicadas

Proyecto Terminal:
Fotosíntesis Cuántica

*A*lumno:
Ángel Cáceres Licona
Matrícula: 2133067715
angelcaceres@outlook.com

Asesor: Juan Manuel Romero Sanpedro

Ciudad de México, diciembre de 2018

Índice

Capítulo 1

El modelo de Ising

1.1 El modelo de Ising unidimensional

El modelo de Ising es uno de los pocos modelos de partículas interactuantes para el cual se conoce una solución exacta. Es de gran utilidad ya que, aunque originalmente fue formulado para resolver problemas físicos (ferromagnetismo) tiene muchísima aplicaciones en el modelado de problemas de otras áreas como la biología, finanzas, etc.

En una dimensión, la energía del modelo de Ising puede ser escrita como

$$\mathbb{H} = -\epsilon \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu B \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \tag{1.1}$$

donde $\sigma = \pm 1$ y estos valores indican cada uno de los estados posibles: Si la partícula apunta hacia arriba o hacia abajo. Se usa también la siguiente representación matricial:

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{1.2}$$

$$|\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{1.3}$$

y se considera que la red es cíclica, es decir:

$$\sigma_N = \sigma_{N+1},$$

lo cual equivale a resolver el problema en un anillo. En este caso tenemos la siguiente relación:

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i + \sigma_{i+1}). \tag{1.4}$$

Definimos la función de partición Z como la suma de todos los microestados. Tomando (1.4) la función de partición puede ser escrita como

$$Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_{N=\pm 1}} e^{\beta \sum_{i=1}^{N} \left[\epsilon \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mu \beta (\sigma_i \sigma i + 1) \right]}. \tag{1.5}$$

La función de partición es importante ya que es función de las variables del sistema y nos ayuda a calcular las demás propiedades termodinámicas del sistema. Entonces introducimos la siguiente matriz:

$$\bar{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon + \mu\beta)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon - \mu\beta)} \end{pmatrix}, \tag{1.6}$$

notando que

$$\langle \sigma_i | \bar{P} | \sigma_{i+1} \rangle = e^{\beta \left[\epsilon \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]}. \tag{1.7}$$

Esto se comprueba fácilmente usando la forma matricial que se muestra en (1.2) , (1.3), la matriz que contiene cada uno de los dos estados posible para cada espin y haciendo el producto de matrices:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i | \bar{P} | \sigma_{i+1} \rangle &= \begin{pmatrix} \sigma_i^+ \\ \sigma_i^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon + \mu\beta)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon - \mu\beta)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{i+1}^+ \\ \sigma_{i+1}^- \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_i^+ \\ \sigma_i^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon + \mu\beta)} \sigma_{i+1}^+ + e^{-\beta\epsilon} \sigma_{i+1}^- \\ e^{-\beta\epsilon} \sigma_{i+1}^+ + e^{\beta(\epsilon - \mu\beta)} \sigma_{i+1}^- \end{pmatrix} \\ &= e^{\beta(\epsilon + \mu\beta)} \sigma_{i+1}^+ \sigma_i^+ + e^{-\beta\epsilon} \sigma_{i+1}^- \sigma_i^+ + e^{-\beta\epsilon} \sigma_{i+1}^+ \sigma_i^- + e^{\beta(\epsilon - \mu\beta)} \sigma_{i+1}^- \sigma_i^- . \end{aligned}$$

Sabemos que σ toma los valores ± 1, entonces identificamos los siguientes casos:

1. $\sigma_i^+ \sigma_i^+$ da un signo positivo.
2. $\sigma_i^- \sigma_i^-$ da un signo positivo.
3. $\sigma_i^+ \sigma_i^-$ da un signo negativo.

De esta manera obtenemos el resultado esperado:

$$\langle \sigma_i | \bar{P} | \sigma_{i+1} \rangle = e^{\beta \left[\epsilon \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]}. \tag{1.8}$$

Usando (1.6), reescribimos la función de partición:

$$Z_N(T,B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle\sigma_1|\bar{P}|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|\bar{P}|\sigma_3\rangle \cdots \langle\sigma_N|\bar{P}|\sigma_1\rangle. \tag{1.9}$$

Nótese que:

$$\sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma\rangle\langle\sigma| = \mathbb{I} \tag{1.10}$$

de manera que

$$Z_N(T,B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle\sigma_1|\bar{P}^N|\sigma_1\rangle = Tr(\bar{P}^N). \tag{1.11}$$

La matriz $\bar{P}$ es simétrica por construcción, por lo tanto sus valores propios son reales. Si $\lambda_\pm$ son sus valores propios, entonces:

$$Z_N(T,B) = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \tag{1.12}$$

Obtenemos los valores propios de:

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(\epsilon+\mu\beta)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon-\mu\beta)} \end{vmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda e^{\beta\epsilon}\cosh(\beta\mu B) + 2\sinh(2\beta\epsilon) = 0, \tag{1.13}$$

de donde obtenemos los valores propios

$$\lambda_\pm = e^{\beta\epsilon}\left[\cosh(\beta\mu B) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta\epsilon\sinh(2\beta\epsilon)}}\right], \tag{1.14}$$

y tomamos $\lambda_+ > \lambda_-$. Para obtener la energía libre es conveniente reescribir la función de partición como:

$$Z_N(T,B) = \lambda_+^N\left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right]. \tag{1.15}$$

Como $\lambda_- < \lambda_+$, para calcular la energía libre, obtenemos el siguiente límite:

$$g(T,B) = \lim_{N\to\infty}\left[-\frac{1}{\beta N}\log Z_N\right] = -\frac{1}{\beta}\log\lambda_+, \tag{1.16}$$

esto es:

$$g(T,B) = -\frac{1}{\beta}\log e^{\beta\epsilon}\cosh(\beta B) + \left[e^{2\beta\epsilon}\cosh^2(\beta B) - 2\sinh(2\beta B)\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{1.17}$$

La magnatización por espín está dada por

$$m(T,B) = -\frac{\partial g}{\partial B} = \frac{\sinh(\beta B)}{[\sin^2(\beta B) + e^{-4B\epsilon}]^{\frac{1}{2}}}. \tag{1.18}$$

Se identifican diferentes fases en el sistema. Una fase cuando la mayoría de los espines apunta hacia arriba, cuando apuntan hacia abajo o cuando hay un mismo número de espines apuntan hacia arriba que hacia abajo. Cuando el sistema pasa de una fase a otra se dice que hay una transición de fase.

1.2 Teoría de juegos y Modelo de Ising

La teoría de juegos estudia modelos matemáticos de conflicto y cooperación entre tomadores de decisiones racionales. Los problemas en teoría de juegos son descritos generalmente con N jugadores que tienen un conjunto $s_x = 1, 2, 4, ..., N$ estrategias disponibles. Cada jugador adoptará una estrategia que maximizará su ganancia u_x en el siguiente paso. En casos especiales existe un estado estacionario en el que a ningún jugador le favorece cambiar de estrategia. Matemáticamente este estado satisface la siguiente condición.

$$u_x\{s_1^*, s_2^*, ..., s_N^*\} \leq u_x\{s_1^*, s_2^*, ...s'_x, ..., s_N^*\} \qquad \forall x, \forall s'_x \neq s_x * . \tag{1.19}$$

Esto se conoce como el equilibrio de Nash y cuando la desigualdad es estricta se le llama equilibrio puro de Nash.
También se puede modelar de forma que, en lugar de buscar maximizar la ganancia, los individuos escojan una estrategia que tienen una cierta probabilidad y es a su vez una función de la ganancia:

$$p(s_x \to s'_x) = f(u_x\{s_1, s_2, ..., s'_x, ..., s_N\}) - u_x\{s_1, s_2, ..., s_x, ...s_N\}. \tag{1.20}$$

Este ruido alrededor de la estrategia óptima es el equivalente a la temperatura en un sistema termodinámico y la probabilidad de transición está dada por:

$$p(s_x \to s'_x) = \frac{1}{1 + e^{\beta \Delta u_x}} \tag{1.21}$$

$$\Delta u_x = u_x\{s_1, s_2, ..., s_x, ..., s_N\} - u_x\{s_1, s_2, ..., s_x, ..., s_N\}. \tag{1.22}$$

En este caso $\frac{1}{\beta}$ denota el "ruido" en el sistema. En el caso donde la toma de decisiones es probabilistíca no existe el equilibrio puro pero en sistemas con un nḿero largo de individuos con funciones de ganancia idénticas el sistema alcanza valores estables en sus parámetros promediados entre la población entera.

1.2.1 El caso de N jugadores y 2 estrategias

Un problema básico en teoría de juegos es aquel en el que se tienen dos jugadores y dos estrategias: Cooperación (C) y deserción (D). La ganancia en esta situación puede ser representada usando esta matriz:

$$\begin{array}{cc} & \begin{bmatrix} C & D \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} R & S \\ T & P \end{bmatrix} \end{array} \tag{1.23}$$

donde la fila (C, D) demnota las opciones de estrategia del jugador que estamos intentando determinar y la columna (C, D) las de el otro jugador. R es la recompensa obtenida cuando ambos cooperan, S es el costo que se paga por un jugador cuando éste coopera y el otro no, T es la ganancia por desertar cuando el otro jugador si coopera y P es el castigo que se paga cuando ambos jugadores desertan. Un ejemplo de un sistema es el que se conoce como el dilema del prisionero. La encunciación es la siguiente:
La policía arresta a dos personas. No hay pruebas suficientes para condenarlas y tras haberlas separado las visita individualmente y les ofrece un trato: Si una confiesa y su cómplice no, la cómplice será condenada a diez años en prisión. Si la primera calla y la cḿplice confiesa, la primera recibirá la condena. Si ambas personas confiesan, serán condenadas a seis años. Si ninguna confiesa, a lo más podrán ser condenadas a un año en prisión. En este caso el equilibrio de Nash se obtiene cuando ambas personas confiesan y la ganancia combinada se maximiza cuando ambas personas cooperan. En un sistema probabilístico con N participantes el interés principal es saber cuántos participantes desertan comparado con el número de participantes. Esto está dado por:

$$m = \frac{P_C - P_D}{N}, \tag{1.24}$$

donde P_C y P_D es el número de agentes que cooperan y desertan, respectivamente. La transición de fase se da cuando el signo de m cambia, es decir, cuando pasamos de tener una mayoría de agentes cooperando que desertando.

1.2.2 Analogías con los sistemas termodinámicos

En este sistema, al convertir a os agentes en partículas, cada uno de las estrategias se convierte en un estado del espín: $\sigma = +1$ para la cooperación y $\sigma = -1$ para la deserción.
La ecuación (1.24) se convierte en la ecuación de la magnetización promedio del sistema.

El objetivo principal es, entonces, encontrar el Hamiltoniano del sistema. Se pueden comprobar los cálculos termodinámicos al tomar el límite de la temperatura crítica ($\beta \to \infty$) que debe corresponer con el equilibrio de Nash. Para lograr esto, Sarkar y Benjamin [1] desarrollaron el siguiente meétodo.
La premisa es que el equilibrio de Nash se mantiene intacto si transformamos la matriz (1.24) de esta forma:

$$U = \begin{bmatrix} R & S \\ T & P \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} R-\lambda & S-\mu \\ T-\lambda & P-\mu \end{bmatrix} = U' \tag{1.25}$$

para $\lambda = \frac{R+T}{2}$ y $\mu = \frac{S+P}{2}$ obtenemos:

$$U' = \begin{bmatrix} \frac{R-T}{2} & \frac{S-P}{2} \\ \frac{T-R}{2} & \frac{P-S}{2} \end{bmatrix} \tag{1.26}$$

Ahora consideramos un Hamiltoniano de un sistema de Ising 1D usando dos espines:

$$\mathbb{H} = -2J\sigma_1\sigma_2 - h\sigma_1 - h\sigma_2, \tag{1.27}$$

donde $\sigma \pm 1$ denota los espines. Para este Hamiltoniano la energía que contribuye cada espin puede ser escrita como:

$$E = \begin{bmatrix} -J-h & J-h \\ J+h & -J+h \end{bmatrix} \tag{1.28}$$

En esta matriz las columnas representan el estado del espín $\sigma_2 = (+1, -1)$ y las filas el estado del espín $\sigma_1 = (+1, -1)$. Se puede formular un juego en el que cada jugador obtiene una ganandcia dada por $-E$. A estos juegos se le llaman juegos de Ising. Tienen la propiedad de que minimizar (1.27) corresponde con el equilibrio de Nash. Nótese que la ganancia dada por la ecuación (1.26) se parece a la ganancia de un juego de Ising. Entonces, el equilibrio de Nash para cualquier juego simetrico de 2x2 es el mismo que el de un juego de Ising en el que

$$J = \frac{R-T+P-S}{4} \qquad h = \frac{R-T+S-P}{4} \tag{1.29}$$

Entonces, al usar herramientas termodinámicas en el juego de Ising podemos encontrar el estado de equilibrio que es equivalente al equilibrio de Nash. Sarkar y Benjamin ([1]) extendieron esta equivalencia para cuando uno tiene N jugadores en el dilema del prisionero. EL Hamiltoniano para este sistema está dado por:

$$\mathbb{H} = -\sum_{i=1}^{N} J\sigma_i\sigma_{i+1} - \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{2}(\sigma_i\sigma_{i+1}). \tag{1.30}$$

La función de partición está dada por

$$Z = e^{N\beta J}(\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}). \tag{1.31}$$

Usando esta función de partición podemos calcular la magnetización promedio.

$$m = \frac{1}{N}\langle J_z\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial \log z}{\partial \beta h} = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \tag{1.32}$$

En el caso del dilema del prisionero, $(T > R > P > S)$, usando la relación de (1.29) tenemos que $h < 0$ y $j > 0$. Entonces, en el límite $\beta \to \infty$:

$$m \approx -1,$$

que corresponde a cuando todos los jugadores desertan, y entonces este resultado no contradice al equilibrio de Nash. Podemos calcular también la energía promedio por partícula:

$$E = \frac{1}{N}\langle \mathbb{H}\rangle = -\frac{1}{N}\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = -J - h\frac{\sin(\beta h) + \frac{1}{2}\frac{\sinh(2\beta h) - 4e^{-4\beta J} J/h}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}}{\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \tag{1.33}$$

En el límite $\beta \to \infty$ para $h < 0$ y $J > 0$,

$$E \approx -J + h, \tag{1.34}$$

que corresponde al estado en el que ambas partículas tienen espin -1 lo cual no contradice los resultados conocidos sobre el equilibrio de Nash.

1.3 Una aplicación a la ciencia política

Muchas situaciones en la ciancia política pueden ser vistas como agentes jugando el mismo juego una y otra vez. Es de interés estudiar como ciertas prácticas, convenciones y cooperación se sostienen cuando los involucrados pueden tener algún inventivo en el corto plazo por desviarse de el comportamiento esperado. Por ejemplo: Los tratados de libre comercio. Muchas veces se cree que la economía global mejoraría si todos los países accedieran a el libre comercio, pero que individulmeante les iría mejor si adoptan medidas proteccionistas. Por ejemplo, se considera la siguiente representación de las políticas de comercio entre México y Estados Unidos:

MX/EU	Libre Mercado	Proteccionismo
Libre Mercado	10,10	1,12
Proteccionismo	12,1	4,4

(1.35)

Hay datos que indican que, el libre mercado puede implicar un ahorro de el 10% en los costos al consumidor de algún producto [3] y al contrario, imponer restricciones a la importación de algún producto puede implicar que el consumidor termine pagando 12% más [4]. Para el caso en que ambos países son proteccionistas, se les asigna una ganancia de 4 relacionada con los beneficios para la economía de la creación de compañías que tal vez no podrían compatir en un ambiente de libre mercado.

En este caso, si el juego es jugado sólo una vez, el equilibrio de Nash se da cuando los dos países eligen las políticas proteccionistas. Al generalizar para un número infinito de juegos podemos ver que se repite el patrón en el que cada país elige las políticas proteccionistas.

Referencias

[1] S. Sarkar y C. Benjamin *Emergence of Cooperation in the thermodynamic limit,* ArXiv e-prints, arXiv:1803.10083 (2018).

[2] L. Onsager, *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, Physical Review, Series II, 65 (3–4): 117–149 (1944).*

[3] Galles, Gary Mexican BMW Factory Shows Us the Benefits of Free Trade, Mises Institute, url = "https://mises.org/wire/mexican-bmw-factory-shows-us-benefits-free-trade"

[4] Galles, Gary Mexican BMW Factory Shows Us the Benefits of Free Trade, Mises Institute, url = "https://mises.org/wire/mexican-bmw-factory-shows-us-benefits-free-trade"