



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ENFRIAMIENTOS RAPIDOS DEL MODELO 2D $O(3)$

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIATURA EN FÍSICA

P R E S E N T A :

MARCO ISRAEL RODRÍGUEZ CORNEJO

TUTOR

WOLFGANG PETER BIETENHOLZ



CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, 2024

Índice general

1. Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio	2
2. Acercamiento estadístico a la mecánica cuántica	3
2.1. Propagador de evolución	3
3. Modelos de espín	7
3.1. Los modelos $O(n)$	7
3.2. Modelo 2d $O(3)$	8
3.3. Observables	9
3.3.1. Energía	10
3.3.2. Magnetización	12
3.3.3. Carga topológica	13
4. Métodos de Monte Carlo	16
4.1. Balance detallado	16
4.2. Algoritmo de Metropolis	16
4.3. Algoritmo de Glauber	17
4.4. Algoritmo cluster	18
5. Fenómenos críticos	19
5.1. Transiciones de fase	19
5.2. Función de correlación	21
5.3. Escalamiento	21
5.4. Universalidad	22
5.5. Renormalización	22
5.6. Tiempo de auto-correlación	22
6. Simulaciones en equilibrio	24
6.1. Metodología	24
6.2. Resultados	25
7. Simulación de enfriamientos	31
7.1. Metodología	31
7.2. Resultados	31
8. Resumen y conclusiones	38
A. Distribución aleatoria de vectores en la esfera S^2	39
B. Programación	41
B.1. Equilibrio entre accesibilidad y eficiencia	41
Bibliografía	42

Capítulo 1

Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio

En física se busca dar descripciones cuantitativas a los sistemas físicos. Para ello se usan herramientas matemáticas como el cálculo, la estadística y la geometría. A la vez que se avanza en el desarrollo de tecnología para realizar mejores experimentos y medir observables físicas en mejores condiciones. Las líneas de investigación continúan de generación en generación refinando la teoría y la experimentación. De esta forma la comunidad científica avanza de forma consistente y sistemática.

Entre 1949 y 1952 en Los Álamos. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller y E. Teller, se dedicaron a entender la física de las interacciones de la radiación y la materia bajo condiciones extremas tales como la explosión, implosión y evolución de las reacciones nucleares. En condiciones extremas y fuera del equilibrio los experimentos se vuelven complicados, y la teoría detrás de procesos que involucran interacciones entre un vasto número de partículas se vuelve demasiado compleja. Para solventar sus limitaciones desarrollaron una serie de métodos basados procesos estocásticos. En vez de intentar calcular cada una de las interacciones en un sistema tan complicado. A este grupo de métodos se le conoce como métodos de Monte Carlo. Con el desarrollo de los ordenadores, los métodos de Monte Carlo se han sido en herramientas cruciales en el estudio de sistemas fuera del equilibrio.

La línea de investigación continua hasta hoy, con importantes aportaciones en cada generación. En este trabajo ahondaremos en una pequeña parte de esta línea de investigación. Aplicaremos los métodos de Monte Carlo en el estudio de enfriamiento rápidos en el modelo $2d$ $O(3)$.

Capítulo 2

Acercamiento estadístico a la mecánica cuántica

2.1. Propagador de evolución

Cuando R. Feynman desarrollo su propia formulación de integral de trayectorias. R. Feynman se pregunto si existía un camino para conectar la mecánica estadística con la mecánica cuántica. La mecánica cuántica descrita por E. Schrödinger se plantea una ecuación que describe el sistema físico de interés, luego se busca la solución. En mecánica estadística, se plantea una función de partición, la cual contiene toda la información necesaria sobre el sistema que modela. La ecuación de E. Schrödinger aumenta en complejidad al aumentar los grados de libertad. La función de partición, propone soluciones factibles para sistemas con muchos grados de libertad.

R. Feynman encontró una función análoga a la función de partición para sistemas cuánticos y uno de los modelos que se pueden estudiar es el modelo de interés para este trabajo, el modelo $2d$ $O(3)$.

En mecánica clásica una observable $O(q, p)$ es una función de las posiciones y los momentos de un sistema, es decir se define en el espacio fase del modelo. En mecánica clásica la dinámica de una observable se rige por la ecuación

$$\dot{O} = \{O, H\}, \quad (2.1)$$

donde $\{O, H\}$ es el corchete de poisson de las funciones. La función \dot{O} es la derivada de la observable con respecto al tiempo t .

En vez de funciones definidas en un espacio fase, en mecánica cuántica se definen operadores \mathcal{O} y \mathcal{H} en el espacio de Hilbert y el corchete de poisson se transforma en el conmutador de los operadores.

La dinámica del operador \hat{O} en el espacio de Hilbert se describe en la ecuación

$$\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}]. \quad (2.2)$$

Se le conoce como la formulación de W. Heisenberg, el paso a la formulación de E. Schrödinger implica la transformación dependiente del tiempo dada por el operador de evolución aplicado a la

observable

$$\hat{O}(t) = e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} \hat{O} e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}, \quad (2.3)$$

aplicar el operador de evolución a la ecuación (2.2) se deriva la ecuación

$$\frac{d}{dt} \hat{O}(t) = e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} \left(-\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}] + \frac{d}{dt} \hat{O} \right) e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} = 0. \quad (2.4)$$

Escribiendo la ecuación resultante en términos de conmutadores se tiene que

$$\frac{d}{dt} \hat{O}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_s]. \quad (2.5)$$

en notación de Dirac

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle, \quad (2.6)$$

en donde

$$|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} |\psi\rangle \quad (2.7)$$

La solución de la ec. (2.6) es de la forma

$$\langle q' | \psi(t) \rangle = \int \langle q' | e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} | q \rangle \langle q | \psi \rangle dq, \quad (2.8)$$

donde, q y q' son estados distintos. Definimos al propagador de la ec. (2.6)

$$K(q, q'; t) := \langle q' | e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} | q \rangle. \quad (2.9)$$

El propagador, describe la evolución de la función de onda desde el estado q hasta q' en tiempo t

$$K(q, q'; t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} e^{iS(q, q'; t)/\hbar}. \quad (2.10)$$

Donde $S(q, q'; t)$ es la acción de la trayectoria desde q a q' y $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$.

$$S(q, q'; t) = \int_0^t \frac{m}{2} \dot{q}^2 = \frac{m}{2t} (q' - q)^2 d\tau. \quad (2.11)$$

$$K(q, q'; t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} \exp \left(i \frac{m}{2t} (q' - q)^2 \right). \quad (2.12)$$

Teorema. Trotter

Sean \hat{A} y \hat{B} operadores auto-adjuntos y $\hat{A} + \hat{B}$ es auto-adjunto en la intersección de sus dominios, además \hat{A} y \hat{B} tienen cota inferior y $\tau \in \mathbb{R}$ entonces

$$e^{-\tau(\hat{A} + \hat{B})} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-\tau \hat{A}/n} e^{-\tau \hat{B}/n} \right)^n.$$

Se busca una expresión general para el propagador que resuelve la ec. (2.6), suponiendo un hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}_0 + \hat{V}$,

$$i\hbar \frac{d}{dt} K(q, q'; t) = \hat{H} K(q, q'; t), \quad (2.13)$$

donde $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \sum \hat{p}_i^2$.

Partiendo de la forma general del propagador

$$K(q, q'; t) = \left\langle q' \left| e^{-i\hbar t(\hat{H}_0 + \hat{V})} \right| q \right\rangle. \quad (2.14)$$

Aplicando el teorema de Trotter

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\langle q' \left| \left(e^{-i\hbar t \hat{H}_0 / n} e^{-i\hbar t \hat{V} / n} \right)^n \right| q \right\rangle, \quad (2.15)$$

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=0}^{n-1} \left\langle q_{j+1} \left| e^{-i\hbar t \hat{H}_0 / n} e^{-i\hbar t \hat{V} / n} \right| q_j \right\rangle dq_1 \dots dq_{n-1}, \quad (2.16)$$

En cada factor del productorio se tiene el hamiltoniano para una partícula libre, aplicando la ec. (2.10) a ec. (2.16) se tiene

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \left(\frac{m}{2\pi i a} \right)^{n/2} \times \exp \left\{ i a \sum_{j=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 - V(q_j) \right] \right\} dq_1 \dots dq_{n-1}, \quad (2.17)$$

donde $a = t/n$ y $\hbar = 1$. Observado que la suma corresponde la integral de Riemann de la acción en el límite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{n-1} a \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 - V(q_j) \right] = \int_0^t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt'} \right)^2 - V(q(t')) \right] dt'. \quad (2.18)$$

Finalmente el propagador se describe por la ecuación

$$K(q, q'; t) = \sum_{\sigma \in \Omega} e^{-itS[\sigma]}, \quad (2.19)$$

donde σ corresponde a una trayectoria en Ω , y este es el conjunto de todas las posibles trayectorias que inician en q y terminan en q' en el tiempo t [1, 2, 3].

El tensor métrico del espacio de Minkowski es de la forma

$$g_M = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

En donde el -1 corresponde a la coordenada temporal. G. Wick propone la transformación al espacio euclidiano, cambiando el eje real de la coordenada temporal por un eje imaginario resultando en el tensor euclidiano

$$g_E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

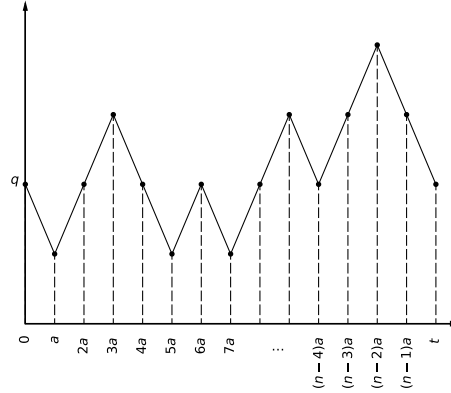


Figura 2.1: Ejemplificación de la evolución de un estado en el espacio fase, desde q hasta q' en el tiempo t .

La métrica del espacio de Minkowski es

$$ds^2 = -dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2, \quad (2.22)$$

La métrica del espacio euclidiano con el eje temporal imaginario es

$$ds^2 = dt_E^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (2.23)$$

Por conveniencia pasemos la ec. (2.19) del espacio euclidiano al espacio de Minkowski, tenemos que hacer el cambio $t_E = it$, la forma del propagador en el espacio de Minkowski es equivalente a la función de partición definida en mecánica estadística, la forma discreta del propagador esta dada por la ecuación

$$K(q, q'; t_E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \left(\frac{m}{2\pi i a} \right)^{n/2} \times \exp \left\{ a \sum_{j=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 + V(q_j) \right] \right\} dq_1 \dots dq_{n-1}, \quad (2.24)$$

donde $\beta = t_E/n$, en el límite cuando $n \rightarrow \infty$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{n-1} \beta \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\beta} \right)^2 + V(q_j) \right] = \int_0^{t_E} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt'_E} \right) + V(q(t'_E)) \right] dt'_E. \quad (2.25)$$

Finalmente

$$K(q, q'; t_E) = \sum_{\sigma \in \Omega} e^{-\beta S[\sigma]}, \quad (2.26)$$

donde otra vez σ corresponde a una trayectoria en Ω , y este es el conjunto de todas las posibles trayectorias que inician en q y terminan en q' en el tiempo t_E .

Capítulo 3

Modelos de espín

3.1. Los modelos $O(n)$

Definición: Retícula.

Definimos una retícula como un subgrupo discreto del espacio continuo \mathbb{R}^d que es isomorfo al espacio discreto de \mathbb{Z}^d , d es el número de dimensiones.

Los modelos de retícula son ampliamente usados para modelar efectos colectivos. En la mayoría de los casos se usan retículas compuestas por repeticiones de estructuras geométricas simples, algunos ejemplos en dos dimensiones son estructuras cuadradas, triangulares, hexagonales, etc. En este trabajo se emplea la estructura cuadrada. Formada por hipercubos de dimensión d , se define como el conjunto de sitios en el espacio de dimensión d cuyas posiciones son coordenadas enteras

$$\mathcal{R}^d = \{ \vec{x} \in \mathbb{R}^d | \vec{x} = (x_1, \dots, x_d) \wedge x_i \in \mathbb{Z} \}. \quad (3.1)$$

En cada sitio $\vec{x} \in \mathcal{R}^d$ hay $2d$ sitios ubicados a una unidad de distancia (dos por cada dimensión). El resto de sitios se ubican a una distancia mayor a una unidad, por lo que a esos $2d$ sitios son los vecinos mas cercanos \vec{x} .

En una simulación no es posible definir retículas infinitas por lo que hay que tomar un trozo finito. Consideremos el caso $d = 2$, en este caso la retícula esta definida en un plano, y tomemos un cuadrado $L \times L$. Se obtiene la retícula cuadrada de dimensión 2 y longitud L descrita como

$$\mathcal{R}_{\text{cuad}}^2 = \{ \vec{x} \in \mathcal{R}^2 | x_1, x_2 \in (0, L) \}. \quad (3.2)$$

Ya no tenemos el problema con la retícula infinita pero ahora los sitios del contorno tienen tres vecinos mas cercanos en vez de cuatro, y en los cuatro sitios ubicados las esquinas de la retícula solo se tienen dos dos vecinos mas cercanos. Para minimizar los efectos de volumen finito hay que solucionar estas asimetrías. Una posible solución es cambiar la topología de la retícula.

Vamos formar un cilindro juntando los dos extremos opuestos del cuadrado por medios de la condición $(0, x_2) = (L, x_2)$ y ahora vamos a cerrar el cilindro formando un toroide por media de la condición $(x_1, 0) = (x_1, L)$. La retícula especial que definimos es

$$\mathcal{R}_L^2 = \{ \vec{x} \in \mathcal{R}_{\text{cuad}}^2 | (x_1, x_2) = (x_1 + nL, x_2 + mL), n, m \in \mathbb{N} \}. \quad (3.3)$$

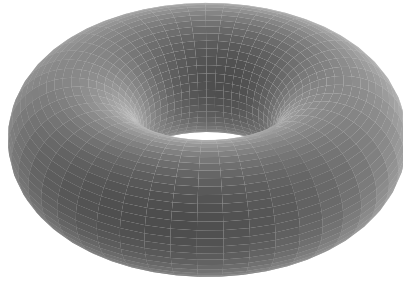


Figura 3.1: Retícula cuadrada bidimensional y de topología toroidal.

La estructura topológica de toroidal es utilizada en los videojuegos, cuando un personaje sale de la pantalla simplemente aparece por el extremo opuesto. En nuestro caso con esta estructura cada sitio tiene siempre cuatro vecinos mas cercanos. Al eliminar las asimetrías en la retícula finita se reducen los efectos de volumen finito inevitables en una simulación.

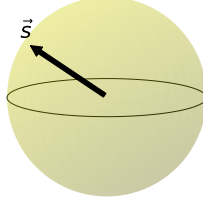
3.2. Modelo 2d $O(3)$

Definición: Espín clásico.

En el contexto de un sistema clásico, un espín es un vector unitario definido en un espacio abstracto de dimensión n . Es decir es un elemento de la esfera \mathcal{S}^{n-1} .

El modelo $O(n)$ es un modelo de espines clásicos. Cada espín \vec{s} ocupa un sitio \vec{x} en la retícula \mathcal{R}^d . Una configuración $[s]$ es un arreglo de espines \vec{s}_x , por ejemplo la configuración en la que todos los espines apuntan a la misma dirección se conoce como «cold start». Consideramos una configuración $[s]$, la energía depende del potencial de interacción magnética espín a espín, es de la forma

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{\langle x,y \rangle} \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y, \quad (3.4)$$

Figura 3.2: Espín en el modelo $O(3)$

donde \vec{s}_x y \vec{s}_y son los espines ubicados en los sitios \vec{x} y \vec{y} . J es una constante de acoplamiento y $\langle x, y \rangle$ se refiere a los espines vecinos más cercanos. Como la interacción magnética decae proporcionalmente al inverso del cuadrado de la distancia, la contribución mas grande se da entre los vecinos mas cercanos. Es conveniente despreciar las interacciones entre espines a mas de una unidad de distancia.

El caso de interés en este trabajo es el modelo $2d$ $O(3)$, un modelo de espines en la esfera \mathcal{S}^2 y una retícula bidimensional. Ya que se realizaran simulaciones en volúmenes finitos se usara la retícula toroidal \mathcal{R}_L^2 de longitud L definida en la ec. (3.3).

Las posiciones de los espines son pares enteros de la forma (i, j) tales que $i, j \in (1, \dots, L)$. Ya que las posiciones de los espines están dadas por dos coordenadas, es conveniente definir la notación para un espín en el sitio (i, j) como $\vec{s}_{i,j}$.

Un espín $\vec{s}_{i,j}$ de dimensión 3 restringido a la esfera \mathcal{S}^2 esta definido por tres coordenadas

$$\vec{s}_{i,j} = (\sin \theta_{i,j} \cos \phi_{i,j}, \sin \theta_{i,j} \sin \phi_{i,j}, \cos \theta_{i,j}). \quad (3.5)$$

En donde $\theta_{i,j} \in (0, \pi)$, $\phi_{i,j} \in (0, 2\pi)$, en algunos casos como la generación de configuraciones es ventajoso trabajar con coordenadas esféricas (θ, ϕ) , en otros casos como el calculo del producto escalar es mas conveniente usar las componentes (x, y, z) por lo que usaremos ambas descripciones en los casos que mas convenga.

3.3. Observables

Las propiedades macroscópicas de una amplia gama de materiales, pueden describirse mediante modelos de espines. Hay propiedades importantes como la energía y al magnetización que se deben medir para obtener información de estos sistemas. A lo largo de la carrera de física se realizan muchas mediciones en experimentos usando diferentes instrumentos y métodos directos o indirectos. En el caso los experimentos simulados hay que aplicar un enfoque estadístico. Empecemos por lo básico.

Un proceso estocástico es una secuencia de estados cuya evolución esta determinada por eventos aleatorios, y cada evento esta asociado a un valor aleatorio X . Consideremos un conjunto de variables aleatorias $\{X_i\}$, que representa el estado de un sistema a tiempo t_i , para $i \in \{1, \dots, N\}$, el

conjunto $\{X_i\}$ es una cadena de Markov. Las cadenas de Markov son usadas con frecuencia, como aproximaciones discretas a procesos físicos continuos.

Consideremos el tiempo de Markov t_i donde $i \in \{1, \dots, N\}$ y $O[s]_i$ es el valor de la observable en el instante t_i , el promedio aproximado de la observable en el intervalo temporal medido es

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O[s]_i, \quad (3.6)$$

donde $[s]_i$ es la configuración del sistema en el instante t_i . Aunque la observable varia en cada configuración sucesiva, el valor esperado se estabiliza cuando el tamaño de la partición aumenta. La desviación estándar de esta suma de configuraciones es

$$\text{std}(O) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left(\sum_{i=1}^N O[s]_i^2 - N \langle O \rangle^2 \right)}, \quad (3.7)$$

y el error estándar se define por la ecuación

$$\text{error}(O) = \frac{\text{std}(O)}{\sqrt{N}}. \quad (3.8)$$

Si cada medición es estadísticamente independiente, conduce al valor esperado de la observable y su error estándar definido por la ecuación

$$\langle O \rangle \simeq \langle O \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(O). \quad (3.9)$$

3.3.1. Energía

En los modelos $O(n)$ la energía esta dada por el hamiltoniano (3.4), veamos en detalle el caso de interés de este trabajo, el modelo $2d$ $O(3)$.

En este modelo cada espín $\vec{s}_{i,j}$ es vecino más cercano de cuatro espines $\{\vec{s}_{i+1,j}, \vec{s}_{i,j+1}, \vec{s}_{i-1,j}, \vec{s}_{i,j-1}\}$. Usando la notación para el caso bidimensional se puede reescribir el hamiltoniano en términos de sumas compactas sobre i, j (La suma total se divide para compensar que cada termino se ha sumado dos veces por la simetría de las sumas dobles) conduciendo a la ecuación

$$\mathcal{H}[s] = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L (\vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i+1,j} + \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i,j+1} + \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i-1,j} + \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i,j-1}). \quad (3.10)$$

Aunque es una ecuación sencilla de manejar es posible simplificarla intercambiando y recorriendo índices en el tercer termino de la ec. (3.10), se tiene

$$\sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i-1,j} = \sum_{j=1}^L \sum_{i=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i-1,j} = \sum_{j=1}^L \sum_{i=0}^{L-1} \vec{s}_{i+1,j} \cdot \vec{s}_{i,j}. \quad (3.11)$$

Separando términos se tiene

$$\sum_{j=1}^L \sum_{i=0}^{L-1} \vec{s}_{i+1,j} \cdot \vec{s}_{i,j} = \sum_{j=1}^L \sum_{i=1}^L \vec{s}_{i+1,j} \cdot \vec{s}_{i,j} + \sum_{j=1}^L (\vec{s}_{1,j} \cdot \vec{s}_{0,j} - \vec{s}_{L+1,j} \cdot \vec{s}_{L,j}). \quad (3.12)$$

Por las condiciones de frontera $\vec{s}_{1,j} = \vec{s}_{L+1}$ y $\vec{s}_{0,j} = \vec{s}_{L,j}$, por lo que

$$\sum_{j=1}^L (\vec{s}_{1,j} \cdot \vec{s}_{0,j} - \vec{s}_{L+1,j} \cdot \vec{s}_{L,j}) = 0 \quad (3.13)$$

Entonces

$$\sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i-1,j} = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i+1,j}. \quad (3.14)$$

De forma análoga para el cuarto termino de la ec. (3.10)

Intercambiando y recorriendo índices en el tercer termino de la ec. (3.10) se tiene

$$\sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i,j-1} = \sum_{i=1}^L \sum_{j=0}^{L-1} \vec{s}_{i,j+1} \cdot \vec{s}_{i,j}. \quad (3.15)$$

Separando términos se tiene

$$\sum_{i=1}^L \sum_{j=0}^{L-1} \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i,j+1} = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i,j+1} + \sum_{i=1}^L (\vec{s}_{i,0} \cdot \vec{s}_{i,1} - \vec{s}_{i,L} \cdot \vec{s}_{i,L+1}). \quad (3.16)$$

Por las condiciones de frontera $\vec{s}_{i,0} = \vec{s}_{i,L}$ y $\vec{s}_{i,1} = \vec{s}_{i,L+1}$, por lo que se tiene

$$\sum_{i=1}^L (\vec{s}_{i,0} \cdot \vec{s}_{i,1} - \vec{s}_{i,L} \cdot \vec{s}_{i,L+1}) = 0. \quad (3.17)$$

Entonces

$$\sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i,j-1} = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{i,j+1}. \quad (3.18)$$

Remplazando los términos (3.14), (3.18) en la ec. (3.10) y simplificando términos se llega a la forma compacta del hamiltoniano

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,j} \cdot (\vec{s}_{i+1,j} + \vec{s}_{i,j+1}). \quad (3.19)$$

La energía de una configuración depende de las diferencias relativas entre espines vecinos. Pensemos en una configuración $[s]$ a la que se aplica una rotación por un ángulo ϕ en la misma dirección a todos los espines en $[s]$, la transformación mantiene las diferencias relativas entre espines, por lo tanto, la nueva configuración $[s']$ es una configuración equivalente asociada a la misma energía que $[s]$.

Definición: Tiempo de Markov.

En un sistema estocástico, un conjunto de eventos sucesivos forman una cadena de Markov. El tiempo de Markov es un parámetro que indica en que evento se encuentra el sistema.

Pensemos en una configuración como un evento y en un conjunto de configuraciones como una cadena de Markov. El tiempo de Markov t_i indica la configuración del sistema en el ese instante. Como cada configuración tiene una energía asociada, la energía asociada a las configuraciones es diferente en cada valor de t_i . Una posible forma de determinar la energía en un intervalo temporal, es calcular el promedio de las energías asociadas a las configuraciones en ese intervalo. Resultando en la energía aproximada

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i. \quad (3.20)$$

La energía real asociada a ese intervalo es el promedio aproximado mas la incertidumbre asociada

$$\langle \mathcal{H} \rangle \simeq \langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(\mathcal{H}). \quad (3.21)$$

La energía es una propiedad extensiva, para comparar resultados en retículas de diferentes tamaños es importante considerar la densidad de energía. Se define como el valor esperado de la energía dividida por el volumen

$$\rho_{\mathcal{H}} = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{V}. \quad (3.22)$$

3.3.2. Magnetización

En modelos de espines clásicos, la magnetización m es un escalar que depende de la alineación de los espines de una configuración. Se define como la magnitud de la suma de los espines de una configuración dividido por el numero de espines V

$$m = \frac{1}{V} \left| \sum_{i,j} \vec{s}_{i,j} \right|. \quad (3.23)$$

Ya que los espines son unitarios se tiene que en una configuración de espines alineados a la misma dirección tiene magnetización

$$m = \frac{|V\vec{s}|}{V} = |\vec{s}| = 1 \quad (3.24)$$

Igual que con la energía un conjunto de configuraciones tiene un conjunto de configuraciones es una cadena de Markov y se puede medir la magnetización de aproximada en un intervalo temporal calculando el promedio de las magnetizaciones en ese intervalo

El promedio aproximado de la magnetización es

$$\langle m \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i. \quad (3.25)$$

El promedio de la magnetización es el valor aproximado con una incertidumbre asociada

$$\langle m \rangle \simeq \langle m \rangle \pm \text{error}(m) \quad (3.26)$$

3.3.3. Carga topológica

En el modelo de espines $O(3)$ definido en un cuadrado, las condiciones de frontera garantizan la invariante topológica [4, 5]

$$Q[s] = \frac{1}{8\pi} \int \varepsilon_{\mu\nu} \vec{s}(x) \cdot (\partial_\mu \vec{s}(x) \times \partial_\nu \vec{s}(x)) d^2x \in \mathbb{Z}. \quad (3.27)$$

La susceptibilidad topológica χ_t es una función de respuesta, es decir, describe la respuesta de un sistema a una perturbación externa y se define siguiendo la ecuación

$$\frac{1}{V} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \int e^{-S[\phi]} e^{iQ[\phi]\theta} d\phi \Big|_{\theta=0} = \frac{1}{V} \langle Q^2 \rangle |_{\theta=0}. \quad (3.28)$$

B. Breg y M. Lüscher introdujeron la definición geométrica de carga topológica reticular para estudiar la susceptibilidad topológica del modelo 2d $O(3)$. Para definir la carga topológica de una configuración se usa un acercamiento geométrico, la retícula se divide en plaquetas formadas por cuatro espines, esto a su vez se subdividen en un dos triángulos, alternando la orientación de la diagonal que divide cada cuadrado para replicar la propiedad de isotropía.

Formula de A. Oosterom y J. Strackee [6].

Sean $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathbb{R}^3$ y Ω el angulo solido generado por $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

$$\tan\left(\frac{\Omega}{2}\right) = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}{abc - (\vec{a} \cdot \vec{b})c + (\vec{c} \cdot \vec{a})b + (\vec{b} \cdot \vec{c})a}. \quad (3.29)$$

En la figura (3.3) las plaquetas se dividen en triángulos a, b . Para los triángulos a , los espines $\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3$ definen las esquinas de un triangulo esférico en \mathcal{S}^2 . Se calculan las variables para el triangulo 1

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_1 \\ y_1 &= \vec{s}_1 \cdot (\vec{s}_2 \times \vec{s}_3). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Al ser una esfera unitaria, el área del triangulo esférico esta dada por el angulo solido generado por los espines, definiendo el número complejo $z_a = x_a + iy_a$ y aplicando la formula de A. Oosterom y J. Strakee. Se obtiene

$$\Omega_1 = 2\arg(z_1). \quad (3.31)$$

Para los triángulos b se definen las variables

$$\begin{aligned} x_2 &= 1 + \vec{s}_4 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_4 \\ y_2 &= \vec{s}_4 \cdot (\vec{s}_3 \times \vec{s}_2). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Se obtiene

$$\Omega_2 = 2\arg(z_2). \quad (3.33)$$

La carga topológica se define como como

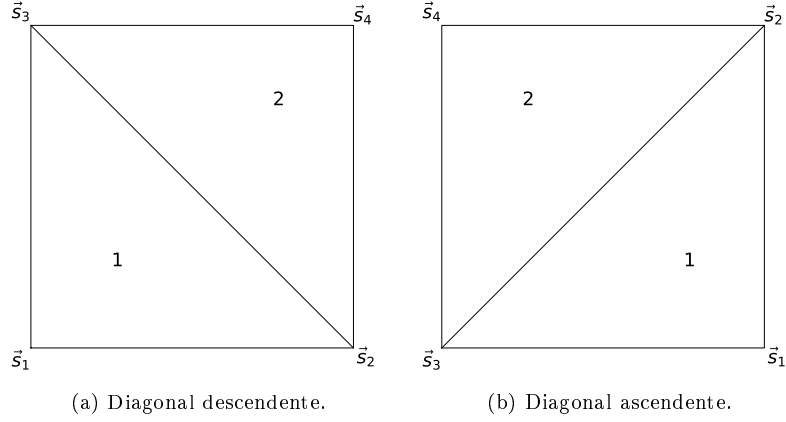


Figura 3.3: Orientaciones de posibles de los triángulos formados en la retícula.

$$Q[s] = \frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} (\Omega_1(i,j) + \Omega_2(i,j)) \in \mathbb{Z}, \quad (3.34)$$

donde $\Omega_a(i,j)$ y $\Omega_b(i,j)$ son las áreas de los triángulos esféricos en el trozo de la retícula indexado por i,j .

El valor esperado del cuadrado de la carga topológica es

$$\langle Q^2 \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i^2. \quad (3.35)$$

El cuadrado de la carga dividido por el volumen es la susceptibilidad topológica

$$\chi_t = \frac{\langle Q^2 \rangle}{V}. \quad (3.36)$$

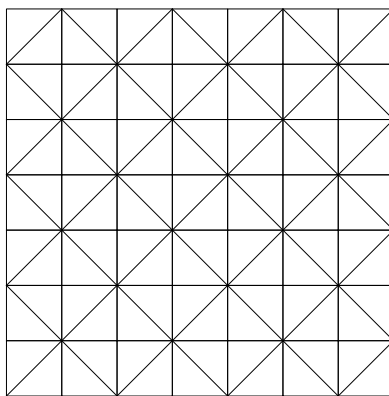


Figura 3.4: Descomposición de la retícula cardada bidimensional en triángulos alternado la dirección de la diagonal. Esta descomposición se usa para medir la carga topológica.

Capítulo 4

Métodos de Monte Carlo

En un proceso con probabilidades de transición estacionarias $p_{i,j}$, $i, j \in \{1, \dots, N\}$.

Una probabilidad de transición estacionaria es independiente de cuando una transición del estado s al estado s' ocurre en la cadena de Markov.

Si se puede pasar de un estado s a otro estado s' en un numero finito de transiciones, entonces s' es un estado accesible de s .

Una cadena de Markov es irreducible si cualquier estado es accesible desde cualquier otro estado. [7].

4.1. Balance detallado

El método de Monte Carlo, consiente en sumar sobre una muestra aleatoria de puntos en el espacio fase, en vez de una distribución homogénea. Ya que no todas las configuraciones en el espacio fase son igualmente probables la muestra aleatoria debe considerar la probabilidad de la configuración, para esto se propone una configuración y se define una probabilidad de aceptación dependiendo de la probabilidad de la configuración. La probabilidad de aceptación debe cumplir la ecuación de balance detallado

$$p[s \rightarrow s']p[s] = p[s' \rightarrow s]p[s'], \quad (4.1)$$

donde $p[s]$ es la probabilidad de la configuración $[s]$ y $p[s \rightarrow s']$ es la probabilidad de la transición de la configuración $[s]$ a $[s']$, de igual manera $p[s']$ es la probabilidad de la configuración $[s']$ y $p[s' \rightarrow s]$ es la probabilidad de la transición de la configuración $[s']$ a $[s]$.

4.2. Algoritmo de Metropolis

En el modelo de espines $O(3)$, definido en la retícula cuadrada \mathcal{R}_L^2 , la de energía de una configuración se define por la ec. (3.19). Dadas dos configuraciones $[s]$ y $[s']$, la diferencia en la energía de las configuraciones es

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s]. \quad (4.2)$$

vamos hacer un cambio a cada uno de los espines en el ensamble dada la probabilidad de pasar de el estado $[s]$ al estado $[s']$ por $p[s \rightarrow s']$, dado que es igualmente probable pasar a cualquier estado

dentro de la región delimitada por la distancia 2α , si el cambio en el estado cae en la región permitida entonces las probabilidades de transición entre ambos estados es igual $p[s \rightarrow s'] = p[s' \rightarrow s]$, si no la probabilidad de transición es cero

$$p[s \rightarrow s'] = \begin{cases} e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} & \text{si } \mathcal{H}[s'] \geq \mathcal{H}[s] \\ 0 & \text{si } \mathcal{H}[s'] < \mathcal{H}[s]. \end{cases} \quad (4.3)$$

Metropolis es un algoritmo de actualización local, esto implica que dada una configuración inicial se propone un cambio individual en la configuración y se acepta con probabilidad $p[s \rightarrow s']$. Si la energía de la configuración aumenta con el cambio o se acepta si la energía de la configuración disminuye. Para aplicar el algoritmo caso particular del al modelo 2-d $O(3)$ hay que escribir la probabilidad de transición en términos de los espines $\vec{s}_{i,j} \in \mathbb{Z}_L^2$.

Dada una configuración $[s]$ se elije un elemento $\vec{s}_{i,j} \in [s]$ un cambio $\vec{s}'_{i,j} \in S^2$. La energía de sistema antes y después del cambio se puede escribir en términos de los espines vecinos de $\vec{s}_{i,j}$

$$\Delta\mathcal{H}_{i,j} = \mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s] = -(\vec{s}'_{i,j} - \vec{s}_{i,j}) \cdot (\vec{s}_{i+1,j} + \vec{s}_{i,j+1} + \vec{s}_{i-1,j} + \vec{s}_{i,j-1}). \quad (4.4)$$

El cambio en el espín $\vec{s}_{i,j}$ se acepta con probabilidad $p_{i,j}$, si la energía de la configuración disminuye por el cambio la probabilidad de aceptar el cambio es 1, si la energía de la configuración aumenta después del cambio la probabilidad es $e^{-\beta\Delta H}$. Siguiendo lo anterior la probabilidad de aceptación de un cambio en la configuración es

$$p_{i,j} = \begin{cases} e^{-\beta\Delta\mathcal{H}_{i,j}} & \text{si } \Delta\mathcal{H}_{i,j} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \Delta\mathcal{H}_{i,j} < 0. \end{cases} \quad (4.5)$$

El cambio se acepta con probabilidad $p_{i,j}$, se elije un otro elemento de la configuración y se repiten los pasos anteriores, una forma de elegir los espines es el método lexicográfico, consiste en empezar por el primer elemento de la cuadrícula $s_{1,1}$ [8].

4.3. Algoritmo de Glauber

El algoritmo Glauber es al igual que el algoritmo Metropolis de actualización local el único cambio es la probabilidad de aceptación. Se propone la transición de probabilidad

$$\begin{aligned} p[s \rightarrow s'] &= \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}{1 + e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}} \\ &= \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}[s] - \mathcal{H}[s'])}}{1 + e^{\beta(\mathcal{H}[s] - \mathcal{H}[s'])}} e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} \\ &= p[s' \rightarrow s] e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Reordenando términos y dividiendo por Z

$$p[s \rightarrow s'] \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s]}}{Z} = p[s' \rightarrow s] \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s']}}{Z}. \quad (4.7)$$

Se cumple la ecuación de balance detallado

$$p[s \rightarrow s']p[s] = p[s' \rightarrow s]p[s']. \quad (4.8)$$

Se propone cambiar el espín $\vec{s}_{i,j}$ a $\vec{s}'_{i,j}$, la diferencia en la energía antes y después del cambio esta dado por la ec. (4.4), la probabilidad de aceptación para el cambio de el espín es

$$p_{i,j} = \frac{e^{-\beta\Delta H_{i,j}}}{1 + e^{-\beta\Delta H_{i,j}}}. \quad (4.9)$$

4.4. Algoritmo cluster

El algoritmo cluster sugerido por R. Swendsen y J. Wang, se basa en la observación de que la función de partición se puede escribir como una suma sobre un grupo de distribuciones [9]. El algoritmo single-cluster consiste en generar un grupo de espines enlazados y cambiar la configuración de todos los espines, el algoritmo cluster evita la desaceleración cerca del punto crítico, que es característica de los algoritmos de actualización local. Se elije un espín aleatorio en la configuración $\vec{s} \in [s]$. Se define un vector aleatorio $\vec{w} \in S^2$ y se calcula la reflexión de \vec{s} respecto a el plano normal a \vec{w} con lo que se define el espín

$$\vec{s}' = \vec{s} - 2(\vec{w} \cdot \vec{s})\vec{w}. \quad (4.10)$$

Para formar un grupo de espines se define una probabilidad de enlace

$$p_{\text{enlace}} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} & \text{si } \mathcal{H}[s'] \geq \mathcal{H}[s] \\ 0 & \text{si } \mathcal{H}[s'] < \mathcal{H}[s]. \end{cases} \quad (4.11)$$

La probabilidad de enlace se prueba con los espines vecinos mas cercanos, si dos espines se enlazan entonces forman parte del mismo grupo. El siguiente paso es probar los enlaces de los nuevos elementos del grupo en el caso de que haya enlaces. El proceso de probar los enlaces de los espines se repite hasta que no se añadan nuevos espines al grupo. Una forma eficiente de formar grupos, es aplicar el algoritmo de Hoshen-Kopelman que se describe para el modelo 2-d $O(3)$ en el apéndice.

En el algoritmo multi-cluster se generan múltiples grupos de espines, estos grupos deben contener el total de espines de la configuración. El tamaño mínimo para un grupo es el de un espín y el máximo es el total de espines. Una vez formados los grupos se cambia la configuración de cada grupo reflejando los espines respecto al plano normal a \vec{w} con probabilidad $p_{\text{cluster}} = 1/2$.

Capítulo 5

Fenómenos críticos

5.1. Transiciones de fase

Dos propiedades relevantes en la descripción macroscópica de un ferro-magneto son, la energía total y el momento magnético total, dividir estas cantidades por el volumen da la densidad de energía y la magnetización, estas cantidades tienen el nombre de variables mecánicas del sistema. Hay otro tipo de cantidades que son externas como la temperatura T y el campo magnético H . Este tipo de variables interactúan con los espines y cambian las variables mecánicas.

Una transición de fase ocurre cuando hay una discontinuidad en la energía libre o en una de sus derivadas, la transición de fase presenta un cambio visible en las propiedades macroscópicas del sistema. La energía es proporcional al logaritmo de la función de partición

$$\mathcal{F} = -kT \ln Z, \quad (5.1)$$

las propiedades termodinámicas del sistema se calculan a partir de la energía libre donde, la primera ley de la termodinámica para ferromagnetos es

$$dU = TdS - MdH. \quad (5.2)$$

En donde dU es el cambio en la energía, dS en la entropía y dH en el campo magnético. Las primeras derivadas de la energía libre son

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad S = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}\right)_H, \quad M = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H}\right)_T. \quad (5.3)$$

Las segundas derivadas son

$$c_H = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_H, \quad C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_M, \quad \chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T. \quad (5.4)$$

Una transición de fase de segundo orden implica una discontinuidad en una segunda derivada de la energía libre.

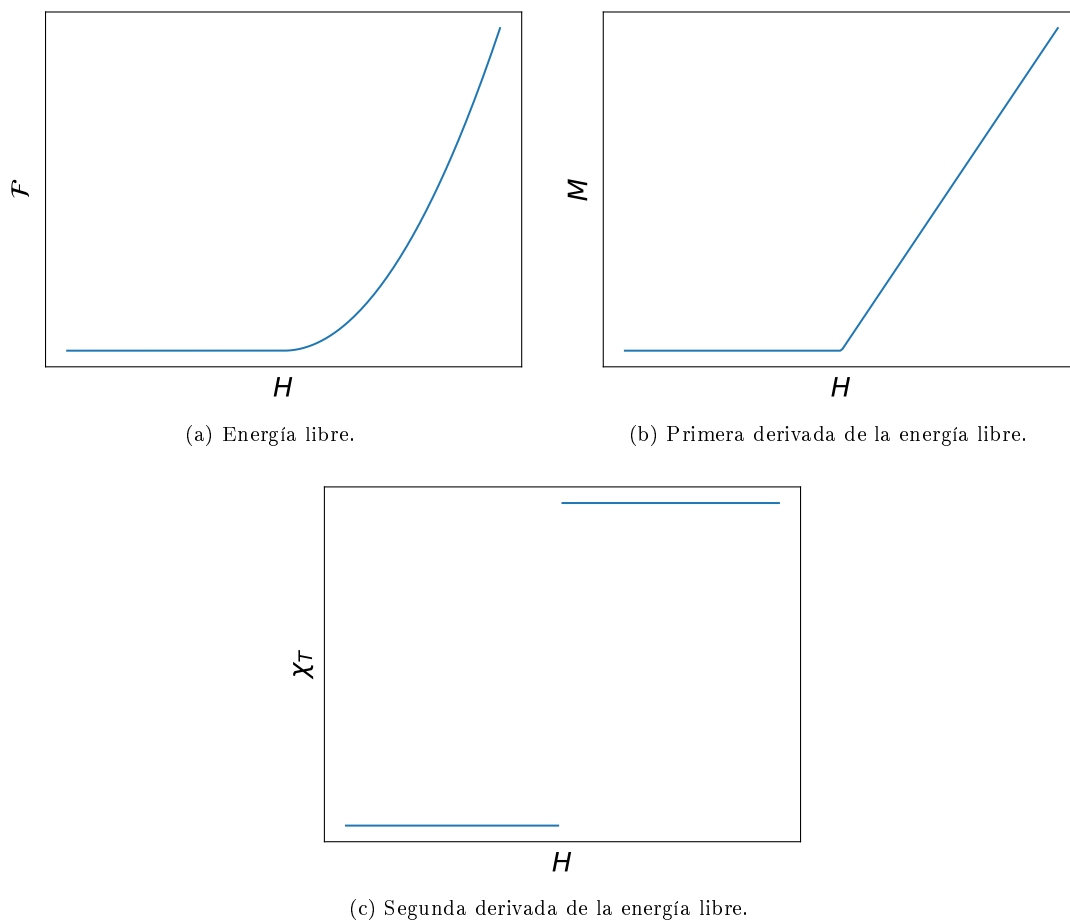


Figura 5.1: Transición de fase de segundo orden.

5.2. Función de correlación

Las variables termodinámicas como la magnetización o la entropía son propiedades macroscópicas, entender lo que pasa en las transiciones de fase requiere de un enfoque a nivel microscópico. La función de correlación se define

$$\langle \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \rangle_c = \langle \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \rangle - \langle \vec{s}_x \rangle \cdot \langle \vec{s}_y \rangle. \quad (5.5)$$

En los modelos de espín la función de correlación mide que tan fuertemente se afectan dos espines $\vec{s}_x, \vec{s}_y \in \mathcal{S}^{n-1}$.

En el modelo 2-d $O(3)$

$$\vec{\sigma}_i = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \vec{s}_{i,k}, \quad \vec{\sigma}_j = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \vec{s}_{l,j}, \quad (5.6)$$

$$\langle \vec{s}_{i,k} \cdot \vec{s}_{l,j} \rangle_c = \frac{1}{L^4} \sum_{i=1}^L \sum_{k=1}^L \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{i,k} \cdot \vec{s}_{l,j} - \frac{1}{L^4} \sum_{i=1}^L \sum_{k=1}^L \vec{s}_{i,k} \cdot \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{s}_{l,j}, \quad (5.7)$$

$$\langle \vec{s}_{i,j} \cdot \vec{s}_{k,l} \rangle_c = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^L \vec{\sigma}_i \cdot \sum_{j=1}^L \vec{\sigma}_j = \langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle_c. \quad (5.8)$$

$$\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle_c = A \cosh \left(\frac{|i-j| - L/2}{\xi} \right), \quad (5.9)$$

donde ξ es la longitud de correlación

$$\xi \propto T^{-\nu}, \quad (5.10)$$

y ν es un exponente crítico.

5.3. Escalamiento

Dado un potencial termodinámico

$$G(H, T) = G(H, \epsilon). \quad (5.11)$$

Cerca de el punto crítico existen exponentes a_H y a_T tales que se cumple la ecuación

$$G(\lambda^{a_H} H, \lambda^{a_T} \epsilon) = \lambda G(H, \epsilon), \quad (5.12)$$

donde $\lambda \in \mathbb{R}^+$.

$$M = - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \Big|_{T, B=0} \propto (T_c - T)^\beta, \quad (5.13)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \Big|_{T, B=0} \propto (T_c - T)^\gamma, \quad (5.14)$$

$$M|_{T=T_c} \propto B^{1/\delta}, \quad (5.15)$$

$$C = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \propto (T - T_c)^{-\alpha}, \quad (5.16)$$

$$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}. \quad (5.17)$$

$$(5.18)$$

5.4. Universalidad

Debido a el numero de elementos que interactúan en un modelo microscópico realista, no es posible hacer predicciones exactas sobre todas las cantidades relevantes. El concepto de clases de universalidad fue señalado primeramente por Kadanoff, posteriormente en 1970 E. Fermi se baso en el trabajo de Griffiths, Jasnow y otros investigadores. Se estudiaron datos experimentales de diversos materiales cerca de sus respectivos puntos críticos, y se encontró que los datos de los diversos sistemas son descritos por la misma función de escalamiento. El aparente comportamiento universal motivo a buscar una respuesta para la siguiente cuestión.

¿Que características, características de las interacciones microscópicas son importantes para determinar puntos críticos, exponentes críticos y funciones de escalamiento y que características son irrelevantes?

En general la clase de universalidad y el valor de los exponentes críticos no depende de la estructura local de los acoplamientos. O dicho de otra forma. Aunque las interacciones son a nivel local, los exponentes críticos dependen solo de la dimensión espacial y las simetrías del sistema.

5.5. Renormalización

La idea de que un punto crítico puede ser mapeado en un punto fijo, eligiendo la transformación correcta del hamiltoniano del sistema. Es la motivación de los grupos de renormalización. Entre las ventajas de la renormalización. Permite obtener estimaciones numéricas de los exponentes críticos. Con lo que proporciona una base para describir universalidad y escalamiento.

Entre los nuevos conceptos que emergen esta la idea de dimensiones marginalmente altas y bajas d_- y d_+ , la teoría clásica proporciona una descripción adecuada de los puntos y exponentes críticos cuando para la dimensión del sistema d se cumple que $d > d_+$. En el caso $d = d_+$ el modelo clásico usualmente funciona con algunas correcciones. Para el caso $d < d_-$ las fluctuaciones del sistema son tan fuertes que no se mantiene el orden estructural para ninguna temperatura $T > 0$. En el caso $d_- < d < d_+$ no se sabe con exactitud las propiedades del sistema salvo en el caso limite en el que el numero de elementos en el sistema n tiende a infinito.

5.6. Tiempo de auto-correlación

La simulación de un sistema cerca de un punto crítico un problema complicado, en general la dinámica de las simulaciones desacelera considerablemente cerca de un punto crítico. La desaceleración es una complicación cuando se dispone de un tiempo de computo finito por lo que es de gran interés entender como cambia el sistema del sistema. La evolución de un sistema se caracteriza por el tiempo de auto-correlación, mide la velocidad a la que un sistema pasa a un estado estadísticamente independiente. Consideremos una observable A y A_t el valor de A en el instante t . Definimos la auto-correlación como

$$C_{AA}(t) = \langle A_s A_{s+t} \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (5.19)$$

Si la cadena de Markov cumple la condición de balance detallado, los valores propios de la matriz de transferencia son reales, se tiene que

$$C_{AA}(t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-t/\tau_{\text{exp},\alpha}}. \quad (5.20)$$

El tiempo de autocorrelacion se estima como

$$\tau_{\text{exp}} = \text{máx}(\tau_{\text{exp},\alpha}) \quad (5.21)$$

Donde $\tau_{\text{exp},A}$ es el tiempo de auto-correlación exponencial. Una definición alternativa es el tiempo de auto-correlación integrado

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \frac{C_{AA}(t)}{C_{AA}(0)}. \quad (5.22)$$

El tiempo de auto-correlación depende del algoritmo de Monte Carlo particular que se use y en general cerca de un punto crítico diverge según la ecuación

$$\tau \propto \xi^z \quad (5.23)$$

donde z es el exponente crítico dinámico.

Capítulo 6

Simulaciones en equilibrio

En el modelo 2d $O(3)$ hay dos variables termodinámicas, el volumen V y la temperatura T . Para V y T constantes y dada una configuración inicial $[s]_1$ con energía \mathcal{H}_1 . La probabilidad de aceptación favorece las configuraciones de menor energía a la vez que la temperatura aumenta la energía permitiendo configuraciones de mayor energía. En cada actualización la energía del sistema evoluciona hasta estabilizarse en una sucesión de configuración que fluctuante alrededor de una energía media constante. En la Figura (6.1) se ve una comparación entre la evolución de la densidad de energía para una configuración inicial aleatoria «Hot start». Y una configuración inicial completamente alineada a una dirección «Cold start».

Tanto la susceptibilidad topológica como la magnetización se comportan de forma similar a la densidad de energía. Por lo que las observables se promedian a partir de una configuración que ya este en equilibrio termodinámico.

6.1. Metodología

Simular el modelo 2d $O(3)$ en un ordenador requiere de la transición de la teoría a un programa capaz de generar configuraciones de espines aleatorias y actualizarlas siguiendo los criterios específicos de cada algoritmo. El programa debe ser capaz de medir y registrar las observables de interés. Una simulación de un sistema equilibrio sigue los siguientes pasos.

1. Se genera una configuración en equilibrio termodinámico a temperatura T .
2. Se actualiza la configuración.
3. Se miden las observables.
4. Regresa al paso 2.

Como se ve en la Figura (6.1), las observables de un sistema fluctúan en respuesta a los cambios en la configuración. Por lo que se calculan suficientes barridos para alcanzar la precisión deseada. En la misma imagen hay dos trayectorias. La trayectoria «Cold start», parte de un estado de energía máxima en el que todos los espines están alineados. La trayectoria «Hot start», parte de una configuración aleatoria. Después de unos 20 barridos ambas trayectorias oscilan alrededor una energía que corresponde al sistema termalizado.

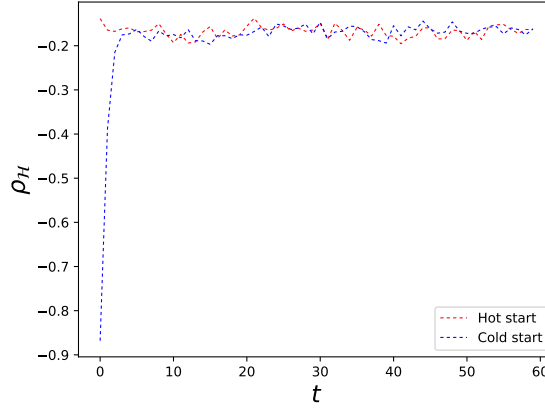


Figura 6.1: Termalización de dos sistemas 2d $O(3)$ a temperatura $T = 4$, $L = 64$. La trayectoria roja corresponde a una configuración inicial de espines aleatorios. La trayectoria azul corresponde a una configuración inicial de espines alineados en la dirección $(0, 0, 1)$.

6.2. Resultados

Se realizó una serie de experimentos numéricos para determinar características generales del modelo 2d $O(3)$. Se calculó la longitud de correlación para las temperaturas $T \in \{0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.4, 1.6\}$, en retículas de longitud $L \in \{32, 64, 128\}$. En todos los casos se partió de una configuración «hot start» y se termalizó durante 10^4 actualizaciones del algoritmo multi cluster.

Se ajustaron las longitudes de correlación respecto a la temperatura a la función

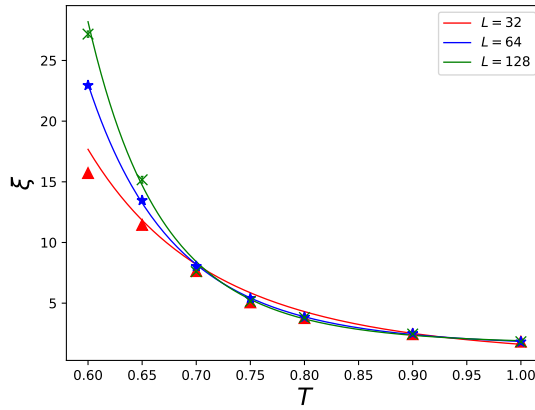
$$\xi = AT^{-\nu}. \quad (6.1)$$

Cada uno de los exponentes críticos está registrado en la Tabla (6.1).

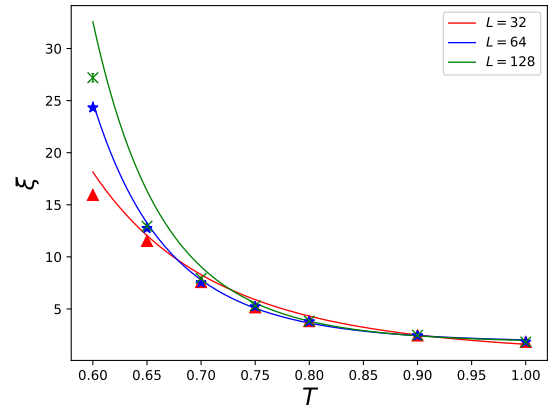
L	ν_{ML}	ν_{MA}	ν_{GL}	ν_{GA}	ν_{MC}
32	5.1(7)	5.3(5)	5.2(5)	5.0(6)	5.0(4)
64	7.5(2)	8.7(9)	8.3(9)	7.3(4)	8.0(3)
128	8.83(1)	9.3(5)	11.21(7)	9.4(2)	9.7(7)

Cuadro 6.1: Exponentes críticos de la longitud de correlación.

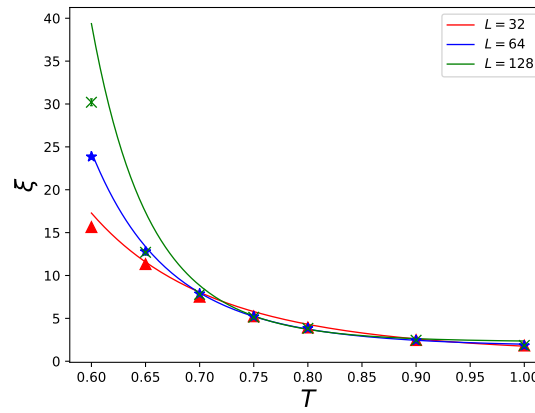
El tiempo de auto correlación se calculó en equilibrio térmico para las temperaturas $T \in \{0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8\}$. En todos los casos se partió de un hot-start y se termalizó durante 10^4 actualizaciones del algoritmo multi cluster. Finalmente se promedió sobre 10^5 barridos del algoritmo de metrópolis lexicográfico fig. .



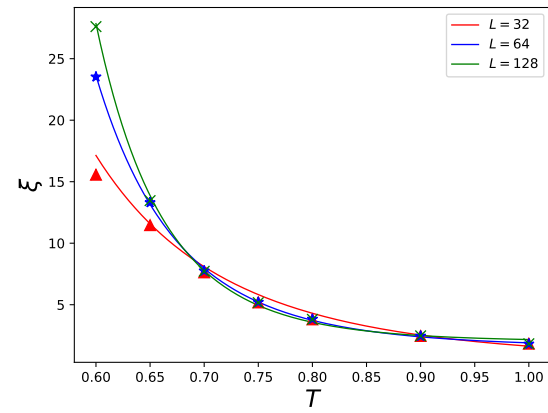
(a) Metropolis lexicográfico



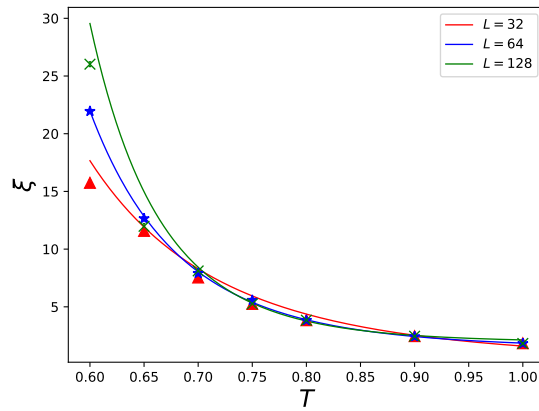
(b) Metropolis aleatorio



(c) Glauber lexicográfico



(d) Multi cluster

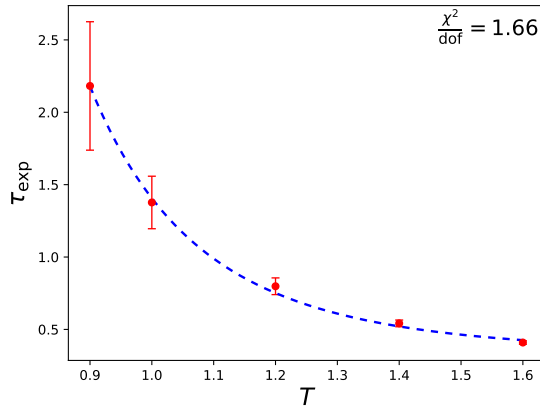


(e) Glauber aleatorio

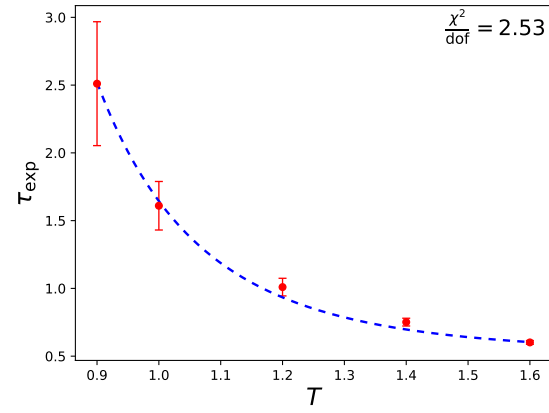
Figura 6.2: Longitud de correlación en función de la temperatura para las retículas de longitud $L \in \{32, 64, 128\}$.

Algoritmo	z_Q	$z_{\mathcal{H}}$	z_m
Metropolis lexicográfico	3.2(5)	3.8(1)	6.4(2)
Metropolis aleatorio	3.4(2)	3.8(1)	6.3(4)
Glauber lexicografico	3.8(4)	4.0(2)	6.6(3)
Glauber aleatorio	3.6(3)	3.8(1)	6.7(5)
Multi cluster	-	-	11.2(7)

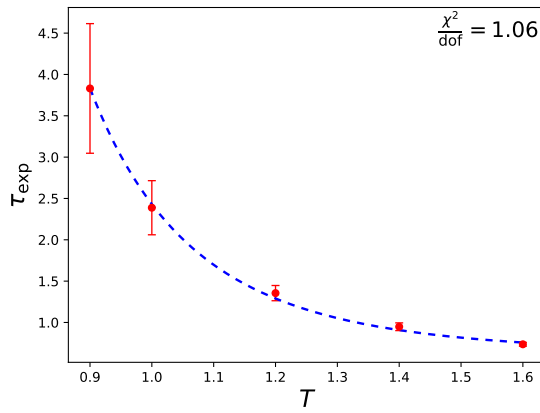
Cuadro 6.2: Exponente crítico z para diferentes algoritmos.



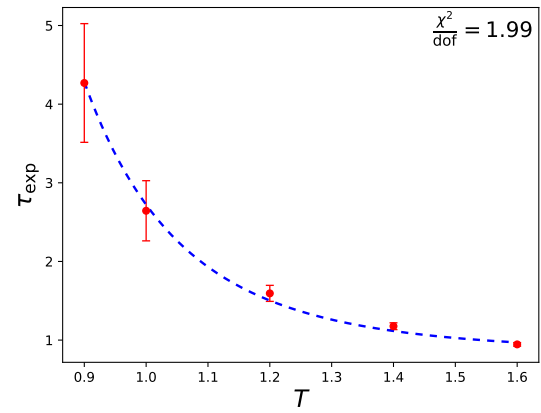
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



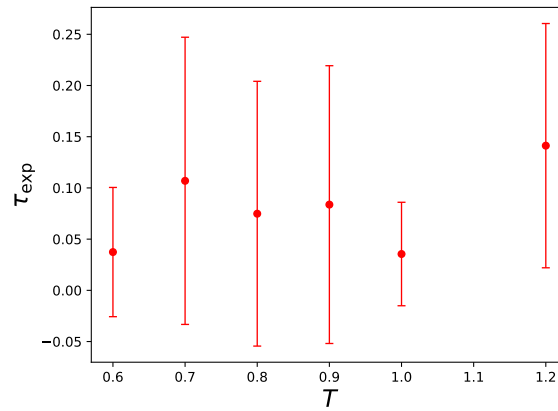
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

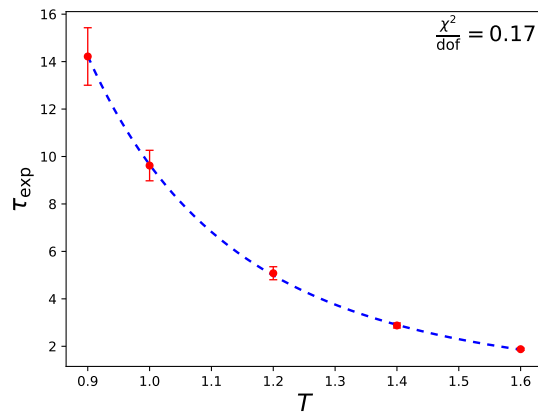


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

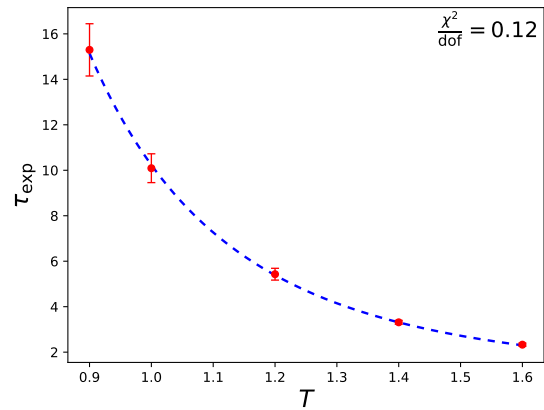


(e) Algoritmo de Multi cluster.

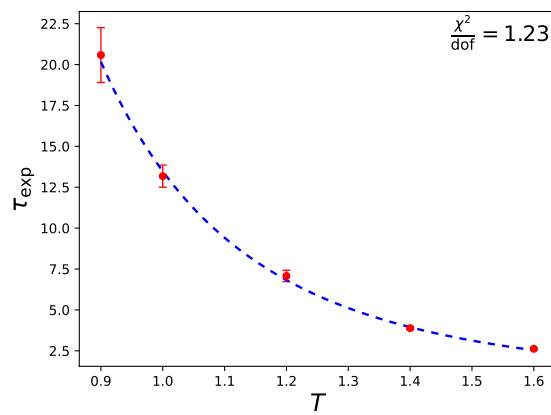
Figura 6.3: Tiempo de autocorrelación de la carga topológica en función de la temperatura en una retícula de longitud $L = 64$.



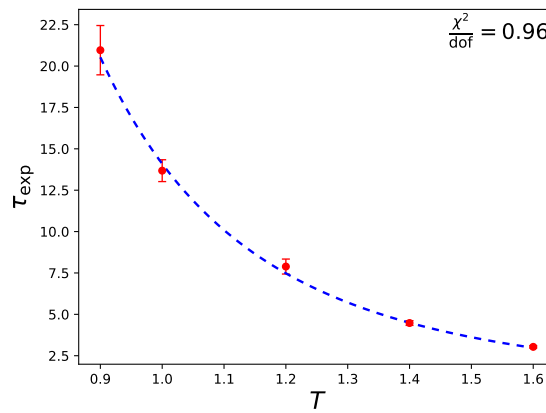
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



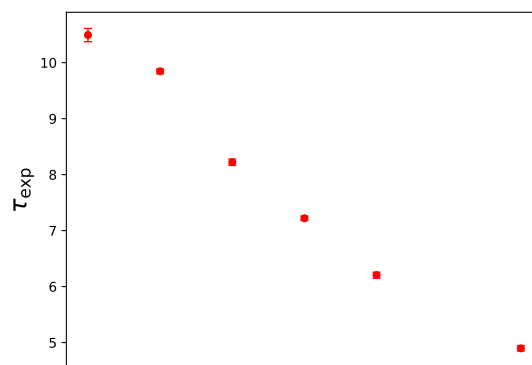
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.

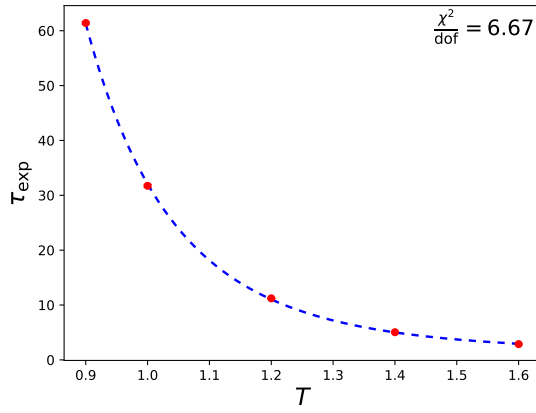


(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

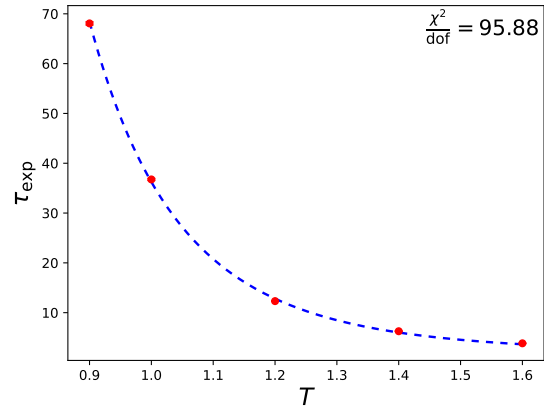


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

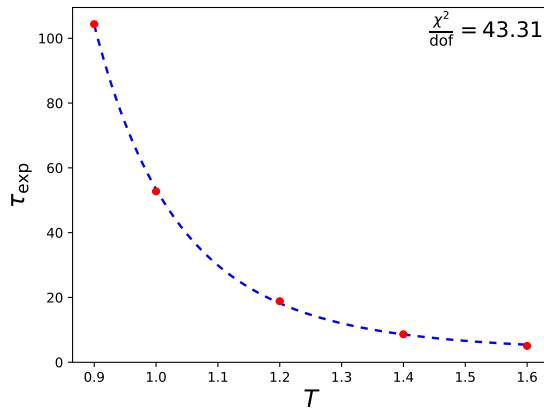




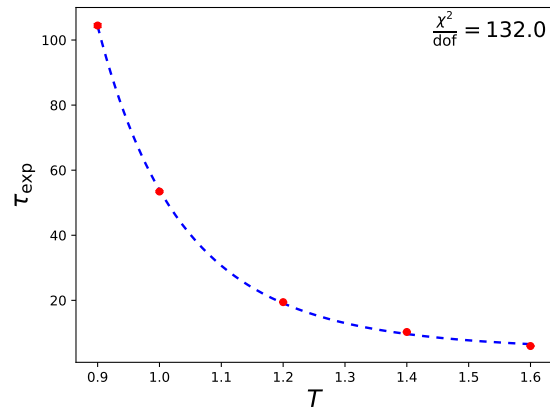
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



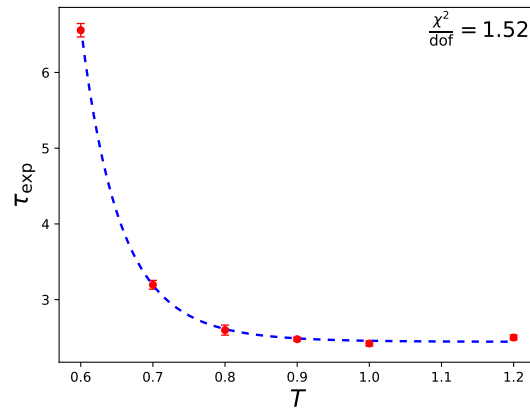
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.



(e) Algoritmo de Multi cluster.

Figura 6.5: Tiempo de autocorrelación de la magnetización en función de la temperatura en una retícula de longitud $L = 64$.

Capítulo 7

Simulación de enfriamientos

7.1. Metodología

Para simular un enfriamiento rápido, el algoritmo multi cluster se vuelve inconveniente ya que genera configuraciones estadística-mente independientes en pocas actualizaciones. Emplearemos un enfoque distinto: en vez de promediar entre configuraciones sucesivas en equilibrio, se realiza un número N enfrenamientos y se promedia entre las configuraciones de los N enfrenamientos a igual temperatura

Se define la velocidad de enfriamiento

$$v_{\text{cool}} = \frac{T_f - T_i}{\tau_{\text{cool}}} \quad (7.1)$$

donde τ_{cool} es el número de pasos para llegar desde la temperatura inicial T_i hasta la temperatura final T_f . Conforme avanza el tiempo de Markov en el rango (t, τ_{cool}) , la temperatura actual cambia linealmente siguiendo la ecuación

$$T(t) = T_i + tv_{\text{cool}}. \quad (7.2)$$

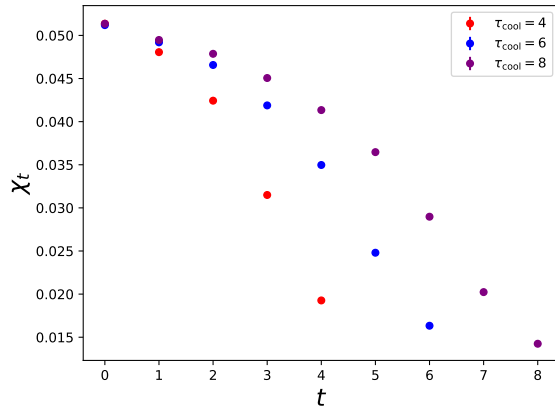
Empezando desde $t = 0$, un enfriamiento consta de los siguientes pasos.

1. Se genera una configuración en equilibrio termodinámico a temperatura T .
2. Se actualiza la configuración a temperatura $T(t)$
3. Se miden las observables.
4. Si $T < 0$, se regresa al paso 2.

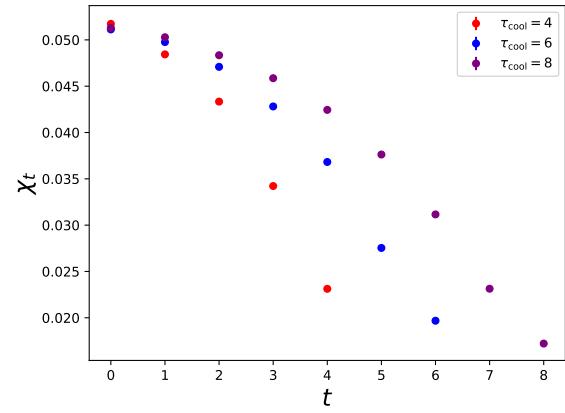
Al terminar el proceso se tiene una trayectoria para cada observable en función de la temperatura. Se realizan N enfriamientos y se promedian las trayectorias, donde el promedio se refiere a un instante fijo t de cada temperatura.

7.2. Resultados

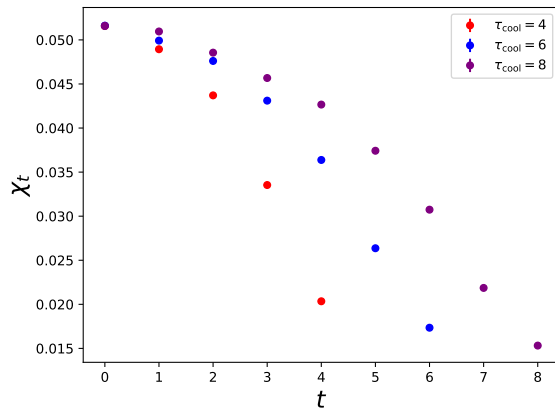
Se realizaron enfriamientos desde la temperatura $T_i = 4$ hasta $T_f = 0$, usando las velocidades de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8, 10, 12, 14, 16\}$. Para cada experimento se realizaron 10^5 enfriamientos.



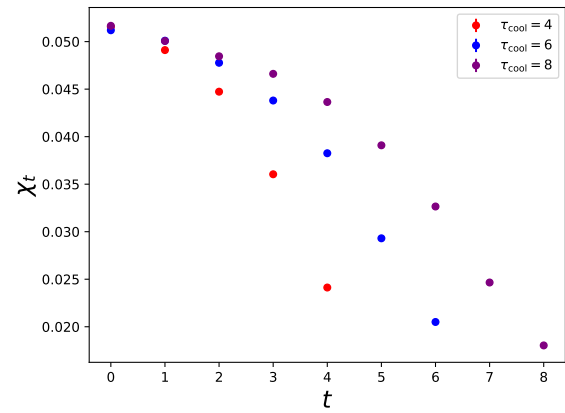
(a) Metropolis lexicográfico



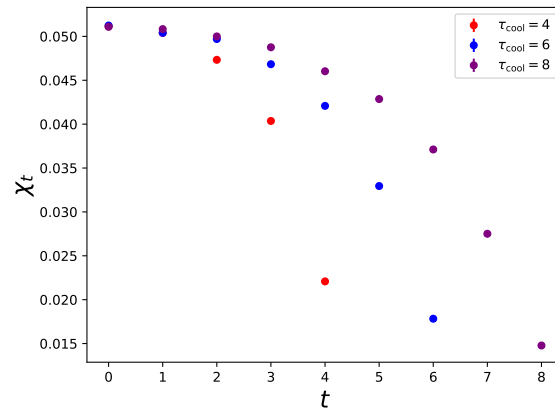
(b) Metropolis aleatorio



(c) Glauber lexicográfico



(d) Glauber aleatorio



(e) Multi cluster

Figura 7.1: Evolución de los enfriamientos de la susceptibilidad topológica χ_t respecto a la temperatura T , para diferentes velocidades de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8\}$.

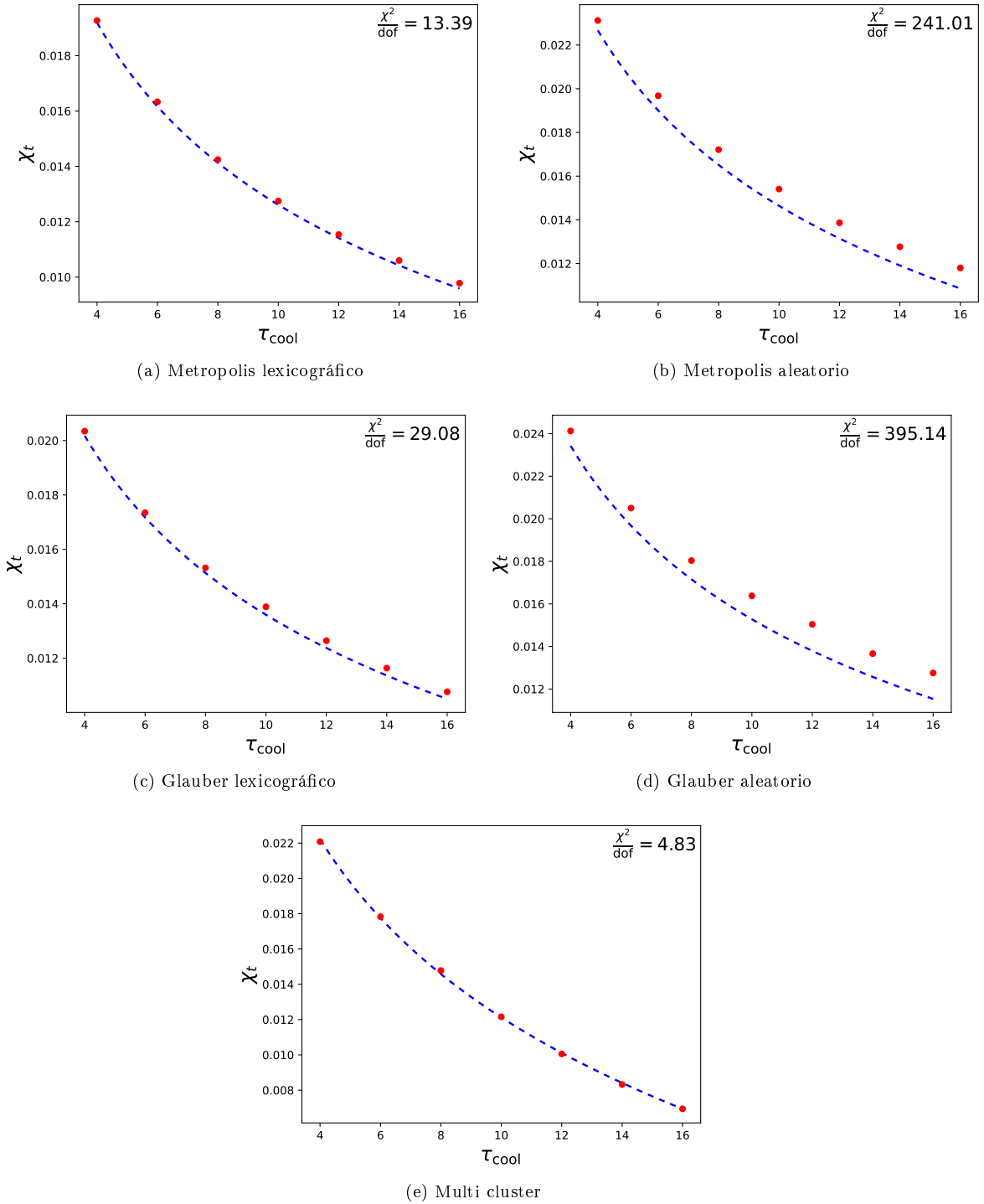


Figura 7.2: Susceptibilidad topológica χ_t respecto a la velocidad de enfrenamiento τ_{cool} .

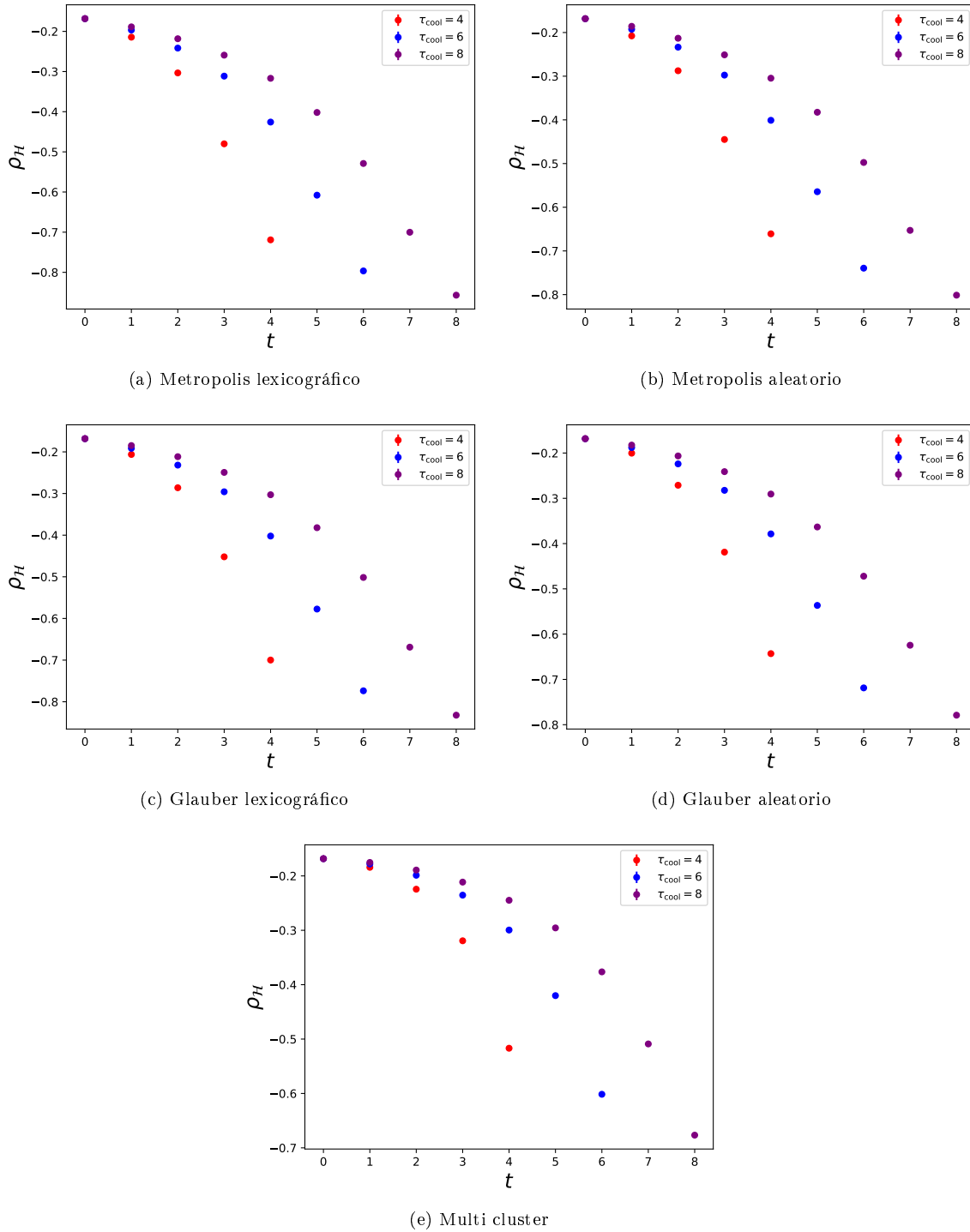
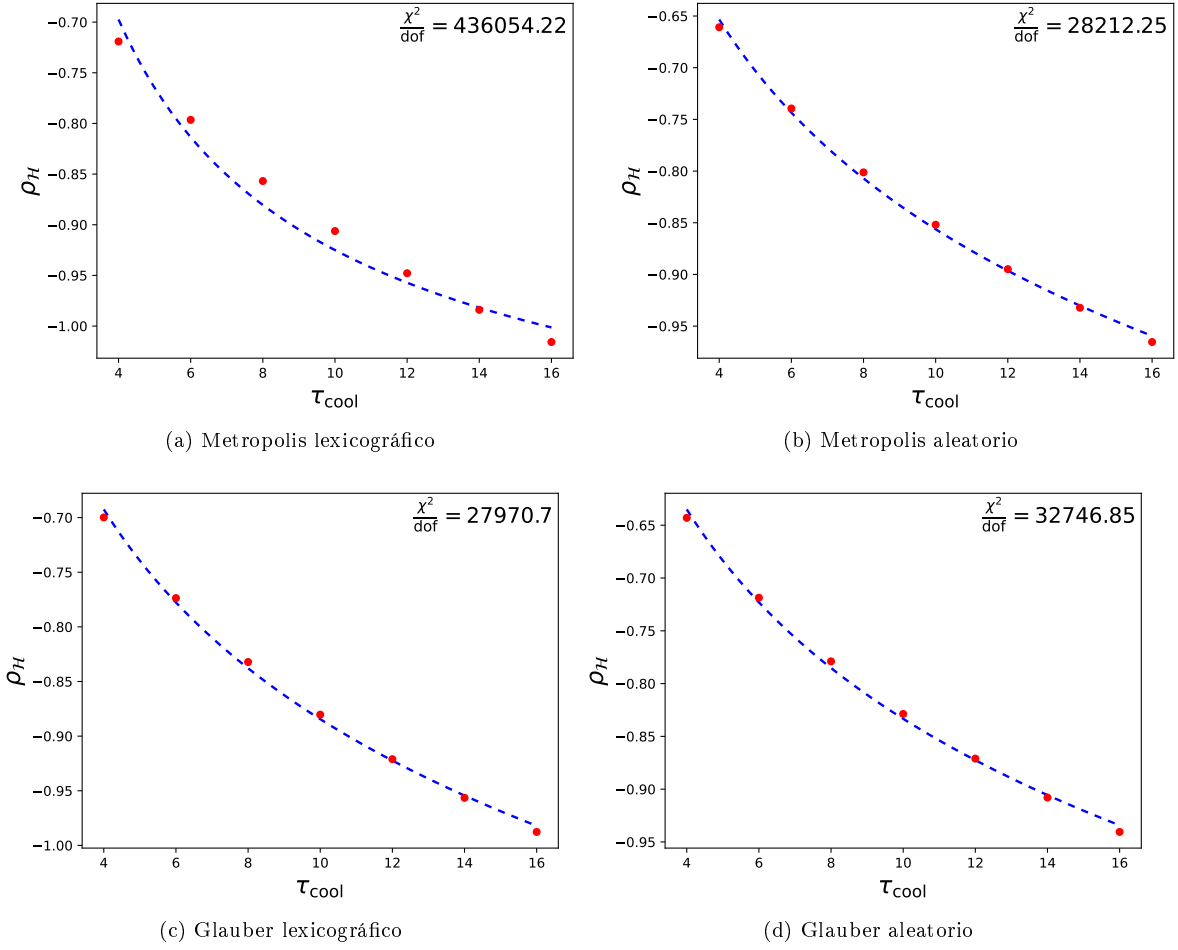


Figura 7.3: Evolución de los enfriamientos de la densidad de energía ρ_H respecto a la temperatura T , para diferentes velocidades de enfriamiento $\tau_{cool} \in \{4, 6, 8\}$.

Figura 7.4: Susceptibilidad densidad de energía ρ_H respecto a la velocidad de enfrenamiento τ_{cool} .

Algoritmo	z_Q	z_H	z_m
Metropolis lexicográfico	0.49(1)	0.0126(2)	0.261(5)
Metropolis aleatorio	0.49(2)	0.0128(3)	0.242(7)
Glauber lexicográfico	0.46(1)	0.0122(3)	0.259(6)
Glauber aleatorio	0.46(1)	0.0125(3)	0.246(7)
Multi cluster	0.74(6)	0.0156(7)	0.608(8)

Cuadro 7.1: Exponente crítico dinámico z para diferentes algoritmos.

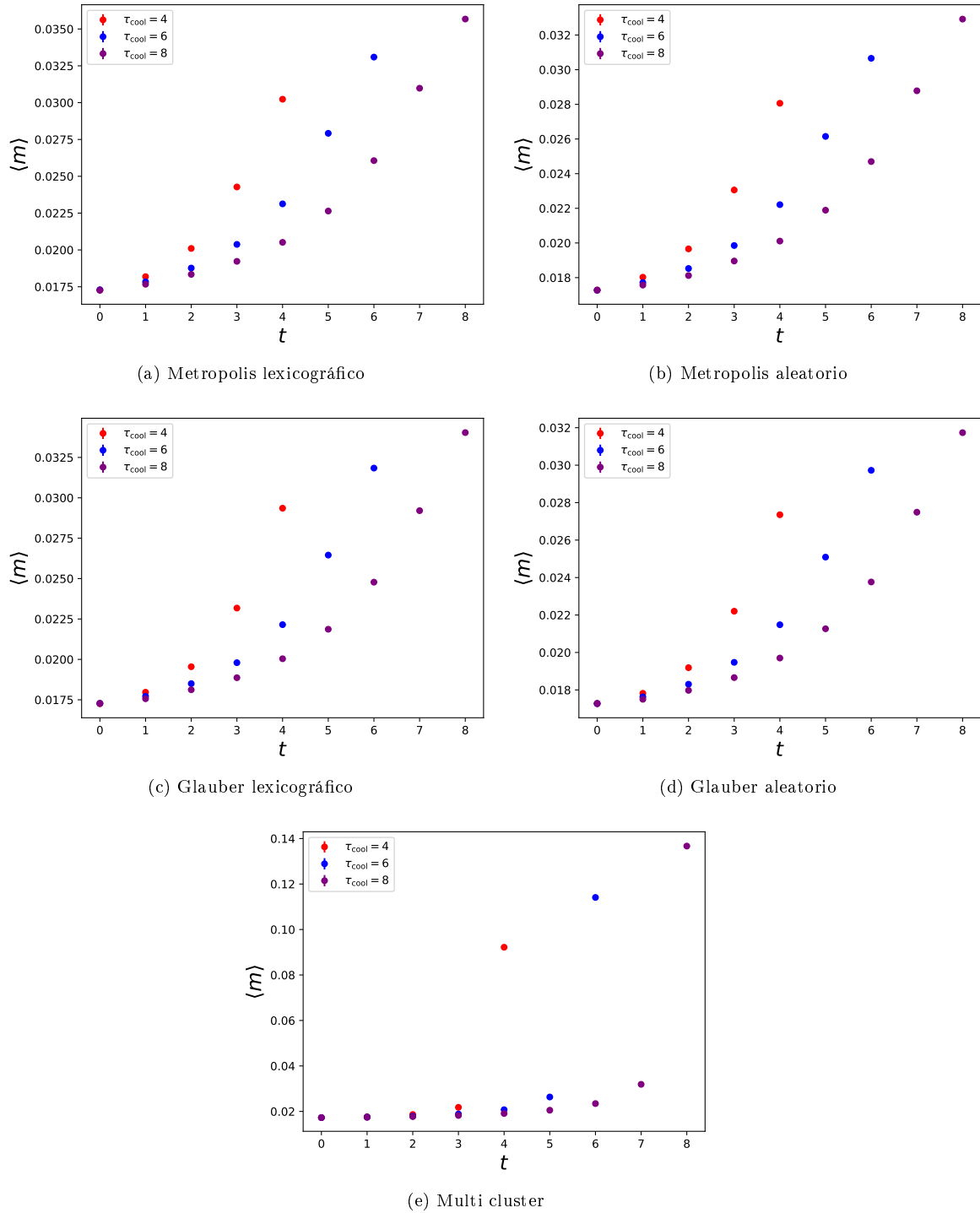
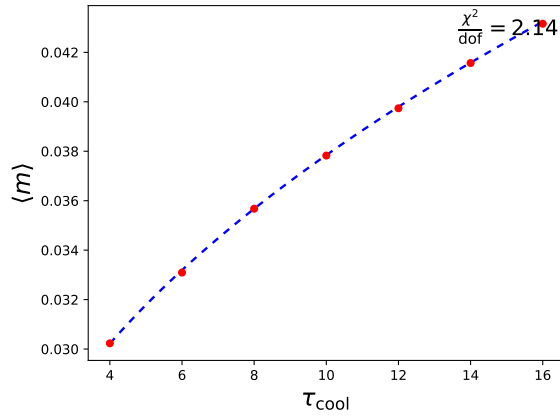
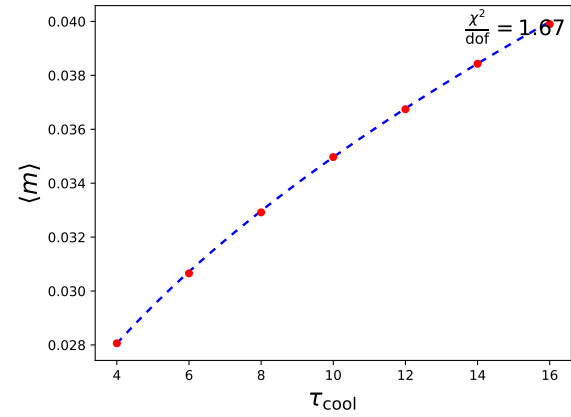


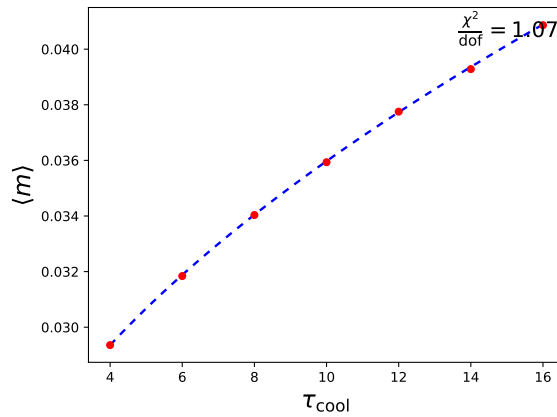
Figura 7.5: Evolución de los enfriamientos de la magnetización m respecto a la temperatura T , para diferentes velocidades de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8\}$.



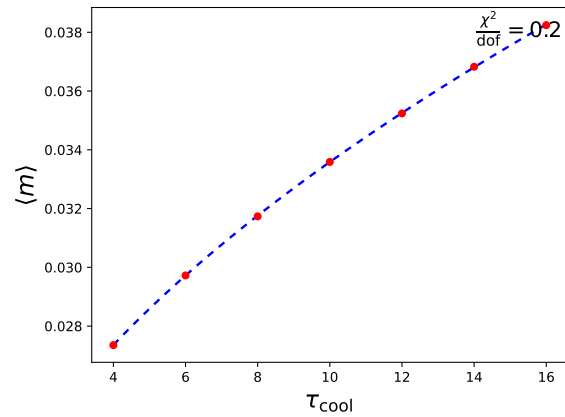
(a) Metropolis lexicográfico



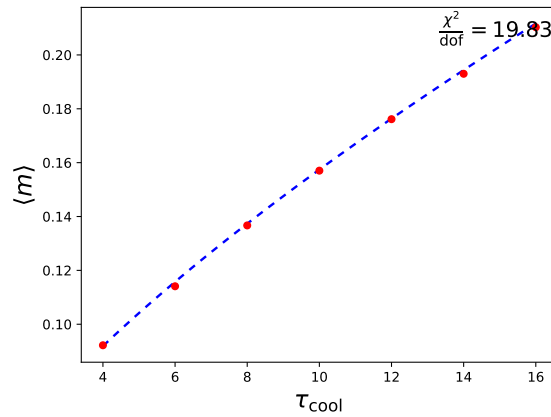
(b) Metropolis aleatorio



(c) Glauber lexicográfico



(d) Glauber aleatorio



(e) Multi cluster

Figura 7.6: Susceptibilidad magnetización m respecto a la velocidad de enfrenamiento τ_{cool} .

Capítulo 8

Resumen y conclusiones

Apéndice A

Distribución aleatoria de vectores en la esfera S^2

Se quiere generar una distribución uniforme y aleatoria de vectores en la esfera S^2 , en coordenadas esféricas tenemos los siguientes parámetros

$$\vec{s} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (\text{A.1})$$

donde $\theta \in (0, \pi)$ y $\phi \in (0, 2\pi)$. Es posible generar números aleatorios uniformemente distribuidos en el intervalo $(0, 1)$ y escalar los intervalos para generar una pareja (θ_r, ϕ_r) , el problema es que no genera una distribución uniforme en la esfera ya que los hay mayor probabilidad de generar un vector cercano al polo norte de la esfera, este problema se debe a que en la transformación de coordenadas del plano a la esfera, la frontera del rectángulo de área $2\pi^2$ se mapea a un único punto en el polo de proyección, podemos corregir el efecto compensando disminuyendo la probabilidad cerca de la frontera. La densidad de probabilidad $f(\vec{r})$ en la superficie de la esfera cumple la siguiente relación

$$\int_S f(\theta, \phi) dS = 1. \quad (\text{A.2})$$

Ya que queremos que la probabilidad sea igual para cualquier dirección la densidad de probabilidad tiene que ser constante, por lo que la densidad de probabilidad tiene que ser $f(\theta, \phi) = 1/4\pi$, entonces

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta. \quad (\text{A.3})$$

La contribución de ϕ es lineal, no es el caso para θ . Definiendo

$$u(\theta) = \frac{1}{2} \int_0^\theta \sin \theta' d\theta' = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta), \quad (\text{A.4})$$

$$\cos \theta = 1 - 2u. \quad (\text{A.5})$$

Resolviendo obtenemos la forma de θ que cumple que dada una distribución uniforme de $u \in (0, 1)$ genera una distribución uniforme en la esfera S^2

$$\theta = \arccos(1 - 2u). \quad (\text{A.6})$$

La restricción $u_r = u\delta$ donde $\delta \in (0, 1)$ genera una distribución uniforme en una sección de la esfera a una distancia δ del polo de proyección

$$\theta = \arccos(1 - 2u\delta). \quad (\text{A.7})$$

Para generar un vector aleatorio en referencia a cualquier punto sobre la esfera podemos rotar generar un vector aleatorio \vec{r} respecto al polo de proyección y hacer una rotación hasta el punto deseado \vec{s} . Es conveniente calcular un vector ortonormal a \vec{s} y \vec{r} dado por el producto vectorial entre los dos vectores

$$\vec{k} = \frac{\vec{s} \times \vec{r}}{\|\vec{s} \times \vec{r}\|} \quad (\text{A.8})$$

Se calcula la rotación de \vec{s} por θ respecto a \vec{k}

$$\vec{s}' = \vec{s} \cos \theta + (\vec{k} \times \vec{s}) \sin \theta. \quad (\text{A.9})$$

Finalmente obtenemos el vector \vec{s}' .

Apéndice B

Programación

Para hacer una simulación por ordenador se escribe un programa con las reglas que debe seguir el sistema, se proporcionan condiciones iniciales y se deja que el ordenador calcule el estado posterior del sistema. Se podría pensar que con esto se puede resolver cualquier problema, delegándolo a una computadora, en la realidad muchos sistemas físicos superan en interacciones a la cantidad de cálculos que un ordenador es capaz de hacer en un tiempo razonable.

Llevar una serie de conceptos abstractos a una simulación es una tarea complicada, se debe elegir el lenguaje de programación que mejor adapte a las necesidades del problema. Se debe crear una estructura de funciones y rutinas para establecer una base que facilite el diseño de un experimento y permita realizar experimentos bajo diversas condiciones, medir las observables y analizar los resultados de una forma eficiente es por eso que se requiere de un buen diseño, un buen uso de las herramientas disponibles y una buena planificación.

B.1. Equilibrio entre accesibilidad y eficiencia

A día de hoy el uso de lenguajes de programación ampliamente versátiles es frecuente para la mayoría de propósitos, sin embargo estos lenguajes al ser tan amplios en funcionalidad llegan a perder eficiencia en tareas específicas, no es un gran problema en la mayoría de los casos en los que esta pérdida es de milésimas de segundo, pero en las simulaciones numéricas de monte carlo el número de cálculos es suficiente para percibir un incremento considerable en el tiempo de computo. Lenguajes como Fortran son mucho menos populares pero muy eficiente cumpliendo con su propósito, al ser un lenguaje no interpretado se debe de compilar para ser ejecutado, como resultado en simulaciones largas que requieren de un alto poder de computo la eficiencia es miles de veces mayor que en el caso de los lenguajes interpretados y no se requiere de instalar algún interprete en un servidor de la nube para ejecutarlo ya que el archivo compilado puede comunicarse directamente con el servidor. Ya que los lenguajes no interpretados como Fortran tienen un rendimiento considerablemente superior en el largo plazo, vale la pena aprender el lenguaje. Al estar orientado al computo científico es accesible y de fácil implementación, por estas cualidades es el lenguaje de programación principal en este proyecto ya que en el caso de el análisis de los resultado y la generación de graficas se ha usado Python con algunos de sus librerías especiales.

Bibliografía

- [1] A. Wipf, “Statistical approach to quantum field theory: an introduction,” *Springer*, 7-11, 2013.
- [2] R. P. Feynman, “Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics,” *Rev. Mod. Phys.*, 20, 367-387, 1948.
- [3] M. Creutz y B. Freedman, “A statistical approach to quantum mechanics,” *Ann. Phys.*, 132, 427-462, 1981.
- [4] J. M. Kosterlitz, “Nobel Lecture: Topological defects and phase transitions,” *Reviews of Modern Physics*, 89, 4, 2017.
- [5] W. Bietenholz, U. Gerber, M. Pepe y U.-J. Wiese, “Topological lattice actions,” *J. High Energy Phys.*, 2010, 20, 2010.
- [6] A. Van Oosterom y J. Strackee, “The Solid Angle of a Plane Triangle,” *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, BME-30, 125-126, 1983.
- [7] K. B. Athreya, H. Doss y J. Sethuraman, “On the convergence of the Markov chain simulation method,” *Ann. Stat.*, 24, 69-100, 1996.
- [8] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller y E. Teller, “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines,” *J. Chem. Phys.*, 21, 1087-1092, 1953.
- [9] R. H. Swendsen y J.-S. Wang, “Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations,” *Phys. Rev. Lett.*, 58, 86-88, 1987.