



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. Algoritmo de Metropolis	17
4.2. Algoritmo de Glauber	18
4.3. Algoritmo clúster	19
5. Fenómenos críticos	21
5.1. Transiciones de fase	22
5.2. Función de correlación	23
5.3. Escalamiento	24
5.4. Universalidad	25
6. Mecanismo de Kibble Zurek	26
6.1. Relacionado al universo temprano	26
6.2. Experimentos en helio superflúidico	27
6.3. Tiempo de auto-correlación	28
7. Simulaciones en equilibrio	30
7.1. Tiempo de autocorrelación	30
7.2. Longitud de correlación	35
7.3. Exponente crítico dinámico	37
8. Simulación de enfriamientos	42
8.1. Enfriamientos rápidos	42
9. Resumen y conclusiones	50
A. Distribución aleatoria de vectores en la esfera S^2	51
B. Algoritmo Hoshen-Kopelman	55
Bibliografía	57

Capítulo 1

Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio

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

Una de estas líneas de investigación se desarrolló entre 1949 y 1952 en Los Álamos, de la mano de Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, y Edward Teller [1]. Su trabajo se centró en comprender la física de las interacciones entre la radiación y la materia bajo condiciones extremas, tales como explosiones, implosiones y la evolución de reacciones nucleares fuera del equilibrio. En estas circunstancias, los experimentos se vuelven complejos, y la teoría detrás de procesos que involucran interacciones entre un vasto número de partículas resulta demasiado intrincada. Para superar estas limitaciones, desarrollaron una serie de métodos basados en procesos estocásticos, conocidos como métodos de Monte Carlo.

Con el posterior desarrollo de los ordenadores, los métodos de Monte Carlo se volvieron herramientas fundamentales en el estudio de diversos sistemas con incontables grados de libertad, tanto en equilibrio como fuera de él. En este trabajo, aplicaremos estos métodos al estudio de enfriamientos rápidos en el modelo 2d $O(3)$, un modelo simplificado del enfriamiento del universo temprano y del ^4He en estado superfluido.

Capítulo 2

Acercamiento estadístico a la mecánica cuántica

2.1. Propagador de evolución

Cuando Richard Feynman desarrollo su propia formulación de integral de trayectorias, se pregunto si existía un camino para conectar la mecánica estadística con la mecánica cuántica. La mecánica cuántica descrita por Erwin Schrödinger se plantea una ecuación que describe el sistema físico de interés, luego se busca la solución. La ecuación de E. Schrödinger aumenta en complejidad al aumentar los grados de libertad. En mecánica estadística, se plantea una función de partición, la cual contiene toda la información necesaria sobre el sistema que modela. 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 $2d$ $O(3)$.

Consideremos una observable \hat{O} en el espacio de Hilbert de un sistema físico descrito por el Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \sum \hat{p}_i^2 + \hat{V}. \quad (2.1)$$

La dinámica del operador \hat{O} sigue la ecuación formulada por Werner Heisenberg

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

Pasar de la formulación de W. Heisenberg a la formulación de E. Schrödinger implica la transformación dependiente del tiempo dada por el operador de evolución aplicado a la observable

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

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

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

Reescribiendo la ecuación anterior se tiene

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

Escribiendo en notación de Dirac

$$(2.6)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle. \quad (2.7)$$

La solución de la ec. (2.7) 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. (2.7)

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

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. (2.7), 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

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

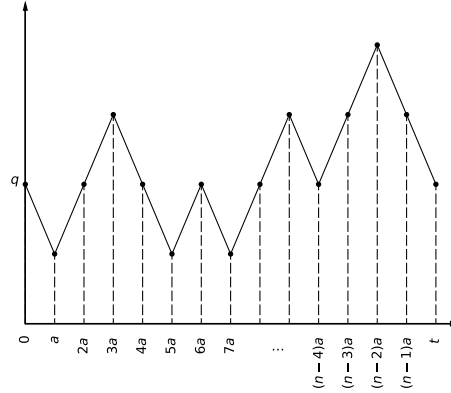


Figura 2.1: Ejemplificación de la evolución de un estado en el espacio fase, desde q hasta q' en el tiempo t .

Aplicando el teorema de Trotter

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

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

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 .

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

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

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 [2]-[4].

Capítulo 3

Modelos de espín

Las propiedades macroscópicas de una amplia gama de materiales pueden describirse mediante modelos de espines. Propiedades como la energía, la magnetización y la carga topológica pueden calcularse a partir de una configuración determinada de espines.

Un modelo de espines clásicos, consiste en un arreglo de espines, cada espín es una fuente de magnetización que interactúa con el resto de espines siguiendo un potencial de interacción.

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 caso se considera una retícula de dimensión d formada por hipercubos. La retícula se define como el conjunto de sitios en el espacio de dimensión d cuyas posiciones son coordenadas enteras

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

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 más cercanos a x .

Fuera de la teoría no es posible computar en retículas infinitas en tiempo finito, por lo que se considera un trozo finito L^d . Se obtiene la retícula finita de dimensión d y tamaño L descrita como

$$\mathcal{R}_L^d = \{x \in \mathcal{R}^d | 0 < x_i \leq L, i \in \{1, \dots, d\}\}. \quad (3.2)$$

Se ha superado el problema con la retícula infinita, pero a la vez se ha roto la homogeneidad. Para recuperarla se establecen condiciones de frontera periódicas.

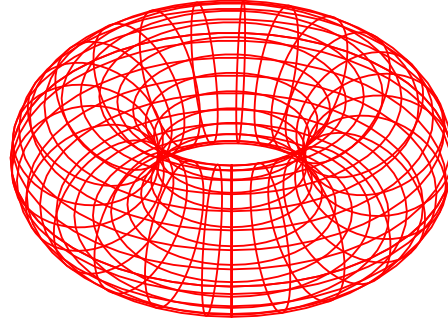


Figura 3.1: En dos dimensiones la topología de una retícula finita cuadrada es la de un toroide, y esa es la estructura que nos interesa en el modelo 2d $O(3)$.

$$\mathcal{T}_L^d = \{x \in \mathcal{R}_L^d | x_i = x_i + nL, i \in \{1, \dots, L\}, n \in \mathbb{Z}\}. \quad (3.3)$$

3.2. Modelo 2d $O(3)$

Definición: Espín clásico en el modelo $O(n)$.

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}_x ocupa un sitio $x \in \mathcal{T}_L^d$. 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 configuración uniforme. La configuración uniforme tiene la particularidad tener la de menor energía. Consideramos una configuración $[s]$, la energía depende del potencial de interacción magnética espín a espín. La función hamiltoniana es de la forma

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

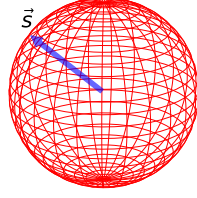


Figura 3.2: Espín en el modelo O(3)

donde J es una constante de acoplamiento, $\langle x, y \rangle$ son los espines vecinos más cercanos. Como la interacción magnética decae proporcionalmente al inverso del cuadrado de la distancia, la contribución más grande se da entre los vecinos más cercanos. Es conveniente despreciar las interacciones entre espines a más 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 sobre una retícula bidimensional. Ya que se realizaran simulaciones en volúmenes finitos se usará la retícula toroidal \mathcal{R}_L^2 de tamaño L definida en la ec. (3.3).

Las posiciones de los espines son pares enteros $x_1, x_2 \in (1, \dots, L)$. Nos referiremos a un espín en el sitio $x = (x_1, x_2)$ como \vec{s}_x .

Un espín \vec{s}_x de dimensión 3 restringido a la esfera \mathcal{S}^2 está definido por tres coordenadas

$$\vec{s}_x = (\sin \theta_x \cos \phi_x, \sin \theta_x \sin \phi_x, \cos \theta_x), \quad (3.5)$$

en donde $\theta_x \in [0, \pi)$, $\phi_x \in [0, 2\pi)$. En algunos casos, como la generación de configuraciones, es ventajoso trabajar con coordenadas esféricas (θ, ϕ) , en otros casos como el cálculo del producto escalar es más conveniente usar las componentes de espín $(s_x^{(1)}, s_x^{(2)}, s_x^{(3)})$ por lo que usaremos ambas descripciones en los casos que más convenga.

3.3. Observables

Describir las propiedades macroscópicas de un material implica la definición de variables como, masa m , la energía H y el momento magnético m , entre otras cantidades. Dividir tales variables entre el volumen V , convierte las variables macroscópicas en densidades independientes del tamaño del sistema, también son conocidas como variables mecánicas.

Hay otro tipo de cantidades como la presión P , la temperatura T y el campo magnético h . Caracterizan el ambiente en el que el sistema está inmerso. En la mayoría de los sistemas, las variables mecánicas están bien definidas solo cuando el valor de estas variables se ha especificado.

A lo largo de un intervalo temporal, se espera que un sistema físico pase por múltiples configuraciones. Por ello, medir observables en una única configuración produce valores inconsistentes que dependen de la configuración utilizada. Para obtener un resultado útil, se busca calcular el

promedio de un observable en un intervalo temporal lo suficientemente amplio como para reducir las fluctuaciones por debajo de un umbral de error deseado.

3.3.1. Energía

En los modelos $O(n)$ la energía esta dada por el hamiltonaino (3.4), en el modelo 2d $O(3)$ es de la forma

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{x_1} \sum_{x_2} \vec{s}_{x_1, x_2} \cdot (\vec{s}_{x_1+1, x_2} + \vec{s}_{x_1, x_2+1} + \vec{s}_{x_1-1, x_2} + \vec{s}_{x_1, x_2-1}), \quad (3.6)$$

Simplificación del hamiltoniano.

Aunque es una ecuación sencilla de manejar es posible simplificarla intercambiando y recorriendo índices en el tercer termino de la ec. (3.6), se tiene

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1-1,x_2} = \sum_{x_2=1}^L \sum_{x_1=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1-1,x_2} = \sum_{x_2=1}^L \sum_{x_1=0}^{L-1} \vec{s}_{x_1+1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2}. \quad (3.7)$$

Separando términos se tiene

$$\sum_{x_2=1}^L \sum_{x_1=0}^{L-1} \vec{s}_{x_1+1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2} = \sum_{x_2=1}^L \left(\vec{s}_{1,x_2} \cdot \vec{s}_{0,x_2} - \vec{s}_{L+1,x_2} \cdot \vec{s}_{L,x_2} + \sum_{x_1=1}^L \vec{s}_{x_1+1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2} \right). \quad (3.8)$$

Por las condiciones de frontera $\vec{s}_{1,x_2} = \vec{s}_{L+1,x_2}$ y $\vec{s}_{0,x_2} = \vec{s}_{L,x_2}$, por lo que

$$\vec{s}_{1,x_2} \cdot \vec{s}_{0,x_2} - \vec{s}_{L+1,x_2} \cdot \vec{s}_{L,x_2} = 0 \quad (3.9)$$

Entonces

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1-1,x_2} = \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1+1,x_2}. \quad (3.10)$$

De forma análoga para el cuarto termino de la ec. (3.6)

Intercambiando y recorriendo índices en el tercer termino de la ec. (3.6) se tiene

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2-1} = \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=0}^{L-1} \vec{s}_{x_1,x_2+1} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2}. \quad (3.11)$$

Separando términos se tiene

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=0}^{L-1} \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2+1} = \sum_{x_1=1}^L \left(\vec{s}_{x_1,0} \cdot \vec{s}_{x_1,1} - \vec{s}_{x_1,L} \cdot \vec{s}_{x_1,L+1} + \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2+1} \right). \quad (3.12)$$

Por las condiciones de frontera $\vec{s}_{x_1,0} = \vec{s}_{x_1,L}$ y $\vec{s}_{x_1,1} = \vec{s}_{x_1,L+1}$, por lo que se tiene

$$\vec{s}_{x_1,0} \cdot \vec{s}_{x_1,1} - \vec{s}_{x_1,L} \cdot \vec{s}_{x_1,L+1} = 0. \quad (3.13)$$

Entonces

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2-1} = \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2+1}. \quad (3.14)$$

Remplazando los términos (3.10), (3.14) en la ec. (3.6) y simplificando términos se llega a la forma compacta del hamiltoniano

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot (\vec{s}_{x_1+1,x_2} + \vec{s}_{x_1,x_2+1}). \quad (3.15)$$

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

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i. \quad (3.16)$$

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

$$\langle \mathcal{H} \rangle \simeq \langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(\mathcal{H}). \quad (3.17)$$

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

$$h = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{V}. \quad (3.18)$$

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 volumen.

$$M = \frac{1}{V} \left| \sum_x \vec{s}_x \right| \quad (3.19)$$

La magnetización máxima se alcanza en una configuración de espines alineados

$$M_{\text{max}} = \frac{1}{V} \left| \sum_x \vec{s}_x \right| = \frac{1}{V} |V \vec{s}| = |\vec{s}| = 1 \quad (3.20)$$

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

$$\langle M \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i. \quad (3.21)$$

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

$$\langle M \rangle \simeq \langle M \rangle \pm \text{error}(M) \quad (3.22)$$

3.3.3. Carga topológica

En el modelo de espines $O(3)$ definido en un cuadrado, las condiciones de frontera garantizan la invariante topológica [5], [6]

$$Q[s] = \frac{1}{8\pi} \int \varepsilon_{\mu\nu} \vec{s}(x) \cdot (\partial_\mu \vec{s}(x) \times \partial_\nu \vec{s}(x)) d^2x \in \mathbb{Z}. \quad (3.23)$$

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

$$\frac{1}{V} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \int e^{-S[\phi]} e^{iQ[\phi]\theta} d\phi \Big|_{\theta=0} = \frac{1}{V} \langle Q^2 \rangle |_{\theta=0}. \quad (3.24)$$

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.

Sean $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathbb{R}^3$ y Ω el ángulo solido generado por $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ [7]

$$\tan\left(\frac{\Omega}{2}\right) = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}{abc - (\vec{a} \cdot \vec{b})c + (\vec{c} \cdot \vec{a})b + (\vec{b} \cdot \vec{c})a}. \quad (3.25)$$

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 triángulo esférico en S^2 . Se calculan las variables para el triángulo

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_1 \\ y_1 &= \vec{s}_1 \cdot (\vec{s}_2 \times \vec{s}_3). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Al ser una esfera unitaria, el área del triángulo esférico esta dada por el ángulo 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

$$\Omega_1 = 2\arg(z_1). \quad (3.27)$$

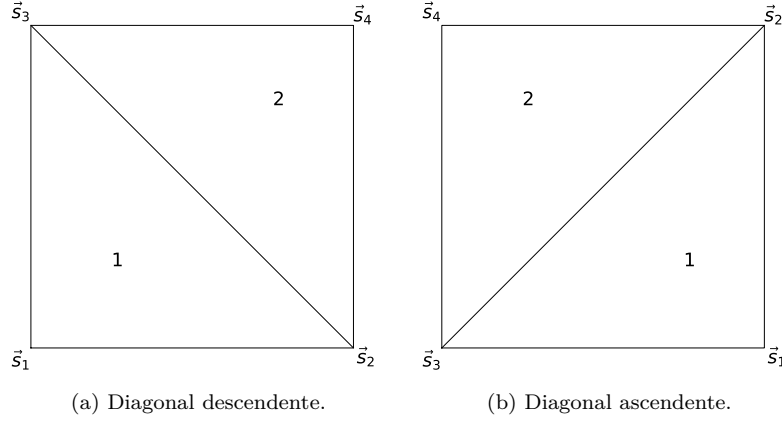


Figura 3.3: Orientaciones de posibles de los triángulos formados en la retícula.

Para los triángulos b se definen las variables

$$\begin{aligned} x_2 &= 1 + \vec{s}_4 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_4 \\ y_2 &= \vec{s}_4 \cdot (\vec{s}_3 \times \vec{s}_2). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Se obtiene

$$\Omega_2 = 2\arg(z_2). \quad (3.29)$$

$$A = \Omega_1 + \Omega_2 \quad (3.30)$$

La carga topológica se define como como

$$Q[s] = \frac{1}{4\pi} \sum_x A_x \in \mathbb{Z}, \quad (3.31)$$

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

$$\langle Q^2 \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i^2. \quad (3.32)$$

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

$$\chi_t = \frac{\langle Q^2 \rangle}{V}. \quad (3.33)$$

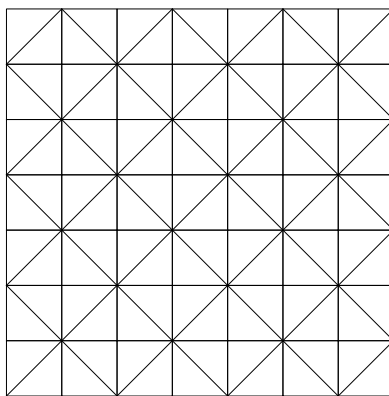


Figura 3.4: Descomposición de la retícula cardada bidimensional en triángulos alternado la dirección de la diagonal. Esta descomposición se usa para medir la carga topológica.

Capítulo 4

Métodos de Monte Carlo

Un proceso estocástico es una secuencia de eventos aleatorios, consideremos un evento aleatorio con N posibles resultados $\{x_1, \dots, x_N\}$. Una variable aleatoria X es una selección aleatoria en el conjunto de los resultados posibles de un evento. La probabilidad de que un valor x_i sea elegido está dado por $p_i = P\{X = x_i\}$. Cada resultado y su probabilidad, en conjunto forman una distribución.

La importancia de muestreo consiste en evaluar propiedades de una distribución a partir de una muestra de una distribución diferente.

La esencia de los métodos de Monte Carlo es evaluar numéricamente las sumas o integrales del espacio fase. El método de Monte Carlo introducido por Metropolis se basa en la idea de importancia de muestreo. En este enfoque, los puntos del espacio de fases no se seleccionan completamente al azar, sino que se distribuyen con mayor densidad en aquellas regiones del espacio de fases que aportan contribuciones dominantes a las integrales.

Una cadena de Markov se representa por una matriz de W con entradas $W_{i,j}$ $i, j \in \mathbb{N}$ que satisfacen la condición

$$\sum_{i,j} W_{i,j} = 1. \quad (4.1)$$

Cada valor $W_{i,j}$ representa la probabilidad de que un sistema en la configuración $[s]_i$ pase a la configuración $[s]_j$ en una unidad de tiempo discreta conocida como paso de Markov.

Consideremos la cadena de Markov dada por 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

$$\langle O \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O[s]_i, \quad (4.2)$$

donde $[s]_i$ es la configuración del sistema en el instante t_i . La desviación estándar de esta suma de configuraciones es

$$\text{std}(O) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left(\sum_{i=1}^N O[s]_i^2 - N \langle O \rangle^2 \right)}, \quad (4.3)$$

y el error estándar se define por la ecuación

$$\text{error}(O) = \frac{\text{std}(O)}{\sqrt{N}}. \quad (4.4)$$

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

$$\langle O \rangle \simeq \langle O \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(O). \quad (4.5)$$

Definición: Balance Detallado.

Sea $\{s_i\}$ una cadena de Markov con probabilidad de transición estacionaria. La cadena de Markov es reversible respecto a la distribución de probabilidad p si cumple la ecuación de balance detallado

$$p[s \rightarrow s']p[s] = p[s' \rightarrow s]p[s'], \quad (4.6)$$

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 $[s]$ [8].

4.1. Algoritmo de Metropolis

Metropolis es un algoritmo de actualización local esto significa que los elementos de la configuración cambian individualmente, para generar una nueva configuración se usa la probabilidad de transición con todos los elementos de la configuración. Consideremos el modelo de espines 2-d $O(3)$, definido en la retícula cuadrada \mathcal{R}_L^2 , la de energía de una configuración se define por la ec. (3.15). En este modelo, un algoritmo de actualización local actúa sobre un espín y sus vecinos más cercanos.

Dada una configuración $[s]$, para cada elemento en la configuración se propone un cambio aleatorio que resulta en una configuración $[s']$. Si el cambio propuesto se acepta o se rechaza depende a la probabilidad de aceptación definida como

$$p[s \rightarrow s'] = \begin{cases} e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} & \text{si } \mathcal{H}[s'] \geq \mathcal{H}[s] \\ 0 & \text{si } \mathcal{H}[s'] < \mathcal{H}[s]. \end{cases} \quad (4.7)$$

La diferencia en la energía de las configuraciones es

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s]. \quad (4.8)$$

Es conveniente definir la probabilidad de aceptación en función de la diferencia de energía entre configuraciones

$$p[s \rightarrow s'] = \begin{cases} e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} & \text{si } \Delta\mathcal{H} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \Delta\mathcal{H} < 0. \end{cases} \quad (4.9)$$

Si la energía de la configuración disminuye con el cambio, la probabilidad de aceptaciones 1, y se acepta de inmediato. Si la energía de la configuración aumenta, esta se acepta con una probabilidad $e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}$. A mayor temperatura $\beta \rightarrow 0$ y la probabilidad de aceptación de las configuraciones que aumentan la energía se acerca a 1. Esto se traduce en más ruido térmico. Por otro lado a menor temperatura $\beta \rightarrow \infty$ la probabilidad de aceptación de las configuraciones que aumentan la energía

tiende a cero. A menor temperatura, menor número de fluctuaciones, y un menor número de fluctuaciones permite que el sistema se aproxime al estado de mínima energía. La prueba de aceptación se repite para cada elemento de la configuración $[s]$, una vez que se probaron todos los espines, se dice que se ha realizado un barrido. Un barrido corresponde una unidad de tiempo discreto de Markov para el algoritmo Metropolis, la forma en la que se realiza el barrido puede ser lexicográfica, en la que los espines se elijen siendo un orden basado en las posiciones de la retícula. O puede ser aleatorio en donde los espines se elijen al azar.

En el modelo 2d $O(3)$. La diferencia de energía en términos de los espines $\vec{s}_{i,j} \in \mathbb{Z}_L^2$ es

$$\Delta\mathcal{H}_{i,j} = \mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s] = -(\vec{s}'_{i,j} - \vec{s}_{i,j}) \cdot (\vec{s}_{i+1,j} + \vec{s}_{i,j+1} + \vec{s}_{i-1,j} + \vec{s}_{i,j-1}). \quad (4.10)$$

Calcular la diferencia de energía entre configuraciones en el modelo 2d $O(3)$ implicar realizar pocos cálculos, por lo que los algoritmos de actualización local son muy eficientes lejos de la temperatura crítica, el problema con la temperatura crítica es que a disminuir el número de cambios que se aceptan, el tiempo de relajación del sistema aumenta exponencialmente, a este fenómeno se le conoce como desaceleración crítica. Si se necesita estudiar sistemas en equilibrio cerca de la temperatura crítica hay una opción más conveniente que consiste en usar un algoritmo que actualice grupos de espines en vez de espines individuales [9], [10].

4.2. Algoritmo de Glauber

El algoritmo Glauber [11] es al igual que el algoritmo Metropolis de actualización local. La diferencia con el algoritmo de Metropolis es la probabilidad de aceptación. La propuesta es construir una función que cumpla con la ecuación de balance detallado

$$p[s \rightarrow s']p[s] = p[s' \rightarrow s]p[s']. \quad (4.11)$$

Reordenando términos y dividiendo por Z

$$p[s \rightarrow s'] \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s]}}{Z} = p[s' \rightarrow s] \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s']}}{Z}. \quad (4.12)$$

Se propone la probabilidad de aceptación de algoritmo de Glauber como

$$\begin{aligned} p[s \rightarrow s'] &= \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}{1 + e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}} \\ &= \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}[s] - \mathcal{H}[s'])}}{1 + e^{\beta(\mathcal{H}[s] - \mathcal{H}[s'])}}} e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} \\ &= p[s' \rightarrow s] e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

La propuesta cumple la ecuación de balance detallado.

$$p[s \rightarrow s'] = \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}{1 + e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])}}. \quad (4.14)$$

En términos de la diferencia de energía

$$p[s \rightarrow s'] = \frac{e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}}{1 + e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}}. \quad (4.15)$$

Similar al algoritmo de Metropolis dada una configuración $[s]$, para cada elemento en la configuración se propone un cambio aleatorio que resulta en una configuración $[s']$. Si la energía de la configuración aumenta a mayor temperatura $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow 0$ y la probabilidad de aceptación se aproxima a $1/2$. A menor temperatura $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow \infty$ y $e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} \rightarrow 0$, por lo tanto la probabilidad de aceptación se aproxima a 0. Por otro lado si la energía de la configuración disminuye. A mayor temperatura igual que en el caso anterior $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow 0$ y la probabilidad de aceptación se aproxima a $1/2$. A menor temperatura $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow -\infty$ y $p[s \rightarrow s'] \rightarrow 1$.

Al igual que en algoritmo de Metropolis, el problema con la temperatura crítica es que a disminuir el número de cambios que se aceptan, el tiempo de relajación del sistema aumenta exponencialmente. Una forma de contrarrestar el problema es aumentar el número de configuraciones que disminuyen la energía del sistema limitando el área en la que se permiten nuevas configuraciones, la desventaja es que limitar las configuraciones a una zona restringida también disminuye el tiempo de relajación, pero puede encontrarse un equilibrio entre número de cambios aceptados el tamaño del área permitida para nuevas configuraciones de manera que se minimice el tiempo de relajación del sistema.

4.3. Algoritmo clúster

El algoritmo clúster 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 [10], [12]. Consiste en generar clústers de espines enlazados y cambiar la configuración de todos los espines en cada clúster a la vez. Una de las principales ventajas del algoritmo clúster es que evita la desaceleración crítica característica de los algoritmos de actualización local.

Un clúster puede consistir de un único espín si sus espines vecinos no se enlazan, o puede estar formado por todos los espines de la configuración, esto puede suceder cerca de la temperatura crítica.

En seguida propone un vector aleatorio $\vec{w} \in S^2$, se elige un espín en la configuración $\vec{s} \in [s]$. y se calcula la reflexión de \vec{s} respecto a el plano normal a \vec{w}

$$\vec{s}' = \vec{s} - 2(\vec{w} \cdot \vec{s})\vec{w}. \quad (4.16)$$

Para determinar si el espín \vec{s} esta enlazado con sus espines vecinos más cercano, se calcula la probabilidad de enlace mediante la función

$$p_{\text{enlace}} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta(\mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s])} & \text{si } \mathcal{H}[s'] \geq \mathcal{H}[s] \\ 0 & \text{si } \mathcal{H}[s'] < \mathcal{H}[s]. \end{cases} \quad (4.17)$$

Igual que en los algoritmos anteriores es conveniente expresar la probabilidad de enlace en función de la diferencia de energía

$$p_{\text{enlace}} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} & \text{si } \Delta\mathcal{H} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \beta\Delta\mathcal{H} < 0. \end{cases} \quad (4.18)$$

En el modelo 2d O(3) usando el algoritmo *multi-clúster*, se tiene una red de espines finita bidimensional de tamaño L cuyos sitios están ocupados por espines. Para probar el enlace entre dos espines \vec{s}_x, \vec{s}_y donde \vec{s}_y es uno de los espines vecinos más cercanos de \vec{s}_x . Primero se obtiene un vector aleatorio y unitario \vec{w} . Se selecciona el espín \vec{s}_x y se refleja respecto al plano normal a \vec{w} dando lugar al espín \vec{s}_x' . Se tienen dos configuraciones $\vec{s}_x \in [s]$ y $\vec{s}_x' \in [s']$, la diferencia de energía entre las configuraciones es

$$\Delta\mathcal{H} = \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y - \vec{s}_x' \cdot \vec{s}_y. \quad (4.19)$$

Calculando la diferencia de energía entre las configuraciones, la probabilidad de enlace entre es

$$p_{\text{enlace}} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} & \text{si } \Delta\mathcal{H} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \beta\Delta\mathcal{H} < 0. \end{cases} \quad (4.20)$$

Para cuales quiera dos espines \vec{s}_x, \vec{s}_y en una configuración $[s]$. Los dos espines pertenecen al mismo clúster si hay un enlace directo entre ambos. Si α es un clúster no vacío y $\vec{s}_x \in [s]$ el espín \vec{s}_x pertenece al clúster si esta enlazado a un espín que pertenece al clúster.

A cada espín se le asocia una etiqueta m_x^α donde α indica el clúster al que pertenece el espín en cuestión. El procedimiento para asociar cada espín a sus respectivos clústers es el siguiente:

1. Se selecciona el espín \vec{s}_x , se genera un valor a una matriz de enlaces b en función de su enlace con los espines $\vec{s}_{x+1}, \vec{s}_{x+2}$
2. Si hay enlace entre \vec{s}_x, \vec{s}_{x+1} se asigna el valor $b_x = 10$, si hay enlace entre \vec{s}_x, \vec{s}_{x+2} se asigna el valor $b_x = 1$ y si hay enlace entre \vec{s}_x, \vec{s}_{x+1} y \vec{s}_{x+2} se asigna el valor $b_x = 11$. Si no hay enlaces se asigna el valor $b_x = 0$.
3. Se pasa al siguiente espín y se regresa al paso 1.

Si existe un enlace con uno de los espines vecinos se forma un clúster con los espines enlazados, se selecciona uno de estos espines y se repite la prueba de enlace con sus propios vecinos más cercanos. Si hay más enlaces se continua repitiendo el proceso, si no hay enlaces se pasa a u otro espín del clúster, hasta comprobar que no hay más enlaces con algún espín del clúster.

Cuando se termina de formar el clúster se cambia el estado de todos los espines del clúster a la vez aplicando la reflexión respecto al plano normal a \vec{w} .

Una variante del algoritmo consiste en formar multiples clústers a la vez, en lugar de uno. Una vez formados se decide si un se cambia el estado de sus elementos clúster con probabilidad $p_{\text{flip}} = 1/2$, valor que minimiza el tiempo de relajación del sistema al mantener más menos la mitad de los grupos y cambiar la configuración de la otra mitad.

Una forma de realizar el proceso de formación de grupos es usar el algoritmo de Hoshen-Kopelman que se describe para el modelo 2-d O(3) en el apéndice B.

Capítulo 5

Fenómenos críticos

La probabilidad de que el sistema a una T dada esté en una configuración determinada de energía \mathcal{H} es proporcional al factor de Boltzmann

$$P_{\mathcal{H}[\sigma]} = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma]}}{Z}, \quad (5.1)$$

donde $\beta = 1/k_B T$, k_B es la constante de Boltzmann y Z es la función de partición. La relación entre la termodinámica y la física estadística viene determinada por la energía libre de Helmholtz \mathcal{F} en el colectivo canónico

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln Z. \quad (5.2)$$

A partir de la función de partición, la energía promedio se calcula como

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\sum_{\sigma} \mathcal{H}[\sigma] e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma]}}{Z} = \frac{\partial \beta \mathcal{F}}{\partial \beta}. \quad (5.3)$$

El calor específico a volumen constante se define como

$$\begin{aligned} c_V &= \frac{1}{V} \left(\frac{\partial \beta \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial T} \right)_V = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\sum_{\sigma} \mathcal{H}_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{k_B T} \left[\frac{\sum_{\sigma} \mathcal{H}_{\sigma}^2 e^{-\beta\mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} - \left(\frac{\sum_{\sigma} \mathcal{H}_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}_{\sigma}}}{Z} \right)^2 \right], \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{k_B T^2} \left(\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 \right). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Siendo B el campo magnético aplicado. La magnetización M se define como

$$M = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} = \frac{\sum_{\sigma} M_{\sigma} e^{-\beta\mathcal{H}_{\sigma}}}{Z}, \quad (5.5)$$

donde

$$\mathcal{H}[\sigma] = -J \sum_{\langle xy \rangle} \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y - B \sum_x \vec{s}_x. \quad (5.6)$$

La susceptibilidad magnética χ_M se define como

$$\begin{aligned}\chi_\mu &= \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial B^2} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_V = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial B} \frac{\sum_\sigma M_\sigma e^{-\beta \mathcal{H}_\sigma}}{Z} \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{k_B T^2} \left[\frac{\sum_\sigma M_\sigma^2 e^{-\beta \mathcal{H}_\sigma}}{Z} - \left(\frac{\sum_\sigma M_\sigma e^{-\beta \mathcal{H}_\sigma}}{Z} \right)^2 \right], \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{k_B T^2} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right).\end{aligned}\tag{5.7}$$

5.1. Transiciones de fase

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[13]-[15].

En el modelo 2d O(3), la temperatura es un parámetro que añade ruido aleatorio a cambiar las direcciones de los espines. A temperatura $T = 0$ no hay fluctuaciones y el sistema alcanza una configuración de energía mínima. Cuando la temperatura $T_c > T > 0$ se forman grupos de espines alineados, el vector de magnetización de cada grupo apunta en una dirección diferente, por lo que el sistema no alcanza una configuración de energía mínima. A mayor temperatura es mayor el número de espines apuntando en direcciones aleatorias. Pasando la temperatura crítica, la intensidad de las fluctuaciones evita la formación de grupos considerables de espines alineados, por consecuencia predomina el ruido termodinámico. En el proceso mencionado se pasan por dos fases:

- Una fase ordenada por debajo de la temperatura crítica
- Una fase desordenada por encima de la temperatura crítica.

El cambio entre estas dos fases es una transición de segundo orden, ya que implica una discontinuidad en la segunda derivada de la energía libre del sistema.

Cuando se perturba un sistema en equilibrio, las variables mecánicas del sistema cambian, el tiempo que el sistema tarda en alcanzar nuevamente el estado de equilibrio termodinámico es conocido como tiempo de relajación

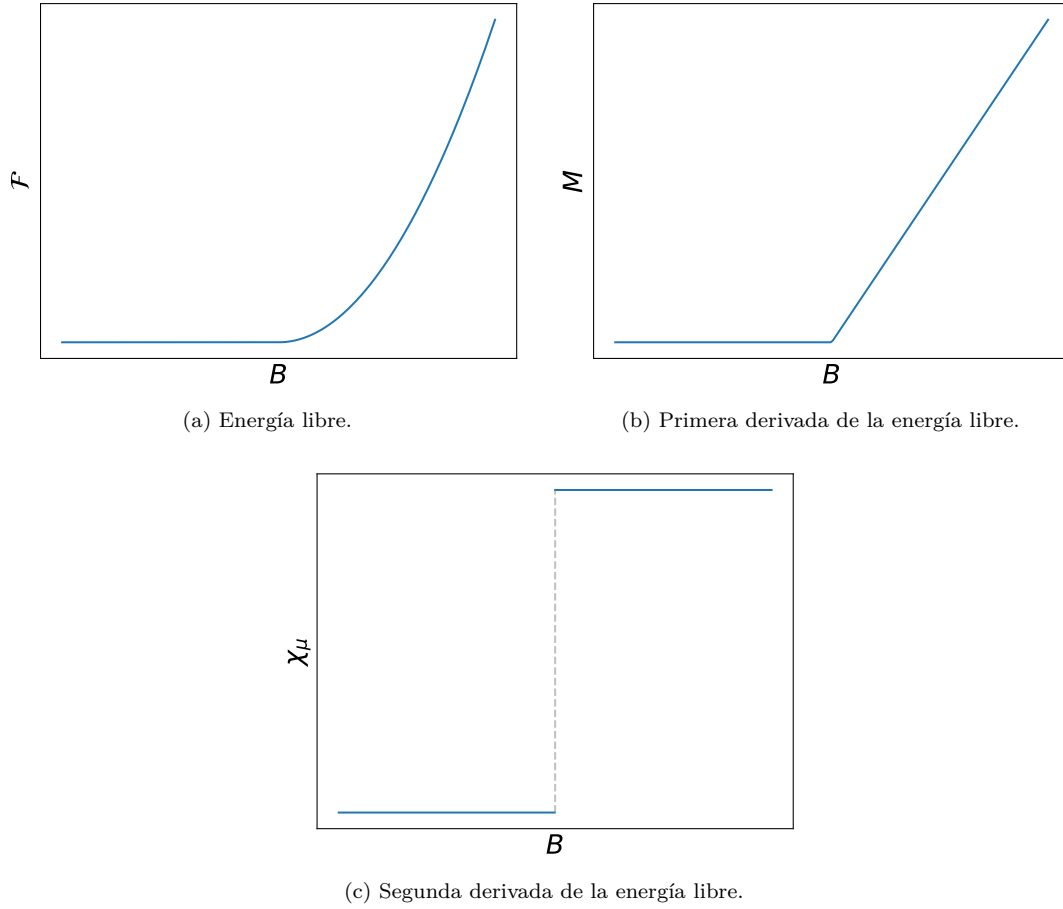


Figura 5.1: Transición de fase de segundo orden.

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 como

$$\langle \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \rangle_c = \langle \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \rangle - \langle \vec{s}_x \rangle \cdot \langle \vec{s}_y \rangle. \quad (5.8)$$

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 la practica, para determinar la longitud de correlación se mapea a una linea

$$\vec{\sigma}_i = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \vec{s}_{i,k}, \quad \vec{\sigma}_j = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \vec{s}_{l,j}, \quad (5.9)$$

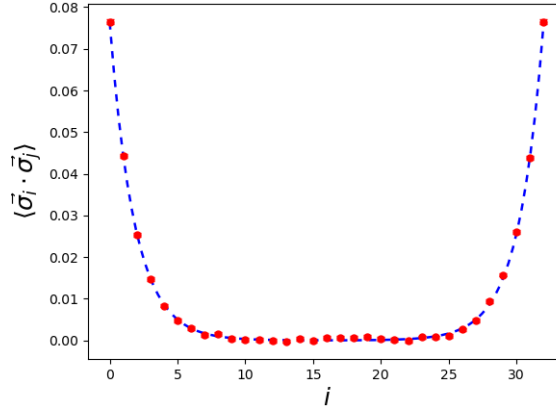


Figura 5.2: Función de correlación

$$\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle_c = A \cosh \left(\frac{|i-j| - L/2}{\xi} \right), \quad (5.10)$$

donde ξ es la longitud de correlación. La longitud de correlación ξ diverge a la temperatura crítica T_c . Conforme T se acerca a la temperatura crítica desde arriba, la divergencia de ξ define el exponente crítico ν

$$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}, \quad (5.11)$$

En el modelo 2d $O(3)$ la formula se simplifica como

$$\xi \propto T^{-\nu}, \quad (5.12)$$

5.3. Escalamiento

Dado un potencial termodinámico

$$G(H, T) = G(H, \epsilon). \quad (5.13)$$

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

$$G(\lambda^{a_H} H, \lambda^{a_T} \epsilon) = \lambda G(H, \epsilon), \quad (5.14)$$

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

$$M = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \Big|_{T, B=0} \propto (T_c - T)^\beta, \quad (5.15)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \Big|_{T, B=0} \propto (T_c - T)^\gamma, \quad (5.16)$$

$$M|_{T=T_C} \propto B^{1/\delta}, \quad (5.17)$$

$$C = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \propto (T - T_c)^{-\alpha}, \quad (5.18)$$

$$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}. \quad (5.19)$$

$$(5.20)$$

5.4. Universalidad

Debido a el número 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 Grriffiths, 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.

Capítulo 6

Mecanismo de Kibble Zurek

Una transición de fase por ruptura de simetría es un fenómeno en un sistema físico en el que este pasa de un estado desordenado pero simétrico a un estado ordenado, presentando más simetrías. Algunos ejemplos son:

- Cuando el agua se congela, la simetría rotacional se rompe por la elección de una orientación en los cristales de hielo.
- En el universo temprano, la ruptura de la simetría puede haber conducido a la formación de defectos topológicos como monopolos puntuales, cuerdas cósmicas lineales o paredes de dominio planares.
- En ^4He en estado superfluidico, la condensación de Bose ocurre alrededor de $2K$. El rompimiento de la simetría favorece la formación de vórtices.

En estos sistemas, los defectos topológicos remanentes son importantes, porque son objetos inherentemente estables que pueden proporcionar pistas observacionales sobre cómo era el sistema en el momento en que se formaron.

6.1. Relacionado al universo temprano

Consideremos el universo temprano en expansión. En modelos de interacción débil y electromagnetismo, la temperatura crítica es del orden $\sqrt{G_F}$, donde G_F es la constante de Fermi. Siguiendo dicha suposición, el universo paso por la temperatura crítica entre $10^{-10}s$ y $10^{-12}s$.

Consideremos un campo multi escalar $\phi \in \mathbb{R}^n$ con un lagrangiano invariante bajo el grupo ortogonal $O(n)$,

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{1}{2} \left(D_\mu \vec{\phi} \right)^2 - \frac{1}{8} g^2 (\phi^2 - \eta^2)^2 + \frac{1}{8} \text{Tr} (B_{\mu\nu} B^{\mu\nu}) \\ D_\mu \left(\vec{\phi} \right) &= (\partial_\mu - q B_\mu) \vec{\phi} \\ B_{\mu\nu} &= O_{\mu\nu} B_{\mu\nu} - D_\nu B_\mu + q [B_\mu, B_\nu].\end{aligned}\tag{6.1}$$

Donde g, ν son constantes de acoplamiento. A temperatura T cero hay una ruptura espontánea de la simetría a $O(n-1)$, por lo que variedad del estado de menor energía es la esfera \mathcal{S}^{n-1}

Para T cerca de la temperatura crítica aparecen fluctuaciones fuertes en el campo $\vec{\phi}$. por debajo de la temperatura crítica el valor esperado es algún punto en \mathcal{S}^{n-1} .

Ningún punto de la esfera tiene preferencia, y la elección es independiente entre las diferentes regiones del espacio. Por lo tanto, se espera la formación de dominios con distinto valor esperado de $\vec{\phi}$, variando entre regiones de una manera más o menos aleatoria. Al llegar al equilibrio muchos de estas variaciones dejarán de fluctuar acercando el valor esperado de los diferentes dominios al valor constante $\langle \vec{\phi} \rangle$. La cuestión es si luego del enfriamiento del universo, las fronteras entre dominios pueden formar defectos topológicos.

Una posibilidad es la neutralidad del universo respecto a las cargas del campo $\vec{\phi}$ en cuyo caso no hay problema con la formación de dominios, ya que no hay una dirección preferencial hacia algún punto en \mathcal{S}^{n-1} . La otra posibilidad es que el universo podría tener una carga asociada q_{t_0} asociada al campo $\vec{\phi}$. En este caso el rompimiento de la simetría sería fijado a las condiciones iniciales impidiendo el surgimiento de estructuras de dominio. Consideremos el primer caso, que permite la formación de dominios, el tamaño de estos dominios está determinado por la longitud de correlación

$$\xi^{-1} \approx g^2 T. \quad (6.2)$$

Es interesante revisar las posibles configuraciones geométricas de estos dominios. Las transiciones de fase de ruptura de simetría en el universo temprano podrían haber formado estructuras topológicamente estables como monopolos y cuerdas cósmicas.

Un problema que surgió al intentar hacer predicciones sobre las cuerdas cósmicas fue estimar cuántas habría. Una elección aleatoria de fases debería conducir a una maraña aleatoria de cuerdas, caracterizada por una escala de longitud típica ξ .

Desafortunadamente, esa idea no funcionó. Las observaciones realizadas por COBE y más recientemente por WMAP [16] de la pequeña anisotropía en el fondo cósmico de microondas revelan una escala de distancia preferencial que las cuerdas cósmicas no pueden explicar. Afortunadamente, existen análogos de cuerdas cósmicas en muchos sistemas de materia condensada, incluidos las líneas de vórtice en superfluidos [17]-[19].

6.2. Experimentos en helio superfluido

En 1985, W. Zurek, en Los Álamos, sugirió que las ideas sobre cómo calcular ξ podrían probarse aplicándolas al problema de la formación de defectos en una transición de fase de baja temperatura, en particular la transición de normal a superfluido en helio líquido. Zurek demostró que en una transición de segundo orden, se podía obtener una relación de ley de potencia entre ξ y τ_{cool} . Donde τ_{cool} se define de modo que la tasa de cambio de temperatura en el punto crítico sea $dT/dt = -Tc/\tau_{\text{cool}}$ y el exponente ζ se pueda calcular en términos de índices críticos conocidos de la transición de fase.

$$\xi \propto \tau_{\text{cool}}^{-\frac{\nu}{1+\nu z}} \quad (6.3)$$

Existe una analogía entre cuerdas cósmicas y líneas de vórtice. En un superfluido, tras un súbito decaimiento de presión, la fase de la función de onda en el condensado de helio es análoga a la ruptura de simetría del campo de multi escalar $\vec{\phi} \in \mathbb{R}^2$.

Cerca de la transición de fase, el potencial es de la forma

$$V = \alpha |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} \beta |\psi(\vec{r})|^4, \quad (6.4)$$

Donde $\alpha = \alpha'(T - T_c)$ y α', β son constantes que se deducen a partir del calor específico. Por debajo de la temperatura crítica tras la ruptura de la simetría en el superfluido α es un valor negativo y el potencial V tiene la forma de sombrero.

El parametro de orden de un spuerfluido puede pensarse como la función de onda del condensado de Bose. En este sistema se pueden formar lineas de vórtice cuando el parámetro de orden es un valor complejo

$$\psi = |\psi|e^{i\theta}. \quad (6.5)$$

Es una situación análoga al modelo cosmológico y una buena aproximación a el superfluido ^4He . en particular para un spuerfluido cerca de la temperatura crítica T_c ,

Una fracción considerable de los átomos de ^4He ocupan un solo estado cuántico a esa temperatura. Entonces ψ es proporcional a la función de onda de ese estado, y $|\psi|^2$ representa la densidad de la fracción superfluida. Una cuerda, o cualquiera de sus defectos análogos, es un tubo delgado alrededor del cual la fase de ψ cambia en 2π . En He, la velocidad superfluida es proporcional al gradiente de la fase[20]-[22].

6.3. 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

$$C_{AA}(t) = \langle A_s A_{s+t} \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (6.6)$$

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

$$C_{AA}(t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-t/\tau_{\text{exp},\alpha}}. \quad (6.7)$$

El tiempo de autocorrelación se estima como

$$\tau_{\text{exp}} = \text{máx}(\tau_{\text{exp},\alpha}) \quad (6.8)$$

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

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \frac{C_{AA}(t)}{C_{AA}(0)}. \quad (6.9)$$

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

$$\tau \propto \xi^{-\nu z} \quad (6.10)$$

donde z es el exponente crítico dinámico.

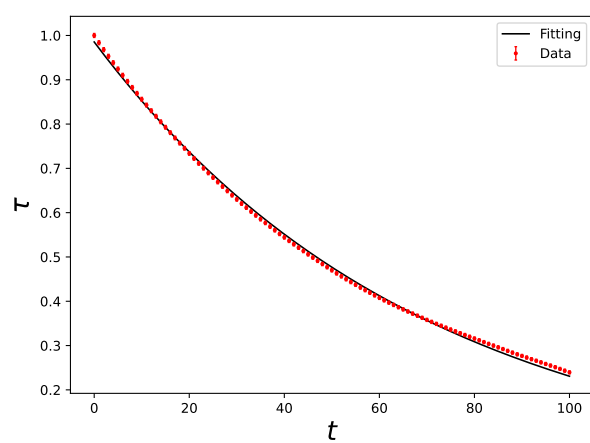


Figura 6.1: Evolución de la autocorrelación de la magnetización en 100 barridos de actualización para el algoritmo de Metropolis lexicográfico a temperatura $T = 0.9$ en una retícula de tamaño $L = 64$.

Capítulo 7

Simulaciones en equilibrio

En esta sección se miden las diferentes observables que se han descrito en los capítulos anteriores, en una simulación del modelo 2d $O(3)$. Para ello se ha escrito un programa en Fortran con rutinas de generación de configuraciones y actualización de estados en función de la temperatura para cada uno de los algoritmos descritos. Algunos términos básicos son:

- *hot-start*. Es una configuración inicial de espines aleatorios.
- *cold-start*. Es una configuración inicial de espines alineados.
- Actualización. Una actualización es un cambio o una propuesta de cambio de una configuración.
- Barrido de actualizaciones. Un barrido es la actualización de $V = L \times L$ espines seleccionados en orden lexicográfico, aleatorio o por su pertenencia a un clúster.

El programa que se encarga de las simulaciones 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. Si el número de observables medidas es menor a el número requerido se regresa al paso 2.

Como se ve en la Figura (7.1), las observables de un sistema fluctúan entre mediciones. Por lo que un resultado se calcula a partir del promedio de un número de mediciones suficientemente grande para alcanzar la precisión deseada.

7.1. Tiempo de autocorrelación

Se calculó el tiempo de autocorrelación en equilibrio térmico para las temperaturas $T \in \{0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$ en una retícula de tamaño $L \times L$ donde $L = 64$. En todos los experimentos numéricos se partió de una configuración inicial *hot-start*. Ya que en este punto se desconocía el

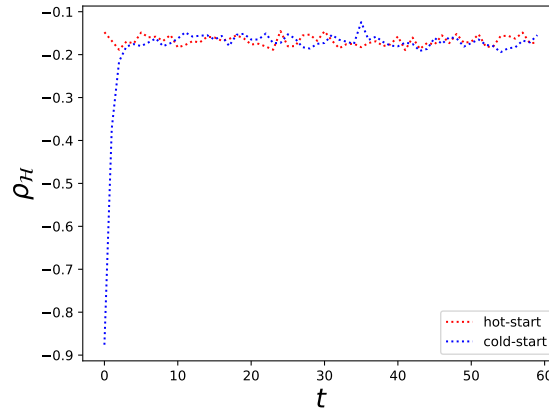


Figura 7.1: Termalización de dos sistemas 2d $O(3)$ a temperatura $T = 4$, $L = 64$. La trayectoria *cold-start*, parte de un estado de energía máxima en el que todos los espines están alineados. La trayectoria *hot-start*, parte de una configuración aleatoria. Después de unos 20 barridos ambas trayectorias oscilan alrededor una energía que corresponde al sistema termalizado.

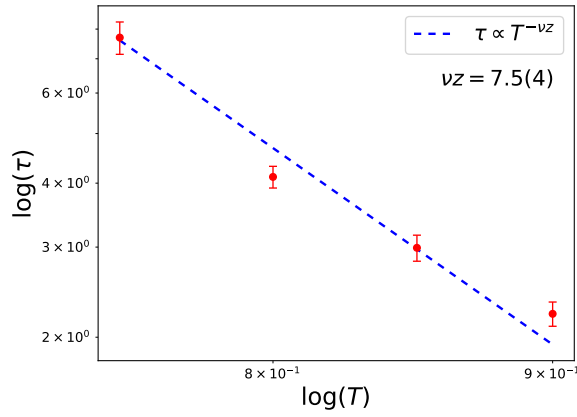
tiempo de autocorrelación, se realizaron 10^4 barridos de actualización del algoritmo multi-clúster, asegurando una configuración completamente termalizada.

Para la carga topológica en el algoritmo multi-clúster, la autocorrelación no puede medirse debido a la eficiencia con la que el algoritmo multi-clúster alcanza la configuración de equilibrio. En el caso de los algoritmos de actualización local hay una desaceleración crítica cerca de la temperatura $T = 0$.

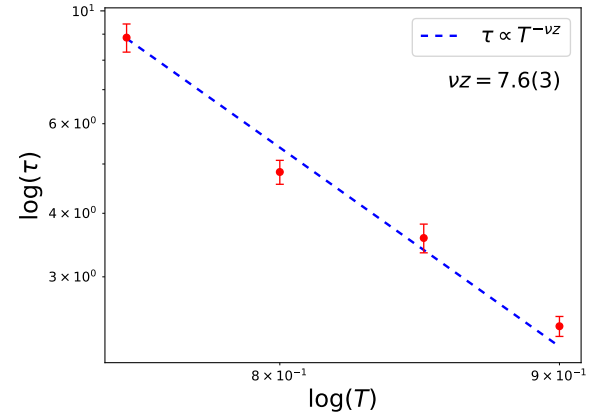
Los tiempos de autocorrelación se calcularon por ajuste a la función exponencial y por integración, ambos resultados fueron consistentes para $T \in \{0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$.

Finalmente se ajustó el tiempo de autocorrelación en función de la temperatura siguiendo la ecuación

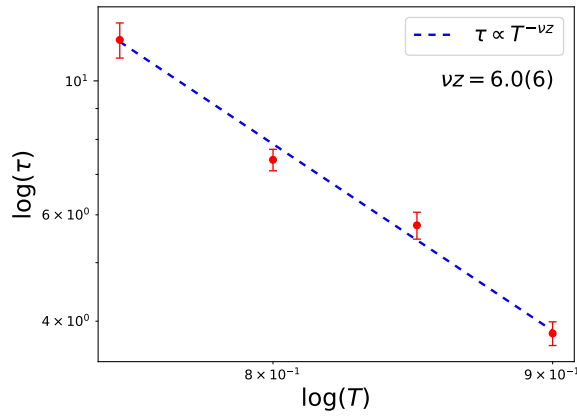
$$\tau \propto T^{-\nu z}. \quad (7.1)$$



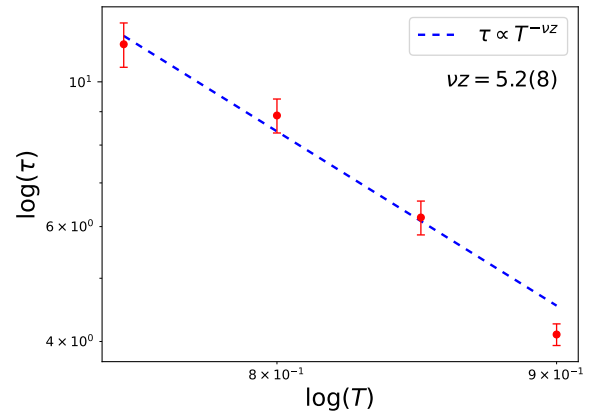
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.

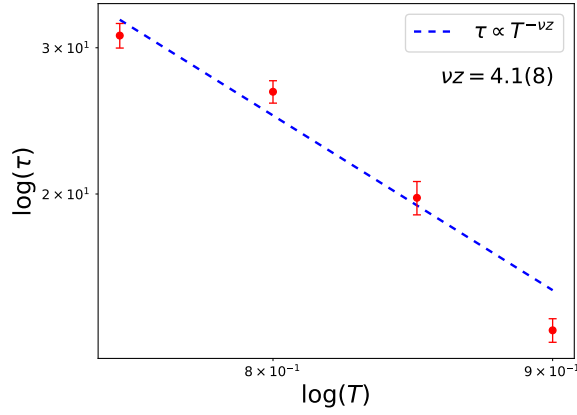


(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

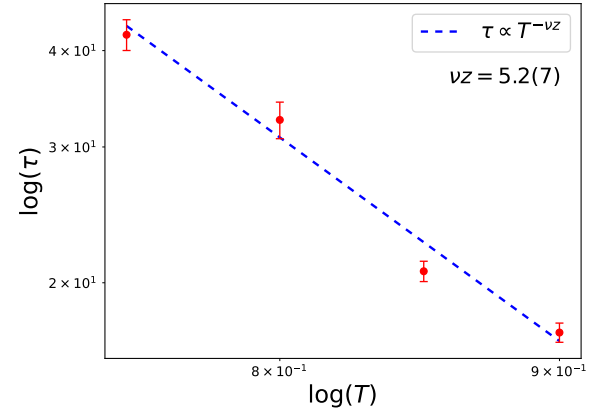


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

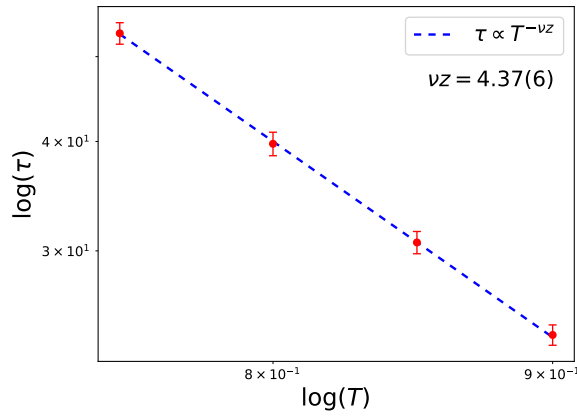
Figura 7.2: Tiempo de autocorrelación de la carga topológica en función de la temperatura en una retícula de longitud $L = 64$.



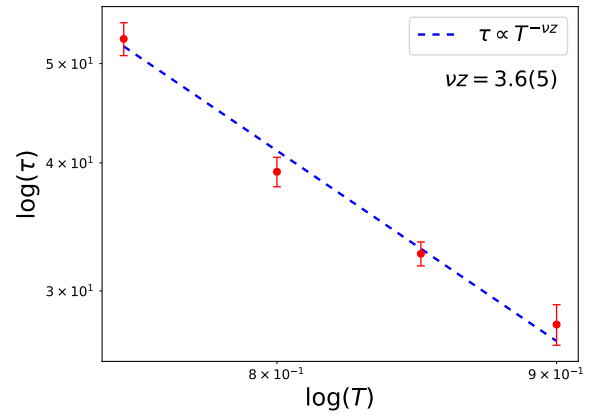
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.

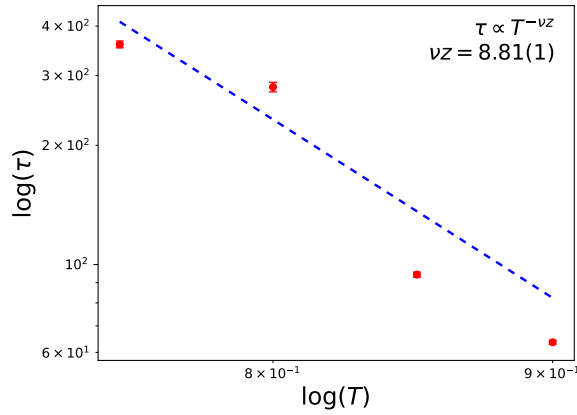


(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

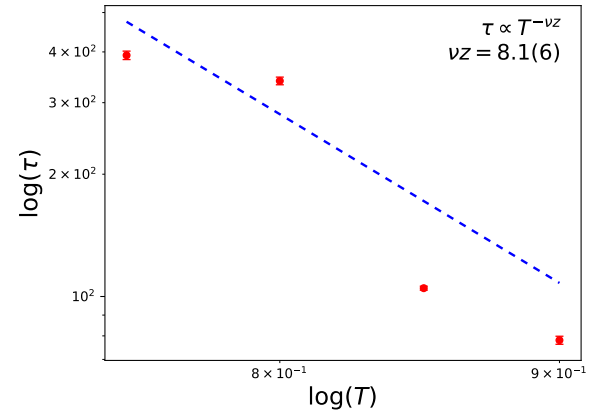


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

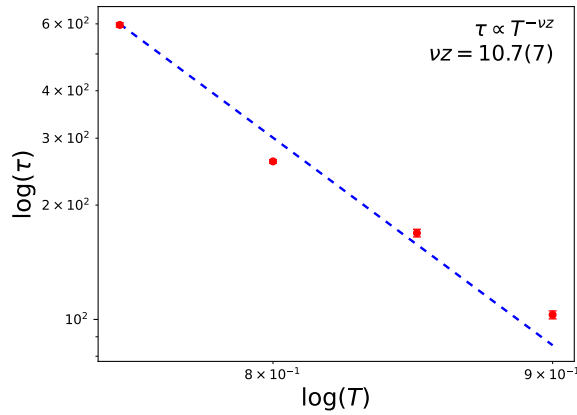
Figura 7.3: Tiempo de autocorrelación de la densidad de energía en función de la temperatura en una retícula de tamaño $L = 64$.



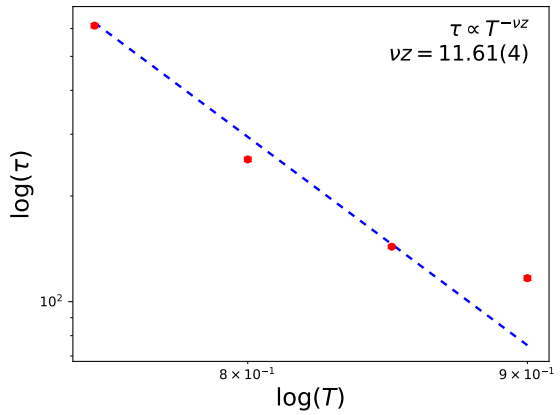
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

Figura 7.4: Tiempo de autocorrelación de la magnetización en función de la temperatura en una retícula de tamaño $L = 64$.

Algoritmo	Q	\mathcal{H}	m
Metropolis lexicográfico	6.9(7)	4.0(8)	9.3(5)
Metropolis aleatorio	5.5(1)	3.9(7)	7.4(9)
Glauber lexicográfico	7.0(5)	4.0(2)	7.6(7)
Glauber aleatorio	7.6(3)	4.8(9)	9.1(4)

Tabla 7.1: Exponente νz para el tiempo de autocorrelación.

El algoritmo multi-cluster termaliza las configuraciones en un barridos de actualización en el rango de temperaturas usado por lo que no se pudo determinar un exponente.

7.2. Longitud de correlación

Se realizó una serie de experimentos numéricos para determinar características generales del modelo 2d $O(3)$,

Se calculó la longitud de correlación en retículas de tamaño $L \times L$ donde $L \in \{32, 64, 128\}$ para las temperaturas $T \in \{0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$. En todos los casos se partió de una configuración *hot-start* y se termalizó durante 10^4 actualizaciones del algoritmo *multi-clúster*.

Cada uno de los exponentes críticos está registrado en la tabla 7.2. Se ajustaron las longitudes de correlación respecto a la temperatura a la función

$$\xi \propto T^{-\nu}. \quad (7.2)$$

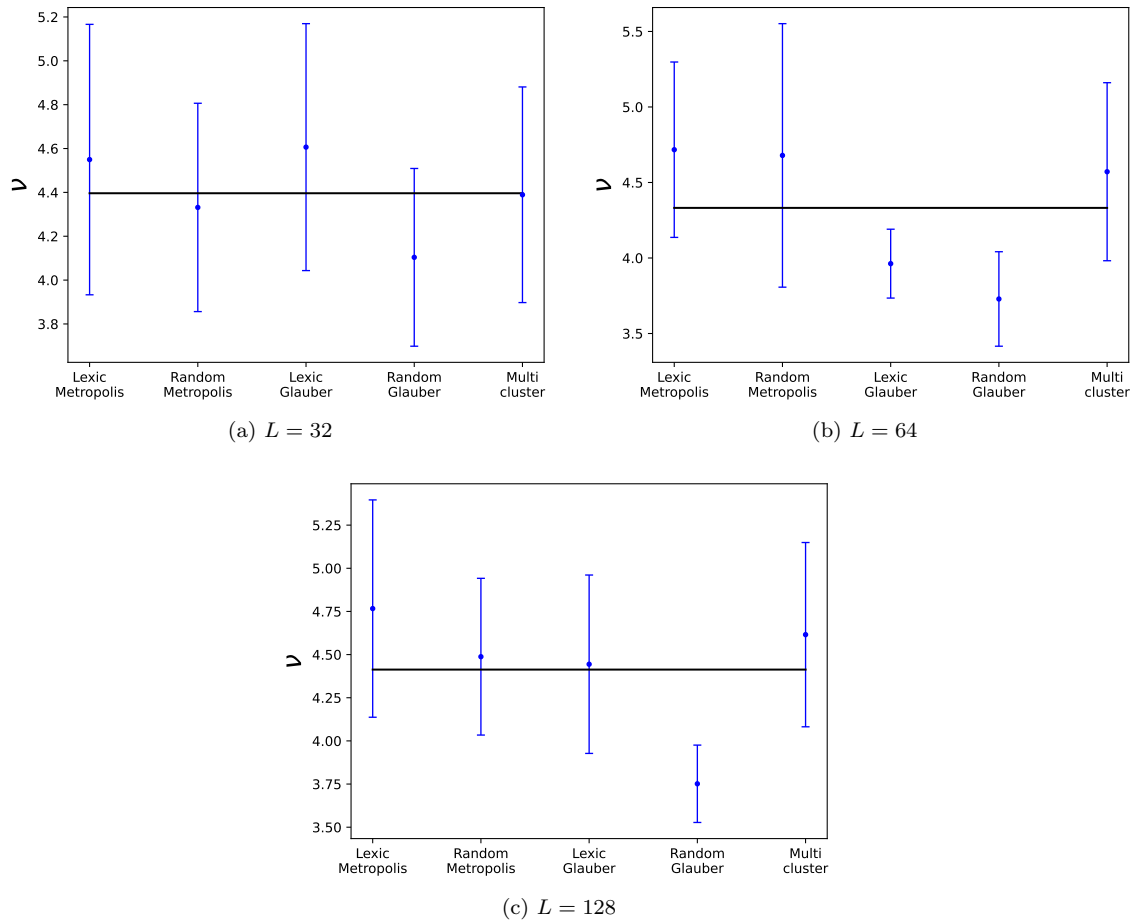
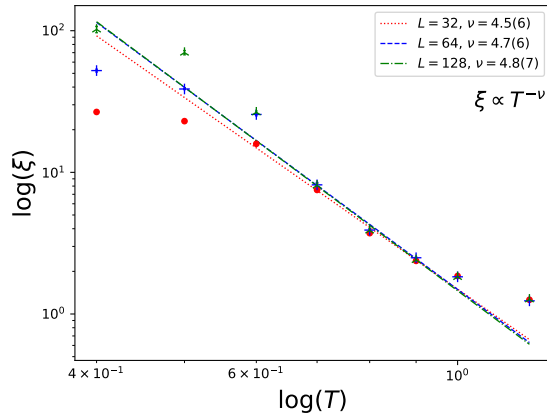
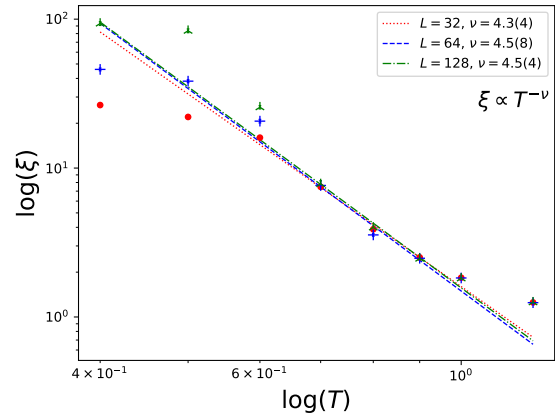


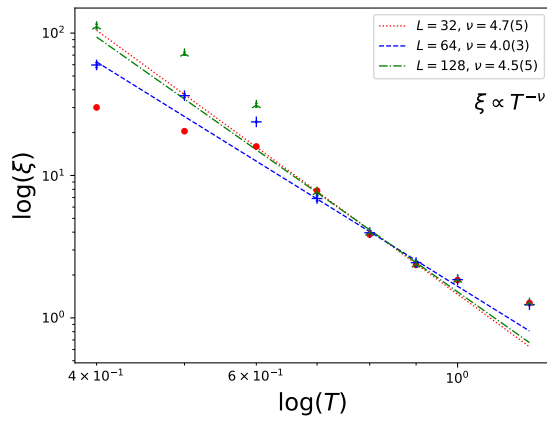
Figura 7.6: Longitud de correlación para los diferentes algoritmos dada una retícula de tamaño L .



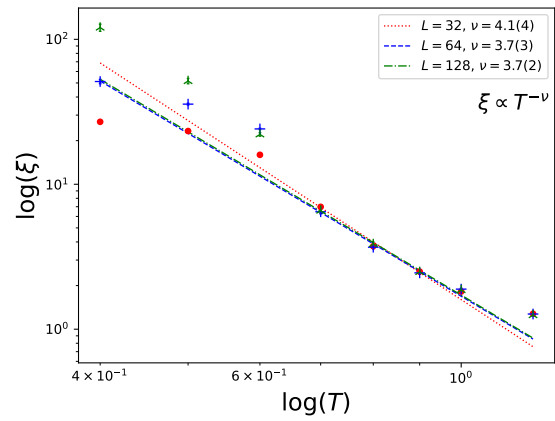
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

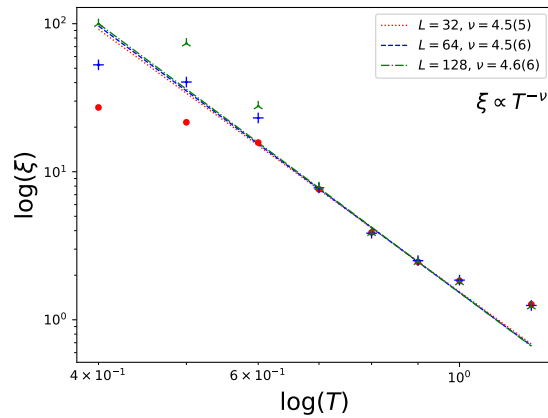
(e) Algoritmo *multi-clúster*

Figura 7.5: Longitud de correlación en función de la temperatura para las retículas de tamaño $L \in \{32, 64, 128\}$, algoritmo *multi-clúster*.

L	Metropolis lexicográfico	Metropolis aleatorio	Glauber lexicográfico	Glauber aleatorio	<i>multi-clúster</i>
32	4.5(6)	4.3(4)	4.7(5)	4.1(4)	4.5(5)
64	4.7(6)	4.5(8)	4.0(3)	3.7(3)	4.5(6)
128	4.8(7)	4.5(4)	4.5(5)	3.7(2)	4.6(6)

Tabla 7.2: Exponente crítico ν obtenido en las retículas de tamaño $L \times L$ donde $L \in \{32, 64, 128\}$.

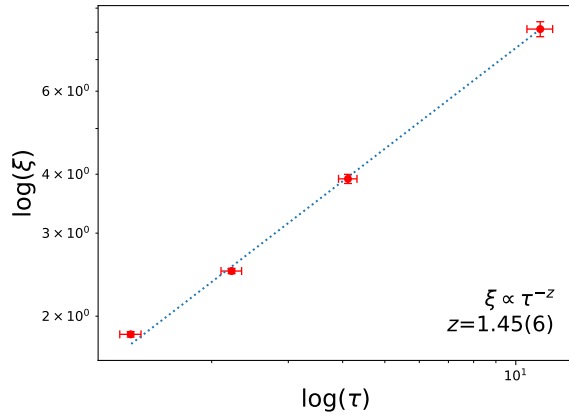
Los efectos de volumen finito son mas fuertes en temperaturas menores a $T = 0.7$ por lo que se consideraron las temperaturas posteriores para el ajuste. Promediando los exponentes críticos para $L = 128$ se tiene $\nu = 4.4(5)$.

7.3. Exponente crítico dinámico

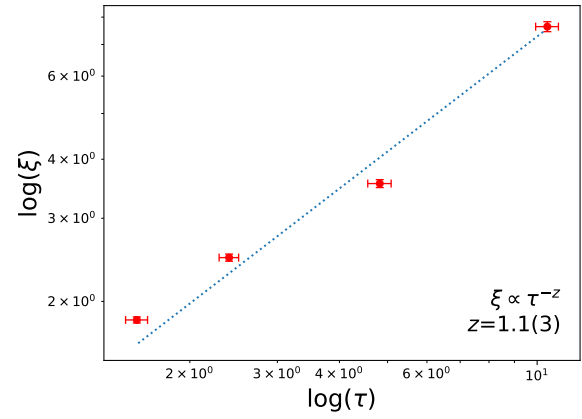
El exponente crítico dinámico se obtuvo a partir de las longitudes de correlación y los tiempos de autocorrelación para las temperaturas $T \in \{0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$ en una retícula de tamaño $L \times L$ donde $L = 64$. El exponente critico se calculo siguiendo la ecuación

$$\tau \propto \xi^z. \quad (7.3)$$

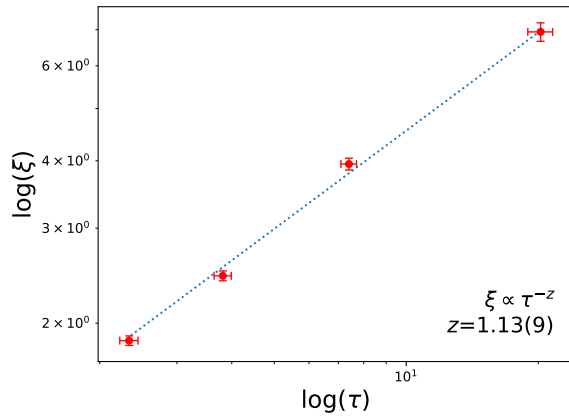
Como el exponente critico de autocorrelación no pudo medirse para el algoritmo multi-cluster, tampoco pudo medirse para calcular el exponente critico dinámico, en consecuencia en la tabla 7.3 se excluyen los exponentes críticos para el algoritmo multi-clúster.



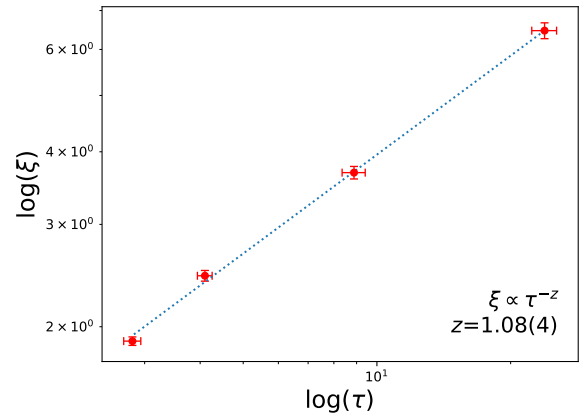
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.

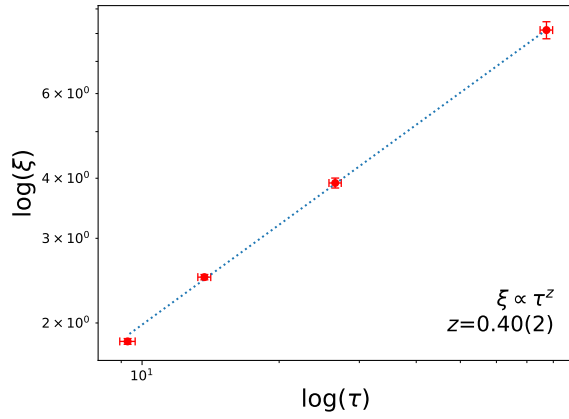


(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

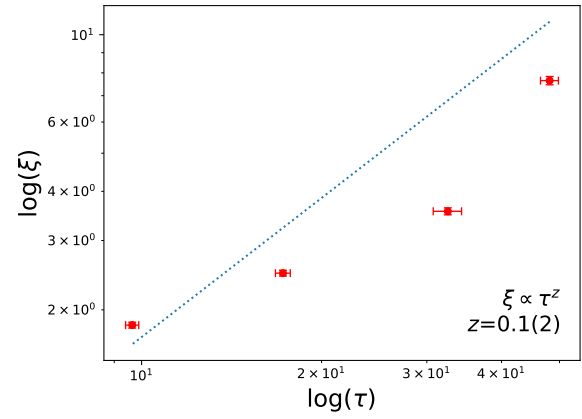


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

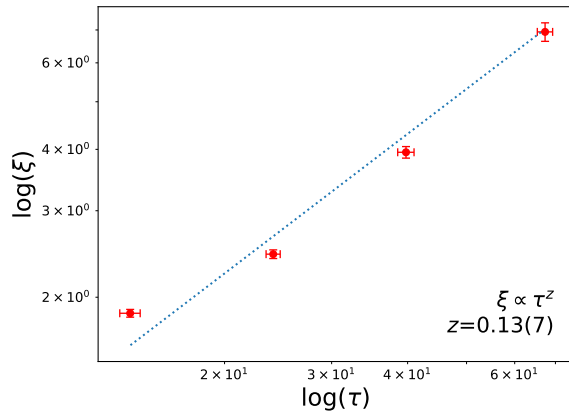
Figura 7.7: Tiempo de autocorrelación de la susceptibilidad topológica en función de la longitud de correlación en una retícula de tamaño $L = 64$.



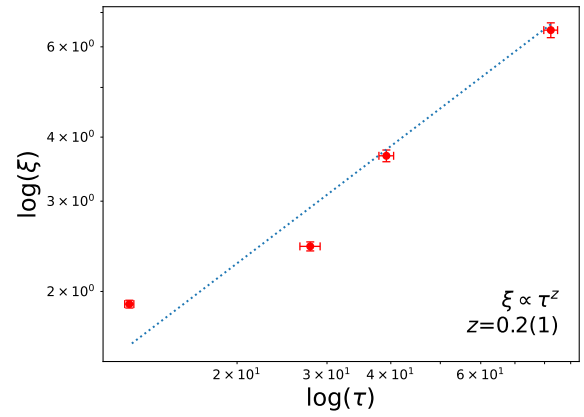
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

Figura 7.8: Tiempo de autocorrelación de la energía en función de la longitud de correlación en una retícula de tamaño $L = 64$.

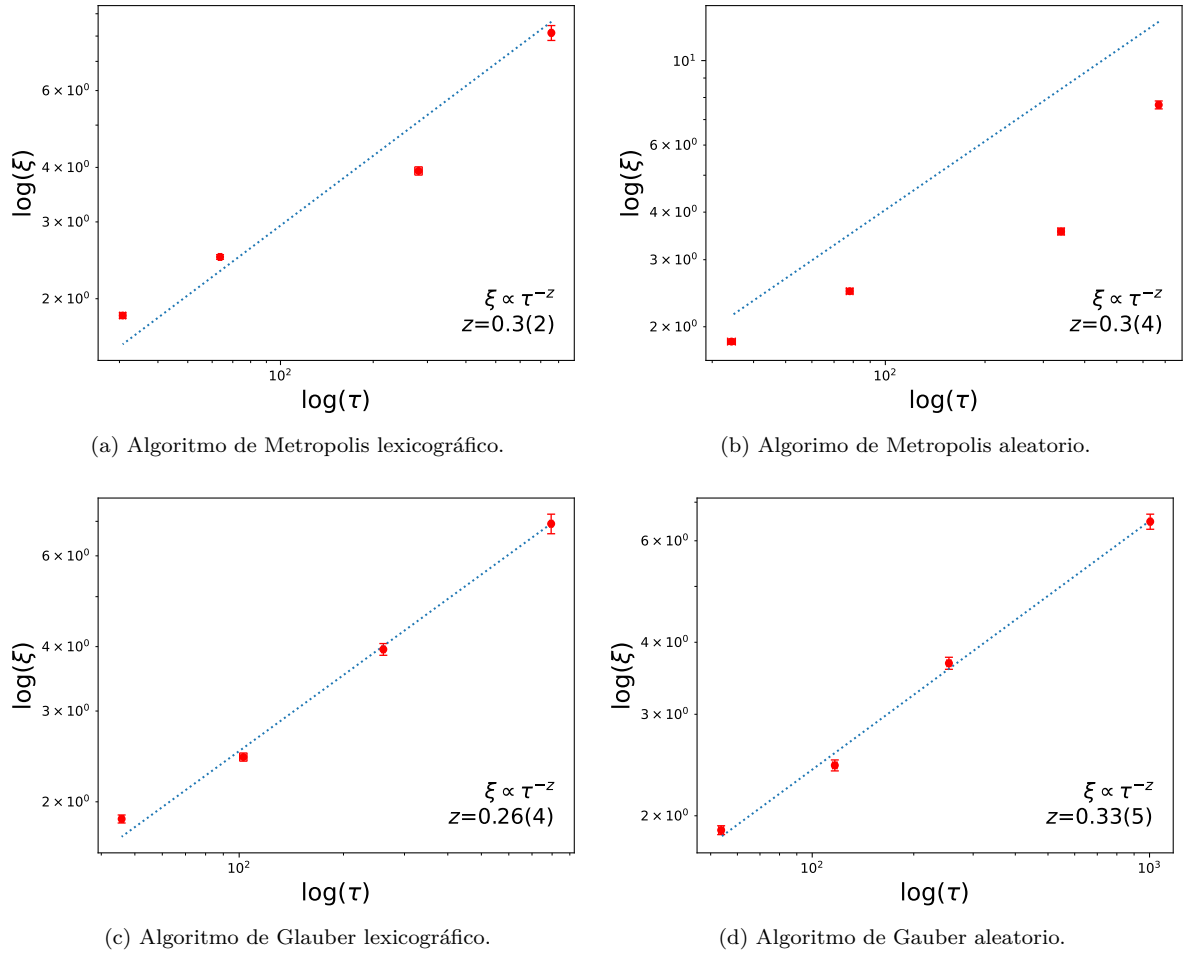


Figura 7.9: Tiempo de autocorrelación de la magnetización en función de la longitud de correlación en una retícula de tamaño $L = 64$.

Algoritmo	χ	\mathcal{H}	m
Metropolis lexicográfico	1.45(6)	0.4(2)	0.3(2)
Metropolis aleatorio	1.1(3)	0.1(2)	0.3(4)
Glauber lexicográfico	1.13(9)	0.13(7)	0.26(8)
Glauber aleatorio	1.08(4)	0.2(1)	0.33(5)

Tabla 7.3: Exponente crítico z dinámico para la susceptibilidad topológica χ_t , la energía \mathcal{H} y la magnetización m .

	χ	\mathcal{H}	m
ζ	0.57(9)	1.0(5)	0.7(2)

Tabla 7.4: Promedio del mecanismo de Kibble-Zurek, para la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización.

Se calculó el valor del exponente del mecanismo de Kibble-Zurek siguiendo la ecuación

$$\chi_t \propto \tau_{\text{cool}}^{-\zeta}, \quad \zeta = \frac{\nu}{1 + \nu z}, \quad (7.4)$$

y usando los exponentes críticos de las tablas 7.2 y 7.3. Finalmente se obtuvieron los resultados promedio expresados en la tabla 7.4.

Capítulo 8

Simulación de enfriamientos

Un enfriamiento rápido, es un fenómeno fuera del equilibrio en el que un sistema pasa de una temperatura inicial T_i a una temperatura final T_f en un tiempo t . La simulación de un enfriamiento se realiza cambiando la temperatura del sistema entre cada barrido de actualizaciones. El decremento de la temperatura entre cada barrido define la velocidad del enfriamiento. Se define la velocidad de enfriamiento como

$$v_{\text{cool}} = \frac{T_i - T_f}{\tau_{\text{cool}}} < 0. \quad (8.1)$$

La variable τ_{cool} es la tasa de cambio de temperatura y corresponde al 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 $t \in [0, \tau_{\text{cool}}]$, la temperatura cambia siguiendo la ecuación

$$T(t) = T_i - v_{\text{cool}}t. \quad (8.2)$$

Una simulación de enfriamiento consta de los siguientes pasos:

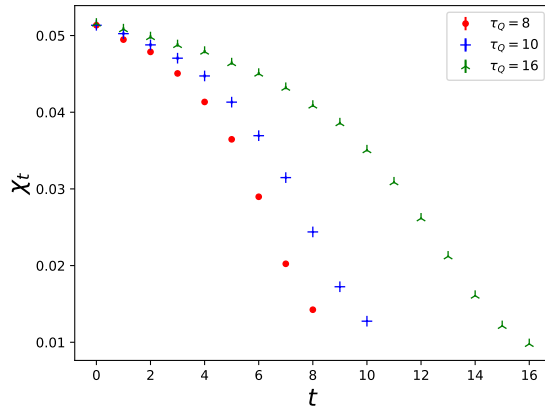
1. Se genera una configuración en equilibrio termodinámico a temperatura T .
2. Se actualiza la configuración a temperatura $T(t)$
3. Se miden las observables y se aumenta el tiempo de Markov de t a $t + 1$.
4. Si $T < 0$, se regresa al paso 2.

Como se hace en las simulaciones en equilibrio, una medición se obtiene de promediar un número de mediciones suficientemente grande para alcanzar la precisión estadística deseada. Se realiza un número N de enfriamientos y se obtiene un promedio de las mediciones en el mismo instante t .

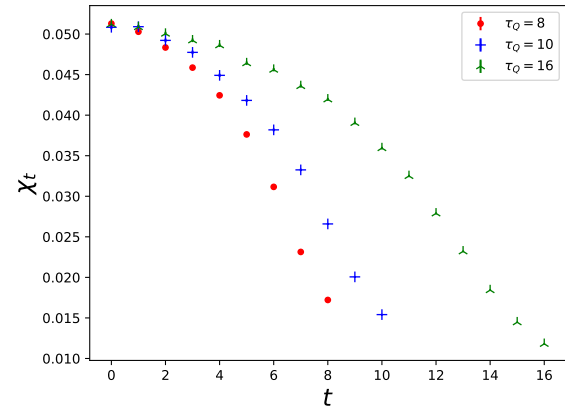
En cada enfriamiento se mide una trayectoria para cada observable en función del tiempo de Markov o de manera equivalente en función de la temperatura.

8.1. Enfriamientos rápidos

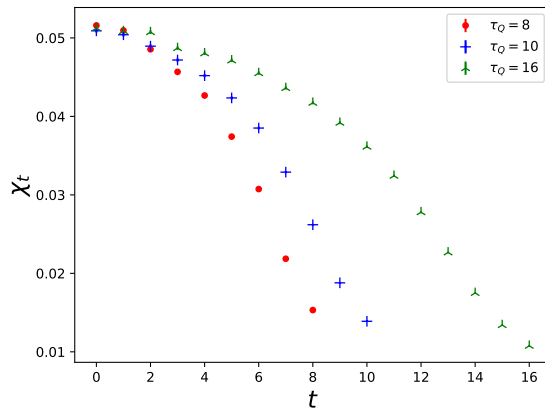
Se realizaron 10^5 enfriamientos desde la temperatura $T_i = 4$ hasta $T_f = 0$, usando las tasas de cambio de temperatura $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18\}$. En cada experimento numérico se midió la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización.



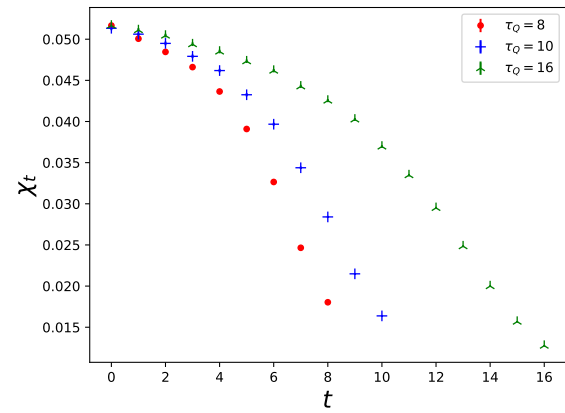
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



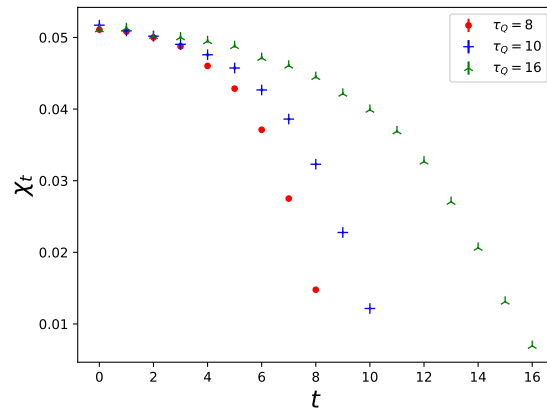
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

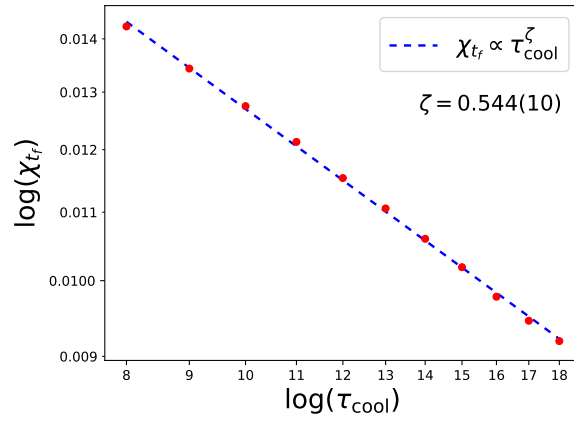


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

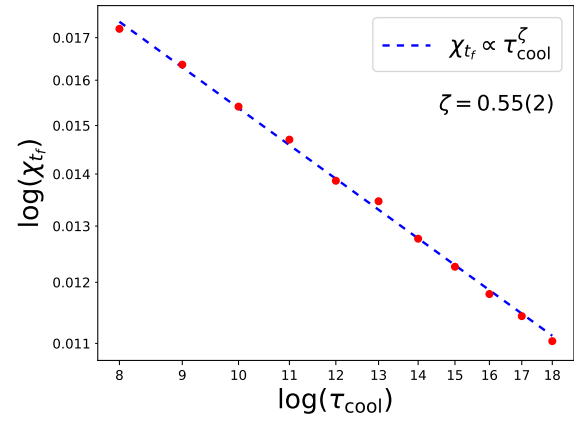


(e) Algoritmo multi-clúster

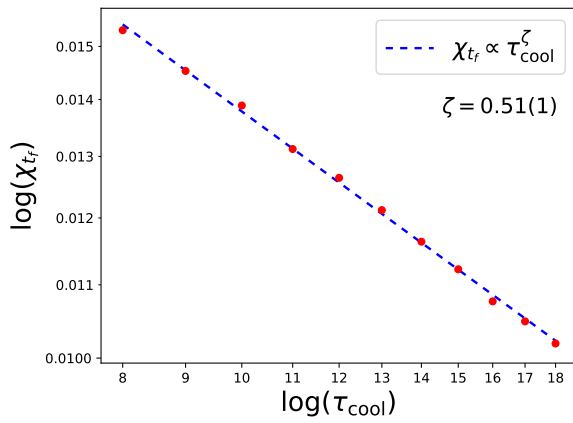
Figura 8.1: Evolución de los enfriamientos de la susceptibilidad topológica χ_t respecto a la temperatura T , para diferentes tasas de cambio de temperatura $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 10, 16\}$.



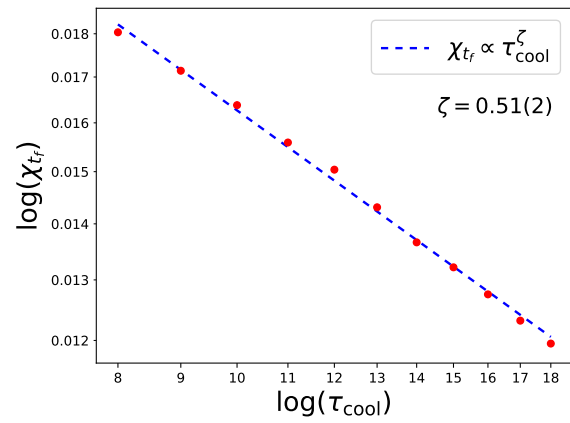
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



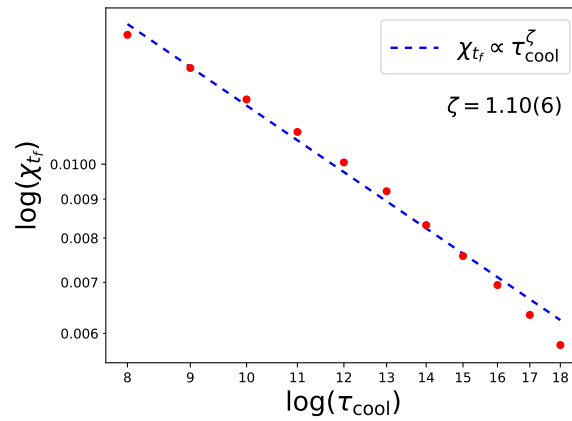
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

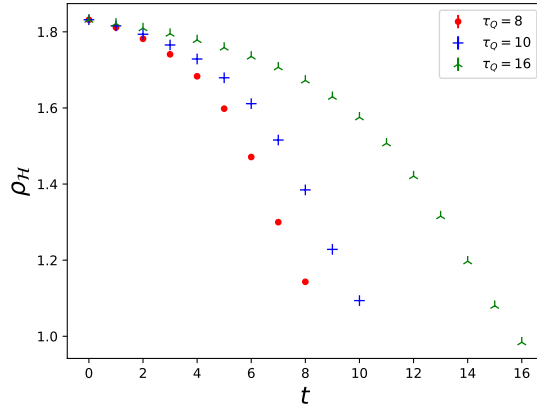


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

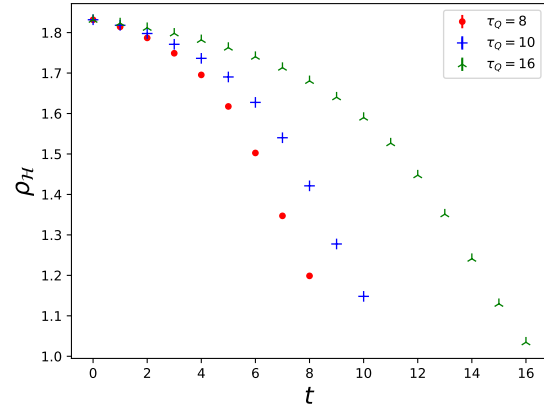


(e) Algoritmo multi-clúster

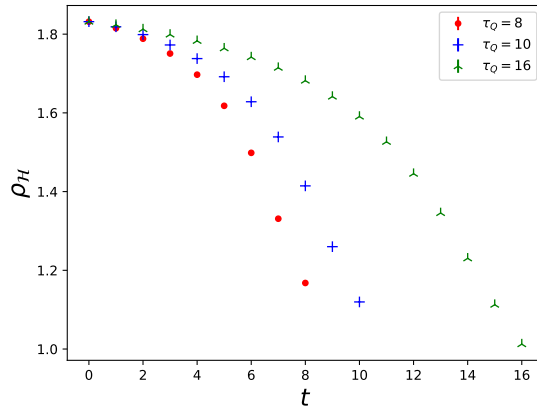
Figura 8.2: Susceptibilidad topológica final χ_{t_f} respecto a la tasa de cambio de temperatura τ_{cool} .



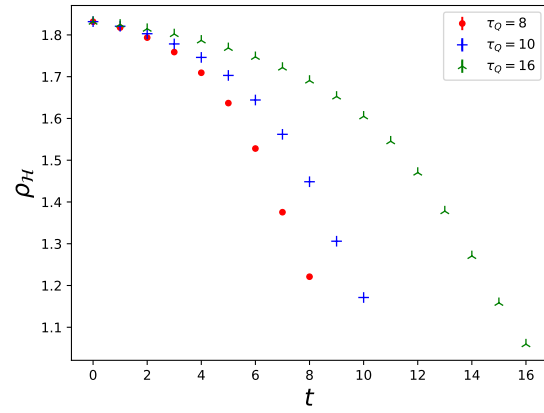
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



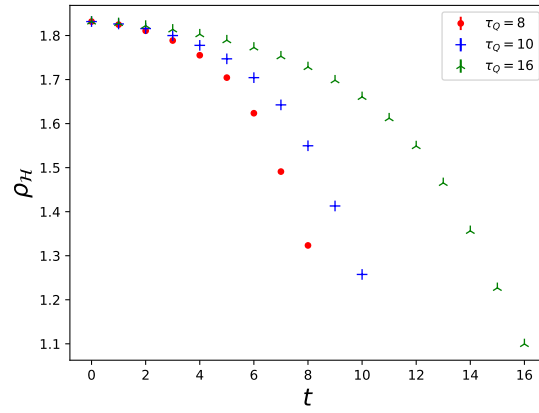
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

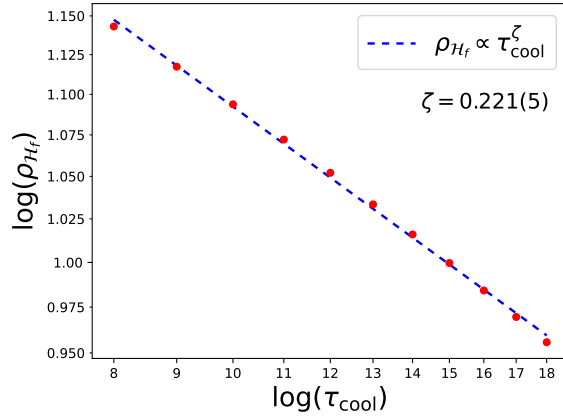


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

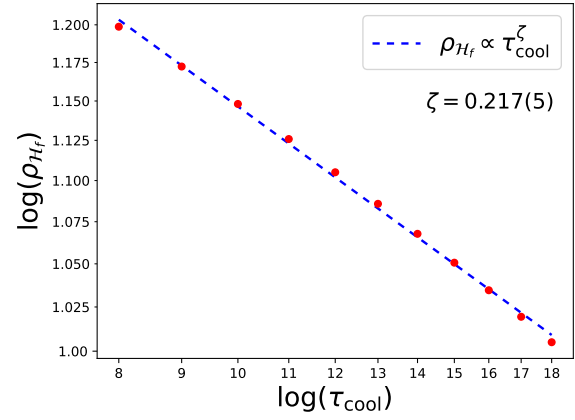


(e) Algoritmo multi-clúster

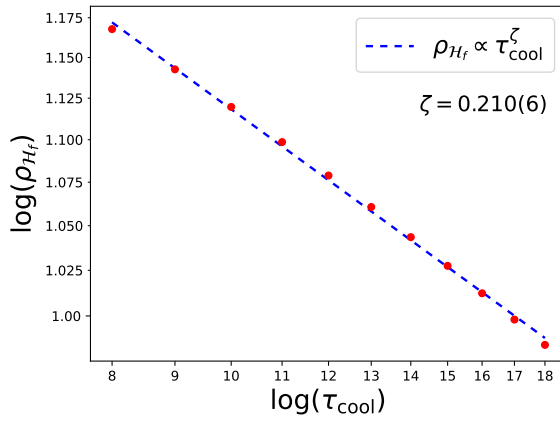
Figura 8.3: Evolución de los enfriamientos de la densidad de energía ρ_H respecto a la temperatura T , para diferentes velocidades de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 10, 16\}$.



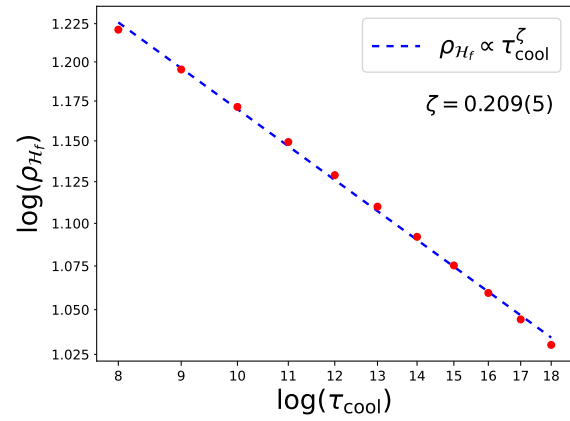
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



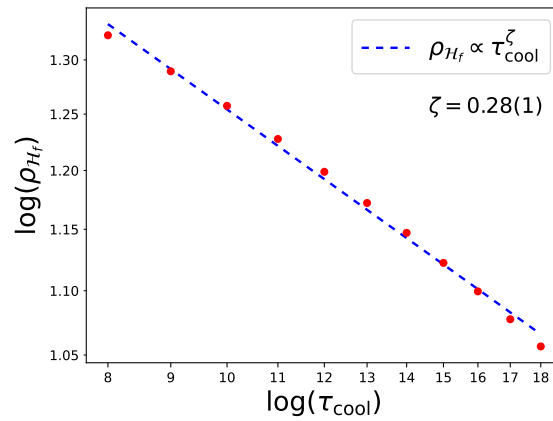
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

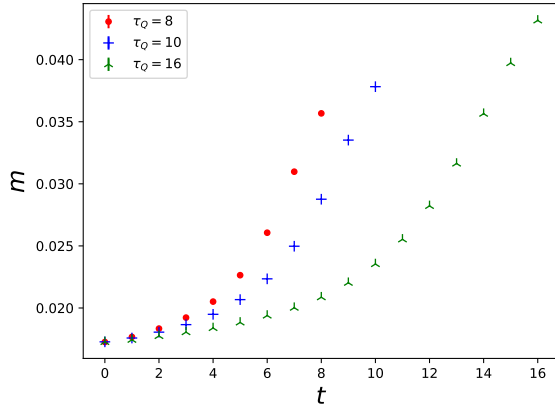


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

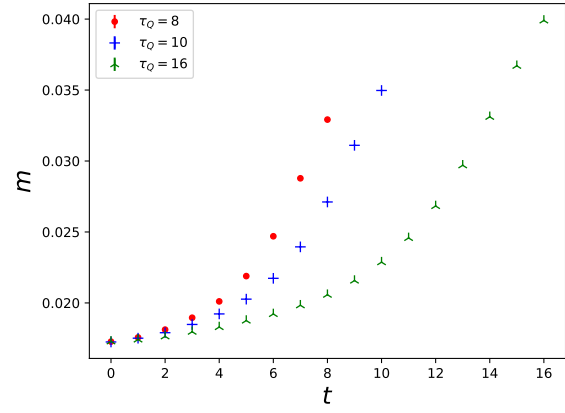


(e) Algoritmo multi-clúster

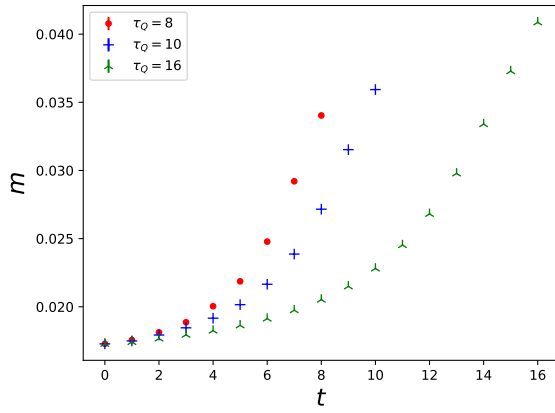
Figura 8.4: Densidad de energía final ρ_{H_f} respecto a la tasa de cambio de temperatura τ_{cool} .



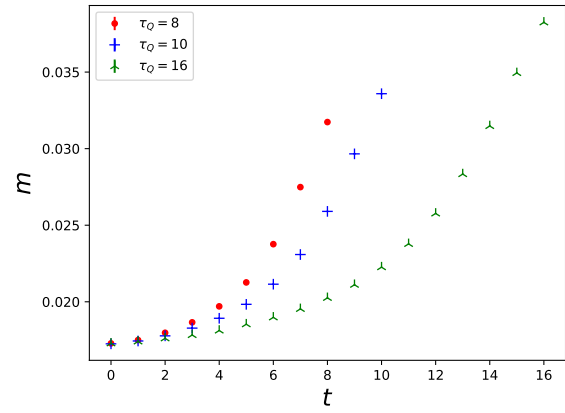
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



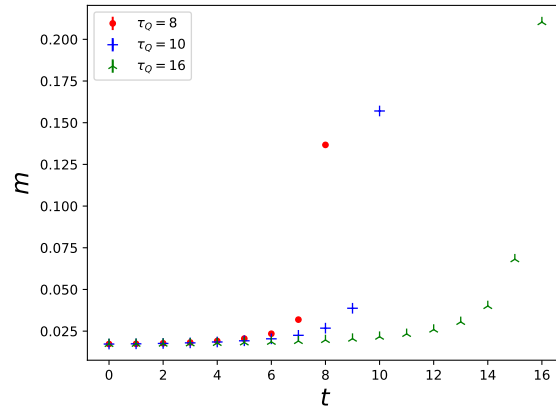
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico

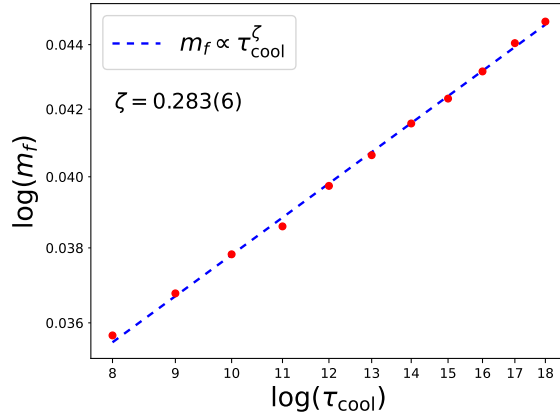


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio

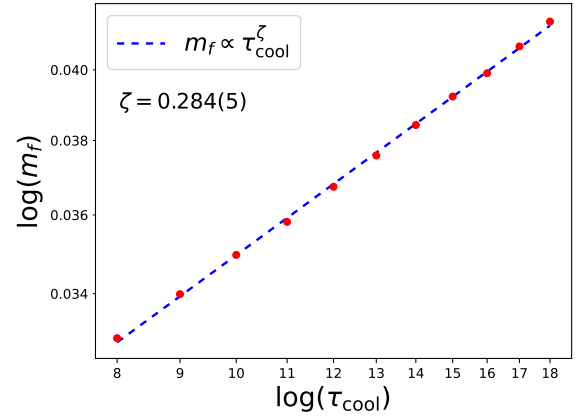


(e) Algoritmo multi-clúster

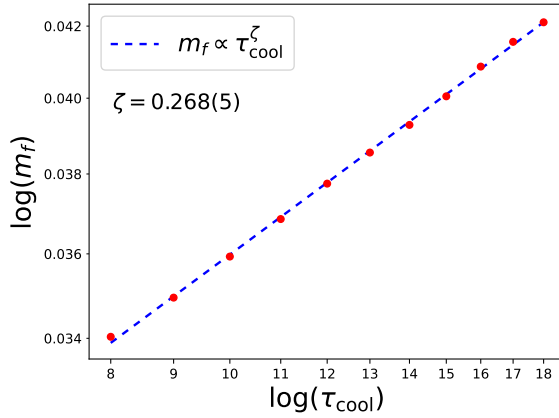
Figura 8.5: Evolución de los enfriamientos de la magnetización m respecto a la temperatura T , para diferentes tasas de cambio de temperatura $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8\}$.



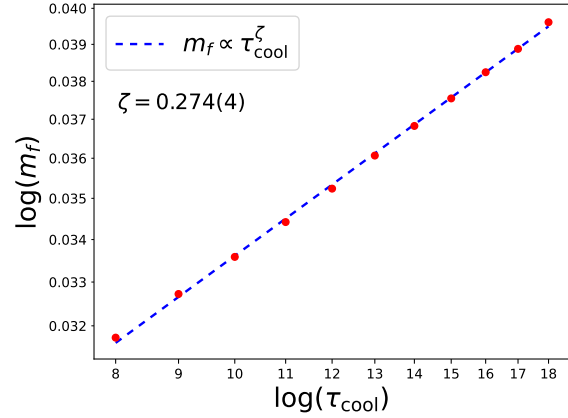
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico



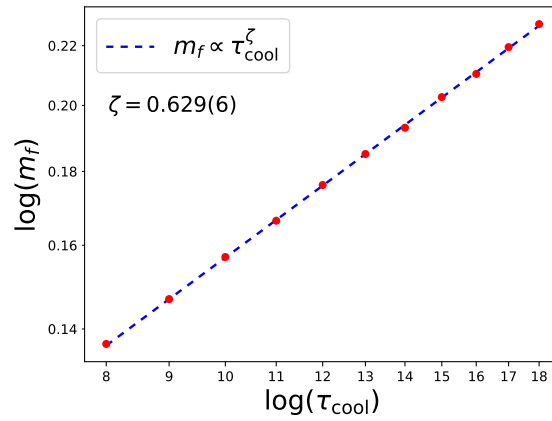
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio



(e) Algoritmo de multi-clúster

Figura 8.6: Magnetización final m_f respecto a la tasa de cambio de temperatura τ_{cool} .

Algoritmo	χ_t	\mathcal{H}	m
Metropolis lexicográfico	0.54(1)	0.221(5)	0.283(7)
Metropolis aleatorio	0.55(1)	0.217(5)	0.284(4)
Glauber lexicográfico	0.51(1)	0.211(5)	0.267(4)
Glauber aleatorio	0.51(2)	0.209(5)	0.274(5)
multi-clúster	1.10(7)	0.28(1)	0.630(5)

Tabla 8.1: Exponentes críticos ζ respecto a la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización para los diferentes algoritmos.

En la tabla 8.1 se observa que el exponente critico ζ es menor para los algoritmos de actualización local.

Capítulo 9

Resumen y conclusiones

Se ajustó el cambio en la velocidad de los enfriamientos a una ley de escalamiento. La susceptibilidad topológica resultó en una ley de escalamiento con un exponente $\zeta_1 = 0.53(1)$, el cual es compatible con las simulaciones en equilibrio que arrojan $\zeta_2 = 0.57(9)$.

Para la energía y la magnetización, los exponentes obtenidos a partir de los enfriamientos no coinciden con los resultados calculados en equilibrio.

El mecanismo de Kibble-Zurek se plantea en sistemas donde ocurre una ruptura de simetría al cruzar una temperatura crítica. Sin embargo, en el modelo 2d $O(3)$, la temperatura crítica es $T = 0$, lo que implica que no es posible alcanzar temperaturas menores a cero. En los experimentos realizados no se cruzó una temperatura crítica, por lo tanto, no hubo un cambio en el orden del sistema. En cambio, al aproximar el sistema a temperatura cero, se observa una desaceleración crítica que resulta ser más fuerte en el caso de la susceptibilidad topológica. Esto podría ser la razón por la cual el valor de ζ es compatible con el resultado en equilibrio.

Aunque el modelo 2d $O(3)$, no pasa por la temperatura crítica en los enfriamientos, fue posible ajustar una ley de escalamiento para las observables de susceptibilidad topológica, energía y magnetización. Para los algoritmos de actualización locales, la ley de escalamiento conduce a exponentes críticos ζ compatibles.

En cambio, con el algoritmo multi-cluster, los valores obtenidos para el exponente ζ resultan mayores que los de los algoritmos de actualización locales. Además, para las temperaturas simuladas en equilibrio, no fue posible calcular el exponente crítico dinámico, por lo que no se pudo confirmar una compatibilidad entre los resultados obtenidos en equilibrio y los enfriamientos.

Apéndice A

Distribución aleatoria de vectores en la esfera S^2

Uno de los principales retos para usar los métodos de Monte Carlo en la simulación del modelo 2d $O(3)$ es la generación de vectores aleatorios uniformemente distribuidos en la esfera S^2 .

Un elemento de la esfera S^2 se puede escribir como

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

donde $\theta \in [0, \pi]$ y $\phi \in [0, 2\pi)$ son variables aleatorias.

Un primer intento para generar vectores aleatorios y uniformemente distribuidos es generar parámetros aleatorios $\theta_r \in [0, \pi]$ y $\phi_r \in [0, 2\pi)$ uniformemente distribuidos. Sin embargo, si se generan vectores aleatorios de esta manera y se representan sobre una esfera, se observa que la distribución de los vectores es más densa en los polos..

Consideremos ahora una distribución f de vectores aleatorios \vec{s} uniformemente distribuidos sobre la superficie de la esfera. Para que se cumpla la condición de uniformidad, la densidad de probabilidad debe ser constante, con valor $p = 1/4\pi$, entonces integral de la densidad de probabilidad sobre el área de la esfera es

$$\frac{1}{4\pi} \int_S d\vec{r} = 1. \quad (\text{A.2})$$

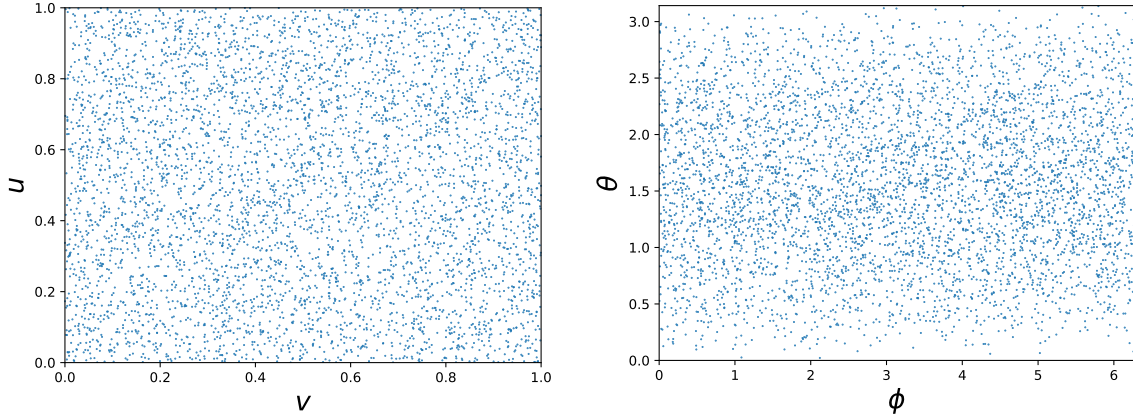
En coordenadas esféricas se tiene

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

Con el ultimo paso se ha separado la distribución de probabilidad de vectores en la esfera, en dos distribuciones de probabilidad u, v para las variables aleatorias θ, ϕ definidas como

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

luego se definen variables aleatorias u, v tales que su función de distribución son las variables aleatorias θ, ϕ .



(a) Distribución aleatoria y uniforme de las variables u, v . (b) Transformación de las variables u, v a las variables θ, ϕ .

Figura A.1: En la figura (a) se tiene una distribución de puntos homogénea y aleatoria, la distribución se mapea a la distribución de la figura (b) en las variables θ, ϕ , se obtiene es una distribución es la que genera vectores aleatorios y uniformemente distribuidos en la esfera.

$$\theta = \arccos(1 - 2u), \quad \phi = 2\pi v, \quad (\text{A.5})$$

donde $u, v \in (0, 1)$.

Recapitulando los pasos para generar un vector aleatorio en la esfera son los siguientes:

1. Se generan dos números aleatorios $u_r, v_r \in [0, 1]$.
2. Se calculan las variables $\theta_r = \arccos(1 - 2u_r), \phi = 2\pi v_r$.
3. Se calculan las componentes cartesianas y se define el vector $\vec{s}_r = (\sin \theta_r \cos \phi_r, \sin \theta_r \sin \phi_r, \cos \theta_r)$.

Dada una esfera S^2 y un vector \vec{s}_0 , el siguiente es desafío generar una distribución de vectores aleatoria y uniformemente distribuida en una región circular R de la esfera S^2 con centro en \vec{s}_0 .

Se define como la región de la esfera es con centro en \vec{s}_0 tal que la distancia esférica máxima entre \vec{s}_0 y cualquier vector de la distribución es $\alpha_{\max} = \arccos(1 - 2u_{\max})$.

$$R = \{ \vec{s} \in S^2 | d(\vec{s}, \vec{s}_0) \leq \alpha_{\max} \}, \quad (\text{A.6})$$

donde $d(\vec{s}, \vec{s}_0)$ la distancia esférica entre \vec{s} y \vec{s}_0 . El valor u_{\max} ajusta el porcentaje p de la esfera que se cubre, si $u = 1$ entonces $\alpha = \pi$ y la región que se cubre es la totalidad de la esfera.

Si se quiere cubrir el porcentaje p de la esfera, se fija $u_{\max} = p/100$.

Pasos para generar un vector aleatorio en R :

Se genera un vector aleatorio \vec{r} en la esfera completa. Los vectores \vec{s}_0 y \vec{r} fijan un círculo máximo sobre la esfera con una orientación aleatoria.

Se calcula un vector ortonormal al plano formado por \vec{s}_0 y \vec{r} siguiendo la ecuación

$$\vec{k} = \frac{\vec{s}_0 \times \vec{r}}{\|\vec{s}_0 \times \vec{r}\|}. \quad (\text{A.7})$$

Se hace define el nuevo vector como una rotación de \vec{s}_0 respecto \vec{k} por un ángulo $\alpha_r \in (0, \alpha_{\max})$. El vector aleatorio \vec{s}_r respecto al vector de referencia \vec{s}_r es de la forma

$$\vec{s}_r = \vec{s}_0 \cos \alpha_r + (\vec{k} \times \vec{s}_0) \sin \alpha_r. \quad (\text{A.8})$$

El procedimiento es sencillo de implementar aquí hay un ejemplo de implementación en el lenguaje de programación Fortran.

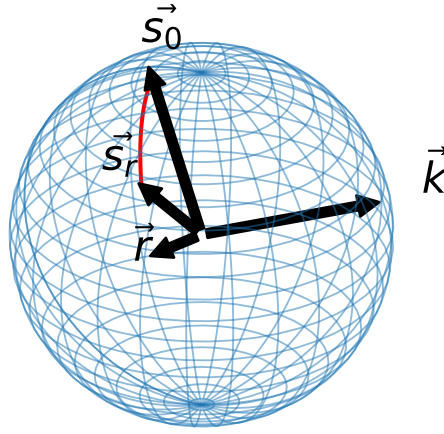


Figura A.2: Rotación de un espín \vec{s} respecto al eje de rotación \vec{k} en dirección \vec{r} .

Algoritmo A.1 Implementación del algoritmo de generación de vectores en Fortran.

```

function random_vector()
  real(8), dimension(3) :: random_vector
  real(8) :: theta, phi
  theta = acos(1-2*random())
  phi = 2*pi*random()
  random_vector = [sin(theta)*cos(phi), sin(theta)*sin(phi), cos(theta)]
end function

function random_vector_sector(s)
  real(8), dimension(3) :: random_vector_sector, r, k, s
  real(8) :: alpha
  r = random_vector()
  k = cross_product(s, r)
  k = k/sqrt(dot_product(k,k))
  alpha = acos(1-2*delta_step*random())
  random_vector_sector = s*cos(alpha)+cross_product(k, s)*sin(alpha)
end function

```

Apéndice B

Algoritmo Hoshen-Kopelman

Definición: cúster.

En una retícula de espines clásicos, un clúster es un conjunto de sitios enlazados directa o indirectamente.

El algoritmo de Hoshen-Kopelman fue descrito por Joseph Hoshen y Raoul Kopelman en 1976 [23]. El algoritmo de Hoshen-Kopelman describe como etiquetar los sitios de la retícula en sus respectivos clústers a partir de una función de enlace.

El algoritmo de Hoshen-Kopelman es considerablemente más eficiente que otros métodos de formación de clústers. A diferencia de algoritmos en los que el número de cálculos crece cuadráticamente con el volumen del sistema, en el caso de Hoshen-Kopelman dicho crecimiento es lineal.

Un enlace directo ocurre entre dos sitios vecinos, mientras que un enlace indirecto se da entre sitios que no son vecinos, pero que están conectados a un sitio común. Este tipo de enlace implica la posibilidad de que dos clústers inicialmente distintos se unan mediante una conexión entre elementos que pertenecen a cada uno de ellos.

Para empezar vamos a generar una configuración de enlaces en donde cada sitio x indica los enlaces directos, por ejemplo en una retícula cuadrada hay cuatro vecinos más cercanos, para cada vecino un 1 indica un enlace directo mientras que un 0 indica que no hay enlace. La función de enlace $p(x_1, x_2)$ da la probabilidad de enlace entre los sitios x_1 y x_2 .

Una vez determinada todos los enlaces se realizan los siguientes pasos:

1. Se selecciona un sitio x y se comprueban sus enlaces directos.
 - a) Si no hay enlaces directos, se etiqueta al sitio con un identificador α correspondiente a un clúster de un elemento y se regresa al paso 1.
 - b) Si hay enlaces directos se pasa al paso 2.
2. Se comprueban los enlaces directos de los sitios vecinos. Todos los espines enlazados en la comprobación se etiquetan con un identificador α_i correspondiente a un clúster.
3. Se repinten los pasos anteriores etiquetando cada sitio de la retícula en sus respectivos clústers.
4. En el proceso de formación de cústers, habrán casos en los que a un sitio le corresponden dos o más etiquetas $\alpha_1, \dots, \alpha_n$, ya que hay un enlace indirecto entre clústers los clusters correspondientes se fusionan en uno y se les asigna la etiqueta α_1 .

Una segunda propuesta útil para la formación de cústers individuales es la formación procedural de cústers. En este caso es importante diferenciar entre sitios en el interior de un cúster y sitios en la frontera de un cúster. Un sitio en el interior de un cúster si todos sus vecinos más cercanos pertenecen al mismo cúster. En complementariedad un sitio está en la frontera si alguno de sus vecinos más cercanos no pertenece al cúster.

En la formación procedural se parte de un cúster individual y se va extendiendo una frontera provisional en cada paso hasta alcanzar el tamaño máximo del cúster, en ocasiones transformando a los sitios de la frontera en sitios en el interior.

Para evitar que un cúster se extienda indebidamente por el cálculo doble de una probabilidad de enlace, solo se calcula una vez un enlace entre dos espines.

El proceso es el siguiente:

1. Se selecciona un sitio aleatorio x y se comprueban los enlaces directos.
2. Todos los espines enlazados en la comprobación se etiquetan con un identificador α_i correspondiente a un cúster.
3. Se identifican los sitios localizados en la frontera y se comprueban sus enlaces directos.
 - a) Si hay enlaces directos adicionales se regresa al paso 2.
 - b) Si no hay enlaces directos adicionales se termina la comprobación.

Este método es especialmente útil en la formación de un cúster, ya que evita el cálculo de una gran cantidad de enlaces.

La aplicación de estos métodos a los algoritmos multi-cluster y single-cluster, permiten ahorrar una gran cantidad de cálculos, por lo que el poder de cómputo puede usarse en aumentar la estadística de los experimentos y reducir los tiempos de cálculo, sin duda es un beneficio que vale la pena a cambio de un poco de programación extra.

Bibliografía

- [1] 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.
- [2] A. Wipf, "Statistical approach to quantum field theory: an introduction," *Springer*, 7-11, 2013.
- [3] R. P. Feynman, "Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics," *Rev. Mod. Phys.*, 20, 367-387, 1948.
- [4] M. Creutz y B. Freedman, "A statistical approach to quantum mechanics," *Ann. Phys.*, 132, 427-462, 1981.
- [5] W. Bietenholz, U. Gerber, M. Pepe y U.-J. Wiese, "Topological lattice actions," *J. High Energy Phys.*, 2010, 20, 2010.
- [6] B. Berg y M. Lüscher, "Definition and statistical distributions of a topological number in the lattice $O(3)$ σ -model," *Nuclear Physics B*, 190, 412-424, 1981.
- [7] TODHUNTER, "SPHERICAL TRIGONOMETRY- I." *MJP PUBLISHERS*, 2021.
- [8] K. B. Athreya, H. Doss y J. Sethuraman, "On the convergence of the Markov chain simulation method," *Ann. Stat.*, 24, 69-100, 1996.
- [9] K. Binder y D. W. Heermann, "Monte Carlo Simulation in Statistical Physics," *Springer Berlin Heidelberg*, 1988.
- [10] R. H. Swendsen y J.-S. Wang, "Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations," *Phys. Rev. Lett.*, 58, 86-88, 1987.
- [11] R. J. Glauber, "Time-Dependent Statistics of the Ising Model," *J. Math. Phys.*, 4, 294-307, 1963.
- [12] U. Wolff, "Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems," *Physical Review Letters*, 62, 361-364, 1989.
- [13] G. Giachetti, N. Defenu, S. Ruffo y A. Trombettoni, "Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Phase Transitions with Long-Range Couplings," *Phys. Rev. Lett.*, 127, 156801, 2021.
- [14] H. Hinrichsen, "Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states," *Advances in Physics*, 49, 815-958, 2000.
- [15] J. M. Yeomans, "Statistical mechanics of phase transitions," *Clarendon Press ; Oxford University Press*, 16-19, 1992.

- [16] R. Ciuca y O. F. Hernández, “Information theoretic bounds on cosmic string detection in CMB maps with noise,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 492, 1329-1334, 2020.
- [17] T. W. B. Kibble, “Topology of cosmic domains and strings,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 9, 1387-1398, 1976.
- [18] T. Kibble, “Phase-transition dynamics in the lab and the universe,” *Physics Today*, 60, 47-52, 2007.
- [19] T. Kibble, “Some implications of a cosmological phase transition,” *Physics Reports*, 67, 183-199, 1980.
- [20] W. H. Zurek, “Cosmological experiments in superfluid helium?” *Nature*, 317, 505-508, 1985.
- [21] J. M. Kosterlitz y D. J. Thouless, “Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. (Application of dislocation theory),” *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 5, 124-126, 1972.
- [22] J. M. Kosterlitz, “Nobel Lecture: Topological defects and phase transitions,” *Reviews of Modern Physics*, 89, 4, 2017.
- [23] J. Hoshen y R. Kopelman, “Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm,” *Physical Review B*, 14, 3438-3445, 1976.