



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ENFRIAMIENTOS RAPÍDOS 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, 2025

Esta tesis esta dedicada a mis padres, quienes me motivaron a no rendirme y me apoyaron incondicionalmente en este largo recorrido.

Agradecimientos

Quiero extender mis mas sinceros agradecimientos al Dr. Wolfgang Bietenholz por guiarme pacientemente a través del largo proceso de investigación y redacción de esta tesis, su guía y constante motivación me mantuvieron en la dirección correcta durante este largo proceso.

Muchas gracias a la Facultad de Ciencias, por permitirme aprender de tantos excelentes maestros, en sus aulas aprendí lecciones importantes que llevo conmigo para toda la vida.

Muchas gracias al Instituto de Ciencias Nucleares por abrirme sus puertas y darme las herramientas y recursos realizar este trabajo de titulación, su gente siempre dispuesta a ayudar me hizo sentir bienvenido en mi paso por esta institución.

Agradezco a DGAPA por el apoyo a través del programa de apoyo a proyectos de investigación e innovación tecnológica, el aporte monetario de este programa me ayudo de una forma importante en la realización de este trabajo.

Muchas gracias a los sinodales y a las personas que con su trabajo hicieron posible la culminación de este trabajo de titulación.

Resumen

En esta tesis se realizo un trabajo de investigación sobre enfriamientos rápidos en el modelo 2d $O(3)$. Se recopiló información sobre la teoría de integral de trayectorias, fenómenos críticos, los métodos de Monte Carlo y el mecanismo de Kibble-Zurek. Entre estos temas el último es de especial relevancia para la investigación. El mecanismo de Kibble-Zurek describe la relación entre los defectos topológicos remanentes respecto a la tasa de enfriamiento en un sistema que pasa por la temperatura crítica. El objetivo principal de esta tesis es averiguar si el mecanismo de Kibble-Zurek es aplicable al modelo 2d $O(3)$, un factor importante en esta cuestión es que en este modelo modelo no puede haber una ruptura espontánea de simetría con interacciones de rango finito y temperatura $T > 0$. Para averiguar si el mecanismo de Kibble-Zurek es aplicable a este modelo, se realizaron simulaciones numéricas en equilibrio y simulaciones de enfriamientos rápidos usando métodos de Monte Carlo. Para realizar las simulaciones se aplicó el algoritmo de Metropolis en la variantes de selección lexicográfica y aleatoria, el algoritmo de Glauber en las mismas dos variantes y el algoritmo multi-clúster.

En las simulaciones en equilibrio se reportaron los siguientes exponentes críticos: el exponente crítico dinámico z , la longitud de correlación ν , el exponente νz y se usaron en un calculo indirecto del exponente ζ para la carga topológica, la energía y la magnetización. En las simulaciones de enfriamientos rápidos se midió directamente el exponente ζ para las mismas observables. Los resultados obtenidos a partir de los experimentos en equilibrio resultaron en todos los casos en valores mayores a los exponentes ζ obtenidos en los enfriamientos. Se discutió que una posible causa de este resultado es que en los experimentos numéricos realizados, no se cruzó una temperatura crítica, por lo que no hubo una ruptura espontánea de la simetría durante los enfriamientos. La teoría considera una ruptura espontánea de la simetría en el cálculo de ζ para los experimentos numéricos en equilibrio. Así la ausencia de la ruptura espontánea de simetría explica el cambio en la relación entre los defectos topológicos remanentes y las tasa inversas de enfriamiento. A pesar de todo, se observaron tres leyes de escalamiento y todos los enfriamientos condujeren a exponentes ζ compatibles con el mecanismo de Kibble-Zurek, pero las diferencias en la definición de barridos de actualización tuvieron como consecuencia diferencias en los valores de los exponentes ζ para los diferentes algoritmos.

Índice general

1. Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio	4
2. Mecánica estadística e integral de trayectorias	5
2.1. Propagador de evolución	5
2.2. Rotación de Wick	8
3. Modelos de espín	10
3.1. Estructura de una red	10
3.2. Modelo 2d $O(3)$	11
3.3. Observables	13
3.3.1. Energía	14
3.3.2. Magnetización	15
3.3.3. Carga topológica	15
4. Fenómenos críticos	19
4.1. Transiciones de fase	19
4.2. Parámetro de orden	21
4.3. Función de correlación	22
4.4. Universalidad	24
4.5. Escalamiento	25
5. Mecanismo de Kibble-Zurek	27
5.1. Ruptura espontánea de simetría	27
5.2. Acoplamientos de largo alcance	28
5.3. Evolución del universo temprano	28
5.4. Experimentos con materia condensada	29
6. Métodos de Monte Carlo	31
6.1. Algoritmo de Metropolis	32
6.2. Algoritmo de Glauber	33
6.3. Algoritmo clúster	34
6.4. Tiempo de auto-correlación	35

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	3
7. Simulaciones en equilibrio	37
7.1. Tiempo de auto-correlación	38
7.2. Longitud de correlación	43
7.3. Exponente crítico dinámico	47
8. Simulación de enfriamientos rápidos	52
8.1. Enfriamientos rápidos	53
9. Resumen y conclusiones	62
A. Distribución aleatoria de vectores en la esfera S^2	64
B. Algoritmo Hoshen-Kopelman	67
Bibliografía	69

Capítulo 1

Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio

La investigación es un proceso largo y requiere gran esfuerzo. En la búsqueda de la comprensión de los fenómenos físicos, se han desarrollado y aplicado herramientas matemáticas como el cálculo, la estadística y la geometría. Al crear modelos teóricos para estos fenómenos, se desencadenó un proceso en el que los modelos teóricos se ponen a prueba por medio de experimentos y se descartan o replantean en base a los resultados. En este proceso se busca realizar mejores experimentos y obtener mejores mediciones. El proceso es exhaustivo y continuo de generación en generación, refinando la teoría y la experimentación. Una de estas líneas de investigación es la relacionada a los estados de la materia y sus transiciones de fase, en este campo aparecen Tom Kibble y Wojciech Zurek. Ambos se interesaron en el estudio de las clases de universalidad, una de sus aportaciones es una ley de escalamiento en sistemas que al pasar por debajo de una temperatura crítica presentan una ruptura súbita de simetría. Kibble propuso una relación entre la tasa inversa de enfriamiento del universo temprano y la densidad remanente de defectos topológicos. Zurek aplicó el mismo concepto a modelos de materia condensada como el modelo de helio en estado superfluidico ^4He . Debido a sus aportaciones la relación es conocida como mecanismo de Kibble-Zurek.

Los enfriamientos rápidos son fenómenos fuera del equilibrio termodinámico, en estas circunstancias, la teoría detrás de procesos que involucran interacciones entre un vasto número de partículas resulta demasiado intrincada. Para superar estas limitaciones, se desarrolló una serie de métodos basados en procesos estocásticos, conocidos como métodos de Monte Carlo. Entre los años 1949-1952, un equipo de científicos liderado por Nicholas Metropolis [1] se centró en comprender la física de las interacciones entre la radiación y la materia bajo condiciones extremas estudiando la evolución de reacciones nucleares fuera del equilibrio. Sus aportes fueron posteriormente aplicados a otras áreas de investigación y con el desarrollo de los ordenadores se volvieron herramientas fundamentales en el estudio de sistemas con incontables grados de libertad. En esta tesis se realizaron simulaciones numéricas de enfriamientos rápidos del modelo 2d $O(3)$ aplicando los métodos de Montecarlo. La motivación de esta tesis es averiguar si el mecanismo de Kibble-Zurek es aplicable al modelo 2d $O(3)$ y en el proceso hacer un pequeño aporte a la tradición de la búsqueda de una mejor comprensión de los fenómenos físicos.

Capítulo 2

Mecánica estadística e integral de trayectorias

En sistemas físicos que consisten en un gran número de grados de libertad, plantear y resolver las ecuaciones de movimiento para cada variable, es en la mayoría de los casos técnicamente imposible. Para estudiar estos sistemas, es necesario un enfoque diferente. En mecánica estadística, se renuncia a conocer la trayectoria exacta de cada elemento, a cambio la función de partición contiene la información sobre el sistema que permite predecir su evolución. La función de partición se define como una suma sobre la energía \mathcal{H} de las posibles configuraciones σ . En un sistema que depende de la temperatura T , la función de partición es de la forma

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}[\sigma]}, \quad (2.0.1)$$

donde $\beta = 1/(k_B T)$ y k_B es la constante de Boltzmann. Usando la función de partición es posible derivar funciones de estado de un sistema como la entropía, el valor esperado de la energía interna etc. Los métodos de Monte Carlo son una forma práctica de calcular numéricamente las observables derivadas de la función de partición, proporcionando una opción realista para estudiar sistemas físicos fuera del equilibrio.

2.1. Propagador de evolución

Cuando Richard Feynman [2] desarrolló su propia formulación de integral de trayectorias después del trabajo previo de Paul Dirac, se preguntó si existía un camino para conectar la mecánica estadística con la mecánica cuántica. Feynman encontró una función análoga a la función de partición para sistemas cuánticos.

En la mecánica clásica un sistema físico está descrito por la función hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 + V, \quad (2.1.1)$$

donde p_i es el momento asociado a cada partícula en el sistema y V es el potencial de interacción. Para describir la evolución de una observable O , se definen los corchetes de Poisson como invariantes

respecto a cualquier transformación canónica. La dinámica de la observable se describe por la ecuación (en el lado derecho de la ecuación usamos los corchetes de Poisson)

$$\frac{dO}{dt} = \{\mathcal{H}, O\}. \quad (2.1.2)$$

En la transición de la mecánica clásica a la mecánica cuántica, se realiza una transformación, donde las funciones definidas en el espacio fase se convierten en operadores definidos en el espacio de Hilbert, y los corchetes de Poisson de dos funciones se convierten en el conmutador de dos operadores

$$\{\mathcal{H}, O\} \rightarrow -i\hbar[\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}], \quad (2.1.3)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}$ y \hat{O} son operadores en el espacio de Hilbert. La dinámica del operador \hat{O} sin dependencia temporal explícita, sigue la ecuación formulada por Werner Heisenberg

$$\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}]. \quad (2.1.4)$$

La ecuación que describe la dinámica de un sistema cuántico fue introducida por Erwin Schrödinger como

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle, \quad (2.1.5)$$

donde t es el tiempo, i es la unidad imaginaria, \hbar es la constante de Planck, $\hat{\mathcal{H}}$ es el operador hamiltoniano del sistema y $|\psi(t)\rangle$ es la función de onda en la notación de Dirac. Para pasar de la formulación de Heisenberg a la formulación de Schrödinger se aplica la transformación

$$\hat{O}(t) = e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} \hat{O} e^{it\hat{\mathcal{H}}/\hbar}, \quad |\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} |\psi\rangle, \quad (2.1.6)$$

donde $|\psi\rangle$ es el vector de estado sin dependencia temporal en la formulación de Heisenberg y $|\psi(t)\rangle$ es la función de onda en la formulación de Schrödinger. Los valores esperados se mantienen invariantes bajo la transformación

$$\langle \psi | \hat{O}(t) | \psi \rangle = \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle. \quad (2.1.7)$$

Un vector de estado $|\psi(t)\rangle$ en la formulación de Schrödinger sigue la ec. 2.1.5. Consideremos el caso de una partícula libre en una dimensión espacial, donde $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. En el espacio de posiciones el vector de estado es $|q\rangle$ y la solución a la ecuación de Schrödinger es de la forma

$$\langle q' | \psi(t) \rangle = \int \langle q' | e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} | q \rangle \langle q | \psi \rangle dq. \quad (2.1.8)$$

Definimos al propagador de la ecuación de Schrödinger como

$$K(q, q'; t) = \langle q' | e^{-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar} | q \rangle. \quad (2.1.9)$$

El propagador describe la evolución de la función de onda desde el estado $|q\rangle$ hasta $|q'\rangle$ en tiempo t [2]. El propagador la partícula libre es de la forma

$$K(q, q'; t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t} \right)^{1/2} e^{iS(q, q'; t)/\hbar} \quad (2.1.10)$$

donde $S(q, q'; t)$ es la acción de la trayectoria desde q a q' en tiempo t , explícitamente es de la forma

$$S(q, q'; t) = \int_0^t \frac{m}{2} \dot{q}^2 d\tau = \frac{m}{2t} (q' - q)^2. \quad (2.1.11)$$

Sustituyendo la acción en la ec. 2.1.10 se obtiene

$$K(q, q'; t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \left[i \frac{m}{2t} (q' - q)^2 \right]. \quad (2.1.12)$$

Teorema de 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 [3]

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

En general se tiene un hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}$ donde $\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2m} \sum_i \hat{p}_i^2$. El propagador general $K(q, q'; t)$ cumple con la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(q, q'; t) = \hat{\mathcal{H}} K(q, q'; t). \quad (2.1.13)$$

Partiendo de la forma estándar del propagador se tiene

$$K(q, q'; t) = \left\langle q' \left| e^{-it(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V})/\hbar} \right| q \right\rangle. \quad (2.1.14)$$

Aplicando el teorema de Trotter se obtiene

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\langle q' \left| \left(e^{-it\hat{\mathcal{H}}_0/(n\hbar)} e^{-it\hat{V}/(n\hbar)} \right)^n \right| q \right\rangle. \quad (2.1.15)$$

Las trayectorias se particionan en n intervalos donde $q_0 = q$ y $q_n = q'$ y el conjunto de variables $\{q_1, \dots, q_n\}$ abarca las posibles trayectorias de la partícula libre de q a q' , de modo que el propagador se expresa como

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=0}^{n-1} \left\langle q_{j+1} \left| e^{-it\hat{\mathcal{H}}_0/(n\hbar)} e^{-it\hat{V}/(n\hbar)} \right| q_j \right\rangle dq_1 \dots dq_{n-1}. \quad (2.1.16)$$

El beneficio de realizar la partición de las trayectorias es que ahora en cada factor del producto se tiene el hamiltoniano de una partícula libre. Aplicando la ec. (2.1.10) a la ec. (2.1.16) se obtiene

$$K(q, q'; t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \left(\frac{m}{2\pi i a} \right)^{n/2} \times \exp \left\{ ia \sum_{j=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 - V(q_j) \right] \right\} dq_1 \dots dq_{n-1}, \quad (2.1.17)$$

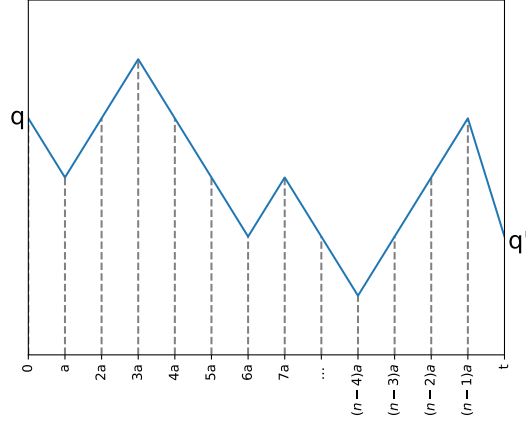


Figura 2.1.1: En esta imagen, se muestra una trayectoria que parte de q en el tiempo 0 hasta q' en el tiempo t en n pasos temporales de tamaño a . La función de partición es la suma sobre las posibles trayectorias que van de q hasta q' en el tiempo t .

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

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{n-1} a \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 - V(q_j) \right] = \int_0^t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right) - V(q(\tau)) \right] d\tau. \quad (2.1.18)$$

El propagador se puede expresar como la suma infinita

$$K(q, q'; t) = \sum_{\sigma \in \Omega} e^{iS[\sigma]/\hbar}, \quad (2.1.19)$$

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 . Al igual que la función de partición es una suma sobre configuraciones, el propagador es una suma sobre trayectorias, el propagador es igual a la función de partición salvo por la unidad imaginaria i que aparece en el exponente.

2.2. Rotación de Wick

Comparando el propagador de evolución ec. (2.1.19) con la función de partición ec. (2.0.1), se vuelve más clara la relación entre la mecánica cuántica y la física estadística. Antes se menciona que hay una diferencia importante. La unidad imaginaria presente en el propagador de evolución, no aparece en la función de partición, mientras que aparece una relación entre la temperatura y la constante de Planck $\hbar \rightarrow k_B T$.

La unidad imaginaria se puede evitar al cambiar el eje temporal en el espacio hiperbólico descrito por la métrica de Minkowski por un eje imaginario en el espacio-tiempo. El tensor métrico del espacio

de Minkowski es de la forma

$$g_M = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.2.1)$$

donde el elemento -1 corresponde a la coordenada temporal. Usando el tensor métrico se obtiene la métrica del espacio de Minkowski

$$ds^2 = -dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (2.2.2)$$

Guido Wick propuso la transformación al espacio euclidiano, cambiando el eje real de la coordenada temporal por un eje imaginario resultando en el tensor euclidiano

$$g_E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2.3)$$

Usando el tensor métrico se obtiene la métrica del espacio euclidiano

$$ds^2 = dt_E^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (2.2.4)$$

Para cambiar la ec. (2.1.19) del espacio de Minkowski al espacio euclidiano, tenemos que hacer el cambio $t_E = it$, donde t es el tiempo en el espacio de Minkowski y t_E es el tiempo en el espacio euclidiano.

Hay que destacar que 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 es

$$K(q, q'; t_E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \left(\frac{m}{2\pi a} \right)^{n/2} \times \exp \left\{ -a \sum_{j=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{a} \right)^2 + V(q_j) \right] \right\} dq_1 \dots dq_{n-1}, \quad (2.2.5)$$

donde $\beta = t/n$, en el límite cuando $n \rightarrow \infty$ se tiene

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{1}{k_B T} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\beta} \right)^2 + V(q_j) \right] = \int_0^{t_E} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right) + V(q(\tau)) \right] d\tau. \quad (2.2.6)$$

El propagador de evolución obtenido en cambio al espacio euclidiano es equivalente a la función de partición en mecánica estadística y es de la forma

$$K(q, q'; t_E) = \sum_{\sigma \in \Omega} e^{-S[\sigma]/(k_B T)}, \quad (2.2.7)$$

donde Ω es el conjunto de todas las posibles trayectorias de q a q' en el tiempo t y la función de partición es tal que $|q\rangle = |q'\rangle$ [4, 5]. De aquí en adelante simplificaremos la notación refiriendo al tiempo euclidiano t_E como t .

Capítulo 3

Modelos de espín

Definición: Espín clásico en los modelos $O(n)$.

En el contexto de un modelo $O(n)$, un espín clásico es un vector unitario definido en un espacio abstracto de dimensión n . Es decir, corresponde a un punto de la esfera \mathcal{S}^{n-1} .

Las propiedades macroscópicas de una amplia gama de materiales pueden describirse mediante modelos de espines. En estos modelos, propiedades como la energía, la magnetización y en algunos modelos la carga topológica son observables y pueden medirse a partir de las configuraciones de espines. En este capítulo se discutirá como puede realizarse cada una de estas mediciones en el modelo 2d $O(3)$.

3.1. Estructura de una retícula

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 , donde d es el número de dimensiones.

Los modelos de retícula son ampliamente usados para describir efectos colectivos. En la mayoría de los casos se usan retículas compuestas por repeticiones de estructuras geométricas simples como en los cristales. En dos dimensiones se tienen estructuras cuadradas, triangulares o hexagonales. Un tipo de retícula se construye con hipercubos de dimensión d , es el conjunto de sitios en el espacio de dimensión d cuyas posiciones son coordenadas enteras, se define como

$$\mathcal{R}^d = \{x \in \mathbb{R}^d | x = (x_1 \dots, x_d) \wedge x_i \in \mathbb{Z} \forall i\}. \quad (3.1.1)$$

En simulaciones de Monte Carlo no es posible computar en retículas infinitas, por lo que la retícula se limita a un trozo finito de tamaño L^d . De esta constricción se obtiene la retícula finita de dimensión d y donde cada lado tiene longitud L , se describe como

$$\mathcal{R}_L^d = \{x \in \mathcal{R}^d | 0 < x_i \leq L, i \in \{1, \dots, d\}\}. \quad (3.1.2)$$

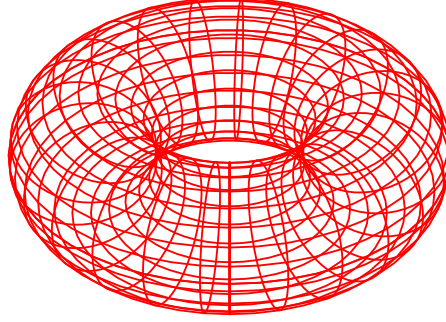


Figura 3.1.1: En dos dimensiones, la topología de una retícula finita cuadrada con condiciones de frontera periódicas es un toroide bidimensional.

Una retícula cortada pierde la simetría de translación discreta en los límites de la estructura. Para recuperar la simetría, se establecen condiciones de frontera periódicas definiendo la retícula con estructura toroidal

$$\mathcal{T}_L^d = \{x \in \mathcal{R}_L^d | x_i = x_i + nL, i \in \{1, \dots, L\}, n \in \mathbb{Z}\}. \quad (3.1.3)$$

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

3.2. Modelo 2d O(3)

Antes que nada, es importante definir una notación clara y simple para referir los sitios y los espines. Un sitio está dado por su posición en la retícula: en dos dimensiones se representa por pares de coordenadas $x = (x_1, x_2)$ donde $x_1, x_2 \in (1, \dots, L)$. Un espín \vec{s}_x de dimensión 3 restringido a la esfera \mathcal{S}^2 se define por sus tres coordenadas cartesianas

$$\vec{s}_x = (\sin \theta_x \cos \phi_x, \sin \theta_x \sin \phi_x, \cos \theta_x), \quad (3.2.1)$$

donde $\theta_x \in [0, \pi)$, $\phi_x \in [0, 2\pi)$, x indica el sitio en la retícula que ocupa el espín. La orientación de un espín se puede describir de manera equivalente con sus coordenadas esféricas (θ_x, ϕ_x) usando la ec. (3.2.1).

El modelo 2d O(3) consiste en un arreglo de espines clásicos en \mathcal{S}^2 acomodados en los sitios de una retícula \mathcal{T}_L^2 . Cada espín es una fuente de magnetización e interactúa con el resto de espines directamente o indirectamente siguiendo un acoplamiento. Típicamente el impacto de un espín decae exponencialmente con la distancia. Por argumentos referentes a la clase de universalidad que se discuten en el capítulo 5.2 optaremos por despreciar interacciones que no correspondan a los espines vecinos más cercanos.

En el modelo 2d O(3) una configuración $[s]$ es el conjunto de orientaciones de los espines en la retícula en el mismo instante t . Ejemplos son, las configuraciones en las que todos los espines

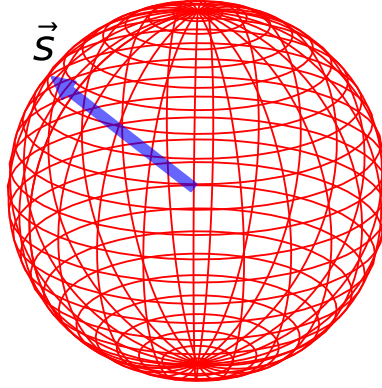


Figura 3.2.1: Representación de un espín clásico \vec{s} en el modelo $O(3)$. Cada espín es representado por vector en la esfera S^2 y su dirección está dada por sus coordenadas.

apuntan a la misma dirección o la configuración en la que todos los espines apuntan en direcciones perpendiculares a sus vecinos. Cualquier combinación de orientaciones de espines es una configuración. Dada una configuración $[s]$, la energía del sistema depende de los acoplamientos espín a espín y se describe por la función hamiltoniana

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{\langle x, y \rangle} \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y, \quad (3.2.2)$$

donde J es una constante de acoplamiento y $\langle x, y \rangle$ son los espines vecinos más cercanos. Si todos los espines son paralelos, la suma sobre el producto escalar se maximiza resultando en una configuración uniforme, esta tiene asociada la menor energía permitida por el modelo, siendo $\mathcal{H} = -JVd$ donde $V = L^d$ es el volumen de la retícula.

Otra forma de escribir el hamiltoniano de interacción del modelo es mediante una suma doble, se expresa como

$$\mathcal{H}[s] = -\frac{J}{2} \sum_{x_1} \sum_{x_2} \vec{s}_{x_1, x_2} \cdot (\vec{s}_{x_1+1, x_2} + \vec{s}_{x_1, x_2+1} + \vec{s}_{x_1-1, x_2} + \vec{s}_{x_1, x_2-1}). \quad (3.2.3)$$

La ec. (3.2.3) se puede simplificar considerando las condiciones de frontera. Si se intercambia y se recorren los índices en el tercer termino de la ec. (3.2.3), se tiene

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1, x_2} \cdot \vec{s}_{x_1-1, x_2} = \sum_{x_2=1}^L \sum_{x_1=0}^{L-1} \vec{s}_{x_1+1, x_2} \cdot \vec{s}_{x_1, x_2}. \quad (3.2.4)$$

Separando el primer y el último elemento de la suma sobre x_1 , se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{x_2=1}^L \sum_{x_1=0}^{L-1} \vec{s}_{x_1+1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2} &= \sum_{x_2=1}^L \left(\vec{s}_{1,x_2} \cdot \vec{s}_{0,x_2} - \vec{s}_{L+1,x_2} \cdot \vec{s}_{L,x_2} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{x_1=1}^L \vec{s}_{x_1+1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2} \right). \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

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

$$\vec{s}_{1,x_2} \cdot \vec{s}_{0,x_2} - \vec{s}_{L+1,x_2} \cdot \vec{s}_{L,x_2} = 0. \quad (3.2.6)$$

Resultando en la identidad

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1-1,x_2} = \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1+1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2}. \quad (3.2.7)$$

De forma análoga hay una simplificación para el cuarto termino de la ec. (3.2.3)

$$\sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2-1} = \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot \vec{s}_{x_1,x_2+1}. \quad (3.2.8)$$

Remplazando los términos (3.2.7), (3.2.8) en la ec. (3.2.3) y simplificando términos se llega a la forma compacta del hamiltoniano

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{x_1=1}^L \sum_{x_2=1}^L \vec{s}_{x_1,x_2} \cdot (\vec{s}_{x_1+1,x_2} + \vec{s}_{x_1,x_2+1}). \quad (3.2.9)$$

La suma recorre todos los sitios en la retícula, por cada sitio, se considera el producto escalar con espín en el sitio a la derecha y arriba en la retícula. Se define $\hat{1} = (1, 0)$ y $\hat{2} = (0, 1)$ y se normaliza el acoplamiento haciendo $J = 1$. El hamiltoniano resultante es de la forma

$$\mathcal{H}[s] = - \sum_x \vec{s}_x \cdot (\vec{s}_{x+\hat{1}} + \vec{s}_{x+\hat{2}}) \quad (3.2.10)$$

Es conveniente ubicar la energía mínima en el valor cero. Si se tiene una configuración uniforme en una retícula de V sitios, la energía de la configuración es $\mathcal{H}[s]_{\min} = -2V$, el mínimo se recorre sumando el hamiltoniano con un factor $2V$. Por simplicidad de la notación de aquí en adelante llamaremos a esta energía desplazada simplemente como \mathcal{H} , donde

$$\mathcal{H}[s] = - \sum_x \vec{s}_x \cdot (\vec{s}_{x+\hat{1}} + \vec{s}_{x+\hat{2}}) + 2V. \quad (3.2.11)$$

3.3. Observables

Describir las propiedades macroscópicas de un material, requiere de observables medibles como, la energía \mathcal{H} , la magnetización M , etc. Algunas observables se convierten en densidades asintóticamente estables al dividirse por el volumen V , a estas observables se les conoce como variables intensivas.

Hay otro tipo de cantidades como la presión P , la temperatura T , el campo magnético \vec{B} , etc. Se les conoce como variables termodinámicas y caracterizan el ambiente en el que el sistema está inmerso. En la mayoría de los sistemas, las variables intensivas están bien definidas solo cuando se fijan los valores de las variables termodinámicas.

Desde un punto de vista microscópico, las variables termodinámicas dependen de la configuración del sistema. A lo largo de un intervalo temporal, se espera que un sistema físico pase por múltiples configuraciones. Cuando se perturba un sistema en equilibrio, las variables termodinámicas del sistema cambian. El tiempo que el sistema tarda en alcanzar nuevamente el equilibrio termodinámico es conocido como tiempo de relajación.

Definición: Cadena de Markov.

Una cadena de Markov es un proceso estocástico discreto en el que la probabilidad de un evento depende únicamente del evento anterior.

En simulaciones numéricas se busca calcular el promedio de un observable en un sistema en equilibrio termodinámico por un intervalo temporal suficientemente amplio como para reducir las fluctuaciones por debajo de un umbral de error. Una configuración es un evento en el sentido estadístico. Para formar una cadena de Markov a partir de un conjunto de configuraciones, cada configuración se asocia a un parametro conocido como tiempo de Markov t_i , el cual establece una posición de la configuración en la cadena de Markov. El valor esperado de la observable es el promedio de los valores obtenidos.

3.3.1. Energía

La energía de una configuración en el modelo 2d $O(3)$ depende de las direcciones de los espines. Consideremos en una configuración $[s]$ a la que se aplica una rotación por un ángulo ϕ en la misma dirección a todos los espines. La transformación mantiene las diferencias relativas entre espines, por lo tanto, la nueva configuración $[s']$ está asociada a la misma energía que la configuración $[s]$. En general en los modelos $O(n)$ la energía es invariante a transformaciones del grupo $O(n)$, característica que le da nombre a este conjunto de modelos.

Consideremos un sistema en equilibrio termodinámico donde se hace un registro de la energía en los instantes (t_1, \dots, t_N) . El conjunto de configuraciones forma una cadena de Markov, por lo tanto la energía del sistema se estima como el valor esperado aproximado

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i. \quad (3.3.1)$$

La energía real asociada a ese estado es el valor esperado aproximado más la incertidumbre asociada

$$\langle \mathcal{H} \rangle \simeq \langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(\mathcal{H}). \quad (3.3.2)$$

La incertidumbre se estima como

$$\text{error}(\mathcal{H}) = \frac{\text{std}(\mathcal{H})}{\sqrt{N}}, \quad (3.3.3)$$

donde $\text{std}(\mathcal{H})$ es la desviación estándar de la energía de las configuraciones. Para una medición en un proceso estocástico hay una probabilidad del 68.27 % de encontrarse a menos de una desviación

estándar del valor esperado de la distribución. Conforme la estadística aumenta, el error converge a cero

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \text{error}(\mathcal{H}) = \frac{\text{std}(\mathcal{H})}{\sqrt{N}}, \quad (3.3.4)$$

a la vez que el estimador de la energía converge al valor real. Al ser una propiedad extensiva, la energía depende del volumen. Para comparar resultados en retículas de diferentes tamaños, la densidad de energía se define como el valor esperado de la energía dividida por el volumen

$$\langle h \rangle = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{V}. \quad (3.3.5)$$

3.3.2. Magnetización

En el modelo 2d O(3), la temperatura es un parámetro que añade ruido (fluctuaciones que cambian las direcciones de los espines). La magnetización M es un escalar que depende de la alineación de los espines, esta alineaciones son menos probables si las fluctuaciones generadas por la temperatura son fuertes. Definimos la magnetización como

$$M = \frac{1}{V} \left| \sum_x \vec{s}_x \right|. \quad (3.3.6)$$

La magnetización máxima se alcanza en una configuración de espines alineados

$$M_{\max} = \frac{1}{V} \left| \sum_x \vec{s}_x \right| = 1. \quad (3.3.7)$$

Al igual que se planteo con la energía, consideremos un sistema en equilibrio termodinámico donde se hace un registro de la magnetización en los instantes (t_1, \dots, t_N) . Se puede medir la magnetización aproximada calculando el promedio de las magnetizaciones en la cadena de Markov. El promedio aproximado de la magnetización es

$$\langle M \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i. \quad (3.3.8)$$

El valor real de la magnetización es el valor aproximado más su incertidumbre asociada

$$\langle M \rangle \simeq \langle M \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(M). \quad (3.3.9)$$

Como la magnetización ya es una variable intensiva no hace falta definir una densidad de magnetización para comparar resultados con retículas de diferentes volúmenes.

3.3.3. Carga topológica

El índice de una curva cerrada en un plano alrededor de un punto, es un número entero que describe el número de vueltas orientadas que la curva da alrededor del punto y es invariante a transformaciones continuas de la curva cerrada. De forma análoga, en el modelo 2d O(3) La carga topológica mide las vueltas de una superficie alrededor de la esfera \mathcal{S}^2 . En el modelo hay dos

simetrías importantes: la primera es la invariancia de la energía interna por la rotación de espines con el grupo $O(3)$. La segunda es la invariancia bajo transformaciones conformes del espacio. En el segundo caso, las condiciones de frontera garantizan la invariante topológica [6-8]

$$Q[s] = \frac{1}{8\pi} \int \varepsilon_{\mu\nu} \vec{s}(x) \cdot (\partial_\mu \vec{s}(x) \times \partial_\nu \vec{s}(x)) d^2x \in \mathbb{Z}, \quad (3.3.10)$$

donde $\varepsilon_{\mu\nu}$ es el tensor totalmente antisimétrico. Bernard Berg y Martin Lüscher [6] 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, estos a su vez se subdividen en dos triángulos, alternando la orientación de la diagonal que divide cada cuadrado para replicar la isotropía discreta en el modelo de espines.

Sean $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathbb{R}^3$ y Ω el ángulo solido generado por $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ [9, 10]

$$\tan\left(\frac{\Omega}{2}\right) = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}{1 + \vec{a} \cdot \vec{b} + \vec{b} \cdot \vec{c} + \vec{c} \cdot \vec{a}}. \quad (3.3.11)$$

En la figura 3.3.1 las plaquetas se dividen en triángulos tipo 1 y tipo 2. Para los triángulos tipo 1, los espines $\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3$ definen las esquinas de un triángulo esférico en \mathcal{S}^2 . Se definen las variables para los triángulos tipo 1

$$\begin{aligned} X_1 &= 1 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_1, \\ Y_1 &= \vec{s}_1 \cdot (\vec{s}_2 \times \vec{s}_3). \end{aligned} \quad (3.3.12)$$

Al ser una esfera unitaria, el área del triángulo esférico es el ángulo solido generado por los espines, definiendo el número complejo $Z_1 = X_1 + iY_1$, aplicando la formula para obtener el área del triángulo esférico, se obtiene

$$\Omega_1 = 2 \arg(Z_1), \quad (3.3.13)$$

donde la función \arg devuelve la fase del número complejo Z_1 . Luego para los triángulos tipo 2 se definen las variables

$$\begin{aligned} X_2 &= 1 + \vec{s}_4 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_4, \\ Y_2 &= \vec{s}_4 \cdot (\vec{s}_3 \times \vec{s}_2), \end{aligned} \quad (3.3.14)$$

resultando en una área

$$\Omega_2 = 2 \arg(Z_2). \quad (3.3.15)$$

Sumando el área para cada par de triángulos, se obtiene

$$A_x = \Omega_1 + \Omega_2. \quad (3.3.16)$$

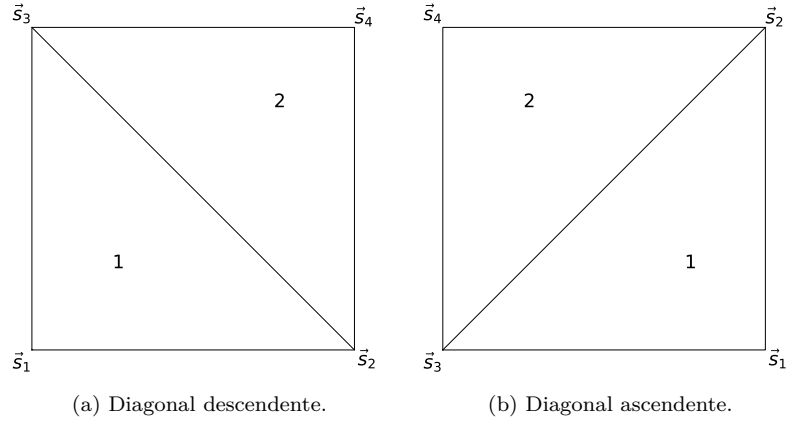


Figura 3.3.1: Orientaciones de los triángulos formados en la retícula. Cada plaqueta se puede dividir en dos triángulos con diagonales descendentes o ascendentes.

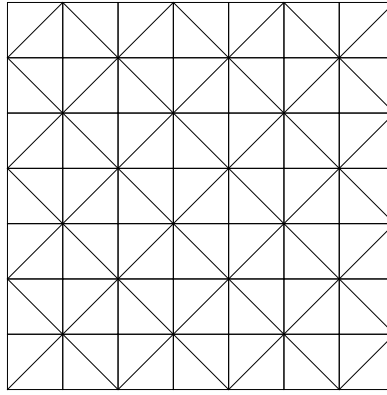


Figura 3.3.2: Descomposición de la retícula cuadrada bidimensional en triángulos, alternado la dirección de la diagonal. Esta descomposición se usa para medir la carga topológica. El cambio en la orientación de la diagonal evita una dirección preferencial.

La carga topológica se define como

$$Q[s] = \frac{1}{4\pi} \sum_x A_x \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.17)$$

La energía es invariante al cambio de signo de todos los espines de una configuración, por lo que las configuraciones tienen la misma importancia estadística independientemente del signo de la carga topológica, resultando en el valor esperado

$$\langle Q \rangle = 0. \quad (3.3.18)$$

Medir los defectos topológicos requiere de otra cantidad que no se anule con el promedio estadístico. Se generaliza

$$Z(\theta) = \int \exp(-\mathcal{H}[s]/T - iQ[s]\theta) D\vec{s}, \quad (3.3.19)$$

donde $D\vec{s}$ indica una integral sobre todas las posibles configuraciones $[s]$ (similar a la integral de trayectorias descrita en el capítulo (2)). En la generalizaron la carga topológica se define como

$$i \frac{\partial}{\partial \theta} Z(\theta) = \langle Q \rangle, \quad (3.3.20)$$

En esta definición si $\theta = 0$ entonces $\langle Q \rangle = 0$ como se tiene en la definición geométrica. Para definir una cantidad sensible a los cambios de la carga topológica y que no se anule con el promedio estadístico se define una susceptibilidad a partir de la energía libre de Helmholtz

$$\mathcal{F}(\theta) = -T \ln Z(\theta), \quad (3.3.21)$$

A partir de la función de estado la susceptibilidad topológica χ_t se define como

$$\chi_t = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mathcal{F}(\theta) = \frac{1}{V} \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2, \quad (3.3.22)$$

tomando $\theta = 0$ se obtiene

$$\chi_t = \frac{1}{V} \langle Q^2 \rangle. \quad (3.3.23)$$

En una cadena de Markov formada por la carga topológica de un conjunto de configuraciones, se calcula el valor esperado aproximado del cuadrado de la carga topológica como

$$\langle Q^2 \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i^2. \quad (3.3.24)$$

El valor real de la susceptibilidad topológica es

$$\chi_t \simeq \frac{1}{V} \left[\langle Q^2 \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(Q^2) \right]. \quad (3.3.25)$$

La susceptibilidad topológica es asintóticamente estable y por definición una variable intensiva, estas propiedades permiten comparar resultados en retículas de diferentes volúmenes.

Capítulo 4

Fenómenos críticos

4.1. Transiciones de fase

Una transición de fase ocurre cuando hay una discontinuidad en la energía libre o en una de sus derivadas con un parametro externo. Ejemplos son:

1. El cambio de estado líquido a solido de un fluido.
2. El cambio del estado paramagnético al ferromagnético en un imán.

El primer ejemplo es una transición de fase de primer orden. En el diagrama de la imagen 4.1.1, las líneas punteadas delimitan las regiones en las que el fluido es estable. El fluido puede existir en estado sólido, líquido o gaseoso, en función de la presión y la temperatura. La variación de las variables en una región estable no cambia el estado del fluido. En cambio, cruzar las fronteras implica un salto en la densidad y el calor específico, como consecuencia de una discontinuidad de primer orden en la energía libre.

Una transición de fase de segundo orden implica una discontinuidad en la segunda derivada de la energía libre [11]. En el segundo ejemplo a temperatura $T = 0$, no hay fluctuaciones y el sistema alcanza en el equilibrio una configuración de energía mínima. En el intervalo de baja temperatura $T \in (0, T_c)$, se forman clústeres de espines alineados. El vector de magnetización de cada clúster apunta en una dirección diferente. En este intervalo de temperatura hay baja simetría inducida por la estructura de diferentes regiones de espines alineados.

Por encima de la temperatura crítica, es mayor el número de espines apuntando en direcciones aleatorias. La intensidad de las fluctuaciones evita la formación de clústeres de tamaño considerable con espines alineados, por consecuencia predomina el ruido termodinámico.

En la teoría de transiciones de fase de Davidovich Landau [12], una transición de fase es un cambio de una fase ordenada a una desordenada. La fase ordenada es invariante a un grupo de transformaciones. La fase desordenada es invariante a un subgrupo del grupo original de transformaciones. En la transición de una fase ordenada a una fase desordenada las propiedades físicas de un material cambian bruscamente.

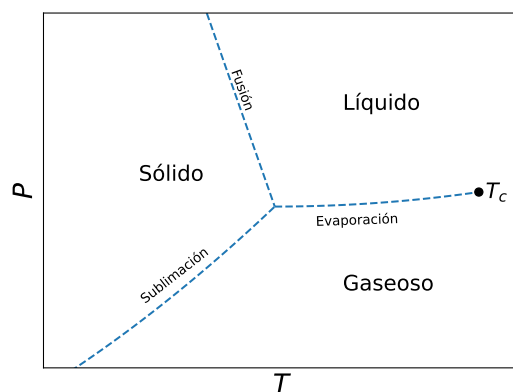
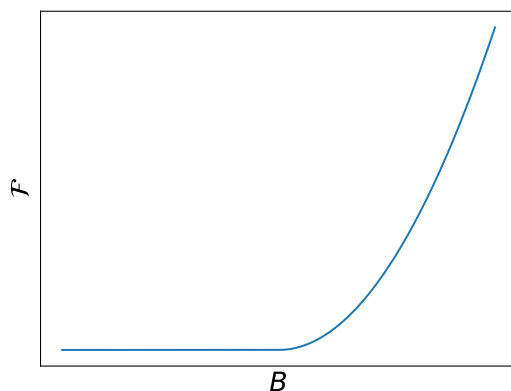
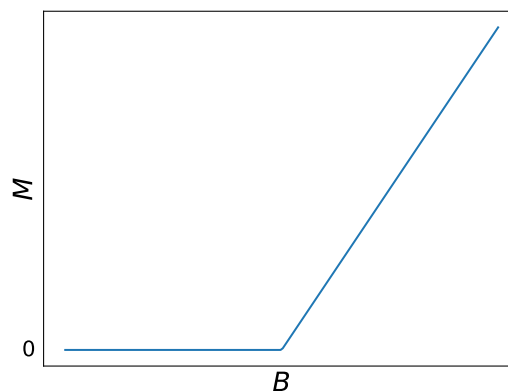


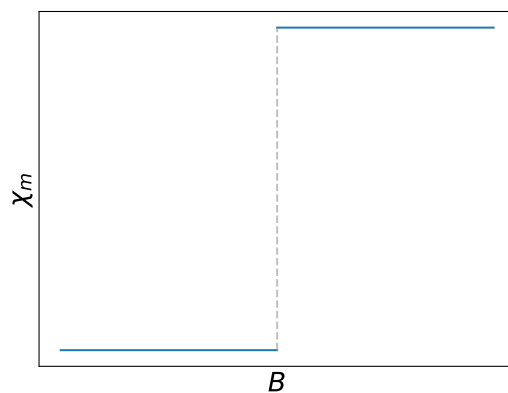
Figura 4.1.1: Se muestra un diagrama de fase típico de un fluido y se delimitan las fronteras entre tres estados: Sólido, líquido y gaseoso. Cuando se pasa por una frontera en el diagrama, hay una transición de fase que se percibe como un cambio visible a nivel macroscópico. La curva de evaporación termina en una temperatura crítica T_c donde la transición de fase es de segundo orden. Las líneas azules indican transiciones de primer grado.



(a) Energía libre.



(b) Primera derivada de la energía libre.



(c) Segunda derivada de la energía libre.

Figura 4.1.2: Se muestra la primera y segunda derivada de la energía libre \mathcal{F} . Hay una discontinuidad en la segunda derivada por lo que se trata de una transición de fase de segundo orden.

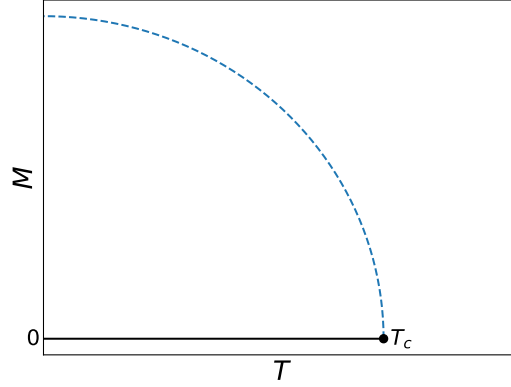


Figura 4.1.3: Diagrama de fase de un ferromagneto: Por debajo de la temperatura crítica T_c , el sistema adquiere un estado de magnetización espontánea $M(T) > 0$.

4.2. Parámetro de orden

Un parámetro de orden es una cantidad que caracteriza el estado de un sistema físico respecto a una transición de fase. Por ejemplo, la magnetización es un parámetro de orden para un ferromagneto que pase del estado diamagnético al paramagnético. Los parámetros de orden se pueden derivar de la función de partición del sistema.

La relación entre la termodinámica y la física estadística viene determinada por la energía libre de Helmholtz \mathcal{F} en el colectivo canónico

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln Z, \quad (4.2.1)$$

donde Z es la función de partición, T es la temperatura y k_B es la constante de Boltzmann. La función hamiltoniana de un sistema de espines es de la forma

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{\langle xy \rangle} \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y - \vec{B} \cdot \sum_x \vec{s}_x, \quad (4.2.2)$$

donde J es una constante de acoplamiento y \vec{B} es el campo magnético. Por simplicidad fijaremos $J = 1$. Definiendo

$$H[s] = - \sum_{\langle xy \rangle} \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y, \quad M[s] = -\vec{B} \cdot \sum_x \vec{s}_x, \quad (4.2.3)$$

la función de partición es

$$Z = \sum_s e^{-(H[s] + M[s]) / (k_B T)}. \quad (4.2.4)$$

El valor esperado de la magnetización $\langle M \rangle$ es la derivada de la energía libre \mathcal{F} respecto a la magnitud del campo magnético $B = |\vec{B}|$

$$\langle M \rangle = - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} = \frac{1}{Z} \sum_s M[s] e^{-(H[s] + M[s]) / (k_B T)}. \quad (4.2.5)$$

La susceptibilidad magnética χ_m es la derivada del valor esperado de la magnetización $\langle M \rangle$ respecto a B

$$\begin{aligned}\chi_m &= \frac{1}{V} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \\ &= -\frac{1}{V} \frac{1}{k_B T} \left(\frac{1}{Z} \sum_s M[s]^2 e^{-(H[s] + M[s])/(k_B T)} \right) + \frac{1}{V} \frac{1}{k_B T} \left(\frac{1}{Z} \sum_s M[s] e^{-(H[s] + M[s])/(k_B T)} \right)^2 \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{k_B T} \left(\langle M \rangle^2 - \langle M^2 \rangle \right).\end{aligned}\tag{4.2.6}$$

La energía promedio se define como

$$\langle \mathcal{H} \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{1}{Z} \sum_s \mathcal{H}[s] e^{-\beta \mathcal{H}[s]},\tag{4.2.7}$$

donde $\beta = 1/k_B T$. El calor específico c_V es la derivada del valor esperado de la energía $\langle \mathcal{H} \rangle$ respecto a la temperatura T

$$\begin{aligned}c_V &= \frac{1}{V} \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial T} \\ &= -\frac{1}{V} \frac{1}{k_B T^2} \frac{1}{Z} \sum_s \mathcal{H}[s]^2 e^{-\mathcal{H}[s]/(k_B T)} + \frac{1}{V} \frac{1}{k_B T^2} \left(\frac{1}{Z} \sum_s \mathcal{H}[s] e^{-\mathcal{H}[s]/(k_B T)} \right)^2 \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{k_B T^2} \left(\langle \mathcal{H} \rangle^2 - \langle \mathcal{H}^2 \rangle \right).\end{aligned}\tag{4.2.8}$$

4.3. Función de correlación

En estadística la correlación mide como una variable es afectada por los cambios en otra variable. Una alta correlación entre variables no implica necesariamente una relación causal, pero si una variable depende de otra habrá una alta correlación entre las variables. El nombre de la función que mide la correlación entre variables es la función de correlación. En física estadística se usa la función de correlación para medir la dependencia temporal o espacial entre variables.

La definición más común de una función de correlación es el promedio del conjunto canónico del producto escalar de dos variables aleatorias X_1, X_2 . Se define como

$$C(r, \tau) = \langle X_1(R, t) \cdot X_2(R + r, t + \tau) \rangle - \langle X_1(R, t) \rangle \langle X_2(R + r, t + \tau) \rangle,\tag{4.3.1}$$

donde $C(r, \tau)$ es la función de correlación y r y $R + t$ son las posiciones en los instantes t y $t + \tau$. Si no se considera el tiempo en la función de correlación, se tiene la función de correlación espacial $C(r, 0)$. La escala natural de un sistema está determinada por la longitud de correlación ξ que es la función de correlación temporal. En los modelos de espín la función de correlación mide que tan fuertemente se afectan dos espines $\vec{s}_x, \vec{s}_y \in \mathcal{S}^2$. En el modelo 2d $O(3)$ la función de correlación conectada se define como

$$\langle \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \rangle_c = \langle \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y \rangle - \langle \vec{s}_x \rangle \cdot \langle \vec{s}_y \rangle.\tag{4.3.2}$$

En la práctica, para determinar la longitud de correlación en un volumen $V = L \times L$ se mapean los espines a una línea

$$\vec{\sigma}_i = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \vec{s}_{i,k},$$

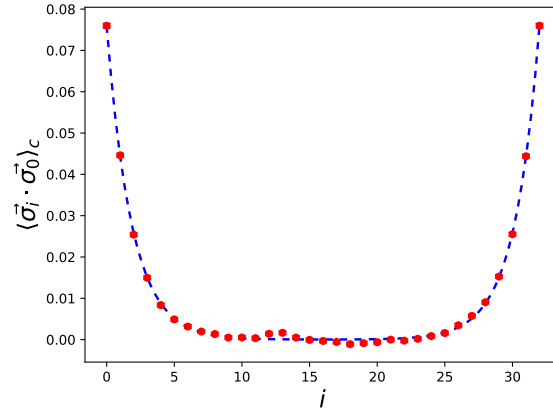
$$\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_1 \rangle_c = A \cosh \left(\frac{i - L/2}{\xi} \right), \quad (4.3.3)$$

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

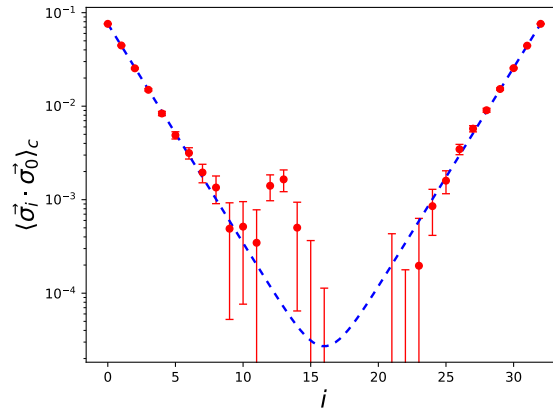
$$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}, \quad (4.3.4)$$

En el modelo 2d O(3) con temperatura crítica $T_c = 0$, si la temperatura es cercana a $T = 0$, la formula se simplifica

$$\xi \propto T^{-\nu}. \quad (4.3.5)$$



(a) Escala lineal. La función de correlación conectada se ajusta a la ec. (4.3.3).



(b) Escala logarítmica. Cerca de las fronteras, la correlación decae exponencialmente formando dos rectas en la escala logarítmica.

Figura 4.3.1: Función de correlación conectada. Los resultados se obtuvieron en simulaciones de Monte Carlo desarrolladas en el capítulo 6. Los parámetros son: temperatura $T = 1$, tamaño de retícula 32×32 .

4.4. Universalidad

El concepto de clases de universalidad fue señalado primeramente por Leo Kadanoff en 1966 [13]. Se encontró empíricamente una clasificación de sistemas críticos que se definió como clases de universalidad. Posteriormente en 1970 Enrico Fermi se basó en el trabajo de Griffiths, Jasnow y otros investigadores. 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 motivó a buscar una respuesta

para la siguiente cuestión.

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

Debido al enorme número de elementos que interactúan en un modelo microscópico realista, no es posible hacer predicciones exactas sobre todas las cantidades relevantes. En general la clase de universalidad, y por lo tanto los valores de los exponentes críticos no dependen de la estructura local. Aunque las interacciones son a nivel local, los exponentes críticos dependen solo de la dimensión espacial y las simetrías del parámetro de orden.

El modelo 2d $O(3)$ pueden surgir preguntas interesantes respecto a la clase de universalidad. Si bien presenta libertad asintótica y sectores topológicos bien definidos. Una pregunta crucial respecto su susceptibilidad topológica, es si converge a un valor finito en el límite al continuo. Conforme a la longitud de correlación aumenta, el parámetro de escala normalizando L/ξ se relaciona con la susceptibilidad topológica como

$$\chi_t = \frac{\langle Q^2 \rangle}{L^2} \quad (4.4.1)$$

El consenso respecto a esta pregunta indica que la susceptibilidad topológica diverge cuando la longitud de correlación diverge en diferentes sistemas con la misma clase de universalidad.

4.5. Escalamiento

La hipótesis de escalamiento fue desarrollada independientemente por varios investigadores, entre ellos Kadanoff en 1967 [13]. Existe una gran cantidad de sistemas físicos en diferentes escalas. En sistemas con la misma clase de universalidad, se pueden encontrar transformaciones que relacionan un sistema con otro a una escala diferente. Consideremos el potencial de Gibbs

$$G(H, T) = G(H, \epsilon), \quad (4.5.1)$$

donde $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ es la temperatura reducida. Cerca de un punto crítico existen exponentes a_H y a_T tales que se cumple la ecuación

$$G(\lambda^{a_H} H, \lambda^{a_T} \epsilon) = \lambda G(H, \epsilon), \quad (4.5.2)$$

donde $\lambda \in \mathbb{R}^+$ es un factor de escala. Algunos exponentes críticos relacionadas a las variables termodinámicas de un magneto se definen de la manera siguiente: la magnetización se relaciona con la temperatura por el exponente crítico \mathcal{B}

$$M = -\left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \right|_{B=0} \propto (T_c - T)^{\mathcal{B}}, \quad \text{si } T \lesssim T_c. \quad (4.5.3)$$

La susceptibilidad magnética se relaciona con la temperatura por el exponente crítico γ

$$\chi_T = \left. \frac{\partial M}{\partial B} \right|_{B=0} \propto |T - T_c|^\gamma, \quad \text{si } T \approx T_c. \quad (4.5.4)$$

El calor específico se relaciona con la temperatura por el exponente crítico α

$$c_V = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \propto (T - T_c)^{-\alpha}, \quad (4.5.5)$$

La longitud de correlación se relaciona con la temperatura por el exponente crítico ν

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}. \quad (4.5.6)$$

Una de las leyes de escalamiento relaciona los exponentes críticos de las variables termodinámicas siguiendo la ecuación

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (4.5.7)$$

Capítulo 5

Mecanismo de Kibble-Zurek

5.1. Ruptura espontánea de simetría

Antes de ahondar en el concepto de ruptura espontánea de una simetría, hay que definir a que nos referimos por simetría. Hay dos tipos de simetrías que pueden existir en un sistema físico. El primer tipo es la simetría que surge de la acción hamiltoniana del sistema. El teorema de Noether dicta que la dinámica de un sistema físico puede ser descrita en términos de leyes de conservación, tales como la conservación de energía, o la conservación de momento angular. Una de las ideas más profundas de la física es que una cantidad conservada se fundamenta en la simetrías de una ley fundamental. Por ejemplo, la invariancia de translación se manifiesta cuando las ecuaciones de movimiento son las mismas en cualquier parte del espacio. Esta invariancia implica la conservación del momento. El segundo tipo es una simetría de estado, se refiere a las simetrías que surgen en las soluciones a una ecuación de movimiento o los estados de un sistema físico.

La ruptura espontánea de una simetría, es una reducción de simetrías al pasar por debajo de la energía del estado vacío, por lo general al pasar por debajo de una temperatura crítica T_c . 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 espontánea de la simetría $SU(2)$ al pasar por debajo de la energía de vacío. La ruptura puede haber conducido a la formación de defectos topológicos como monopolos cuasipuntuales, cuerdas cósmicas lineales o paredes de dominio planares.
- En el helio ^4He en estado superfluidico, la condensación de Bose-Einstein ocurre alrededor de la temperatura $2K$. Hay una ruptura espontánea de la simetría al pasar por debajo de la temperatura crítica T_c conduciendo a la posible formación de vórtices puntuales y líneas de flujo lineales.

Basándose en el concepto de ruptura de simetría Tom Kibble introdujo la idea de fluctuaciones primordiales. En un sistema que pasa continuamente por una ruptura de simetría, un parametro de orden difiere en las regiones no correlacionadas. Formando regiones asiladas conocidas como dominios. Dependiendo del sistema estos dominios son diferentes tipos de defectos topológicos; pueden ser vórtices, cuerdas cósmicas, monopolos magnéticos etc.

En el ejemplo del universo temprano, los defectos topológicos remanentes son objetos inherentemente estables que pueden proporcionar pistas observacionales sobre cómo era el sistema en el momento en que se formaron.

5.2. Acoplamientos de largo alcance

La esencia del mecanismo de Kibble-Zurek está en la aleatoriedad en la ruptura de la simetría de dominios en un sistema. El tamaño de los dominios está determinado por el tiempo de autocorrelación τ y la longitud de correlación ξ . La ley de escalamiento describe la relación entre los defectos topológicos remanentes respecto a la tasa de enfriamiento en un sistema que pasa por la temperatura crítica. En estas transiciones, la clase de universalidad está determinada por propiedades fundamentales como la simetría de un parámetro de orden, el rango de interacciones o la dimensionalidad por lo que es de gran interés clasificar los diferentes modelos en sus respectivas clases de universalidad [14].

Las interacciones de los componentes microscópicos de un sistema se afectan según un potencial de interacción $V(r)$, donde r es la distancia entre los componentes. Comúnmente se le llama interacción de largo rango si sigue la ley de potencia

$$V(r) \propto r^{-\alpha}, \quad (5.2.1)$$

donde α es un exponente que describe el decaimiento de las interacciones. Aunque pueden surgir ordenes de largo rango a partir de propiedades del sistema distintas a la longitud de correlación, tales como el orden topológico de largo rango, no es el caso para el modelo 2d $O(3)$. David Mermin y Warren Wagner [15, 16] demostraron que no puede haber una ruptura espontánea de simetría en los modelos 1d $O(3)$ y 2d $O(3)$ con interacciones de rango finito y temperatura $T > 0$. La idea central de la demostración es que las fluctuaciones térmicas en un sistema 2d en bajas temperaturas son lo suficientemente grandes como para destruir cualquier orden de largo rango. Aunque las interacciones en el modelo 2d $O(3)$ son a nivel local, la clase de universalidad y por lo tanto los valores de los exponentes críticos no dependen de la estructura local, en cambio dependen de la dimensión espacial y las simetrías del parámetro de orden. Usando los argumentos anteriores se sigue que: es más conveniente considerar únicamente los espines vecinos más cercanos, ya que representan la mayor contribución a la interacción entre espines y no afectan la clase de universalidad del sistema.

5.3. Evolución del universo temprano

En su trabajo Kibble propuso que la ruptura de la simetría $SU(2)$ en el universo temprano en expansión pudo conducir a la formación de defectos topológicos. En el sector electro-débil del Modelo estándar ME, la temperatura crítica es del orden $1/\sqrt{G_F}$, donde G_F es la constante de Fermi. Siguiendo dicha suposición, el universo paso por una ruptura de simetría en $10^{-12}s$.

Consideremos un campo multi-escalar $\vec{\phi} \in \mathbb{R}^n$ con un lagrangiano invariante bajo el grupo ortogonal $O(n)$, la matriz antisimétrica B_μ representa un campo de norma dado por el acoplamiento $\frac{1}{2}n(n-1)$. El lagrangiano es de la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2} D_\mu \vec{\phi} D_\mu \vec{\phi} - \frac{1}{8} g^2 \left(\vec{\phi} \cdot \vec{\phi} - \eta^2 \right)^2 + \frac{1}{8} \text{Tr} (B_{\mu\nu} B^{\mu\nu}) \\ & D_\mu \vec{\phi} = (\partial_\mu - q B_\mu) \vec{\phi} \\ & B_{\mu\nu} = D_\mu B_\nu - D_\nu B_\mu + q [B_\mu, B_\nu], \end{aligned} \quad (5.3.1)$$

donde g, q son constantes de acoplamiento. Cerca de la temperatura crítica T_c , aparecen fluctuaciones fuertes en el campo $\vec{\phi}$. por debajo de la temperatura crítica, el valor esperado corresponde a algún punto en \mathcal{S}^{n-2} . Ningún punto de esta 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, muchas de estas variaciones dejarán de fluctuar, acercando el valor esperado de los diferentes dominios a un valor constante $\langle \vec{\phi} \rangle$. La cuestión es, si luego del enfriamiento del universo, las fronteras entre dominios pueden formar defectos topológicos. El tamaño de estos dominios está determinado por la longitud de correlación

$$\xi^{-1} \approx g^2 T. \quad (5.3.2)$$

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. Las cuerdas cósmicas se teorizan como defectos topológicos unidimensionales que pueden resultar de la ruptura de la simetría $O(n)$.

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

Desafortunadamente todavía no se han detectado cuerdas cósmicas. Las observaciones realizadas por COBE y más recientemente por WMAP [17] 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 [18-20].

5.4. Experimentos con materia condensada

En 1985, Wojciech Zurek, en Los Álamos, sugirió que las ideas de Kibble podrían aplicarse al problema de la formación de defectos en una transición de fase de baja temperatura, en particular la transición de un fluido normal a un superfluido en helio ^4He líquido. Zurek mostró que en una transición de segundo orden, se puede obtener una relación de ley de potencia entre la longitud de correlación ξ y la tasa inversa de enfriamiento τ_{cool} siguiendo la relación

$$\xi \propto \tau_{\text{cool}}^{-\zeta}, \quad (5.4.1)$$

donde ζ es el exponente del mecanismo de Kibble-Zurek. El parámetro de orden de un superfluido, puede pensarse como la función de onda del condensado de Bose. La función de onda es de la forma

$$\psi = |\psi| e^{i\theta} \quad (5.4.2)$$

donde θ es una fase y $|\psi|$ es la magnitud de la función de onda. En este sistema se pueden formar líneas de vórtices cuando el parámetro de orden es un valor complejo. El resultado da lugar una situación análoga al modelo cosmológico.

Pasando por un súbito decaimiento de presión, la fase de la función de onda en el condensado de helio ^4He es análoga a la ruptura de simetría del campo de multi-escalar $\vec{\phi} \in \mathbb{R}^2$. Existe un análogo

a las cuerdas cósmicas presentes en el modelo del universo temprano llamadas líneas de vórtice. Cerca de la transición de fase, el potencial es de la forma

$$V = a|\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2}b|\psi(\vec{r})|^4, \quad (5.4.3)$$

donde a y b son constantes. Por debajo de la temperatura crítica, tras la ruptura de la simetría en el superfluido, a es un coeficiente negativo y el potencial V tiene la forma de sombrero. Pasando por debajo de la temperatura crítica T_c , una fracción considerable de los átomos de ^4He ocupa un sólo estado cuántico. Entonces ψ es proporcional a la función de onda de ese estado, y $|\psi|^2$ representa la densidad de la fracción superfluida. En este caso, una cuerda, o cualquiera de sus defectos análogos, es un tubo delgado alrededor del cual la fase de ψ cambia en 2π [16, 21, 22].

Capítulo 6

Métodos de Monte Carlo

El trabajo pionero en el campo de los Métodos de Monte Carlo fue realizado por Metropolis y colaboradores [1]. La esencia de los métodos de Monte Carlo es evaluar numéricamente las sumas o integrales multidimensionales intratables analíticamente. Se basa en la idea de muestreo de importancia. Consiste en generar una muestra con entradas que corresponden sus probabilidades. La probabilidad de selección se multiplica por una función con mayor densidad en aquellas regiones del espacio de fases de mayor contribución a las integrales.

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

$$\sum_j W_{i,j} = 1. \quad (6.0.1)$$

Cada valor $W_{i,j}$ representa la probabilidad de transición de la configuración $[s]_i$ a la configuración $[s]_j$ en una unidad de «tiempo» discreto 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 una observable O en el intervalo temporal medido es

$$\langle O \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O[s]_i, \quad (6.0.2)$$

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

$$\text{std}(O) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left(\sum_{i=1}^N O[s]_i^2 - N \langle O \rangle_{\text{aprox}}^2 \right)}, \quad (6.0.3)$$

y el error estándar se define por la ecuación

$$\text{error}(O) = \frac{\text{std}(O)}{\sqrt{N}}. \quad (6.0.4)$$

Para una medición en un proceso estocástico hay una probabilidad del 68.27 % de encontrarse a menos de una desviación estándar del valor esperado de la distribución. Conforme la estadística aumenta, el error converge a cero y el estimador de la observable converge al valor real. Si cada

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

$$\langle O \rangle \simeq \langle O \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(O). \quad (6.0.5)$$

Definición: Variable aleatoria.

Una variable aleatoria X es el valor resultante de una selección aleatoria en el conjunto de los posibles resultados de un evento.

Un proceso estocástico es una secuencia de eventos aleatorios. Consideremos un evento aleatorio con N posibles resultados $\{x_1, \dots, x_N\}$: La probabilidad de que el sistema se encuentre en una configuración determinada con energía \mathcal{H} es proporcional al factor de Boltzmann

$$P[s] = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}[s]}}{Z}, \quad (6.0.6)$$

donde $\beta = 1/T$, y Z es la función de partición.

Definición: Balance Detallado.

Sea $\{s_i\}$ una cadena de Markov con probabilidad de transición estacionaria. La cadena de Markov esta en equilibrio respecto a la distribución de probabilidad $p[s]$ si cumple la ecuación de balance detallado

$$p[s \rightarrow s']p[s] = p[s' \rightarrow s]p[s'], \quad (6.0.7)$$

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 $[s]$ [23].

6.1. Algoritmo de Metropolis

La implementación común del algoritmo de Metropolis procede con actualizaciones locales. En las actualizaciones locales generar una nueva configuración requiere de aplicar una probabilidad de transición individualmente a cada elemento de la configuración. Consideremos el modelo de espines 2d $O(3)$, definido en la retícula con condiciones de frontera periódicas \mathcal{T}_L^2 . La energía de una configuración se define por la ec. (3.2.11).

- El algoritmo de actualización actúa sobre cada espín $\vec{s}_x \in [s]$. Se propone un cambio aleatorio en la orientación del espín \vec{s}_x que resulta en una configuración $[s']$. Si el cambio propuesto se acepta o se rechaza, depende de la diferencia en la energía de las configuraciones es

$$\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s]. \quad (6.1.1)$$

Se define la probabilidad de aceptación en función de la diferencia de energía entre configuraciones como

$$p[s \rightarrow s'] = \begin{cases} e^{-\beta \Delta \mathcal{H}} & \text{si } \Delta \mathcal{H} > 0 \\ 1 & \text{si } \Delta \mathcal{H} \leq 0. \end{cases} \quad (6.1.2)$$

- Si la energía de la configuración disminuye con el cambio, la probabilidad de aceptación es "1", y se acepta de inmediato.
- Si la energía de la configuración aumenta, esta se acepta con una probabilidad $e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}$. Si $\beta \rightarrow 0$, entonces la probabilidad de aceptación para las configuraciones que aumentan la energía se acerca a "1", resultando en más ruido térmico.
- Por otro lado, si $\beta \rightarrow \infty$ la probabilidad de aceptación de las configuraciones que aumentan la energía tiende a cero resultando en una configuración trivial uniforme.

A menor temperatura menos fluctuaciones, implicando que el sistema se acerca a configuraciones de energía cercanas al mínimo. La prueba de aceptación se repite para cada espín del volumen. El orden de selección puede ser lexicográfico, en el que los espines se eligen siguiendo un orden basado en las posiciones de la retícula, o aleatorio, donde los espines se eligen al azar. Un barrido de actualización corresponde a una unidad de tiempo discreto de Markov para el algoritmo Metropolis e implica que se ha aplicado la probabilidad de aceptación a un número de espines igual al total del volumen V la retícula. En el modelo 2d $O(3)$, la diferencia de energía en términos de los espines $\vec{s}_x \in \mathcal{S}^2$ es

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}[s'] - \mathcal{H}[s] = (\vec{s}_x - \vec{s}_x') \cdot (\vec{s}_{x+\hat{1}} + \vec{s}_{x-\hat{1}} + \vec{s}_{x+\hat{2}} + \vec{s}_{x-\hat{2}}). \quad (6.1.3)$$

donde $\hat{1} = (1, 0)$ y $\hat{2} = (0, 1)$.

6.2. Algoritmo de Glauber

El algoritmo de Glauber [24] es al igual que el algoritmo Metropolis, un algoritmo de actualización local. La diferencia entre los algoritmos esta en la probabilidad de aceptación. La propuesta de Glauber es construir una función que cumpla con la ecuación de balance detallado

$$p[s \rightarrow s']p[s] = p[s' \rightarrow s]p[s']. \quad (6.2.1)$$

Se propone la probabilidad de aceptación de algoritmo de Glauber como

$$p[s \rightarrow s'] = \frac{e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}}{1 + e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}}. \quad (6.2.2)$$

La probabilidad de aceptación tiene que cumplir la ecuación de balance detallado por lo que se realiza siguiendo la sustitución directa

$$\begin{aligned} p[s \rightarrow s']p[s] &= \frac{e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}}{1 + e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}} \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s]}}{Z} \\ &= \frac{e^{\beta\Delta\mathcal{H}}}{e^{\beta\Delta\mathcal{H}}} \left(\frac{e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}}{1 + e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}} \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s]}}{Z} \right) \frac{e^{\beta\mathcal{H}[s']}}{e^{\beta\mathcal{H}[s']}} \\ &= \frac{e^{\beta\Delta\mathcal{H}}}{1 + e^{\beta\Delta\mathcal{H}}} \frac{e^{-\beta\mathcal{H}[s']}}{Z} \\ &= p[s' \rightarrow s]p[s']. \end{aligned} \quad (6.2.3)$$

La sustitución de la probabilidad de aceptación cumple con la ecuación de balance detallado por lo que es una probabilidad de aceptación valida. De manera similar al algoritmo de Metropolis dada una configuración $[s]$, para cada elemento en el volumen se propone un cambio aleatorio que resulta en una configuración $[s']$.

- Si $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow 0$, entonces la probabilidad de aceptación se aproxima a $1/2$.
- Si $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow \infty$ entonces $e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} \rightarrow 0$ y la probabilidad de aceptación se aproxima a 0.
- Si la energía de la configuración disminuye $\beta\Delta\mathcal{H} \rightarrow -\infty$, entonces la probabilidad de aceptación tiende a 1.

El algoritmo de Glauber es normalmente menos usado que el algoritmo de Metropolis ya que es un poco menos eficiente para termalizar un sistema, pero en esta tesis esa característica no es una desventaja ya que en los capítulos posteriores se realizarán enfriamientos rápidos y una menor eficiencia permite alcanzar una mayor velocidad de enfriamiento en las simulaciones numéricas.

6.3. Algoritmo clúster

Calcular la diferencia de energía entre configuraciones implica realizar pocos cálculos, por lo que los algoritmos de actualización local son eficientes lejos de la temperatura crítica. El problema con la temperatura crítica en los algoritmos de actualización local se hace notar cerca de la temperatura crítica, donde disminuye drásticamente el número de cambios que se aceptan. Por consecuencia, el tiempo de auto-correlación del sistema aumenta. A este fenómeno se le conoce como desaceleración crítica. Para estudiar sistemas en equilibrio cerca de la temperatura crítica hay una opción más conveniente. Se trata de aplicar un algoritmo que actualice clústeres de espines en vez de espines individuales [25, 26].

Definición: Clúster.

Un clúster es un subconjunto de espines de una configuración que comparten un vínculo directo o indirecto.

El algoritmo clúster sugerido por Robert Swendsen y Jian Wang se basa en la observación de que la función de partición se puede escribir como una suma sobre un conjunto de distribuciones [26, 27]. Consiste en generar clústeres y cambiar la configuración de cada subconjunto de espines a la vez. Una de las principales ventajas del algoritmo clúster es que suprime la desaceleración crítica característica de los algoritmos de actualización local. Un clúster puede estar formado por un único espín si no hay vínculos con sus vecinos, o puede estar formado por todos los espines de la configuración, caso más probable cerca de la temperatura crítica. Para formar los clústeres primero propone un vector aleatorio $\vec{w} \in S^2$, se elige un espín \vec{s}_x y se calcula la reflexión de \vec{s}_x respecto al plano normal a \vec{w} aplicando la transformación

$$\vec{s}_x' = \vec{s}_x - 2(\vec{w} \cdot \vec{s}_x)\vec{w}. \quad (6.3.1)$$

Para probar el vínculo entre dos espines vecinos \vec{s}_x, \vec{s}_y , se calcula la diferencia de energía entre las configuraciones

$$\Delta\mathcal{H}_{x,y} = \vec{s}_x' \cdot \vec{s}_y - \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y. \quad (6.3.2)$$

Se determina si el espín \vec{s}_x está enlazado con sus espines vecinos más cercano, dada la probabilidad de vínculo

$$p_{x,y} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta\Delta\mathcal{H}_{x,y}} & \text{si } \Delta\mathcal{H}_{x,y} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \Delta\mathcal{H}_{x,y} < 0. \end{cases} \quad (6.3.3)$$

Se calcula la probabilidad de vínculo, con lo que se decide si los espines están enlazados. Una forma de realizar el proceso de identificación de clústeres es usar el algoritmo de Hoshen-Kopelman que se describe en el apéndice B.

En la variante single-clúster se forma un único clúster alrededor de un espín aleatorio, y se cambia la orientación de todos sus espines a la vez, aplicando la transformación (6.3.1). En la variante multi-cluster se forman todos los clústeres posibles. Una vez formados, se divide todo el volumen en clústeres con probabilidad de transición $1/2$, valor que minimiza el tiempo de auto-correlación del sistema al mantener aproximadamente la mitad de los clústeres y cambiar la configuración de la otra mitad.

6.4. Tiempo de auto-correlación

La evolución de un sistema se caracteriza por el tiempo de auto-correlación, que mide la velocidad a la que un sistema pasa a una configuración estadísticamente independiente. En general, la dinámica desacelera considerablemente cerca de un punto crítico. Una forma de tratar con la desaceleración en el algoritmo de Metropolis y Glauber es limitar el área en la esfera alrededor de un espín en la que se permiten cambios de configuración. El área se delimita por un ángulo máximo α_{\max} , como los posibles cambios en la dirección del espín son más cercanos, entonces el ratio de aceptación aumenta. Aunque limitar en área de selección disminuye el tiempo de auto-correlación, la desaceleración crítica continua siendo es una barrera inevitable. Si bien el ratio de aceptación puede aumentar considerablemente, los cambios en la configuración son menores.

Es de gran interés entender cómo cambia el tiempo de auto-correlación para las diferentes observables del sistema. Consideremos una observable A donde A_t es el valor de A en el instante t . El tiempo de auto-correlación se define como una función de correlación temporal, definimos la auto-correlación como

$$C_{AA}(t) = \langle A_s A_{s+t} \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (6.4.1)$$

Si la cadena de Markov cumple la condición de balance detallado, típicamente se tiene que

$$C_{AA}(t) = C e^{-t/\tau_{\text{exp}}}, \quad (6.4.2)$$

donde τ_{exp} es el tiempo de auto-correlación exponencial. Una definición alternativa es el tiempo de auto-correlación integrado

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^n \frac{C_{AA}(t)}{C_{AA}(0)}, \quad (6.4.3)$$

donde n es el número de términos que se añaden a la suma antes del corte. Se elije n tal que, el tiempo de auto-correlación oscile alrededor de una constante τ_{int} a partir de $t = n$. El error depende de las oscilaciones del tiempo de auto-correlación alrededor de τ_{int} y es de la forma

$$\delta\tau_{\text{int}} = \sqrt{\frac{2\tau_{\text{int}}}{n} C_{AA}(0)}. \quad (6.4.4)$$

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

$$\tau \propto \xi^{-\nu z}, \quad (6.4.5)$$

donde z es el exponente crítico dinámico como se discute en ref. [28].

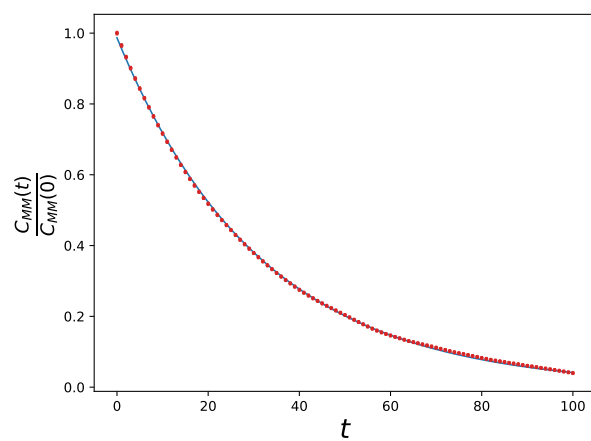


Figura 6.4.1: Evolución de la auto-correlación de la magnetización en 100 barridos de actualización para el algoritmo de Metropolis lexicográfico a temperatura $T = 0.9$ en una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$.

Capítulo 7

Simulaciones en equilibrio

En esta sección se reportan mediciones de las diferentes observables que se han descrito en los capítulos anteriores, en simulaciones del modelo 2d $O(3)$ en equilibrio termodinámico. Para ello, se ha escrito un programa en Fortran con rutinas de generación de configuraciones y su actualización 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. En una retícula de volumen V , un barrido es la actualización de V espines seleccionados en orden lexicográfico, aleatorio o por su pertenencia a un clúster.

Como se ve en la Figura 7.0.1, los valores de un sistema fluctúan entre mediciones. Por lo que una medición se calcula a partir del promedio, donde el número de mediciones es suficientemente grande para alcanzar la precisión deseada. Si el ruido termodinámico es fuerte (para $T > 2$), el estado de equilibrio térmico se alcanza en pocos barridos de actualización y generar configuraciones estadísticamente independientes también requiere pocos barridos. En este escenario las fuertes fluctuaciones requieren una muestra grande de configuraciones para estabilizar el promedio estadístico. En cambio si el ruido termodinámico es bajo ($T \leq 2$), el equilibrio termodinámico y las configuraciones estadísticamente independientes requieren un mayor número de barridos. En este escenario, el bajo ruido termodinámico requiere un número menor de configuraciones para estabilizar el promedio estadístico, pero requiere de un mayor número de actualizaciones para generar configuraciones estadísticamente independientes.

Para realizar las simulaciones se requiere determinar la temperatura T , el tamaño de la retícula $V = L \times L$ y el ángulo δ que determina la distancia máxima para el cambio en un espín de la configuración. 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 realizan suficientes barridos de actualización para generar una configuración estadísticamente independiente.

3. Se miden los valores de las observables para la configuración actual.
 - a) Si el número de mediciones es menor al número requerido para alcanzar la precisión deseada, se regresa al paso 2.
 - b) Si en cambio el número de mediciones es suficiente se termina el ciclo y se promedian los resultados.

El ángulo δ afecta el ratio de aceptación, si abarca un área grande sobre la esfera \mathcal{S}^2 , entonces el ratio de aceptación es bajo pero cada cambio aceptado es un cambio importante en la configuración. En cambio si el área sobre la esfera es pequeña, el ratio de aceptación aumenta pero los cambios aceptados afectan en menor proporción a la configuración.

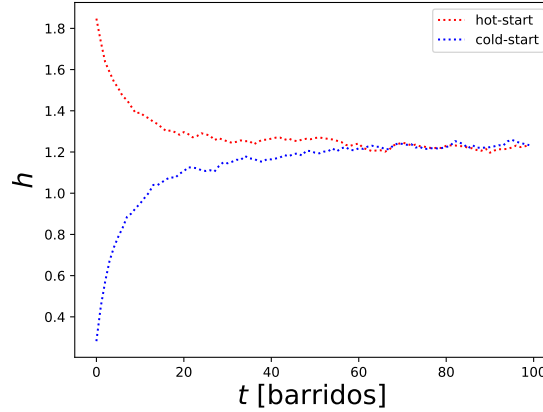


Figura 7.0.1: Evolución de la densidad energética del modelo 2d $O(3)$ a temperatura $T = 1$ y $V = 64 \times 64$ desde las configuraciones hot-start y cold-start. El eje vertical muestra la densidad energética $h = \mathcal{H}/V$. La trayectoria cold-start parte de una configuración de espines alineados. La trayectoria hot-start, parte de una configuración aleatoria. En unos 100 barridos, ambas trayectorias oscilan alrededor del valor esperado de la energía del sistema termalizado $\langle h \rangle = 1.247(1)$.

7.1. Tiempo de auto-correlación

Se realizó una serie de experimentos numéricos para determinar características generales del modelo 2d $O(3)$. En el primer experimento se calculó el tiempo de auto-correlación en equilibrio térmico para las temperaturas

$$T = 0.75, 0.8, 0.9, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0$$

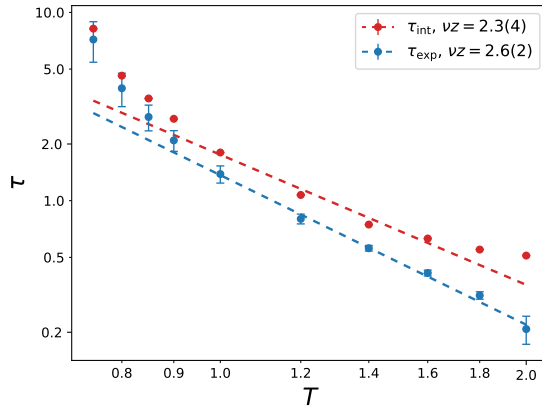
en una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$. En todos los experimentos numéricos se partió de una configuración inicial hot-start y se procedió con 10^4 barridos de actualización del algoritmo multi-clúster, asegurando una configuración completamente termalizada. El algoritmo multi-clúster alcanza la configuración de equilibrio en pocas actualizaciones, este comportamiento evita medir una desaceleración crítica en el rango de temperaturas $[0.7, 2.0]$. Este característica del algoritmo multi-clúster impidió el cálculo del tiempo de auto-correlación en el rango de temperaturas seccionado

para la carga topológica y la energía, pero fue posible realizar una medición para la magnetización en el rango de temperaturas $[0.3, 0.6]$.

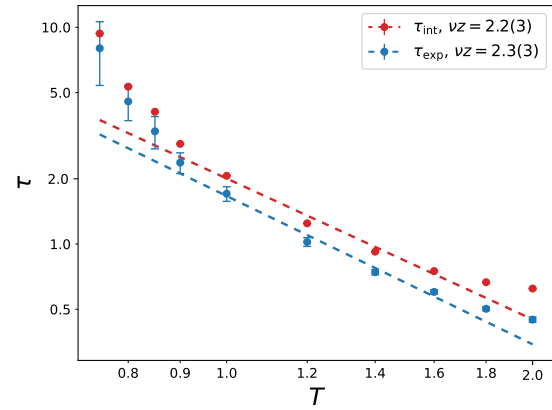
En el caso de los algoritmos de actualización local, hay una notoria desaceleración crítica en el rango de temperaturas $[0.7, 2.0]$, por lo que fue posible la medición del tiempo de auto-correlación para las diferentes observables. Los tiempos de auto-correlación se obtuvieron por ajuste a la función exponencial y por integración usando las ecuaciones (6.4.3) y (6.4.2), ambos resultados fueron consistentes para los algoritmos de actualización local. Una vez obtenidos los resultados, se ajustó el tiempo de auto-correlación τ en función de la temperatura siguiendo la relación

$$\tau \propto T^{-\nu z}. \quad (7.1.1)$$

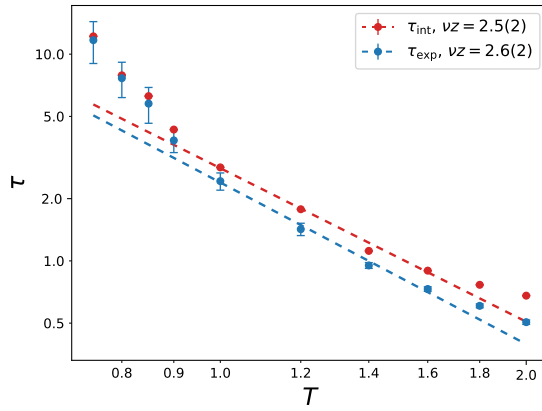
En las figuras 7.1.1, 7.1.2 y 7.1.3, las gráficas muestran el cambio en el tiempo de auto-correlación en función de la temperatura para la carga topológica, la densidad de energía y la magnetización. Se observa que el tiempo de auto-correlación es bajo en la temperatura $T = 2.0$, conforme la temperatura baja el tiempo de auto-correlación aumenta.



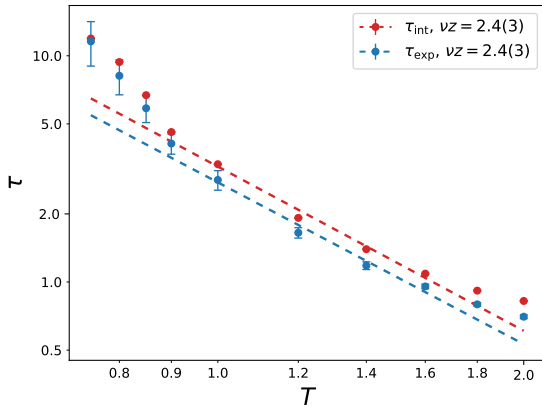
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.

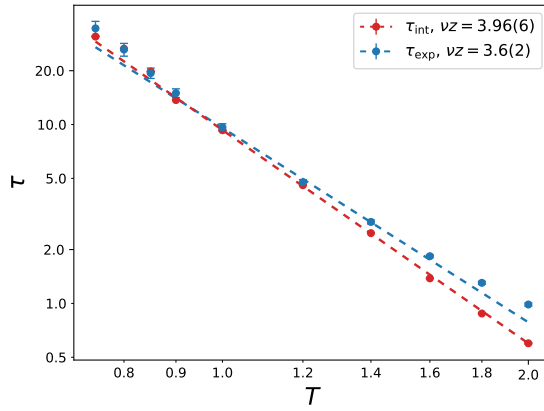


(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

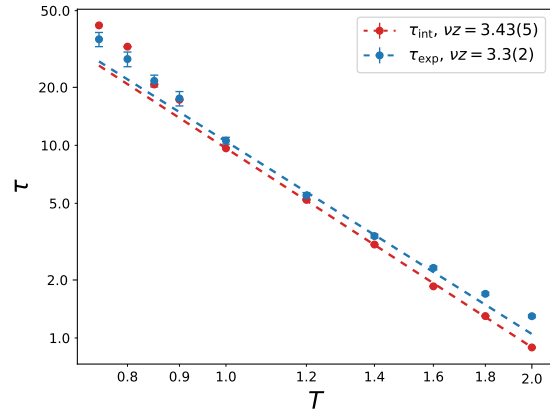


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

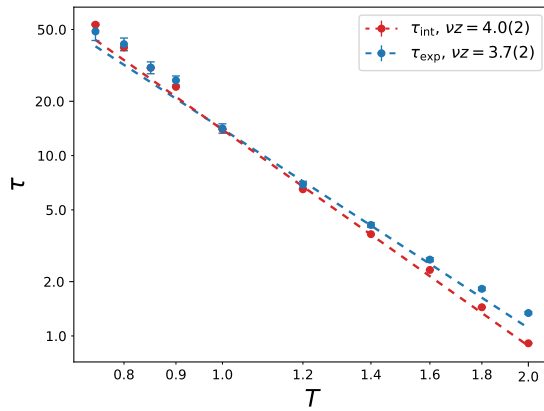
Figura 7.1.1: Tiempo de auto-correlación de la carga topológica en función de la temperatura en una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$, en la escala log-log. Los tiempos de auto-correlación exponencial e integrado son definidos en las ecs. (6.4.3) y (6.4.2). Aunque los valores τ_{int} y τ_{exp} varían un poco, la inclinación determinada por νz es consistente para los algoritmos de actualización local.



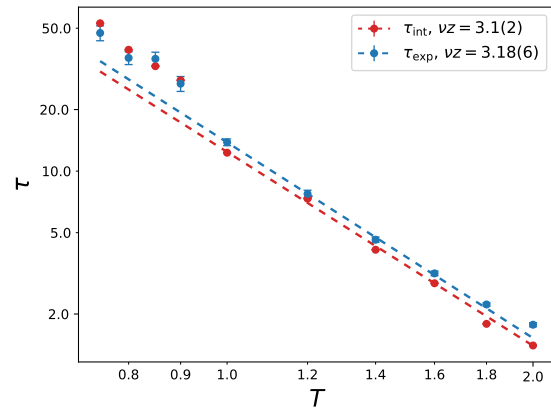
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

Figura 7.1.2: Tiempo de auto-correlación de la energía en función de la temperatura en una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$. Los valores τ_{int} y τ_{exp} son cercanos en el rango de temperaturas $[0.75, 2.0]$, en comparación a las gráficas en la figura 7.1.1 y la inclinación determinada por ν_Z es consistente para los algoritmos de actualización local.

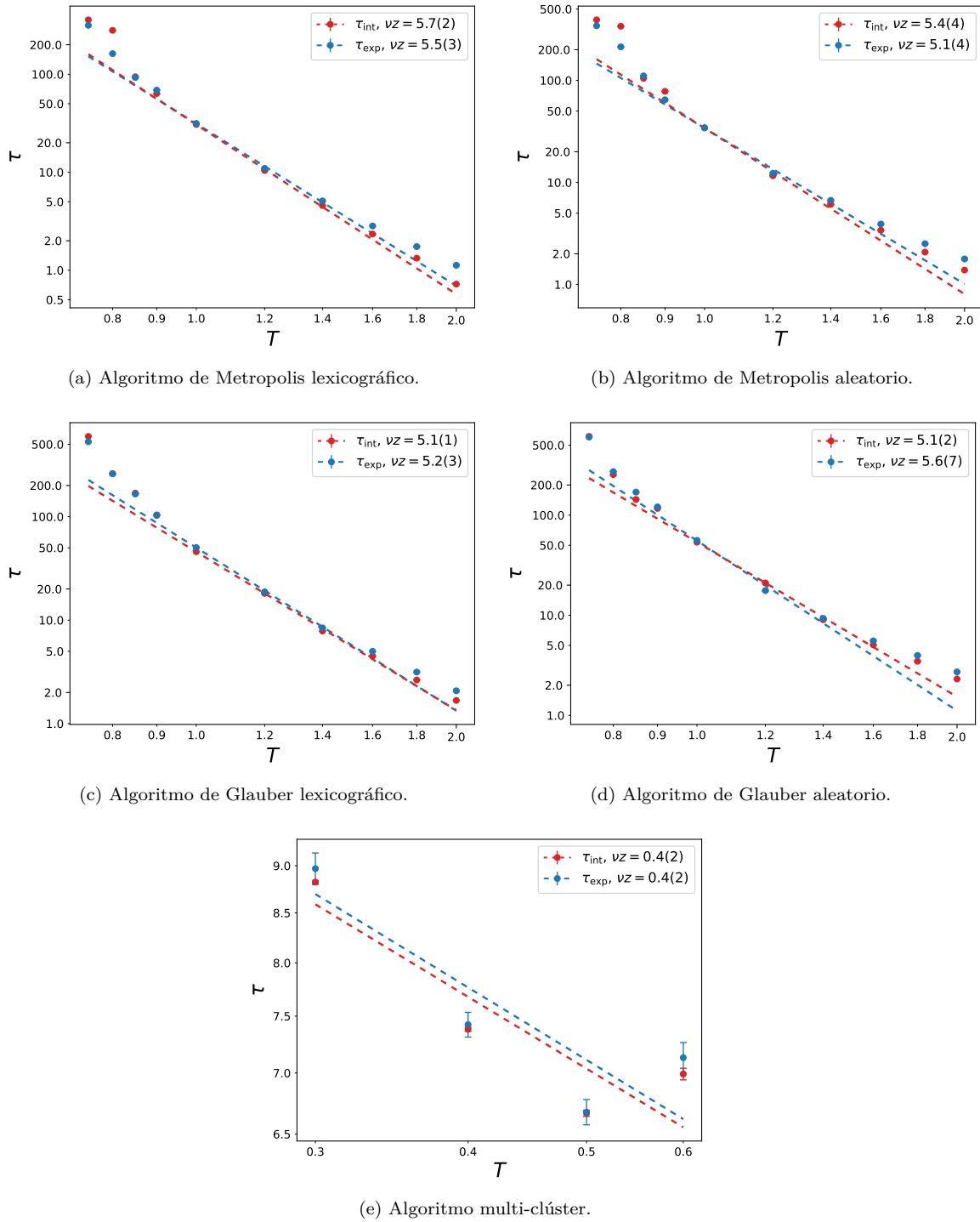


Figura 7.1.3: Tiempo de auto-correlación de la magnetización en función de la temperatura en una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$. Los valores τ_{int} y τ_{exp} son cercanos en el rango de temperaturas $[0.75, 2.0]$, y la inclinación determinada por νz es consistente para los algoritmos de actualización local.

El número de actualizaciones necesarios para generar una configuración estadísticamente independiente es aproximadamente 4τ . En $T = 0.75$ para la carga topológica se requieren aproximadamente 40 barridos de actualización entre cada medición. En el mismo escenario para la energía se requieren aproximadamente 200 barridos y para la magnetización 2000 barridos. En estos resultados, la magnetización es de lejos el parámetro que requiere más barridos de actualización para generar configuraciones estadísticamente independientes. En el algoritmo multi-clúster el tiempo de auto-correlación baja drásticamente de 2000 a 40 barridos de actualización. Aunque la eficiencia del algoritmo multi-clúster evito la medición del tiempo de auto-correlación para la carga topológica y la energía, la alta auto-correlación de la magnetización, hizo posible la medición en el rango de temperaturas $[0.3, 0.6]$. En la tabla 7.1 se comparan los valores de νz para las observables considerando el tiempo de auto-correlación integrado y por ajuste.

Algoritmo	Q		\mathcal{H}		M	
	τ_{int}	τ_{exp}	τ_{int}	τ_{exp}	τ_{int}	τ_{exp}
Metropolis lexicográfico	2.3(4)	2.6(2)	3.96(6)	3.6(2)	5.7(2)	5.5(3)
Metropolis aleatorio	2.2(3)	2.3(3)	3.43(4)	3.3(2)	5.4(4)	5.1(4)
Glauber lexicográfico	2.5(2)	2.6(2)	4.0(2)	3.7(2)	5.1(1)	5.2(3)
Glauber aleatorio	2.4(3)	2.4(3)	3.1(2)	3.18(6)	5.1(2)	5.6(7)
Multi-clúster	-	-	-	-	0.4(2)	0.4(1)

Tabla 7.1: Exponente crítico νz para el tiempo de auto-correlación. Para cada observable se registro el valor de νz para el tiempo de auto-correlación integrado τ_{int} y ajustado τ_{exp} .

Los resultados del tiempo de auto-correlación integrada y por ajuste son cercanos en temperaturas $T \in [0.75, 1.0]$ según los resultados resumidos en la tabla 7.1. Se observo que las inclinaciones mas bajas son las relacionadas a la carga topológica y las más altas, las asociadas a la magnetización. Este resultado muestra que la carga topológica Q es más sensible a los cambios en la configuración del sistema que la energía \mathcal{H} y la magnetización M . Los resultados para las observables mostraron una consistencia en la inclinación νz de los ajustes al comparar el tiempo de auto-correlación con la temperatura para los algoritmos locales. Por otro lado el valor de νz para el algoritmo multi-cluster es considerablemente menor. La diferencia en los resultados se explica por que los barridos de actualización que representan el cambio temporal del sistema no son equivalentes. Los barridos son parecidos para los algoritmos de actualización local, donde el número de espines que cambian en cada barrido depende del ratio de aceptación. En cambio, para el algoritmo multi-clúster los espines actualizados dependen del tamaño promedio de los clústeres. Como los barridos son esencialmente diferentes no es sencillo dar una equivalencia entre barridos de actualización locales y barridos de actualización de multi-clúster. Aunque hay variación en los resultados dados por los diferentes algoritmos, en todos los casos se sigue la relación dada por (7.1) entre la temperatura y el tiempo de auto-correlación.

7.2. Longitud de correlación

En el segundo experimento numérico se midió la longitud de correlación en retículas cuadradas de longitud $L = 32, 64, 128$. Para las simulaciones se consideraron las temperaturas

$$T = 0.3, 0.4, 0.5, 0.6.$$

En todos los casos, se partió de una configuración hot-start y se aplicaron 10^4 actualizaciones del algoritmo multi-clúster para asegurar una configuración completamente termalizada, luego se actualizó la configuración con 100 barridos de actualización para cada algoritmo y se calculó la longitud de correlación dejando un espacio de 100 barridos entre cada medición. En la figura 7.2.1 se muestra el cambio de la longitud de correlación en función de la temperatura para los algoritmos de actualización. En las gráficas se observa como conforme la temperatura baja la longitud de correlación aumenta. A partir de los resultados se ajustaron las longitudes de correlación respecto a la temperatura siguiendo la relación

$$\xi \propto T^{-\nu}. \quad (7.2.1)$$

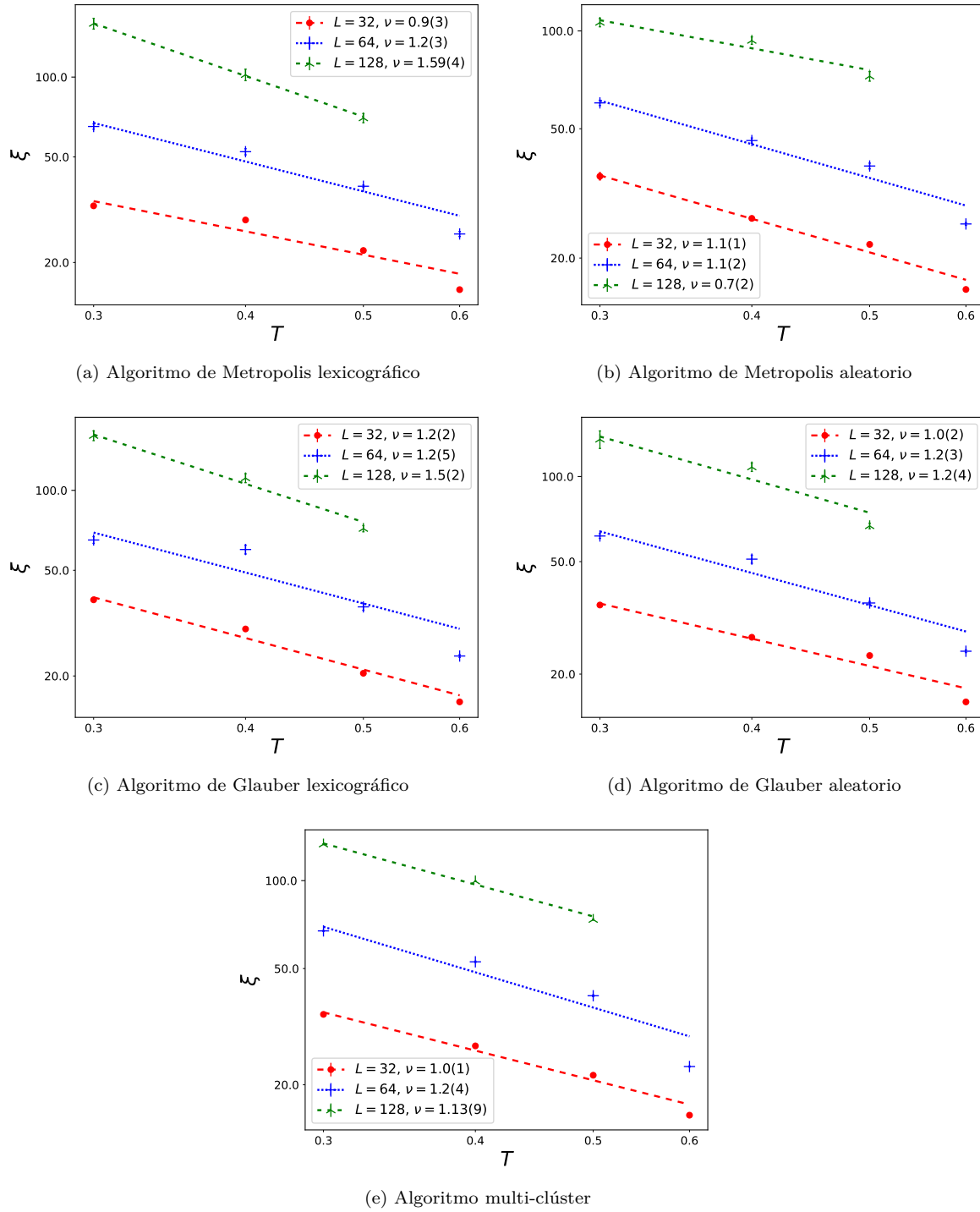


Figura 7.2.1: Longitud de correlación en función de la temperatura para las retículas cuadradas de longitud $L = 32, 64, 128$. Los valores ξ son consistentes para todos los algoritmos en el rango de temperaturas $[0.3, 0.5]$.

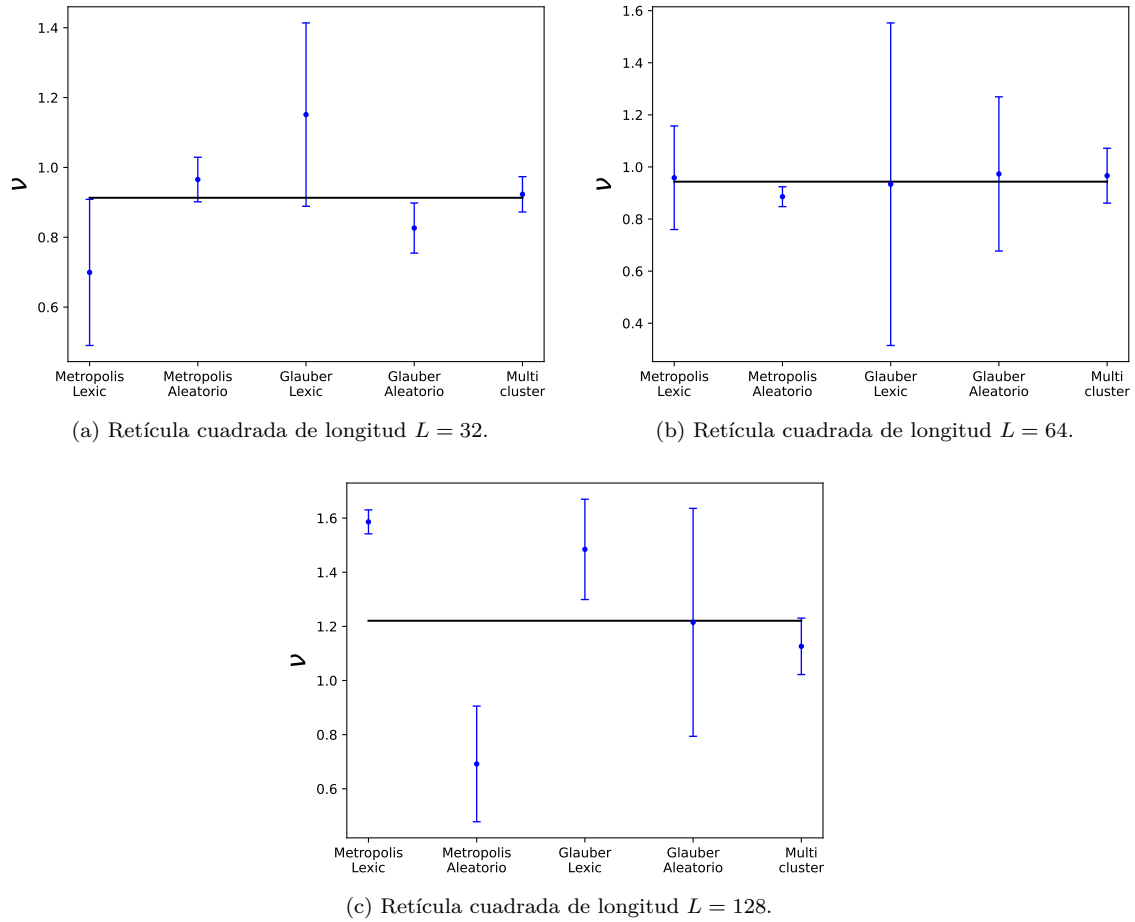


Figura 7.2.2: Exponente crítico ν para los algoritmos Metropolis y Glauber en las variantes lexicográfica, aleatoria y el algoritmo multi-clúester. En las gráficas se muestra que los resultados son esencialmente consistentes para $L = 32$ y $L = 64$, pero los resultados son incompatibles para $L = 128$.

Conforme aumenta el tamaño de la retícula, el valor de ν se aproxima al valor en el continuo. El exponente crítico ν real se define en la extrapolación termodinámica $L \rightarrow \infty$, por lo tanto se espera que la mejor aproximación al valor de ν se de para $L = 128$ en el rango de temperaturas más bajo posible. En la tabla 7.2 se resumen los valores de ν para los diferentes algoritmos de actualización. Los resultados son consistentes para $L = 32, 64$. En contraste los resultados para $L = 128$ no fueron compatibles entre los diferentes algoritmos de actualización. Una posible causa de la incompatibilidad es que la retícula de longitud $L = 128$ requiere de un número considerablemente mayor de actualizaciones entre cada medición para obtener configuraciones estadísticamente independientes en bajas temperaturas. Si el espaciado de 100 barridos entre cada configuración no fue suficiente, entonces el promedio de longitud de correlación entre configuraciones parcialmente relacionadas

afecta los resultados para $L = 128$. La segunda mejor opción es usar el promedio de los exponentes críticos para $L = 64$ ya que en esta retícula los resultados son consistentes. Realizando el cálculo se obtiene el resultado para el exponente crítico $\nu = 1.2(3)$.

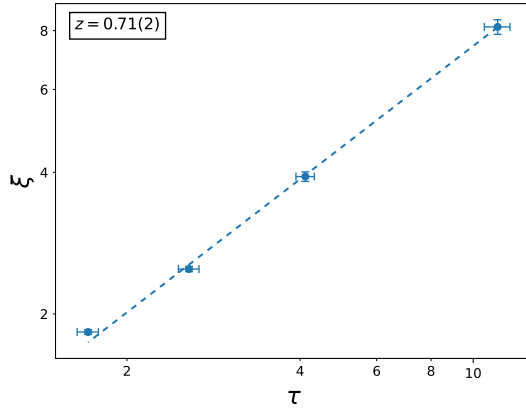
Algoritmo	$L = 32$	$L = 64$	$L = 128$
Metropolis lexicográfico	0.9(3)	1.2(3)	1.59(4)
Metropolis aleatorio	1.1(1)	1.1(2)	0.7(4)
Glauber lexicográfico	1.0(2)	1.2(5)	1.5(2)
Glauber aleatorio	1.0(2)	1.2(3)	1.2(4)
Multi-clúster	1.0(1)	1.2(4)	1.13(9)

Tabla 7.2: Exponente crítico ν para los diferentes algoritmos de actualización en las retículas cuadradas de longitud $L = 32, 64, 128$.

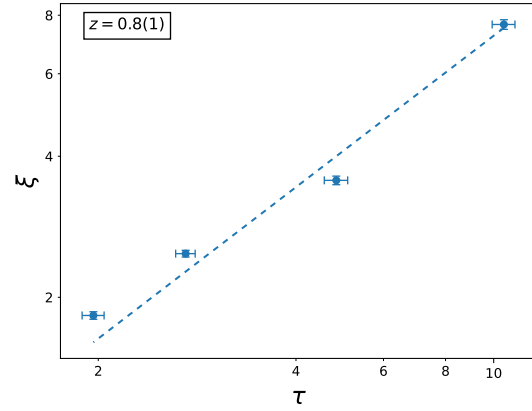
7.3. Exponente crítico dinámico

En el tercer experimento numérico, se calculó el exponente crítico dinámico z a partir de las longitudes de correlación y los tiempos de auto-correlación. Además se calculó el exponente ζ a partir de los exponentes críticos ν y z . Se consideró una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$ y las temperaturas $T = 0.7, 0.8, 0.9, 1$. Como se explico en el primer experimento, la eficiencia del algoritmo multi-clúster impidió la medición del tiempo de auto-correlación para la carga topológica y la energía, pero si fue posible para la magnetización debido a su alto tiempo de auto-correlación. Por ese motivo en esta sección tampoco se considera la carga topológica y la energía en el algoritmo multi-clúster para el cálculo del exponente crítico dinámico z . En las figuras 7.3.1, 7.3.2 y 7.3.3, en las gráficas se muestra la relación entre el tiempo de auto-correlación y la longitud de correlación para los diferentes algoritmos de actualización. Se observa que conforme el tiempo de auto-correlación aumenta, la longitud de correlación también aumenta. El exponente crítico z se calculó siguiendo la relación

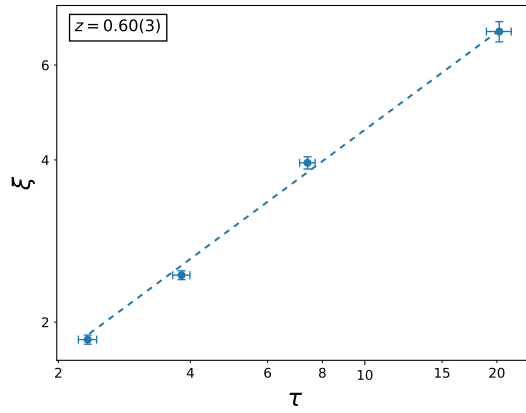
$$\tau \propto \xi^z. \quad (7.3.1)$$



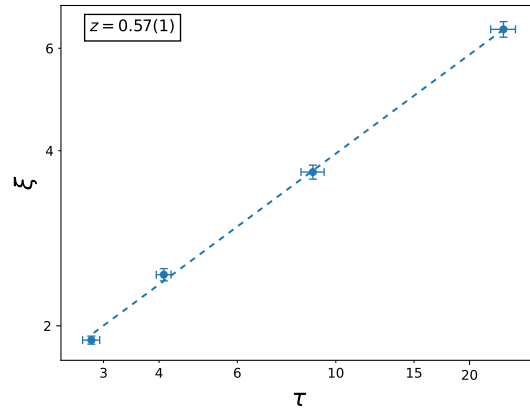
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.

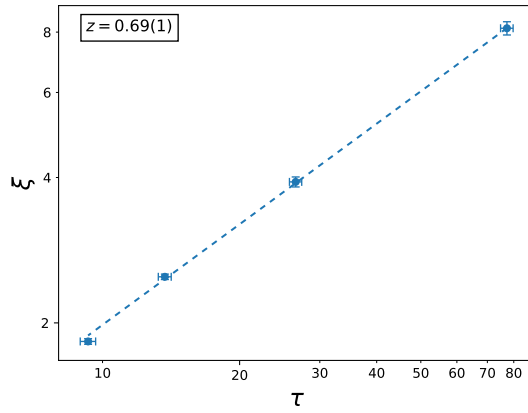


(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

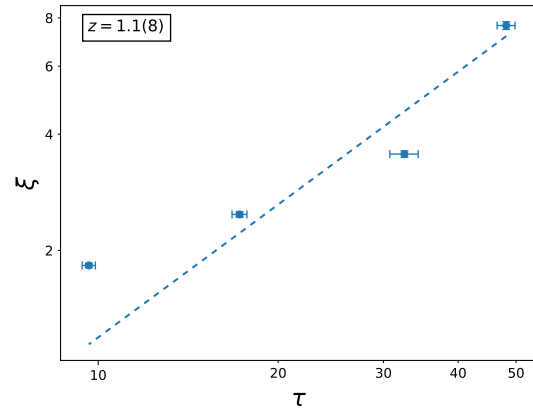


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

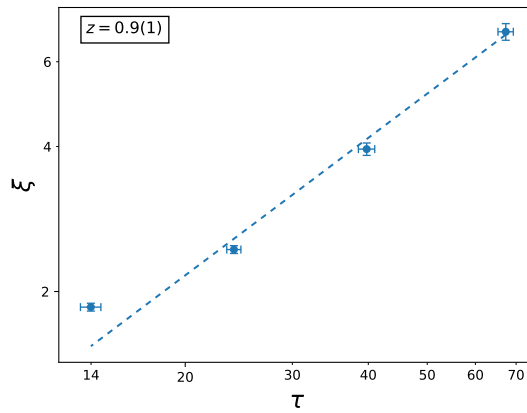
Figura 7.3.1: Tiempo de auto-correlación τ de la carga topológica Q vs. la longitud de correlación en una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$, en el rango de temperaturas $[0.7, 1.0]$. En las gráficas se observa como los datos obtenidos siguen la relación (7.3.1).



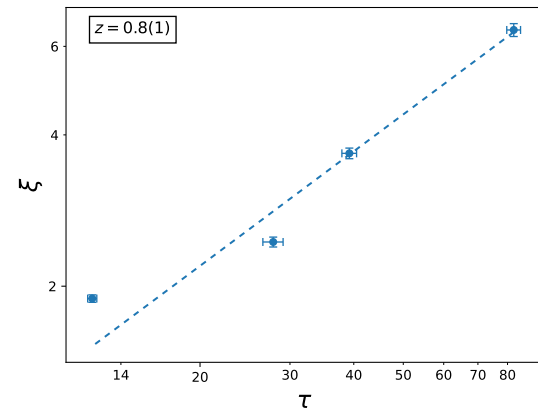
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.

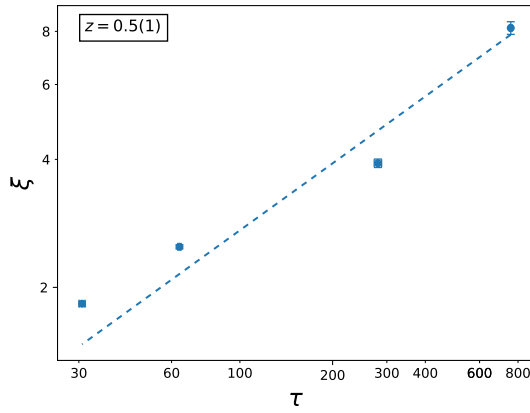


(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

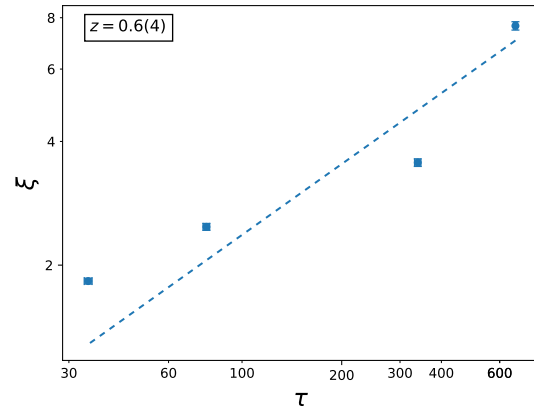


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

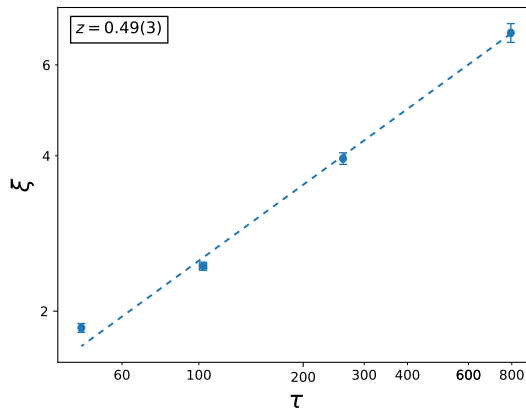
Figura 7.3.2: Tiempo de auto-correlación τ de la energía \mathcal{H} vs. la longitud de correlación ξ en una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$, en el rango de temperaturas $[0.7, 1.0]$, la relación (7.3.1) se sigue cumpliendo pero los valores del tiempo de auto-correlación aumentan considerablemente.



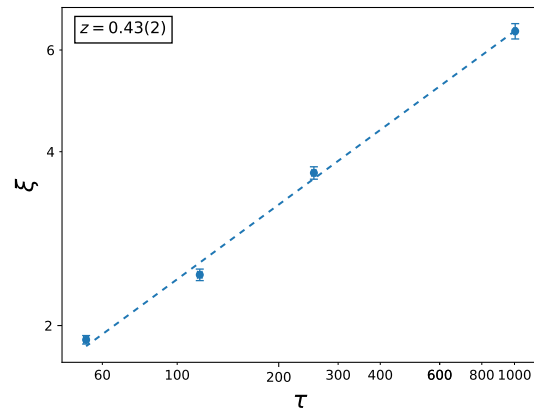
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



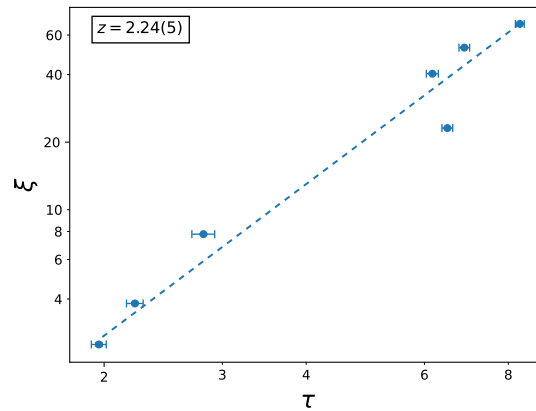
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.



(e) Algoritmo multi-clúster.

Figura 7.3.3: Tiempo de auto-correlación τ de la magnetización M vs. la longitud de correlación ξ en una retícula de tamaño $V = 64 \times 64$. El rango de temperaturas $[0.7, 1.0]$ para los algoritmos locales y $[0.3, 0.9]$ para el algoritmo multi-clúster. La relación (7.3.1) se sigue cumpliendo. Los valores del tiempo de auto-correlación aumentan considerablemente para los algoritmos de actualización locales y se mantienen bajos para el algoritmo multi-clúster.

Los resultados mostrados en las gráficas se resumen en la tabla (7.3). El exponente z no es compatible para los diferentes algoritmos, pero es compatible entre las variantes aleatoria y lexicográfica. La discrepancia entre los valores del exponente z se explica por la diferencia en las definiciones de barrido de actualización para cada algoritmo. El valor más alto corresponde a la magnetización del algoritmo multi-clúster.

Algoritmo	Q	\mathcal{H}	M
Metropolis lexicográfico	0.71(2)	0.69(1)	0.5(2)
Metropolis aleatorio	0.8(1)	1.1(7)	0.6(5)
Glauber lexicográfico	0.60(3)	0.9(1)	0.49(2)
Glauber aleatorio	0.56(1)	0.8(1)	0.43(2)
Multi-clúster	-	-	2.24(5)

Tabla 7.3: Exponente crítico dinámico z para la carga topológica Q , la energía \mathcal{H} y la magnetización M .

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

$$\zeta = \frac{2\nu}{1 + \nu z}. \quad (7.3.2)$$

El exponente $\nu = 1.2(3)$ se obtiene de la sección anterior como el promedio de los resultados para $L = 64$. Para los algoritmos Metropolis y Glauber, se promedia entre sus dos variantes para obtener los exponentes z , los resultados se registraron en la tabla 7.4. Los resultados son compatibles para las tres observables entre los algoritmos Metropolis y Glauber, pero es incompatible con el resultado para el algoritmo multi-clúster.

La relación funciona para una temperatura menor a la crítica, por lo que no es sorpresa que no se cumpla en el modelo 2d $O(3)$, ya que no hay ruptura espontánea de simetría para $T > 0$. Aun así los valores obtenidos son compatibles entre los algoritmos Metropolis y Glauber. En el siguiente capítulo se medirá directamente el exponente ζ permitiendo comparar su valor en el experimento numérico fuera del equilibrio con la predicción teórica calculada en el experimento numérico en equilibrio.

Algoritmo	Q	\mathcal{H}	M
Metropolis	1.3(4)	1.2(6)	1.5(8)
Glauber	1.5(4)	1.3(4)	1.6(5)
Multi-clúster	-	-	0.7(4)

Tabla 7.4: Promedio de los valores calculados para el exponente crítico ζ usando la ec. (7.3.2) en el mecanismo de Kibble-Zurek. Las observables son: la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización.

Capítulo 8

Simulación de enfriamientos rápidos

Un enfriamiento rápido, se da cuando un sistema pasa de una temperatura inicial T_i a una temperatura final $T_f < T_i$ en un tiempo t tal que el sistema sale del equilibrio térmico. La simulación de un enfriamiento se realiza bajando la temperatura del sistema entre cada barrido de actualizaciones. El decremento de la temperatura entre cada barrido define la velocidad del enfriamiento de acuerdo a la formula

$$v_{\text{cool}} = \frac{T_i - T_f}{\tau_{\text{cool}}}. \quad (8.0.1)$$

La variable τ_{cool} es la tasa inversa de cambio de temperatura o tasa inversa de enfriamiento: corresponde al número de barridos 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

$$T(t) = T_i - v_{\text{cool}}t. \quad (8.0.2)$$

Una simulación de enfriamiento consta de los siguientes pasos:

1. Se genera una configuración en equilibrio termodinámico a temperatura T_i .
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 $T > T_f$, se regresa al paso 2.

Al igual que en las simulaciones en equilibrio, el valor esperado aproximado requiere de 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

En esta sección se investiga si en un modelo donde la temperatura crítica es $T_c = 0$ se cumple la ley de escalamiento dada por el mecanismo de Kibble-Zurek

$$\chi_t \propto \tau_{\text{cool}}^{-\zeta}, \quad (8.1.1)$$

Se realizaron simulaciones numéricas de enfriamientos que se acercan a (pero no pueden cruzar) la temperatura crítica para los diferentes algoritmos de actualización y se midieron los valores esperados de la susceptibilidad topológica χ_t , la densidad de energía $\langle h \rangle$ y la magnetización $\langle M \rangle$.

Para cada experimento numérico se realizaron 10^5 enfriamientos desde la temperatura $T_i = 4$ hasta $T_f = 0$, usando las tasas inversas de enfriamiento

$$\tau_{\text{cool}} = 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18.$$

. En cada enfriamiento se midió la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización. En la figura 8.1.1 se muestra la evolución de la susceptibilidad topológica, la densidad de energía y la magnetización vs. la temperatura, los enfriamientos se realizaron usando barridos del algoritmo de Metropolis lexicográfico y las tasas inversas de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} = 8, 10, 16$. En las gráficas se observa como la susceptibilidad topológica y la energía disminuyen conforme la temperatura disminuye. Al llegar a la temperatura $T = 0$ tanto la energía como la susceptibilidad topológica deberían ser nulas, en cambio en los enfriamientos rápidos resultan en valores $\chi_t > 0$ y $\langle h \rangle > 0$ para $T = 0$. La magnetización se comporta de una forma diferente, conforme disminuye la temperatura la magnetización aumenta. En un enfriamiento adiabático el sistema alcanzaría la magnetización máxima al llegar a la temperatura $T = 0$, en cambio en enfriamientos rápidos la magnetización final se mantiene por debajo de la magnetización máxima.

En la figura 8.1.2 se muestra la evolución de la susceptibilidad topológica χ_t vs. la tasa inversa de enfriamiento τ_{cool} para los diferentes algoritmos, en la figura 8.1.4 se muestran gráficas de evolución similares para la densidad de energía y en la figura 8.1.6 se considera la magnetización. El ultimo punto en cada trayectoria es el valor final en la temperatura $T = 0$, para la susceptibilidad topológica el valor final es χ_{t_f} , para la densidad de energía es $\langle h \rangle_f$ y para la magnetización $\langle M \rangle_f$. Las trayectorias de las tasas inversas $\tau_{\text{cool}} = 8$ resultan en el valor final más alto en las gráficas para la susceptibilidad topológica χ_t , debido a la velocidad del enfriamiento, se forman sectores de la retícula que mantienen una susceptibilidad topológica por encima de cero. Conforme la tasa inversa de enfriamiento aumenta las trayectorias seguidas por las observables se aproximan a las de un enfriamiento adiabático. Las gráficas de la evolución de la energía muestran un comportamiento similar en el que el valor final $\langle h \rangle_f$ es mayor a cero. En el caso de la magnetización los enfriamientos rápidos evitan la formación normal de espines alineados bajando la magnetización final $\langle M \rangle_f$. En la figuras 8.1.3, 8.1.5 y 8.1.7 se muestran los valores finales para las diferentes tasas inversas de enfriamiento. En las gráficas se observa que los resultados siguen la relación (8.1.1).

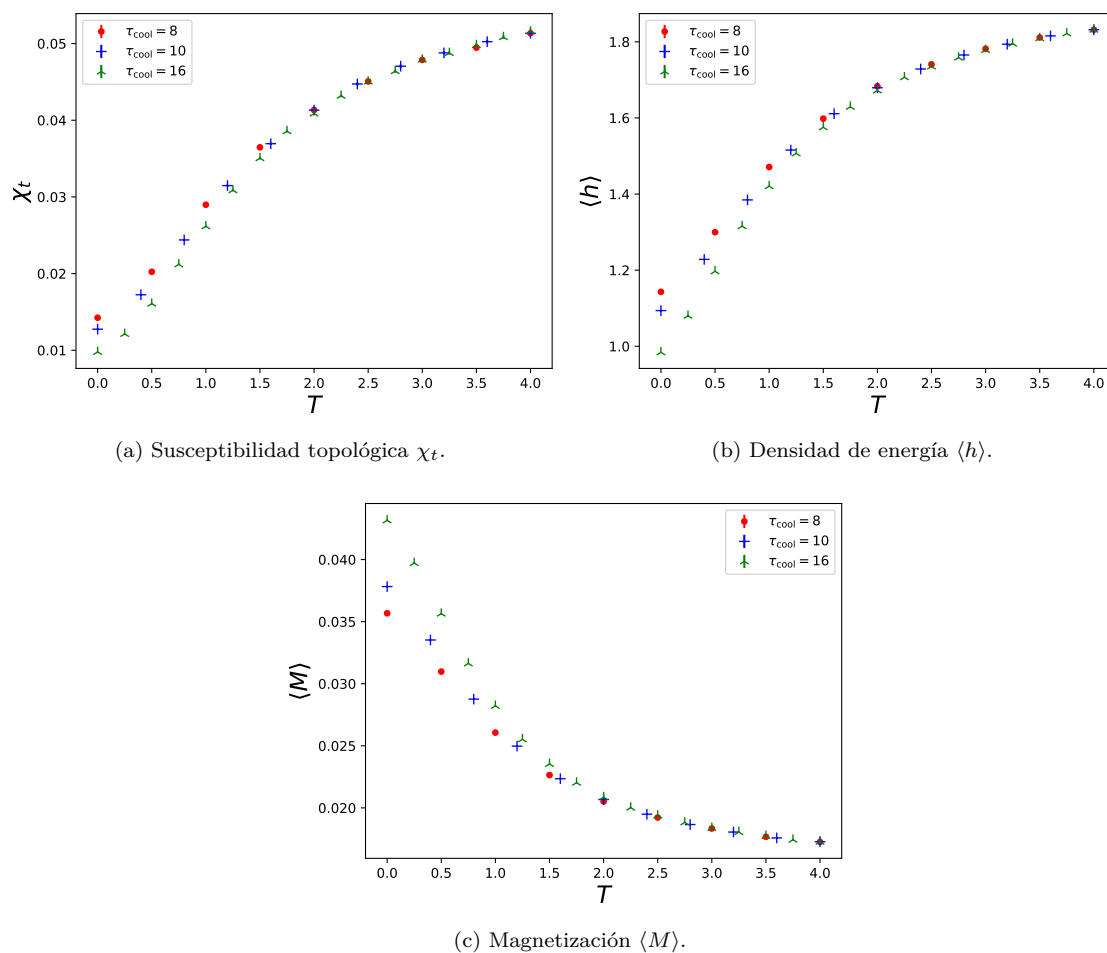
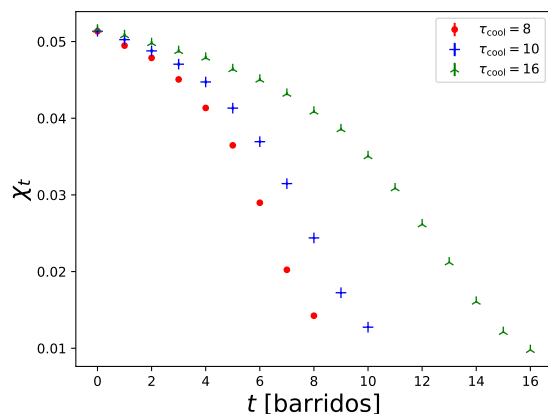
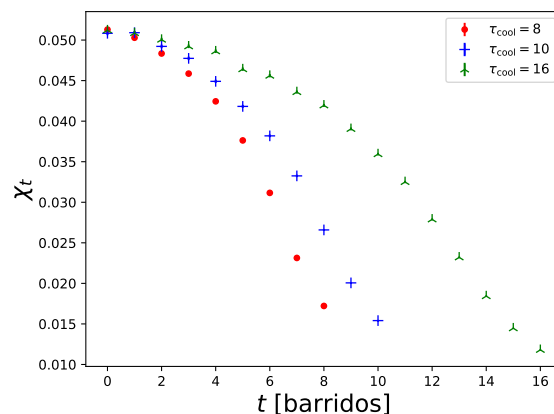


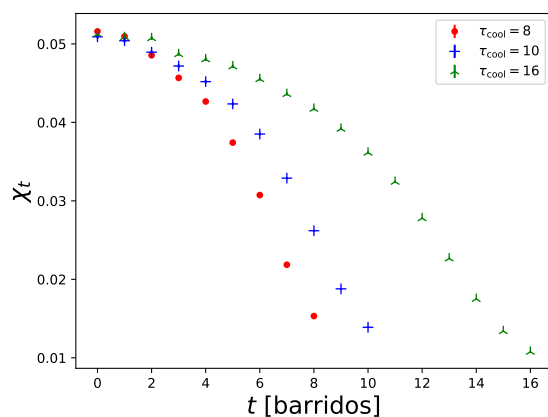
Figura 8.1.1: Evolución de los enfriamientos de la susceptibilidad topológica χ_t , la densidad de energía $\langle h \rangle$ y la magnetización $\langle M \rangle$ respecto a la temperatura T , para diferentes tasas inversas de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 10, 16\}$. Los barridos de actualización corresponden al algoritmo de Metropolis lexicográfico.



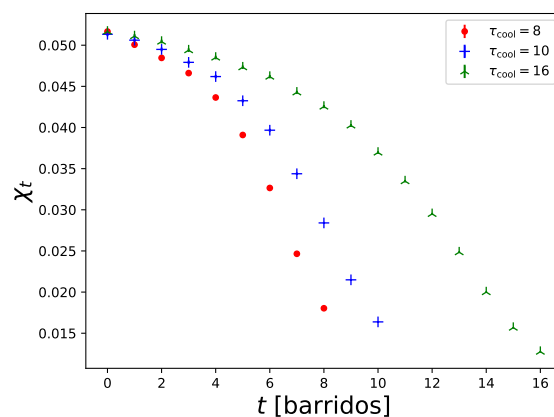
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



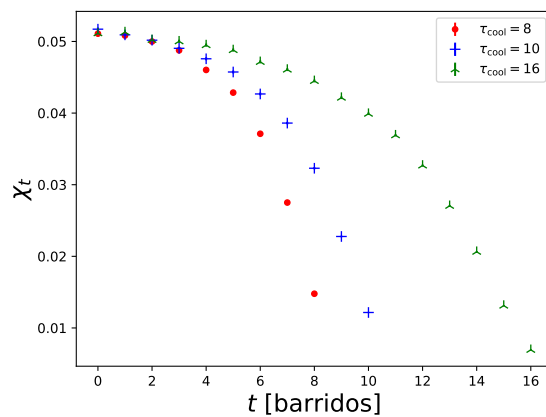
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

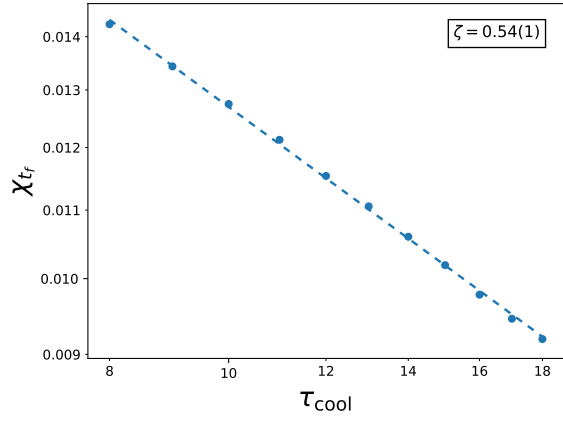


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

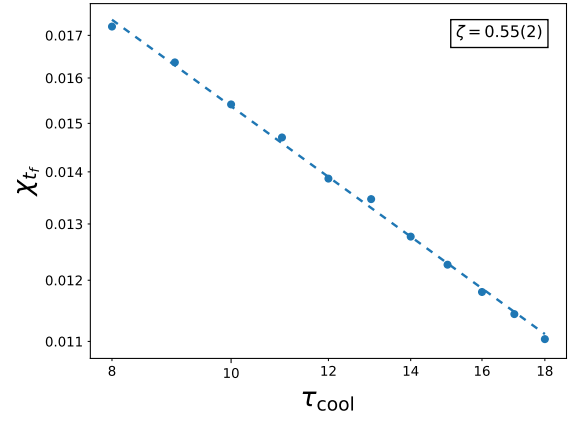


(e) Algoritmo multi-clúster.

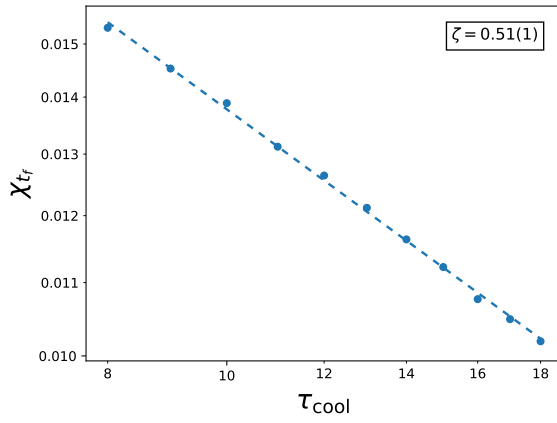
Figura 8.1.2: Evolución de la susceptibilidad topológica χ_t respecto al tiempo de Markov t en unidades de barridos. En las tasas inversas de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 10, 16\}$.



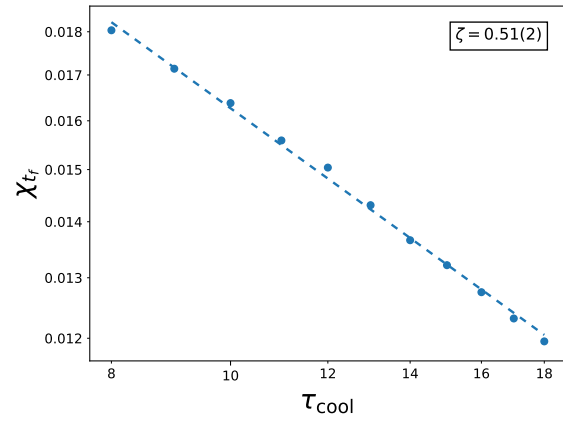
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



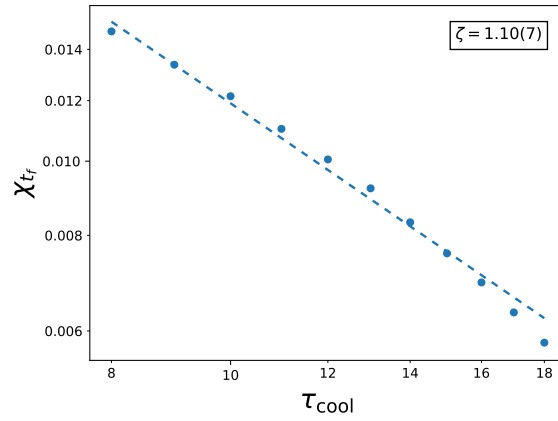
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

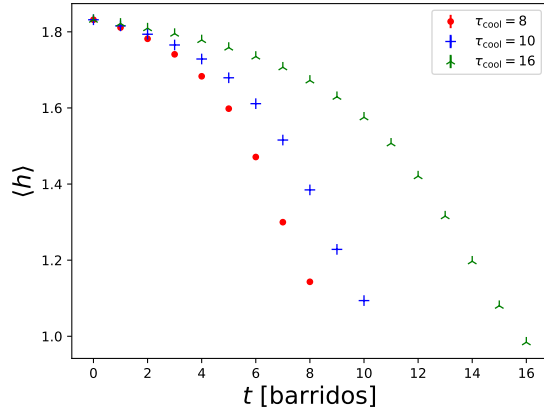


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

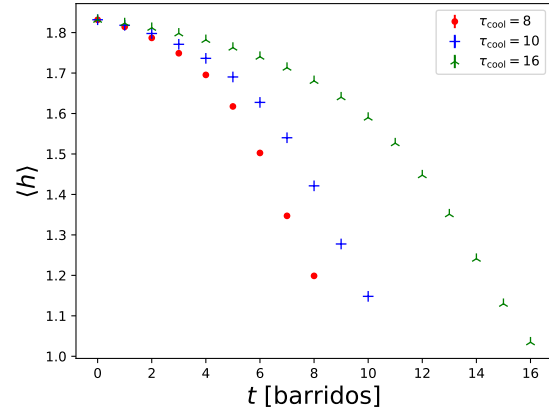


(e) Algoritmo multi-clúster.

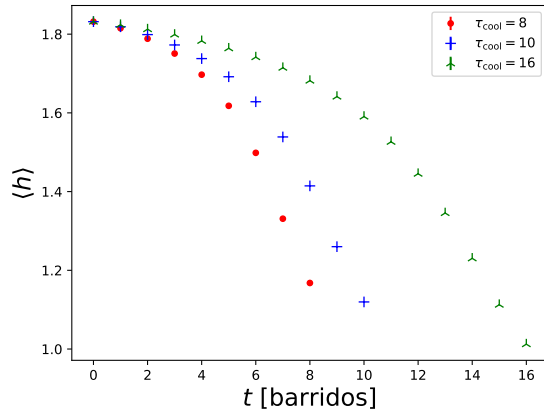
Figura 8.1.3: Susceptibilidad topológica final χ_{t_f} vs. la tasa inversa de enfriamiento τ_{cool} .



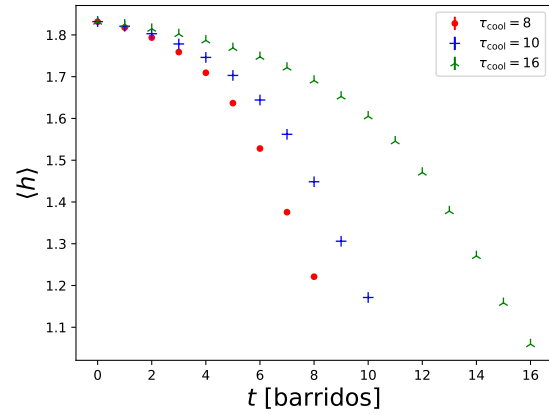
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



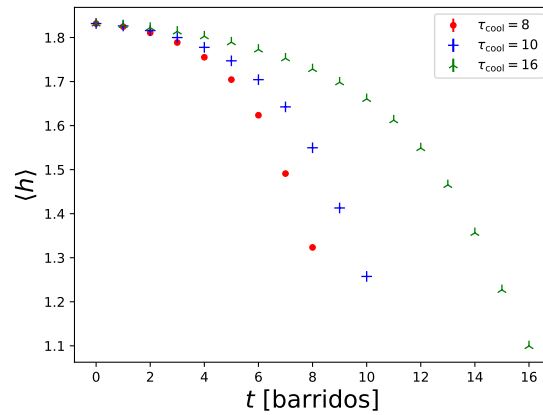
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

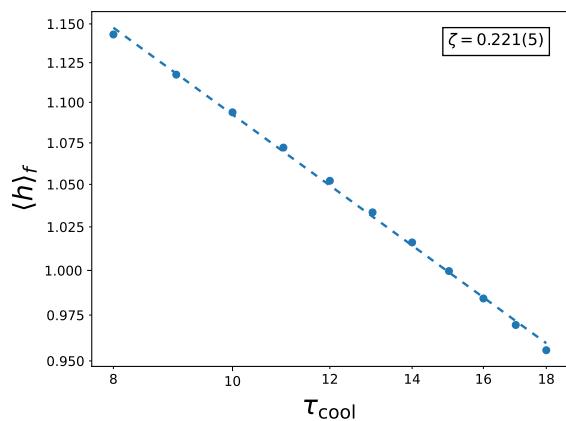


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

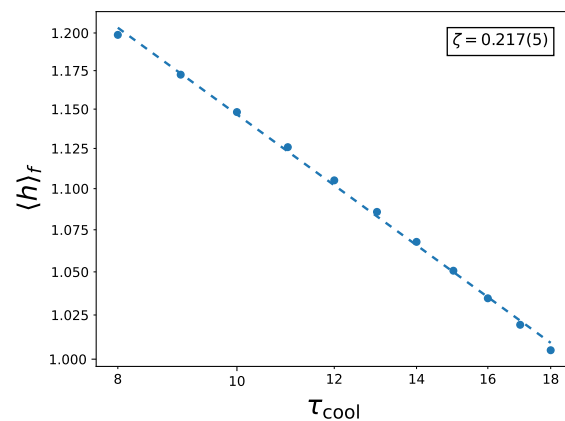


(e) Algoritmo multi-clúster.

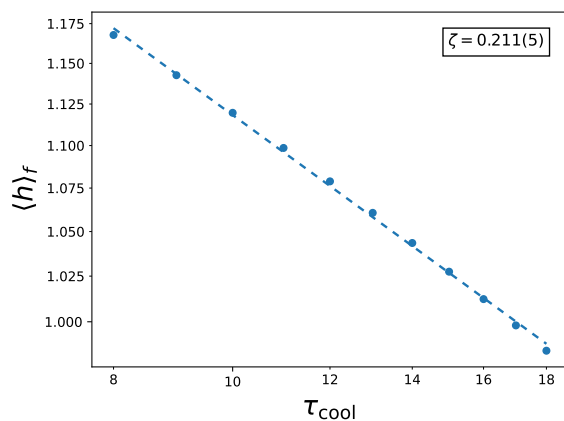
Figura 8.1.4: Evolución de la densidad de energía $\langle \mathcal{H} \rangle$ respecto al tiempo de Markov t en unidades de barridos. Para las tasas inversas de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 10, 16\}$.



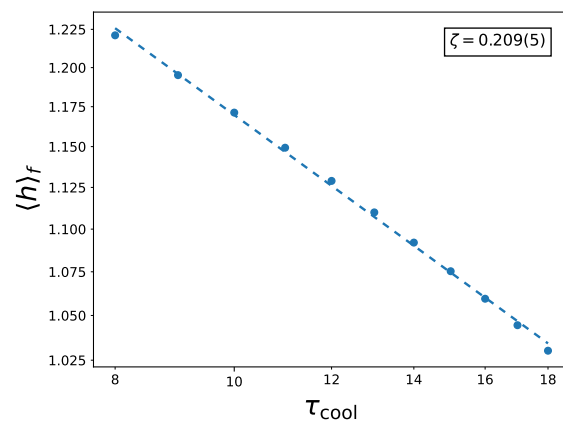
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



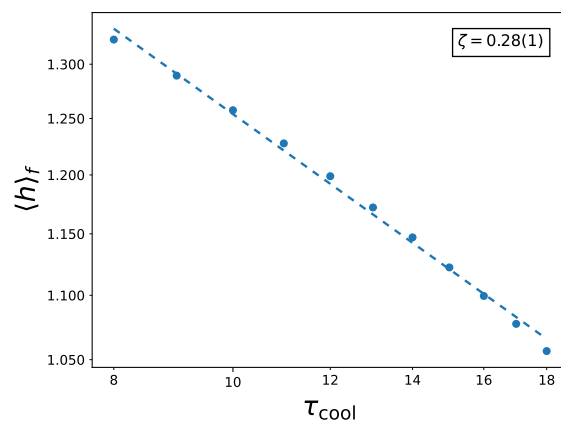
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

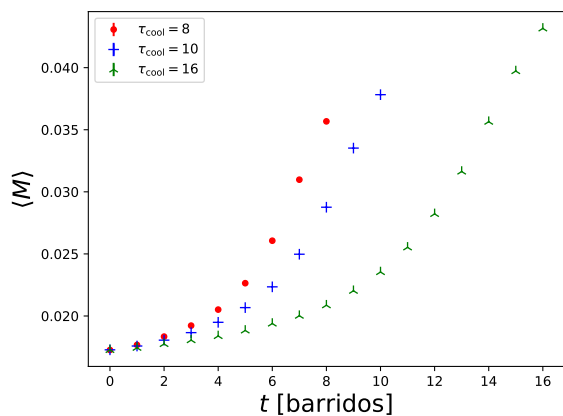


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

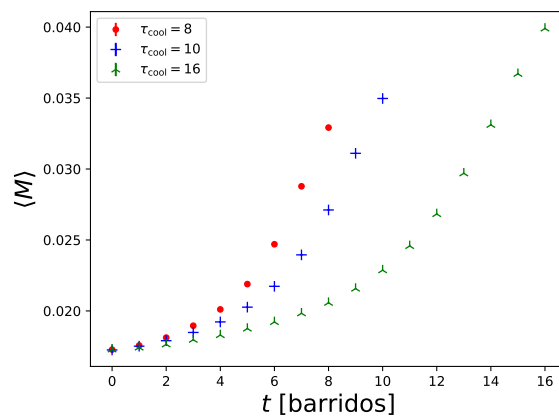


(e) Algoritmo multi-clúster.

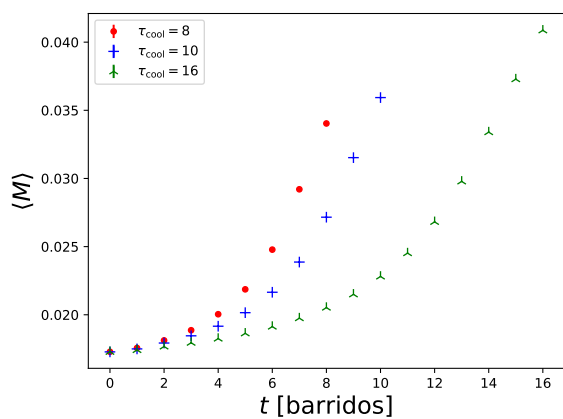
Figura 8.1.5: Densidad de energía final $\langle h \rangle_f$ vs. la tasa inversa de enfriamiento τ_{cool} .



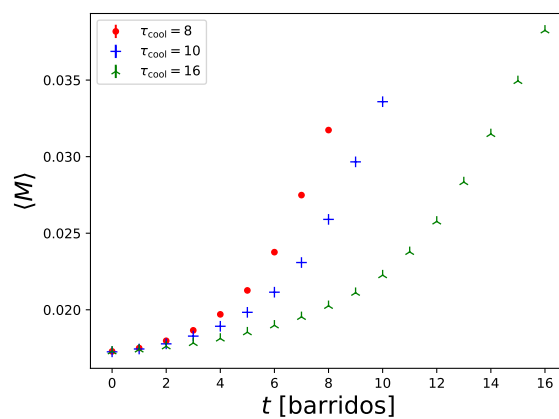
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



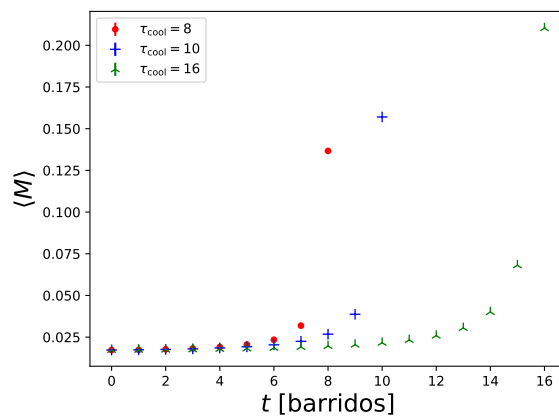
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

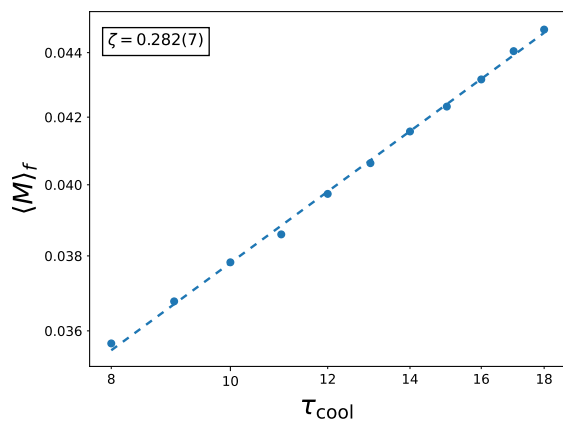


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

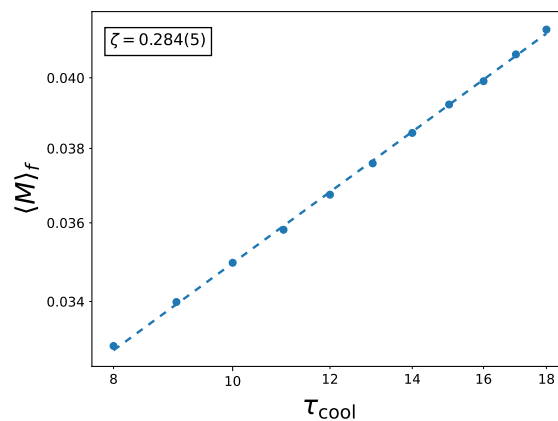


(e) Algoritmo multi-clúster.

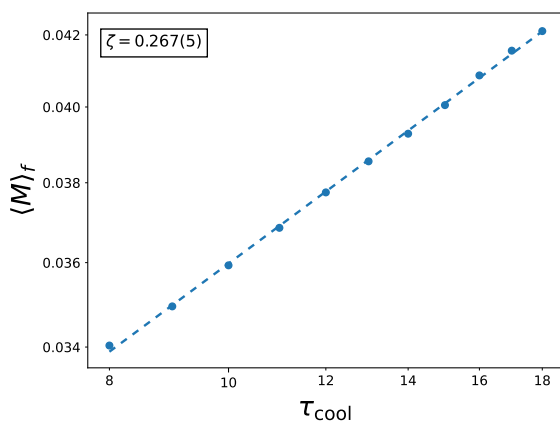
Figura 8.1.6: Evolución de los enfriamientos de la magnetización $\langle M \rangle$ respecto al tiempo de Markov t en unidades de barridos. Para las tasas inversas de enfriamiento $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8\}$.



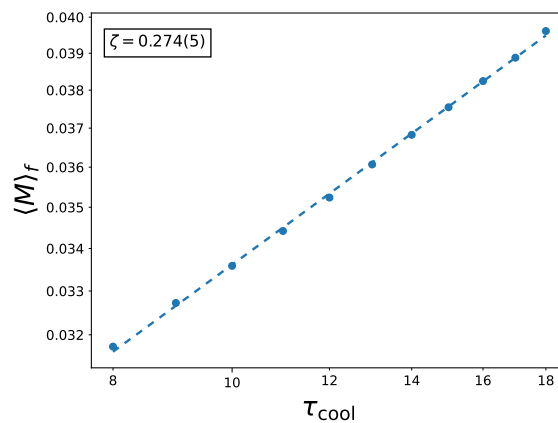
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



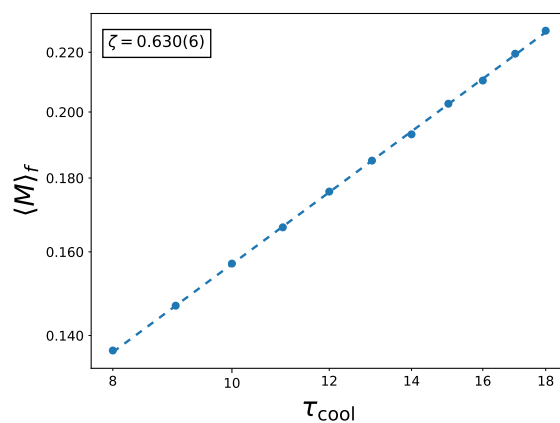
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.



(e) Algoritmo multi-clúster.

Figura 8.1.7: Magnetización final $\langle M \rangle_f$ vs. la tasa inversas de enfriamiento τ_{cool} .

Los resultados de los ajustes se registraron en la tabla 8.1. En los resultados se observa que el exponente crítico ζ es menor para los algoritmos de actualización local, los valores más bajos se obtienen del ajuste para la energía final en las dos variantes del algoritmo de Glauber. En contraste el valor mas alto es el ajuste de la susceptibilidad topológica final para el algoritmo multi-clúster. También se observa que los ajustes son compatibles entre las dos variantes del algoritmo de Metropolis para la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización. De la misma manera los ajustes de las dos variantes del algoritmo Glauber, son compatibles para las tres observables indicando que la inclinación del ajuste depende del algoritmo de actualización. Este resultado refuerza la idea de que la discrepancia en los resultados se debe a la diferencia en el comportamiento de los barridos de actualización de los diferentes algoritmos. Aunque las variantes lexicográfica y aleatoria cambian el orden de selección de los espines, el cambio del tempo de auto-correlación con la temperatura es similar para las dos variantes.

Algoritmo	Q	\mathcal{H}	M
Metropolis lexicográfico	0.54(1)	0.221(5)	0.282(7)
Metropolis aleatorio	0.55(2)	0.217(5)	0.284(5)
Glauber lexicográfico	0.51(1)	0.211(5)	0.267(5)
Glauber aleatorio	0.51(2)	0.209(5)	0.274(5)
multi-clúster	1.10(7)	0.28(1)	0.630(6)

Tabla 8.1: Exponentes críticos ζ de la susceptibilidad topológica, la energía y la magnetización en los diferentes algoritmos.

Capítulo 9

Resumen y conclusiones

Se realizaron simulaciones del modelo 2d $O(3)$, usando los siguientes algoritmos: Metropolis lexicográfico, Metropolis aleatorio, Glauber lexicográfico, Glauber aleatorio y multi-cluster. Se realizaron dos tipos de experimentos numéricos, el primer tipo consistió en simulaciones numéricas en equilibrio, se midieron los exponentes νz , ν y el exponente crítico dinámico z . Se obtuvo un resultado consistente del exponente $\nu = 1.2(4)$ para todos los algoritmos de actualización. Usando los exponentes críticos se calculo el mecanismo de Kibble-Zurek y se obtuvieron los resultados de la tabla 7.4. Los resultados fueron compatibles entre los algoritmos de actualización local. En cambio la eficiencia del algoritmo multi-clúster impidió el cálculo de ζ para la carga topológica y la energía pero el alto tiempo de auto-correlación de la magnetización permitió la medición de νz y del exponente crítico dinámico z usando el algoritmo multi-clúster.

El segundo tipo de experimentos numéricos se realizo fuera del equilibrio termodinámico y consistió en una serie de enfriamientos. Se registro la evolución temporal en función de las diferentes tasas de enfriamiento τ_{cool} de la susceptibilidad topológica, la densidad de energía y la magnetización. Se tomaron los resultados finales (en temperatura $T = 0$) de las trayectorias de evolución y se gráfcaron los valores finales vs. las tasas de enfriamiento. A partir de los resultados se calculo el valor ζ para los diferentes algoritmos de actualización.

Los exponentes ζ obtenidos a partir de los experimentos en equilibrio resultaron en todos los casos en valores mayores a los exponentes obtenidos en los enfriamientos. No es una sorpresa que los valores no sean compatibles. El mecanismo de Kibble-Zurek se plantea en sistemas donde ocurre una ruptura de la simetría por cruzar la temperatura crítica T_c . En los experimentos numéricos realizados, no se cruzó una temperatura crítica debido a que esta corresponde al valor $T_c = 0$. Aunque el modelo 2d $O(3)$ no permite el paso por debajo de la temperatura crítica, fue posible ajustar una ley de escalamiento para las observables de susceptibilidad topológica, energía y magnetiza-

Algoritmo	Q	\mathcal{H}	M
Metropolis	0.53(1)	0.219(5)	0.283(6)
Glauber	0.51(2)	0.210(6)	0.271(5)
Muti-clúster	1.10(6)	0.28(1)	0.630(6)

Tabla 9.1: Valores de los exponentes críticos ζ medidos en los enfriamientos.

ción en los enfriamientos. Los resultados para las diferentes observables cumplieron con la relación (8.1.1). Los ajustes resultan en exponentes ζ compatibles respecto a la misma observable pero difieren entre los diferentes algoritmos. Sin embargo los resultados son cercanos para los algoritmos de actualización local, es un resultado esperado ya los barridos de actualización son similares entre los algoritmos Metropolis y Glauber. En cambio en el algoritmo multi-clúster se definen barridos de actualización fundamentalmente diferentes, no hay una equivalencia obvia entre los barridos de actualización locales y multi-clúster.

En el caso del algoritmo multi-cluster no fue posible medir un exponente crítico dinámico z para la carga topológica y la magnetización debido a su efectividad. La información sobre el tiempo de auto-correlación recopilada en los experimentos numéricos, indica que la alta eficiencia del algoritmo multi-clúster dificulta la medición de algunos exponentes críticos. Además, los enfriamientos rápidos en bajas tasa de enfriamiento del algoritmo multi-cluster son equivalentes a tasas elevadas de enfriamiento en los algoritmos locales, considerando estas características los algoritmos locales parecen más apropiados para la simulación de enfriamientos rápidos. No fue posible calcular el exponente ζ a partir de los experimentos en equilibrio de la susceptibilidad topológica y la energía para el algoritmo multi-clúster, por lo que no se pudo confirmar una compatibilidad entre los resultados obtenidos en equilibrio y los enfriamientos. Sin embargo, sí fue posible medir el exponente crítico ζ para la magnetización resultando en una ley de escalamiento para enfriamientos en el rango de temperaturas $[4, 0]$. En resumen se observaron tres leyes de escalamiento, todos los enfriamientos condujeron a exponentes ζ compatibles con el mecanismo de Kibble-Zurek, pero las diferencias en la definición de barridos de actualización tuvieron como consecuencia diferencias en los valores de los exponentes ζ .

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 punto en la esfera S^2 se puede escribir como

$$\vec{s} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (\text{A.0.1})$$

donde $\theta \in [0, \pi]$ y $\phi \in [0, 2\pi)$ son ángulos esféricos aleatorios. Un primer intento para generar puntos aleatorios y uniformemente distribuidos, es generar una distribución aleatoria y uniforme de ángulos θ_r, ϕ_r en los intervalos $[0, \pi]$ y $[0, 2\pi)$. Sin embargo, si se generan puntos 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 $1/(4\pi)$. Entonces la integral de la densidad de probabilidad sobre el área de la esfera es

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta d\phi = \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \right) \left(\frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \right) = 1. \quad (\text{A.0.2})$$

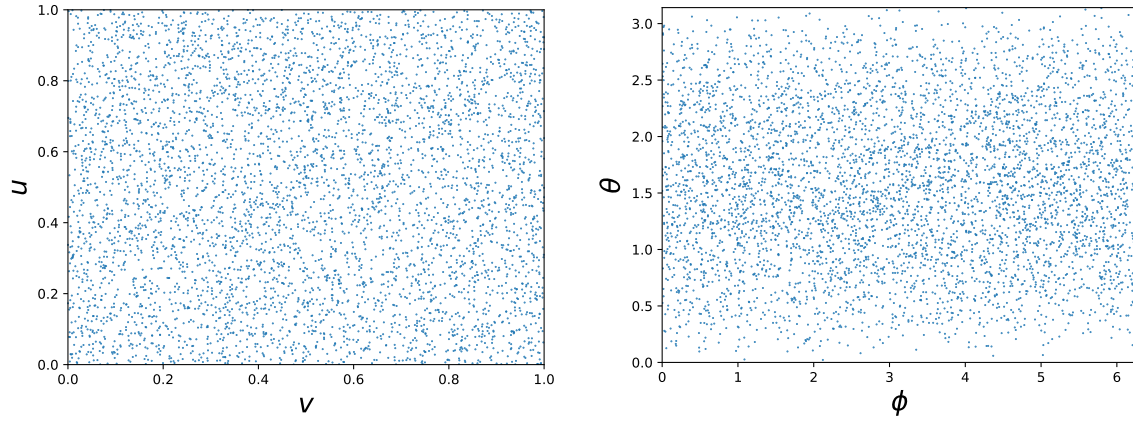
Se separa la distribución de probabilidad de vectores en la esfera, en dos distribuciones de probabilidad U, V para las variables aleatorias θ, ϕ definidas como

$$U(\theta) = \frac{1}{2} \int_0^\theta \sin \theta' d\theta' = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta), \quad V(\phi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\phi d\phi' = \frac{\phi}{2\pi}. \quad (\text{A.0.3})$$

Se definen las variables aleatorias u, v tales que su función de distribución son las variables aleatorias

$$\theta = \arccos(1 - 2u), \quad \phi = 2\pi v, \quad (\text{A.0.4})$$

donde $u, v \in (0, 1)$. Recapitulando los pasos para generar un vector aleatorio en la esfera son los siguientes:



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

Figura A.0.1: En la figura (a) se tiene una distribución de puntos uniforme y aleatoria, la distribución (a) se mapea en la figura (b) en las variables θ, ϕ , de esta forma se obtiene la distribución que genera vectores aleatorios y uniformemente distribuidos en la esfera.

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

$$\vec{s}_r = (\sin \theta_r \cos \phi_r, \sin \theta_r \sin \phi_r, \cos \theta_r). \quad (\text{A.0.5})$$

Dada una esfera S^2 y un vector \vec{s}_0 , el siguiente objetivo es 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 . La región R se define como

$$R = \{\vec{s} \in S^2 | d(\vec{s}, \vec{s}_0) \leq \alpha_{\max}\}, \quad (\text{A.0.6})$$

donde $d(\vec{s}, \vec{s}_0)$ es la distancia esférica entre \vec{s} y \vec{s}_0 , R es la región sobre la esfera limitada por la distancia esférica máxima $\alpha_{\max} = \arccos(1 - 2u_{\max})$ con el centro \vec{s}_0 . El valor u_{\max} ajusta el área de la esfera que se cubre, si $u_{\max} = 1$ entonces $\alpha = \pi$ y la región que se cubre es la totalidad de la esfera.

Pasos para generar un vector aleatorio en R :

1. 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.
2. Se calcula un vector ortonormal al plano formado por \vec{s}_0 y \vec{r} siguiendo la ecuación

$$\vec{k} = \frac{\vec{s}_0 \times \vec{r}}{\|\vec{s}_0 \times \vec{r}\|}.$$

3. Se 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}_0 es de la forma

$$\vec{s}_r = \vec{s}_0 \cos \alpha_r + (\vec{k} \times \vec{s}_0) \sin \alpha_r. \quad (\text{A.0.7})$$

La ventaja de generar vectores en un cono sobre la esfera con esta fórmula es que el número de cálculos es menor que los que se harían al generar vectores en un cono sobre el eje z y aplicar una rotación, disminuyendo considerablemente el tiempo de cómputo cuando se generan millones de vectores aleatorios.

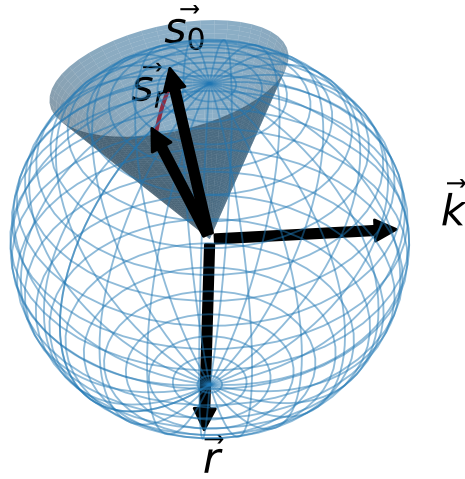


Figura A.0.2: Rotación de un espín \vec{s} respecto al eje de rotación \vec{k} en dirección \vec{r} . El espín resultante cae dentro del cono delimitado por α_{\max} .

Apéndice B

Algoritmo Hoshen-Kopelman

El algoritmo de Hoshen-Kopelman fue introducido por Joseph Hoshen y Raoul Kopelman en 1976 [29]. Este algoritmo describe cómo etiquetar los sitios de la retícula en sus respectivos clústeres a partir de una función de vínculo. Es considerablemente más eficiente que otros métodos de formación de clústeres. A diferencia de algoritmos en los que el número de cálculos crece cuadráticamente con el volumen, en el caso de Hoshen-Kopelman dicho crecimiento es lineal.

La definición de clúster que consideraremos en este apartado es la mencionada en el Capítulo 9 de esta tesis. Consideremos una red reticular con una configuración de espines asociados a cada sitio. Un vínculo directo puede ocurrir entre dos sitios vecinos, mientras que un vínculo indirecto se da entre sitios que no son vecinos pero que están conectados a un sitio común.

Para empezar, se realiza una clasificación en la que se indican los vínculos para cada sitio x . Por ejemplo, en una retícula cuadrada hay cuatro vecinos más cercanos. Para cada vecino un "1" indica un vínculo directo, mientras que un "0" indica que no hay vínculo. La función de vínculo $p(x_1, x_2)$ da la probabilidad de vínculo entre los sitios x_1 y x_2 .

Una vez determinados todos los vínculos, se realizan los siguientes pasos:

1. Se selecciona un sitio x y se comprueban sus vínculos directos.
 - a) Si no hay vínculos 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 vínculos directos, continua al paso 2.
2. Se comprueban los vínculos directos de los sitios vecinos. Todos los espines enlazados en la comprobación se etiquetan con un identificador α correspondiente a un clúster.
3. Se repiten los pasos anteriores etiquetando cada sitio de la retícula en sus respectivos clústeres.
4. En el proceso de formación de clústeres, habrá casos en los que a un sitio le corresponden dos o más etiquetas $\alpha_1, \dots, \alpha_n$, ya que hay un vínculo indirecto entre los clústeres. Los clústeres correspondientes se fusionan en uno y se les asigna la etiqueta α_1 . Este tipo de vínculo implica la posibilidad de que dos clústeres inicialmente distintos se unan mediante una conexión entre elementos que pertenecen a cada uno de ellos.

Una forma de optimizar la identificación de cústeres individuales es la ampliación por capas. Es importante diferenciar entre sitios en el interior de un clúster, sitios en la frontera de un clúster y sitios en el exterior.

- Un sitio está en el interior de un clúster si todos sus vecinos más cercanos pertenecen al mismo clúster.
- Un sitio está en la frontera si alguno de sus vecinos más cercanos no pertenece al clúster.
- Un sitio está en el exterior si ninguno de sus vecinos más cercanos pertenece al clúster.

Se parte de un clúster individual y se va extendiendo la frontera en cada paso hasta alcanzar el tamaño máximo del clúster, transformando los sitios de la frontera en sitios en el interior. Para evitar que un clúster se extienda indebidamente por el cálculo múltiple de una probabilidad de vínculo, solo se calculará una vez un vínculo entre un espín con el clúster. Esto se logra etiquetando los espines ya probados con una etiqueta. El proceso es el siguiente:

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

Este método es especialmente útil en la formación de un único clúster. La aplicación de este método al los algoritmos multi-clúster y single-cluster permite 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 et al., “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines,” *J. Chem. Phys.*, 21, 1087-1092, 1953.
- [2] R. P. Feynman, “Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics,” *Rev. Mod. Phys.*, 20, 367-387, 1948.
- [3] H. F. Trotter, “On the product of semi-groups of operators,” *Proc. Am. Math. Soc.*, 10, 545-551, 1959.
- [4] M. Creutz y B. Freedman, “A statistical approach to quantum mechanics,” *Ann. Phys.*, 132, 427-462, 1981.
- [5] A. Wipf, “Statistical approach to quantum field theory: an introduction,” *Springer*, 2013.
- [6] B. Berg y M. Lüscher, “Definition and statistical distributions of a topological number in the lattice $O(3)$ σ -model,” *Nucl. Phys.*, 190, 412-424, 1981.
- [7] W. Bietenholz, U. Gerber, M. Pepe y U.-J. Wiese, “Topological lattice actions,” *J. High Energy Phys.*, 2010, 20, 2010.
- [8] W. Bietenholz et al., “Topological susceptibility of the 2D $O(3)$ model under gradient flow,” *Phys. Rev.*, 98, 114501, 2018.
- [9] F. Eriksson, “On the Measure of Solid Angles,” *Math. Mag.*, 63, 184-187, 1990.
- [10] I. Todhunter, “Spherical Trigonometry,” *Macmillan And Company*, 1925.
- [11] J. M. Yeomans, “Statistical mechanics of phase transitions,” *Oxford University Press*, 1992.
- [12] D. Landau, “On the theory of phase transitions,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 7, 19-32, 1937.
- [13] L. P. Kadanoff, “Scaling laws for ising models near T_c ,” *Phys. Phys. Fiz.*, 2, 263-272, 1966.
- [14] S.-Z. Lin et al., “Topological defects as relics of emergent continuous symmetry and Higgs condensation of disorder in ferroelectrics,” *Nat. Phys.*, 10, 970-977, 2014.
- [15] N. D. Mermin y H. Wagner, “Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models,” *Phys. Rev. Lett.*, 17, 1133-1136, 1966.
- [16] J. M. Kosterlitz y D. J. Thouless, “Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. (Application of dislocation theory),” *J. Phys. Condens. Matter*, 5, 124-126, 1972.
- [17] R. Ciuca y O. F. Hernández, “Information theoretic bounds on cosmic string detection in CMB maps with noise,” *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 492, 1329-1334, 2020.

- [18] T. Kibble, "Phase-transition dynamics in the lab and the universe," *Phys. Today*, 60, 47-52, 2007.
- [19] T. Kibble, "Some implications of a cosmological phase transition," *Phys. Rep.*, 67, 183-199, 1980.
- [20] T. W. B. Kibble, "Topology of cosmic domains and strings," *J. Phys. A*, 9, 1387-1398, 1976.
- [21] W. H. Zurek, "Cosmological experiments in superfluid helium?" *Nat.*, 317, 505-508, 1985.
- [22] J. M. Kosterlitz, "Nobel Lecture: Topological defects and phase transitions," *Rev. Mod. Phys.*, 89, 4, 2017.
- [23] K. B. Athreya, H. Doss y J. Sethuraman, "On the convergence of the Markov chain simulation method," *Ann. Stat.*, 24, 69-100, 1996.
- [24] R. J. Glauber, "Time-Dependent Statistics of the Ising Model," *J. Math. Phys.*, 4, 294-307, 1963.
- [25] K. Binder y D. W. Heermann, "Monte Carlo Simulation in Statistical Physics," *Springer*, 1988.
- [26] R. H. Swendsen y J.-S. Wang, "Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations," *Phys. Rev. Lett.*, 58, 86-88, 1987.
- [27] U. Wolff, "Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems," *Phys. Rev. Lett.*, 62, 361-364, 1989.
- [28] F. Niedermayer, "General Cluster Updating Method for Monte Carlo Simulations," *Phys. Rev. Lett.*, 61, 2026-2029, 1988.
- [29] J. Hoshen y R. Kopelman, "Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm," *Phys. Rev. B*, 14, 3438-3445, 1976.