



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

FACULTAD DE CIENCIAS

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

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIATURA EN FÍSICA

P R E S E N T A :

MARCO ISRAEL RODRÍGUEZ CORNEJO

TUTOR

WOLFGANG PETER BIETENHOLZ



CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, 2024

# Índice general

<b>1. Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio</b>	<b>2</b>
<b>2. Acercamiento estadístico a la mecánica cuántica</b>	<b>3</b>
2.1. Propagador de evolución . . . . .	3
<b>3. Modelos de espín</b>	<b>7</b>
3.1. Los modelos $O(n)$ . . . . .	7
3.2. Modelo 2d $O(3)$ . . . . .	8
3.3. Observables . . . . .	10
3.3.1. Energía . . . . .	10
3.3.2. Magnetización . . . . .	11
3.3.3. Carga topológica . . . . .	11
<b>4. Métodos de Monte Carlo</b>	<b>14</b>
4.1. Algoritmo de Metropolis . . . . .	15
4.2. Algoritmo de Glauber . . . . .	16
4.3. Algoritmo cluster . . . . .	17
<b>5. Fenómenos críticos</b>	<b>19</b>
5.1. Transiciones de fase . . . . .	20
5.2. Función de correlación . . . . .	21
5.3. Escalamiento . . . . .	22
5.4. Universalidad . . . . .	23
<b>6. Mecanismo de Kibble Zurek</b>	<b>24</b>
6.1. Relacionado al universo temprano . . . . .	24
6.2. Experimentos en helio superflúidico . . . . .	25
6.3. Tiempo de auto-correlación . . . . .	26
<b>7. Simulaciones en equilibrio</b>	<b>28</b>
7.1. Metodología . . . . .	28
7.2. Resultados . . . . .	29
<b>8. Simulación de enfriamientos</b>	<b>38</b>
8.1. Metodología . . . . .	38
8.2. Resultados . . . . .	39
<b>9. Resumen y conclusiones</b>	<b>46</b>
<b>A. Distribución aleatoria de vectores en la esfera <math>S^2</math></b>	<b>47</b>
<b>B. Algoritmo Hoshen-Kopelman aplicado al modelo 2d <math>O(3)</math></b>	<b>50</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>52</b>

# Capítulo 1

## Motivación al estudio de sistemas fuera del equilibrio

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

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

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

## Capítulo 2

# Acercamiento estadístico a la mecánica cuántica

### 2.1. Propagador de evolución

Cuando Richard Feynman desarrollo su propia formulación de integral de trayectorias, se pregunto si existía un camino para conectar la mecánica estadística con la mecánica cuántica. La mecánica cuántica descrita por Erwin Schrödinger se plantea una ecuación que describe el sistema físico de interés, luego se busca la solución. La ecuación de E. Schrödinger aumenta en complejidad al aumentar los grados de libertad. En mecánica estadística, se plantea una función de partición, la cual contiene toda la información necesaria sobre el sistema que modela. La función de partición, propone soluciones factibles para sistemas con muchos grados de libertad. R. Feynman encontró una función análoga a la función de partición para sistemas cuánticos y uno de los modelos que se pueden estudiar es el modelo de interés para este trabajo, el modelo  $2d$   $O(3)$ .

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

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

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

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

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

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

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

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

Reescribiendo la ecuación anterior se tiene

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

Escribiendo en notación de Dirac

$$(2.6)$$

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

La solución de la ec. (2.7) es de la forma

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

donde,  $q$  y  $q'$  son estados distintos. Definimos al propagador de la ec. (2.7)

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

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

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

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

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

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

#### **Teorema. Trotter**

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

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

Se busca una expresión general para el propagador que resuelve la ec. (2.7), suponiendo un hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ ,

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

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

Partiendo de la forma general del propagador

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

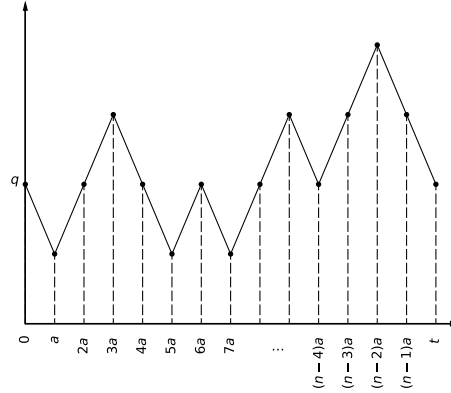


Figura 2.1: Ejemplificación de la evolución de un estado en el espacio fase, desde  $q$  hasta  $q'$  en el tiempo  $t$ .

Aplicando el teorema de Trotter

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

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

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

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

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

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

Finalmente el propagador se describe por la ecuación

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

donde  $\sigma$  corresponde a una trayectoria en  $\Omega$ , y este es el conjunto de todas las posibles trayectorias que inician en  $q$  y terminan en  $q'$  en el tiempo  $t$ .

El tensor métrico del espacio de Minkowski es de la forma

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

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

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

La métrica del espacio de Minkowski es

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

La métrica del espacio euclidiano con el eje temporal imaginario es

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

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

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

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

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

Finalmente

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

donde otra vez  $\sigma$  corresponde a una trayectoria en  $\Omega$ , y este es el conjunto de todas las posibles trayectorias que inician en  $q$  y terminan en  $q'$  en el tiempo  $t_E$  [2]-[4].

## Capítulo 3

# Modelos de espín

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

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

### 3.1. Los modelos $O(n)$

**Definición: Retícula.**

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

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

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

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

En este trabajo se empleo la estructura cuadrada, caso  $d = 2$  donde la retícula esta definida en un plano. En una simulación no es posible usar retículas infinitas, hay que tomar un trozo finito. Tomando un cuadrado  $L \times L$ , se obtiene la retícula cuadrada de dimensión 2 y longitud  $L$  descrita como

$$\mathcal{R}_{\text{cuad}}^2 = \{x \in \mathcal{R}^2 | x_1, x_2 \in (1, L)\}. \quad (3.2)$$

Ya no tenemos el problema con la retícula infinita pero ahora los sitios del contorno tienen tres vecinos más cercanos en vez de cuatro, y en los cuatro sitios ubicados las esquinas de la retícula



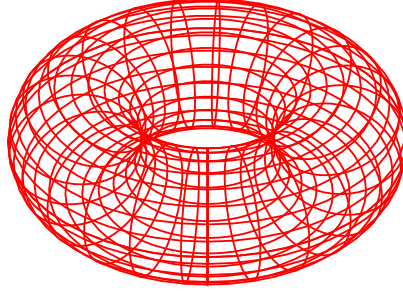


Figura 3.1: Retícula cuadrada bidimensional y de topología toroidal.

solo se tienen dos vecinos más cercanos. Para tener invarianza de translación discreta. Una posible solución es cambiar la topología de la retícula.

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

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

La estructura topológica de toroidal es utilizada en los videojuegos, cuando un personaje sale de la pantalla simplemente aparece por el extremo opuesto.

### 3.2. Modelo 2d $O(3)$

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

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

El modelo  $O(n)$  es un modelo de espines clásicos. Cada espín  $\vec{s}_x$  ocupa un sitio  $x \in \mathcal{R}^d$ . Una configuración  $[s]$  es un arreglo de espines  $\vec{s}_x$ , por ejemplo la configuración en la que todos los espines

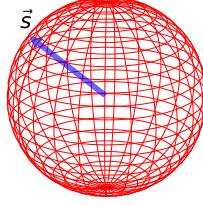


Figura 3.2: Espín en el modelo O(3)

apuntan a la misma dirección se conoce como configuración uniforme. La configuración uniforme tiene la particularidad tener la de menor energía. Consideramos una configuración  $[s]$ , la energía depende del potencial de interacción magnética espín a espín. La función hamiltoniana es de la forma

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}[s] &= \frac{J}{2} \sum_x \sum_{\hat{\mu}}^d (\vec{s}_x - \vec{s}_{x+\hat{\mu}})^2 \\
 &= -\frac{J}{2} \sum_x \sum_{\hat{\mu}}^d (2\vec{s}_{x+\hat{\mu}} \cdot \vec{s}_x - 2) \\
 &= -J \sum_x \sum_{\hat{\mu}}^d (\vec{s}_{x+\hat{\mu}} \cdot \vec{s}_x + 1),
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

donde  $J$  es una constante de acoplamiento,  $\hat{\mu}$  es un vector unitario con valor 1 en la  $d$ -ésima entrada. Como la interacción magnética decae proporcionalmente al inverso del cuadrado de la distancia, la contribución más grande se da entre los vecinos más cercanos. Es conveniente despreciar las interacciones entre espines a más de una unidad de distancia.

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

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

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

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

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

### 3.3. Observables

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

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

A lo largo de un intervalo temporal, se espera que un sistema físico pase por múltiples configuraciones. Por ello, medir observables en una única configuración produce valores inconsistentes que dependen de la configuración utilizada. Para obtener un resultado útil, se busca calcular el promedio de un observable en un intervalo temporal lo suficientemente amplio como para reducir las fluctuaciones por debajo de un umbral de error deseado.

#### 3.3.1. Energía

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

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_x (\vec{s}_x \cdot \vec{s}_{x+\hat{1}} + \vec{s}_x \cdot \vec{s}_{x+\hat{2}} + 2), \quad (3.6)$$

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

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

**Definición:** Tiempo de Markov.

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

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

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i. \quad (3.7)$$

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

$$\langle \mathcal{H} \rangle \simeq \langle \mathcal{H} \rangle_{\text{aprox}} \pm \text{error}(\mathcal{H}). \quad (3.8)$$

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

$$h = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{V}. \quad (3.9)$$

### 3.3.2. Magnetización

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

$$M = \frac{1}{V} \left| \sum_x \vec{s}_x \right| \quad (3.10)$$

La magnetización máxima se alcanza en una configuración de espines alineados

$$M_{\max} = \frac{1}{V} \left| \sum_x \vec{s}_x \right| = \frac{1}{V} |V \vec{s}| = |\vec{s}| = 1 \quad (3.11)$$

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

El promedio aproximado de la magnetización es

$$\langle M \rangle_{\text{aprox}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i. \quad (3.12)$$

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

$$\langle M \rangle \simeq \langle M \rangle \pm \text{error}(M) \quad (3.13)$$

### 3.3.3. Carga topológica

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

$$Q[s] = \frac{1}{8\pi} \int \varepsilon_{\mu\nu} \vec{s}(x) \cdot (\partial_\mu \vec{s}(x) \times \partial_\nu \vec{s}(x)) d^2x \in \mathbb{Z}. \quad (3.14)$$

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

$$\frac{1}{V} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \int e^{-S[\phi]} e^{iQ[\phi]\theta} d\phi \Big|_{\theta=0} = \frac{1}{V} \langle Q^2 \rangle |_{\theta=0}. \quad (3.15)$$

B. Breg y M. Lüscher introdujeron la definición geométrica de carga topológica reticular para estudiar la susceptibilidad topológica del modelo 2d  $O(3)$ . Para definir la carga topológica de una

configuración se usa un acercamiento geométrico, la retícula se divide en plaquetas formadas por cuatro espines, esto a su vez se subdividen en un dos triángulos, alternando la orientación de la diagonal que divide cada cuadrado para replicar la propiedad de isotropía.

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

$$\tan\left(\frac{\Omega}{2}\right) = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}{abc - (\vec{a} \cdot \vec{b})c + (\vec{c} \cdot \vec{a})b + (\vec{b} \cdot \vec{c})a}. \quad (3.16)$$

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

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_1 \\ y_1 &= \vec{s}_1 \cdot (\vec{s}_2 \times \vec{s}_3). \end{aligned} \quad (3.17)$$

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

$$\Omega_1 = 2\arg(z_1). \quad (3.18)$$

Para los triángulos  $b$  se definen las variables

$$\begin{aligned} x_2 &= 1 + \vec{s}_4 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_4 \\ y_2 &= \vec{s}_4 \cdot (\vec{s}_3 \times \vec{s}_2). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Se obtiene

$$\Omega_2 = 2\arg(z_2). \quad (3.20)$$

$$A = \Omega_1 + \Omega_2 \quad (3.21)$$

La carga topológica se define como como

$$Q[s] = \frac{1}{4\pi} \sum_x A_x \in \mathbb{Z}, \quad (3.22)$$

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

El valor esperado del cuadrado de la carga topológica es

$$\langle Q^2 \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i^2. \quad (3.23)$$

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

$$\chi_t = \frac{\langle Q^2 \rangle}{V}. \quad (3.24)$$

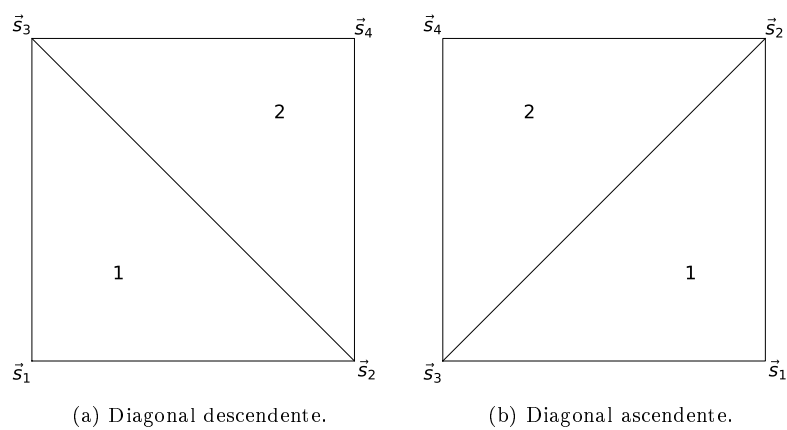


Figura 3.3: Orientaciones de posibles de los triángulos formados en la retícula.

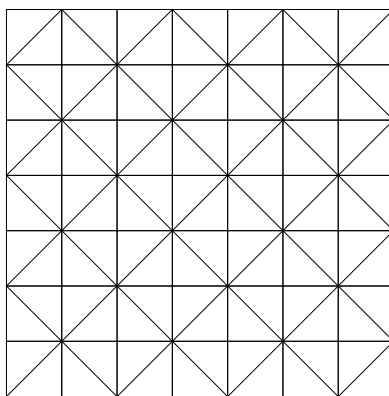


Figura 3.4: Descomposición de la retícula cardada bidimensional en triángulos alternado la dirección de la diagonal. Esta descomposición se usa para medir la carga topológica.

## Capítulo 4

# Métodos de Monte Carlo

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

y el error estándar se define por la ecuación

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

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

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

Definición: Balance Detallado.

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

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

donde  $p[s]$  es la probabilidad de la configuración  $[s]$  y  $p[s \rightarrow s']$  es la probabilidad de la transición de la configuración  $[s]$  a  $[s']$ , de igual manera  $p[s']$  es la probabilidad de la configuración  $[s']$  y  $p[s' \rightarrow s]$  es la probabilidad de la transición de la configuración  $[s']$  a  $[s]$  [8].

## 4.1. Algoritmo de Metropolis

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

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

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

La diferencia en la energía de las configuraciones es

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

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

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

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



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

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

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

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

## 4.2. Algoritmo de Glauber

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

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

Reordenando términos y dividiendo por  $Z$

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

Se propone la probabilidad de aceptación de algoritmo de Glauber como

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

La propuesta cumple la ecuación de balance detallado.

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

En términos de la diferencia de energía

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

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

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

### 4.3. Algoritmo cluster

El algoritmo Cluster sugerido por R. Swendsen y J. Wang, se basa en la observación de que la función de partición se puede escribir como una suma sobre un grupo de distribuciones [10], [12]. Consiste en generar clusters de espines enlazados y cambiar la configuración de todos los espines en cada cluster a la vez. Una de las principales ventajas del algoritmo Cluster es que evita la desaceleración crítica característica de los algoritmos de actualización local.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## Capítulo 5

# Fenómenos críticos

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

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

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

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

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

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

El calor específico a volumen constante se define como

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

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

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

donde

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

La susceptibilidad magnética  $\chi_M$  se define como

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

## 5.1. Transiciones de fase

Una transición de fase ocurre cuando hay una discontinuidad en la energía libre o en una de sus derivadas, la transición de fase presenta un cambio visible en las propiedades macroscópicas del sistema. La energía es proporcional al logaritmo de la función de partición[13]-[15].

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

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

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

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

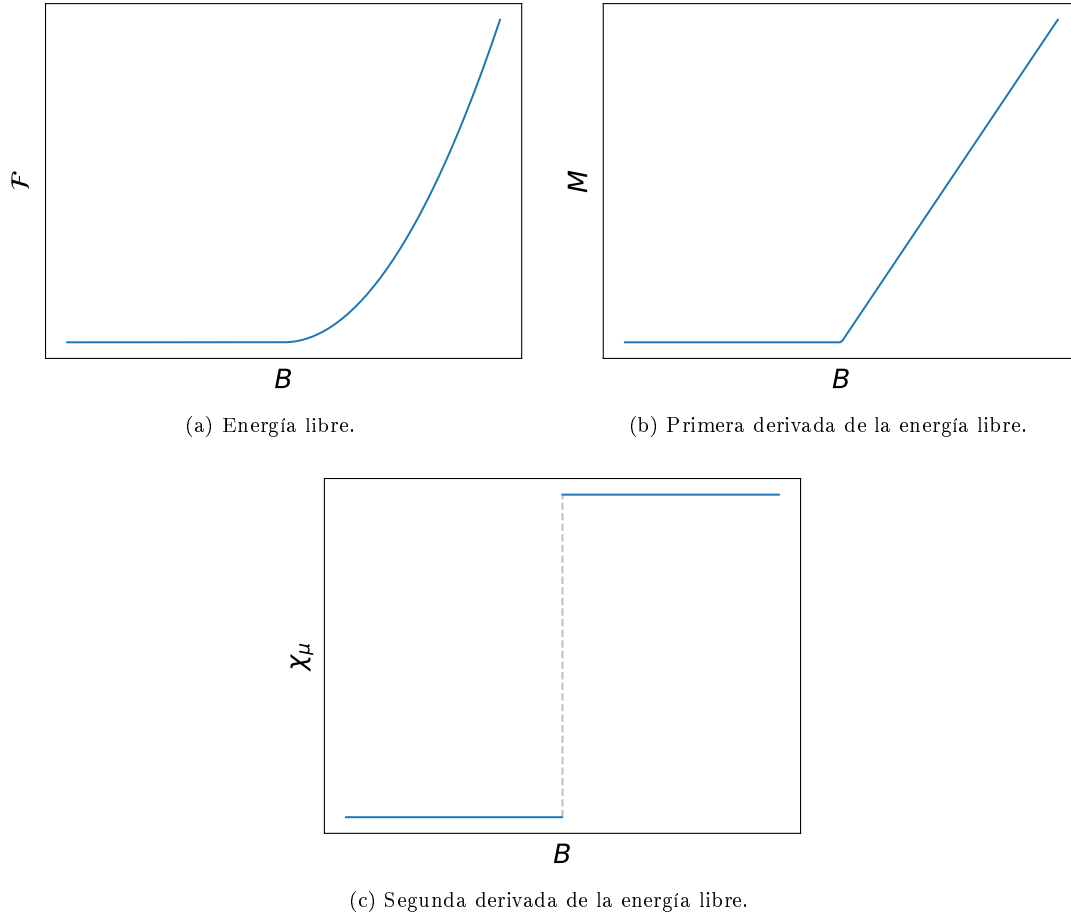


Figura 5.1: Transición de fase de segundo orden.

## 5.2. Función de correlación

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

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

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

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

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

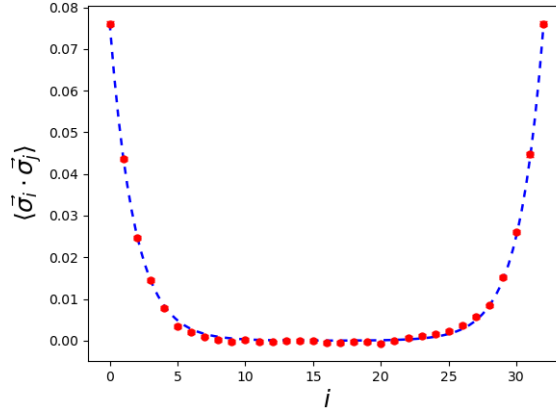


Figura 5.2: Función de correlación

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

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

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

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

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

### 5.3. Escalamiento

Dado un potencial termodinámico

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$(5.20)$$

## 5.4. Universalidad

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

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

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



## Capítulo 6

# Mecanismo de Kibble Zurek

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

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

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

### 6.1. Relacionado al universo temprano

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## 6.2. Experimentos en helio superfluido

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

$$\xi \propto \tau_Q^z \quad (6.3)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

### 6.3. Tiempo de auto-correlación

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

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

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

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

El tiempo de autocorrelacion se estima como

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

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

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

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

$$\tau \propto \xi^z \quad (6.10)$$

donde  $\zeta$  es el exponente crítico dinámico.

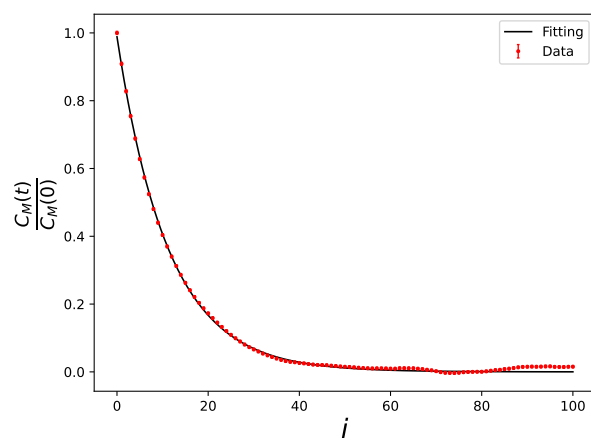


Figura 6.1: Tiempo de autocorrelación

## Capítulo 7

# Simulaciones en equilibrio

En el modelo 2d  $O(3)$  hay dos variables termodinámicas, el volumen  $V$  y la temperatura  $T$ . Para  $V$  y  $T$  constantes y dada una configuración inicial  $[s]_1$  con energía  $\mathcal{H}_1$ . La probabilidad de aceptación favorece las configuraciones de menor energía a la vez que la temperatura aumenta la energía permitiendo configuraciones de mayor energía. En cada actualización la energía del sistema evoluciona hasta estabilizarse en una sucesión de configuración que fluctuante alrededor de una energía media constante. En la Figura (7.1) se ve una comparación entre la evolución de la densidad de energía para una configuración inicial aleatoria «Hot start». Y una configuración inicial completamente alineada a una dirección «Cold start».

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

### 7.1. Metodología

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

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

Como se ve en la Figura (7.1), las observables de un sistema fluctúan en respuesta a los cambios en la configuración. Por lo que se calculan suficientes barridos para alcanzar la precisión deseada. En la misma imagen hay dos trayectorias. La trayectoria «Cold start», parte de un estado de energía máxima en el que todos los espines están alineados. La trayectoria «Hot start», parte de una configuración aleatoria. Después de unos 20 barridos ambas trayectorias oscilan alrededor una energía que corresponde al sistema termalizado.

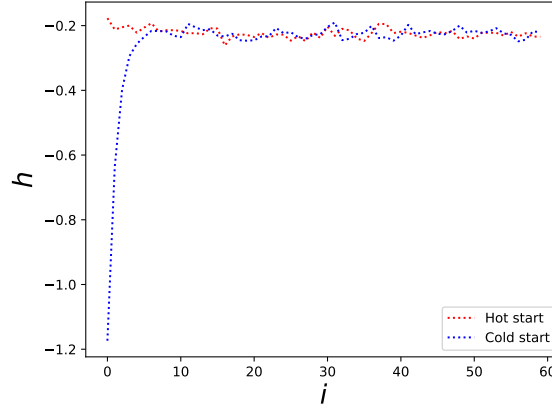


Figura 7.1: Termalización de dos sistemas 2d  $O(3)$  a temperatura  $T = 4$ ,  $L = 64$ . La trayectoria roja corresponde a una configuración inicial de espines aleatorios. La trayectoria azul corresponde a una configuración inicial de espines alineados en la dirección  $(0, 0, 1)$ .

## 7.2. Resultados

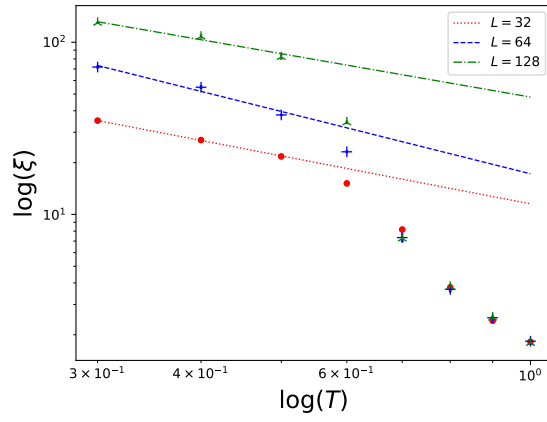
Se realizó una serie de experimentos numéricos para determinar características generales del modelo 2d  $O(3)$ . Se calculó la longitud de correlación para las temperaturas  $T \in \{0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$ , en retículas de longitud  $L \in \{32, 64, 128\}$ . En todos los casos se partió de una configuración «hot start» y se termalizó durante  $10^4$  actualizaciones del algoritmo multi cluster.

Cada uno de los exponentes críticos está registrado en la Tabla (7.1). Se ajustaron las longitudes de correlación respecto a la temperatura a la función

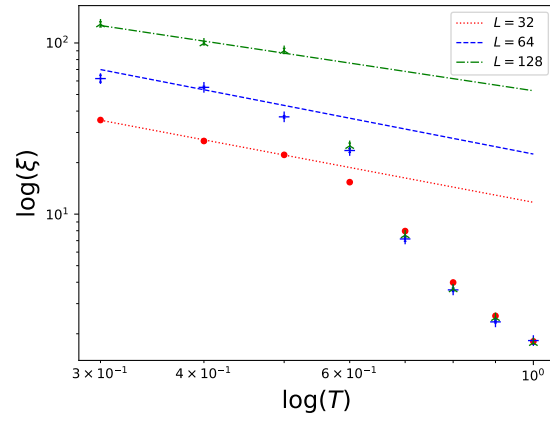
$$\xi = AT^{-\nu}. \quad (7.1)$$

$L$	$\nu_{\text{ML}}$	$\nu_{\text{MA}}$	$\nu_{\text{GL}}$	$\nu_{\text{GA}}$	$\nu_{\text{MC}}$
32	0.93(3)	0.92(5)	0.91(4)	1.0(2)	0.94(8)
64	1.2(2)	0.9(7)	1.0(2)	1.2(2)	1.00(9)
128	0.8(2)	0.7(1)	1.3(2)	0.1(4)	1.1(1)

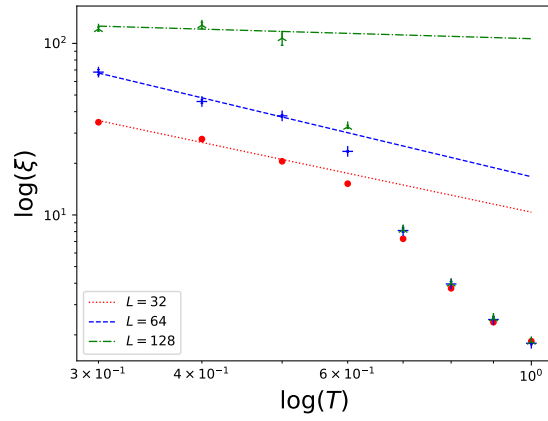
Cuadro 7.1: Exponentes críticos de la longitud de correlación. ML corresponde al algoritmo de metropolis lexicográfico, MA a metropolis aleatorio. GL corresponde a Glauber lexicográfico, GA a glauber aleatorio y MC a multi cluster.



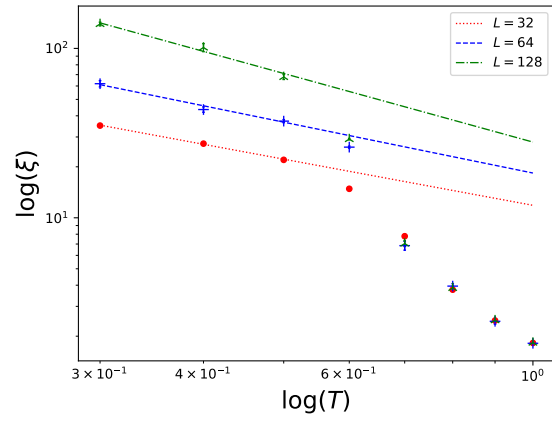
(a) Metropolis lexicográfico



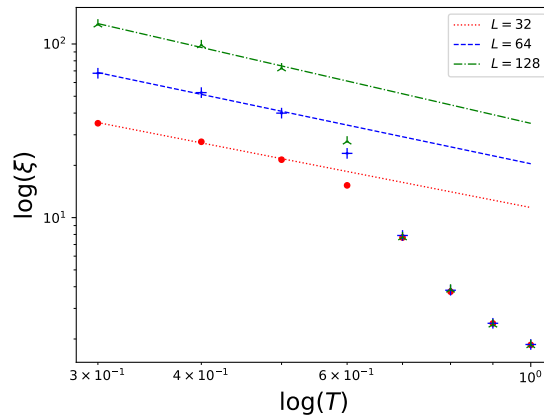
(b) Metropolis aleatorio



(c) Glauber lexicográfico



(d) Glauber aleatorio



(e) Multi cluster

Figura 7.2: Longitud de correlación en función de la temperatura para las retículas de longitud  $L \in \{32, 64, 128\}$ .

Algoritmo	$z_Q$	$z_{\mathcal{H}}$	$z_m$
Metropolis lexicográfico	1.45(9)	—	0.44(3)
Metropolis aleatorio	1.2(3)	—	1.1(3)
Glauber lexicografico	0.8(2)	—	0.8(2)
Glauber aleatorio	1.0(3)	—	1.0(2)
Multi cluster	—	—	0.05(5)

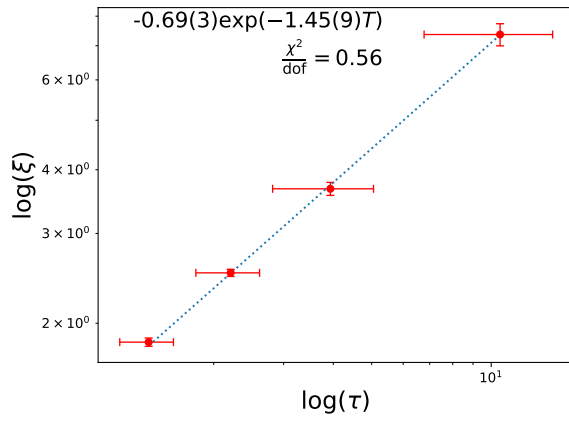
Cuadro 7.2: Exponente crítico  $z$  para diferentes algoritmos.

El tiempo de auto correlación se cálculo en equilibrio térmico para las temperaturas  $T \in \{0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$ . En todos los casos se partió de un hot-start y se termalizó durante  $10^4$  actualizaciones del algoritmo multi cluster. Finalmente se promedió sobre  $10^5$  barridos del algoritmo de metrópolis lexicográfico.

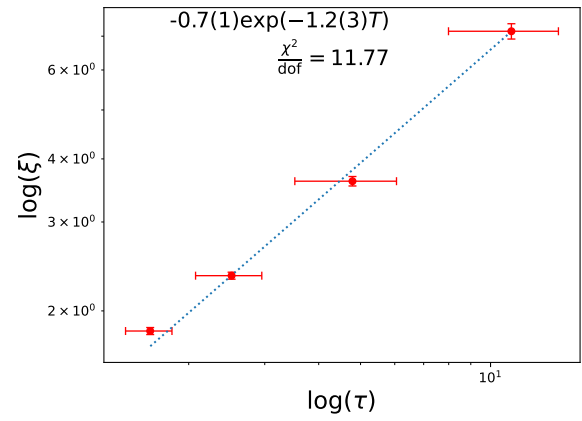
Algoritmo	$\lambda_Q$	$\lambda_{\mathcal{H}}$	$\lambda_m$
Metropolis lexicográfico	4.8(5)	3.9(2)	8.0(7)
Metropolis aleatorio	5.1(7)	3.3(3)	8.4(8)
Glauber lexicografico	5.7(4)	3.5(2)	8.9(2)
Glauber aleatorio	4.1(3)	3.3(4)	9.1(5)
Multi cluster	2.2(9)	1.29(4)	0.30(8)

Cuadro 7.3: Exponente crítico  $\lambda$  para diferentes algoritmos.

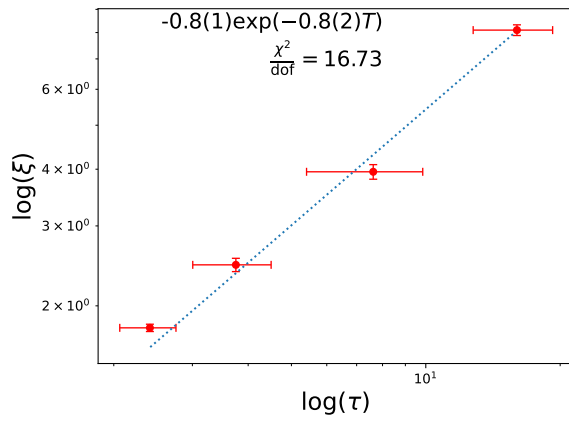




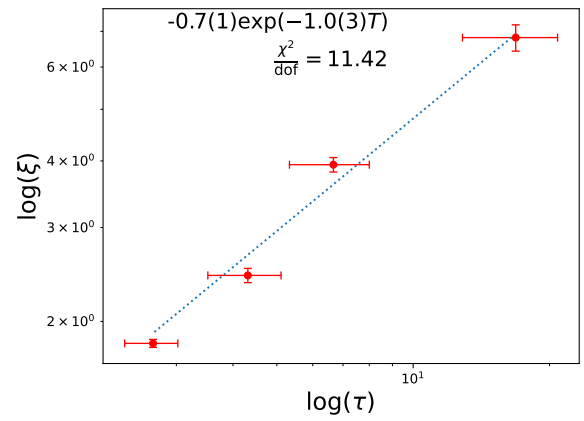
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



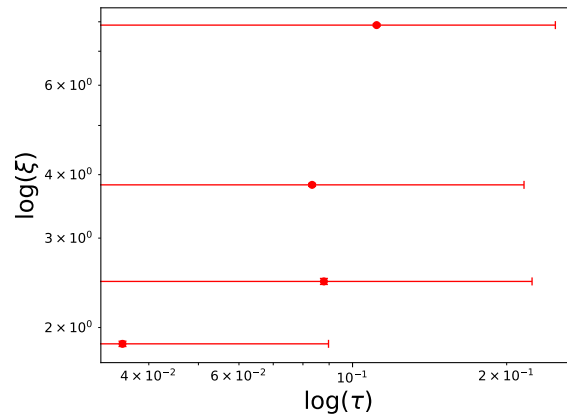
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

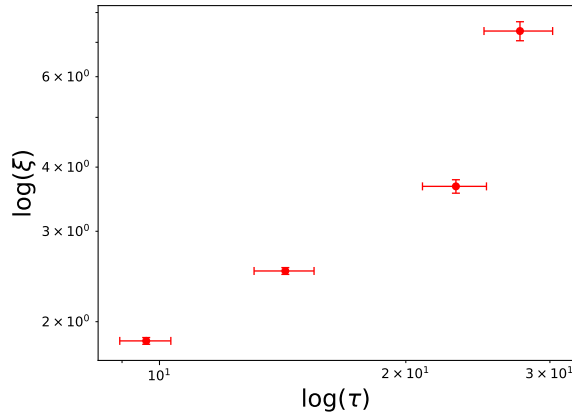


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

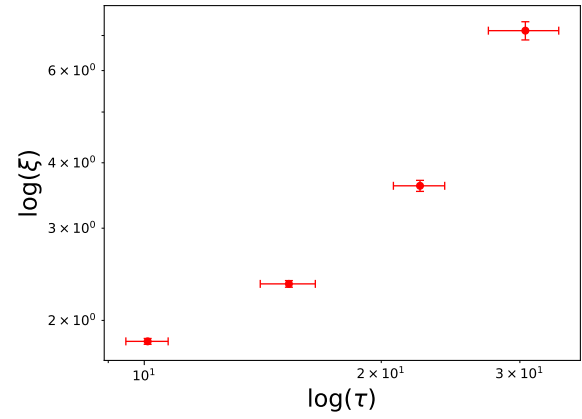


(e) Algoritmo de Multi cluster.

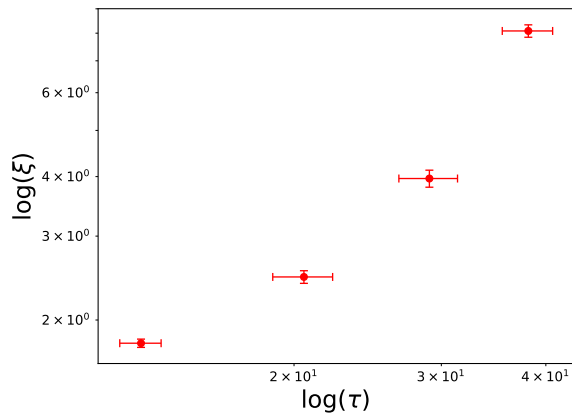
Figura 7.3: Tiempo de autocorrelación de la carga topológica en función de la longitud de correlación en una retícula de longitud  $L = 64$ .



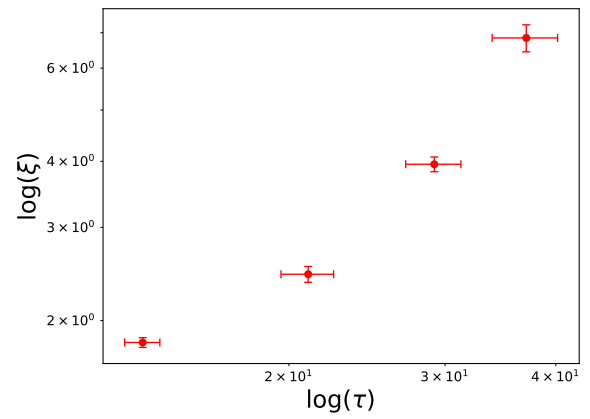
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



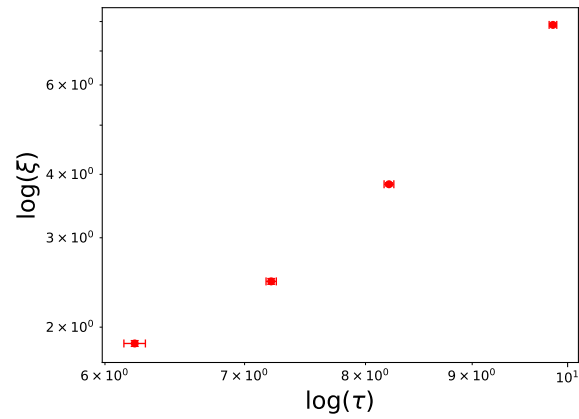
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

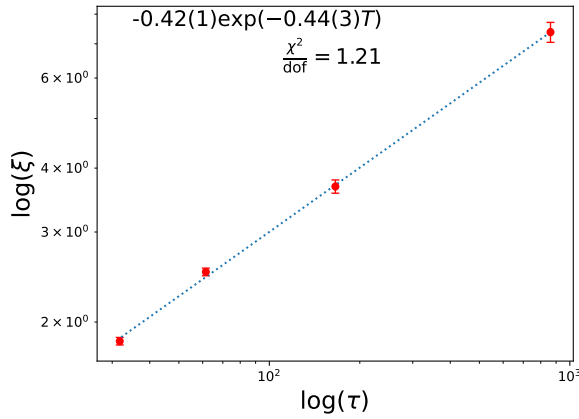


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

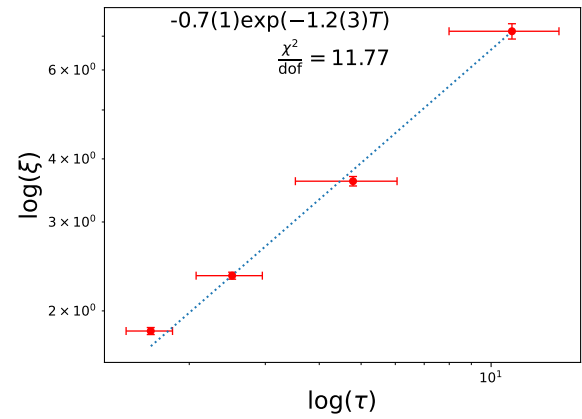


(e) Algoritmo de Multi cluster.

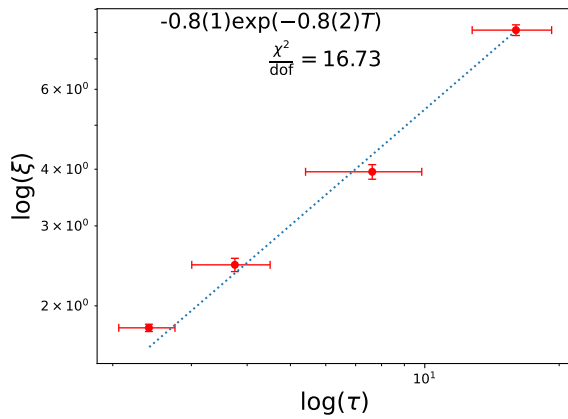
Figura 7.4: Tiempo de autocorrelación de la magnetización en función de la longitud de correlación en una retícula de longitud  $L = 64$ .



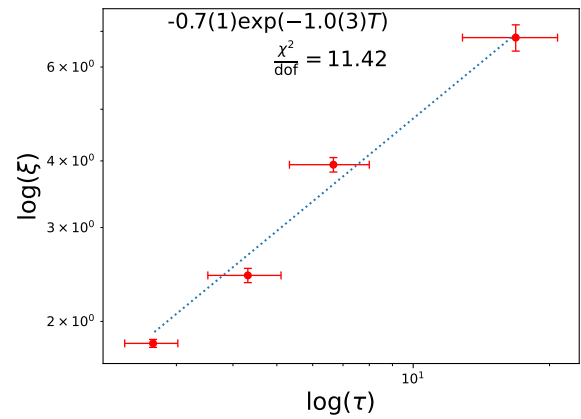
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



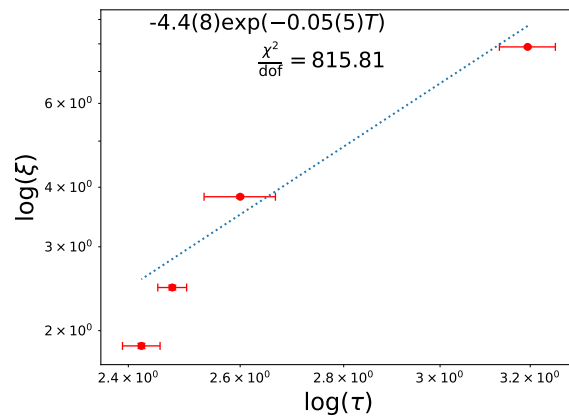
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

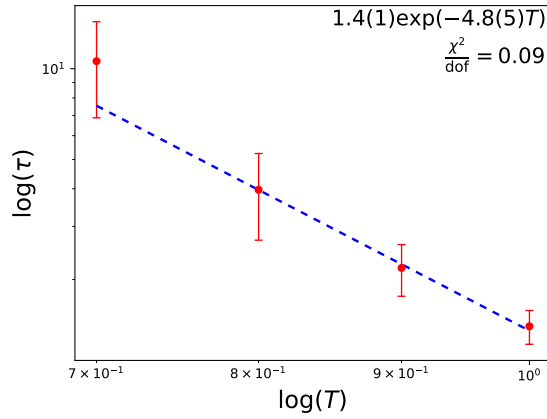


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

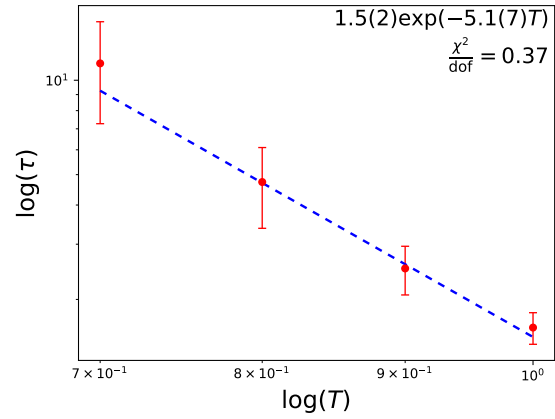


(e) Algoritmo de Multi cluster.

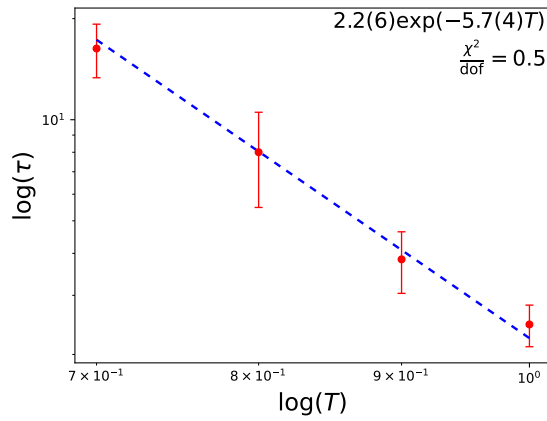
Figura 7.5: Tiempo de autocorrelación de la magnetización en función de la longitud de correlación en una retícula de longitud  $L = 64$ .



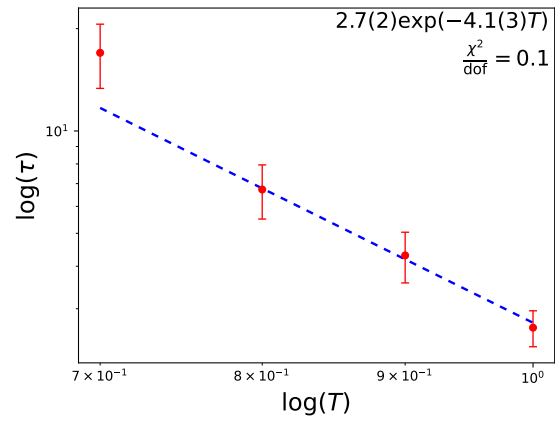
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



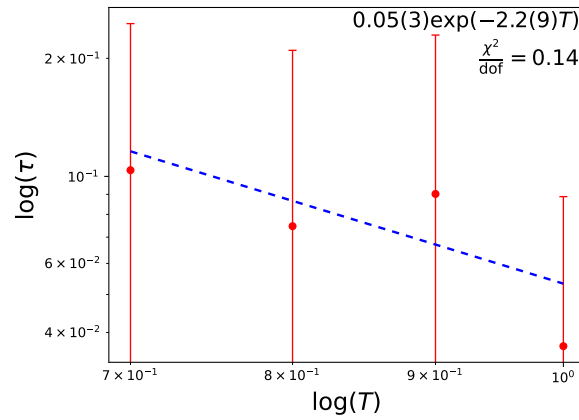
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

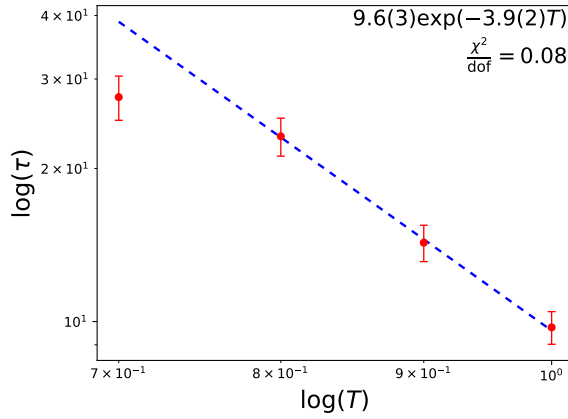


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

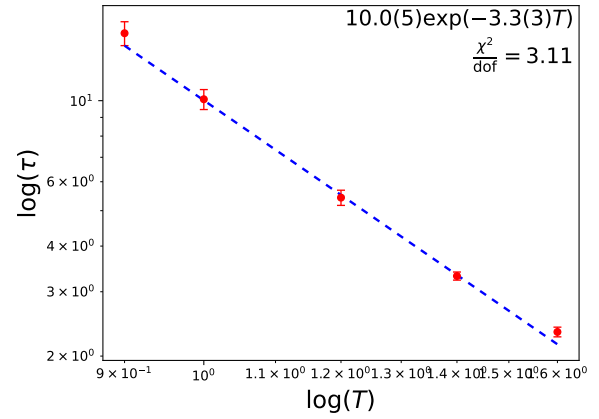


(e) Algoritmo de Multi cluster.

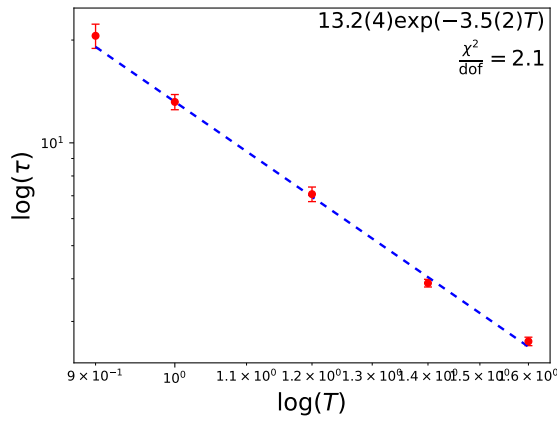
Figura 7.6: Tiempo de autocorrelación de la carga topológica en función de la temperatura en una retícula de longitud  $L = 64$ .



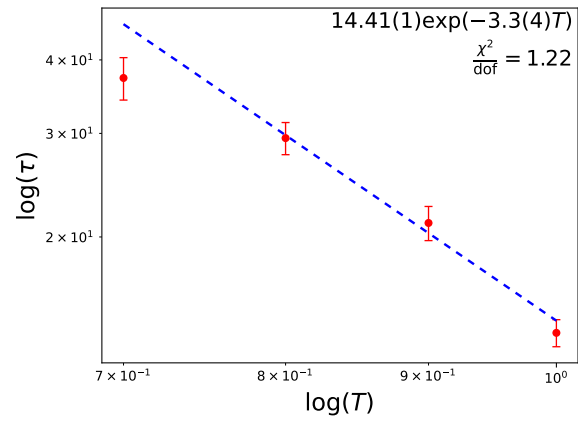
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



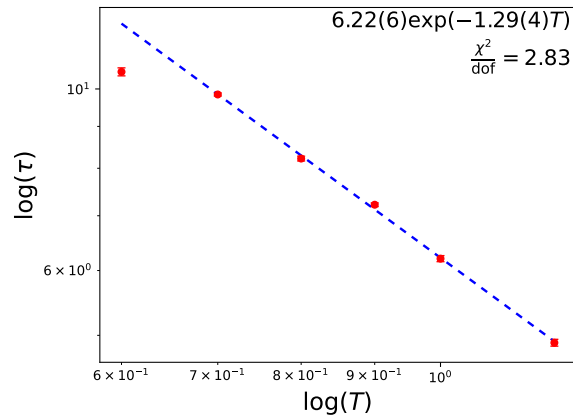
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.

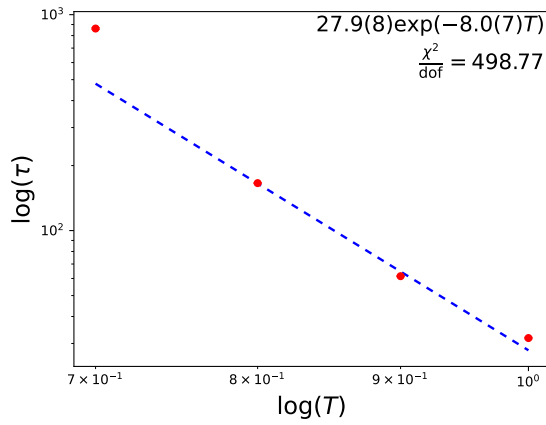


(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.

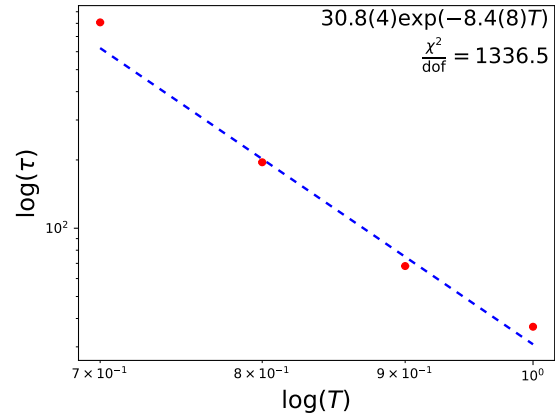


(e) Algoritmo de Multi cluster.

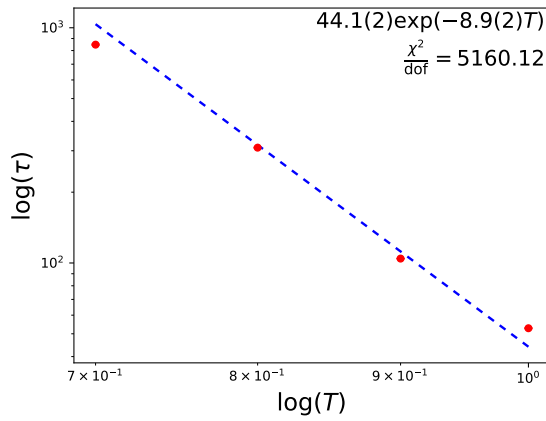
Figura 7.7: Tiempo de autocorrelación de la densidad de energía en función de la temperatura en una retícula de longitud  $L = 64$ .



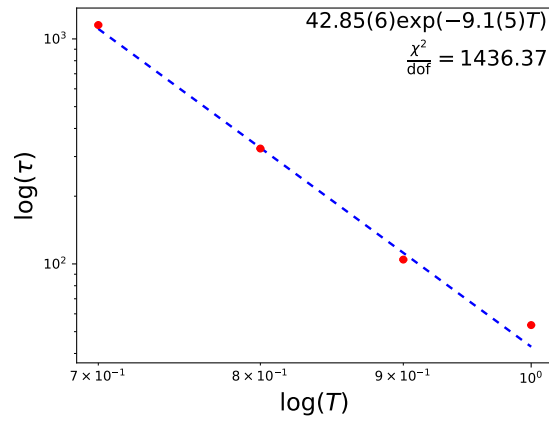
(a) Algoritmo de Metropolis lexicográfico.



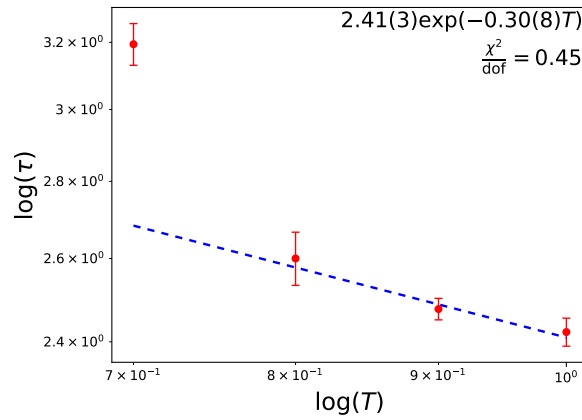
(b) Algoritmo de Metropolis aleatorio.



(c) Algoritmo de Glauber lexicográfico.



(d) Algoritmo de Glauber aleatorio.



(e) Algoritmo de Multi cluster.

Figura 7.8: Tiempo de autocorrelación de la magnetización en función de la temperatura en una retícula de longitud  $L = 64$ .

## Capítulo 8

# Simulación de enfriamientos

### 8.1. Metodología

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

Se define la velocidad de enfriamiento

$$v = \frac{T_f - T_i}{\tau_Q} \quad (8.1)$$

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

$$T(t) = T_i + vt. \quad (8.2)$$

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

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

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

Algoritmo	$\zeta_Q$	$\zeta_{\mathcal{H}}$	$\zeta_m$
Metropolis lexicográfico	0.54(1)	0.220(6)	0.282(7)
Metropolis aleatorio	0.55(2)	0.218(6)	0.284(4)
Glauber lexicográfico	0.51(1)	0.211(4)	0.267(3)
Glauber aleatorio	0.51(1)	0.209(5)	0.274(5)
Multi cluster	1.10(7)	0.282(7)	0.629(6)

Cuadro 8.1: Exponente crítico dinámico  $z$  para diferentes algoritmos.

## 8.2. Resultados

Se realizaron enfriamientos desde la temperatura  $T_i = 4$  hasta  $T_f = 0$ , usando las velocidades de enfriamiento  $\tau_{\text{cool}} \in \{8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18\}$ . Para cada experimento se realizaron  $10^5$  enfriamientos.



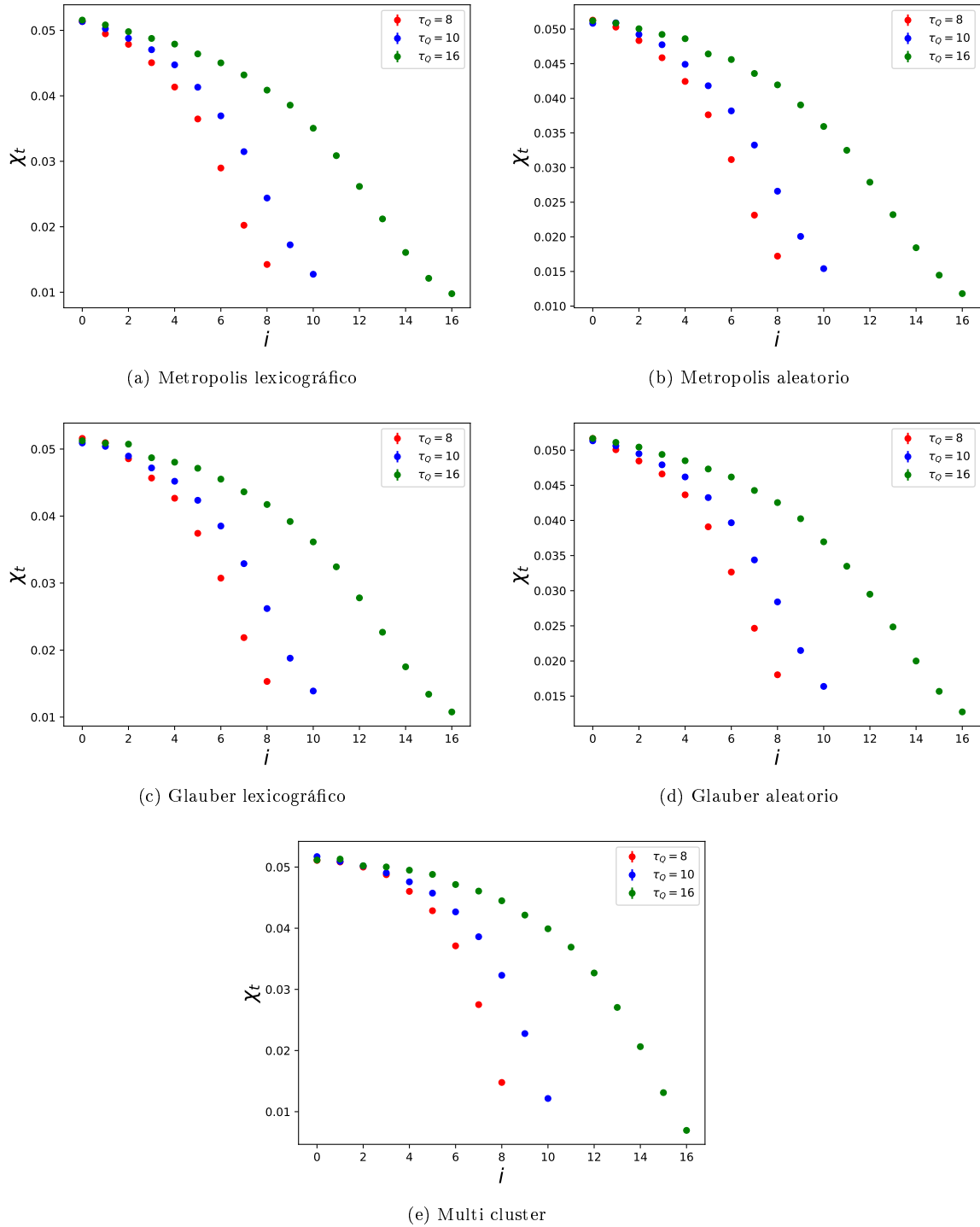
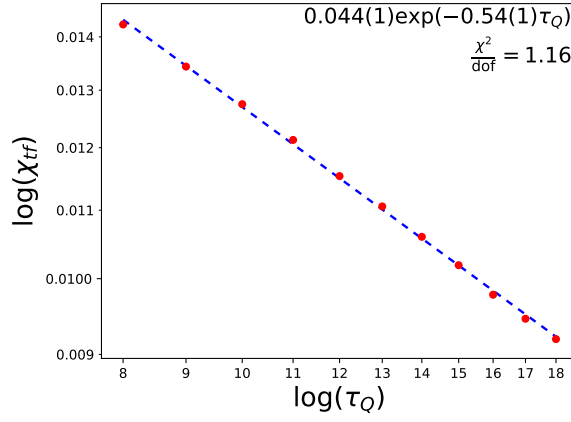
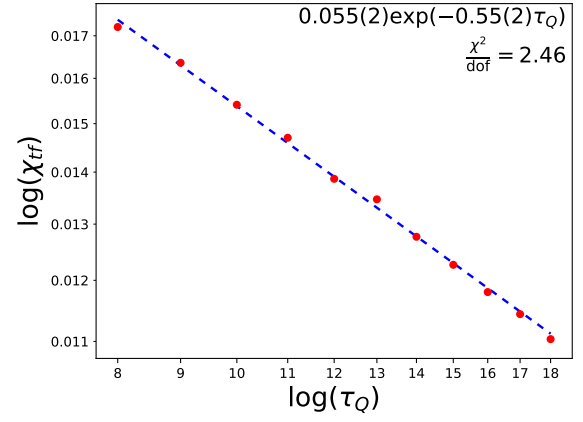


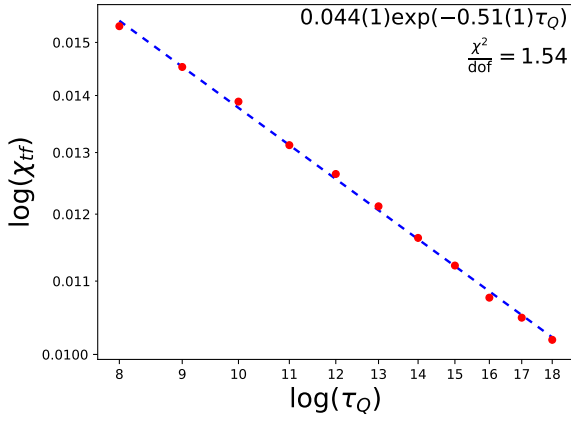
Figura 8.1: Evolución de los enfriamientos de la susceptibilidad topológica  $\chi_t$  respecto a la temperatura  $T$ , para diferentes velocidades de enfriamiento  $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8\}$ .



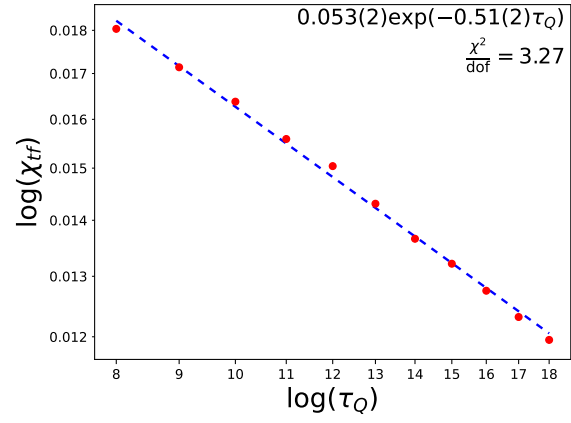
(a) Metropolis lexicográfico



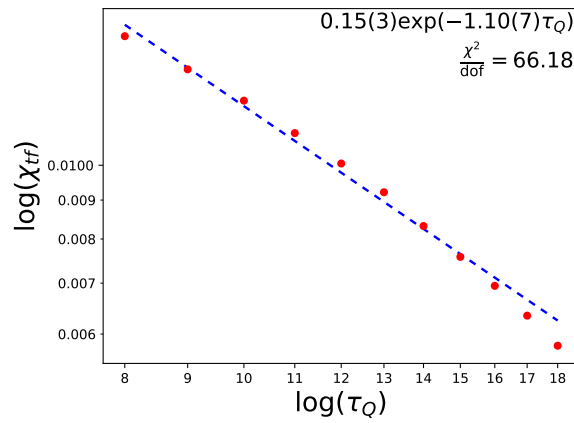
(b) Metropolis aleatorio



(c) Glauber lexicográfico

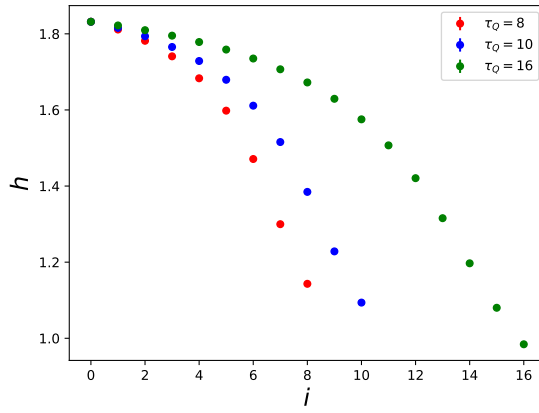


(d) Glauber aleatorio

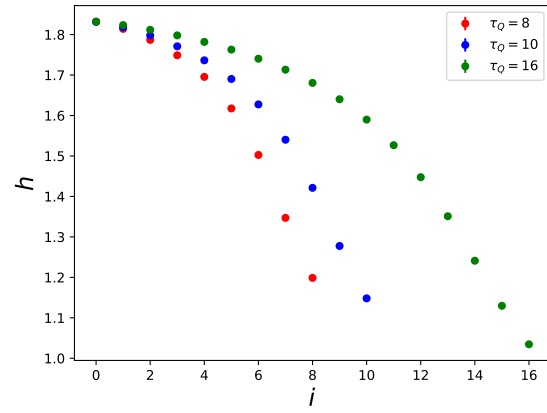


(e) Multi cluster

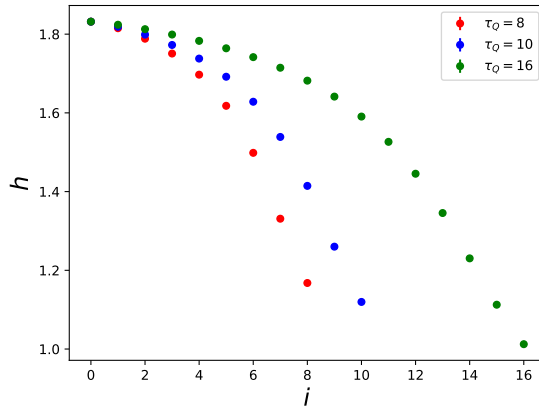
Figura 8.2: Susceptibilidad topológica final  $\chi_{tf}$  respecto a la velocidad de enfrenamiento  $\tau_{\text{cool}}$ .



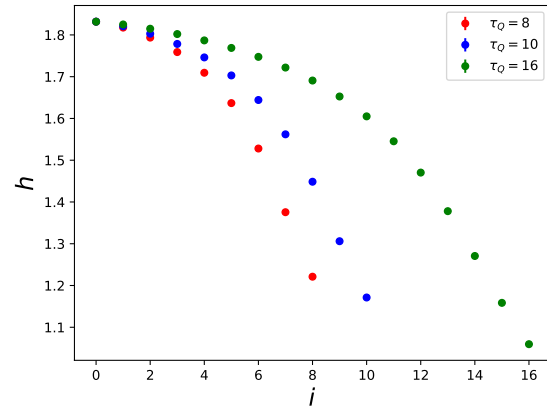
(a) Metropolis lexicográfico



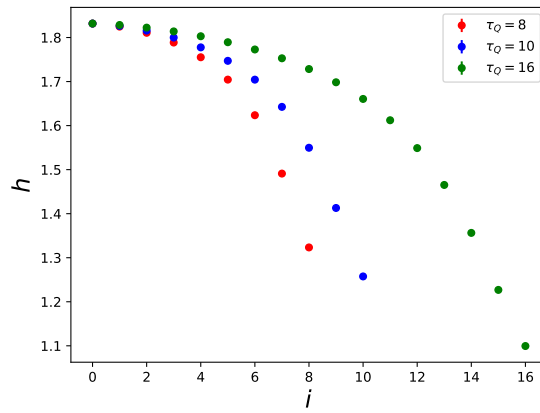
(b) Metropolis aleatorio



(c) Glauber lexicográfico

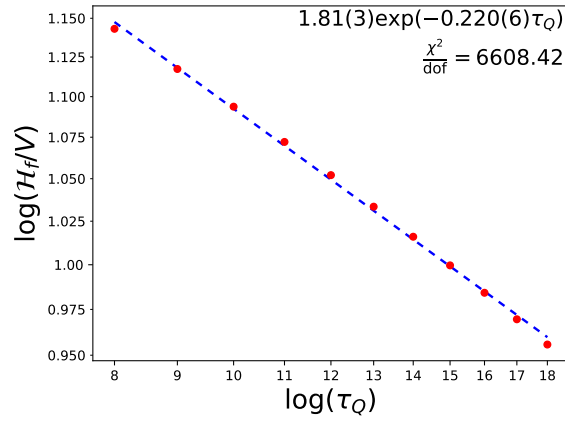


(d) Glauber aleatorio

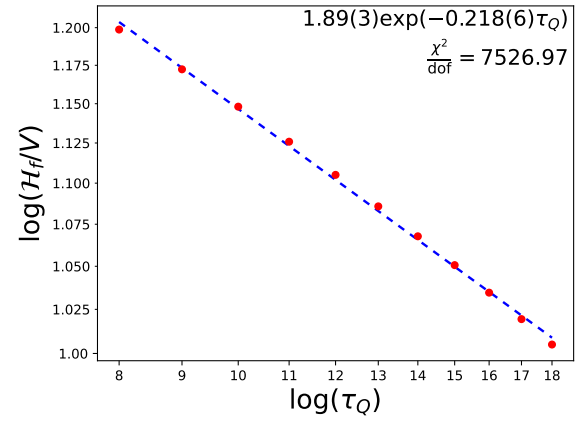


(e) Multi cluster

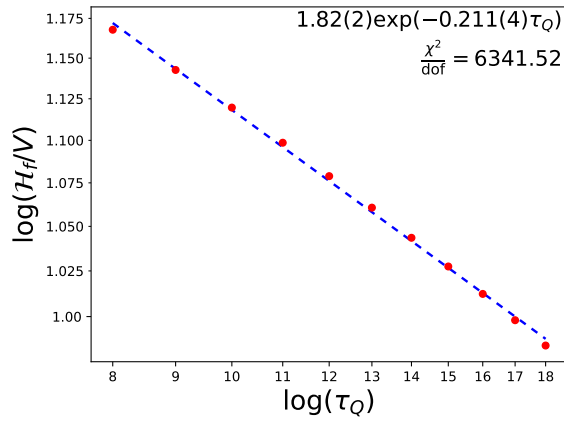
Figura 8.3: Evolución de los enfriamientos de la densidad de energía  $\rho_{\mathcal{H}}$  respecto a la temperatura  $T$ , para diferentes velocidades de enfriamiento  $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8\}$ .



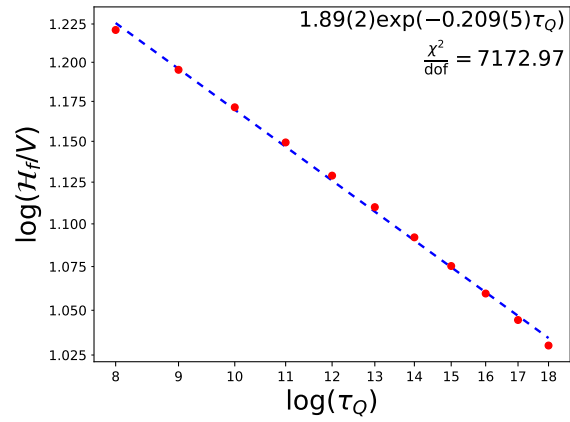
(a) Metropolis lexicográfico



(b) Metropolis aleatorio



(c) Glauber lexicográfico



(d) Glauber aleatorio

Figura 8.4: Susceptibilidad densidad de energía  $\rho_H$  respecto a la velocidad de enfrenamiento  $\tau_{\text{cool}}$ .

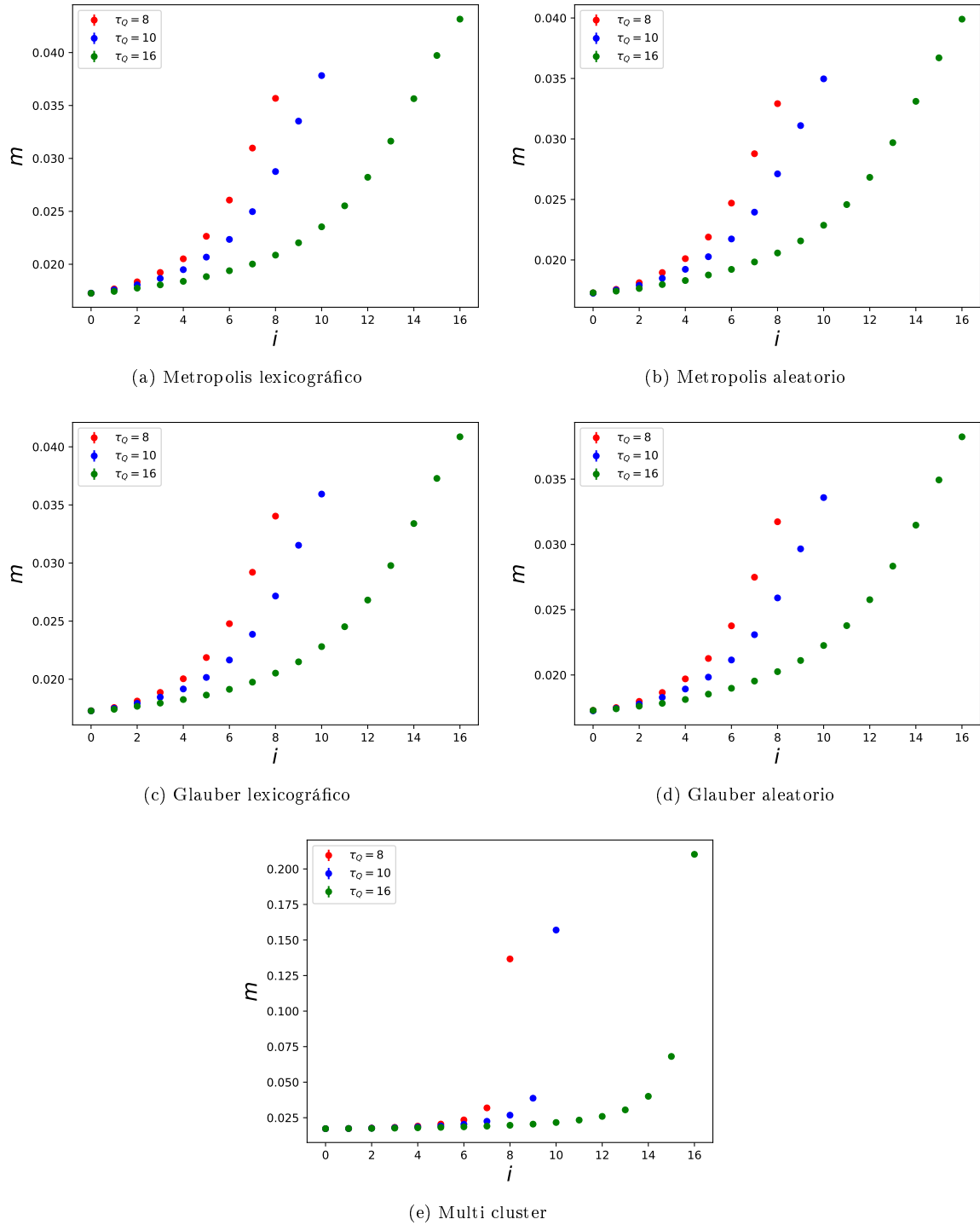
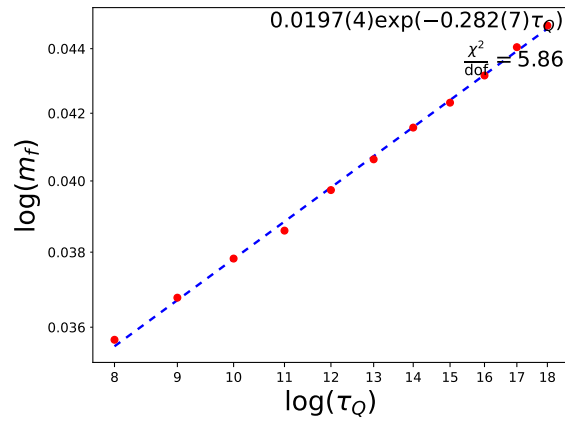
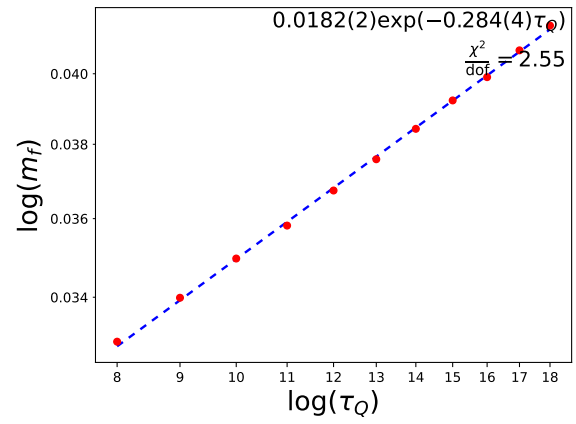


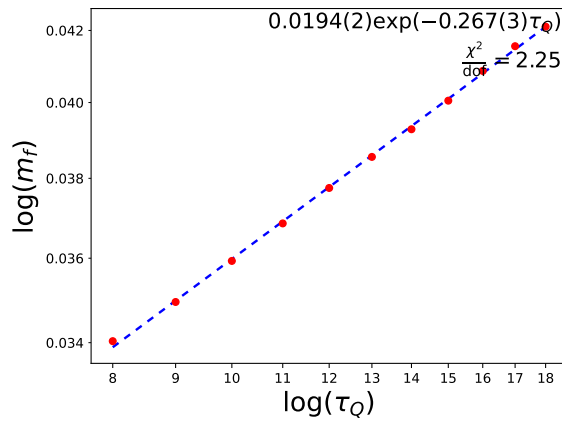
Figura 8.5: Evolución de los enfriamientos de la magnetización  $m$  respecto a la temperatura  $T$ , para diferentes velocidades de enfriamiento  $\tau_{\text{cool}} \in \{4, 6, 8\}$ .



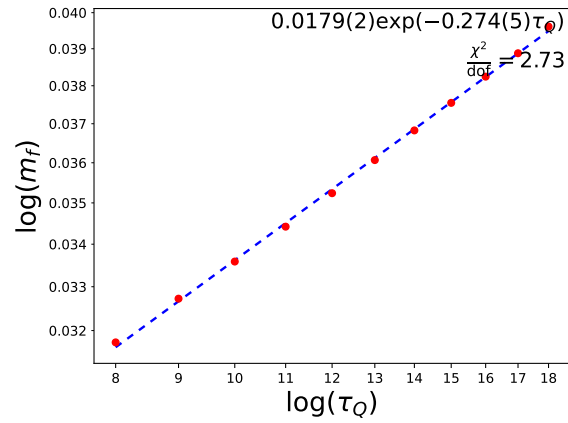
(a) Metropolis lexicográfico



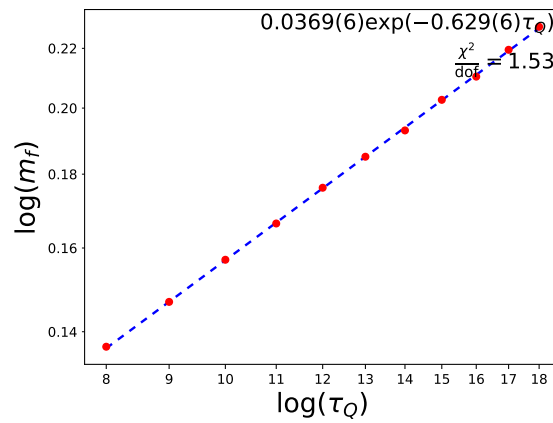
(b) Metropolis aleatorio



(c) Glauber lexicográfico



(d) Glauber aleatorio



(e) Multi cluster

Figura 8.6: Susceptibilidad magnetización  $m$  respecto a la velocidad de enfrenamiento  $\tau_Q$ .

## Capítulo 9

# Resumen y conclusiones

A partir de los resultados en equilibrio se muestra consistencia en los resultados para los diferentes algoritmos. En el caso de la longitud de correlación, y los tiempos de relajación los algoritmos de actualización local dieron resultados consistentes, mientras que el algoritmo Cluster tuvo resultados diferentes en los tiempos de relajación para la magnetización y no dio resultados para la densidad de energía y la susceptibilidad topológica para las temperaturas  $T \in \{0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.2\}$ .

Los experimentos fuera del equilibrio también dieron resultados consistentes con la ley de escalamiento, para la susceptibilidad topológica y la magnetización, pero en el caso de la energía la calidad de los ajustes no fue suficiente para mostrar una ley de escalamiento.

## Apéndice A

# Distribución aleatoria de vectores en la esfera $S^2$

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

Un elemento de la esfera  $S^2$  se puede escribir en coordenadas esféricas siguiendo la ecuación

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

donde  $\theta \in (0, \pi)$  y  $\phi \in (0, 2\pi)$ . Generar parámetros aleatorios  $(\theta_r, \phi_r)$ , resulta en una distribución más densa en el polo norte debido a la transformación de coordenadas cartesianas a coordenadas esféricas. Una forma de corregir el problema es seleccionar parámetros usando funciones auxiliares  $u(\theta, \phi), v(\theta, \phi)$  que puedan corregir la distribución.

Definamos  $\sigma(\theta, \phi)$  como la densidad de probabilidad en la superficie de la esfera. Si la probabilidad es la misma para cada punto de la esfera la densidad de probabilidad es un valor constante además la integral de la densidad de probabilidad sobre la esfera es 1

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

Como la densidad de probabilidad es constante, se puede separar de la integral, resultando en una integral muy sencilla de resolver.

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

Las funciones que buscamos se encuentran separando las dependencias de  $\theta, \phi$  respectivamente

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

$$v(\phi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\phi = \frac{1}{\pi} \phi. \quad (\text{A.5})$$

Despejando los parámetros se tiene



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

donde  $u, v \in (0, 1)$ . El proceso para generar una distribución uniforme ya aleatoria de vectores unitarios en la esfera  $S^2$ , empieza por generar una distribución uniforme y aleatoria en el rectángulo  $uv$ , no supone ningún problema ya que existen algoritmos eficientes que pueden generar números pseudoaleatorios muy bien distribuidos en el intervalo  $(0, 1)$ . El siguiente paso es usar las ec. (A.6) y (A.1) para pasar a una distribución de vectores en la esfera con la ventaja de que si la distribución en el rectángulo es uniforme, la distribución en la esfera también es uniforme.

Una ventaja adicional es la posibilidad de limitar la distancia a la que se generan los vectores respecto al polo de proyección usando el parametro  $u$ , si  $u \in (0, d)$  entonces  $\theta \in (0, 2\pi d)$ . Podemos aprovechar esto para generar vectores uniformemente distribuidos en una sección circular de la esfera. En el algoritmo de Metropolis la probabilidad de aceptación se puede controlar cambiando la región en la que se generan las nuevas propuestas, una región amplia reduce la probabilidad de aceptación, por lo que limitar la generación de vectores a una región de la esfera aumenta la probabilidad de aceptación a la vez que aumenta el tiempo de autocorrelación ya que el cambio en la configuración se limita al tamaño de la región permitida para nuevas propuestas.

Para lograr nuestro objetivo se debe generar un vector aleatorio en referencia a cualquier punto sobre la esfera. Una forma sencilla es usar el método que ya desarrollamos, podemos generar un vector aleatorio  $\vec{r}$  respecto al polo de proyección y hacer una rotación del polo de proyección un punto de referencia  $\vec{s}$ . Un método conveniente para realizar la rotación consiste en calcular un vector ortonormal a  $\vec{s}$  y  $\vec{r}$  dado por el producto vectorial entre los dos vectores

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

Luego se calcula la rotación de  $\vec{s}$  por  $\theta$  respecto a  $\vec{k}$ , donde  $\theta$  es el parametro calculado para generar el vector aleatorio  $\vec{r}$ . Finalmente se tiene que el vector aleatorio respecto al vector de referencia  $\vec{s}$  es

$$\vec{s}' = \vec{s} \cos \theta + (\vec{k} \times \vec{s}) \sin \theta. \quad (\text{A.8})$$

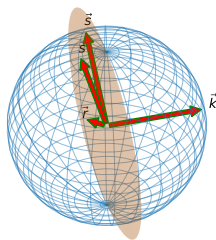


Figura A.1: Rotación de un espín  $\vec{s}$  respecto al eje de rotación  $\vec{k}$  en dirección  $\vec{r}$ .

## Apéndice B

# Algoritmo Hoshen-Kopelman aplicado al modelo 2d O(3)

La teoría de precolación se relaciona a una amplia variedad de fenómenos como:

- La magnetización espontánea de un ferromagneto.
- La propagación de enfermedades.
- La formación de geles de polímeros.
- La conductividad eléctrica en semiconductores amorfos.
- La formación de un grupo infinito de moléculas idénticas en un sistema multicomponente.

Para resolver problemas de precolación, los métodos de Monte Carlo se aplican a subretículas finitas. En este caso la teoría de precolación la probabilidad de colocar un cluster infinito en una retícula infinita, la cuestión es como tratar un cluster infinito en una retícula finita.

El algoritmo de Hoshen kopelman fue descrito por Joseph Hoshen y Raoul Kopelman en 1976 [23].

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

$$\Delta\mathcal{H} = \vec{s}_x \cdot \vec{s}_y - \vec{s}_x' \cdot \vec{s}_y. \quad (\text{B.1})$$

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

$$p_{\text{enlace}} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta\Delta\mathcal{H}} & \text{si } \Delta\mathcal{H} \geq 0 \\ 0 & \text{si } \beta\Delta\mathcal{H} < 0. \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

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

A cada espín se le asocia una etiqueta  $m_x^\alpha$  donde  $\alpha$  indica el cluster al que pertenece el espín en cuestión. El procedimiento para asociar cada espín a sus respectivos clusters es el siguiente:

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

Al probar todos los espines se forma una matriz de enlaces, la siguiente matriz es un ejemplo de matriz de enlaces en una retícula cuadrada de longitud 8

$$b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 10 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 10 & 11 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 & 0 & 10 \\ 11 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 10 \\ 10 & 11 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

El siguiente paso es usar  $b$  para etiquetar cada espín a su respectivo cluster.

1. Se selecciona el espín  $\vec{s}_x$
2. Si  $b_x = 0$  se crea un nuevo cluster  $\alpha$  y se asocia la etiqueta  $\alpha$  al espín  $\vec{s}_x$ , luego vuelve al paso 1
3. Si  $b_x > 0$  se verifica si el valor de  $b_{x+\hat{1}}$  y  $b_{x+\hat{2}}$ . Si alguno de los espines tiene enlace con un clusuter existente  $\alpha$ , entonces los espines enlazados se añaden al clusuter existente etiquétamelos con  $\alpha$ .
4. Se pasa al siguiente espín y se regresa al paso 1.

Finalmente se obtiene la matriz de clusters, donde cada valor en esta asociado a un único cluster

$$m = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 8 & 2 & 2 & 9 & 5 & 5 & 10 & 11 \\ 12 & 13 & 13 & 14 & 15 & 5 & 16 & 16 \\ 17 & 18 & 19 & 19 & 20 & 21 & 22 & 23 \\ 24 & 18 & 19 & 25 & 26 & 21 & 27 & 28 \\ 28 & 28 & 29 & 25 & 30 & 31 & 32 & 28 \\ 28 & 33 & 34 & 35 & 36 & 36 & 37 & 38 \\ 1 & 1 & 1 & 39 & 39 & 40 & 41 & 38 \end{pmatrix} \quad (\text{B.4})$$

# Bibliografía

- [1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller y E. Teller, "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines," *J. Chem. Phys.*, 21, 1087-1092, 1953.
- [2] A. Wipf, "Statistical approach to quantum field theory: an introduction," *Springer*, 7-11, 2013.
- [3] R. P. Feynman, "Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics," *Rev. Mod. Phys.*, 20, 367-387, 1948.
- [4] M. Creutz y B. Freedman, "A statistical approach to quantum mechanics," *Ann. Phys.*, 132, 427-462, 1981.
- [5] W. Bietenholz, U. Gerber, M. Pepe y U.-J. Wiese, "Topological lattice actions," *J. High Energy Phys.*, 2010, 20, 2010.
- [6] B. Berg y M. Lüscher, "Definition and statistical distributions of a topological number in the lattice  $O(3)$   $\sigma$ -model," *Nuclear Physics B*, 190, 412-424, 1981.
- [7] TODHUNTER, "SPHERICAL TRIGONOMETRY- I." *MJP PUBLISHERS*, 2021.
- [8] K. B. Athreya, H. Doss y J. Sethuraman, "On the convergence of the Markov chain simulation method," *Ann. Stat.*, 24, 69-100, 1996.
- [9] K. Binder y D. W. Heermann, "Monte Carlo Simulation in Statistical Physics," *Springer Berlin Heidelberg*, 1988.
- [10] R. H. Swendsen y J.-S. Wang, "Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations," *Phys. Rev. Lett.*, 58, 86-88, 1987.
- [11] R. J. Glauber, "Time-Dependent Statistics of the Ising Model," *J. Math. Phys.*, 4, 294-307, 1963.
- [12] U. Wolff, "Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems," *Physical Review Letters*, 62, 361-364, 1989.
- [13] G. Giachetti, N. Defenu, S. Ruffo y A. Trombettoni, "Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Phase Transitions with Long-Range Couplings," *Phys. Rev. Lett.*, 127, 156801, 2021.
- [14] H. Hinrichsen, "Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states," *Advances in Physics*, 49, 815-958, 2000.
- [15] J. M. Yeomans, "Statistical mechanics of phase transitions," *Clarendon Press ; Oxford University Press*, 16-19, 1992.
- [16] R. Ciuca y O. F. Hernández, "Information theoretic bounds on cosmic string detection in CMB maps with noise," *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 492, 1329-1334, 2020.

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