



**INSTITUTO POTOSINO DE INVESTIGACIÓN
CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C.**

POSGRADO EN CIENCIAS APLICADAS

**Estudio de Transiciones de Fase en
Redes con Interacciones de Largo Alcance**

Tesis que presenta

Marcia Vianey Bojórquez Avitia

Para obtener el grado de

Maestro en Ciencias Aplicadas

En la opción de

Nanociencias y Nanotecnología

Codirectores de la Tesis:

Dr. Aldo Humberto Romero Castro

Dr. Cristian F. Moukarzel Rodríguez

San Luis Potosí, S.L.P., mayo de 2006

CONSTANCIA DE APROBACIÓN DE LA TESIS

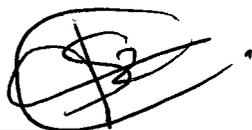
La tesis “**Estudio de Transiciones de Fase en Redes con Interacciones de Largo Alcance**” presentada para obtener el Grado de Maestro en Ciencias Aplicadas con opción en Nanociencia y Nanotecnología fue elaborada por **Marcia Vianey Bojórquez Avitia** y aprobada el **2 de mayo de 2006** por los suscritos, designados por el colegio de profesores de la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.



Dr. Cristian F. Moukarzel Rodríguez
Codirector de la tesis



Dr. Aldo Humberto Romero Castro
Codirector de la tesis



Dr. Roman López Sandoval
Asesor



Dra. Yadira Itzel Vega Cantú
Asesora



Dr. Martín Chávez Páez
Asesor externo



CRÉDITOS INSTITUCIONALES

Esta tesis fue elaborada en la División de Materiales Avanzados del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., bajo la dirección de los doctores Cristian Fernando Moukarzel Rodríguez y Aldo Humberto Romero Castro.

Durante la realización del trabajo el autor recibió una beca académica del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (No. de registro 182517) y un apoyo del proyecto de investigación básica CONACYT J42645-F.



IPICYT

Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

Acta de Examen de Grado

COPIA CERTIFICADA

El Secretario Académico del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., certifica que en el Acta 017 del Libro Primero de Actas de Exámenes de Grado del Programa de Maestría en Ciencias Aplicadas en la opción de Nanociencias y Nanotecnología está asentado lo siguiente:

En la ciudad de San Luis Potosí a los 2 días del mes de mayo del año 2006, se reunió a las 10:00 horas en las instalaciones del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., el Jurado integrado por:

Dr. Aldo Humberto Romero Castro	Presidente	CINVESTAV-Qro
Dr. Román López Sandoval	Secretario	IPICYT
Dr. Cristian F. Moukarzel Rodríguez	Sinodal externo	CINVESTAV-Mérida
Dr. Martín Chávez Páez	Sinodal externo	UASLP
Dra. Yadira Itzel Vega Cantú	Sinodal	IPICYT

a fin de efectuar el examen, que para obtener el Grado de:

**MAESTRA EN CIENCIAS APLICADAS
EN LA OPCIÓN DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA**

sustentó la C.

Marcia Vianey Bojórquez Avitia

sobre la Tesis intitulada:

Estudio de Transiciones de Fase en Redes con Interacciones de Largo Alcance.

que se desarrolló bajo la dirección de

Dr. Cristian Fernando Moukarzel Rodríguez (CINVESTAV-Mérida)
Dr. Aldo Humberto Romero Castro (CINVESTAV-Qro.)

El Jurado, después de deliberar, determinó

APROBARLA

Dándose por terminado el acto a las 11:35 horas, procediendo a la firma del Acta los integrantes del Jurado. Dando fé el Secretario Académico del Instituto.

A petición de la interesada y para los fines que a la misma convengan, se extiende el presente documento en la ciudad de San Luis Potosí, S.L.P., México, a los 2 días del mes mayo de 2006.

L.C.C. Ivonne Lizette Cuevas Velez
Jefa del Departamento de Asuntos Escolares

Dr. Marcial Bonilla Marín
Secretario Académico



A mi familia.

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer a mis asesores, profesores y compañeros.

ÍNDICE GENERAL

CONSTANCIA DE APROBACIÓN DE LA TESIS	III
CRÉDITOS INSTITUCIONALES	V
DEDICATORIA	VII
AGRADECIMIENTOS	IX
RESUMEN	XXV
ABSTRACT	XXVII
1. INTRODUCCIÓN	1
2. TRANSICIONES DE FASE	9
2.1. CONCEPTOS BÁSICOS DE MECÁNICA ESTADÍSTICA	9
2.2. TRANSICIONES DE FASE	11
2.3. LÍMITE TERMODINÁMICO	13
2.4. ESCALAMIENTO DE TAMAÑO FINITO	13
2.5. EXPONENTES CRÍTICOS	16
2.6. UNIVERSALIDAD Y LEYES DE ESCALAMIENTO	17
3. MODELO DE POTTS	21
3.1. MODELOS DE ESPÍN	22
3.2. MODELO DE ISING	22
3.2.1. EJEMPLO: EL DÍMERO	24

3.2.2. ENERGÍA Y ENTROPÍA	24
3.2.3. CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO	26
3.2.4. MODELO DE ISING CON INTERACCIONES DE LARGO AL- CANCE TIPO LRDI	27
3.3. MODELO DE POTTS	27
4. MÉTODOS NUMÉRICOS	31
4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO	31
4.1.1. METROPOLIS Y EL MODELO DE ISING	32
4.1.2. ALGORITMOS MULTIESPÍN (CLUSTER ALGORITHMS)	36
4.1.3. ALGORITMO SWENDSEN-WANG	37
4.1.4. ALGORITMO DE WOLFF	39
4.2. PARTE II: ORDEN DE LA TRANSICIÓN DE FASE	40
4.2.1. CUARTO CUMULANTE DE BINDER PARA LA MAGNETIZACIÓN .	40
4.2.2. DISTRIBUCIÓN DE ENERGÍA	42
4.2.3. MÉTODO DEL HISTOGRAMA	45
4.2.4. MÉTODO DEL MULTIHISTOGRAMA	46
5. REDES LRDP	49
5.1. REDES REGULARES, REDES ALEATORIAS Y REDES DE MUNDO PE- QUEÑO	50
5.2. FENÓMENO DE MUNDO PEQUEÑO (SMALL WORLD EFFECT)	52
5.3. CARACTERÍSTICAS PRINCIPALES DE LA ESTRUCTURA DE LAS REDES	53
5.4. MODELOS DE REDES COMPLEJAS	54
5.4.1. REDES WATTS-STROGATZ Y REDES NEWMAN-WATTS	55
5.5. REDES CON ENLACES DE LARGO ALCANCE CON PROBABILIDAD DE- CRECIENTE (REDES LRDP)	57
5.5.1. GENERACIÓN DE REDES LRDP	59
5.6. CAMINOS	59
5.7. DIMENSIÓN EFECTIVA	60

6. RESULTADOS	63
6.1. MODELO DE POTTS DE DOS ESTADOS: $q = 2$	63
6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$	68
6.2.1. REGIÓN I: TRANSICIONES DE PRIMER ORDEN	69
6.2.2. REGIÓN II: TRANSICIONES DE SEGUNDO ORDEN	76
6.2.3. REGIÓN III: AUSENCIA DE TRANSICIONES DE FASE	77
7. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS	81
7.1. SUMARIO Y CONCLUSIONES	81
7.1.1. MODELO DE POTTS DE 2 ESTADOS	81
7.1.2. MODELO DE POTTS DE 3 ESTADOS	82
7.1.3. CONCLUSIÓN GENERAL	83
7.2. PERSPECTIVAS	84

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1. (A) UN SISTEMA FÍSICO CON INTERACCIONES DE LARGO ALCANCE (LINEAS PUNTEADAS) PROVOCADAS POR LOS DOBLAMIENTOS DEL MISMO, PUEDE SER REPRESENTADO POR (B) UNA RED UNIDIMENSIONAL LRDP , DONDE TODAS LAS INTERACCIONES ENTRE SITIOS SON UNITARIAS Y EL CARÁCTER NO UNIDIMENSIONAL DEL SISTEMA QUEDA REPRESENTADO POR MEDIO DE LOS ENLACES DE LARGO ALCANCE (ENLACES PUNTEADOS) PRESENTES DE LA RED.	3
1.2. LA ESTRUCTURA DE LAS REDES LRDP . LA PROBABILIDAD DE FORMAR ENLACES DE LARGO ALCANCE p SE RIGE POR $r_{ij}^{-\alpha}$. SE MUESTRAN DOS CASOS EXTREMOS DE LA REDES LRDP , CONSIDERANDO 16 NODOS. EN (A) SE MUESTRA EL CASO $\alpha = 0.1$, DONDE LOS ENLACES DE LARGO ALCANCE AÑADIDOS UNEN SITIOS QUE ESTÁN MUY ALEJADOS ENTRE SÍ. EN ESTE RÉGIMEN, LA LONGITUD DEL CAMINO MÁS CORTO PROMEDIO ES PEQUEÑO Y ESCALA COMO $\log(L)$. EN (B) SE MUESTRA UNA RED CORRESPONDIENTE A $\alpha = 2.3$, DONDE LOS ENLACES AÑADIDOS UNEN SITIOS MÁS CERCANOS ENTRE SÍ EN LA RED. EN ESTE RÉGIMEN LA LONGITUD DEL CAMINO MÁS CORTO PROMEDIO ESCALA COMO L	5
2.1. SE ILUSTRAN LA EVOLUCIÓN DEL HISTOGRAMA RESPECTO A LA TEMPERATURA. PARA CADA TAMAÑO SE OBSERVA UNA TEMPERATURA MENOR QUE T_c (FIGURAS (A), (D) Y (G)), DONDE HAY MAYOR PROBABILIDAD DE ESTAR EN LA FASE A BAJAS TEMPERATURAS. EN LA TEMPERATURA CRÍTICA HAY LA MISMA PROBABILIDAD DE ESTAR EN UNA FASE QUE EN LA OTRA; ESTO Y EL VALOR ESTIMADO PARA LA TEMPERATURA CRÍTICA PARA CADA TAMAÑO SE MUESTRA EN (B), (E) Y (H). POR ENCIMA DE LA TEMPERATURA CRÍTICA HAY MÁS PROBABILIDAD DE ESTAR EN LA FASE DE ALTAS TEMPERATURAS (FIGURAS (C), (F) Y (G)). EL HECHO DE QUE LA TEMPERATURA CRÍTICA CAMBIE CON EL TAMAÑO DESCRIBE UN EFECTO DE TAMAÑO FINITO.	15

3.1. CONFIGURACIONES DE ESPÍN PARA EL DÍMERO. (A) CONFIGURACIONES DE ESPINES PARALELOS. ESTAS CONFIGURACIONES CORRESPONDEN AL CASO DE MÍNIMA ENERGÍA ($-J$) CUANDO $J > 0$. (B) CONFIGURACIONES DE ESPÍN CORRESPONDIENTES A LA ENERGÍA MÍNIMA PARA EL CASO $J < 0$	25
4.1. DIAGRAMA DE FLUJO DE METROPOLIS. LA SIMULACIÓN DE METROPOLIS PARTE DE UNA CONFIGURACIÓN DE ESPÍN INICIAL. SE ELIGE UN ESPÍN i AL AZAR Y AL VALOR ALTERADO DEL ESPÍN LO DENOMINAREMOS i' . SE CALCULA LA DIFERENCIA DE ENERGÍA $\Delta E = E_{i'} - E_i$. SI $\Delta E < 0$ SE CONSERVA EL NUEVO VALOR DE ESPÍN i' . SI $\Delta E > 0$ SE GENERA UN NÚMERO ALEATORIO r ($0 < r < 1$), CUANDO $r < \exp(-\beta\Delta E)$ SE CONSERVA EL NUEVO VALOR DEL ESPÍN, EN CASO CONTRARIO LA CONFIGURACIÓN PERMANECE SIN ALTERACIONES.	34
4.2. EXISTEN DOS TIPOS DE MÉTODOS DE MONTE CARLO, LOS ALGORITMOS LOCALES (COMO METROPOLIS) Y LOS ALGORITMOS NO LOCALES (COMO EL ALGORITMO DE SWENDESEN-WANG (SW) Y EL DE WOLFF). LOS ALGORITMOS NO LOCALES PUEDEN CAMBIAR EL VALOR DE TODO UN CONJUNTO DE ESPINES EN UNA SOLA ITERACIÓN Y, A DIFERENCIA DE METROPOLIS SON EFICIENTES ALREDEDOR DEL PUNTO CRÍTICO.	37
4.3. ALGORITMO DE SW PARA EL MODELO DE POTTS DE 3-ESTADOS. LA CONFIGURACIÓN INICIAL SE MUESTRA EN (A) DONDE CADA COLOR REPRESENTA UN VALOR DE ESPÍN, EN (B) SE REALIZA EL PROCESO DE CONSTRUCCIÓN DE CÚMULOS Y, (C) UN NUEVO VALOR DE ESPÍN ES ASIGNADO A CADA CÚMULO GENERANDO UNA NUEVA CONFIGURACIÓN.	39
4.4. SE ILUSTRAN EL ALGORITMO DE WOLFF PARA EL MODELO DE POTTS DE 3-estados. EN (A) SE MUESTRA LA CONFIGURACIÓN INICIAL DONDE A CADA VALOR DEL ESPÍN SE LE ASIGNA UN COLOR, DESPUÉS (B) SE ESCOGE UN SITIO ALEATORIAMENTE Y SE CONSTRUYE EL CÚMULO CORRESPONDIENTE Y, (C) SE ASIGNA UN NUEVO VALOR DE ESPÍN AL CÚMULO.	40
4.5. U_L vs. T . A TEMPERATURAS BAJAS $U_L \sim \frac{2}{3}$. ALREDEDOR DE T_c , CUANDO $T < T_c$ SE OBSERVA QUE $U_{1600} < U_{3200}$; CUANDO $T > T_c$ SE TIENE QUE $U_{1600} > U_{3200}$. LA TEMPERATURA CRÍTICA PUEDE OBTENERSE EN BASE A LA INTERSECCIÓN DE LOS CUMULANTES.	41

- 4.6. HISTOGRAMA DE ENERGÍA PARA $L = 9000$ Y $\alpha = 0.1$. LEJOS DE LA TEMPERATURA CRÍTICA (A Y E), EL HISTOGRAMA DE ENERGÍA MUESTRA UN ÚNICO MÁXIMO. ALREDEDOR DE T_c SE OBSERVAN DOS MÁXIMOS EN EL HISTOGRAMA DE ENERGÍA (B, C Y D). AL APROXIMARSE A T_c POR DEBAJO (B), LA FASE DE BAJAS TEMPERATURAS TIENE MAYOR PESO EN LA DISTRIBUCIÓN. EN LA TEMPERATURA CRÍTICA EL SISTEMA TIENE LA MISMA PROBABILIDAD DE ESTAR EN CUALQUIERA DE LAS DOS FASES. (C) SE PUEDE ESTIMAR T_c COMO LA TEMPERATURA A LA CUAL LOS MÁXIMOS TIENEN LA MISMA ALTURA. (D) CUANDO LA TEMPERATURA ES CERCANA Y MAYOR A T_c , HAY MÁS PROBABILIDAD DE QUE EL SISTEMA ESTÉ EN LA FASE DE ALTAS TEMPERATURAS. . . . 44
- 5.1. CUATRO DIFERENTES MODELOS DE REDES, TODOS FUERON DISEÑADOS PARA MIMETIZAR REDES DEL MUNDO REAL. (A) UNA RED BIDIMENSIONAL. (B) RED ALEATORIA GENERADA CON EL MODELO DE ERDŐS-RÉNYI CORRESPONDIENTE A $N = 24$ Y $m = 60$ CON $p = 0.14$. (C) MODELO DE WATTS Y STROGATZ, CADA NODO ($N = 24$) ESTÁ CONECTADO A LOS PRIMEROS VECINOS Y A LOS SEGUNDOS PRIMEROS VECINOS, DONDE CUATRO ENLACES ESTÁN REUBICADOS CON UNA PROBABILIDAD DE REUBICACIÓN $p = 0.08$. (D) UNA RED LIBRE DE ESCALA CON GRADO DE DISTRIBUCIÓN $P(k) \propto K^{-2.2}$. FIGURA TOMADA DE [67]. 51
- 5.2. EJEMPLOS DE REDES REGULARES TRIDIMENSIONALES. (A) RED CÚBICA SIMPLE, LOS SITIOS ESTÁN SITUADOS EN LOS VÉRTICES DE UN CUBO. (B) RED CÚBICA CENTRADA EN EL CUERPO, ADEMÁS DE LOS SITIOS EN LOS VÉRTICES HAY UN SITIO EN EL CENTRO DEL CUBO. (C) RED CÚBICA CENTRADA EN LAS CARAS, EN ESTA RED LOS SITIOS ESTÁN LOCALIZADOS EN LOS VÉRTICES ASÍ COMO EN EL CENTRO DE CADA CARA DEL CUBO. ESTAS REDES SON FRECUENTEMENTE ESTUDIADAS EN LA FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO YA QUE REPRESENTAN ALGUNAS ESTRUCTURAS CRISTALINAS. . . . 51
- 5.3. REDES GENERADAS CON EL MODELO WATTS-STROGATZ. AL INCREMENTAR EL VALOR DE LA PROBABILIDAD DE INCREMENTAR EL REUBICAMIENTO DE ENLACES, SE PRODUCEN TRANSICIONES DE FASE ESTRUCTURALES: I) TRANSICIÓN DE RED ORDENADA A RED DE MUNDO PEQUEÑO Y II) TRANSICIÓN DE RED DE MUNDO PEQUEÑO A RED ALEATORIA. FIGURA TOMADA Y MODIFICADA DE [68]. 55

5.4. REDES DE MUNDO PEQUEÑO EN LAS CUALES SE REALIZA LA TRANSICIÓN DE RED REGULAR A RED ALEATORIA. EN (A) SE MUESTRA UN EJEMPLO DEL MODELO DE WATTS-STROGATZ CON REUBICAMIENTO DE ENLACES. EN (B) SE ILUSTR A UNA MODIFICACIÓN DEL MODELO WATTS-STROGATZ, DONDE A LA RED REGULAR SE LE AÑADEN ENLACES DE LARGO ALCANCE. FIGURA TOMADA DE [73].	56
5.5. LA ESTRUCTURA DE LAS REDES LRDP MUESTRA UNA GRAN DIVERSIDAD AL CAMBIAR EL VALOR DE α . EN LA FIGURA SE ILUSTRAN TRES REDES LRDP DE 16 NODOS. (A) SE MUESTRA UNA RED DONDE $\alpha = 0.1$, ESTA RED CORRESPONDE AL RÉGIMEN DONDE EL CAMINO MÁS CORTO MEDIO ESCALA COMO $\log(L)$. EN (B) SE ILUSTR A UNA COPIA DE LA RED (O MUESTRA) PARA $\alpha = 1.3$, ESTA RED CORRESPONDE A LA REGIÓN DONDE $\ell(L) \propto \log(L)^\theta$. (C) SE MUESTRA UNA RED CORRESPONDIENTE A $\alpha = 2.3$, AQUÍ EL CAMINO MÁS CORTO MEDIO ESCALA COMO $\ell(L) \propto L$	58
5.6. GENERACIÓN DE UNA RED LRDP. EN LA FIGURA SE EJEMPLIFICA EL CASO $L = 16$ Y $\alpha = 0.1$. EN (A) SE ILUSTR A EL PRIMER PASO EN LA CONSTRUCCIÓN DE LA RED, DESDE EL PRIMER SITIO SE CREA UN ENLACE DE CORTO ALCANCE HACIA SU PRIMER VECINO A LA DERECHA. (B) MUESTRA EL SEGUNDO PASO, GENERAR UN ENLACE DE LARGO ALCANCE DE ACUERDO A $p_{ij} \sim r_{ij}^{-\alpha}$, EL CUAL UNE AL SITIO CON AQUEL SITIO j QUE SE ENCUENTRA r_{ij} ENLACES A LA DERECHA. (C) AL REPETIR LOS PASOS 1 Y 2 EN TODOS LOS SITIOS OBTENEMOS UNA MUESTRA DE LA RED LRDP PARA EL TAMAÑO Y EL VALOR DE α DADO.	60
6.1. CUMULANTE DE BINDER DE CUARTO ORDEN EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA. EN LA FIGURA SE MUESTRA QUE LOS CUMULANTES DE BINDER (PARA $0.1 \leq \alpha \leq 1.9$) SE INTERSECTAN CASI EN EL MISMO PUNTO. LA ESTIMACIÓN DE LA TEMPERATURA CRÍTICA PUEDE CALCULARSE A PARTIR DE LA INTERSECCIÓN DE LAS CUATRO CURVAS DEL CUMULANTE DE BINDER OBTENIDAS PARA LOS TAMAÑOS $L = 400, 500, 600$ Y 700 ($\alpha \leq 1.9$) Y $L = 400, 800, 1600$ Y 3200 ($\alpha = 1.95$).	65
6.2. U vs. T. EL CASO PARTICULAR $\alpha = 2.1$ SE ILUSTR A EN LA FIGURA. EN LAS TRANSICIONES DE FASE CONTINUAS SE SABE QUE EL CUMULANTE DE BINDER ES $\sim 2/3$ PARA TEMPERATURAS BAJAS. SE TIENE QUE $U_{L_1} < U_{L_2}$ PARA $T < T_c$ Y QUE $U_{L_1} > U_{L_2}$ PARA $T > T_c$, CUANDO $L_1 < L_2$. ENTONCES, PARA $\alpha \geq 2.1$ SE ESTIMA QUE $T_c = 0$	66

6.3. C_v vs. T , PARA $\alpha = 2.1$. EN UNA TRANSICIÓN DE FASE CONTINUA, EL MÁXIMO DEL CALOR ESPECÍFICO ESCALA COMO $L^{\alpha/\nu}$. CUANDO LA TRANSICIÓN DE FASE ES DISCONTINUA, EL MÁXIMO DEL CALOR ESPECÍFICO ESCALA COMO EL TAMAÑO DEL SISTEMA. EN LA FIGURA SE APRECIA QUE EL MÁXIMO DEL CALOR ESPECÍFICO NO SE RIGE POR EL ESCALAMIENTO PROPIO DE LAS TRANSICIONES DE FASE.	66
6.4. TEMPERATURA CRÍTICA EN FUNCIÓN DE α . PARA ESTE CASO DEL MODELO DE POTTS ($q = 2$), SE DISTINGUEN DOS REGIONES. EN LA REGIÓN I ($\alpha < \alpha_c$, DONDE $1.95 < \alpha_c < 2.05$) SE IDENTIFICARON TRANSICIONES CONTINUAS. LAS TEMPERATURAS CRÍTICAS Y SUS ERRORES CORRESPONDIENTES SE ILUSTRAN EN LA PRIMER REGIÓN. CUANDO $\alpha \geq 2.05$ (REGIÓN II), NO HAY TRANSICIONES DE FASE. COMO T_c DECAE RAPIDAMENTE, SE ASUME QUE EN LA REGIÓN II NO HAY TRANSICIONES DE FASE.	67
6.5. HISTOGRAMAS DE ENERGÍAS CORRESPONDIENTES A T_c . DE IZQUIERDA A DERECHA Y DE ARRIBA HACIA ABAJO, SE MUESTRA EL HISTOGRAMA DE ENERGÍA PARA UN VALOR ASCENDENTE DE α Y DISTINTOS TAMAÑOS DEL SISTEMA. PARA UN MISMO α , AL INCREMENTAR EL TAMAÑO DEL SISTEMA SE HACEN MÁS EVIDENTES LOS DOS MÁXIMOS DE $P(e)$. EVIDENCIANDO ASÍ UNA TRANSICIÓN DISCONTINUA. POR OTRO LADO, PARA UN MISMO TAMAÑO, AL INCREMENTAR α SE HACEN MENOS EVIDENTES LOS MÁXIMOS DE $P(e)$. ESTO INDICA LA EXISTENCIA DE α_{c1} , A PARTIR DEL CUAL NO HAY TRANSICIONES DE FASE DISCONTINUAS. PARA OBTENER UNA BUENA ESTIMACIÓN DE LA TEMPERATURA CRÍTICA SE UTILIZÓ EL MÉTODO DE EXTRAPOLACIÓN DE FERRENBURG-SWENDSEN.	70
6.6. HISTOGRAMAS DE ENERGÍAS CORRESPONDIENTES A T_c . DE IZQUIERDA A DERECHA Y DE ARRIBA HACIA ABAJO, SE MUESTRA EL HISTOGRAMA DE ENERGÍA PARA UN VALOR ASCENDENTE DE α Y DISTINTOS TAMAÑOS DEL SISTEMA. CADA FIGURA DESCRIBE UNA TRANSICIÓN DE FASE DE PRIMER ORDEN PARA UN VALOR DADO DEL PARÁMETRO α . A MEDIDA QUE SE INCREMENTA EL PARÁMETRO α LA TRANSICIÓN DE FASE DISCONTINUA SE HACE MÁS DÉBIL. POR ESTA RAZÓN, EN LOS VALORES MÁS GRANDES DE α SÓLO SE UTILIZAN LOS SISTEMAS MÁS GRANDES. LOS HISTOGRAMAS ENERGÍA MOSTRADOS SE OBTUVIERON UTILIZANDO EL MÉTODO DE EXTRAPOLACIÓN DE FERRENBURG-SWENDSEN.	71

6.7. T_c vs. $1/L$. PARA OBTENER LA TEMPERATURA CRÍTICA EN EL LÍMITE TERMODINÁMICO, SE GRAFICAN LOS DATOS OBTENIDOS PREVIAMENTE (PARA CADA α) Y SE AJUSTAN A UNA RECTA. LA INTERSECCIÓN DE LA RECTA CON EL EJE DE LAS ABCISAS PROPORCIONA EL VALOR DE LA TEMPERATURA CRÍTICA.	73
6.8. T_c vs. $1/L$. PARA CADA VALOR DE α SE MUESTRA LA TEMPERATURA CRÍTICA EN FUNCIÓN DE $1/L$. PARA OBTENER EL VALOR DE LA TEMPERATURA CRÍTICA EN EL LÍMITE TERMODINÁMICO LOS DATOS SE AJUSTAN A UNA RECTA. Y DICHA TEMPERATURA CRÍTICA SE ESTIMA EVALUANDO LA FUNCIÓN EN ($1/L = 0$).	74
6.9. $\Delta E(L)$ vs. α . CADA FIGURA MUESTRA EL CALOR LATENTE EN FUNCIÓN DE α , PARA UN TAMAÑO FIJO. LOS DATOS (EN ROJO) SE APROXIMAN A LA CURVA $\Delta E(\alpha - \alpha_{c1})$ (AZUL) A LA CUAL SE APROXIMA. EN BASE A ESTE AJUSTE SE PUEDE DETERMINAR EL VALOR CRÍTICO $\alpha_{c1}(L)$ PARA CADA TAMAÑO.	75
6.10. $\alpha_{c1}(1/L)$ vs. $1/L$. PARA ESTIMAR EL VALOR DE α_{c1} EN EL LÍMITE TERMODINÁMICO, PRIMERO SE AJUSTAN LOS DATOS (REPRESENTADOS POR PUNTOS, EL ERROR ESTÁ REPRESENTADO POR LA BARRAS AZULES.) A UNA RECTA (LÍNEA ROJA). DESPUÉS SE EVALUA LA RECTA EN ($1/L$) = 0. EL VALOR ESTIMADO DE α_{c1} ES 1.7 ± 0.1	76
6.11. CUMULANTE DE BINDER DE CUARTO ORDEN EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA. EN LA FIGURA SE MUESTRAN CUMULANTES DE BINDER PARA LA REGIÓN II ($\alpha_{c1} \leq \alpha < \alpha_{c2}$). LOS CUMULANTES CONVERGEN CASI EN UN MISMO PUNTO. LA ESTIMACIÓN DE LA TEMPERATURA CRÍTICA PUEDE CALCULARSE A PARTIR DE LA INTERSECCIÓN DE LAS CUATRO CURVAS DEL CUMULANTE DE BINDER OBTENIDAS. PARA $\alpha = 1.7$ Y 1.9 , LOS TAMAÑOS SON $L = 300, 480, 540$ Y 600 , MIENTRAS QUE PARA $\alpha = 1.95$ FUE NECESARIO UTILIZAR SISTEMAS MÁS GRANDES ($L = 300, 600, 1200$ Y 2400).	78
6.12. U vs. T , PARA EL MODELO DE POTTS DE $q = 3$ ESTADOS. EN LA GRÁFICA SE ILUSTRAN EL EJEMPLO $\alpha = 2.1$. EN LA FIGURA PODEMOS OBSERVAR QUE AUNQUE DOS CUMULANTES SE PUEDEN INTERSECTAR A TEMPERATURA FINITA, EL ÚNICO PUNTO DONDE SE INTERSECTAN LAS TRES CURVAS DE LOS CUMULANTES ES EN $T = 0$	79
6.13. C_v vs. T . EN LA FIGURA, EL COMPORTAMIENTO DE C_L^{Max} NO CORRESPONDE A UNA TRANSICIÓN DE FASE CONTINUA (DONDE $C_L^{Max} \sim L^{\alpha/\nu}$). EL MÁXIMO DEL CALOR ESPECÍFICO TAMPOCO ESCALA DE ACUERDO A UN TRANSICIÓN DE FASE DISCONTINUA ($C_L^{Max} \sim L$). EL ESCALAMIENTO DE C_L^{Max} NO CORRESPONDE AL ESCALAMIENTO CARACTERÍSTICO DE LAS TRANSICIONES DE FASE.	79

6.14. PARA EL MODELO DE POTTS DE 3-ESTADOS SE IDENTIFICAN TRES REGIONES: EN LA REGIÓN I ($\alpha < \alpha_{c1}$) LA TRANSICIÓN DE FASE ES DISCONTINUA. EL VALOR DEL PUNTO QUE DIVIDE LA REGIÓN DE TRANSICIONES DISCONTINUAS DE LAS CONTINUAS ES $\alpha_{c1} = 1.7 \pm 0.1$. EN LA REGIÓN II ($\alpha_{c1} < \alpha < \alpha_{c2}$) LA TRANSICIÓN DE FASE ES CONTINUA. LA REGIÓN III ($\alpha \geq \alpha_{c2}$, DONDE $1.95 < \alpha_{c2} \leq 2.05$) SE DISTINGUE POR LA AUSENCIA DE TRANSICIONES DE FASE. 80

ÍNDICE DE CUADROS

2.1. EXPONENTES CRÍTICOS DE SISTEMAS MAGNÉTICOS. LOS EXPONENTES CRÍTICOS, SUS DEFINICIONES ASÍ COMO LAS CONDICIONES EN LAS QUE SON VÁLIDOS SE RESUMEN EN EL CUADRO. CUADRO TOMADO Y MODIFICADO DE [2].	19
2.2. VALORES NUMÉRICOS DE LOS EXPONENTES CRÍTICOS. SE MUESTRAN LOS VALORES QUE TOMAN LOS EXPONENTES CRÍTICOS PARA ALGUNOS SISTEMAS MAGNÉTICOS Y MODELOS RESUELTOS. CUADRO TOMADO Y MODIFICADO DE [2].	19
5.1. PROPIEDADES DE LAS REDES. LAS CARACTERÍSTICAS QUE EXHIBEN LAS REDES DE MUNDO PEQUEÑO LAS SITUAN ENTRE LAS REDES ALEATORIA Y LAS REDES REGULARES.	54

RESUMEN

Las interacciones de largo alcance son de gran relevancia en muchas de las fuerzas existentes en la naturaleza. Algunos ejemplos de este tipo de interacciones son las electrostáticas y las fuerzas de polarización.

Podemos identificar más de un tipo de interacción de largo alcance. Por un lado están las interacciones cuya magnitud decae en función de la distancia. Por otro lado, en algunos sistemas es más importante la conectividad que la magnitud de la interacción. En estos sistemas la magnitud de la interacción puede ser constante pero no todos los sitios están conectados entre sí. Ejemplos de estos sistemas son: las propiedades magnéticas y de conducción de cadenas poliméricas, redes neuronales, la dispersión del fuego y la propagación de enfermedades. Una buena forma de representar sistemas de este tipo es mediante las redes con interacciones de largo alcance donde la probabilidad de formar enlaces decrece con la distancia (redes LRDP). Las redes LRDP 1D se construyen a partir de una cadena lineal, a la cual se le añaden enlaces de largo alcance de acuerdo a la probabilidad $p_{ij} \propto r_{ij}^{-\alpha}$ de formar enlaces de largo alcance entre los sitios i y j separados por una distancia r_{ij} . En estas redes, los valores grandes del parámetro de estructura α favorecen los enlaces entre sitios separados a la menor distancia posible.

En esta tesis se estudian las transiciones de fase magnéticas de las redes LRDP 1D, en el contexto del modelo de Potts. Se aprovecha la estructura de las redes LRDP para estudiar el efecto de las interacciones de largo alcance en sistemas magnéticos.

Para el desarrollo de la tesis se utilizó un método de Monte Carlo (el algoritmo de Wolff), aplicado a redes LRDP 1D. El algoritmo es eficaz en el estudio de transiciones de fase. Para distinguir el orden de la transición y determinar la temperatura crítica, se analizó el histograma de energías y el cumulante de Binder de cuarto orden de la magnetización. Con el fin de mejorar la precisión de algunos datos obtenidos de las simulaciones numéricas, se utilizó la *técnica de extrapolación de Ferrenberg-Swendsen*. En el caso de las transiciones de primer

orden, se analizó el comportamiento del calor latente.

Se estudiaron los casos $q = 2$ (Ising) y $q = 3$ del modelo de Potts. Se determinó el orden de la transición de fase y se estimó la temperatura crítica. Para $q = 2$ estados, se observó la ausencia de transiciones de fase cuando $\alpha > \alpha_{c2}$ (donde $\alpha_{c2} = 2.00 \pm 0.05$). En el caso $\alpha < \alpha_{c2}$, se determinó la existencia de transiciones de fase de segundo orden. Para el caso $q = 3$ -estados, el sistema no exhibe transiciones de fase con $\alpha > \alpha_{c2}$ (con $\alpha_{c2} = 2.00 \pm 0.05$). Cuando $\alpha < \alpha_{c1}$ ($\alpha_{c1} = 1.7 \pm 0.1$) existen transiciones de fase de segundo orden. Se observó la presencia de transiciones de fase de primer orden en la región $\alpha_{c1} < \alpha < \alpha_{c2}$. Los resultados obtenidos en este trabajo de tesis para redes LRDP son muy semejantes a los correspondientes a interacciones de largo alcance que decaen con la distancia.

Palabras clave: Interacción de largo alcance, interacción de corto alcance, transiciones de fase magnéticas, red, Método de Monte Carlo, Modelo de Potts.

ABSTRACT

Long range interactions are important in many natural systems. Some examples of this kind of interactions are the electrostatic and polarization forces.

We can identify more than one type of long range interactions. On one side are interactions in whose intensity decays as a function of the distance. On the other side, in some systems the connectivity is more important than the interaction intensity. In these systems the magnitude of the interaction can be constant but not all pairs of sites are connected. Examples of these systems are: the magnetic and conduction properties of polymeric strings, neural networks, propagation of fire and disease. A good representation of these systems are the Long Range Decaying Probabilities networks (LRDP). The LRDP 1D networks are generated from a lineal string, then long range links are added with probability $p_{ij} \propto r_{ij}^{-\alpha}$, where p_{ij} is the probability of adding a long range link between the sites i and j , separated by the distance r_{ij} . In these networks, large values of the structure parameter α generate links between sites separated by the smallest distance possible, while small values of α generate random graphs.

In this thesis we study the magnetic phase transitions of networks LRDP 1D, in the context of the Potts model. We take advantage of the LRDP network's structure to study the effect of the long range interactions on magnetic systems.

For the development of the thesis we used a Monte Carlo method (the Wolff algorithm), applied to LRDP 1D. The algorithm was efficient in the study of phase transitions. In order to distinguish the order of the transition and determine the critical temperature, we analyzed the histogram of energy and the Binder fourth order cumulant of magnetization. With the purpose of improving the data obtained from the Monte Carlo simulation, the Reweighting technique was used. In the case of first order transitions, the behaviour of the latent heat was analyzed.

The cases $q = 2$ (Ising) and $q = 3$ of the Potts model were studied. The order of the phase transition and the critical temperature were determined. For the $q = 2$ case, no exist phase transitions exist when $\alpha > \alpha_{c2}$ (where $\alpha_{c2} = 2.00 \pm 0.05$). In constrast, when $\alpha < \alpha_{c2}$ it was determined the existence of second

order transitions. In $q = 3$ -estates case, the system do not show phase transitions for $\alpha > \alpha_{c2}$ (with $\alpha_{c2} = 2.00 \pm 0.05$). Where $\alpha < \alpha_{c1}$ ($\alpha_{c1} = 1.7 \pm 0.1$) exist second order transitions. While first order transitions were shown $\alpha_{c1} < \alpha < \alpha_{c2}$. The results from these thesis work are highly in agreement with those corresponding to those long range interactions which decays with the distance.

Key words: Long range interaction, short range interaction, magnetic phase transitions, network, Monte Carlo method, Potts model.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

Muchas de las fuerzas moleculares que juegan un papel importante en las áreas de química, física y biología tienen una naturaleza de largo alcance. Algunos ejemplos de este tipo de interacciones son las fuerzas: electrostáticas, de polarización, etc. A pesar de su importancia, todavía hay grandes deficiencias en el entendimiento del efecto de las interacciones de largo alcance.

Todas las interacciones conocidas en la naturaleza son no nulas a cualquier distancia. En los sistemas magnéticos, la magnitud de la interacción entre los momentos magnéticos está representada por una constante de intercambio J . Sin embargo, algunas fuerzas decaen rápidamente (al punto que son despreciables a distancias moderadas), mientras que otras son relevantes aún a grandes distancias (en este caso se dice que la interacción es de largo alcance). Se puede considerar como una interacción de corto alcance toda aquella interacción que decae más rápido que $1/r^d$, donde r es la distancia entre las partículas que interactúan, y d es la dimensión del sistema.

Los modelos de espín se utilizan para simular materiales magnéticos, principalmente para estudiar las transiciones entre fases. En un modelo de espín, las variables de espín se asocian con los sitios de la red. Los diferentes modelos de espín se identifican por los diferentes tipos de variable de espín. Por ejemplo, en el modelo de Ising (uno de los modelos más estudiados) la variable de espín tiene sólo dos estados. Mientras que en el modelo de Potts la variable de espín

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

tiene q estados, $q = 2, 3, \dots$

Una transición de fase es el punto que separa dos regiones con comportamiento analítico diferente de la función de partición (dos fases). Una posible clasificación de las transiciones de fase fue propuesta por Ehrenfest [1], la cual divide las transiciones de fase de acuerdo al orden de la primera derivada de la energía libre, en la cual exista una singularidad. De acuerdo a la clasificación moderna [2], existen transiciones de fase de primer orden (también conocidas como transiciones discontinuas) y de segundo orden (denominadas transiciones continuas). En una transición de fase existe una temperatura crítica (temperatura de Curie) a partir de la cual el parámetro de orden se desvanece. En los sistemas magnéticos el parámetro de orden es la magnetización. Los procesos del sistema que ocurren alrededor de la temperatura crítica, se conocen como fenómenos críticos.

Existe una gran variedad de sistemas donde la conectividad de la red, y no la magnitud de la interacción, es determinante para el comportamiento físico de este [3]. Algunos ejemplos de esto son: las propiedades magnéticas [4] y de conducción [5,6] de cadenas poliméricas (donde el doblamiento de la cadena induce enlaces de largo alcance de acuerdo a una probabilidad que decae como una ley de potencias de la distancia química entre dos monómeros), redes neuronales [7,8], la dispersión de fuego y de enfermedades [9,10], etc. Una buena forma de representar este tipo de sistemas es mediante las redes con interacciones de largo alcance denominadas redes **LRDP** (por sus siglas en inglés, Longe Range Decaying Probabilities) [3]. Las redes **LRDP** 1D, se construyen con una red unidimensional de N sitios (o nodos) como base, en donde cada nodo i está conectado a los nodos $(i - 1)$ e $(i + 1)$. Además de los enlaces entre primeros vecinos, cada nodo i se conecta a un nodo j obedeciendo la probabilidad $p_{ij} \propto r_{ij}^{-\alpha}$ de formar un enlace de largo alcance entre los sitios i y j que están separados una distancia euclidiana r_{ij} , donde α se conoce como el parámetro de estructura.

En la Fig. 1.1, se ilustra como se puede representar un sistema físico en dimensión d con una red unidimensional con interacciones de largo alcance unitarias. A una red (o grafo) puede asignarse una dimensión efectiva d_e . La di-

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

dimensión efectiva de la red **LRDP** representa la dimensión del sistema físico modelado. Así pues, un sistema en dimensión d ($d \geq 1$) puede representarse por una red **LRDP** unidimensional donde la información acerca de la dimensión del sistema (dimensión efectiva) queda implícita en la estructura de la red.

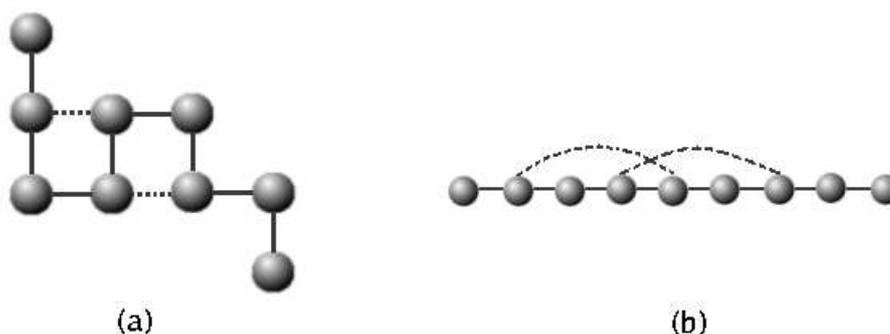


Figura 1.1: (a) Un sistema físico con interacciones de largo alcance (líneas punteadas) provocadas por los doblamientos del mismo, puede ser representado por (b) una red unidimensional **LRDP**, donde todas las interacciones entre sitios son unitarias y el carácter no unidimensional del sistema queda representado por medio de los enlaces de largo alcance (enlaces punteados) presentes de la red.

Las redes **LRDP** se clasifican dependiendo de α , como: (i) redes regulares o (ii) redes de *mundo pequeño* (*i.e.*, redes donde se puede llegar de un sitio a otro por medio de una pequeña cantidad de enlaces intermedios). En una red se puede llegar desde un punto de la red a otro por medio de más de un camino (donde un camino es una secuencia determinada de enlaces utilizados para unir dos sitios de la red). La cantidad mínima de enlaces necesarios para unir dos puntos de la red se conoce como *longitud del camino más corto* $\ell(L)$.

En los últimos años se han analizado algunos aspectos de estas redes en el caso unidimensional. Por ejemplo, las propiedades de los caminos aleatorios y la longitud del camino más corto, para sistemas pequeños [11, 12] en función del parámetro de estructura α , y también para sistemas grandes [3]. Se ha discutido en mayor detalle la longitud del camino más corto para $d = 1$, clasificando su comportamiento en: (a) para $\alpha > 2$ el camino más corto promedio escala pro-

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

porcional al tamaño del sistema (es decir, $\ell(L) \propto L$), esta relación se observa en redes regulares. (b) Cuando $1 < \alpha < 2$, $\ell(L) \propto L^\theta$, donde θ es un exponente no trivial, y $0 < \theta < 1$. (c) Para $\alpha < 1$, se tiene que $\ell(L) \propto \log(L)$, como sucede en las redes aleatorias.

En estas redes, los valores grandes del parámetro de estructura α favorecen los enlaces entre los sitios separados por la menor distancia euclidiana posible; esto lo podemos observar en la Fig. 1.2, en la cual se muestran dos ejemplos contrastantes de la estructura de estas redes. En la Fig. 1.2.a se muestra un ejemplo de un valor pequeño de α ($\alpha = 0.1$), donde en los enlaces de largo alcance añadidos se favorece la unión de sitios que están muy alejados entre sí. Estos enlaces de largo alcance sirven como atajos en los caminos. Debido a la longitud de estos enlaces de largo alcance en este régimen de α , la longitud del camino más corto promedio es pequeña y escala como $\log(L)$. En (b) se muestra una red correspondiente a un valor grande ($\alpha = 2.3$), donde los enlaces añadidos unen sitios cercanos entre sí. En este régimen la longitud del camino más corto promedio escala como L .

Actualmente, no se conoce el comportamiento magnético de las redes **LRDP**. El objetivo de este trabajo de tesis es estudiar las transiciones de fase magnéticas en dichas redes. Aquí se presenta un estudio dentro del marco del modelo de Potts del comportamiento magnético de dichas redes, para los casos del modelo de $q = 2$ (Ising) y $q = 3$ estados. Se analizará la dependencia del comportamiento crítico del sistema respecto a la estructura de la red (es decir respecto al parámetro α).

Los esfuerzos dirigidos a entender el efecto de las interacciones de largo alcance en el comportamiento crítico de sistemas magnéticos se han realizado tomando en cuenta interacciones de largo alcance cuya intensidad decae como la inversa de una ley de potencias de la distancia entre dos sitios r , $J \propto 1/r^\alpha$, donde α es el exponente de decaimiento. Estas interacciones de largo alcance se denominan **LRDI** (por sus siglas en inglés, Long Range Decaying Interactions). El análisis del comportamiento crítico de estas interacciones no es algo sencillo,

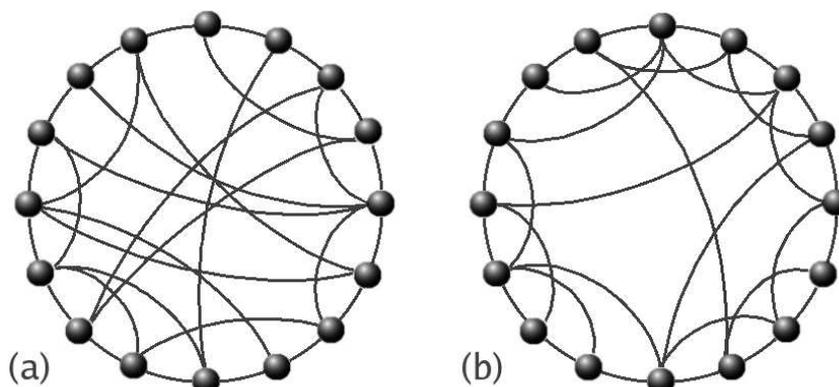


Figura 1.2: La estructura de las redes **LRDP**. La probabilidad de formar enlaces de largo alcance p se rige por $r_{ij}^{-\alpha}$. Se muestran dos casos extremos de la redes **LRDP**, considerando 16 nodos. En (a) se muestra el caso $\alpha = 0.1$, donde los enlaces de largo alcance añaden unen sitios que están muy alejados entre sí. En este régimen, la longitud del camino más corto promedio es pequeño y escala como $\log(L)$. En (b) se muestra una red correspondiente a $\alpha = 2.3$, donde los enlaces añaden unen sitios más cercanos entre sí en la red. En este régimen la longitud del camino más corto promedio escala como L .

incluso en 1D.

Aunque todavía hay controversia acerca del efecto que tiene la presencia de las interacciones de largo alcance en sistemas magnéticos, algunos de los resultados más relevantes se mencionan a continuación. Es bien conocido que en sistemas unidimensionales no existe transición de fase cuando se toman en cuenta sólo interacciones de corto alcance [13]. Sin embargo, en sistemas con interacciones **LRDI** que decaen como una ley de potencias $1/r^\alpha$, ocurre una transición de fase de segundo orden para el modelo de Ising 1D, cuando $\alpha < 2$ [14–16]. El punto $\alpha = 2$ es un punto particular, dado que en este punto ocurre una transición de primer orden [14]. En el modelo de Potts unidimensional de tres estados ($q = 3$) [17] se distinguen tres comportamientos del sistema magnético con interacciones **LRDI**. Exhibe transiciones de fase de primer orden para el intervalo $\alpha \leq 1.6$. La transición se debilita a medida que se aumenta α y se vuelve de segundo orden en el valor crítico de α_c . Aunque α_c no está determinado con mucha

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

precisión, se sabe que para $2 \geq \alpha \geq 1.7$ ocurren transiciones continuas. Para $\alpha > 2$ no existen transiciones de fase magnéticas.

En el **capítulo 2** se da una breve introducción a los conceptos básicos relacionados con las transiciones de fase. Se detallará la clasificación de transiciones de fase, la importancia de la teoría del escalamiento finito, el límite termodinámico y los exponentes críticos.

El modelo de Potts se introduce en el **capítulo 3**. Se menciona la fenomenología del modelo para sistemas magnéticos y también los resultados previos obtenidos tanto para el caso de interacciones de corto alcance en 1D como 2D. Además, se mencionan los resultados tomando en cuenta interacciones de largo alcance tipo **LRDI**.

En esta tesis el estudio de las transiciones de fase de los sistemas con interacciones de largo alcance **LRDP** se desarrolló aplicando un método de Monte Carlo. El método de Monte Carlo se describe en el **capítulo 4**. Los métodos de Monte Carlo son métodos numéricos que se aplican para solucionar problemas que no tienen solución analítica o problemas muy complejos. Estos métodos son ampliamente utilizados en aplicaciones computacionales de mecánica estadística. Metropolis fue el primer algoritmo de Monte Carlo introducido, este algoritmo presenta dificultad de convergencia alrededor del punto crítico (*critical slowing down* [13]), por lo tanto no es conveniente estudiar fenómenos críticos aplicando este método. Con el objetivo de reducir la dificultad de convergencia alrededor del punto crítico se propusieron los algoritmos tipo cluster (cluster algorithms), y entre ellos destaca el algoritmo de Wolff, que se basa en la esencia del algoritmo de Swendsen-Wang. El algoritmo de Wolff nos permite calcular los valores medios de las variables de interés para estudiar las transiciones de fase.

En el **capítulo 4** también se detallan las herramientas utilizadas para determinar el orden y la temperatura crítica de la transición de fase. Para determinar el orden de la transición, así como la temperatura crítica T_c , se analiza el histograma de energía y el cumulante de Binder de magnetización de cuarto orden U . Con el fin de reducir el error correspondiente a la temperatura crítica, se aplica el método de Extrapolación de Ferrenberg-Swendsen (*Reweighting technique*) en

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

el histograma de energía y en el Cumulante de Binder. El análisis del histograma de energía permite determinar la temperatura crítica T_c en las transiciones de fase de primer orden haciendo uso del escalamiento de tamaño finito (*finite size scaling*).

En el **capítulo 5** se introducen conceptos importantes para entender el modelo para las redes **LRDP** utilizadas. En la primera parte se definen los antecedentes. En una segunda parte se describen las redes **LRDP**, también se discute la relación entre la *dimensión efectiva* y la longitud del camino más corto derivada en [3] para las redes **LRDP**, y se resumen los resultados numéricos obtenidos previamente en [3] para el *camino más corto* en función del parámetro de estructura de la red α . Así como los resultados obtenidos para la *dimensión efectiva* en función del parámetro α .

En el **capítulo 6** se discute, en el contexto del modelo de Potts, el orden de las transiciones de fase magnéticas en redes **LRDP** 1D, para los casos con $q = 2$ y $q = 3$ del modelo. Los resultados presentados en este capítulo se obtuvieron con un código donde se aplica el algoritmo de Wolff en las redes **LRDP** y se utilizan las herramientas descritas en los capítulos previos. Se determinó en que región de α es válida la existencia de transiciones de fase. En el caso de las transiciones de fase se estimó el valor de la temperatura crítica. En resumen, para el modelo de Potts de $q = 2$ estados (Ising) se concluyó que ocurren transiciones de fase de segundo orden cuando $0 < \alpha < 2$, y además se observó la ausencia de transiciones de fase cuando $\alpha \geq 2.05$. Los resultados más relevantes obtenidos para el caso $q = 2$ se resumen en la Fig. 6.4. En el caso de $q = 3$ estados, se obtuvo que ocurren transiciones de fase de primer orden para $0 < \alpha < \alpha_{c1}$, transiciones de fase continuas para $\alpha_{c1} < \alpha < 2$ (donde $\alpha_{c1} = 1.7 \pm 0.1$), y también se concluyó que en $\alpha \geq 2.05$ no ocurren transiciones de fase. Todo lo anterior se observa en la Fig. 6.14. Finalmente, en el **capítulo 7** se discuten las conclusiones y las perspectivas de este trabajo de tesis.

CAPÍTULO 2

TRANSICIONES DE FASE

La mecánica estadística provee el contexto para relacionar las propiedades microscópicas de los átomos y moléculas individuales a las propiedades de los materiales en el volumen. Puede emplearse para hacer predicciones teóricas acerca del comportamiento de sistemas macroscópicos en base a las leyes estadísticas que gobiernan a las partículas que lo componen.

2.1. CONCEPTOS BÁSICOS DE MECÁNICA ESTADÍSTICA

En 1902, Gibbs mostró que para un sistema en equilibrio térmico en un reservorio a temperatura T , y de acuerdo al concepto de ensamble canónico ¹, las probabilidades de encontrar al sistema en un estado particular con energía E_i es:

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i/k_B T}, \quad (2.1)$$

donde E_i es la energía del estado i y k_B es la constante de Boltzmann (cuyo valor es $1.38 \times 10^{-23} JK^{-1}$). Convencionalmente se denota por el símbolo β a la

¹Se dice que el sistema pertenece al ensamble canónico si el número de partículas y la temperatura se mantiene fijos. Cuando se mantienen fijos el número de partículas y la energía el sistema pertenece al ensamble microcanónico. Si se permite fluctuación en el número de partículas, el sistema está en el ensamble gran canónico.

2.1. CONCEPTOS BÁSICOS DE MECÁNICA ESTADÍSTICA

cantidad $(k_B T)^{-1}$. La distribución de probabilidad se conoce como *distribución de Boltzmann*, y Z es una constante de normalización, cuyo valor está dado por:

$$Z = \sum_i e^{-E_i/k_B T} = \sum_i e^{-\beta E_i}. \quad (2.2)$$

Z se conoce como la *función de partición*, y figura en la matemática de la mecánica estadística de una manera mucho más compleja que como una simple constante de normalización (el desarrollo de la función de partición se detalla en [18]). La variación de Z respecto a la temperatura u otros parámetros afecta al sistema, y nos permite entender el comportamiento macroscópico del sistema.

Por otro lado, se sabe que el valor esperado de una cantidad Q para un sistema en equilibrio es:

$$\langle Q \rangle = \sum_i Q_i p_i = \frac{1}{Z} \sum_i Q_i e^{-\beta E_i}. \quad (2.3)$$

El valor esperado de la energía, que es la cantidad que conocemos de la termodinámica como la energía interna E_{int} , está dada por:

$$E_{int} = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{-\beta E_i}. \quad (2.4)$$

De la Ec. 2.2 podemos ver que E_{int} también se puede escribir en términos de la primera derivada de la función de partición:

$$E_{int} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}. \quad (2.5)$$

El calor específico está dado como la derivada de la energía interna:

$$C = \frac{\partial E_{int}}{\partial T} = -k_B \beta^2 \frac{\partial E_{int}}{\partial \beta} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}. \quad (2.6)$$

Por otro lado, sabemos que en termodinámica el calor específico está relacionado con la entropía:

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta}. \quad (2.7)$$

2.2. TRANSICIONES DE FASE

Integrando respecto a β se deriva la siguiente expresión para la entropía:

$$S = -k_B \beta \frac{\partial Z}{\partial \beta} + k_B \log Z. \quad (2.8)$$

Utilizando las Ec. 2.5 y 2.8 , podemos escribir la expresión de la energía libre de Helmholtz:

$$F = E_{int} - TS = -k_B T \log Z. \quad (2.9)$$

2.2. TRANSICIONES DE FASE

En un sistema termodinámico, una transición de fase es la transformación que experimenta el sistema al cambiar de una fase a otra. La característica distintiva de una transición de fase es un cambio abrupto y repentino en una o más propiedades físicas (en particular la capacidad calorífica) con una pequeña variación en una variable termodinámica como la temperatura. Ejemplos de transiciones de fase son: transiciones entre fases sólida, líquida y gaseosa, transición de materiales magnéticos entre fases ferromagnéticas y paramagnéticas en la temperatura crítica.

Las transiciones se presentan cuando la energía libre del sistema no es analítica para algunas variables termodinámicas. Esta no-analiticidad principalmente se genera debido a las interacciones de un número extremadamente grande de partículas en un sistema, y no aparece en sistemas de tamaño finito.

Una transición de fase magnética está definida por el comportamiento de la energía libre, el calor específico, la magnetización y la susceptibilidad en el punto crítico, el cual ocurre en la temperatura donde el parámetro de orden (que en el caso de sistemas magnéticos es la magnetización M) se desvanece.

La primera clasificación de las transiciones de fase fue propuesta por Ehrenfest [1]. En esta clasificación, las transiciones de fase son etiquetadas de acuerdo al orden de la menor derivada discontinua de la energía libre. Las transiciones de fase de primer orden exhiben una discontinuidad en la primer derivada de la

2.2. TRANSICIONES DE FASE

energía libre respecto a una variable termodinámica. Las transiciones de fase de segundo orden tienen una discontinuidad en la segunda derivada de la energía libre. De acuerdo a la clasificación de Enherenfest pueden existir transiciones de tercer orden, así como de ordenes mayores.

Actualmente, la clasificación realizada por Enherenfest ha caído en desuso. En el esquema moderno de clasificación [2], las transiciones de fase se dividen en dos amplias categorías que tienen una nomenclatura similar a la presentada por Ehrenfest:

- Las *transiciones de primer orden* también denominadas *transiciones discontinuas*: son aquellas que implican un calor latente. Durante este tipo de transición un sistema emite o absorbe cierta cantidad de energía. Como la energía no puede transmitirse instantáneamente entre el sistema y su ambiente, las transiciones de primer orden están asociadas con regímenes de *fases mixtas* en las cuales algunas partes del sistema han completado la transición y otras no. Estas *transiciones discontinuas* son difíciles de estudiar debido a su dinámica violenta, sin embargo muchas transiciones de fase importantes caen dentro de esta categoría.
- La segunda clase de transiciones son las *transiciones de segundo orden* (también conocidas como *transiciones de fase continuas*). Aquí la energía libre y la primera derivada de la energía libre son continuas, mientras que la segunda derivada de la energía libre es discontinua. En este tipo de transiciones de fase, no hay calor latente asociado. Además la longitud de correlación ² diverge a medida que $T \rightarrow T_c$.

Las cuestiones de interés en el estudio de transiciones de fase son: qué tipo de transición experimenta un sistema, qué causa la transición y cuáles son los *exponentes críticos*. Los exponentes críticos describen el comportamiento de ciertas cantidades físicas cerca del punto crítico. En una transición de fase de

²En los sistemas magnéticos, la longitud de correlación es el tamaño característico de los grupos de espines que apuntan en una misma dirección.

2.3. LÍMITE TERMODINÁMICO

segundo orden, de acuerdo a los exponentes críticos la transición de fase experimentada por el sistema puede caer en diferentes *clases de universalidad*. Para determinar si un sistema pertenece a una u otra clase universal se toma en cuenta la dimensión d del espacio, el número n de componentes del parámetro de orden y , el rango de la escala microscópica de interacciones.

2.3. LÍMITE TERMODINÁMICO

En el ensamble canónico las propiedades del sistema, en el contexto de un hamiltoniano H , se obtienen a partir de la energía libre F .

$$F = -k_B T \log Z. \quad (2.10)$$

Si una transición de fase tiene una singularidad en la energía libre, entonces, para un hamiltoniano H la transición de fase puede ocurrir sólo si Z vale cero (recordemos que los parámetros tienen valores reales). Este no es el caso de un sistema de tamaño finito debido a que Z es una suma de un número finito de factores de Boltzmann, los cuales siempre son positivos. Los ceros de Z o singularidades de F sólo pueden surgir para valores complejos de los parámetros. Estos ceros complejos pueden tener valores reales cuando $N \rightarrow \infty$ (un número infinito de términos se toma en cuenta en Z). Entonces y sólo entonces una transición de fase puede ocurrir. En resumen una transición de fase no puede existir en un sistema finito, por lo que el límite termodinámico, $N \rightarrow \infty$, tiene que ser tomado en cuenta.

2.4. ESCALAMIENTO DE TAMAÑO FINITO

La teoría del escalamiento de tamaño finito (también conocida como *FSS*, por sus siglas en inglés) [13] describe la variación en las propiedades del sistema cuando el tamaño de este se incrementa. La descripción es particularmente importante en sistemas fuertemente correlacionados, donde las fluctuacio-

2.4. ESCALAMIENTO DE TAMAÑO FINITO

nes críticas se desarrollan con el incremento del tamaño incluyendo los puntos donde ocurren las transiciones de fase. Dado que las simulaciones numérico-computacionales siempre se realizan con sistemas finitos, se utiliza la teoría del escalamiento de tamaño finito para la extrapolación de datos. En una simulación de Monte Carlo, el número de espines N se encuentra generalmente entre 10^2 y 10^7 , mientras que un sistema real tiene aproximadamente 10^{23} espines.

Debido al tamaño finito de la red considerada, surgen efectos de tamaño finito en la simulación. Efectos que son particularmente trascendentes en la región crítica. A diferencia de los experimentos, el tamaño de la red puede variarse en las simulaciones y por lo tanto la magnitud de los efectos de tamaño finito pueden ser estimados utilizando escalamiento de tamaño finito. La teoría FSS es un método poderoso en simulaciones de Monte Carlo para estimar y eliminar los efectos de tamaño finito.

En las transiciones de fase de primer orden, el histograma de energía tiene una gran importancia en el análisis del comportamiento crítico del sistema. Se ha establecido que el histograma de energía a cualquier temperatura exhibe un máximo en la energía característica de la fase. Debido a la coexistencia de fases, cerca de la temperatura se observan dos máximos en el histograma de energía. Cada uno de ellos está en la energía característica de cada fase. Debajo de la temperatura crítica la probabilidad de estar en la fase de bajas temperaturas es mayor, y esto se refleja en el histograma de energía. Por otro lado, en temperaturas altas hay mayor probabilidad de estar en la fase de altas temperaturas. La temperatura a la cual la probabilidad de estar en las dos fases es la misma, es la temperatura crítica. Se puede estimar la temperatura crítica como la temperatura a la cual los dos máximos de la distribución de la energía son iguales. Todo esto se discute de manera más detallada en la sección 4.2.2.

En la Fig. 2.1 se obtuvo la distribución de energía en redes LRDP 1D, para $\alpha = 0.1$. Los histogramas de energía mostrados en la figura se obtuvieron utilizando el modelo de Potts ($q = 3$), y el algoritmo de Wolff. Para cada tamaño ($L = 3600, 6000, 9000$) se muestra la evolución del histograma de energía respecto a la temperatura. Para cada tamaño se muestra una temperatura menor que

2.4. ESCALAMIENTO DE TAMAÑO FINITO

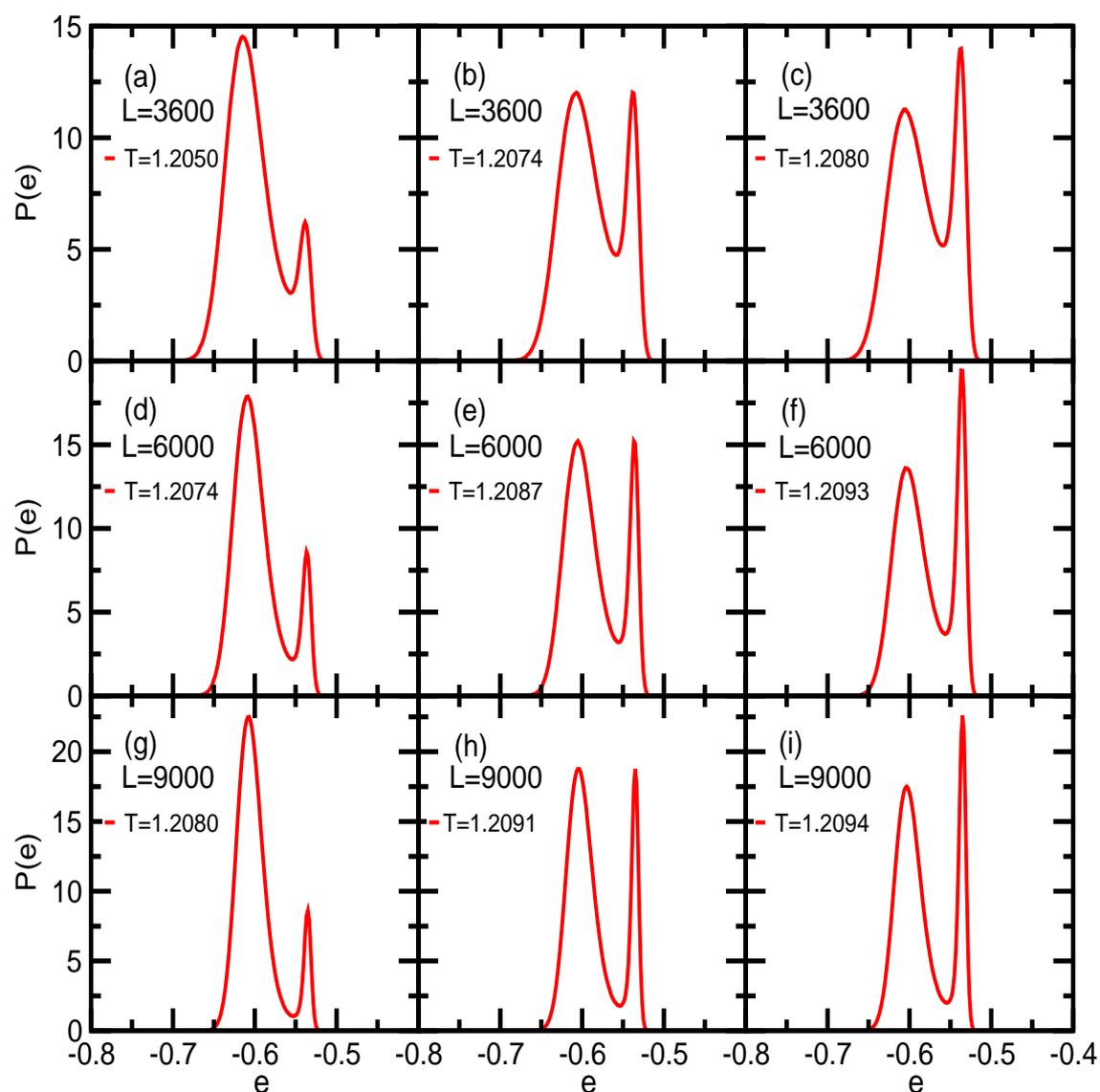


Figura 2.1: Se ilustra la evolución del histograma respecto a la temperatura. Para cada tamaño se observa una temperatura menor que T_c (figuras (a), (d) y (g)), donde hay mayor probabilidad de estar en la fase a bajas temperaturas. En la temperatura crítica hay la misma probabilidad de estar en una fase que en la otra; esto y el valor estimado para la temperatura crítica para cada tamaño se muestra en (b), (e) y (h). Por encima de la temperatura crítica hay más probabilidad de estar en la fase de altas temperaturas (figuras (c), (f) y (g)). El hecho de que la temperatura crítica cambie con el tamaño describe un efecto de tamaño finito.

2.5. EXPONENTES CRÍTICOS

la temperatura crítica (Figs. 2.1.a, 2.1.d y 2.1.g), es decir una temperatura a la cual la fase de bajas temperaturas tiene mayor probabilidad. En las Figs. 2.1.b, 2.1.e y 2.1.h se ilustra una estimación de la temperatura crítica, aquí los dos máximos tienen la misma altura. También se ilustra el caso donde la temperatura es mayor que la temperatura crítica en las Figs. 2.1.c, 2.1.f y 2.1.i. Nótese como al incrementar el tamaño del sistema cambia substancialmente la temperatura crítica estimada, de esta manera queda ilustrada la importancia del escalamiento de tamaño finito.

Un método para obtener la temperatura crítica y los exponentes críticos es estimar la posición de los máximos de los observables a T_c para diferentes tamaños de la red y extrapolarlos al sistema infinito [13]. Este método será útil en esta tesis para calcular la temperatura crítica de las transiciones de fase discontinuas. Para una red finita de tamaño lineal L la temperatura crítica es calculada para una red infinita utilizando la siguiente relación:

$$T_c(L) - T_c(\infty) \propto L^{-\frac{1}{\nu}}. \quad (2.11)$$

En este método es necesario calcular los exponentes críticos (específicamente ν). La longitud de correlación ζ no debe exceder el tamaño de la red L . Conociendo ν se puede determinar la temperatura crítica para la red infinita ($T_c(\infty)$).

Un método alternativo, el cual no requiere información acerca de los exponentes críticos para obtener la temperatura crítica T_c , es analizar el *cumulante de Binder de cuarto orden* (sección 4.2.1).

2.5. EXPONENTES CRÍTICOS

Los exponentes críticos (representados mediante el alfabeto griego) gobiernan el comportamiento de varias propiedades alrededor de T_c . La temperatura reducida t se define como la medición de la distancia desde la temperatura crítica, y se expresa como:

2.6. UNIVERSALIDAD Y LEYES DE ESCALAMIENTO

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}. \quad (2.12)$$

Los espines del sistema magnético en equilibrio se agrupan en cúmulos de tamaño típico ξ (longitud de correlación), y esta longitud de correlación diverge a medida que la temperatura se aproxima a T_c . En el límite termodinámico el comportamiento de la longitud de correlación en la región crítica está dada por

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad (2.13)$$

donde ν es un exponente crítico. También se pueden definir los exponentes críticos γ y α que gobiernan la singularidad de la susceptibilidad magnética y del calor específico respectivamente, de la siguiente manera:

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (2.14)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha}. \quad (2.15)$$

Además de los exponentes críticos mencionados, en los sistemas magnéticos se puede definir el exponente β (que gobierna el comportamiento de la magnetización) de la siguiente manera:

$$m \sim |t|^\beta. \quad (2.16)$$

La última expresión sólo es válida para temperaturas por debajo de la temperatura crítica, ya que m es cero para $T \geq T_c$.

Los exponentes críticos de los sistemas magnéticos se agrupan en el Cuadro 2.1. En el cuadro se mencionan las definiciones de cada exponente crítico y también las condiciones necesarias para su validez.

2.6. UNIVERSALIDAD Y LEYES DE ESCALAMIENTO

No todos los exponentes críticos definidos previamente son independientes. De acuerdo con argumentos termodinámicos podemos definir relaciones entre

2.6. UNIVERSALIDAD Y LEYES DE ESCALAMIENTO

los exponentes críticos llamadas *leyes de escalamiento*. Estas leyes muestran que generalmente sólo dos exponentes críticos son independientes [13].

Combinando expresiones que involucran a los exponentes críticos, se obtiene la *igualdad de Rushbrooke*:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.17)$$

que es válida independientemente de los valores de los exponentes críticos. Otra ley de escalamiento es la llamada ley del *hiperescalamiento*, la cual esta relacionada con la dimensión de la red d .

$$d\nu = 2 - \alpha. \quad (2.18)$$

El hiperescalamiento es válido cuando la dimensión de la red es menor que la dimensión conocida como dimensión crítica d_u . La dimensión crítica d_u es aquella a partir de la cual los exponentes críticos toman los valores obtenidos mediante la teoría de campo medio (para el modelo de Ising $d_u = 4$) [13].

Los valores de los exponentes críticos se agrupan en *clases de universalidad*. La universalidad de las clases implica que los valores de los exponentes críticos para un modelo, son independientes de la mayoría de los parámetros del modelo, tales como la interacción entre espines J del modelo de Ising. Sólo algunas propiedades del sistema como la dimensión afectan a los exponentes críticos. La región donde los exponentes críticos toman los *valores clásicos* (obtenidos mediante la teoría de campo medio) se denomina como *régimen clásico*. Dentro del régimen clásico los valores de los exponentes críticos no dependen de la dimensión de la red. En el Cuadro 2.2 se muestran valores de los exponentes críticos. Se indican los valores de los exponentes críticos para el régimen clásico así como para otros modelos resueltos. Se muestran también los exponentes para aproximaciones de algunos modelos, y los valores experimentales obtenidos para algunos magnetos.

2.6. UNIVERSALIDAD Y LEYES DE ESCALAMIENTO

Cuadro 2.1: Exponentes críticos de sistemas magnéticos. Los exponentes críticos, sus definiciones así como las condiciones en las que son válidos se resumen en el cuadro. Cuadro tomado y modificado de [2].

Exponente	Definición	t	H	M
α'	$c \sim (-t)^{-\alpha'}$	< 0	0	0
α	$c \sim t^{-\alpha}$	> 0	0	0
β	$m \sim (-t)^\beta$	< 0	0	$\neq 0$
γ'	$\chi \sim (-t)^{-\gamma'}$	< 0	0	$\neq 0$
γ	$\chi \sim t^{-\gamma}$	> 0	0	0
ν'	$\xi \sim (-t)^{-\nu'}$	< 0	0	$\neq 0$
ν	$\xi \sim t^{-\nu}$	> 0	0	0

Cuadro 2.2: Valores numéricos de los exponentes críticos. Se muestran los valores que toman los exponentes críticos para algunos sistemas magnéticos y modelos resueltos. Cuadro tomado y modificado de [2].

Sistema	α'	β	γ'	ν'	α	γ	ν
Sistemas magnéticos							
Ni	-0.3	0.42			0	1.35	
EuS	-0.15	0.33			0.05		
$CrBr_3$		0.368				1.215	
Modelos resueltos							
clásico	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	0	1	$\frac{1}{2}$
Modelo esférico ($d = 3$)		$\frac{1}{2}$			-1	2	1
Modelo de Ising ($d = 2$)	0	$\frac{1}{8}$	$\sim \frac{7}{4}$	1	0	$\sim \frac{7}{4}$	1
Aproximaciones							
Modelo de Ising ($d = 3$)	$\sim \frac{1}{8}$		$\sim \frac{5}{4}$				
Modelo de Heisenberg		~ 0.345			~ -0.1	~ 1.4	~ 0.70

CAPÍTULO 3

MODELO DE POTTS

El magnetismo (o el electromagnetismo) es una de las fuerzas fundamentales de la naturaleza. Un campo magnético es producido por el movimiento de una partícula cargada, y entonces una corriente eléctrica (la cual consiste de electrones en movimiento) produce un campo magnético.

En 1925 G. E. Uhlenbeck y S. Goudsmit [19] formularon la hipótesis de que un electrón posee un “espín”, y que se comporta como una pequeña barra magnética, y que en un campo magnético externo la dirección del campo magnético de los electrones es paralelo o antiparalelo al campo externo.

Los materiales magnéticos exhiben un interesante comportamiento dependiente de la temperatura. En particular, arriba de cierta temperatura (la cual es característica del material) cualquier magnetización presente desaparece (no existe magnetización neta). Cuando la temperatura se reduce debajo de dicha temperatura surge una magnetización espontánea. Esta temperatura es llamada “temperatura crítica” o “temperatura de Curie”. En la temperatura crítica, algunas propiedades medibles (por ejemplo, el calor específico) muestran una discontinuidad.

3.1. MODELOS DE ESPÍN

Los modelos de espín se utilizan para simular sistemas reales, por ejemplo los materiales magnéticos. Estos modelos exhiben el mismo comportamiento de los sistemas a emular, y por lo tanto proveen un entendimiento de los mecanismos físicos envueltos.

A pesar de su aparente simplicidad, la mayoría de estos modelos no pueden ser resueltos de manera exacta mediante los métodos teóricos actuales. Por esta razón, la simulación computacional y los métodos de Monte Carlo han sido utilizados para solucionarlos. Usualmente, el interés se centra en el comportamiento del sistema en la transición de fase. La simulación por computadora revela dónde están las fronteras de la transición de fase, y cómo las propiedades del sistema varían durante esta transición. Existen dos clases de modelos de espín, los que tienen valores de espín discretos y los que tienen valores de espín continuos. En ambos casos, las variables de espín se ponen en los sitios de la red y, usualmente, sólo interactúan con sus *primeros vecinos*.

El comportamiento magnético de modelos con interacciones de largo alcance ha sido menos explorado que con interacciones de corto alcance, especialmente para modelos discretos donde la no-localidad de las interacciones hace a la mayoría de los métodos estándares inefectivos [17].

Un gran número de investigaciones han sido realizadas durante años tratando de encontrar buenos algoritmos para las simulaciones computacionales de modelos de espín. Los métodos de Monte Carlo como Metropolis han sido ampliamente utilizados en simulaciones de sistemas magnéticos, y recientemente se han desarrollado algunos algoritmos más eficientes como los algoritmos multiespín (*cluster algorithms*).

3.2. MODELO DE ISING

El modelo de Ising trata de imitar el comportamiento de un sistema real en el cual los elementos individuales (átomos, células, neuronas, personas, etc.)

3.2. MODELO DE ISING

modifican su comportamiento para conformar el del conjunto de individuos (por ejemplo: proteínas [20], membranas biológicas [21], redes neuronales [22], comportamiento social [23], etc.) . El modelo de Ising es el modelo más sencillo para sistemas magnéticos que predice transiciones de fase y fenómenos críticos.

El modelo de Ising es el modelo más utilizado en el área de física estadística y la premisa de la que parte el modelo es que el magnetismo en el bulto se forma de la combinación de momentos magnéticos dipolares de los espines atómicos dentro del material. El modelo postula una red (la cual puede tener cualquier geometría) con un dipolo magnético o espín en cada sitio.

En el modelo de Ising los espines asumen la forma más simple posible (lo cual no siempre es realista) de la variable de espín s_i . Para denotar el estado hacia arriba (\uparrow) y el estado hacia abajo (\downarrow) la variable de espín s_i toma los valores $+1$ y -1 respectivamente, representando de esta manera dipolos de magnitud unitaria apuntando hacia arriba o hacia abajo. Al relacionar los espines de la red el subíndice i hace referencia al sitio de la red. En un material magnético real los espines interactúan, y el modelo de Ising mimetiza estas interacciones introduciendo en el hamiltoniano un término proporcional al producto $s_i s_j$ de los espines. En el caso más simple todas las interacciones tienen la misma magnitud J , y sólo se toman en cuenta las interacciones entre los espines de sitios que son primeros vecinos en la red. El hamiltoniano toma la forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad (3.1)$$

donde la notación $\langle i, j \rangle$ indica que los sitios i y j son primeros vecinos. Usualmente los sitios interactúan sólo con los primeros vecinos porque la energía de intercambio es la más importante para definir las características magnéticas. La magnitud de la interacción espín-espín está representada por la constante de intercambio J y el signo menos que aparece se toma por convención. En el modelo ferromagnético ($J > 0$) los espines tienden a alinearse en la misma dirección, al contrario del modelo antiferromagnético ($J < 0$).

En el modelo de Ising la magnetización es la suma de todos los espines, y se

3.2. MODELO DE ISING

puede expresar como:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i, \quad (3.2)$$

donde N es el número de sitios, y el término $1/N$ normaliza la magnetización.

Cuando el modelo es ferromagnético la energía mínima es $E_{min} = -JK$ para la temperatura igual a cero (donde K es el número de enlaces del sistema). Dicha energía mínima corresponde al caso cuando todos los espines están alineados (ya sea que todos los espines sean $+1$ ó -1). Conforme se aumenta la temperatura el sistema se desordena y, en algunos casos se aprecian transiciones entre fases magnéticas y paramagnéticas.

Los estados de un sistema de Ising son los diferentes conjuntos de valores que pueden tomar los espines y dado que cada espín puede tomar dos valores, existen 2^N estados en una red con N sitios.

3.2.1. EJEMPLO: EL DÍMERO

Para entender el modelo de Ising analicemos un ejemplo sencillo. Consideremos que el sistema tiene sólo dos sitios. En este caso existen cuatro posibles configuraciones de espín, ver Fig. 3.1. Si tomamos $J > 0$ (caso ferromagnético) tendremos dos configuraciones de espín de mínima energía ($-J$) donde los espines apuntan en la misma dirección (Fig. 3.1(a)). Sin embargo, si $J < 0$ (caso antiferromagnético) las configuraciones de mínima energía ($+J$) corresponden a las de espines antiparalelos (Fig. 3.1(b)).

3.2.2. ENERGÍA Y ENTROPÍA

Como planteamos anteriormente, en el caso ferromagnético la energía se minimiza cuando todos los espines apuntan en la misma dirección. Entonces podría pensarse que la solución del problema siempre sería tal que la energía fuera la mínima, es decir máxima magnetización. Sin embargo, la termodinámica

3.2. MODELO DE ISING

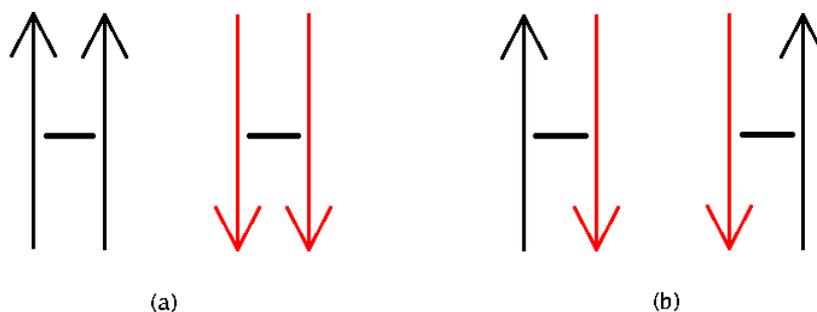


Figura 3.1: Configuraciones de espín para el dímero. (a) Configuraciones de espines paralelos. Estas configuraciones corresponden al caso de mínima energía ($-J$) cuando $J > 0$. (b) Configuraciones de espín correspondientes a la energía mínima para el caso $J < 0$.

establece que la situación de equilibrio no está dada por un mínimo de energía sino por un mínimo de la energía libre de Helmholtz F , la cuál está definida por:

$$F = E_{int} - TS, \quad (3.3)$$

donde E_{int} es la energía interna (a la cual nos hemos referido simplemente como la energía) y TS es el producto de la temperatura y la entropía.

El modelo de Ising es una pugna entre energía y entropía. Es conveniente recordar que la entropía es una medida del desorden. Así pues, el estado fundamental minimiza E_{int} y es un estado muy ordenado ya que los espines se alinean, por lo tanto es un estado de muy baja entropía. Si la temperatura es muy baja, el término TS contribuye muy poco a la energía libre y el sistema se magnetizará. Sin embargo cuando se aumenta la temperatura la entropía tiene mayor peso en la energía libre, por lo que minimizar F implica maximizar la entropía. A altas temperaturas el estado de mayor entropía (el más desordenado) se favorece, por lo que el sistema no se magnetiza.

Solucionar el problema nos dirá exactamente a qué temperatura la energía deja de gobernar el comportamiento del sistema y lo hace la entropía. Esta tem-

3.2. MODELO DE ISING

peratura es la temperatura crítica.

El modelo de Ising tiene las siguientes propiedades. A temperaturas muy por arriba de la temperatura crítica el arreglo de espines es un arreglo aleatorio. Si la simulación del modelo empieza por debajo de la temperatura crítica, sólo aparece una pequeña cantidad de *cúmulos* (grupos de espines apuntando en una misma dirección), y la magnetización es diferente de cero. Para temperaturas cercanas a la temperatura de transición hay grandes cúmulos de espín con el mismo estado.

Este modelo fue introducido por Lenz en 1920 [24], y fue resuelto analíticamente en una dimensión (donde no presenta transición de fase) por Ising en 1925 [25], y en dos dimensiones por Onsager en 1944 [26] quien demostró la existencia de una transición de fase de segundo orden [13]. Sin embargo, no ha sido resuelto de manera analítica en tres dimensiones, por lo tanto las simulaciones de Monte Carlo han sido uno de los métodos más usados para obtener soluciones numéricas.

3.2.3. CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

En el modelo de Ising se puede considerar también la aplicación de un campo magnético externo B (término de Zeeman), con lo cual el hamiltoniano toma la siguiente forma:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i, \quad (3.4)$$

en este caso los espines tienden a alinearse en la misma dirección que el campo magnético B , los espines toman el valor positivo cuando $B > 0$ y el valor -1 cuando $B < 0$.

El problema no ha sido resuelto analíticamente, y no aparecen transiciones de fase respecto a la temperatura.

3.3. MODELO DE POTTS

3.2.4. MODELO DE ISING CON INTERACCIONES DE LARGO ALCANCE TIPO LRDI

El modelo de Ising ha sido estudiado con interacciones ferromagnéticas de largo alcance que decaen algebraicamente de la siguiente manera $J \propto r_{ij}^{-\alpha}$ (redes **LRDI**), donde r_{ij} es la distancia entre los sitios i y j , y α es el parámetro de decaimiento de la interacción. Otra forma de representar estas interacciones es expresar al parámetro α en términos de la dimensión d de la siguiente manera $\alpha = \sigma + d$, por lo tanto la interacción está dada por $J \propto r_{ij}^{-(\sigma+d)}$.

A diferencia del caso de interacciones de corto alcance, se determinó que el modelo de Ising con interacciones de largo alcance exhibe transición de fase en 1D cuando $\sigma \leq 1$ (es decir, $\alpha \leq 2$) y que no hay transiciones de fase para $\sigma > 1$ [14]. Para el intervalo $0 < \sigma \leq d/2$ se encontró la existencia de transiciones de fase magnéticas de segundo orden que obedecen el régimen clásico [27], y para $(\sigma > d/2)$ se estableció la existencia de transiciones de fase continuas con exponentes críticos no clásicos [15, 36].

3.3. MODELO DE POTTS

El modelo de Ising se basa en la cuantización del espín y tiene una gran variedad de aplicaciones. Sin embargo, en muchas situaciones el espín tiene más de dos alternativas (especialmente cuando el momento magnético es grande). El modelo de Potts es una extensión del modelo de Ising donde cada espín tiene q estados.

El modelo fue propuesto por Domb como tema de tesis a Potts [29]. En este modelo los espines están confinados a un plano y sus direcciones difieren por el ángulo $2\pi/q$. Esta versión es conocida como el modelo de Potts planar. Actualmente el término modelo de Potts se utiliza comunmente para hacer referencia al modelo de Potts estandar [30], en el cual los espines ya no están confinados a un plano. En el modelo de Potts los espines pueden tomar una cantidad finita de estados q ($q > 1$), el caso $q = 2$ es el modelo de Ising. El comportamiento

3.3. MODELO DE POTTS

magnético del modelo de Potts ha mostrado ser más diverso y más general que el del modelo de Ising y se ha vuelto más importante en el estudio de la teoría de fenómenos críticos [27]. Debido a esta característica, el modelo de Potts se ha aplicado en áreas como magnetismo, biología [31], ciencias sociales [32], etc.

La configuración de espín del sistema está dada por los estados de todos los espines pertenecientes a la red. El hamiltoniano es la suma de las energías de interacción sobre todos los espines. En ausencia de un campo magnético externo y considerando solamente las interacciones entre primeros vecinos el hamiltoniano puede expresarse como:

$$H = -J \sum_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j}, \quad (3.5)$$

donde σ_i es la variable de espín y puede tomar los valores $\sigma = 1, 2, \dots, q$. En este modelo sólo se toma en cuenta la interacción entre los vecinos con el mismo estado y la suma es sobre todos los diferentes pares de primeros vecinos. El modelo de Potts es ferromagnético cuando $J > 0$ y antiferromagnético cuando $J < 0$. Para el desarrollo de esta tesis nos enfocamos en el caso ferromagnético. El comportamiento del modelo de Potts depende de la dimensión d del sistema y del número de estados q considerados. En sistemas con interacciones de corto alcance (Short Range, SR) el modelo ha sido estudiado ampliamente en 1D y 2D. El modelo no exhibe transición de fase en 1D y para el caso 2D muestra transiciones de segundo orden para $q \leq 4$ y de primer orden para $q > 4$; la temperatura crítica para el modelo en el caso bidimensional está dada por $T_c = [\ln(1 + \sqrt{q})]^{-1}$. En 3D el modelo muestra transiciones de primer orden para $q > 2$ [13].

En el modelo de Potts aplicado en redes regulares, y considerando solamente interacciones de corto alcance, se ha reportado que en el espacio (d, q) de d -dimensión y q -estados existe una línea crítica $(d, q_c(d))$ que separa las transiciones de primer orden de las transiciones de segundo orden [33].

La manera más sencilla de estudiar el modelo de Potts es considerar sola-

3.3. MODELO DE POTTS

mente las interacciones entre primeros vecinos. Sin embargo, la introducción de interacciones de largo alcance nos permite explorar fenómenos donde las interacciones de largo alcance son importantes (como sistemas con interacciones dipolares). Usualmente las interacciones de largo alcance se expresan en el hamiltoniano de la siguiente manera:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j}, \quad (3.6)$$

donde J_{ij} es la interacción entre los sitios i y j . Generalmente en las interacciones de largo alcance la magnitud de la interacción J_{ij} no es constante.

Las interacciones de largo alcance que decaen como una ley de potencias ($r^{-(d+\sigma)}$) se utilizan para modelar redes neuronales [34], vidrios de espín con interacciones RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) [35], entre otros sistemas.

Una de las mayores contribuciones con respecto a las interacciones de largo alcance, es el análisis de transiciones de fase en sistemas d -dimensionales realizado por E. Fisher, S.K. Ma y B.G. Nickel con interacciones de largo alcance que decrecen como $r^{-(d+\sigma)}$ en el contexto de modelos $O(n)$ [36], donde d es la dimensión y σ es el parámetro que media las interacciones. El comportamiento magnético en 1D se clasifica en tres regiones de acuerdo al parámetro σ : (1) para $\sigma < 0.5$ el comportamiento del sistema obedece la teoría de campo medio, (2) en la región intermedia $0.5 < \sigma < 1$ los exponentes críticos son funciones continuas de σ . (3) para $\sigma > 1$ el comportamiento es similar al de sistemas con interacciones de corto alcance.

Tanto en el modelo de Ising como en el modelo de Potts, las interacciones de largo alcance que decaen con la distancia ($1/r^{\sigma+d}$) inducen la presencia de transiciones de fase en sistemas unidimensionales. El modelo de Potts en el caso de corto alcance muestra transiciones de primer orden cuando q excede cierto valor que depende de la dimensionalidad $q_c(d)$. En el modelo de Potts con interacciones de largo alcance se observa un comportamiento similar al deducir la existencia de un valor crítico de σ dependiente de q ($\sigma_c(q)$) que separa el de

3.3. MODELO DE POTTS

las transiciones de primer orden del régimen de las transiciones continuas [37].

Zvonko Glumac y Katarina Uzelac observaron que el modelo de Potts de tres estados ($q = 3$) en 1D [17] exhibe transiciones de fase de primer orden para el intervalo $\sigma \leq 0.6$, la transición se debilita al incrementar σ y cambia a una transición continua (para $\sigma \geq 0.7$). Se sugiere un valor crítico σ_c de σ , por debajo del cual la transición de fase es discontinua y por encima del cual es continua. Dicho valor crítico está dentro del intervalo comprendido entre $0.6 < \sigma_c < 0.7$.

En esta tesis la red considerada es una cadena lineal a la cual se le añaden enlaces de largo alcance entre dos sitios de acuerdo a una probabilidad que depende de la distancia entre los sitios (ver el capítulo 5 para una discusión más detallada de las redes bajo estudio). Aquí la interacción entre dos sitios cualesquiera siempre tiene la misma magnitud independientemente de la distancia euclidiana que los separa, por lo que es posible utilizar la primera expresión del hamiltoniano de Potts y a la vez incluir las interacciones de largo alcance.

El modelo de Potts no se ha resuelto analíticamente, y no es posible hacer el cálculo numérico exhaustivo por enumeración de estados. Los métodos computacionales como los llamados de Monte Carlo han sido ampliamente utilizados para estudiar el modelo de Potts, y estos se describen en el siguiente capítulo.

CAPÍTULO 4

MÉTODOS NUMÉRICOS

Para el desarrollo de esta tesis se utilizaron diversos métodos numéricos. Para facilitar la descripción de dichos métodos los describiremos en dos partes. La primera parte está enfocada a los métodos de Monte Carlo, mientras que la segunda se refiere a los utilizados para identificar el orden de la transición de fase y/o la temperatura crítica.

4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO

Los métodos de Monte Carlo proveen soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas matemáticos mediante experimentos de muestreo estadístico en una computadora. Monte Carlo se aplica a problemas con contenido no probabilístico así como a aquellos con una estructura probabilística inherente. El método es útil para obtener soluciones numéricas a problemas que son muy complicados para resolverse analíticamente. Estos son métodos numéricos utilizados para simular una distribución de probabilidad dada, de manera que las configuraciones aparezcan con la probabilidad correcta.

El crédito por inventar el método de Monte Carlo frecuentemente se le asigna a Stanislaw Ulam. La principal contribución de Ulam fue reconocer el potencial de las recién inventadas computadoras electrónicas para automatizar el muestreo. Trabajando con John von Newman y Nicholas Metropolis, desarrolló algoritmos

4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO

para las implementaciones computacionales y además exploró el significado de transformar problemas no aleatorios a formas aleatorias que puedan facilitar la solución por medio del muestreo estadístico. Ulam y Metropolis publicaron su primer artículo acerca del método de Monte Carlo en 1949 [39].

En un principio Monte Carlo no fue un método para la solución de problemas en física, sino un método para la estimación de integrales que no pueden ser resueltas analíticamente. La integración de funciones mal comportadas e integrales en espacios de dimensión alta son dos áreas en las cuales el método ha probado ser eficiente, de hecho aún es una importante técnica para problemas de este tipo.

Una característica importante del método de Monte Carlo es el carácter interdisciplinario de esta técnica. Monte Carlo se ha aplicado a problemas diversos como el estudio de tumores [40], los patrones de la dispersión de animales [41], en medicina nuclear [42], procesos complejos que ocurren durante la fotosíntesis [43], desdoblamiento de proteínas [44], estudio de transporte electrónico en heteroestructuras semiconductoras [45], en el estudio de mezclas de polímeros [46], descripción del “envenenamiento” de superficies catalíticas por reacciones químicas [47], etc.

4.1.1. METROPOLIS Y EL MODELO DE ISING

El primer método de Monte Carlo desarrollado es Metropolis, este algoritmo fue introducido por Nicolas Metropolis y sus colaboradores en 1949 [39]. En este algoritmo se ilustran muchos de los conceptos involucrados en las simulaciones de Monte Carlo. Una forma de entender el algoritmo de Metropolis es analizarlo en el contexto del modelo de Ising. En un sistema magnético los átomos se idealizan en posiciones fijas y, en el contexto del modelo de Ising (uno de los modelos más sencillos utilizados para el estudio de fenómenos críticos) la dirección del momento magnético es σ y la intensidad del momento magnético está dada por la magnitud de la interacción de intercambio J . Los sitios de la red pueden tomar solamente los valores $\sigma = +1$ o $\sigma = -1$ para espines apuntando hacia arriba o

4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO

hacia abajo, respectivamente.

El algoritmo inicia con la construcción de una configuración de espín S_0 , la cual usualmente es generada de forma aleatoria. La configuración de espín está compuesta de todos los valores σ_i , donde $i = 1, 2, \dots, N$.

A continuación se describen los pasos que componen al algoritmo de Metropolis haciendo referencia al modelo de Ising:

1. En el paso i del algoritmo, tenemos una configuración de espín S_i , de la cual seleccionamos un sitio m al azar ($1 < m < N$, donde N es el número de sitios en la red) y se le asigna un nuevo valor de espín ($\sigma'_m = -\sigma_m$).
2. Al cambiar el valor de espín del sitio m se obtiene una nueva configuración de espín a la que denotaremos como S_j . La diferencia de energías $\Delta E = E_{S_j} - E_{S_i}$ entre las configuraciones S_j y S_i es entonces calculada.
3. Si la energía correspondiente a la configuración S_j es menor o igual a la de la configuración S_i , se elige a S_j como la nueva configuración de espín ($S_{i+1} = S_j$). En el caso contrario ($\Delta E > 0$), se genera un número aleatorio r en el intervalo $0 < r < 1$, si este número es menor que la *probabilidad de transición* se toma S_{i+1} como S_j , en otro caso la configuración de espín permanece sin cambio ($S_{i+1} = S_i$).

Se considera que se ha completado un paso de Monte Carlo cuando se cumple todo el el proceso descrito anteriormente.

Dado que Monte Carlo es un método que explora un sistema en equilibrio, hay una distribución de probabilidad que describe el comportamiento del sistema, esta probabilidad es la *probabilidad de transición*. La *probabilidad de transición* es tal que entre mayor sea ΔE_{ij} menor es la probabilidad de cambiar el espín, y tiene la siguiente expresión:

$$P(S_i \rightarrow S_j) = \begin{cases} 1, & \Delta E \leq 0 \\ e^{-\Delta E/(k_B T)}, & \Delta E > 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

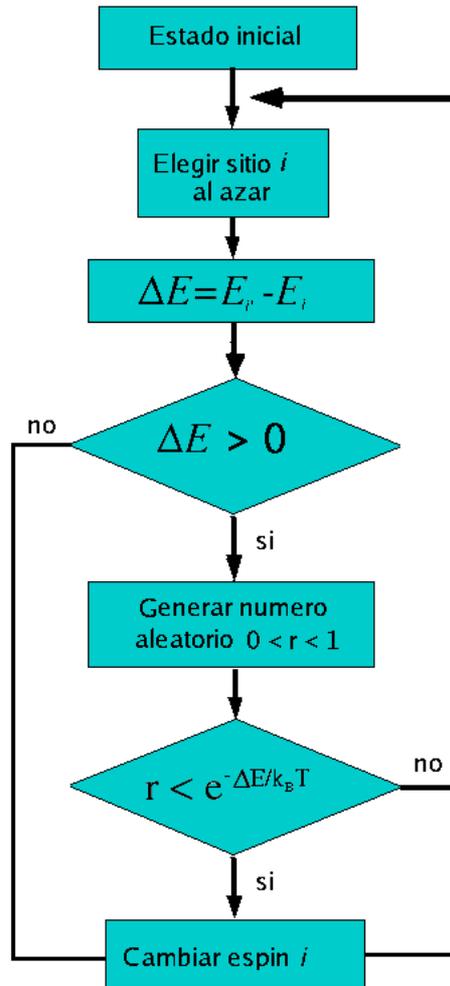


Figura 4.1: Diagrama de flujo de Metropolis. La simulación de Metropolis parte de una configuración de espín inicial. Se elige un espín i al azar y al valor alterado del espín lo denominaremos i' . Se calcula la diferencia de energía $\Delta E = E_{i'} - E_i$. Si $\Delta E < 0$ se conserva el nuevo valor de espín i' . Si $\Delta E > 0$ se genera un número aleatorio r ($0 < r < 1$), cuando $r < \exp(-\beta\Delta E)$ se conserva el nuevo valor del espín, en caso contrario la configuración permanece sin alteraciones.

4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO

La cantidad de iteraciones (o pasos de Monte Carlo) debe ser lo suficientemente grande para que el sistema alcance el equilibrio en la temperatura dada. El conjunto de S_1, S_2, \dots constituye la *cadena de Markov*. Aunque la función de partición no se puede calcular analíticamente, podemos obtener información de las propiedades físicas del sistema en base a la cadena de Markov, ya que en esta cadena la frecuencia de una configuración es proporcional al factor de Boltzmann correspondiente. Antes de construir la cadena de Markov se debe realizar un proceso de termalización (descartar las primeras configuraciones de la cadena de Markov), con el fin de que el sistema pueda minimizar el efecto que la configuración inicial del sistema (la cual usualmente está fuera del equilibrio) puede tener en la simulación de Metropolis. Los pasos de Metropolis descritos anteriormente se ilustran en la Fig. 4.1.

Para una distribución de probabilidad P_n dada, el valor esperado de una variable se puede calcular de acuerdo a la siguiente relación:

$$\langle A \rangle = \sum_{[s]} P_s A_s. \quad (4.2)$$

Para la distribución de Boltzmann la relación anterior describe el valor medio de cualquier propiedad física A a una temperatura T . Donde A_s es la propiedad física medida y P_s es la probabilidad correspondiente a A_s . La suma se realiza sobre todos los estados disponibles del sistema. Utilizando la *probabilidad de transición* establecida en Metropolis es posible probar que estos valores esperados son simplemente la media aritmética de las propiedades medidas en la cadena de Markov.

En base a lo anterior, se pueden calcular las propiedades físicas de interés en una simulación de Monte Carlo, como el valor medio del calor específico, de la magnetización, de la susceptibilidad, etc. La media evaluada sobre una simulación de Metropolis de M pasos está dada por:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i, \quad (4.3)$$

4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO

donde A_i es el valor de la propiedad física medida en el paso i de la simulación de Monte Carlo, y M es el número total de pasos o iteraciones.

4.1.2. ALGORITMOS MULTIESPÍN (CLUSTER ALGORITHMS)

Cerca del punto crítico las fluctuaciones del sistema son muy grandes (comparables al tamaño del sistema), por lo que el algoritmo de Metrópolis se aproxima muy lentamente al estado de equilibrio. Por esta razón se requieren los algoritmos conocidos como multiespín si se quiere muestrear de manera correcta y eficiente alrededor de la temperatura crítica. Los *algoritmos multiespín* han sido introducidos para reducir *la lentitud de la convergencia cerca del punto crítico (critical slowing down)* que afecta mucho al algoritmo de Metropolis. El algoritmo Swendsen-Wang (SW) fue el primero de esta clase de algoritmos en ser propuesto, y con el mismo propósito otros algoritmos han sido desarrollados como (a) el algoritmo de Wolff (el cual se basa en el algoritmo SW), (b) el algoritmo de *cluster invadido* (IC, el cual fue desarrollado para estudiar transiciones de fase tanto continuas como discontinuas y tiene la característica especial de que no se necesita conocimiento *a priori* de la temperatura crítica; mas aún, la temperatura crítica es una salida del algoritmo [48]) y, (c) el algoritmo Luijten-Blöte, el cual reduce el esfuerzo computacional al simular modelos ferromagnéticos con interacciones de largo alcance **LRDI**. Este esfuerzo es comparable al esfuerzo para la simulación de modelos de corto alcance [49].

La principal ventaja de los algoritmos multiespín reside en el hecho de que no son algoritmos locales (un algoritmo local es aquel en el cual sólo se puede cambiar un espín por iteración). El algoritmo de Metropolis es local y cerca de la temperatura crítica el sistema desarrolla grandes dominios de espín correlacionados que son difíciles de romper. Entonces, la mejor forma de modificar la configuración de espín es cambiar todo un dominio de espines en un sólo movimiento. Pero, como lo hemos definido en el algoritmo de Metropolis se puede mover solamente un dominio del tamaño de un sitio de la red. En este sentido se dice que es local.

4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO

La primera aplicación de estos algoritmos no locales fue para el modelo de Potts [50], después fueron publicados para otros modelos. En la Fig. 4.2 se muestra la clasificación de los métodos de Monte Carlo en algoritmos locales y no locales. Cada algoritmo multiespín tiene su propia forma de construir el(los) conjunto(s) de espín(es), que posteriormente tendrá(n) un nuevo valor de espín.

La discusión del algoritmo SW nos ayudará a entender el de Wolff, el algoritmo de SW se introduce en la siguiente sección para el modelo de Potts. El algoritmo de Wolff es una excelente herramienta para estudiar transiciones de fase magnéticas, y se describe en la sección 4.1.4 (para el modelo de Potts).

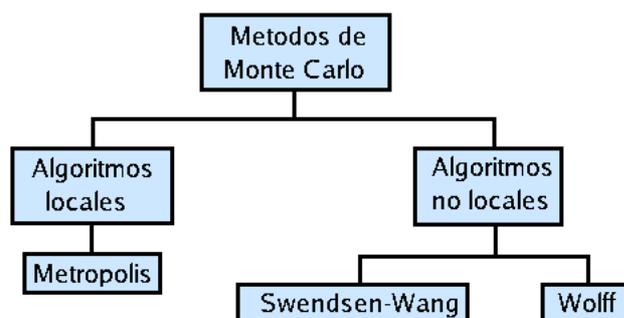


Figura 4.2: Existen dos tipos de métodos de Monte Carlo, los algoritmos locales (como Metropolis) y los algoritmos no locales (como el algoritmo de Swendsen-Wang (SW) y el de Wolff). Los algoritmos no locales pueden cambiar el valor de todo un conjunto de espines en una sola iteración y, a diferencia de Metropolis son eficientes alrededor del punto crítico.

4.1.3. ALGORITMO SWENDSEN-WANG

El algoritmo Swendsen-Wang (SW) fue propuesto por Swendsen y Wang en 1987 para el modelo de Potts [50]. El cambio de un sólo espín exhibido en Metropolis es reemplazado por el cambio del valor de espín de todo un cúmulo, siendo las principales características de este algoritmo la *identificación de los cúmulos* y el cambio de espín en estos.

4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO

El algoritmo de SW para el modelo de Potts se puede describir de la siguiente manera:

1. Se empieza el proceso con una configuración de espines aleatoria. En este algoritmo, los cúmulos de espines son creados alrededor del primer sitio con cierta probabilidad introduciendo enlaces con sus *primeros vecinos* que se encuentren en el mismo estado con probabilidad $p = \exp(-\beta E)$, una vez que un sitio es incluido en el cúmulo se analizan los *primeros vecinos* de los nuevos sitios; cuando ya no se añaden nuevos sitios a un cúmulo se dice que el cúmulo está *satisfecho* y ahora se analiza el primer sitio fuera del cúmulo y se continua así hasta que todos los diferentes cúmulos son generados. Este proceso es conocido como construcción ó identificación de los cúmulos.
2. Para cada cúmulo el nuevo valor de espín se selecciona con la misma probabilidad, entre los $q - 1$ valores restantes.

Los pasos 1 y 2 (la identificación de los cúmulos y la variación del valor de espín de los cúmulos), constituyen una iteración de Monte Carlo. Los pasos del algoritmo SW se ilustran en la Fig. 4.3.

Este algoritmo genera una nueva configuración de espín y no es necesario calcular la diferencia de energía entre las dos configuraciones, pue siempre conservamos la nueva configuración debido a la apropiada construcción de los cúmulos.

La principal contribución del algoritmo SW es la idea de cómo construir un conjunto de espines al cual se le cambia el valor del espín simultáneamente. Este algoritmo esta basado en el mapeo de Kastelyn-Fortuin (*Kastelyn-Fortuin mapping*) [51].

La parte del proceso que consume más tiempo es la identificación de los cúmulos, además a temperaturas altas muchos cúmulos están constituídos de un solo sitio. El algoritmo de Wolff conserva la idea esencial de SW pero hace mas ágil el proceso de identificación de los cúmulos, trabajando con un solo cúmulo.

4.1. PARTE I: MÉTODOS DE MONTE CARLO

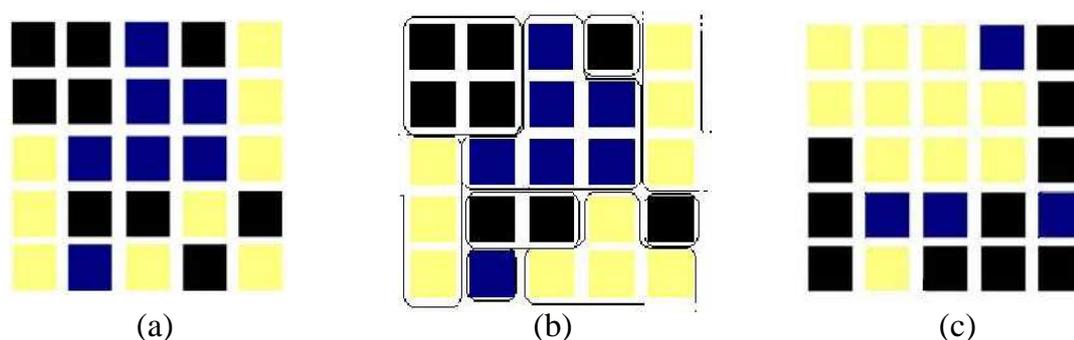


Figura 4.3: Algoritmo de SW para el modelo de Potts de 3-estados. La configuración inicial se muestra en (a) donde cada color representa un valor de espín, en (b) se realiza el proceso de construcción de cúmulos y, (c) un nuevo valor de espín es asignado a cada cúmulo generando una nueva configuración.

4.1.4. ALGORITMO DE WOLFF

El algoritmo de Wolff está basado en el algoritmo de SW, pero a diferencia de este último solamente un único cúmulo es identificado [52]. El algoritmo es mejor que el algoritmo de SW ya que el esfuerzo computacional se reduce al construir un solo cúmulo y, al igual que en el algoritmo SW *la lentitud de la convergencia cerca del punto crítico se reduce*.

El algoritmo de Wolff se describe a continuación paso por paso, para el modelo de Potts. En la Fig. 4.4 se ilustran los pasos de este algoritmo.

1. Se selecciona de manera aleatoria un espín, y se conecta por medio de enlaces de acuerdo a la probabilidad $p = \exp(-\beta E)$ a sus *primeros vecinos* que estén en el mismo estado. Después, se analizan todos los *primeros vecinos* de los nuevos sitios pertenecientes al cúmulo.
2. Cuando el crecimiento del cúmulo se detiene (es decir, cuando el cúmulo está satisfecho) se le asigna un nuevo valor a todo el cúmulo, donde los $q - 1$ valores restantes tienen la misma probabilidad de ser escogidos.

Un paso de Monte Carlo consiste en la construcción del cúmulo y la variación del espín del cúmulo

4.2. PARTE II: ORDEN DE LA TRANSICIÓN DE FASE

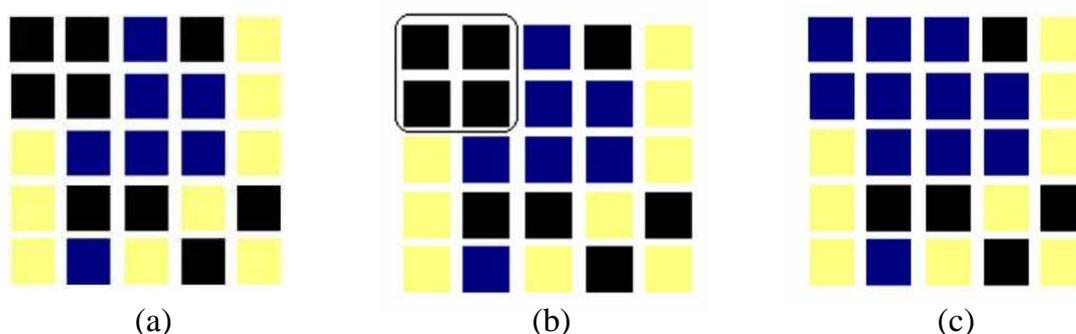


Figura 4.4: Se ilustra el algoritmo de Wolff para el modelo de Potts de 3-estados. En (a) se muestra la configuración inicial donde a cada valor del espín se le asigna un color, después (b) se escoge un sitio aleatoriamente y se construye el cúmulo correspondiente y, (c) se asigna un nuevo valor de espín al cúmulo.

Aunque se pueden introducir las interacciones LRDI fácilmente, la eficiencia del método decrece rápidamente al incrementar la cantidad de iteraciones [49], pero aún así es un poderoso algoritmo para estudiar transiciones de fase en sistemas con interacciones LRDP.

4.2. PARTE II: ORDEN DE LA TRANSICIÓN DE FASE

Distinguir el orden de una transición de fase es uno de los problemas principales en las simulaciones numéricas de sistemas de espín. Las herramientas más utilizadas para identificar el orden de una transición es el análisis de la *distribución de probabilidades de energías* [53] y del cumulante de Binder de cuarto orden [54].

4.2.1. CUARTO CUMULANTE DE BINDER PARA LA MAGNETIZACIÓN

El concepto del cuarto cumulante de Binder para la magnetización U fue introducido en 1981 por K. Binder [54], puede utilizarse para determinar el orden de una transición de fase. En el caso de las transiciones continuas, la temperatura

4.2. PARTE II: ORDEN DE LA TRANSICIÓN DE FASE

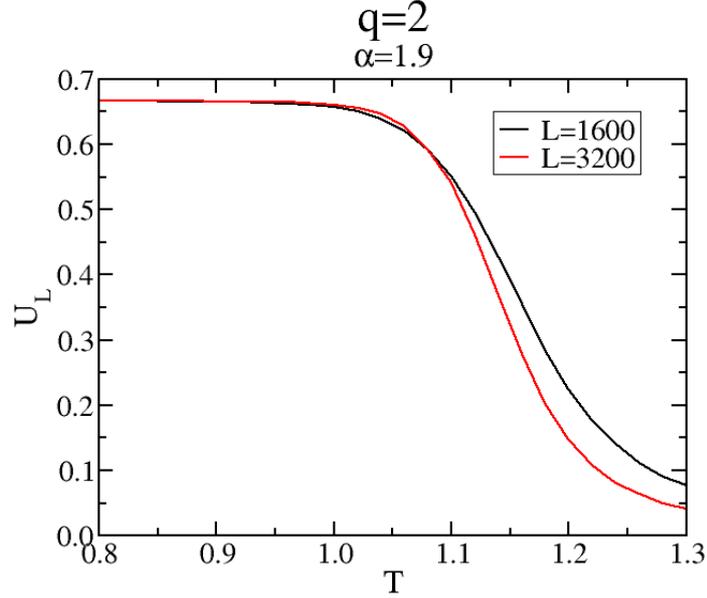


Figura 4.5: U_L vs. T . A temperaturas bajas $U_L \sim \frac{2}{3}$. Alrededor de T_c , cuando $T < T_c$ se observa que $U_{1600} < U_{3200}$; cuando $T > T_c$ se tiene que $U_{1600} > U_{3200}$. La temperatura crítica puede obtenerse en base a la intersección de los cumulantes.

crítica puede calcularse a partir de U . La expresión para el cumulante está dada por:

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}, \quad (4.4)$$

donde M^2 y M^4 son la media cuadrática y la media cuártica de la magnetización respectivamente, (la media se calcula a partir de datos tomados durante la simulación del sistema en equilibrio a una temperatura fija).

Se puede mostrar que $U_L \rightarrow 0$ para $T > T_c$ y cuando $L \rightarrow \infty$, $U_L \rightarrow \frac{2}{3}$ para $T < T_c$ y $U_L \rightarrow U^*$ ($U^* \in [0, \frac{2}{3}]$) para $T = T_c$. Además, U_L decrece monótonamente con T . Si un par de curvas U_L y $U_{L'}$ se grafican vs T , deberían intersectarse en $T = 0$, $T \rightarrow \infty$ y $T = T_c$. Para un tamaño de la red $L' > L$ y una temperatura $T < T_c$ se obtiene que $U_{L'} > U_L$, si $T > T_c$ entonces $U_{L'} < U_L$. Por lo tanto, cuando graficamos U_L en función de la temperatura para varios valores de L ,

4.2. PARTE II: ORDEN DE LA TRANSICIÓN DE FASE

los cumulantes deben intersectarse casi en un punto (sus intersecciones deben estar muy próximas). El valor de la temperatura en el punto de intersección da una estimación de la temperatura crítica. Esta técnica ha probado ser eficiente y será utilizada en un capítulo posterior.

La Fig. 4.5 ilustra el comportamiento de U en función de la temperatura para sistemas que exhiben transiciones de fase de segundo orden (en la figura $q = 2$ y $\alpha = 1.9$). A temperaturas bajas, el valor de ambas curvas de cumulante es aproximadamente $2/3$. Para temperaturas alrededor de T_c , $U_{1600} < U_{3200}$ cuando $T < T_c$, y $U_{1600} > U_{3200}$ cuando $T > T_c$. La temperatura crítica está situada aproximadamente en la intersección de los dos cumulantes de magnetización reducidos.

4.2.2. DISTRIBUCIÓN DE ENERGÍA

Las transiciones de fase de primer orden se caracterizan por una discontinuidad en la primer derivada de la energía libre respecto a la temperatura. La singularidad en las transiciones de fase de primer orden se debe a la coexistencia de fases [53].

Durante la simulación del sistema se obtienen valores de e (energía interna por sitio) cada ciertos pasos de Monte Carlo. Estos valores de e obedecen una distribución de probabilidad $P_L(e)$, y dicha distribución se aproxima a una gaussiana centrada alrededor de la energía de red infinita e_0 característica de la temperatura T , con un ancho proporcional al calor específico C de la red infinita [53]. A altas temperaturas, la distribución de probabilidad se puede expresar como:

$$P_L(e) = \frac{A}{\sqrt{C}} \exp \left[-\frac{(e - e_0)^2 L^d}{2K_B T^2 C} \right], \quad (4.5)$$

donde K_B es la constante de Boltzmann y A es una constante de renormalización. También podemos referirnos a la distribución de energía como histograma de energía.

4.2. PARTE II: ORDEN DE LA TRANSICIÓN DE FASE

La característica distintiva de las transiciones de primer orden es la coexistencia de dos fases cerca de la temperatura crítica. Aquí, $P_L(e)$ se puede aproximar como una superposición de dos gaussianas centradas en e_+ y e_- . Donde, e_+ y e_- son las energías internas características de la fase a altas y bajas temperaturas respectivamente [53]. Al aproximarse a T_c por debajo, la gaussiana centrada en e_- tiene mayor peso en la distribución $P_L(e)$. En T_c , hay igual probabilidad de estar en la fase de bajas temperaturas que en la de altas temperaturas. Para temperaturas próximas y mayores a T_c , la probabilidad de estar en la gaussiana centrada en e_+ es mayor. Lejos de la temperatura crítica, las gaussianas están centradas en las energías características de la temperatura.

En la temperatura crítica, la energía interna es discontinua para las transiciones de fase de primer orden. Esto equivale a la existencia de un calor latente¹ no nulo. En T_c se tiene que $e_+ = E_{int+}(T_c)$ y $e_- = E_{int-}(T_c)$, a la diferencia de las energías internas $E_{int+}(T_c) - E_{int-}(T_c)$ se le conoce como calor latente.

En resumen, la distribución de probabilidad de energía obedece a una gaussiana centrada en la energía característica de la fase e_0 a una temperatura T . Alrededor de T_c la distribución de energías se aproxima a la superposición de dos gaussianas, donde una representa la fase a altas temperaturas y la otra la fase de bajas temperaturas. Para temperaturas menores a T_c , la probabilidad de estar en la fase de bajas temperaturas es menor. Mientras que arriba de T_c , hay mayor probabilidad de estar en la gaussiana centrada en e_+ . En la temperatura crítica el sistema salta de estar en la fase de bajas temperaturas a la fase de altas temperaturas, con la misma probabilidad. Una buena estimación de la temperatura crítica es la temperatura a la cual los máximos de las dos gaussianas tienen la misma altura. Todo lo anterior se ilustra en la Fig. 4.6.

¹El calor latente es la cantidad de calor absorbido o emitido durante una transición de fase de primer orden.

4.2. PARTE II: ORDEN DE LA TRANSICIÓN DE FASE

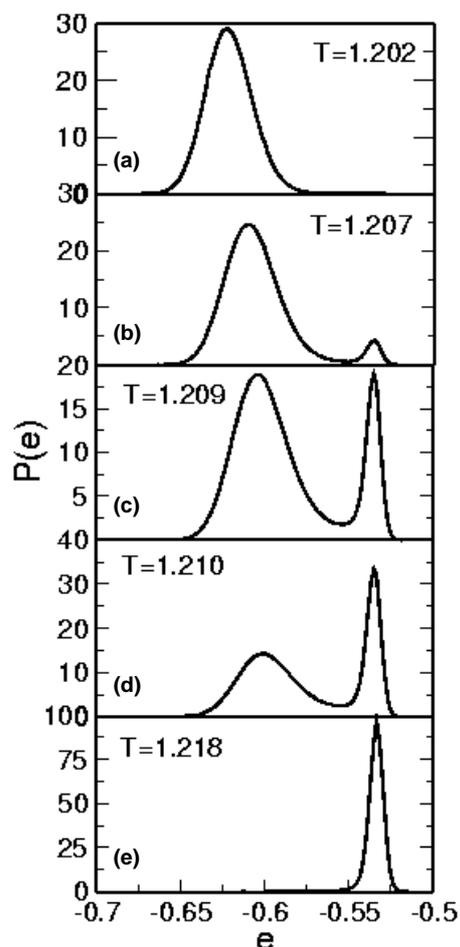


Figura 4.6: Histograma de energía para $L = 9000$ y $\alpha = 0.1$. Lejos de la temperatura crítica (a y e), el histograma de energía muestra un único máximo. Alrededor de T_c se observan dos máximos en el histograma de energía (b, c y d). Al aproximarse a T_c por debajo (b), la fase de bajas temperaturas tiene mayor peso en la distribución. En la temperatura crítica el sistema tiene la misma probabilidad de estar en cualquiera de las dos fases. (c) Se puede estimar T_c como la temperatura a la cual los máximos tienen la misma altura. (d) Cuando la temperatura es cercana y mayor a T_c , hay más probabilidad de que el sistema esté en la fase de altas temperaturas.

4.2.3. MÉTODO DEL HISTOGRAMA

El método del histograma, también conocido como *método de extrapolación*, nos permite calcular algunas propiedades termodinámicas a una temperatura T' basándonos en los resultados obtenidos mediante la simulación de Monte Carlo realizada en otra temperatura T (cuando T' es cercana a T). De esta manera se pueden generar funciones termodinámicas continuas, lo que de otra manera requeriría una gran cantidad de simulaciones. Fue introducido en el año de 1988 por Ferrenberg y Swendsen [55] y su esencia es muy simple.

La estimación de una cantidad Q a partir de M mediciones Q_{μ_i} durante una simulación de Monte Carlo es:

$$Q = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}}. \quad (4.6)$$

Sea la temperatura de interés T' (temperatura inversa β'), la cual está alrededor de la temperatura inversa β en la cual se realizó la medición. El método se basa en el hecho de que el valor de $Q(\beta')$ se puede deducir conociendo el valor de Q a la temperatura β ($Q(\beta)$).

Supongamos que p_{μ_i} son también las probabilidades de los estados individuales para otra temperatura β' muy cercana a β , entonces:

$$p_{\mu_i} = \frac{1}{Z'} e^{-\beta' E_{\mu_i}}, \quad (4.7)$$

donde Z' es la función de partición correspondiente a la temperatura T' . Sustituyendo esto en la Ec. 4.6 tenemos:

$$Q(\beta') = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} e^{-(\beta-\beta')E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M e^{-(\beta-\beta')E_{\mu_j}}}. \quad (4.8)$$

Esta expresión es la ecuación fundamental del método. Se aplica para calcular el valor medio de cualquier propiedad física que esté en función de la energía, como el histograma de energía $p(e)$ y el cumulante de Binder de la energía V_L .

4.2.4. MÉTODO DEL MULTIHISTOGRAMA

El método del histograma múltiple o *Extrapolación multivariable* es una eficaz herramienta utilizada en física estadística. El método permite calcular el valor de una observable (que no necesariamente está en función de la energía) a una temperatura inversa β' basándose en el valor del observable para β . Cualquier cantidad de interés puede ser calculada como una función continua [56]. Para realizar la extrapolación de alguna variable es necesario conocer la probabilidad de tener una magnetización M y una energía E , probabilidad que se representa por $P^\beta(E, M)$.

Durante la simulación de Monte Carlo (con temperatura inversa β) calculamos los valores de E y M , donde por E y M nos referimos a la energía y la magnetización total. Estos valores se acumulan en la distribución de probabilidad $p(M, E)$

Para un ensamble canónico a una temperatura inversa β dada, se cumple que:

$$P^\beta(M, E) = \frac{\Omega(M, E)e^{-\beta E}}{Z(\beta)}, \quad (4.9)$$

donde $\Omega(M, E)$ es la cantidad total de configuraciones de espín del sistema que tienen simultáneamente la misma magnetización M y energía E , y $Z(\beta)$ es la función de partición del sistema a una temperatura β , y se define como:

$$Z(\beta) = \sum_{E, M} \Omega(M, E)e^{-\beta E}. \quad (4.10)$$

En la sumatoria se toman en cuenta todos los valores que puede tomar la energía y la magnetización.

Sea T' la temperatura de interés, la cual está en la vecindad de T . Para obtener el valor de algún observable a la temperatura T' basándonos en las mediciones realizadas en T , obtenemos $P^{T'}(E, M)$ de la siguiente manera:

$$P^{\beta'}(M, E) = \frac{\Omega(M, E)e^{-\beta' E}}{Z(\beta')}. \quad (4.11)$$

4.2. PARTE II: ORDEN DE LA TRANSICIÓN DE FASE

Usando la relación 4.9 podemos reescribir la expresión anterior como:

$$P^{\beta'}(M, E) = \frac{Z(\beta)}{Z(\beta')} P^{\beta}(M, E) e^{-(\beta' - \beta)E}. \quad (4.12)$$

Entonces a partir de las medición de $P^{\beta}(M, E)$ se puede obtener $P^{\beta'}(M, E)$ con sólo multiplicar por un factor $(Z(\beta)/Z(\beta')e^{-(\beta' - \beta)E})$.

Usando las relaciones 4.9 y 4.10 tenemos que:

$$Z(\beta') = \sum_{E,M} \Omega(M, E) e^{\beta' E}, \quad (4.13)$$

$$Z(\beta') = Z(\beta) \sum_{E,M} P^{\beta}(M, E) e^{-(\beta' - \beta)E}. \quad (4.14)$$

Por lo tanto

$$\frac{Z(\beta')}{Z(\beta)} = \sum_{E,M} P^{\beta}(M, E) e^{-(\beta' - \beta)E}. \quad (4.15)$$

Ahora, usando la expresión anterior podemos expresar la relación 4.12 de la siguiente manera:

$$P^{\beta'}(M, E) = \frac{P^{\beta}(M, E) e^{-(\beta' - \beta)E}}{\sum_{E,M} P^{\beta}(M, E) e^{-(\beta' - \beta)E}}. \quad (4.16)$$

Una vez obtenido $P^{\beta'}(M, E)$ se puede calcular la variable de interés para la nueva temperatura inversa β' , por ejemplo se puede obtener el calor específico, la media de la magnetización, el cumulante de Binder de cuarto orden de la magnetización, etc.

CAPÍTULO 5

REDES LRDP

Una red puede definirse desde el punto de vista matemático como un conjunto G que contiene dos subconjuntos $G = \{P, E\}$, donde P es el conjunto de los N nodos (o sitios) y E es el conjunto de los enlaces (los cuales representan las conexiones entre dos sitios) [57]. Toda red puede representarse mediante un grafo¹, el cual se constituye de N nodos y m enlaces (los enlaces representan propiedades de las interacciones entre nodos). Es importante estudiar la estructura topológica de la red ya que toda propiedad mostrada por la red depende de la topología de la misma [57].

El estudio de redes es un área de interés tanto en física estadística como neurobiología, ciencias sociales, ecología, etc. La mayoría de los sistemas reales pueden describirse como redes complejas. Estas redes tienen como característica una topología estructural complicada. Algunos ejemplos de sistemas relevantes que han sido estudiados analizando redes complejas son: la World Wide Web [58], el Internet [59], la dispersión de enfermedades [60], las redes metabólicas [61], las llamadas telefónicas [62], etc.

El estudio de las redes complejas inició con el análisis de las redes aleatorias desde un enfoque matemático realizado por Paul Erdős y Alfréd Rény (1959) [63].

¹Un grafo es el objeto abstracto básico de estudio en teoría de grafos. Un grafo se concibe y se representa como un conjunto de objetos llamados vértices o nodos unidos por enlaces llamados aristas

5.1. REDES REGULARES, REDES ALEATORIAS Y REDES DE MUNDO PEQUEÑO

Recientemente, el estudio de redes complejas ha cobrado interés dentro de la física estadística, y en este punto resaltan los estudios de A. L. Barabási [64], D. J. Watts [65] y S. H. Strogatz [66].

5.1. REDES REGULARES, REDES ALEATORIAS Y REDES DE MUNDO PEQUEÑO

Gran parte de las redes utilizadas en la física del estado sólido son considerablemente simples, y la gran mayoría presentan simetría traslacional². Las redes regulares son muy útiles en la física de materia condensada tradicional. Todas las características de las redes regulares se resumen en la tabla 5.1.

Las redes regulares se utilizan para describir sistemas ordenados (cualquier sistema que presente simetría traslacional, por ejemplo el arreglo existente en los cristales), y por esto también se les conoce como redes ordenadas. En la física del estado sólido se ha estudiado ampliamente este tipo de estructuras, y algunos ejemplos son: cadenas unidimensionales, redes bidimensionales como (1) las redes cuadradas, (2) triangulares, (3) hexagonales, etc. y, dentro del caso tridimensional se ubican, por ejemplo, las redes cúbica simple, cúbica centrada en el cuerpo y cúbica centrada en las caras (sc, bcc y fcc, por sus siglas en inglés). Las redes cúbicas mencionadas se ilustran en la Fig. 5.2. En las redes regulares no sólo es importante el tipo de red sino también el grupo de simetría.

El ejemplo más simple de una red compleja es una red aleatoria que consiste de N sitios y m enlaces. De acuerdo a la teoría de redes aleatorias, una red aleatoria se puede construir de las siguientes maneras: (a) escoger los m enlaces de manera aleatoria, o (b) cada enlace existe de acuerdo a una probabilidad p , donde $p > 0$.

Los tipos de redes descritos anteriormente fueron introducidos con la finali-

²La simetría traslacional significa que desde cualquier punto de la red podemos llegar a otro punto, que no se diferencia del anterior. Es decir, el entorno de cada punto de la red es idéntico para cualquier traslación.

5.1. REDES REGULARES, REDES ALEATORIAS Y REDES DE MUNDO PEQUEÑO

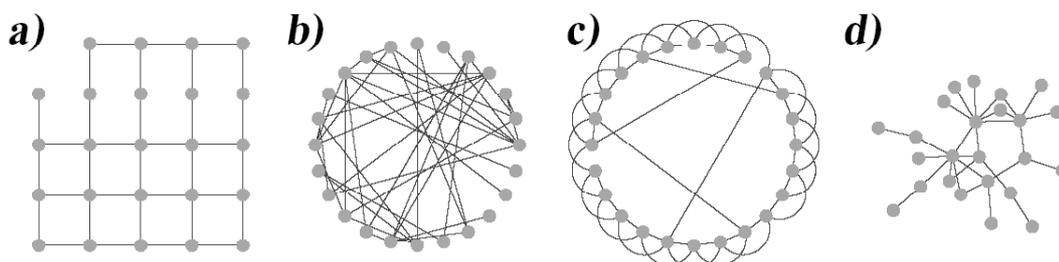


Figura 5.1: Cuatro diferentes modelos de redes, todos fueron diseñados para mimetizar redes del mundo real. (a) Una red bidimensional. (b) red aleatoria generada con el modelo de Erdős-Rényi correspondiente a $N = 24$ y $m = 60$ con $p = 0.14$. (c) Modelo de Watts y Strogatz, cada nodo ($N = 24$) está conectado a los primeros vecinos y a los segundos primeros vecinos, donde cuatro enlaces están reubicados con una probabilidad de reubicación $p = 0.08$. (d) Una red libre de escala con grado de distribución $P(k) \propto K^{-2.2}$. Figura tomada de [67].

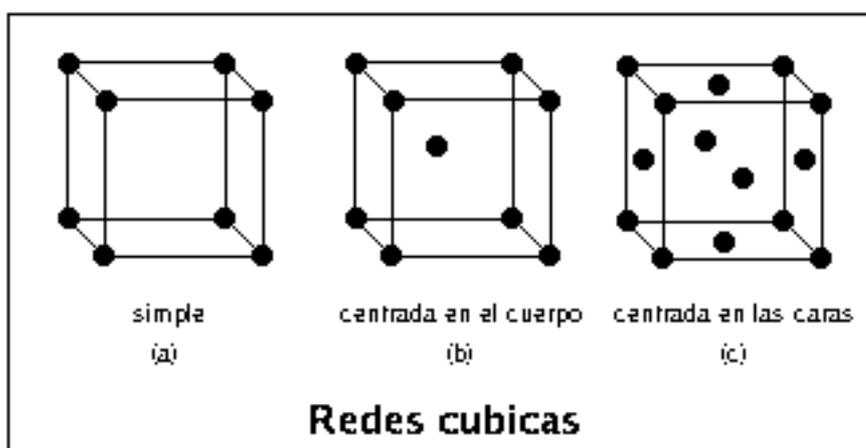


Figura 5.2: Ejemplos de redes regulares tridimensionales. (a) Red cúbica simple, los sitios están situados en los vértices de un cubo. (b) Red cúbica centrada en el cuerpo, además de los sitios en los vértices hay un sitio en el centro del cubo. (c) Red cúbica centrada en las caras, en esta red los sitios están localizados en los vértices así como en el centro de cada cara del cubo. Estas redes son frecuentemente estudiadas en la física del estado sólido ya que representan algunas estructuras cristalinas.

5.2. FENÓMENO DE MUNDO PEQUEÑO (SMALL WORLD EFFECT)

dad de reproducir sistemas reales. Sin embargo, una gran cantidad de sistemas reales no son completamente aleatorios ni completamente regulares por lo cual se han propuesto las redes de mundo pequeño para modelar estos sistemas. Las redes de *mundo pequeño* se han aplicado al estudio de diversos sistemas reales y tienen algunas de las características de las redes aleatorias así como algunas propiedades de las redes regulares. Además presentan la propiedad de *mundo pequeño* (sección 5.2). En la Fig. 5.1 podemos apreciar algunos ejemplos gráficos de redes generadas con distintos modelos, se aprecia desde: (a) una red regular bidimensional hasta redes complejas como (b) redes aleatorias generadas con el modelo de Erdős-Rényi y (c) redes generadas con el modelo de Watts-Strogatz [68], y (d) redes libres de escala [69].

5.2. FENÓMENO DE MUNDO PEQUEÑO (SMALL WORLD EFFECT)

El concepto de *mundo pequeño* describe el hecho de que aún en redes de gran tamaño existe un camino relativamente corto³ entre cualquier par de nodos pertenecientes a la red.

El término de mundo pequeño fue introducido por el psicólogo Stanley Milgram en su artículo “The Small World Problem” publicado en 1967 [70]. En 1969, apareció un artículo más técnico que aborda algunos detalles omitidos en el primero [71].

El experimento realizado por S. Milgram se detalla a continuación. Los voluntarios de Kansas (primer estudio [70]) y de Nebraska (segundo estudio [71]) recibieron cartas dirigidas a residentes desconocidos de Cambridge y Boston, respectivamente. Los voluntarios deberían hacer llegar la carta a su destino de acuerdo a la siguiente regla: si no se conocía al destinatario personalmente, no

³Se considera un camino corto si tiene una longitud de $\sim \log N$, donde N es la cantidad de nodos del sistema. El camino más corto es la cantidad mínima de enlaces para unir dos sitios de la red.

5.3. CARACTERÍSTICAS PRINCIPALES DE LA ESTRUCTURA DE LAS REDES

debería contactarse directamente. En este caso el sobre debía enviarse a algún conocido (amigo, pariente o compañero) que probablemente tendría un vínculo más cercano con el destinatario. Todos los intermediarios debían escribir sus nombres.

Aunque muchas cartas se perdieron, entre las cartas entregadas se observó una longitud corta de la cadena de intermediarios. En ambos estudios la longitud de la cadena varía de dos a diez intermediarios, con un promedio cercano a seis enlaces. Así pues, en Estados Unidos de América todo par de personas puede conectarse a través de una cadena corta de intermediarios (aproximadamente seis). El resultado general muestra que dos personas seleccionadas al azar (en cualquier parte del mundo) pueden ser conectadas por una cadena corta de intermediarios y, aunque el experimento de Stanley Milgram fue duramente criticado, ahora es ampliamente aceptado. La frase *seis grados de separación* se asocia a este resultado.

5.3. CARACTERÍSTICAS PRINCIPALES DE LA ESTRUCTURA DE LAS REDES

Para hacer predicciones acerca del comportamiento de un sistema bajo estímulos externos, es necesario conocer la estructura de la red. El estudio topológico de las redes se basa en el análisis de las siguientes propiedades: diámetro, coeficiente de clusterización (CC), distancia química, y en el caso de las redes dinámicas la evolución de las redes.

- **Coeficiente de clusterización:** El vecindario de un nodo consiste en el conjunto de nodos a los cuales está conectado. El coeficiente de clusterización de un nodo es la razón de la cantidad de enlaces existentes entre los nodos de su vecindario y el total de enlaces posibles entre ellos. El coeficiente de clusterización de un grafo es el promedio de todos los coeficientes de clusterización de los nodos.

5.4. MODELOS DE REDES COMPLEJAS

Cuadro 5.1: Propiedades de las redes. Las características que exhiben las redes de mundo pequeño las sitúan entre las redes aleatoria y las redes regulares.

PROPIEDAD	REGULAR	MUNDO PEQUEÑO	ALEATORIA
orden	orden	orden/desorden	desorden
camino medio	grande	pequeño	pequeño
coeficiente de clusterización	grande	grande	pequeño

- **Longitud del camino más corto:** Conocida como distancia química, es la cantidad mínima de enlaces necesarios para conectar dos nodos pertenecientes a la red.
- **Longitud del camino más corto medio:** También conocido como distancia química media, es el promedio de la longitud de todos los caminos más corto entre los pares de sitios de la red.

En el Cuadro 5.1 se pueden comparar las características más representativas de las redes regulares, redes aleatorias y redes de mundo pequeño. De acuerdo al cuadro, las redes de mundo pequeño exhiben algunas características de las redes aleatorias (como la longitud del camino medio), sin embargo, muestran un alto coeficiente de clusterización al igual que las redes regulares. El coeficiente de clusterización es una medida de la interrelación de los vecinos de un sitio. Las redes de mundo pequeño se ubican en medio de las redes aleatorias y las redes regulares, como se muestra en la Fig. 5.3, donde pueden observarse algunas redes generadas con el modelo de Watts-Strogatz (sección 5.4.1), donde al variar la probabilidad de reubicar enlaces p podemos obtener desde redes regulares hasta redes aleatorias.

5.4. MODELOS DE REDES COMPLEJAS

Las redes complejas son un nuevo tópico de investigación científica. Hay una gran cantidad de modelos creados para representar las redes complejas. En esta

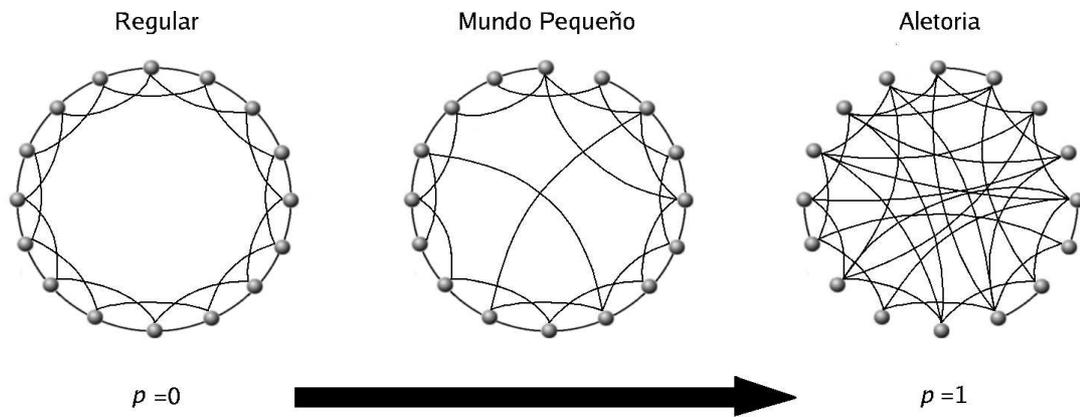


Figura 5.3: Redes generadas con el modelo Watts-Strogatz. Al incrementar el valor de la probabilidad de incrementar el reubicamiento de enlaces, se producen transiciones de fase estructurales: i) transición de red ordenada a red de mundo pequeño y ii) transición de red de mundo pequeño a red aleatoria. Figura tomada y modificada de [68].

sección se mencionarán los principales modelos existentes con el fin de facilitar el entendimiento del modelo utilizado para la generación de las redes estudiadas en este trabajo.

Los principales modelos de redes complejas son: las redes aleatorias (propuesta por P. Erdős y A. Rényi [63]), las redes libres de escala (propuestas por R. Albert y A. L. Barabási [64], que son redes donde pocos enlaces están altamente conectados y los cuales ejercen una gran influencia en la forma en que la red opera, y un ejemplo de estas redes es la internet), las redes Watts-Strogatz [65] y las redes Newman-Watts [72]; estos últimos modelos se discuten a continuación.

5.4.1. REDES WATTS-STROGATZ Y REDES NEWMAN-WATTS

Watts y Strogatz calcularon los coeficientes de clusterización de redes de sistemas reales, los cuales son similares a los presentes en redes ordenadas. Basados en esta observación, en 1998 [68] propusieron un modelo para generar redes complejas. A este modelo haremos referencia con las siglas WS. La

5.4. MODELOS DE REDES COMPLEJAS

explicación de este modelo dada por Barabási [57] es la siguiente:

Empezar desde una red ordenada: Se inicia con un anillo unidimensional perfecto, en el cual cada vértice tiene exactamente k vecinos, donde $N \gg k$ y $\ln(N) \gg 1$, donde N es el número de nodos de la red.

Aleatoriedad: Aleatoriamente reubicar cada enlace de la red con una probabilidad p . Este proceso introduce $pNk/2$ enlaces de largo alcance a través de la red. Variando p se obtiene: (a) un anillo ordenado cuando $p = 0$ y (b) una aproximación a una red aleatoria cuando $p = 1$.

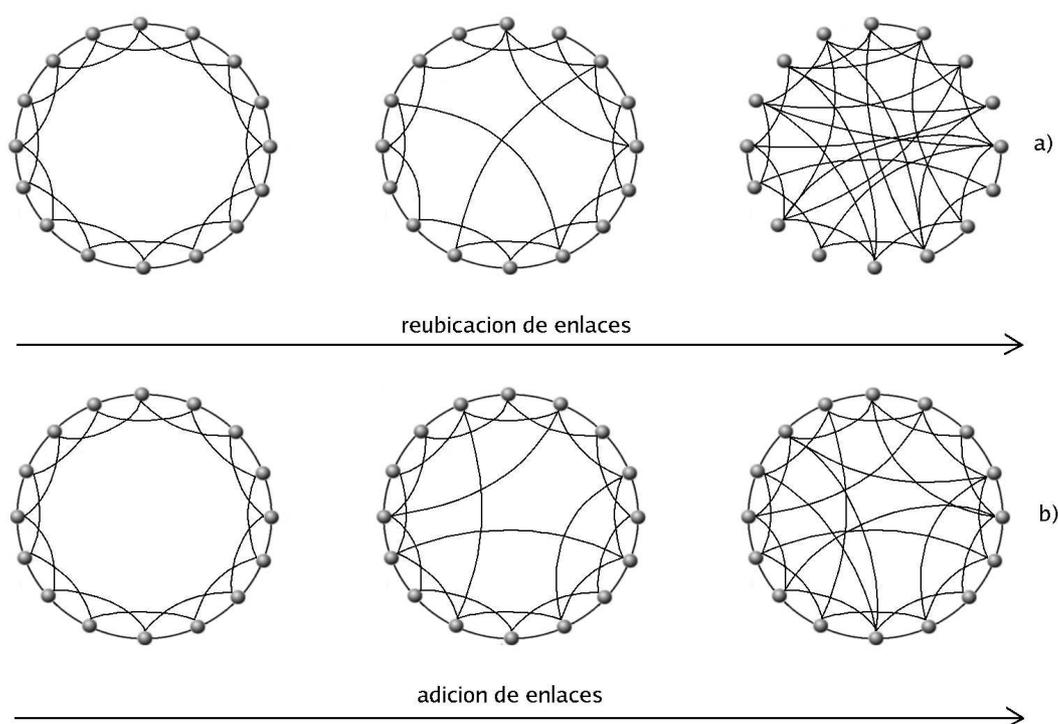


Figura 5.4: Redes de mundo pequeño en las cuales se realiza la transición de red regular a red aleatoria. En (a) se muestra un ejemplo del modelo de Watts-Strogatz con reubicamiento de enlaces. En (b) se ilustra una modificación del modelo Watts-Strogatz, donde a la red regular se le añaden enlaces de largo alcance. Figura tomada de [73].

La Fig. 5.4 muestra un ejemplo de redes generadas en base al modelo descrito anteriormente. Una variante muy estudiada del modelo Watts-Strogatz es la propuesta por Newman y Watts [72], en la cual se añaden enlaces entre pares de

5.5. REDES CON ENLACES DE LARGO ALCANCE CON PROBABILIDAD DECRECIENTE (REDES LRDP)

nodos seleccionados de manera aleatoria, pero no se remueven enlaces de la red regular. Watts-Strogatz y de Newman-Watts tienen coeficientes de clusterización (CC) altos.

5.5. REDES CON ENLACES DE LARGO ALCANCE CON PROBABILIDAD DECRECIENTE (REDES LRDP)

La idea básica de las redes con probabilidad de enlaces de largo alcance decreciente (redes LRDP) fue propuesta por Jespersen y Blumen en las redes que denominaron *redes de mundo pequeño generalizadas* [11], las redes se introdujeron con propiedades especiales para generar sistemas físicos.

Las redes con interacciones LRDP se caracterizan por seguir una distribución de enlaces aleatoria de acuerdo a la siguiente probabilidad: $p_{ij} \sim r_{ij}^{-\alpha}$, donde p_{ij} es la probabilidad de formar un enlace entre los sitios i y j separados por la distancia r_{ij} . Las redes LRDP se construyen de la siguiente manera: primero se toma una red unidimensional de N nodos donde cada nodo i está conectado a los nodos $(i - 1)$ e $(i + 1)$ (para asegurar que la conectividad de la red sea igual a uno). Posteriormente para cada sitio i se añade un nuevo enlace hacia otro nodo de acuerdo a la probabilidad antes mencionada. Además, se verifica que un sitio i no aparezca más de una vez como vecino de otro sitio j . De esta manera se construyen redes con número de coordinación⁴ promedio igual a 4. Los enlaces más cortos que se pueden formar tienen longitud uno y los más largos tienen longitud $N/2$, donde N es el número de sitios de la red.

Como las redes LRDP dependen de una probabilidad, para un mismo valor de α podemos construir redes diferentes. A cada copia de la red (red generada para un valor dado de α), le denominaremos *muestra*. Por esta razón, todos los resultados obtenidos en el siguiente capítulo se calcularon utilizando más de una muestra.

⁴El número de coordinación de un sitio i es la cantidad de sitios j ($i \neq j$) a los cuales está unido por medio de un enlace.

5.5. REDES CON ENLACES DE LARGO ALCANCE CON PROBABILIDAD DECRECIENTE (REDES LRDP)

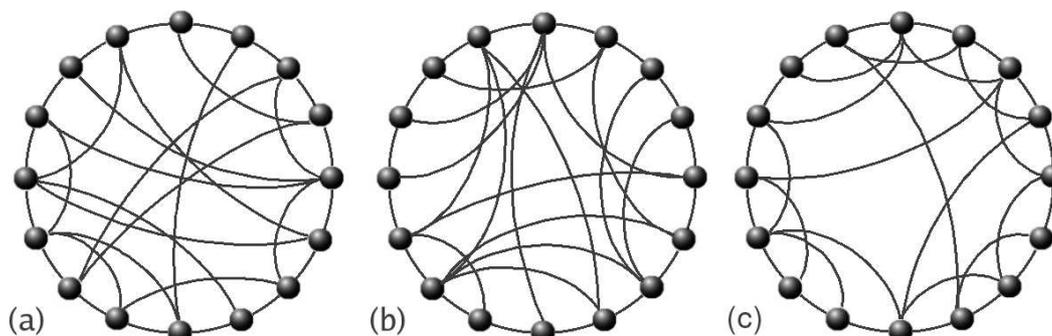


Figura 5.5: La estructura de las redes LRDP muestra una gran diversidad al cambiar el valor de α . En la figura se ilustran tres redes LRDP de 16 nodos. (a) Se muestra una red donde $\alpha = 0.1$, esta red corresponde al régimen donde el camino más corto medio escala como $\log(L)$. En (b) se ilustra una copia de la red (o muestra) para $\alpha = 1.3$, esta red corresponde a la región donde $\ell(L) \propto \log(L)^\theta$. (c) Se muestra una red correspondiente a $\alpha = 2.3$, aquí el camino más corto medio escala como $\ell(L) \propto L$.

De acuerdo a la ley de distribución para el caso donde α tiende a infinito los enlaces tienden a ser de corto alcance, y para el caso extremo donde α tiende a cero las redes tienen una mayor cantidad de enlaces de largo alcance. De esta manera, con sólo variar el parámetro α podemos obtener sistemas muy diversos.

En la Fig. 5.5 se ejemplifica la estructura de redes LRDP 1D pertenecientes a los tres diferentes regímenes (para $L = 16$). La Fig. 5.5.a es una red obtenida para $\alpha = 0.1$, esta figura es ilustrativa del régimen $\alpha < 1$ donde la longitud del camino más corto medio escala como $\ell(L) \propto \log(L)$. Un ejemplo de una red perteneciente a la región intermedia ($1 < \alpha < 2$) se ilustra en la Fig. 5.5.b (donde $\alpha = 1.5$), aquí el camino más corto promedio escala como $\ell(L) \propto L^\theta$ (donde $\theta < 1$). En la Fig. 5.5.c podemos apreciar una red donde $\alpha = 2.3$, esta figura pertenece al régimen $\alpha > 2$ donde el camino escala como el tamaño del sistema ($\ell(L) \propto L$), este tipo de escalamiento se observa en las redes regulares.

5.6. CAMINOS

5.5.1. GENERACIÓN DE REDES LRDP

En esta sección nos enfocaremos a describir el algoritmo de generación de las redes LRDP que utilizamos. Debido a que estudiamos el caso 1D el tamaño del sistema es L . Como utilizamos condiciones de frontera periódicas, el sitio 1 es vecino del sitio L .

Es importante mencionar que los enlaces de estas redes carecen de dirección, esto implica que al unir el sitio i con el j , podemos ir desde i a j y también de j a i . El algoritmo inicia en el sitio $i = 1$, y se puede describir de la siguiente manera:

1. Primero se genera una cadena lineal, uniendo los sitios i e $i + 1$ por medio de un enlace de **corto alcance**, ver Fig. 5.6.a.
2. Mediante un enlace de **largo alcance** se une el sitio i con el sitio j de acuerdo a la probabilidad p_{ij} de formar un enlace de largo alcance ($p_{ij} \sim r_{ij}^{-\alpha}$, donde j es el sitio que se encuentra r_{ij} enlaces hacia la derecha de i). La longitud máxima del enlace es $L/2$, ya que al tomar en cuenta las condiciones de frontera periódicas al sobrepasar ese límite la longitud real del enlace sería $L - L/2$. De esta manera el algoritmo no repite enlaces, pues se puede generar un enlace desde el sitio i a un sitio j que se encuentra hacia la derecha pero desde el sitio j no se generará algún enlace hacia la izquierda ni tampoco alguno con longitud mayor a $L/2$. El valor del parámetro de estructura α es un dato de entrada del código. Ver Fig. 5.6.b.
3. Hacer $i = i + 1$ y repetir, pasos 1 y 2 hasta que $i = L$ (Fig. 5.6.c).

El proceso de construcción descrito anteriormente explica como se construye una sola muestra de la red para un valor dado de α y L .

5.6. CAMINOS

Una de las principales características de una red es la longitud del *camino medio* ℓ . El camino medio está relacionado con la *dimensión efectiva*, la cual

5.7. DIMENSIÓN EFECTIVA

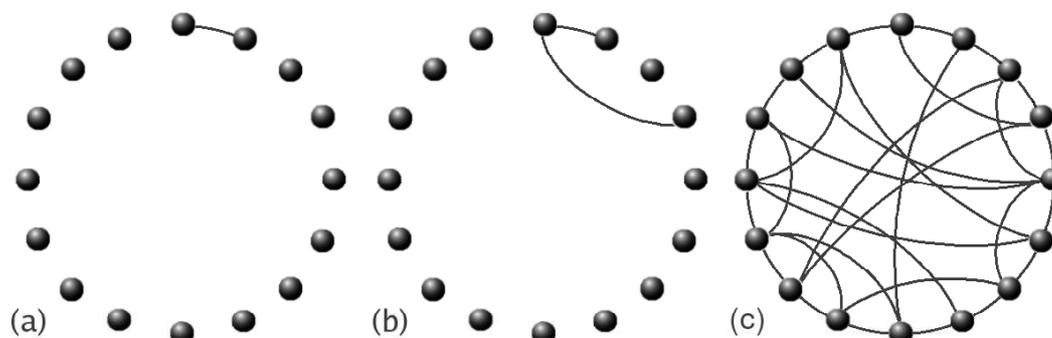


Figura 5.6: Generación de una red LRDP. En la figura se ejemplifica el caso $L = 16$ y $\alpha = 0.1$. En (a) se ilustra el primer paso en la construcción de la red, desde el primer sitio se crea un enlace de corto alcance hacia su primer vecino a la derecha. (b) Muestra el segundo paso, generar un enlace de largo alcance de acuerdo a $p_{ij} \sim r_{ij}^{-\alpha}$, el cual une al sitio con aquel sitio j que se encuentra r_{ij} enlaces a la derecha. (c) Al repetir los pasos 1 y 2 en todos los sitios obtenemos una muestra de la red LRDP para el tamaño y el valor de α dado.

tiene un efecto importante en el comportamiento de la red.

En la misma red hay muchas rutas para conectar dos nodos a través de los enlaces existentes. A cada ruta entre dos sitios i y j en la red se le llama camino. El *camino más corto (distancia química)* ℓ_{ij} es el número mínimo de enlaces necesarios para conectar los sitios i y j , mientras que la *longitud media del camino más corto (distancia química media)* ℓ es el promedio entre los caminos más cortos existentes en la red.

5.7. DIMENSIÓN EFECTIVA

La *dimensión efectiva* es una medida de la geometría de la red y puede tomar valores fraccionarios. Esta dimensión también se conoce como *dimensión química* y se denota por d_q . Se considera que la introducción de enlaces de largo alcance proporciona a la red una dimensión efectiva que difiere de la dimensión euclidiana d [74].

En una red, el volumen $V_i(\ell)$ dentro de una distancia ℓ alrededor de un nodo i ,

5.7. DIMENSIÓN EFECTIVA

es el número de sitios a los que se puede llegar desde el sitio i en a lo máximo ℓ pasos. En una red d -dimensional donde los enlaces unen sólo primeros vecinos, $V_i(\ell)$ crece asintóticamente como ℓ^d . Esto hace posible definir, para cualquier red, la dimensión efectiva como:

$$d_q = \lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{\log \langle V_i(\ell) \rangle}{\log \ell}. \quad (5.1)$$

Para redes en el espacio euclidiano de dimensión d , se tiene que $V(r) \sim r^d$ donde $V(r)$ es la media del número de nodos dentro de una esfera de radio r . Si definimos $\ell(r)$ como la distancia química media (o el camino medio) para nodos separados por una distancia r . Se tiene que $\ell(r) \sim r^{d/d_q}$, y que la dimensión química se puede expresar como:

$$d_q = d \left[\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\log \ell(r)}{\log r} \right]^{-1}, \quad (5.2)$$

donde la expresión entre corchetes es el exponente de escalamiento θ del camino medio más corto. Podemos escribir la expresión anterior como:

$$d_q = d/\theta. \quad (5.3)$$

En el caso unidimensional se tiene que $d = 1$, por lo que la dimensión efectiva es $d_q = 1/\theta$ (donde $\theta < 1$).

De acuerdo a [74], la dimensión efectiva es infinita para $\alpha < 1$ y para $\alpha > 2$ se tiene que $d_q = 1$. No hay una expresión analítica para describir el comportamiento de d_q en la región intermedia $1 < \alpha < 2$, pero se sabe que decrece desde infinito hasta 1 [74].

CAPÍTULO 6

RESULTADOS

El comportamiento magnético de las redes LRDP depende del parámetro de estructura α (este parámetro está directamente relacionado con la dimensión efectiva d_e del sistema). También depende del estado q del modelo de Potts.

En la primera parte del capítulo se discuten los resultados de las transiciones de fase magnéticas en las redes para el caso $q = 2$. En la segunda parte se mencionan los resultados más relevantes respecto al caso $q = 3$.

6.1. MODELO DE POTTS DE DOS ESTADOS: $q = 2$

El modelo de Potts de dos estados muestra transiciones de fase magnéticas de segundo orden cuando α es menor que una α crítica, a la que denotaremos α_{c2} . Una manera de determinar el orden de la transición así como la temperatura crítica es analizar el cumulante de Binder de cuarto orden reducido.

Para estudiar el comportamiento del cumulante de Binder reducido U se realizaron simulaciones de Monte Carlo, utilizando cuatro diferentes tamaños del sistema para cada una de ellas. Para $\alpha \leq 1.7$, los tamaños de red utilizados fueron: $L = 400, 500, 600$ y 700 . Dado que la transición de fase se hace más débil conforme se aumenta α , en $\alpha \geq 1.9$ es muy difícil reconocer la existencia de transiciones de fase. Por esta razón se utilizaron algunas redes de tamaños más grandes: $L = 400, 800, 1600$ y 3200 .

6.1. MODELO DE POTTS DE DOS ESTADOS: $q = 2$

Para cada α se realizó una primera simulación utilizando 200 muestras, con el objetivo de ubicar la región crítica. En una segunda simulación se enfocó en la región crítica utilizando un intervalo de temperatura $\Delta T=0.005$, con 1400 muestras y 250000 pasos de Monte Carlo e igual cantidad de pasos de termalización.

El comportamiento del cumulante de Binder alrededor de la temperatura crítica se muestra en la Fig. 6.1 para $\alpha < 2.0$. En la figura se pueden apreciar claramente las intersecciones entre las curvas U_{L_1} , U_{L_2} , U_{L_3} y U_{L_4} para cada valor considerado del parámetro α .

Como se utilizaron cuatro tamaños diferentes, se tienen seis intersecciones entre los cumulantes que denotaremos por T_1, T_2, \dots, T_6 . Una vez obtenidas la intersecciones entre cumulantes, hacemos un promedio entre las seis temperaturas obtenidas, y de acuerdo con la estimación de errores, la temperatura crítica T_c es:

$$T_c = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 T_i \pm \Delta T_c, \quad (6.1)$$

donde el primer término representa el valor de $T_c(\infty)$, y el segundo es el error $\Delta T_c(\infty)$ correspondiente a la estimación de $T_c(\infty)$. El error estándar estimado es $\sigma_e/\sqrt{4}$. Denotemos por \bar{T} el primer término del lado derecho de la expresión, y utilizando la expresión de la varianza σ_e , tenemos que:

$$T_c = \bar{T} \pm \sqrt{\sum_{i=1}^{n=6} \frac{(\delta T_i)^2}{5}}, \quad (6.2)$$

donde las desviaciones de las mediciones están dadas por $\delta T_i = T_i - \bar{T}$.

Para el caso de $q = 2$ no sólo fue posible determinar la temperatura crítica cuando las transiciones de fase son de segundo orden, sino también se pudo establecer la existencia de dos regiones. En la región I ($\alpha < \alpha_{c2}$) existen transiciones de fase son continuas. Por otro lado, en la región II ($\alpha \geq \alpha_{c2}$), no existe transición de fase.

La determinación de la ausencia de la transición de fase se fundamenta principalmente en dos observaciones. (i) Para $\alpha \geq 2.05$ las intersecciones entre las

6.1. MODELO DE POTTS DE DOS ESTADOS: $q = 2$

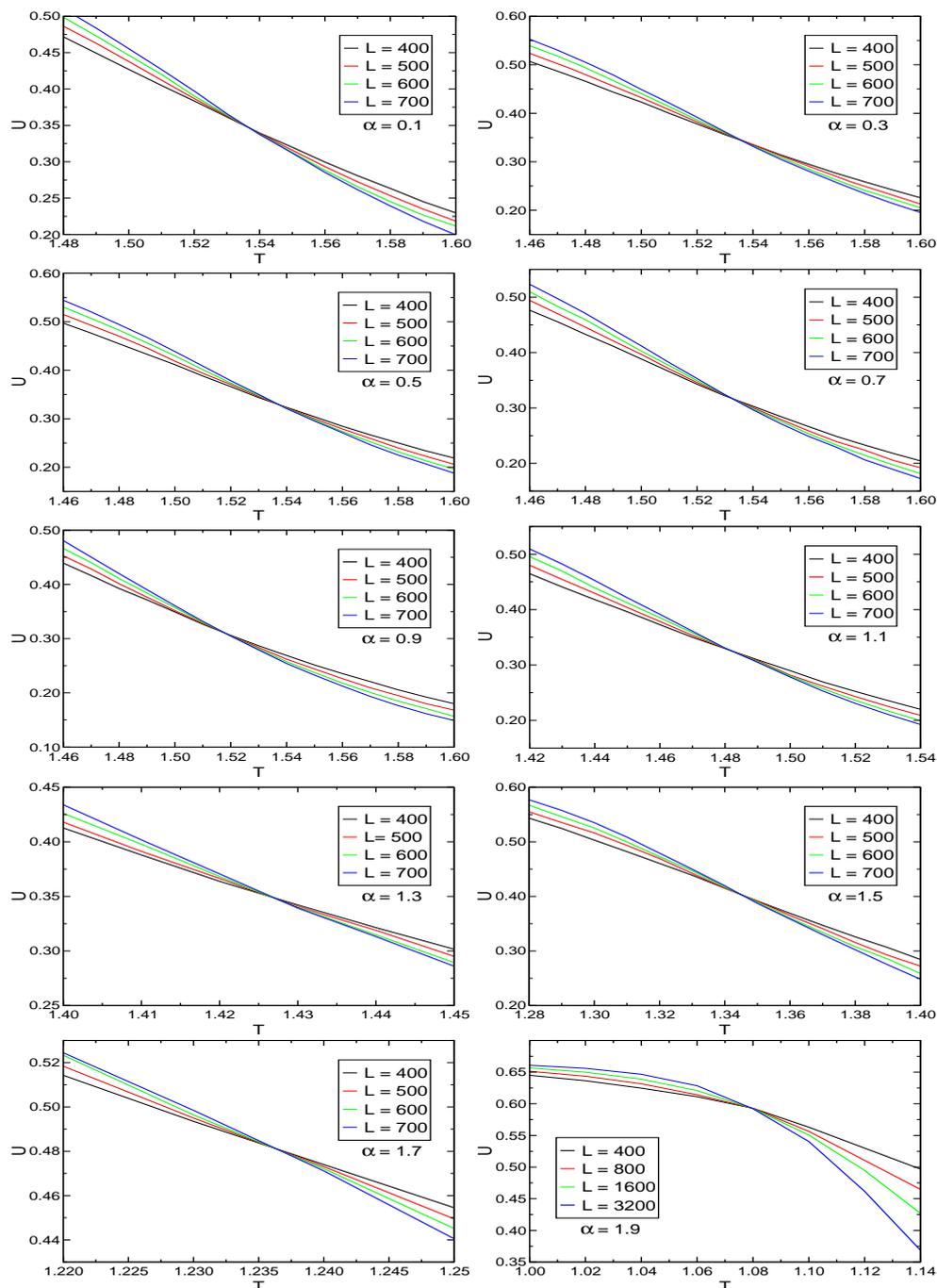


Figura 6.1: Cumulante de Binder de cuarto orden en función de la temperatura. En la figura se muestra que los cumulantes de Binder (para $0.1 \leq \alpha \leq 1.9$) se intersectan casi en el mismo punto. La estimación de la temperatura crítica puede calcularse a partir de la intersección de las cuatro curvas del cumulante de Binder obtenidas para los tamaños $L = 400, 500, 600$ y 700 ($\alpha \leq 1.9$) y $L = 400, 800, 1600$ y 3200 ($\alpha = 1.95$).

6.1. MODELO DE POTTS DE DOS ESTADOS: $q = 2$

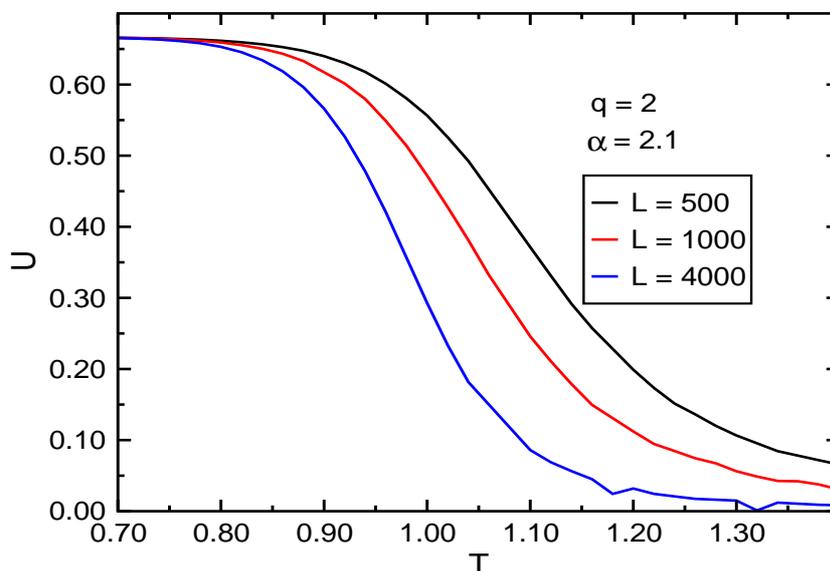


Figura 6.2: U vs. T . El caso particular $\alpha = 2.1$ se ilustra en la figura. En las transiciones de fase continuas se sabe que el cumulante de Binder es $\sim 2/3$ para temperaturas bajas. Se tiene que $U_{L_1} < U_{L_2}$ para $T < T_c$ y que $U_{L_1} > U_{L_2}$ para $T > T_c$, cuando $L_1 < L_2$. Entonces, para $\alpha \geq 2.1$ se estima que $T_c = 0$.

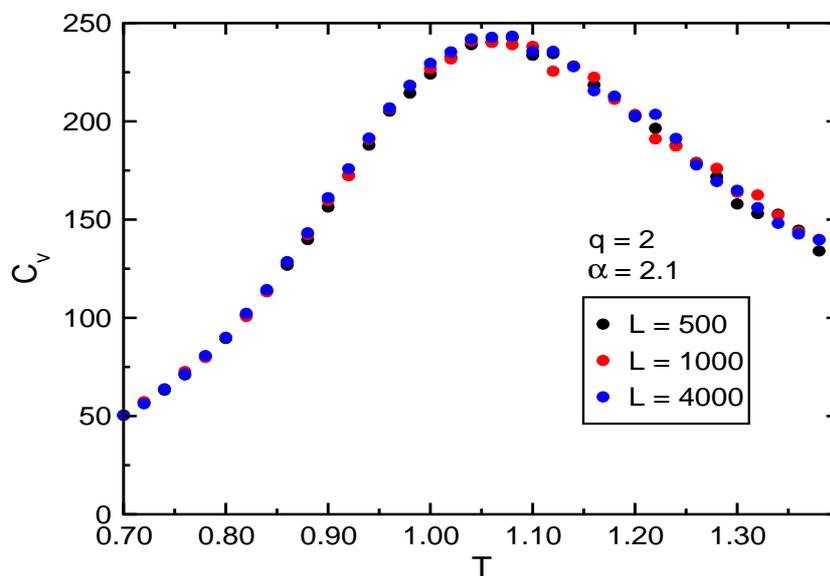


Figura 6.3: C_v vs. T , para $\alpha = 2.1$. En una transición de fase continua, el máximo del calor específico escala como $L^{\alpha/\nu}$. Cuando la transición de fase es discontinua, el máximo del calor específico escala como el tamaño del sistema. En la figura se aprecia que el máximo del calor específico no se rige por el escalamiento propio de las transiciones de fase.

6.1. MODELO DE POTTS DE DOS ESTADOS: $q = 2$

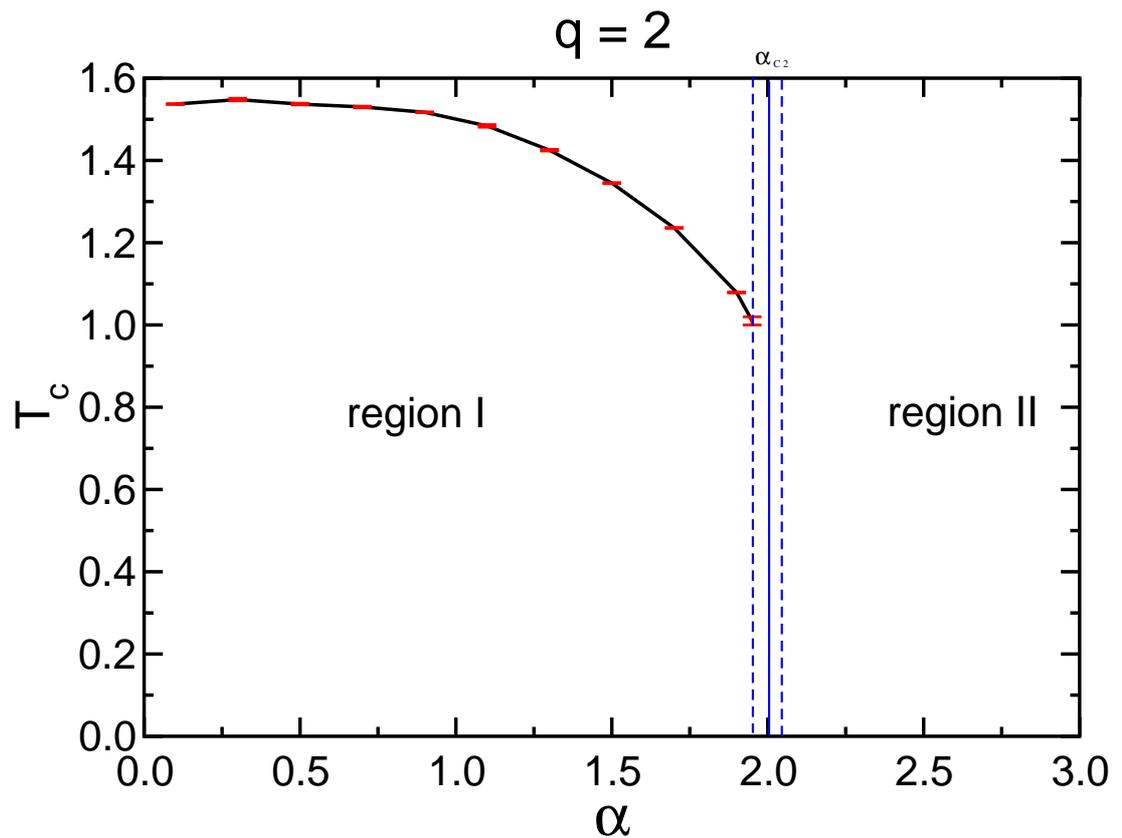


Figura 6.4: Temperatura crítica en función de α . Para este caso del modelo de Potts ($q = 2$), se distinguen dos regiones. En la región I ($\alpha < \alpha_c$, donde $1.95 < \alpha_c < 2.05$) se identificaron transiciones continuas. Las temperaturas críticas y sus errores correspondientes se ilustran en la primer región. Cuando $\alpha \geq 2.05$ (región II), no hay transiciones de fase. Como T_c decae rápidamente, se asume que en la región II no hay transiciones de fase.

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

distintas curvas del cumulante de Binder ocurren a $T = 0$. Aquí se observa que $U_{L_1} > U_{L_2} > U_{L_3}$ (donde $L_1 = 500$, $L_2 = 1000$ y $L_3 = 4000$), ver Fig. 6.2 donde se ilustra el caso $\alpha = 2,1$. Como se mencionó anteriormente, cuando existen transiciones de segundo orden, si $L_1 < L_2$ se tiene que: $U_{L_1} < U_{L_2}$ para $T < T_c$ y que $U_{L_1} > U_{L_2}$ para $T > T_c$. Entonces, las intersecciones entre los cumulantes ocurren cerca de T_c . Además, para bajas temperaturas se tiene que $U \sim 2/3$. Como lo anterior no se cumple, se estima que $T_c = 0$ para $\alpha \geq 2.05$. (ii) El máximo del calor específico no exhibe el escalamiento propio de las transiciones de fase de segundo orden ni de primer orden. En las transiciones de fase de segundo orden se tiene que el máximo del calor específico escala como $C_L^{Max} \sim L^{\alpha/\nu}$, donde α y ν son exponentes críticos ($\alpha > 0$). Mientras que en las transiciones discontinuas, el calor específico escala como $C_L^{Max} \sim L$. Como se aprecia en la Fig. 6.3, el máximo del calor específico no escala en función del tamaño.

Para $\alpha \leq 1.95$ el comportamiento de la temperatura crítica en función de α es monótonamente decreciente, mientras que para $\alpha \geq 2.05$ no se tiene transición de fase. Por todo lo anterior, se sabe que existe un valor crítico del parámetro α (α_{c2}) a partir del cual no hay transiciones de fase, dicho valor es $\alpha_{c2} = 2.00 \pm 0.05$. En la Fig. 6.4 se muestra el comportamiento de la temperatura crítica en función de α , en la región I (el intervalo $\alpha \leq 1.95$) la temperatura decrece monótonamente, mientras que para la región II ($\alpha \geq 2.05$) la temperatura crítica es cero. El punto en el cual se pierde la transición de fase (α_{c2}) está localizado entre las líneas azules (es decir, $\alpha_{c2} = 2.00 \pm 0.05$).

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

Cuando se analiza el modelo de Potts de tres estados se pueden distinguir tres regiones en función del valor del parámetro α : en la región I ($0 < \alpha < \alpha_{c1}$) se observa la presencia de transiciones de fases magnéticas discontinuas, en la región II se presentan transiciones de fase continuas ($\alpha_{c1} < \alpha < \alpha_{c2}$) y en la región III ($\alpha \geq \alpha_{c2}$) no existen transiciones de fase.

6.2.1. REGIÓN I: TRANSICIONES DE PRIMER ORDEN

Para extraer la temperatura crítica en la primera región se analiza el comportamiento del histograma de energía. Además se utiliza el muy útil método de extrapolación de Ferrenberg-Swendsen para reducir el tiempo de cómputo y para obtener la temperatura crítica y el calor latente de un tamaño dado con mayor exactitud.

Dentro de la región I ($0.1 \leq \alpha < \alpha_{c1}$) se observan dos máximos en el histograma de energía cerca de T_c . Además, al incrementar el tamaño del sistema L , estos se mantienen y se profundizan, evidenciando que la transición es de primer orden. La temperatura crítica, en las transiciones discontinuas, es la temperatura a la cual los dos máximos de la función de distribución de la energía tienen la misma altura.

En esta región se estudiaron sistemas de los siguientes tamaños: $L = 3600, 4200, 4800, 5400, 6000, 7200, 8100$ y 9000 . Para determinar la temperatura crítica primero se realiza una simulación de Monte Carlo aplicando el algoritmo de Wolff, utilizando cien muestras para cada α , con un intervalo de temperaturas grande, con la finalidad de tener noción del valor de la temperatura crítica. Una vez determinada una temperatura T' alrededor de la temperatura crítica (una temperatura a la cual el histograma despliega dos gaussianas en el histograma de energía) se procede realizar una segunda simulación de Monte Carlo con mil doscientas muestras a una sola temperatura (T'). De la segunda simulación se obtiene una buena estimación del histograma de energía y, para determinar la temperatura crítica a este histograma se le aplica el método de extrapolación de Ferrenberg-Swendsen.

De acuerdo al procedimiento descrito anteriormente, para un valor de α se obtuvieron los valores de la temperatura crítica correspondientes al tamaño del sistema dado. En las figuras 6.5 y 6.6, para cada valor de α se aprecia la variación de la distribución de la energía (donde la distribución de la energía ha sido calculada en la temperatura crítica) en función del tamaño del sistema. Los histogramas de energía mostrados en la figura se obtuvieron implementando el

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

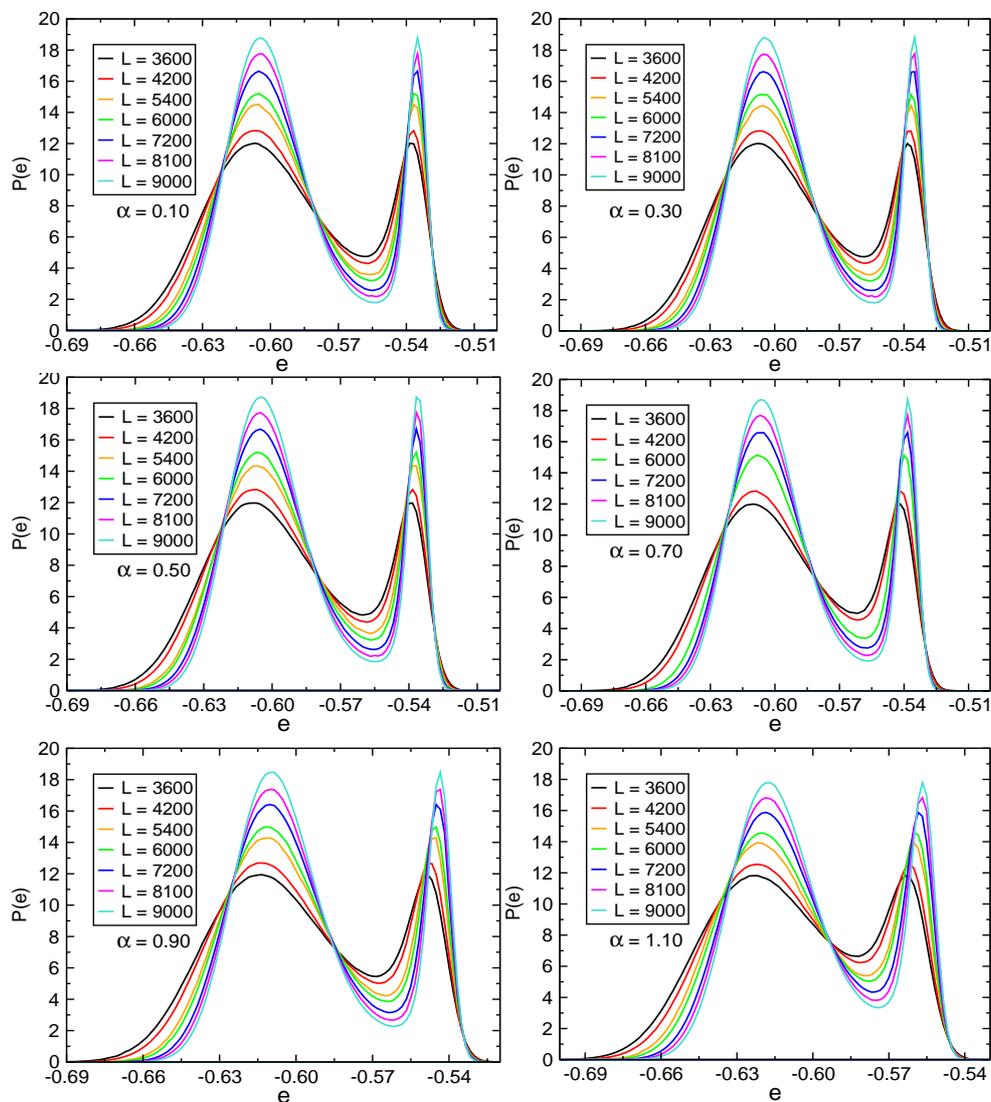


Figura 6.5: Histogramas de energías correspondientes a T_c . De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, se muestra el histograma de energía para un valor ascendente de α y distintos tamaños del sistema. Para un mismo α , al incrementar el tamaño del sistema se hacen más evidentes los dos máximos de $P(e)$. Evidenciando así una transición discontinua. Por otro lado, para un mismo tamaño, al incrementar α se hacen menos evidentes los máximos de $P(e)$. Esto indica la existencia de α_{c1} , a partir del cual no hay transiciones de fase discontinuas. Para obtener una buena estimación de la temperatura crítica se utilizó el método de extrapolación de Ferrenberg-Swendsen.

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

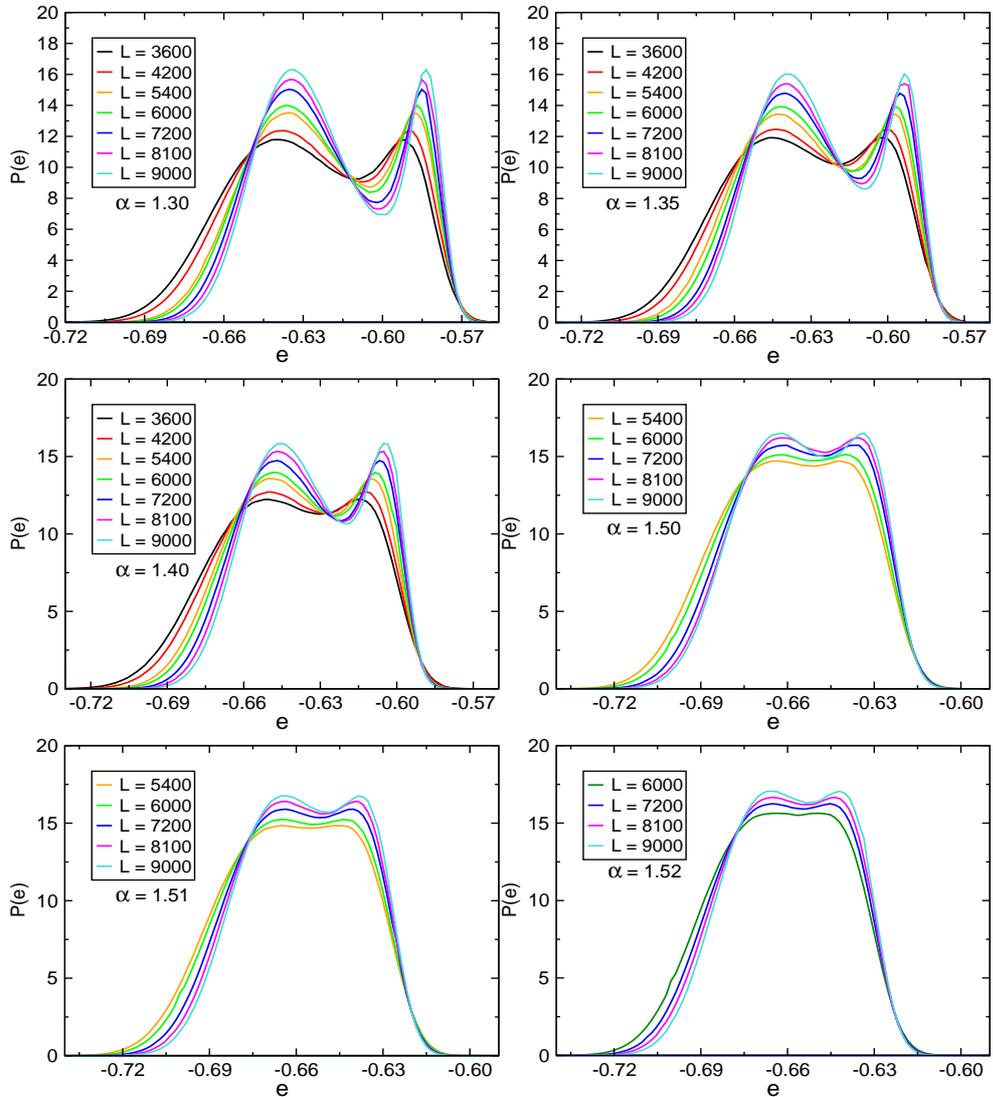


Figura 6.6: Histogramas de energías correspondientes a T_c . De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, se muestra el histograma de energía para un valor ascendente de α y distintos tamaños del sistema. Cada figura describe una transición de fase de primer orden para un valor dado del parámetro α . A medida que se incrementa el parámetro α la transición de fase discontinua se hace más débil. Por esta razón, en los valores más grandes de α sólo se utilizan los sistemas más grandes. Los histogramas energía mostrados se obtuvieron utilizando el método de extrapolación de Ferrenberg-Swendsen.

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

método de extrapolación de Ferrenberg-Swendsen.

Al analizar el histograma de energía se obtiene, para cada α , la temperatura crítica de un sistema finito. En las figuras 6.5 y 6.6 se muestra la temperatura crítica, de un α dado, respecto al tamaño del sistema. Para determinar la temperatura crítica del sistema infinito, se grafica la temperatura crítica de un sistema finito $T_c(L)$ de un α determinado respecto a $1/L$. Después, se ajusta a una recta $f(1/L) = T_c + a(1/L)$ y se evalúa la recta en el punto $1/L = 0$, como se aprecia en las figuras 6.7 y 6.8. El valor estimado de la temperatura crítica del sistema infinito para la región I, así como su respectivo error, se muestra en la Fig. 6.14. En la región I se observa un comportamiento decreciente de la temperatura crítica respecto a α .

Por otro lado al observar la Fig. 6.5 y la Fig. 6.6, se aprecia para cada tamaño del sistema la variación del histograma de energía (evaluado en la temperatura crítica) respecto al parámetro α . Se deduce que el calor latente tiende a cero conforme se aumenta el parámetro α . Esto implica la existencia de un valor de α en el cual se pierde la transición discontinua.

Se calculó el calor latente para cada tamaño dado, en base al histograma de energía calculado en la temperatura crítica. Los valores del calor latente para cada tamaño se ajustaron a la siguiente función:

$$\Delta E(\alpha) = a + \tanh[b(\alpha - c)], \quad (6.3)$$

donde los parámetros a, b y c se obtienen al ajustar los datos a la Ec. 6.3. Para ajustar los datos a la curva se utilizó XMGRACE.

En la Fig. 6.9 se muestra el calor latente para cada uno de los tamaños analizados así como la función resultante de ajustarlo a la Ec. 6.3. Cuando la transición de primer orden se desvanece, el calor latente es igual a cero pues dejan de existir dos máximos para dar paso a un sólo máximo en la función de distribución de energía. El valor de α en el cual la transición deja de ser de primer orden se llamará *primera α crítica* y la denotaremos (α_{c1}) . De acuerdo a la relación 6.3 y al ajuste realizado para cada tamaño del sistema, se obtienen los valores de $\alpha_{c1}(L)$. En la Fig. 6.10 se muestra los valores y los errores estimados para α crítica en

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

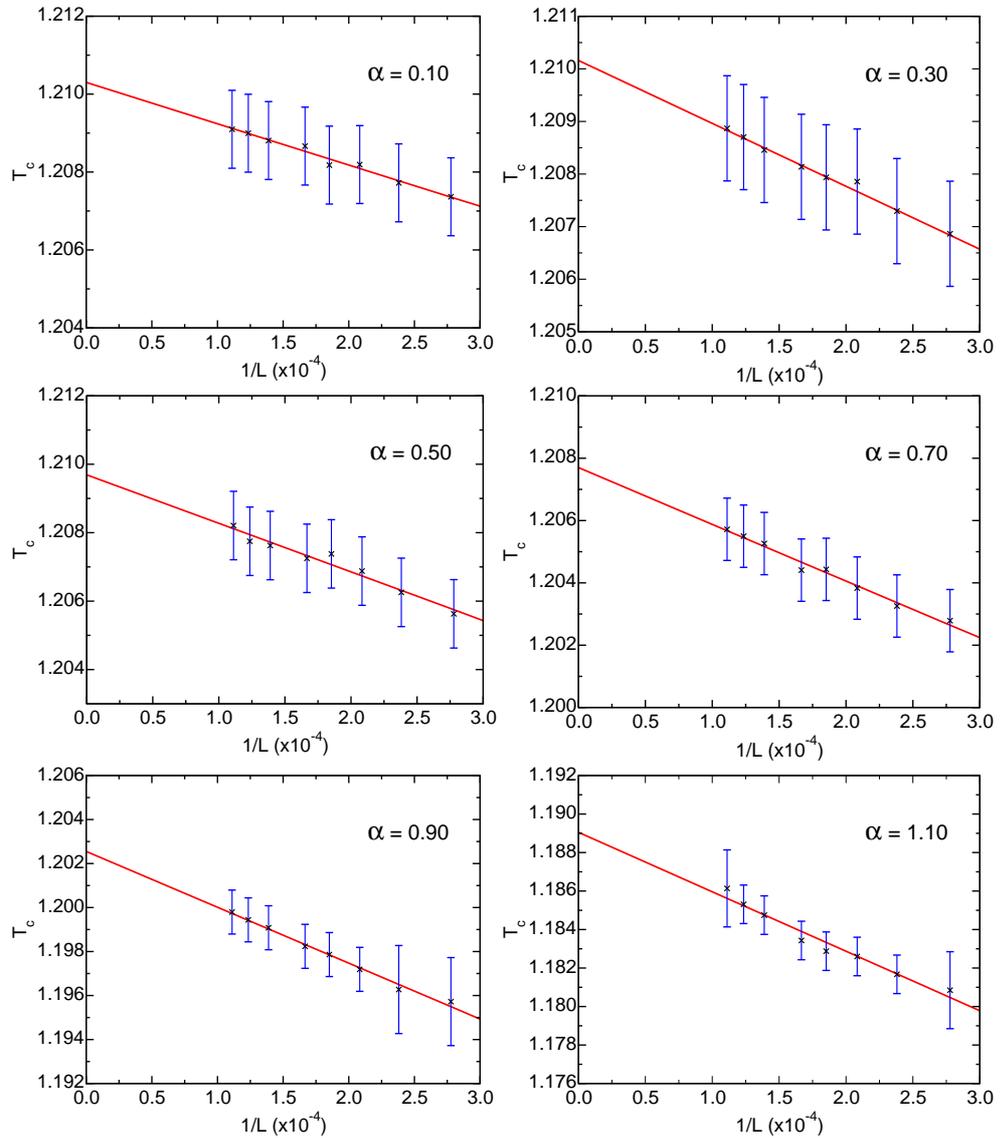


Figura 6.7: T_c vs. $1/L$. Para obtener la temperatura crítica en el límite termodinámico, se grafican los datos obtenidos previamente (para cada α) y se ajustan a una recta. La intersección de la recta con el eje de las abscisas proporciona el valor de la temperatura crítica.

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

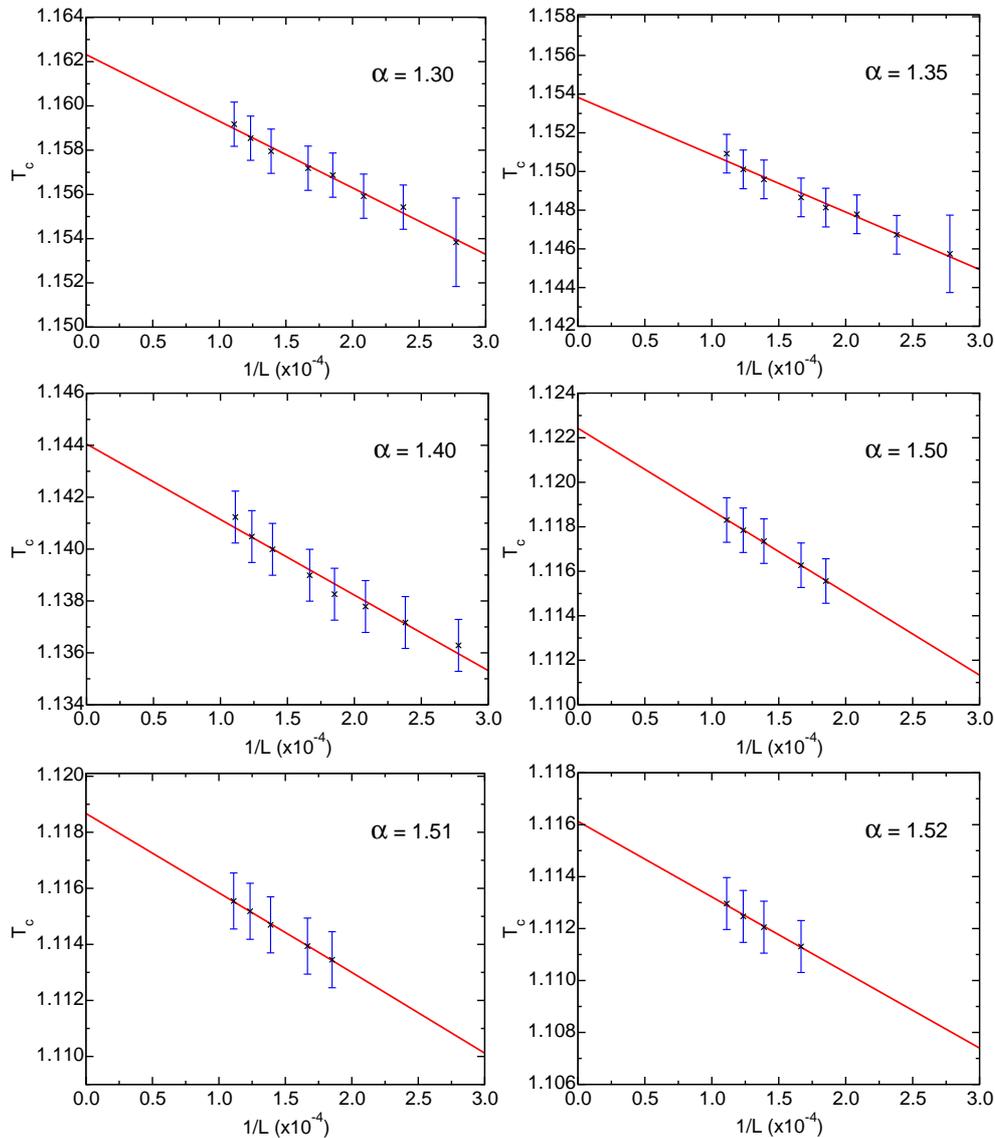


Figura 6.8: T_c vs. $1/L$. Para cada valor de α se muestra la temperatura crítica en función de $1/L$. Para obtener el valor de la temperatura crítica en el límite termodinámico los datos se ajustan a una recta. Y dicha temperatura crítica se estima evaluando la función en ($1/L = 0$).

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

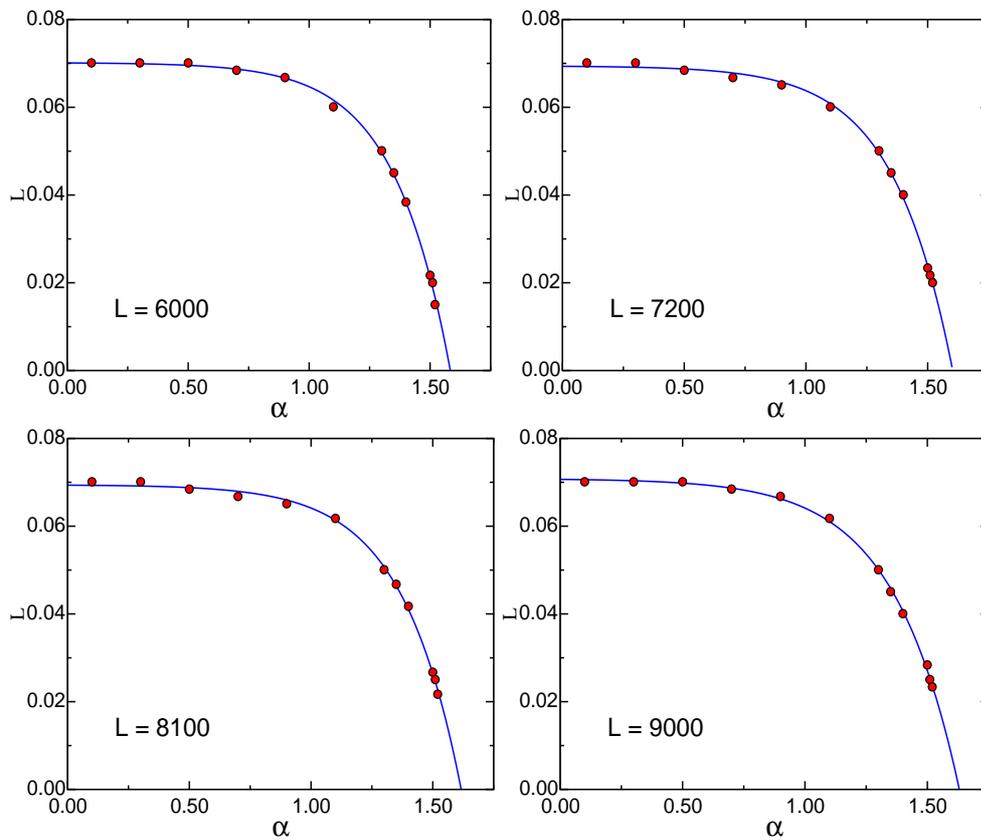


Figura 6.9: $\Delta E(L)$ vs. α . Cada figura muestra el calor latente en función de α , para un tamaño fijo. Los datos (en rojo) se aproximan a la curva $\Delta E(\alpha - \alpha_{c1})$ (azul) a la cual se aproxima. En base a este ajuste se puede determinar el valor crítico $\alpha_{c1}(L)$ para cada tamaño.

función de $1/L$, la extrapolación de la recta a la cual son ajustados los datos nos da el valor de la primera alfa crítica en el límite termodinámico (el valor de la recta en el punto $1/L = 0$). El valor estimado de α_{c1} es 1.7 ± 0.1 , y a partir de este punto hay una región donde la transición de fase es continua.

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

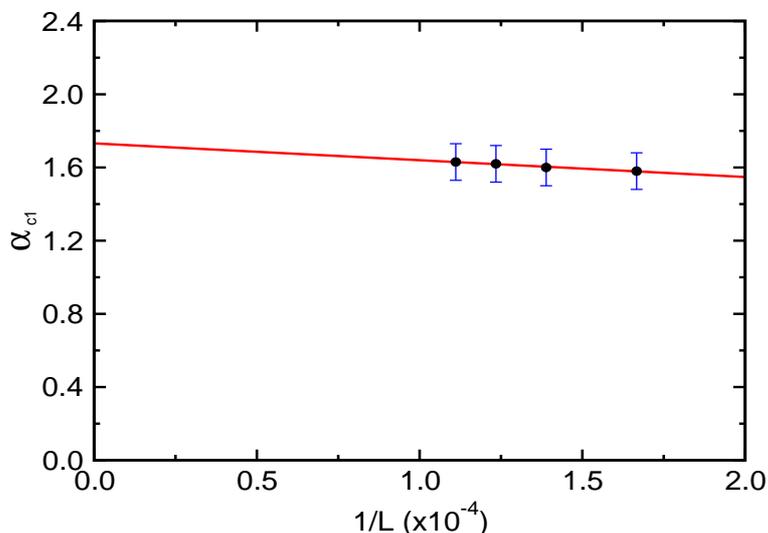


Figura 6.10: $\alpha_{c1}(1/L)$ vs. $1/L$. Para estimar el valor de α_{c1} en el límite termodinámico, primero se ajustan los datos (representados por puntos, el error está representado por la barras azules.) a una recta (línea roja). Después se evalúa la recta en $(1/L) = 0$. El valor estimado de α_{c1} es 1.7 ± 0.1 .

6.2.2. REGIÓN II: TRANSICIONES DE SEGUNDO ORDEN

Los sistemas estudiados son susceptibles al parámetro α y muestran transiciones de fase de primer orden hasta un valor crítico de α denominado primera alfa crítica α_{c1} . El valor de la primera α crítica se estima en $\alpha_{c1} = 1.7 \pm 0.1$, y a partir de este valor se encuentra una región donde la existencia de transiciones de fase magnéticas continuas es evidente.

En la segunda región, con cada valor de α se realizaron dos simulaciones de Monte Carlo para cuatro diferentes tamaños del sistema. Se utilizaron los tamaños $L = 300, 480, 540$ y 600 para $\alpha = 1.7$ y 1.9 , mientras que para $\alpha = 1.95$ se utilizaron sistemas más grandes ($L = 300, 600, 1200$ y 2400). La primera simulación se realizó con doscientas muestras y sirvió para ubicar la región crítica, mientras que en la segunda simulación se enfocó en la región crítica utilizando un intervalo de temperatura $\Delta T = 0.01$, mil doscientas muestras, doscientas cincuenta mil iteraciones e igual cantidad de termalización.

El comportamiento del cumulante alrededor de la temperatura crítica se mues-

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

tra en las Fig. 6.11 para $\alpha = 1.7$ y 1.9 y 1.95 . Las intersecciones entre las curvas correspondientes a los cuatro tamaños utilizados se aprecian en la misma figura.

6.2.3. REGIÓN III: AUSENCIA DE TRANSICIONES DE FASE

A diferencia de las regiones I y II, en la región III no hay transiciones de fase cuando $\alpha \geq 2.05$. Para establecer la ausencia de transiciones de fase, fue necesario utilizar tamaños de red más grandes, siendo $L_1 = 600$, $L_2 = 1200$ y $L_3 = 4800$. Se puede determinar la ausencia de las transiciones de fase básicamente por dos aspectos. El cumulante de Binder no exhibe el comportamiento propio de las transiciones de segundo orden y el máximo del calor específico no se rige por el escalamiento correspondiente a las transiciones de fase de primer orden ni a las de segundo orden. En la Fig. 6.12 se ilustra el caso cuando $\alpha = 2.1$, donde podemos apreciar que la intersección de las curvas de cumulante ocurre en $T_c = 0$. En la Fig. 6.13 se muestra el calor específico para $\alpha = 2.1$, donde claramente se puede observar que el máximo del calor específico no escala como una transición de fase de primer orden ($\sim L^{\alpha/\nu}$) ni como una transición de fase de segundo orden ($\sim L$).

Para el modelo de Potts con $q = 3$, se identificó tanto el orden de la transición como la temperatura crítica. También se clasificó el comportamiento magnético de las redes en tres regiones. En la región I ($0 < \alpha < \alpha_{c1}$) las transiciones de fase son discontinuas. El punto que identifica el cambio de transiciones de fase discontinuas a continuas, es el primer valor crítico de α (α_{c1}) y está localizado en $\alpha_{c1} = 1.7 \pm 0.1$. En la región II ($\alpha < \alpha_{c2}$) las transiciones de fase son continuas. El valor de α que representa el punto donde la transición de fase deja de existir, es el segundo valor crítico de α (α_{c2}), dicho valor es $1.9 < \alpha_{c2} < 2.0$. Para la región III ($\alpha \geq \alpha_{c2}$) se determinó la ausencia de transiciones de fase.

La temperatura crítica en función de α se ilustra en la Fig. 6.14, junto al error correspondiente. La temperatura crítica calculada para las tres regiones se muestra en la Fig. 6.14. El valor de la temperatura crítica decrece a medida que aumenta α . Los valores críticos de alfa ($\alpha_{c1} = 1.7 \pm 0.1$, y $1.9 < \alpha_{c2} < 2.0$)

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

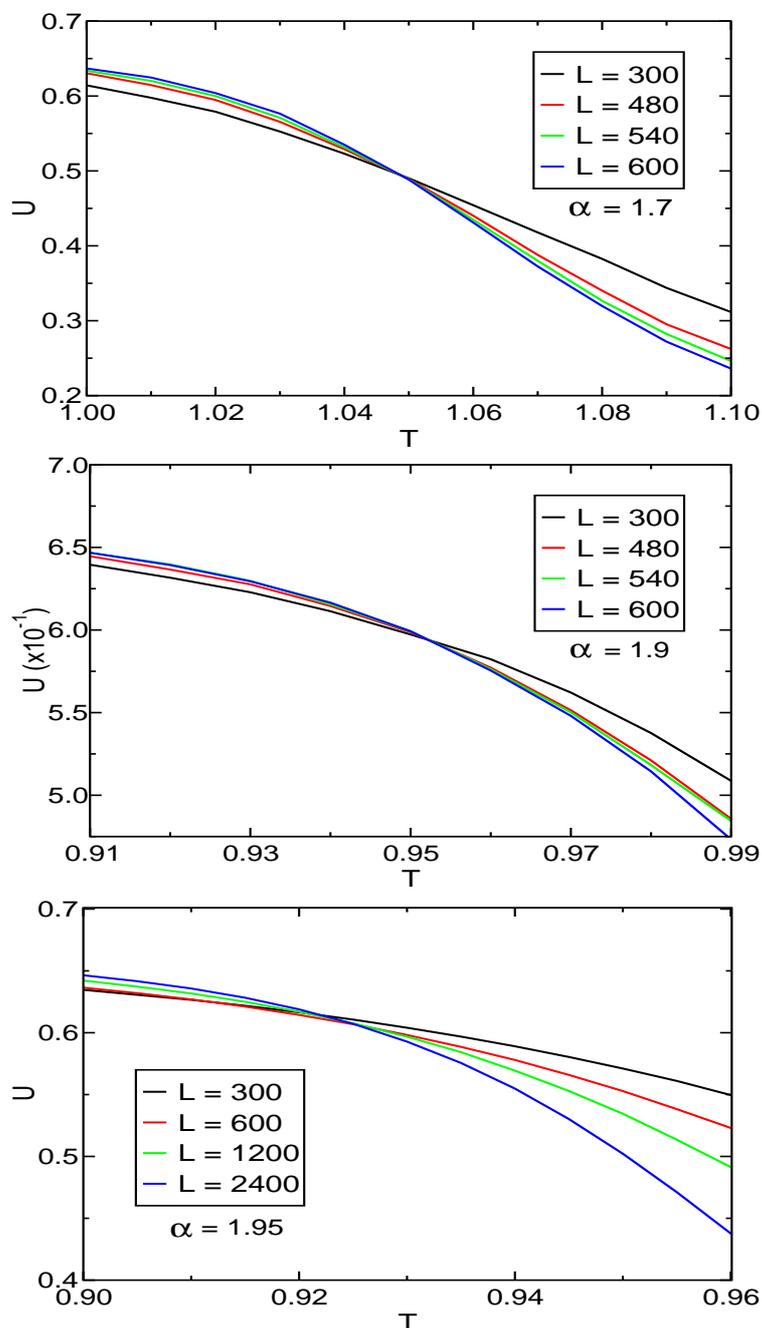


Figura 6.11: Cumulante de Binder de cuarto orden en función de la temperatura. En la figura se muestran cumulantes de Binder para la región II ($\alpha_{c1} \leq \alpha < \alpha_{c2}$). Los cumulantes convergen casi en un mismo punto. La estimación de la temperatura crítica puede calcularse a partir de la intersección de las cuatro curvas del cumulante de Binder obtenidas. Para $\alpha = 1.7$ y 1.9 , los tamaños son $L = 300, 480, 540$ y 600 , mientras que para $\alpha = 1.95$ fue necesario utilizar sistemas más grandes ($L = 300, 600, 1200$ y 2400).

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

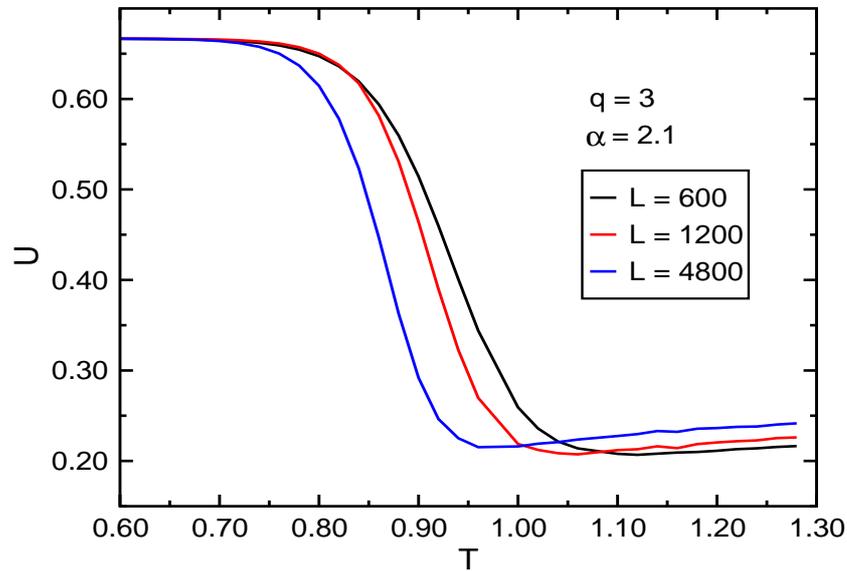


Figura 6.12: U vs. T , para el modelo de Potts de $q = 3$ estados. En la gráfica se ilustra el ejemplo $\alpha = 2.1$. En la figura podemos observar que aunque dos cumulantes se pueden intersectar a temperatura finita, el único punto donde se intersectan las tres curvas de los cumulantes es en $T = 0$.

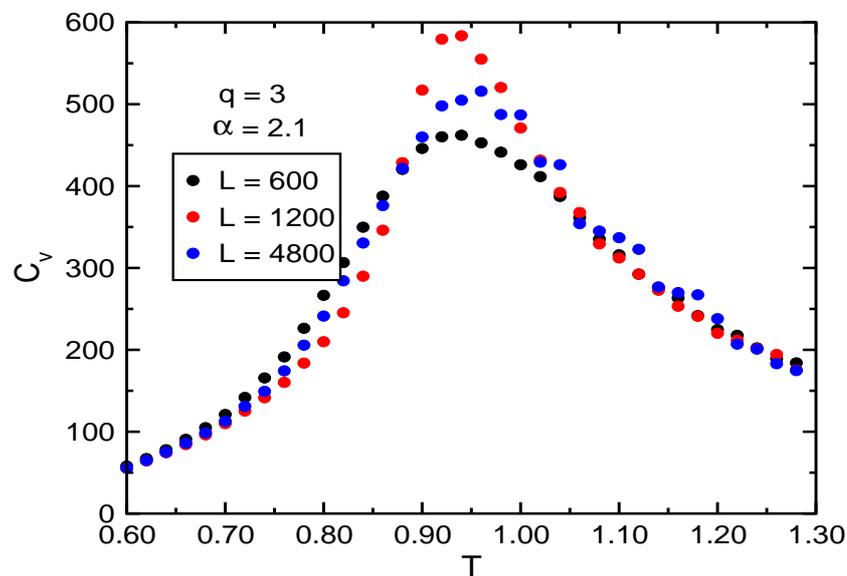


Figura 6.13: C_v vs. T . En la figura, el comportamiento de C_L^{Max} no corresponde a una transición de fase continua (donde $C_L^{Max} \sim L^{\alpha/\nu}$). El máximo del calor específico tampoco escala de acuerdo a un transición de fase discontinua ($C_L^{Max} \sim L$). El escalamiento de C_L^{Max} no corresponde al escalamiento característico de las transiciones de fase.

6.2. MODELO DE POTTS DE TRES ESTADOS: $q = 3$

también se ilustran en la figura, dichos valores están acotados entre las líneas segmentadas. Además, el valor $\alpha_{c1} = 1.7$ está representado por la línea azul continua.

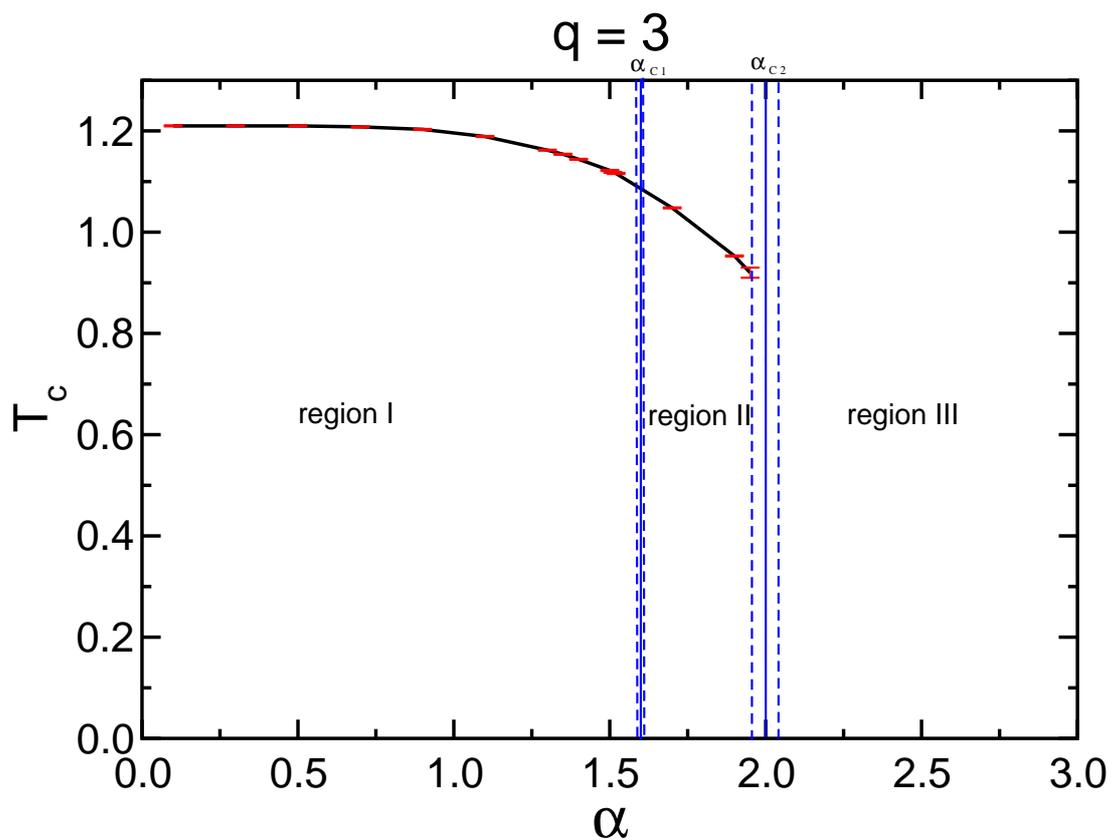


Figura 6.14: Para el modelo de Potts de 3-estados se identifican tres regiones: en la región I ($\alpha < \alpha_{c1}$) la transición de fase es discontinua. El valor del punto que divide la región de transiciones discontinuas de las continuas es $\alpha_{c1} = 1.7 \pm 0.1$. En la región II ($\alpha_{c1} < \alpha < \alpha_{c2}$) la transición de fase es continua. La región III ($\alpha \geq \alpha_{c2}$, donde $1.95 < \alpha_{c2} \leq 2.05$) se distingue por la ausencia de transiciones de fase.

CAPÍTULO 7

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

7.1. SUMARIO Y CONCLUSIONES

Se ha estudiado el comportamiento crítico del modelo de Potts en redes con interacciones de largo alcance LRDP en 1D. Para esto se empleó el método de simulación Monte Carlo (en particular, el algoritmo de Wolff).

Las redes LRDP pueden representar sistemas donde el comportamiento físico se rige por la conectividad de la red. Las redes **LRDP** 1D, parten de una red unidimensional de N sitios (o nodos) como base, en donde cada nodo i esta conectado a los nodos $(i - 1)$ e $(i + 1)$. Además de los enlaces entre primeros vecinos, cada nodo i se conecta a un nodo j obedeciendo la probabilidad $p_{ij} \propto r_{ij}^{-\alpha}$ de formar un enlace de largo alcance entre los sitios i y j que están separados una distancia euclidiana r_{ij} . En estas redes, los valores pequeños del parámetro de estructura α favorecen los enlaces entre los sitios separados por la mayor distancia euclidiana posible.

7.1.1. MODELO DE POTTS DE 2 ESTADOS

Para el modelo de Potts de 2-estados, el comportamiento magnético del sistema se identificaron dos regiones en función del parámetro de estructura α . Una región con transiciones continuas y una región con ausencia de transiciones.

7.1. SUMARIO Y CONCLUSIONES

Se determinó la existencia de transiciones de fase continuas cuando $0 < \alpha < \alpha_{c2}$, donde α_{c2} es el valor crítico de α en el cual se desvanece la transición de fase. Por otro lado, se encontró que para la región $\alpha \geq \alpha_{c2}$ no hay transiciones de fase. El valor crítico de α (α_{c2}) está dado por $\alpha_{c2} = 2.00 \pm 0.05$. La transición de fase se hace más débil conforme se aumenta el valor del parámetro estructural α , por lo cual es difícil obtener el valor crítico de α con mayor precisión.

La identificación de dos regímenes concuerda con trabajos teóricos previos realizados con el modelo de Ising 1D para interacciones **LRDI**, donde se determinó que las transiciones de fase existentes eran de segundo orden [14, 27, 28].

Recordemos también que el parámetro de estructura está relacionado con la dimensión efectiva d_e de la red. Por lo tanto, el comportamiento crítico del sistema también es afectado por la dimensión efectiva. La dimensión efectiva es mucho mayor que uno, para valores pequeños de $\alpha < 1$. A medida que se aumenta α , la dimensión efectiva decrece hasta llegar a $d_e = 1.0$ cuando $\alpha > 2.0$. La ausencia de transiciones de fase (cuando $\alpha \geq \alpha_{c2}$, $\alpha_{c2} = 2.00 \pm 0.05$) se debe a que la dimensión efectiva en esta región es uno.

7.1.2. MODELO DE POTTS DE 3 ESTADOS

Cuando $q = 3$, observamos tanto la presencia de transiciones de fase (para $\alpha \leq 1.9$) como la ausencia de ellas (cuando $\alpha \geq \alpha_{c2}$). En las interacciones de largo alcance tipo **LRDP**, se observan tres comportamientos magnéticos diferentes en función del parámetro estructural α : la existencia de transiciones de fase de primer orden, la existencia de transiciones de fase continuas y la ausencia de transiciones de fase.

Se determinó la existencia de transiciones de fase de primer orden para $0 < \alpha < \alpha_{c1}$ (el valor estimado de α_{c1} es 1.7 ± 0.1). Las transiciones se hacen más débiles a medida que se incrementa el parámetro estructural α , hasta convertirse en transiciones continuas para un valor crítico de alfa α_{c1} . A pesar de que la transición es muy débil alrededor de α_{c1} , este primer valor crítico de α se estimó gracias al análisis de la dependencia del calor latente. Se estimó que la transición

7.1. SUMARIO Y CONCLUSIONES

es continua para $\alpha_{c1} < \alpha \leq 1.9$. Por otro lado, se determinó que cuando $\alpha \geq 2.0$ no ocurre transición de fase. Debido a estas dos últimas observaciones, se sabe de la existencia de un segundo valor crítico de α (α_{c2}) acotado entre $1.9 < \alpha_{c2} \leq 2.0$. Este valor crítico no fue determinado de manera más precisa, debido a que la transición de fase es muy débil alrededor de α_{c2} .

Los resultados obtenidos muestran una clara analogía con los obtenidos con el modelo de Potts 1D de 3-estados para las interacciones **LRDI**, ya que se identifican también tres regímenes. Sin embargo, estos regímenes no siempre ocurren para los mismos valores de α , pues el valor crítico α_{c1} está en $1,6 < \alpha_{c1} < 1,7$ para las redes **LRDI** [17]. Los resultados obtenidos en este trabajo utilizando redes **LRDP** son consistentes con los obtenidos por Zvonko Glumac y Katarina Uzelac para redes **LRDI** [17]. Entonces, el comportamiento magnético de las redes **LRDI** es semejante al de las redes **LRDP**. Con la ventaja de que las redes **LRDP** nos permiten estudiar sistemas más grandes. Por ejemplo, para esta tesis se estudiaron sistemas más grandes (L varía desde 3600 hasta 9000) que en [17] donde los tamaños estudiados están entre 400 y 5000.

7.1.3. CONCLUSIÓN GENERAL

La dimensión efectiva en las redes **LRDP** está relacionada con el parámetro de estructura α . La dimensión efectiva de la red **LRDP** es infinita para $\alpha < 1$. Para los valores intermedios de α ($1 < \alpha < 2$), la dimensión efectiva decrece hasta aproximarse a uno. Cuando $\alpha > 2$, la dimensión efectiva es constante y es uno. El hecho de que la transición se pierde para $\alpha > 2$, se debe a que la dimensión efectiva es uno.

Como se observa, con las redes **LRDP** se pueden reproducir los resultados obtenidos para redes **LRDI**. Es decir, el efecto de las interacciones de largo alcance es básicamente el mismo independientemente de si las interacciones de largo alcance decaen con la distancia o de si la probabilidad de formar enlaces de largo alcance (de magnitud constante) depende de la distancia. Además, en las redes **LRDP** se cuenta con la ventaja de que se puede trabajar con sistemas

más grandes.

7.2. PERSPECTIVAS

En investigaciones anteriores [15, 27, 36], se ha demostrado que los exponentes críticos calculados para interacciones **LRDI** 1D, con el modelo de Ising, exhiben dos comportamientos diferentes. Para el intervalo ($\alpha \leq 3d/2$) se determinó que los exponentes críticos toman los valores clásicos calculados por *teoría de campo medio* (MFT) [27]. Para $3d/2 < \alpha < 2$, se estableció que los exponentes críticos tienen valores no clásicos [15, 36]. Sería interesante calcular los exponentes críticos para las redes **LRDP** y compararlos con los calculados para interacciones **LRDI**.

Otro punto de interés es calcular con mayor precisión los valores críticos de α . Para este fin sería conveniente hacer simulaciones utilizando sistemas más grandes. Teniendo en cuenta que las simulaciones deben realizarse en más de una muestra, es recomendable implementar el algoritmo IC [48] a este problema.

El trabajo realizado en esta tesis trata a las redes **LRDP** 1D con un enlace de largo alcance añadido por sitio. Otro aspecto a estudiar es el comportamiento magnético de la red **LRDP** 1D con k enlaces de largo alcance añadidos. Al aumentar el número de enlaces se espera que el resultado sea aún más próximo al calculado para las interacciones **LRDI** (donde todos los sitios están conectados entre sí).

Las redes **LRDP** nos permiten explorar los casos 2D y 3D, dado que en estas redes: (i) la magnitud de la interacción J es constante y (ii) podemos escoger la cantidad de enlaces de largo alcance k . Análisis similares en redes **LRDI** serían más complicados.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Nigel Goldenfeld, Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group, Addison Wesley Publishing Company, New York (1992).
- [2] Eugene Stanley, Introduction to Phase Transition Phenomena, Oxford University Press, Oxford y New York (1971).
- [3] C. F. Moukarzel y M. Argollo, Phys. Rev. E **65**, 56709 (2002).
- [4] B. Chakrabarti, A. Maggs y R. Stinchcombe, J. Phys. A: Math. Gen. **18**, L373 (1985).
- [5] D. Chowdhury y B. Chakrabarti, J. Phys. A: Math. Gen. **18**, L377 (1985).
- [6] S. Xiong, Y. Chen y S. Evangelou, Phys. Rev. Lett. **77**, 4414 (1996).
- [7] T. Yang y L. Chua, Int. J. Bifurcation Chaos **9**, 2105 (1999).
- [8] L. Lago-Fernandez, Ramón Huerta, Fernando Corbacho y Juan A. Sigüenza, Phys. Rev. Lett. **84**, 2758 (2000).
- [9] C. F. Moukarzel, Phys. Rev. E **60**, R6263 (1999).
- [10] R. Pastor-Satorras y A. Vespignani, Phys. Rev. Lett. **86**, 3200 (2001).
- [11] S. Jespersen y A. Blumen, Phys. Rev. E **62**, 6270 (2000).
- [12] P. Sen y B. Chakrabarti, J. Phys. A **34**, 7749 (2001).
- [13] D.P. Landau y K. Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, Cambridge (2002).

BIBLIOGRAFÍA

- [14] D. J. Thouless, Phys. Rev. E **187**, 732 (1969).
- [15] Z. Glumac y K. Uzelac, J. Phys A **22**, 4439 (1989).
- [16] Z. Glumac y K. Uzelac, J. Phys A **24**, 501 (1991).
- [17] Z. Glumac y K. Uzelac, Phys. Rev. E **58**, 4372 (1998).
- [18] John D. Walecka, Fundamentals of Statistical Mechanics: Manuscript and Notes of Felix Bloch, Imperial College Press y World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., London (2000).
- [19] G. E. Uhlenbeck y S. Godsmit, Nature **117**, 264 (1925).
- [20] S. Tanaka y H. A. Scheraga, PNAS **74**, 1320 (1977).
- [21] T. A. J. Duke y D. Bray, Proc. Natl. Acad. Sci. **96**, 10104 (1999).
- [22] D. J. Amit, H. Gutfreund y H. Sompolinsky, Phys. Rev. A **32**, 1007 (1985); H. Rieger, M. Schreckenberg y J. Zittartz, Z. Phys. B **72**, 523 (1988); H. Horner, D. Bormann, M. Frick, H. Kinzelbach y A. Schmidt, Z. Phys. B **76**, 383 (1989).
- [23] T. Erez, M. Hohnisch y S. Solomon, Statistical Economics on Multi-Variable Layered Networks, publicado en Economics: Complex Windows, Springer Press, Heidelberg (2005).
- [24] W. Lenz, Phys. Zeitschr. **21**, 613 (1920).
- [25] E. Ising, Z. Physik **31**, 253 (1925).
- [26] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [27] F. Y. Wu, Rev. of Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [28] K. Uzelac, Z. Glumac y A. Aničić, Phys. Rev. E **63**, 37101 (2001).
- [29] R. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952).
- [30] C. Domb, J. Phys A **7**, 1335 (1974).

BIBLIOGRAFÍA

- [31] F. Graner y A. Glazier, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2013 (1992).
- [32] Z. Liu, J. Luo y C. Shao, *Phys. Rev. E* **64**, 046134 (2001).
- [33] G. Barkema y J. de Boer, *Phys. Rev. A* **44**, 8000 (1991).
- [34] D. J. Amit, In *Modeling Brain Functions*, Crambridge University Press, Cambridge, Inglaterra (1989).
- [35] P. J. Ford, *Contemp. Phys.* **23**, 141 (1982).
- [36] M. E. Fisher, S. K. Ma y B.G. Nickel, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 917 (1972).
- [37] K. Uzelac y Z. Glumac, *Fisika B* **6**, 133 (1997).
- [38] E. Luijten y H. W. J. Blöte, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1557 (1996).
- [39] N. Metropolis y S. Ulam, *J. Amer. Statist. Assoc.* **44**, 335 (1949).
- [40] J. J. Berman y G. W. Moore, *Analytical Cellular Pathology* **4**, 359 (1992).
- [41] J. H. Porter y J. L. Dooley Jr, *Ecology* **74**, 2436 (1993).
- [42] Habib Zaidi y George Sgouros, *Therapeutic Applications of Monte Carlo Calculations in Nuclear Medicine (Series in Medical Physics and Biomedical Engineering)*, Taylor and Francis Press, London (2003).
- [43] A. Kollias y W.A. Lester, *American Chemical Society* **222**, 147 (2001).
- [44] K. A. Dill, K. M. Fiebig y H. S. Chan, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **90**, 1942 (1993); A. Kolinski, A. y J. Skolnick, *Proteins: Struc. Func. Genet.* **18**, 338 (1994); W. L. Treptow, M. A. Barbosa, L. G. Garcia y A. F. Pereira, *Proteins* **49**, 167 (2002).
- [45] k. Yokoyama y K. Hess, *Phys. Rev. B* **33**, 5595 (1986).
- [46] A. Sariban y K. Binder, *J. Chem. Phys.* **86**, 5859 (1987).
- [47] R.M. Ziff, E. Gulari y Y. Barshad, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2553 (1986).

BIBLIOGRAFÍA

- [48] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke y T. Schweizer, *Phys.Rev. E* **54**, 1332 (1996).
- [49] E. Luijten, Monte Carlo Simulation of Spin Models with Long-Range Interactions, publicado en *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XII*, Springer Press, Heidelberg (2000).
- [50] R. H. Swendsen y J.S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
- [51] P. W. Kastelyn y C. M. Fortuin, *J. Phys. Soc. Jpn. Sppl.* **26s**, 11 (1969).
- [52] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
- [53] M. S. S. Challa, D. P. Landau y K. Binder, *Phys. Rev. B* **34**, 3 (1986).
- [54] K. Binder, *Z. Phys. B.* **43**, 119 (1981).
- [55] A. M. Ferrenberg y R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 23 (1988).
- [56] A. M. Ferrenberg y R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989).
- [57] R. Albert y A. L. Barabási, *Reviews of Modern Physics* **74**, 47 (2002).
- [58] A. Broder, R. Kumar, F. Maghoul, P. Raghavan, S. Rajagopalan, R. Stata, A. Tomkins y J. Wiener, *Comput. Netw.* **33**, 309 (2000).
- [59] M. Faloutsos, P. Faloutsos y C. Faloutsos, *Comput. Commun. Rev.* **29**, 251 (1999).
- [60] F. Liljeros, C. R. Edling, L. A. N. Amaral, H. E. Stanley y Y. Aberg, *Nature* **411**, 907 (2001).
- [61] H. Jeon B. Tombor, R. Albert, Z. N. Oltvai y A. L. Barabási, *Nature* **407**, 651 (2000).
- [62] J. Abello, P. M. Pardalos y M. G. C. Resende, *Disc. Math. and Theor. Comp. Sci.* **50**, 119 (1999).
- [63] P. Erdős y A. Rényi, *Publ. Math.* **6**, 290 (1959).

BIBLIOGRAFÍA

- [64] A. L. Barabási y R. Albert, *Science* **286**, 509 (1999).
- [65] D. J. Watts, *Small World: The Dynamics of Networks between Order and Randomness*, Princenton Univ. Press, Princenton (1999).
- [66] S. H. Strogatz, *Nature* **401**, 268 (2001).
- [67] Martin Rosvall, *Hide and seek in a complex world*, Tesis de licenciatura, Umeå University, Umeå (2005).
- [68] D. J. Watts y S. H. Strogatz, *Nature* **393**, 440-442 (1998).
- [69] A. L. Barabási y A. Reka, *Science* **286**, 509 (1999).
- [70] S. Milgram, *Psychology Today* **2**, 60 (1967).
- [71] J. Travers y S. Milgram, *Sociometry* **32**, 425 (1969).
- [72] M. E. J. Newman, S. H. Strogatz y D. J. Watts, *Phys. Rev. E* **64**, 026118 (2001).
- [73] S. N. Dorogotsev y J.F.F. Mendes, *Adv. Phys.* **51**, 1079 (2002).
- [74] C. F. Moukarzel, *Physica A: Stat. Mech. & its Appl.* **356**, 157 (2005).