

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

**ESTUDIO DEL EFECTO DE LA TOPOLOGÍA DE MUNDO PEQUEÑO EN
EL MODELO DE ISING DE 1D Y 2D MEDIANTE SIMULACIÓN
COMPUTACIONAL**

**PROYECTO PREVIO A LA OBTENCIÓN
DEL TÍTULO DE FÍSICO**

ÁNGEL SANTIAGO NARANJO RUBIO
asangrub@hotmail.com

DIRECTOR: Leonardo Basile Carrasco Phd.
leonardo.basile@epn.edu.ec

Quito, Septiembre de 2010

DECLARACIÓN

Yo, Ángel Santiago Naranjo Rubio, declaro bajo juramento que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido presentado previamente para ningún grado o calificación profesional; y que, he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

La Escuela Politécnica Nacional puede hacer uso de los derechos correspondientes a este trabajo, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normatividad institucional vigente.

Ángel Santiago Naranjo Rubio

CERTIFICACIÓN

Certifico que el presente trabajo fue desarrollado por Ángel Santiago Naranjo Rubio, bajo mi supervisión.

Leonardo Basile Carrasco Phd.
DIRECTOR DE PROYECTO

AGRADECIMIENTO

A mis padres por haber sido los maestros de mi vida, porque me enseñaron el valor de la honestidad, el respeto, la confianza y la felicidad. Ellos son los seres que más admiro.

A mi hermana por entenderme y por sobre todo, soportarme.

A Lorena por su amor incondicional, respeto, amistad, apoyo y tantas cosas que he vivido contigo.

A las familias Balvín Rubio y Mejía Rubio por acogerme en sus hogares durante mis primeros años de estudio, en especial a mis primos que me hicieron sentir como un hermano más.

A Dios porque gracias a Él se dispone del objeto de estudio de la Física, la Naturaleza.

A Ángel Rubio, mi tío, por su valiosa colaboración en la impresión de este trabajo.

A la Escuela Politécnica Nacional por ser la institución que me ha formado.

DEDICATORIA

A Dios

A mis padres y hermana

A ti, mi Lore

INDICE DE CONTENIDO

LISTA DE FIGURAS.....	v
LISTA DE TABLAS.....	viii
LISTA DE ANEXOS.....	ix
RESUMEN.....	x
CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO 2: ALGUNOS RESULTADOS DE LA FÍSICA ESTADÍSTICA, MODELO DE ISING Y TRANSICIONES DE FASE	5
2.1 ENSAMBLE MICROCANÓNICO.....	6
2.1.1 ENTROPÍA	6
2.1.2 TEMPERATURA Y CONDICIÓN DE EQUILIBRIO.....	7
2.2 ENSAMBLE CANÓNICO	9
2.2.1 FUNCIÓN DE PARTICIÓN	9
2.2.2 VALOR MEDIO DE LA ENERGÍA	10
2.2.3 CAPACIDAD CALÓRICA	11
2.2.4 CONEXIÓN ENTRE LA TERMODINÁMICA Y LA MECÁNICA ESTADÍSTICA	12
2.3 SISTEMAS MAGNÉTICOS	13
2.3.1 MOMENTOS MAGNÉTICOS QUE NO INTERACTÚAN	13
2.3.2 MAGNITUDES FÍSICAS DE INTERÉS.....	14
2.4 INTRODUCCIÓN AL MODELO DE ISING.....	17
2.4.1 LA CADENA DE ISING.....	19
2.4.2 FUNCIÓN DE CORRELACIÓN	22
2.4.3 FUNCIÓN DE CORRELACIÓN PARA LA CADENA DE ISING	23
2.4.4 LONGITUD DE CORRELACIÓN	25
2.4.5 MATRIZ DE TRANSFERENCIA Y SOLUCIÓN DEL MODELO DE ISING UNIDIMENSIONAL.....	26
2.5 TRANSICIONES DE FASE Y EL MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL	28
2.5.1 MODELO DE ISING EN DOS DIMENSIONES, RESULTADOS DE LA SOLUCIÓN DE ONSAGER	29
2.5.2 TEORÍA DE CAMPO MEDIO DE WEISS	36
2.5.4 TEORÍA DE LANDAU	40

2.5.5 TEORÍAS DE ESCALA	42
CAPÍTULO 3: REDES Y COMPLEJIDAD	45
3.1 CONCEPTOS Y DEFINICIONES FUNDAMENTALES DE LA TEORÍA DE GRAFOS	46
3.1.1 DEFINICIONES FUNDAMENTALES	46
3.1.2 LONGITUD DE CAMINO PROMEDIO Y COEFICIENTE DE AGRUPAMIENTO	48
3.1.3 EJEMPLOS DE GRAFOS	49
3.1.4 MATRIZ DE ADYACENCIA DE UN GRAFO	50
3.1.5 DISTRIBUCIÓN DE GRADO	51
3.2 REDES COMPLEJAS DEL MUNDO REAL.....	53
3.2.1 REDES DE MUNDO PEQUEÑO	54
3.2.2 REDES SIN ESCALA	56
3.2.3 ALGUNAS REDES DEL MUNDO REAL	59
3.3 MODELOS DE REDES DE MUNDO PEQUEÑO	63
3.3.1 MODELO WATTS-STROGATZ	64
3.3.1.1 LONGITUD DE CAMINO PROMEDIO Y COEFICIENTE DE AGRUPAMIENTO.....	65
3.3.2.2 DISTRIBUCIÓN DE GRADO	67
3.3.2 MODELO NEWMAN-WATTS	69
3.3.3 MODELO KUPERMAN-ABRAMSON	70
3.3 MODELO DE ISING EN REDES COMPLEJAS	71
CAPÍTULO 4: SIMULACIÓN DE MONTE CARLO Y SU APLICACIÓN AL MODELO DE ISING	73
4.1 MÉTODO DE MONTE CARLO	74
4.1.1 INTEGRACIÓN SIMPLE POR MONTE CARLO	74
4.1.2 INTEGRACIÓN POR MONTE CARLO MEJORADA	76
4.1.3 SIMULACIÓN DE MONTE CARLO DE DOS SISTEMAS FÍSICOS ILUSTRATIVOS	78
4.2 LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN.....	82
4.3 PROBLEMA DE CAMINO ALEATORIO EN UNA DIMENSIÓN.....	84
4.4 CADENAS DE MARKOV (RELACIÓN ENTRE LOS CAMINOS ALEATORIOS Y LA DIFUSIÓN)	85

4.5 MUESTREO SIMPLE Y MUESTREO POR IMPORTANCIA, UN ENFOQUE AL MÉTODO DE MONTE CARLO DE FÍSICA ESTADÍSTICA	90
4.6 ALGORITMO DE METROPÓLIS	94
4.6.1 ALGORITMO DE METRÓPOLIS PARA EL MODELO DE ISING	95
4.6.2 ALGORITMO DE METRÓPOLIS PARA EL MODELO DE ISING CONSIDERANDO VARIOS ESPINES POR ITERACIÓN	96
4.6 ERROR ESTADÍSTICO EN LA SIMULACIÓN DE MONTECARLO DEL MODELO ISING	96
4.8 EFECTOS DEL TAMAÑO FINITO	98
4.8.1 TEORÍA DE ESCALAMIENTO FINITO	99
4.8.2 CUMULANTE DE BINDER	100
4.8.2 ESCALAMIENTO FINITO POR ENCIMA DE LA DIMENSIÓN CRÍTICA SUPERIOR	101
CAPÍTULO 5: MÉTODO Y RESULTADOS	104
5.1 MÉTODO	104
5.1.1 CREACIÓN DE LAS REDES DE MUNDO PEQUEÑO	104
5.1.1.1 REDES UNIDIMENSIONALES	104
5.1.1.2 REDES BIDIMENSIONALES	107
5.1.2 CÁLCULO DE LAS PROPIEDADES DE LAS REDES	112
5.1.2.1 DISTRIBUCIÓN DE GRADO	112
5.1.2.2 LONGITUD DE CAMINO PROMEDIO.....	113
5.1.2.3 COEFICIENTE DE AGRUPAMIENTO	113
5.1.3 SIMULACIÓN DEL MODELO DE ISING EN LAS REDES CREADAS ...	115
5.1.3.1 MODELO Y MÉTODO DE SIMULACIÓN	115
5.1.3.2 REDES CONSIDERADAS PARA LA SIMULACIÓN DEL MODELO DE ISING	116
5.1.3.3 CÁLCULO DE LOS EXPONENTES CRÍTICOS Y ESTIMACIÓN DE LA TEMPERATURA CRÍTICA	117
5.2 RESULTADOS	119
5.2.1 RESULTADOS DE LAS PROPIEDADES DE LAS REDES GENERADAS	119
5.2.1.1 REDES UNIDIMENSIONALES	119
5.2.1.2 REDES BIDIMENSIONALES	122
5.2.2 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DEL MODELO DE ISING	126

5.2.1.1 MODELOS UNIDIMENSIONALES.....	126
5.2.1.2 MODELOS BIDIMENSIONALES	132
CAPÍTULO 6: CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	138
6.1 CONCLUSIONES	138
6.2 RECOMENDACIONES	140
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	142
ANEXOS	144

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Cadena de espines.....	19
Figura 2.2 Función de correlación del modelo de Ising unidimensional.	25
Figura 2.3 Retículo de espines.....	30
Figura 2.4 Energía en función de la temperatura. Solución exacta del modelo de Ising bidimensional.....	32
Figura 2.5 Calor específico en función de la temperatura. Solución exacta del modelo de Ising bidimensional.....	33
Figura 2.6 Magnetización por espín. Gráfica de la solución de Onsager.....	34
Figura 2.7 Solución gráfica de $m = \tanh (J\langle k \rangle m/kT)$	37
Figura 3.1 Representación gráfica de un grafo.....	47
Figura 3.2 Ejemplos de grafos.....	49
Figura 3.3. Distribución de grado de la simulación en Matlab de un grafo aleatorio.....	53
Figura 3.4. Distribución de ley potencial.	57
Figura 3.5. Distribución de ley potencial obtenida con el modelo Barabási-Albert.	59
Figura 3.6 Reprntación gráfica de las redes sociales.....	62
Figura 3.7 Representación gráfica de la construcción de una red de mundo pequeño según el modelo Watts-Strogatz.....	64
Figura 3.8 Gráfica semilogarítmica del coeficiente de agrupamiento vs la longitud de camino promedio (Watts-Strogatz, 1998).....	66
Figura 3.9 Distribución de grado de una red creada con el modelo Watts-Strogatz unidimensional.	68
Figura 3.10 Ejemplo de generación de una red de mundo pequeño mediante el modelo Newman-Watts.	69

Figura 3.11 Ejemplo de generación de una red de mundo pequeño mediante el modelo Newman-Watts en una red bidimensional.....70

Figura 4.1 Número de partículas n_{iz} en el lado izquierdo de la caja en función del tiempo con $N = 1000$. Resultado de la simulación y el resultado analítico.....80

Figura 4.2 Número de núcleos radiactivos N en función del tiempo t82

Figura 5.1 Simulación del Modelo de Ising Bidimensional con interacciones de primeros vecinos mediante el programa de Matlab y solución de Onsager.116

Propiedades de las redes generadas sobre redes unidimensionales:

Figura 5.2 Gráfica de las distribuciones de grado de las redes generadas de tamaño $L = 1601$119

Figura 5.3 Longitud de camino promedio en función del tamaño de la red.....121

Figura 5.4 Coeficiente de agrupación y longitud de camino en función del parámetro p121

Figura 5.5 a) Modelo KA ($L = 101, K = 2, p = 1$). Coeficiente de agrupamiento en función del parámetro m . El coeficiente de agrupamiento crece con m . b) Longitud de camino promedio en función del parámetro m . La longitud de camino promedio también crece con m122

Propiedades de las redes generadas sobre redes bidimensionales

Figura 5.6 Gráfica de las distribuciones de grado de las redes generadas de tamaño $L = 20$122

Figura 5.7 Longitud de camino promedio en función del tamaño de la red.....124

Figura 5.8 Coeficiente de agrupación y longitud de camino en función del parámetro p125

Figura 5.9 a) Modelo KA ($L = 20, K = 4, p = 1$). Coeficiente de agrupamiento en función del parámetro m . El coeficiente de agrupamiento crece con m . b) Longitud de camino promedio en función del parámetro m . La longitud de camino promedio también crece con m125

Resultados de las simulaciones del modelo de Ising sobre redes generadas a partir de redes unidimensionales:

Modelo WS:

Figura 5.10 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura.....126

Figura 5.11 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder.....127

Modelo NW:

Figura 5.12 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura.....127

Figura 5.13 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder.....128

Modelo KA:

Figura 5.14 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura.....129

Figura 5.15 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder.....129

Resultados de las simulaciones del modelo de Ising sobre redes generadas a partir de redes bidimensionales:

Modelo WS:

Figura 5.16 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura.....132

Figura 5.17 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder.....133

Modelo NW:

Figura 5.18 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura.....133

Figura 5.19 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder.....133

Modelo KA:

Figura 5.20 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura.....135

Figura 5.21 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder.....135

LISTA DE TABLAS

Tabla 2.1 Relación entre la temperatura crítica predicha por la teoría de campo medio y la mejor estimación que se conoce de T_c para las distintas redes regulares.....40

Tabla 5.1 Redes consideradas para la simulación del modelo de Ising.....117

Tabla 5.2 Coeficiente de agrupamiento C y longitud de camino promedio l de las redes generadas a partir de redes unidimensionales que fueron utilizadas en las simulaciones120

Tabla 5.3 Coeficiente de agrupamiento C y longitud de camino promedio l de las redes generadas a partir de redes bidimensionales que fueron utilizadas en las simulaciones...123

Resultados de las simulaciones del modelo de Ising sobre redes generadas a partir de redes unidimensionales:

Tabla 5.4 Comparación de la estimación de la temperatura crítica mediante las graficas de las magnitudes físicas y la estimación mediante el método de los cumulantes de Binder.130

Tabla 5.5 Estimación de la temperatura crítica mediante la teoría de campo medio.....131

Resultados de las simulaciones del modelo de Ising sobre redes generadas a partir de redes bidimensionales:

Tabla 5.6 Estimación de la temperatura crítica mediante los cumulantes de Binder y comparación con la estimación de la temperatura crítica a partir del comportamiento de las magnitudes Físicas.....136

Tabla 5.7 Estimación de la temperatura crítica mediante la teoría de campo medio.....137

LISTA DE ANEXOS

ANEXO A	Código de las simulaciones del modelo de Ising.....	144
ANEXO B	Cálculo de las Magnitudes físicas.....	148

RESUMEN

En el presente trabajo se estudió mediante simulación computacional los efectos de la topología de mundo pequeño en el modelo de Ising. Las redes de mundo pequeño estudiadas fueron generadas utilizando tres modelos: modelo de Watts y Strogatz, modelo de Kuperman y Abramsom y modelo de Newman y Watts. Estos modelos interpolan a una red regular de dimensión d con un grafo aleatorio, en este trabajo se consideraron redes regulares unidimensionales y bidimensionales, obteniendo un total de seis modelos a analizar.

Para las simulaciones del modelo de Ising se empleó el algoritmo de Metrópolis - Monte Carlo, con una modificación, en lugar de explorar un espín por iteración se exploraron todos los espines al mismo tiempo. Esta metodología, utilizada en el modelo de Ising usual (Ref [17]), mejora la eficiencia computacional.

Finalmente, se calcularon las magnitudes físicas de interés, encontrando gráficamente las temperaturas de transición de los seis modelos estudiados. Mediante el método de los cumulantes de Binder y el análisis de escalamiento se estimaron nuevamente las temperaturas críticas y se calcularon los exponentes críticos, tales análisis muestran que las transiciones del modelo de Ising sobre las redes empleadas son de tipo teoría de campo medio.

CAPÍTULO 1.

INTRODUCCIÓN.

¿Quién no ha usado frases como “¡Que pequeño que es el mundo!” o “¡Este mundo es un pañuelo!”?. Frases utilizadas cuando dos personas que recién se conocen, luego de una conversación, descubren que tienen un amigo en común. Aunque en muchos casos, ambas personas no tengan un amigo que los relacione, tal vez entre los amigos de una de ellas se encuentre un individuo que tenga un amigo, el cual conoce a alguien que a la final si tiene una amistad con la otra persona. Hace 43 años un psicólogo social llamado Stanley Milgram se hizo la pregunta: ¿cuántas personas forman parte de esta cadena? y para responderla se ingenió un experimento [1].

La hipótesis de Stanley fue que se podía llegar a establecer contacto a través de una red de amigos, realizando sólo unos pocos pasos, a tal hipótesis se denominó “problema de mundo pequeño” [1]. El experimento consistió en repartir una serie de cartas a algunos cientos de personas seleccionadas en dos pueblos de Estados Unidos y las cartas debían llegar a un único destinatario en otra región del país. La única restricción que tenían las personas fue que debían entregar la carta a una persona conocida y que pensarán que de alguna forma estaba más cerca del destinatario final.

Lo interesante fue que tanto los pueblos donde se repartieron las cartas y el pueblo del destinatario final estaban muy alejados tanto geográfica como socialmente. ¿Cuántos pasos debieron darse para que las cartas llegaran a su destino? ¿Tal vez cientos o miles?, el resultado promedio fue de tan sólo seis, sugiriendo que dos personas escogidas al azar se pueden conectar a través de la red en pocos pasos.

Sin duda este resultado es muy interesante en el ámbito de las redes sociales, sin embargo, ¿es este un resultado general?, ¿existen otro tipo de redes en la naturaleza de similar comportamiento?, la respuesta es sí. Estructuras como las redes neuronales del gusano *Caenorhabditis elegans*, la red eléctrica del oeste de los Estados Unidos, la red de colaboración de actores en el mismo país, etc., se presentan como **Redes de Mundo Pequeño** [1,3].

Muchas de las redes del mundo real presentan otro tipo de cualidades. En dichas redes ocurren procesos complejos de autoorganización y se las conoce como **Redes Complejas** [1]. Las redes complejas, que en general tienen cualidades de mundo pequeño, también suelen tener una distribución de grado que sigue una ley potencial. Es decir, la probabilidad de que un nodo en la red tenga k conexiones tiene una probabilidad $p(k) \sim k^{-\gamma}$ [1,7,8].

La topología de la red influye directamente en los procesos que en ella se desarrollan. Por ejemplo, la transmisión de enfermedades en una población se propaga más rápido en sistemas que poseen estructura de mundo pequeño [2]. Siendo natural pensar que los fenómenos que se dan lugar en un sistema están notablemente influenciados por las interacciones de sus componentes, las cuales pueden ser representadas por una red.

Un modelo físico sobre una red, una red de espines, es el modelo de Ising, fue **propuesto por Wilhelm Lenz en 1960** para explicar el fenómeno de magnetización espontánea presente en materiales ferromagnéticos [9,12]. Estos materiales presentan magnetización en temperaturas menores a una temperatura crítica, inclusive con campo externo nulo, mostrando una transición de un estado ordenado a otro desordenado, donde el parámetro de orden es la magnetización [10-13]. El modelo de Ising bidimensional presenta transición de fase a una temperatura distinta de cero, permitiendo comprender varios aspectos de los fenómenos de transición. En el modelo unidimensional la situación es distinta ya que no existe transición de fase a una temperatura mayor que cero [11-14].

Las interacción entre espines afectan el comportamiento colectivo del sistema, por ejemplo, en un sistema bidimensional de espines que no interactúan entre sí, no existe transición de un estado ferromagnético a uno paramagnético [9]; sin embargo, usando el modelo de Ising se encuentra que el sistema presenta transición de fase. Este hecho manifiesta la importancia de la presencia de las interacciones y se espera que la topología de la red de interacciones influya en la transición de fase.

Si las redes de mundo pequeño facilitan la propagación de información, de energía, de ideas, de rumores, etc. [1] de alguna manera debe influenciar en procesos de transición de fase como en modelo de Ising. Se espera que la transición de orden a desorden se vea favorecida por la topología de red de mundo pequeño, comparada con la transición de fase del modelo de Ising bidimensional en una red regular.

Por otro lado, conociendo que el modelo de Ising en una dimensión no presenta transición de fase ¿qué sucedería si aumentamos conexiones en la red regular unidimensional? Tal vez se estaría induciendo a una transición de fase, dependiendo, está claro, de cuantas conexiones sean agregadas. De todas formas ello depende del criterio con el que sean añadidas. Por ejemplo, se podrían añadir conexiones de tal forma que se llegue a reproducir una red de mundo pequeño.

El modelo de Ising es uno de los modelos más importantes de la mecánica estadística y ha sido utilizado para modelar fenómenos naturales presentes en campos como las ciencias sociales, la biología, la computación y muchos otros [8, 25]. Para estos estudios las redes de mundo pequeño son más apropiadas que

las redes regulares y para ello se necesitan usar modelos que reproduzcan las cualidades de mundo pequeño presentes en las redes reales [8,22,25].

Con el propósito de generar redes de mundo pequeño algunos modelos han sido propuestos. Watts y Strogatz (WS) en 1998 propusieron un método para generar redes que tengan longitudes de camino promedio pequeñas. Dicho modelo interpola a una red regular con una red aleatoria. Dada una red de dimensión finita (como una red unidimensional) donde cada nodo posee K vecinos (conexiones), cada nodo es reconectado a otro con una probabilidad p con el objeto de generar conexiones de larga distancia [3].

En el modelo WS existe la probabilidad de que la red se divida en subredes puesto que a medida que se crean nuevas conexiones se eliminan otras. Para evitar esto, el modelo de Newman y Watts (NW) propone conservar las conexiones de la red regular y añadir las nuevas [4,5]. Y otro modelo propuesto por Marcelo Kuperman y Guillermo Aberamson (KA) generaliza los modelos anteriores imponiendo que cada nodo en la red elija a un nuevo nodo para ser conectado de tal manera que la elección no sea equiprobable, sino que sigue una distribución dependiente de la distancia $p \sim l^{-m}$ [5]. Este modelo evidentemente converge al modelo NW cuando $m = 0$. Los modelos WS, KA y NW producen redes de mundo pequeño que a la vez conservan una característica muy importante de las redes reales: los nodos tienden a formar agrupaciones. Es decir, si dos nodos están conectados a un tercero muy probablemente estarán conectados entre sí.

Algunos estudios teóricos y simulaciones computacionales han sido efectuados con el propósito de describir el modelo de Ising sobre redes de mundo pequeño. Warrat y Weigt estudiaron teóricamente el modelo de Ising sobre una red WS generada a partir de una red unidimensional, ellos encontraron que la red WS presenta transición de fase tipo campo medio, evidenciando que las conexiones inducen una transición de fase que en la red unidimensional no existe [8,20]. Trabajos en simulaciones computacionales confirman los resultados de Warrat y Weigt [21,22] y otras simulaciones han sido hechas utilizando el modelo WS sobre redes bidimensionales, en ellas se ha encontrado que se produce un cambio en el carácter de la transición, donde los nuevos exponentes críticos coinciden con la teoría de campo medio [22,23]. También se han realizado simulaciones sobre redes con conexiones dependientes de la distancia en una dimensión (modelo KA), encontrando transiciones de tipo teoría de campo medio [24].

En el presente trabajo realizaremos simulaciones del modelo de Ising en redes de mundo pequeño basadas en los modelos WS, NW y KA sobre redes bidimensionales y unidimensionales. De manera general se han incluido los tres modelos que en el caso bidimensional no han sido muy explorados, permitiendo

obtener resultados sobre el modelo de Ising en una red bidimensional con conexiones dependientes de la distancia (modelo KA).

En las simulaciones empleamos un método para optimizar el cálculo computacional, este método consiste en explorar todos los espines al mismo tiempo aprovechando las cualidades matriciales del lenguaje Matlab. Este método ha sido probado en el modelo de Ising usual (Ref. [17]), nosotros lo hemos propuesto para las simulaciones sobre redes de mundo pequeño. Finalmente, compararemos con los resultados de trabajos previos para verificar la validez del método.

CAPÍTULO 2.

ALGUNOS RESULTADOS DE LA MECÁNICA ESTADÍSTICA, MODELO DE ISING Y TRANSICIONES DE FASE.

En la naturaleza se encuentran diversos sistemas conformados por muchas partículas. Ejemplo de estas partículas pueden ser los átomos y moléculas que constituyen la materia. En principio, una descripción completa del sistema necesita describir físicamente a cada partícula que lo conforma. Sin embargo, muchos sistemas obedecen a las mismas leyes generales, leyes que son abordadas por la termodinámica. Mediante este enfoque no es necesario describir el nivel microscópico de los sistemas, sino definir cantidades físicas apropiadas que caracterizan sus propiedades macroscópicas (cantidades de estado). Tales cantidades se relacionan por las leyes de la termodinámica y por ecuaciones (ecuaciones de estado) encontradas empíricamente para un sistema en específico [10].

A diferencia de la termodinámica, la mecánica estadística da una conexión entre lo microscópico y lo macroscópico, permitiendo explicar las ecuaciones de estado más allá de lo empírico. Las cantidades de estado son el resultado de tomar valores medios de cantidades microscópicas y es tarea de la **mecánica estadística** definir métodos que permitan calcular estos valores. Mediante estos valores es posible calcular la ecuación de estado para un determinado sistema [10].

El cálculo de los valores medios se hace posible utilizando la teoría del ensamble, donde las cantidades macroscópicas son los valores medios de las cantidades microscópicas. La teoría del ensamble supone un conjunto de sistemas preparados idénticamente, cada sistema en el ensamble se encuentra en un microestado posible y en un único macroestado determinado. Los valores medios sobre el ensamble caracterizan las propiedades macroscópicas del sistema [9,10]. Distintos ensambles son obtenidos dependiendo del sistema en estudio. Un sistema puede ser cerrado, abierto o aislado y para cada uno de los casos se obtendrán ensambles distintos.

En un sistema existen varios microestados compatibles con el macroestado en el que se encuentra. Si el sistema en equilibrio está cerrado no existe razón alguna para decir que un cierto microestado tiene mayor probabilidad de ser ocupado, entonces, se asume que **todos los microestados del sistema son igualmente probables**, este es el postulado básico de la mecánica estadística [9-11]. Sobre este postulado se construye la mecánica estadística y en base a él se determinan las densidades de probabilidad encontradas en cada ensamble.

2.1 ENSAMBLE MICROCANÓNICO.

Al ensamble constituido por la colección de sistemas cerrados con valores de $E, N,$ y V fijos, se lo conoce como ensamble microcanónico [9-11]. Todos los microestados que cumplen las condiciones de este macroestado son equiprobables (de acuerdo al postulado básico de la mecánica estadística). Puesto que la variable E es continua, es conveniente considerar un rango de incertidumbre ΔE . Entonces, la probabilidad de que el sistema se encuentre en un determinado microestado en el rango E a $E + \Delta E$ es:

$$p = \frac{1}{\Omega} \quad (2.1)$$

Donde, Ω es el número de microestados accesibles.

Tanto la entropía como temperatura pueden ser encontradas considerando el número de microestados accesibles.

2.1.1 ENTROPÍA

En Mecánica estadística la entropía se define como [9-11]:

$$S \equiv k \ln \Omega \quad (2.2)$$

Donde k es la constante de Boltzman y Ω el número de microestados. La entropía es una magnitud extensiva, puesto que si se tiene dos sistemas distintos la entropía total es la suma de cada una de las entropías. De hecho, sean A y B dos sistemas, el macroestado de cada sistema está descrito por E_A, N_A, V_A y E_B, N_B, V_B respectivamente y cada sistema tiene un número de microestados: $\Omega(E_A, N_A, V_A)$ para el sistema A y $\Omega(E_B, N_B, V_B)$ para el sistema B . A y B en su totalidad forman un solo sistema T con un número microestados Ω_T dado por [9-11]:

$$\Omega_T = \Omega(E_A, N_A, V_A) \Omega(E_B, N_B, V_B) \quad (2.3)$$

Si se sustituye (2.3) en (2.2) se tiene:

$$S_T = S_A + S_B \quad (2.4)$$

2.1.2 TEMPERATURA Y CONDICIÓN DE EQUILIBRIO.

Supóngase ahora que los dos sistemas interactúan de tal forma que exista una pared que permita la interacción térmica, pero que ella es rígida e impermeable. Los dos subsistemas están en contacto térmico de tal forma que las energías E_A y E_B pueden cambiar pero que la energía total $E_T = E_A + E_B$ se mantiene constante; N_A, V_A, N_B y V_B permanecen también constantes. Si la energía E_A está determinada, consecuentemente la energía E_B también lo está, entonces Ω_T sólo depende de E_A , esto es $\Omega_T(E_A)$ [10]. Usando el postulado fundamental se llega a la conclusión que la probabilidad $P(E_A)$ de que el sistema A tenga una energía E_A es simplemente proporcional al número de estados $\Omega_T(E_A)$ accesibles del sistema total T :

$$P(E_A) = C\Omega_T(E_A) \quad (2.5)$$

Donde $C^{-1} = \sum_E \Omega_T(E)$. La suma es sobre todos los valores que puede tomar la energía de A .

Porque $E_B = E_T - E_A$ entonces la relación (2.3) puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\Omega_T(E_A) = \Omega_A(E_A)\Omega_B(E_T - E_A) \quad (2.6)$$

De acuerdo a la probabilidad en (2.5):

$$P(E_A) = C\Omega_A(E_A)\Omega_B(E_T - E_A) \quad (2.7)$$

La probabilidad $P(E_A)$ exhibe un máximo muy pronunciado para algún valor de energía $E_A = \overline{E_A}$ [9,11]. Y maximizar la función P es equivalente a maximizar $\ln P$, entonces el objetivo es encontrar $\overline{E_A}$ que cumpla:

$$\frac{\partial \ln P}{\partial E_A} = \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial E_A} = 0 \quad (2.8)$$

Considerando que (2.7) puede ser escrito como $P(E_A) = C\Omega_A(E_A)\Omega_B(E_B)$, se tiene;

$$\frac{\partial \ln \Omega_A(E_A)}{\partial E_A} - \frac{\partial \ln \Omega_B(E_B)}{\partial E_B} = 0 \quad (2.9)$$

En base a la relación anterior se puede hacer la siguiente definición:

$$\beta(E) \equiv \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E} \quad (2.10)$$

Existe una energía \overline{E}_A y consecuentemente una energía \overline{E}_B donde la relación (2.9) se cumple, entonces:

$$\beta(\overline{E}_A) = \beta(\overline{E}_B) \quad (2.11)$$

¿Qué significado tiene esta función? Usando la definición (2.2) y la (2.10)

$$\beta = \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E} = \frac{1}{k} \frac{\partial S}{\partial E} \quad (2.12)$$

Y se obtiene:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad (2.13)$$

Donde se ha introducido la definición:

$$T \equiv \frac{1}{k\beta} \quad (2.14)$$

Siendo T un parámetro llamado temperatura y en el caso de que (2.11) se cumpla:

$$T_A = T_B \quad (2.15)$$

2.2 ENSAMBLE CANÓNICO.

2.2.1 FUNCIÓN DE PARTICIÓN.

Considérese el sistema A cuya temperatura T se mantiene fija al igual que su volumen y número de partículas. A diferencia del ensamble microcanónico donde el sistema estaba aislado, ahora puede intercambiar energía con otro muy grande, el sistema B , conocido como reservorio de calor [9-11]. El sistema grande no se ve afectado de manera significativa por el sistema A . Por ejemplo, si en una habitación se coloca una taza de café caliente la temperatura del café variará hasta alcanzar la temperatura del aire de la habitación; sin embargo, el ambiente en el cuarto no será calentado de manera apreciable.

Los sistemas A y B forman otro que está aislado, con E, N y V fijas. Por tanto, los estados accesibles al macroestado del sistema compuesto son equiprobables. Se sabe que la energía total E es la suma de las energías de cada sistema, siendo E_B la energía del reservorio y E_s la energía del sistema pequeño A , entonces se tiene que $E = E_B + E_s$. Por la diferencia de tamaños entre los dos sistemas se tiene la siguiente relación $E_s \ll E_B$.

Si el sistema A se encuentra en un estado definido s , el número de estados accesibles del sistema combinado es el número de estados accesibles del sistema B (el reservorio de calor). Así, la probabilidad de encontrar al sistema A en el estado s es proporcional al número de estados accesibles de B con la condición $E_B = E - E_s$ [10]. Entonces:

$$P_s = C \Omega_B(E - E_s) \quad (2.16)$$

La constante C puede ser determinada por la condición de normalización

$$\sum_s P_s = 1 \quad (2.17)$$

Por el hecho de que $E_s \ll E_B$ y en general $E_s \ll E$, (2.16) puede ser aproximado por expandir el logaritmo de Ω_B alrededor del valor $E_B = E$ [9-11].

$$\ln \Omega_B(E - E_s) = \ln \Omega_B(E) - \left[\frac{\partial \ln \Omega_B}{\partial E_B} \right]_E E_s + \dots \quad (2.18)$$

Los términos de orden superior de la serie pueden ser despreciados porque $E_s \ll E$. Tomando en cuenta que $\beta = \left[\frac{\partial \ln \Omega_B}{\partial E_B} \right]_E$ la cual es independiente de la energía E_s :

$$\ln \Omega_B(E - E_s) = \ln \Omega_B(E) - \beta E_s \quad (2.19)$$

Sacando el exponencial a ambos lados.

$$\Omega_B(E - E_s) = \Omega_B(E) e^{-\beta E_s} \quad (2.20)$$

$\Omega_B(E)$ es una constante independiente de s . La probabilidad (2.16) finalmente queda:

$$P_s = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_s} \quad (2.21)$$

El valor de Z puede ser encontrado a partir de la condición (2.16)

$$Z = \sum_s e^{-\beta E_s} \quad (2.22)$$

A la función Z se la conoce como **función de partición**.

2.2.2 VALOR MEDIO DE LA ENERGÍA.

El sistema A está en contacto con el reservorio de calor. De A se conoce la temperatura, el volumen y el número de partículas. El sistema A puede tener alguno de los valores energéticos E_s correspondientes a cada microestado s . Por eso es conveniente considerar la energía media del sistema, que en este caso puede ser calculada así

$$\bar{E} = \sum_s P_s E_s = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-\beta E_s} \quad (2.23)$$

Y se expresa así:

$$\bar{E} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_s e^{-\beta E_s} \quad (2.24)$$

Y usando la igualdad (2.22).

$$\bar{E} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (2.25)$$

2.2.3 CAPACIDAD CALÓRICA.

La capacidad calórica a volumen constante en términos de \bar{E} es:

$$C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{d\beta}{dT} \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \quad (2.26)$$

Usando (2.24) y teniendo en cuenta que $\overline{E^2} = \frac{1}{Z} \sum_s E_s^2 e^{-\beta E_s}$, se tiene

$$C_V = \frac{1}{kT^2} [\overline{E^2} - \bar{E}^2] \quad (2.27)$$

Esta relación liga a la capacidad calórica con las fluctuaciones energéticas del sistema y es de mucho uso en lo que respecta a simulaciones computacionales [9, 13, 14].

2.2.4 CONEXIÓN ENTRE LA TERMODINÁMICA Y LA MECÁNICA ESTADÍSTICA

De acuerdo con la termodinámica se introduce la siguiente definición:

$$F \equiv E - TS \quad (2.28)$$

A la función F se la conoce como **energía libre de Helmholtz**.

Esta energía es el potencial termodinámico natural para valores dados de T , V y N , y cumple con las siguientes relaciones [9-11]:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (2.29)$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{T,N} \quad (2.30)$$

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (2.31)$$

Sustituyendo $E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$ y (2.29) en la definición (2.28):

$$F = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} - \beta \left(\frac{\partial F}{\partial \beta} \right)_{V,N} \quad (2.32)$$

Reescribiendo (2.32) así:

$$F + \beta \left(\frac{\partial F}{\partial \beta} \right)_{V,N} = \left(\frac{\partial \beta F}{\partial \beta} \right)_{V,N} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (2.33)$$

Finalmente integrando (2.33) se encuentra:

$$F = -kT \ln Z \quad (2.34)$$

Donde se ha ligado a la termodinámica con la mecánica estadística.

2.3 SISTEMAS MAGNÉTICOS.

La importancia de la mecánica estadística radica en explicar el estado físico de un sistema mediante un tratamiento microscópico. Las magnitudes físicas que uno puede medir como experimentador son el resultado del comportamiento de los componentes del sistema. Por ejemplo, en el caso de un gas, la presión que ejerce el gas sobre las paredes del recipiente que lo contiene es el resultado de los choques de las moléculas que componen el gas sobre dichas paredes. De la misma forma, como cada partícula tiene una velocidad y momento que afecta al estado de todo el sistema, propiedades como el espín de las partículas también influyen sobre el estado macroscópico del sistema. La base del Magnetismo tal como lo conocemos es el resultado de los espines de las partículas y su comprensión desde el punto de vista estadístico es la clave para entender muchos fenómenos presentes en la materia.

2.3.1 MOMENTOS MAGNÉTICOS QUE NO INTERACTÚAN.

Considere un sistema de momentos magnéticos que no interactúan con espín $\frac{1}{2}$ y que están en equilibrio con un reservorio de calor a temperatura T . La energía de interacción de cada momento magnético μ en un campo magnético \mathbf{B} está dado por:

$$E = -\mu\mathbf{B} = -\mu_z B \quad (2.35)$$

Donde μ_z es la componente del momento magnético en dirección del campo magnético \mathbf{B} , puesto que el espín tiene valor $\frac{1}{2}$ entonces las posibles orientaciones del momento magnético son dos: $\mu_z = S\mu$ y $S = \pm 1$.

Dado que los momentos magnéticos no interactúan entre sí, no hay mayor interés en el estudio del sistema si no existe un campo magnético externo \mathbf{B} . En ausencia de un campo magnético los espines estarán orientados aleatoriamente sin preferencia en cualquiera de las dos direcciones posibles, de tal forma que la energía media es cero. Al existir un campo magnético externo \mathbf{B} , ya existen interacciones entre momentos magnéticos con el campo \mathbf{B} y la **energía del sistema ya no es cero.**

Asumiendo que los espines están fijamente ubicados en una red (no importa su topología), entonces estos espines son distinguibles unos a otros y se los puede

diferenciar, de esta manera podemos calcular la función de partición para un espín, por ejemplo: Z_1 y usar la relación $Z_N = Z_1^N$ para determinar la función de partición del sistema de los N espines:

$$Z_1 = \sum_{s=\pm 1} e^{-\beta\mu Bs} = e^{-\beta\mu B} + e^{\beta\mu B} = 2 \cosh \beta\mu B \quad (2.36)$$

Consecuentemente se obtiene:

$$Z_N = Z_1^N = (2 \cosh \beta\mu B)^N \quad (2.37)$$

Con el objeto de obtener la energía del sistema es necesario usar (2.25):

$$E = -N\mu\beta \tanh \beta\mu B \quad (2.38)$$

2.3.2 MAGNITUDES FÍSICAS DE INTERÉS.

- **Capacidad Calorífica.**

Con el conocimiento de la energía se puede calcular la capacidad calorífica:

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right) = -k\beta^2 \left(\frac{\partial}{\partial \beta} (N\mu\beta \tanh \beta\mu B) \right)$$

$$C = N(\beta\mu B)^2 \operatorname{sech}^2(\beta\mu B) \quad (2.39)$$

En este caso la capacidad calorífica toma valores positivos y tiende a cero cuando $T \rightarrow 0$.

- **Magnetización y susceptibilidad magnética.**

-La magnetización está definida como el momento magnético medio

$$\bar{M} = \mu \sum_{i=1}^N \bar{s}_i \quad (2.40)$$

Donde la magnetización media por espín, la cual es una variable intensiva, está dada por:

$$\bar{m} = \frac{\bar{M}}{N} \quad (2.41)$$

-La susceptibilidad magnética χ es una medida del cambio de la magnetización debido al cambio en el campo magnético externo:

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_T \quad (2.42)$$

Se puede expresar χ en términos del $\ln Z$ tomando en cuenta que la energía total es:

$$E = E_0 - MB \quad (2.43)$$

Donde E_0 es la energía de interacción entre ellos los espines y $-MB$ es la **energía de interacción** de los espines con el campo magnético externo; si los espines no interactúan entre ellos, como en nuestro análisis, entonces $E_0 = 0$. Según (2.43) se puede escribir Z de la siguiente forma:

$$Z = \sum_s e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)} \quad (2.44)$$

Donde el índice s corresponde a los microestados posibles.

Con el objeto de expresar a \bar{M} como función de la energía libre F es necesario hallar $\frac{\partial Z}{\partial B}$:

$$\frac{\partial Z}{\partial B} = \sum_s \beta M_s e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)} \quad (2.45)$$

El valor de $\bar{M} = \frac{1}{Z} \sum_s M_s e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)}$, y

$$\bar{M} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = kT \frac{\partial \ln Z}{\partial B} \quad (2.46)$$

Finalmente, utilizando (2.34) se llega a la magnetización en función de la energía libre F :

$$\bar{M} = - \frac{\partial F}{\partial B} \quad (2.47)$$

-La susceptibilidad magnética (relación con las fluctuaciones de la magnetización)

Utilizando la definición de susceptibilidad magnética (2.42) y $\bar{M} = \frac{1}{Z} \sum_s M_s e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)}$

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial}{\partial B} \left(\frac{1}{Z} \sum_s M_s e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)} \right) \\ &= \sum_s M_s e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)} \frac{\partial}{\partial B} \frac{1}{Z} + \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial B} \left(\sum_s M_s e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)} \right) \\ &= - \sum_s M_s e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)} \frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial B} + \frac{\beta}{Z} \left(\sum_s M_s^2 e^{-\beta(E_{0,s} - M_s B)} \right) \\ &= \beta (-\bar{M}^2 + \overline{M^2}) = \frac{1}{kT} (\overline{M^2} - \bar{M}^2) \end{aligned} \quad (2.48)$$

Este resultado es similar al obtenido para la capacidad calorífica en (2.27). Como se ve la susceptibilidad magnética está relacionada con las fluctuaciones de la magnetización. Es de mucha utilidad para simulaciones numéricas [9, 13, 14].

Se conoce la función de partición y por tanto la energía libre.

Con (2.47):

$$\bar{M} = - \frac{\partial F}{\partial B} = kT \frac{\partial \ln Z_N}{\partial B}$$

Remplazando Z_N por (2.37)

$$\bar{M} = -\frac{\partial F}{\partial B} = kT \frac{\partial}{\partial B} \ln(2 \cosh \beta\mu B)^N$$

$$\bar{M} = N\mu \tanh \beta\mu B \quad (2.49)$$

Si el campo B fuera nulo, entonces \bar{M} sería cero para cualquier temperatura distinta de cero. Lo que conlleva un comportamiento en que los espines tan sólo se alinean en la dirección de un campo externo no nulo. A tal sistema se lo conoce como **paramagnético** [9,11].

También, conocida \bar{M} es posible determinar χ usando (2.42).

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial}{\partial B} N\mu \tanh \beta\mu B \\ \chi &= N\mu^2 \beta \operatorname{sech}^2 \beta\mu B \end{aligned} \quad (2.50)$$

Para temperaturas altas $\beta\mu B \rightarrow 0$ y por tanto $\operatorname{sech} \beta\mu B \rightarrow 1$, tenemos

$$\chi = N\mu^2 \beta = \frac{N\mu^2}{kT} \quad (2.51)$$

La dependencia de χ con T^{-1} se conoce como Ley de Curie y es observada en materiales magnéticos a temperaturas altas.

El modelo aplicado anteriormente no explica la realidad compleja de muchos sistemas. El hecho de no tomar en cuenta las interacciones de los espines no permite explicar cómo determinados materiales presenten magnetización incluso cuando el campo magnético externo es cero (a tales sistemas se los conoce como **ferromagnéticos**), el ferromagnetismo se debe a la interacción entre los espines.

2.4 INTRODUCCIÓN AL MODELO DE ISING.

Como se mencionó en el capítulo I un modelo para explicar el fenómeno de magnetización en ciertos materiales es el propuesto por Wilhelm Lenz en 1920. A dicho modelo se lo conoce como el modelo de Ising en honor a un estudiante de Lenz llamado Ernst Ising, quién en 1925 encontró la solución exacta para el modelo en una dimensión [12].

El modelo de Ising está definido sobre una colección discreta de espines S_j , los cuales pueden tomar los valores de $+1$ o -1 . Los espines interactúan en pares con una energía que tiene un valor dependiendo de la orientación de cada par de espines. La energía total del sistema está dada por:

$$E = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.52)$$

Donde la suma es sobre cada par de espines tomados en cuenta una sola vez. Se asume que el campo externo está en la dirección positiva del eje z .

Para cada par de espines (i, j) se tiene que si

$J_{ij} > 0$ La interacción es llamada ferromagnética.

$J_{ij} = 0$ Los espines no interactúan.

$J_{ij} < 0$ La interacción es llamada antiferromagnética.

Se los ha nombrado así porque una interacción ferromagnética tiende a alinear los espines (i, j) , mientras que una interacción antiferromagnética tiende a desalinearlos.

Los espines pueden ser considerados como objetos físicos estructurados en una red, donde cada **nodo** tiene exactamente un espín y cada **arista** conecta a determinados espines (i, j) , la interacción está dada por $J_{ij} \neq 0$. Por tanto la energía del sistema (2.52) está determinada por la red, el campo externo \mathbf{H} y los J_{ij} .

En los materiales sólidos es común encontrar estructuras ordenadas de cierta forma. Por ejemplo, los cristales poseen un ordenamiento de sus moléculas formando redes. En el caso unidimensional esta red es una cadena donde cada átomo está ubicado en un nodo. Este modelo tiene solución exacta para $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ a partir del cálculo de la función de partición Z .

En el modelo de Ising de dos dimensiones, cuya red es una cuadrícula, cada espín interactúa con sus cuatro vecinos próximos (en este caso también existe solución exacta para $\mathbf{H} = \mathbf{0}$). Sin embargo la función Z , en el caso general, no siempre es fácil de calcular porque no existe un procedimiento estándar para su cálculo. En los casos donde la solución analítica de la función de partición no es posible es necesario métodos de aproximación o métodos numéricos [9,13,14].

2.4.1 LA CADENA DE ISING.

Como se ha mencionado, el modelo de Ising en una dimensión (cadena de Ising) sí posee solución exacta, para tal efecto es necesario calcular la función de partición involucrada. El ensamble canónico es precisamente aquel que debe ser usado para conseguir el objetivo. Como ahora se tiene un sistema en el cuál los espines interactúan, ya no es posible usar la relación $Z_N = Z_1^N$. En su defecto ahora es necesario calcular Z_N directamente. El objetivo es enumerar todos los microestados del sistema y sus correspondientes energías. Luego se debe calcular Z_N para un número finito N de espines y posteriormente tomar el límite cuando $N \rightarrow \infty$.

El problema radica en que el sistema posee un número grande de microestados (2^N) cuando $N \gg 1$. Sin embargo, para el modelo de Ising unidimensional es factible calcular Z_N para N pequeño e inmediatamente generalizar para un N arbitrario.

En una cadena finita de espines es necesario especificar las condiciones de frontera de los espines extremos. Por ejemplo, una posibilidad es elegir extremos libres tal que los espines de los extremos tengan una sola interacción y otra posibilidad son condiciones de frontera periódicas (ver Fig. 2.1). Esta última implica que el N th espín esté conectado al primer espín, formando un anillo. La elección de las condiciones de frontera no es relevante en el límite cuando $N \rightarrow \infty$.

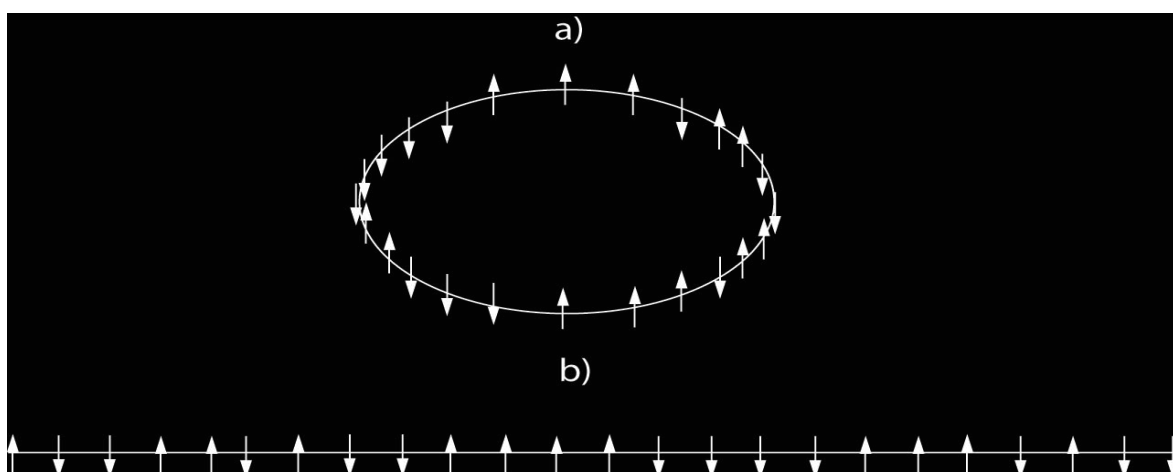


Fig. 2.1 Cadena de espines: a) condiciones de frontera periódicas, b) condiciones de frontera libres.

En la ausencia de campo magnético externo, $\mathbf{H} = \mathbf{0}$, con condiciones de frontera de extremos libres, la energía de un sistema de dos espines es:

$$E = -J \sum_{i=0}^{N-1} S_i S_{i+1} \quad (2.53)$$

Por simplicidad la constante de interacción J es la misma para todos los espines.

Para este sistema es fácil calcular la función de partición, el sistema tiene cuatro microestados: dos espines orientados en la misma dirección (en esta situación existen dos estados) y dos espines desalineados (de la misma forma con dos estados posibles), se tiene que la función de partición Z_2 es:

$$Z_2 = 2e^{\beta J} + 2e^{-\beta J} = 4 \cosh \beta J \quad (2.54)$$

Si se consideran tres espines:

$$Z_3 = 2e^{\beta J} + 4 + 2e^{-\beta J} = (2 \cosh \beta J) Z_2 \quad (2.55)$$

La relación entre Z_2 y Z_3 sugiere una relación general entre Z_N y Z_{N-1} de la forma:

$$Z_N = (2 \cosh \beta J) Z_{N-1} = 2(2 \cosh \beta J)^{N-1} \quad (2.56)$$

Demostración.

Este resultado puede ser demostrado directamente por escribir Z_N de la siguiente manera:

$$Z_N = \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}} \quad (2.57)$$

Para el caso de $N = 3$ la expresión (2.57) queda:

$$Z_3 = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \sum_{S_3=\pm 1} e^{\beta J S_1 S_2 + \beta J S_2 S_3} \quad (2.58)$$

Desarrollando la sumatoria sobre el índice S_3 :

$$\begin{aligned} Z_3 &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} e^{\beta J S_1 S_2} (e^{-\beta J S_2} + e^{\beta J S_2}) \\ &= 2 \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} e^{\beta J S_1 S_2} \cosh \beta J \end{aligned} \quad (2.59)$$

La sumatoria sobre los índices s_1 y s_2 es precisamente Z_2 , entonces:

$$Z_3 = (2 \cosh \beta J) Z_2$$

Que es la expresión (2.55).

Análogamente para el caso general es posible hacer lo mismo, quedando:

$$Z_N = 2 \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_2=\pm 1} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+1}} \cosh \beta J \quad (2.60)$$

Que se expresa así:

$$Z_N = (2 \cosh \beta J) Z_{N-1} = 2(2 \cosh \beta J)^{N-1}$$

Con la función Z_N se calcula la energía libre de Helmholtz

$$F = -kT \ln Z_N = -kT [\ln 2 + (N - 1) \ln(2 \cosh \beta J)] \quad (2.61)$$

Para N muy grande el término $\ln 2$ es despreciable, entonces (2.61) queda:

$$F = -kTN \ln(2 \cosh \beta J) \quad (2.62)$$

2.4.2 FUNCIÓN DE CORRELACIÓN

Es necesario definir la siguiente función $G(r)$ que provee información relevante dentro de las propiedades del modelo de Ising [9]:

$$G(r) = \overline{s_k s_{k+r}} - \overline{s_k} \overline{s_{k+r}} \quad (2.63)$$

Debido a que el promedio s_k es independiente del lugar que ocupe en la red, entonces el segundo término de la función $G(r)$ es igual a \overline{m}^2 . La expresión de $G(r)$ queda:

$$G(r) = \overline{s_k s_{k+r}} - \overline{m}^2 \quad (2.64)$$

El promedio se efectúa sobre todas las configuraciones de los espines. Todos los sitios de la red son equivalentes, $G(r)$ es independiente de la elección de k y sólo depende de la separación r (en unidades de red) de los espines. Hay que tomar en cuenta que el análisis es para una temperatura T y campo externo H dados. Si $r = 0$ el caso se reduce a $G(r) = \overline{s_k s_k} - \overline{m}^2 = \overline{m^2} - \overline{m}^2$ valor que es proporcional a la susceptibilidad magnética χ .

Esta función ofrece información sobre nuestro sistema, pero ¿cuál es? Pues bien, la magnetización espontánea en ausencia del campo a una temperatura crítica es un fenómeno colectivo que requiere que los espines del sistema se “comuniquen” es decir estén correlacionados [9], esta función da el grado en el cual dos espines lo están. Si dos espines no están correlacionados, entonces $G(r) = 0$.

A temperaturas altas y $H = 0$ las interacciones entre los espines dejan de ser importantes porque ellos tienden a orientarse aleatoriamente, por lo que al límite cuando $kT \gg J$ se tiene que $G(r) \rightarrow 0$, para un r fijo. Por otro lado, si cierto espín está orientado, por ejemplo “hacia arriba”, es más probable que un espín próximo tenga también la misma orientación, pero si se elige un espín más distante respecto al primero se espera que la probabilidad de tener la misma orientación sea menor que el cercano, para un H y T fijos, $G(r) \rightarrow 0$ como $r \rightarrow \infty$.

2.4.3 FUNCIÓN DE CORRELACIÓN PARA LA CADENA DE ISING.

La función de correlación $G(r)$ para el caso de la cadena de Ising con condiciones de frontera nulas y $H = 0$ puede ser calculado exactamente. Es conveniente generalizar el modelo de Ising asumiendo que la magnitud de interacción J entre dos espines próximos sea arbitraria y la energía total E es:

$$E = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1} \quad (2.65)$$

Donde J_i es la energía de interacción entre el espín i y el espín $i + 1$. Puesto que $m = 0$ para $T > 0$ (se lo demostrará luego) se puede escribir $G(r) = \overline{s_k s_{k+r}}$

Usando la expresión de la energía (2.65) se obtiene $\overline{s_k s_{k+r}}$

$$\overline{s_k s_{k+r}} = \frac{1}{Z_N} \sum_{s_i=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} s_k s_{k+r} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} \beta J_i s_i s_{i+1}\right) \quad (2.66)$$

Siendo $Z_N = 2 \prod_{i=1}^{N-1} 2 \cosh \beta J$

El lado derecho de (2.66) es el valor del producto de dos espines separados por una distancia r en una configuración particular, con sus respectivas probabilidades.

Usando un artificio, si se toma la derivada del exponencial con respecto a J_k se tiene implícitamente el factor $s_k s_{k+1}$ y se calcula la función de correlación $G(1) = \overline{s_k s_{k+1}}$:

$$\begin{aligned} G(1) = \overline{s_k s_{k+1}} &= \frac{1}{Z_N} \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N} s_k s_{k+1} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} \beta J_i s_i s_{i+1}\right) \\ &= \frac{1}{Z_N} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_k} \sum_{s_i=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} \beta J_i s_i s_{i+1}\right) \end{aligned} \quad (2.67)$$

Regresando al caso particular, $J_i = J$ para todo $i = \{1, \dots, N\}$

$$G(1) = \frac{\sinh \beta J}{\cosh \beta J} = \tanh \beta J \quad (2.68)$$

Para obtener $G(2) = \overline{s_k s_{k+2}}$ tómesese en cuenta que $s_{k+1}^2 = 1$, de tal forma que es posible escribir $s_k s_{k+2} = s_k s_{k+1} s_{k+1} s_{k+2}$. Con esa consideración se obtiene:

$$G(2) = \overline{s_k s_{k+2}} = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{s_i\}} s_k s_{k+1} s_{k+1} s_{k+2} \exp\left(\sum_{i=1}^{N-1} \beta J_i s_i s_{i+1}\right) = \frac{1}{Z_N} \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 (J_1, \dots, J_{N-1})}{\partial J_k \partial J_{k+1}}$$

$$G(2) = (\tanh \beta J)^2 \quad (2.69)$$

Para encontrar $G(r)$ es necesario generalizar el análisis anterior, obteniendo:

$$G(r) = \frac{1}{Z_N} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_k} \frac{\partial}{\partial J_{k+1}} \dots \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} Z_N \quad (2.70)$$

Remplazando la función de partición

$$G(r) = \tanh \beta J_k \tanh \beta J_{k+1} \dots \tanh \beta J_{k+r-1}$$

$$= \prod_{k=1}^r \tanh \beta J_{k+r-1} \quad (2.71)$$

En una interacción uniforme $J_i = J$, y la función de correlación (Ver Fig. 2.2) es:

$$G(r) = (\tanh \beta J)^r \quad (2.72)$$

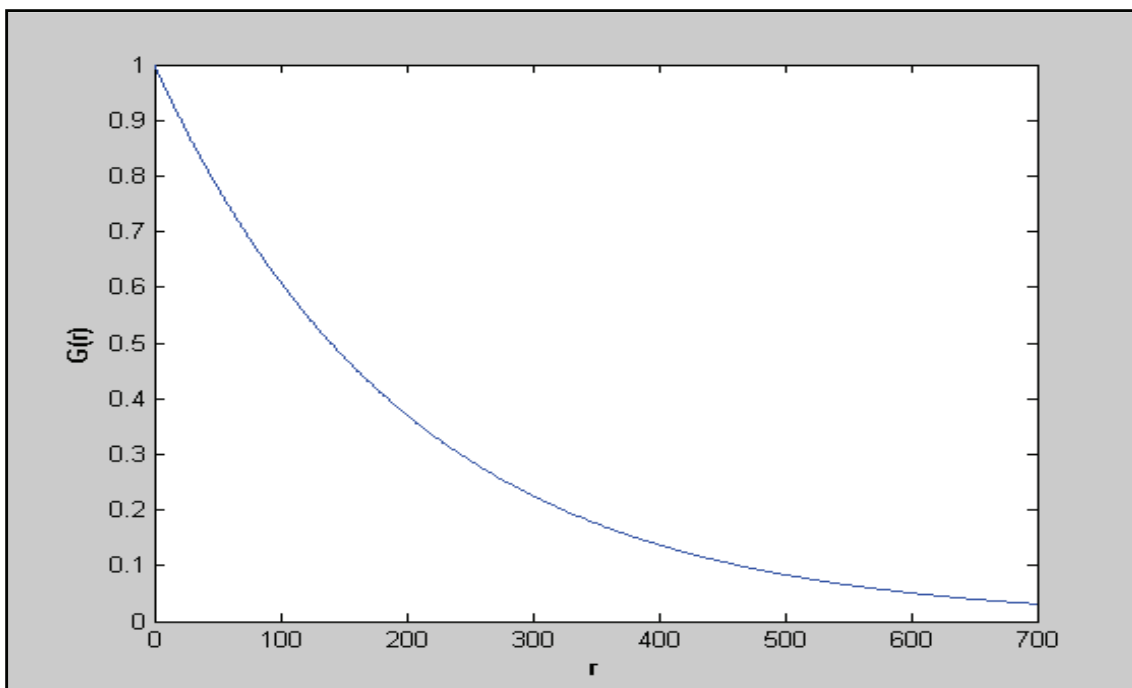


Fig. 2.2 Función de correlación del modelo de Ising unidimensional. Se ha considerado el valor $\beta J = 3$. Se puede observar como $G(r)$ decrece con la distancia entre los espines.

2.4.4 LONGITUD DE CORRELACIÓN.

La longitud de correlación, notada como ξ , se define al escribir $G(r)$ en la forma:

$$G(r) = e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (2.73)$$

Por ejemplo, para el modelo de Ising unidimensional

$$\xi = -\frac{1}{\ln(\tanh \beta J)} \quad (2.74)$$

A bajas temperaturas $\tanh \beta J \approx 1 - 2e^{-2\beta J}$ y el $\ln(\tanh \beta J) \approx -2e^{-2\beta J}$

Obteniendo:

$$\xi = \frac{1}{2} e^{2\beta J} (\beta J \gg 1) \quad (2.75)$$

De (2.75) vemos que para temperaturas bajas ($\beta J \gg 1$) la longitud de correlación se hace muy grande.

La longitud de correlación da la escala de longitud para el decaimiento de las correlaciones entre los espines.

2.4.5 MATRIZ DE TRANSFERENCIA Y SOLUCIÓN DEL MODELO DE ISING UNIDIMENSIONAL.

La matriz de transferencia es un método que posibilita una resolución más general del modelo de Ising. Hasta el momento sólo se ha considerado la interacción de los espines entre sí, sin tomar en cuenta un campo magnético externo distinto de cero. La matriz de transferencia permite encontrar soluciones al modelo unidimensional con $H \neq 0$, con este método también es posible encontrar la solución exacta al modelo bidimensional con $H = 0$.

Para dilucidar en qué consiste el método se lo va a emplear en la resolución del modelo unidimensional. Considere una cadena de N espines con condiciones de borde periódicas, es decir $s_{N+1} = s_1$. La energía de este sistema en presencia de un campo magnético externo H es

$$E = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \frac{1}{2} H \sum_{i=1}^N (s_i + s_{i+1}) \quad (2.76)$$

Y se define la matriz de transferencia como:

$$T_{ss'} = e^{Jss' + Hss'}$$

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix} \quad (2.77)$$

Con esta definición es posible expresar la función de partición del sistema en términos de T

$$Z_N(T, H) = \sum \sum \dots \sum T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \dots T_{s_N s_1} \quad (2.78)$$

Es fácil darse cuenta que:

$$(T^2)_{s_1 s_3} = \sum_{s_2} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \quad (2.79)$$

Extendiendo esta idea al producto de N matrices:

$$(T^N)_{s_1 s_{N+1}} = \sum_{s_2} \sum_{s_3} \dots \sum_{s_N} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \dots T_{s_N s_1} \quad (2.80)$$

Donde se ha usado las condiciones de frontera periódicas. El lado derecho de (2.80) es la traza de la matriz T^N :

$$Z_N = \text{Traza}(T^N) \quad (2.81)$$

La representación de una matriz no afecta a su traza. Por eso es posible diagonalizar a la matriz y obtener el mismo resultado. Y diagonalizar la matriz T^N implica encontrar los valores propios de T y elevarlos a la N

$$\begin{aligned} \det(T) &= \begin{vmatrix} e^{\beta(J+H)} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} - \lambda \end{vmatrix} \\ &= (e^{\beta(J+H)} - \lambda)(e^{\beta(J-H)} - \lambda) - e^{-2\beta J} = 0 \end{aligned} \quad (2.82)$$

Y los valores propios son:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh \beta J \pm [e^{-2\beta J} + e^{2\beta J} \sinh^2 \beta H]^{\frac{1}{2}} \quad (2.83)$$

El segundo término de (2.83) es un valor positivo, entonces $\lambda_+ > \lambda_-$ para todo H y β .

Como $Z_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N$

$$\frac{1}{N} \ln Z_N(T, H) = \ln \lambda_+ + \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \quad (2.84)$$

Obteniendo el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N(T, H) = \ln \lambda_+ \quad (2.85)$$

Pero

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \ln Z_N(T, H) &= \frac{1}{N} F(T, H) \\ &= -kT \ln \left[e^{\beta J} \cosh \beta J + (e^{2\beta J} \sinh^2 \beta H + e^{-2\beta J})^{\frac{1}{2}} \right] \end{aligned} \quad (2.86)$$

Que permite encontrar la magnetización:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = N \frac{\sinh \beta H}{(\sinh^2 \beta H + e^{-4\beta J})^{\frac{1}{2}}} \quad (2.87)$$

La magnetización toma el valor de cero cuando $H = 0$, esto quiere decir que para campo externo nulo el sistema no experimenta magnetización a temperatura distinta de cero.

2.5 TRANSICIONES DE FASE Y EL MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL.

Hasta el momento se han estudiado dos sistemas paramagnéticos: el sistema de espines que no interactúan entre sí y el anillo de espines. Ambos sistemas no presentan magnetización espontánea a temperatura distinta de cero en un campo externo nulo. Sin embargo, en la naturaleza existen materiales que cambian de una fase paramagnética a una fase ferromagnética en una temperatura distinta de cero (conocida como temperatura de Curie). Esto es un ejemplo de cambio de fase, similar al que se produce en el agua que cambia de fase sólida a líquida a $0^\circ C$. De manera general, el estado físico de un sistema está caracterizado por el valor de una cantidad física conocida como **parámetro de Orden** que se anula en una de las fases y es distinta de cero en la otra [13,14]. En el caso de sistemas Magnéticos el parámetro de orden es la Magnetización m , distinguiéndose la dos fases: la una donde $m = 0$ y la otra con $m \neq 0$.

Las transiciones de fase han sido clasificadas de acuerdo al comportamiento de la energía libre con respecto a alguno de los parámetros termodinámicos relevantes (por ejemplo la temperatura). Si la n -ésima derivada de la energía respecto del parámetro considerado es discontinua; entonces, la transición se conoce como transición de n -ésimo orden. Esta clasificación es errónea ya que muchas transiciones continuas (aquellas transiciones donde la primera derivada es continua) no presentan una discontinuidad en una de sus derivadas segundas, más bien, presentan una divergencia [9,13,14], este error se debe a que en el tiempo donde fue propuesta esta clasificación (principios del siglo XX) no se tenía conocimiento de aquello. Sin embargo, hasta nuestros tiempos la clasificación conserva los nombres de: transiciones de **primer orden** y transiciones de **segundo orden**, aunque en muchos textos se mencionan como transiciones **continuas** y transiciones **discontinuas**.

Uno de los modelos físicos que presenta transición de fase, una transición de fase continua, es el modelo de Ising en dos dimensiones con campo externo nulo. El modelo de Ising bidimensional es abordado a continuación junto con sus resultados más importantes.

2.5.1 MODELO DE ISING EN DOS DIMENSIONES, RESULTADOS DE LA SOLUCIÓN DE ONSAGER

El modelo de Ising en dos dimensiones consiste en un retículo bidimensional donde cada espín está ubicado en un nodo (Véase Fig. 2.3). Los espines interactúan con sus cuatro vecinos más cercanos (por simplicidad del modelo). De la misma manera que en el caso unidimensional, se considera que el campo externo es nulo. En tal caso la energía del sistema es

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (2.88)$$

La notación $\langle i,j \rangle$ indica interacciones con primeros vecinos.

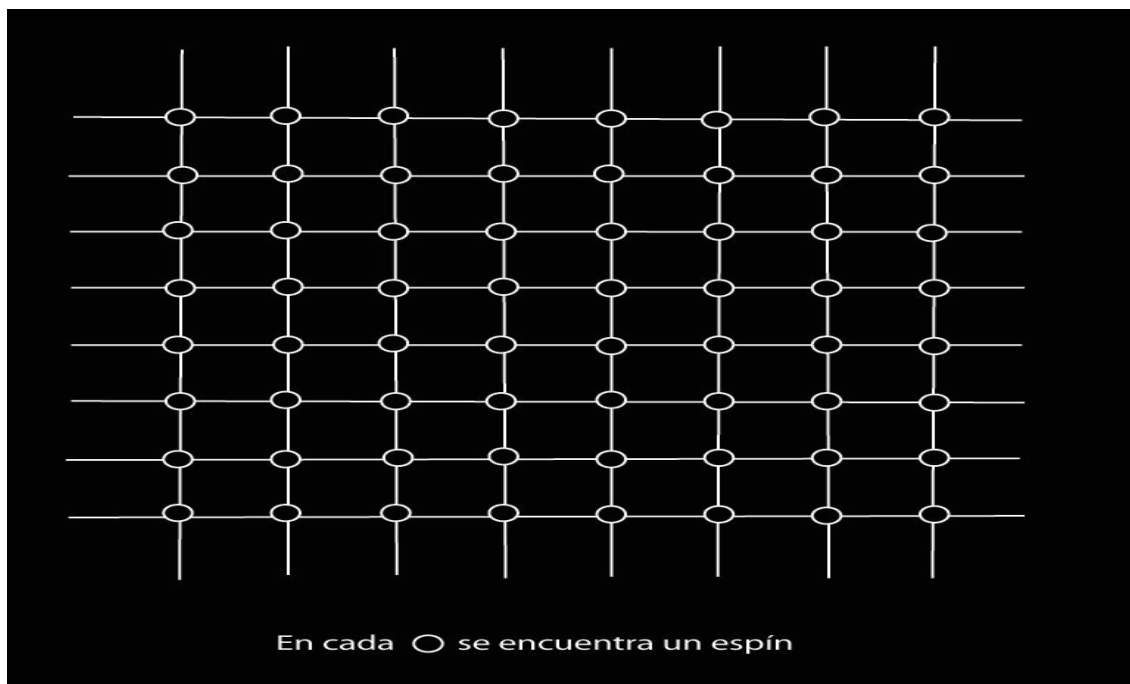


Fig. 2.3 Retículo de espines, en cada nodo se encuentra un espín, en este caso interactuando con sus vecinos más cercanos

Es necesario encontrar una forma analítica para la función de partición y en base de ella calcular las magnitudes físicas. La solución a este problema no es tan simple como el modelo de Ising unidimensional. Sin embargo, tal solución existe y fue encontrada por Lars Onsager en 1944. Por largo tiempo esta solución fue la única que planteaba un tratamiento matemático riguroso y cuyo resultado exhibe una transición de fase. Antes de esta solución se pensó que la formulación de la Mecánica estadística no explicaría las transiciones de fase [12].

El tratamiento matemático que hizo Onsager para resolver el problema fue particular para el modelo de Ising y no se ha podido generalizar para otros problemas. Por ello muy pocos textos muestran tal desarrollo completamente. En este estudio es importante mencionar los resultados que fueron hallados y no es de importancia describir la metodología a detalle. Onsager demostró que la función de partición $Z(H = 0, T)$ en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ es igual a

$$\ln Z(H = 0, T) = \ln(2 \cosh 2\beta J) + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - h^2 \sin^2 \phi} \right) \quad (2.89)$$

Donde h está definida como

$$h \equiv 2 \sinh 2\beta J / \cosh^2 2\beta J$$

De los cálculos sobre la función (2.89) Onsager encontró que:

$$\sinh \frac{2J}{kT_c} = 1 \quad (2.90)$$

Obteniendo:

$$\frac{kT_c}{J} = 2.269185 \quad (2.91)$$

La energía del sistema es:

$$E = -2NJ \tanh 2\beta J - NJ \frac{\sinh^2 2\beta J - 1}{(\sinh 2\beta J)(\cosh 2\beta J)} \left[\frac{2}{\pi} K_1(h) - 1 \right] \quad (2.92)$$

Donde:

$$K_1(h) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - h^2 \sin^2 \phi}} \quad (2.93)$$

A esta integral se la conoce como integral elíptica de primera especie. La energía $E(T)$ es continua en $T = T_c$ y en todo el rango de las demás temperaturas, ver Fig. 2.4.

En base a (2.92) se calcula la capacidad calorífica en función de la temperatura

$$C(T) = Nk \frac{4}{\pi} (\beta J \coth 2\beta J)^2 [K_1(h) - E_1(h)] - (1 - \tanh^2 2\beta J) \left(\frac{\pi}{2} + (2 \tanh^2 \beta J - 1) K_1(h) \right) \quad (2.94)$$

Siendo,

$$E_1(h) = \int_0^{\pi/2} d\phi \sqrt{1 - h^2 \sin^2 \phi} \quad (2.95)$$

Conocida como integral elíptica de segunda especie.

Alrededor de $T_c = 2.269185 \frac{J}{k}$, la capacidad calórica es aproximadamente:

$$C \approx -Nk \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{kT_c} \right) \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| \quad (2.96)$$

Resultado importante que muestra que la capacidad calórica diverge logarítmicamente (ver Fig. 2.5) en temperaturas cercanas a T_c

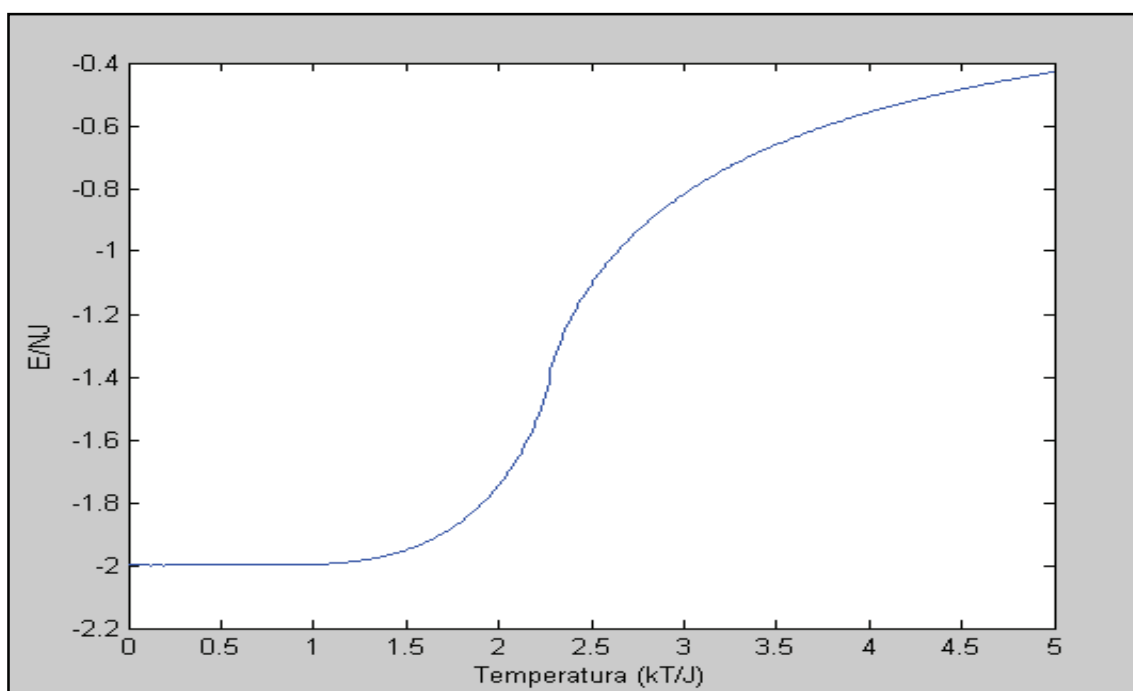


Fig. 2.4 Energía en función de la temperatura. Solución exacta del modelo de Ising bidimensional

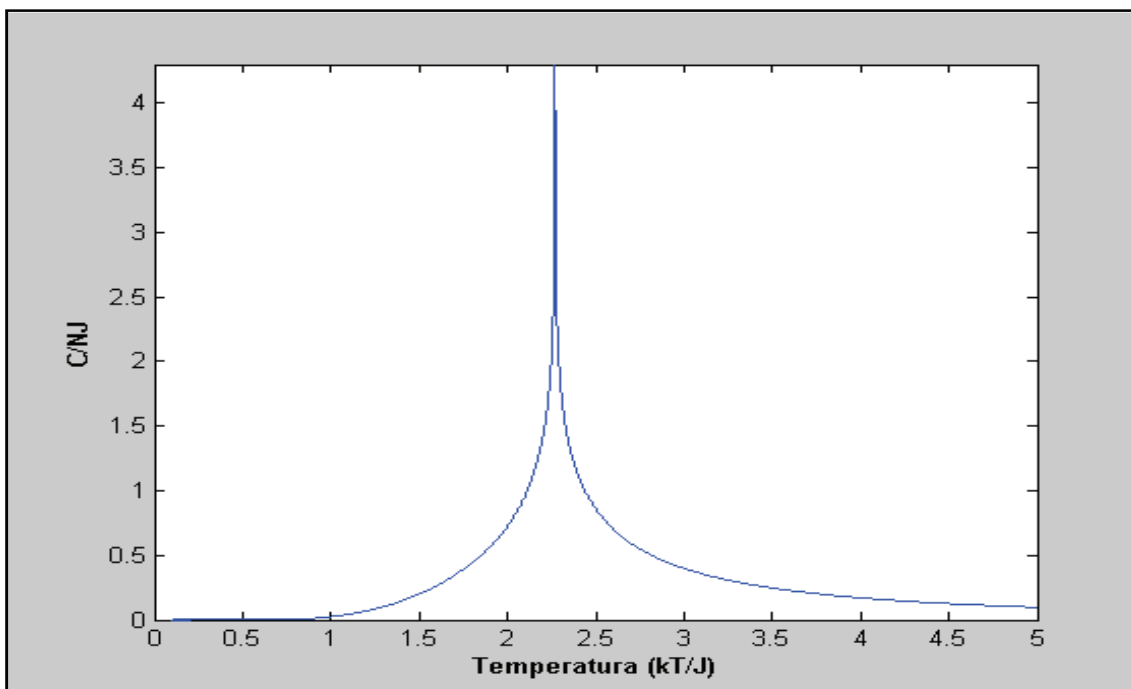


Fig. 2.5 Calor específico en función de la temperatura. Solución exacta del modelo de Ising bidimensional, el calor específico diverge en la temperatura crítica.

$$C(T) \sim -\ln(|\epsilon|) \quad (2.97)$$

En ella se ha definido la temperatura reducida

$$\epsilon = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.98)$$

Es necesario comprobar si la divergencia de C en T_c se debe a una transición de fase, para ello se debe verificar si existe magnetización espontánea. Para calcular la magnetización se deriva la energía libre con $H \neq 0$ y posteriormente se reemplaza $H = 0$. El problema fue resuelto por Onsager quien no lo publicó, tiempo después N. C. Yang lo hizo en 1955 [9,12]. El resultado es el siguiente:

$$m(T) = \begin{cases} (1 - (\sinh 2\beta J)^{-4})^{1/8}, & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases} \quad (2.99)$$

Se observa que la magnetización no presenta discontinuidad en la transición de fase (Fig. 2.6) y por tanto de acuerdo a (2.47) la derivada de la energía libre es continua, esto es, el sistema experimenta una transición de segundo orden.

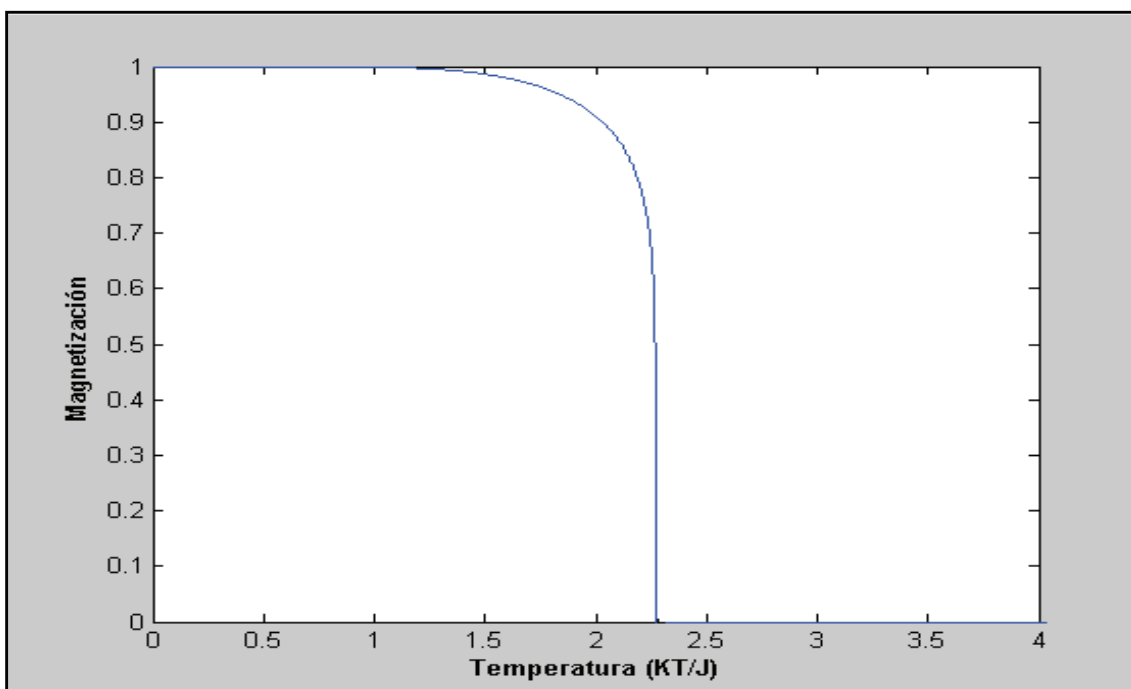


Fig. 2.6 Magnetización por espín. Gráfica de la solución de Onsager, existe magnetización espontánea para $T < T_c$, donde $T_c = 2.269185 \frac{J}{k}$

Yang encontró que para $T < T_c$ la magnetización se acerca siguiendo la ley:

$$m \sim \epsilon^\beta \quad (2.100)$$

Y encontró que el valor de β es $1/8$.

Cerca a la temperatura crítica se encontró que la susceptibilidad se comporta según:

$$\chi \sim |\epsilon|^{-\gamma} \quad (2.101)$$

Siendo $\gamma = 7/4$.

De la misma manera el comportamiento de la capacidad calorífica puede ser expresado en términos de una ley potencial:

$$C \sim |\epsilon|^{-\alpha} \quad (2.102)$$

Por el comportamiento de C , según (2,97), se determina que el exponente crítico α es igual a cero.

Cerca a T_c , la longitud de correlación también sigue una ley potencial:

$$\xi \sim |\epsilon|^{-\nu} \quad (2.103)$$

Donde $\nu = 1$.

Estos comportamientos no son exclusivos del modelo de Ising en dos dimensiones. Muchos experimentos sobre sistemas magnéticos y muchas más simulaciones muestran que las propiedades termodinámicas pueden ser descritas por un conjunto de leyes potenciales en la vecindad de T_c [9, 13,14].

Adicionalmente se puede definir otro exponente crítico, el cual muestra la dependencia de la magnetización m con un campo magnético uniforme H a lo largo de la isoterma crítica $T = T_c$

$$m \sim H^{1/\delta} \quad (2.104)$$

Para el modelo de Ising bidimensional $\delta = 15$.

Además, para $r \rightarrow \infty$ la función de correlación $G(r)$ tiene la forma Ornstein-Zernike

$$G(r) \propto r^{-d+2-\eta} e^{-r/\xi} \quad (2.105)$$

d es la dimensión espacial y η es otro exponente crítico. En $T = T_c$ la expresión (2.105) decae potencialmente.

$$G(r) \sim r^{-(d-2+\eta)} \quad (2.106)$$

En el modelo de Ising bidimensional $d = 2$ y $\eta = 1/4$

2.5.2 TEORÍA DE CAMPO MEDIO DE WEISS.

Un método para resolver aproximadamente el modelo de Ising en una dimensión arbitraria es el propuesto por Pierre Weiss y es conocido como teoría de campo medio. La teoría de campo medio asume que cada espín interactúa con el mismo campo efectivo. El campo efectivo se debe al campo magnético externo más el campo interno generado por los espines vecinos

$$H_{ef} = J \sum_{i=1}^q s_i + H \quad (2.107)$$

En la teoría de campo medio no se considera las fluctuaciones de H_{ef} alrededor de su media $\overline{H_{ef}}$. En lugar de usar H_{ef} se utiliza el valor $\overline{H_{ef}}$

$$\overline{H_{ef}} = J\langle k \rangle m + H \quad (2.108)$$

Donde $\langle k \rangle$ es el número promedio de vecinos de cada espín (en negrita para evitar la confusión con la constante de Boltzman), quedando la siguiente función de partición por espín:

$$Z = \sum_{s=\pm 1} e^{s\overline{H_{ef}}/kT} = 2 \cosh [(J\langle k \rangle m + H)/kT] \quad (2.109)$$

La energía por espín es:

$$f = -kT \ln(2 \cosh[(J\langle k \rangle m + H)/kT]) \quad (2.110)$$

y la magnetización $m = -\frac{\partial f}{\partial H}$:

$$m = \tanh[(J\langle k \rangle m + H)/kT] \quad (2.111)$$

En el caso donde $H = 0$ se tiene $m = \tanh(J\langle\mathbf{k}\rangle m/kT)$ que es una ecuación de la forma $m = g(m)$. La función g tiene algunas propiedades. En primer lugar 0 es punto fijo, esto es $0 = g(0)$, lo que significa que $m = 0$ es solución. Además, $g \rightarrow 1$ cuando $M \rightarrow \infty$, y finalmente g es creciente y convexa.

Para resolver esta ecuación se puede usar el método gráfico mostrado en la Fig. 2.7. La solución se encuentra en la intersección de las curvas $y = x$ y $y = g(x)$.

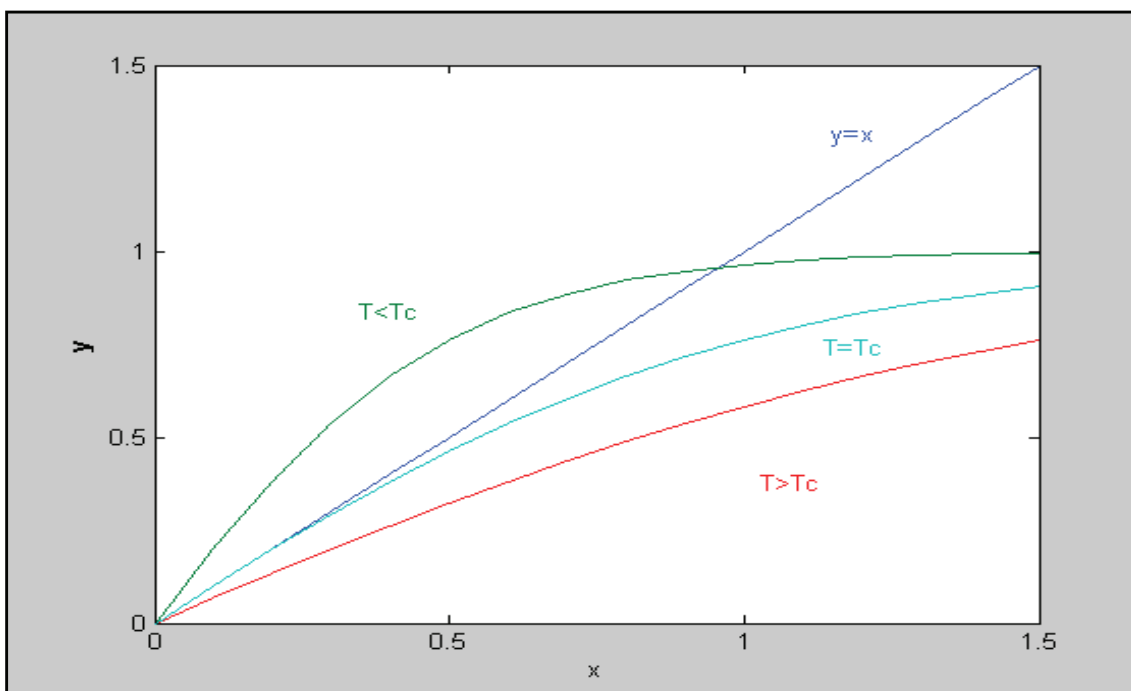


Fig. 2.7 Solución gráfica de $m = \tanh(J\langle\mathbf{k}\rangle m/kT)$, se muestra que existe solución distinta de cero por debajo de una cierta temperatura T_c .

Para temperaturas $T \geq T_c$ la ecuación no tiene solución distinta a $M = 0$, donde

$$kT_c = J\langle\mathbf{k}\rangle \quad (2.112)$$

Soluciones distintas a $M = 0$ existen para $T < T_c$, mostrando un comportamiento crítico en T_c .

Para estimar los exponentes críticos se puede expandir la $\tanh(Jqm/kT)$ de forma que $\tanh(x) \approx x - \frac{x^3}{3}$.

$$\tanh\left(\frac{J\langle\mathbf{k}\rangle m}{kT}\right) \approx \frac{J\langle\mathbf{k}\rangle m}{kT} - \frac{1}{3}\left(\frac{J\langle\mathbf{k}\rangle m}{kT}\right)^3 + \dots \quad (2.113)$$

La solución de la ecuación es:

$$m = \begin{cases} 0, & T \geq T_c \\ \pm \frac{3^{\frac{1}{2}}}{\left(\frac{J\langle\mathbf{k}\rangle}{kT}\right)} \left(\frac{J\langle\mathbf{k}\rangle}{kT} - 1\right)^{\frac{1}{2}}, & T < T_c \end{cases} \quad (2.114)$$

Tomando la expresión correspondiente a $T < T_c$ de (2.114) y usando (2.113):

$$|m| = 3^{1/2} \left(\frac{T}{T_c}\right) \left(\left|\frac{T - T_c}{T_c}\right|\right)^{\frac{1}{2}} = 3^{1/2} \left(\frac{T}{T_c}\right) |\epsilon|^{1/2} \quad (2.115)$$

De lo anterior se ve que cerca a T_c :

$$m \sim |\epsilon|^{1/2} \quad (2.116)$$

Entonces el valor crítico de β es $\frac{1}{2}$.

Derivando (2.111) con respecto a H se encuentra la susceptibilidad magnética y sacando el límite $H \rightarrow 0$ se encuentra la susceptibilidad a campo cero

$$\begin{aligned} \chi &= \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{1 - \tanh^2(J\langle\mathbf{k}\rangle m/kT)}{kT - J\langle\mathbf{k}\rangle(1 - \tanh^2(J\langle\mathbf{k}\rangle m/kT))} \\ &= \frac{1 - m^2}{kT - J\langle\mathbf{k}\rangle(1 - m^2)} \end{aligned} \quad (2.117)$$

Muy cerca de T_c cuando $T \geq T_c$ m es nulo y (2.117) queda

$$\chi = \frac{1}{kT - J\langle\mathbf{k}\rangle} = \frac{1}{k(T - T_c)} \quad (2.118)$$

Esta relación es conocida como la ley de Curie-Weiss

Muy cerca de T_c cuando $T \geq T_c$ la susceptibilidad es expresada usando el hecho de que $m^2 \approx 3(T_c - T)/T_c$ y $1 - m^2 = (3T - 2T_c)/T_c$

$$\chi \approx \frac{1}{2k(T_c - T)} \quad (2.119)$$

Los dos resultados (2.118) y (2.119) muestran la divergencia de la susceptibilidad cerca a T_c , donde el exponente crítico γ encontrado por la teoría de campo medio es $\gamma = 1$.

La magnetización en la isoterma crítica en función de H puede ser calculada expandiendola respecto a H :

$$m = m + \frac{H}{kT_c} - \frac{1}{3}(m + H/kT_c)^3 + \dots \quad (2.120)$$

Para H/kT_c mucho menor que m :

$$m = (3H/kT_c)^{1/3} \propto H^{1/3} \quad (2.121)$$

Que muestra el valor de 3 para el exponente crítico δ .

La energía por espín en la teoría de campo medio es:

$$\frac{E}{N} = -\frac{1}{2}J(\mathbf{k})m^2 \quad (2.122)$$

Como $m^2 = 0$ para $T > T_c$, por encima de la temperatura crítica la energía también es cero y por tanto el calor específico. Para $T < T_c$ y muy cercanas a T_c $m^2 \approx 3(T_c - T)/T_c$ y consecuentemente el calor específico a volumen constante es:

$$c_v = \frac{3k}{2} \quad (2.123)$$

Presentando una discontinuidad en T_c .

La teoría de campo medio da resultados cuantitativamente correctos; sin embargo, cualitativamente están lejos de la realidad. Lo que respecta al valor de la T_c , los mejores resultados corresponden a valores de $\langle k \rangle$ altos (Ver tabla 2.1) [9].

Tabla 2.1 Relación entre la temperatura crítica predicha por la teoría de campo medio y la mejor estimación que se conoce de T_c para las distintas redes regulares.

Red	d	$\langle k \rangle$	T_{cm}/T_c
Cuadrada	2	4	1.763
Hexagonal	2	6	1.648
Diamante	3	4	1.479
Cúbica simple	3	6	1.330
bcc	3	8	1.260
fcc	2	12	1.225

2.5.3 TEORÍA DE LANDAU.

Los resultados de la teoría de campo medio pueden ser obtenidos considerando una expresión fenomenológica de la energía libre. Landau L.D. buscó obtener una expresión unificada de todos los sistemas cerca del punto crítico. Fue precisamente Landau quien sugirió que la transición de fase puede ser caracterizada por un **parámetro de orden**. La Teoría de Landau asume que la energía libre del sistema puede ser expandida en serie de potencias en términos del parámetro de orden, recordando que en el caso de los sistemas ferromagnéticos el parámetro de orden es la magnetización m y que la simetría $m \rightarrow -m$ excluye los términos impares de m , la energía libre se expresa

$$F = c + am^2 + bm^4 + O(m^6) + \dots \quad (2.124)$$

Asumiendo que los términos de orden 6 o mayores son despreciables y minimizando la energía libre:

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 0 \quad (2.125)$$

Lleva a:

$$2am = -4bm^4 \Rightarrow m = 0 \text{ o } m^2 = -\frac{a}{2b} \quad (2.126)$$

La transición ocurre cuando a cambia de signo, entonces a depende de la temperatura así:

$$a = a_0 \epsilon \quad (2.127)$$

Donde a_0 es una constante.

De acuerdo a (2.126) y (2.127)

$$m^2 = \frac{a_0 \epsilon}{2b} \quad (2.128)$$

Obteniendo el exponente crítico $\beta = 1/2$

En medio de un campo externo H la simetría se rompe

$$F = Hm + am^2 + bm^4 \quad (2.129)$$

Y en el punto crítico T_c , $\epsilon = 0$, tenemos

$$F = Hm + bm^4 \quad (2.130)$$

Minimizando F

$$H = 4bm^3 \quad (2.131)$$

Se encuentra que $\delta = 3$.

Minimizando (2.129) y luego derivando para H , se tiene

$$0 = -1 + 2a\chi + 12bm^2\chi \quad (2.132)$$

$$\chi \approx \begin{cases} \frac{1}{2a\epsilon}, & \epsilon > 0 \\ \frac{1}{4a|\epsilon|}, & \epsilon < 0 \end{cases} \quad (2.133)$$

Entonces $\gamma = 1$.

2.5.4 TEORÍAS DE ESCALA.

Hasta ahora se ha visto que el modelo de Ising presenta divergencias en forma de leyes de potencia caracterizadas por exponentes críticos. En general las transiciones de fase se caracterizan por exponentes críticos. Los sistemas críticos pueden agruparse en categorías, donde los sistemas que pertenecen a una misma categoría tienen los mismos exponentes críticos. A este fenómeno se lo conoce como universalidad y a las distintas categorías como clases de universalidad [9,13,14].

Los exponentes críticos no son independientes entre sí y obedecen a las siguientes relaciones conocidas como leyes de escala:

Igualdad de Rushbrooke: $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$

Igualdad de Griffithsh: $\alpha + \beta(1 + \delta) = 2$

Igualdad de Fisher: $(2 - \eta)\nu = \gamma$

Igualdad de Josephson (hiperescala): $d\nu = 2 - \alpha$

Existen un conjunto de hipótesis llamadas teorías de escala que explican las leyes de escala. Las teorías de escala se basan en la divergencia de la longitud de correlación en el punto crítico, donde la longitud de correlación es la única escala relevante del problema [9]. Desde este punto de vista, cuando $\xi \gg 1$, los detalles a escalas pequeñas (escalas $\ll \xi$) se vuelven irrelevantes. Un cambio en los parámetros termodinámicos implica un cambio en ξ y también implica un cambio de escala. Se espera que el cambio de escala no modifique la física del problema, es decir, que la energía libre sea invariante de escala.

Las funciones homogéneas son invariantes de escala. Una función de una variable homogénea se define como aquella que cumple:

$$f(\lambda x) = \lambda^p f(x), \quad \forall \lambda \text{ real} \quad (2.134)$$

Las funciones que cumplen esta relación son funciones de potencia, entonces f tiene la forma:

$$f(x) = Cx^p, \quad C \text{ una constante} \quad (2.135)$$

Una función homogénea generalizada para dos variable se define como:

$$f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda f(x, y), \quad \forall \lambda \text{ real} \quad (2.136)$$

Donde a_x, a_y son números reales.

Tomando un λ que cumpla $\lambda^a x = 1$, entonces $\lambda = \frac{1}{x^{1/a}}$ y

$$f\left(1, \frac{y}{x^{b/a}}\right) = x^{-1/a} f(x, y) \quad (2.137)$$

Definiendo $\tilde{f}(z) \equiv f(1, z)$, entonces

$$f(x, y) = x^{1/b} \tilde{f}\left(\frac{y}{x^{b/a}}\right) \quad (2.138)$$

Retomemos las teorías de escala para los ferromagnetos. Una de las teorías de escala considera a la energía libre como una función que en las proximidades del punto crítico puede ser expresada así

$$F(T, B) = F_r(T, H) + F_s(t, H) \quad (2.139)$$

Donde F_r es la parte analítica de la función y es considerada constante en las proximidades del punto crítico. Mientras tanto F_s es la parte singular de la función y es una función homogénea generalizada

$$F_s(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda F_s(t, H) \quad (2.140)$$

A estas suposiciones se las conoce como hipótesis de Widom en honor a quien las formuló [9].

Mediante las apropiadas derivas de la función libre es posible encontrar los exponentes críticos del ferromagneto en función de a y b , y mediante cálculos simples obtener las leyes de escala. F_s es homogénea generalizada y cumple con (2.138):

$$F(t, B) = \epsilon^{1/b} \tilde{F} \left(\frac{B}{\epsilon^{b/a}} \right) = \epsilon^{2-\alpha} \tilde{F}(B\epsilon^\Delta) \quad (2.141)$$

Siendo $\Delta = \frac{1}{2}(2 - \alpha + \gamma)$. Δ y $\frac{1}{b} = 2 - \alpha$ se obtienen de las relaciones de los exponentes críticos con a y b .

Finalmente, se debe mencionar que la igualdad de Josephson no se cumple para el modelo de Ising en $d > 4$. En esos casos los exponentes críticos obedecen a la teoría de campo medio [9,13,14].

CAPÍTULO III

REDES Y COMPLEJIDAD.

El ferromagnetismo es un fenómeno colectivo, resultado de la interacción de los espines, muchos sistemas reales se comportan de una forma similar, donde existe una sincronía de sus componentes [1,2]. La pregunta en definitiva es ¿cómo las partículas, en el caso de la física, o los distintos elementos que pueden formar un sistema económico, social, ecológico, etc. presentan comportamientos tan complejos cuando interactúan?, o como lo menciona Duncan J. Watts en su libro [1] ¿de qué modo se asocian los comportamientos individuales para dar lugar a un comportamiento colectivo?

Los sistemas colectivos han sido abordados mediante el reduccionismo: el mundo puede ser comprendido en términos de la simplicidad de las propiedades de sus componentes [2]. Mediante esta filosofía los físicos han explicado satisfactoriamente el comportamiento de sistemas compuestos de muchas partículas (átomos, moléculas o electrones). Por ejemplo, se ha explicado el comportamiento de cristales, del gas ideal, el gas de fermi, el condensado de Bose Einstein etc.

El éxito principal de este tratamiento se basa fundamentalmente en la simplicidad de las interacciones de los elementos, no existe ambigüedad de cual partícula interactúa con cual y la intensidad de las interacciones está sujeta a la distancia física que separa a las partículas [7]. ¿Pero qué ocurre cuando se necesita describir sistemas donde la distancia física es irrelevante o existe ambigüedad en el hecho de que si dos partículas interactúan o no? En estos casos el estudio del sistema va más allá del entendimiento de sus componentes individuales.

Un estudio completo debe tratar al colectivo como un todo, donde su estructura es de mucha importancia. El mundo real está formado por sistemas complejos cuyos elementos forman estructuras que determinan su funcionamiento. Los elementos del sistema se conectan de manera que pueden transportar energía, intercambiar información, propagar rumores, etc., formando una red tanto en sentido estructural como dinámico. Las redes naturales presentan topologías no triviales y en ellas se producen fenómenos con propiedades complejas, de ahí su nombre de redes complejas [1].

Las redes desde un punto de vista matemático han sido estudiadas como objetos llamados grafos desde 1736, siendo el pionero Leonhard Euler [1,8,15]. Desde 1950 las redes de larga escala han sido consideradas como grafos aleatorios donde no existe un principio de diseño, estas han sido propuestas como la más simple realización de redes complejas. Los grafos aleatorios fueron estudiados en

sus inicios por Paul Erdos y Alfréd Rényi. De acuerdo a su modelo se parte con N nodos y se conecta a cada par de nodos con una probabilidad p , teniendo como resultado aproximadamente un número total de conexiones igual a $pN(N - 1)/2$ distribuidas aleatoriamente.

Durante mucho tiempo las redes aleatorias fueron propuestas como el modelo de muchos sistemas reales, sin embargo los científicos han profundizado sobre el estudio de las mismas, dando la pauta de que las redes complejas deben contener algún tipo de organización, la cual debe estar de alguna forma codificada en la topología de las mismas [7]. Para este propósito se ha necesitado recurrir a herramientas que hagan posible cuantificar estos principios de organización.

En los últimos años se ha logrado avances significativos en esta dirección, gracias al acceso a las grandes bases de datos ha sido posible el estudio de la topología de muchas redes. De la misma forma, el aumento de la potencia de cálculo de los computadores ha contribuido notablemente para el estudio de las redes con millones de nodos. Con estos trabajos se ha encontrado propiedades de carácter universal, concluyendo que redes complejas de distinta naturaleza poseen características similares [1].

3.1 CONCEPTOS Y DEFINICIONES FUNDAMENTALES DE LA TEORÍA DE GRAFOS

Para el presente trabajo es necesario mencionar algunos resultados de la teoría de grafos. Definiciones y conceptos básicos son expuestos a continuación.

3.1.1 DEFINICIONES FUNDAMENTALES.

Grafo.

Un grafo G es un par (V, E) donde tanto V como E son conjuntos. V es un conjunto de nodos y E es un subconjunto de $V \times V$ (conjunto de aristas). Gráficamente un grafo es representado por puntos (nodos) unido por líneas (aristas) ver **Fig. 3.1**.

Un grafo se llama finito si su número de vértices es finito.

Las **aristas** son las conexiones (gráficamente las líneas) que ligan a los **nodos**.

Sea una arista que une a dos nodos a y b , si ella carece de dirección se la denota por $\{a, b\}$ o por $\{b, a\}$ indistintamente. A los nodos a y b se los llama extremos de la arista $\{a, b\}$

Grafos no dirigidos.

Un grafo no dirigido es un grafo $G_{nd}(V, E)$ donde: $E \subseteq \{x: x \in P(V)\}$, siendo $P(V)$ el conjunto de pares no ordenados de elementos de V , de manera que:

Sean $a, b \in V$ y $\{a, b\}, \{b, a\} \in E$, entonces $\{a, b\} = \{b, a\}$

Grafos dirigidos.

Un grafo dirigido es un grafo $G_d(V, E)$ donde: $E \subseteq \{(a, b) \in V \times V\}$, es un conjunto de pares ordenados de V , de manera que:

Sea $\{a, b\} \in E$, a es su nodo inicial y b su nodo final, mostrando una dirección de a a b .

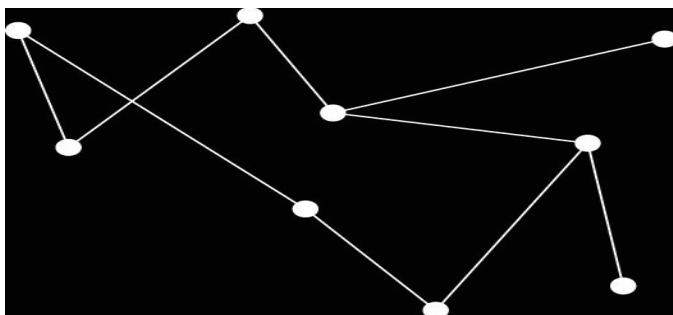


Fig. 3.1 Representación gráfica de un grafo

Orden de un grafo

El número de nodos existentes en el grafo se conoce como orden del grafo.

Grado de un nodo.

Se llama grado de un nodo al número de aristas de los que es extremo

Vértices Adyacentes.

Dos nodos a y b son adyacentes si existe una arista $\{a, b\} \in E$ que los une.

Camino.

Sean $x, y \in V$, se dice que existe un camino en G de x a y si existe una sucesión finita no vacía de aristas: $(\{x, V_1\}, \{V_1, V_2\}, \{V_2, V_3\}, \dots, \{V_N, y\})$.

En tal caso se tiene que:

- 1 Los extremos del camino son x e y .
- 2 Al número de aristas se lo llama **longitud de camino**.

Distancia entre nodos (Longitud de camino más corta)

Se define la distancia entre dos nodos como el camino más corto que los separa. La distancia entre un nodo i y nodo j se la nota como l_{ij} . Si dos nodos están en dos partes desconectadas del grafo, se define $l_{ij} = \infty$.

La cantidad l_{ij} para grafos no dirigidos es simétrica $l_{ij} = l_{ji}$. Lo que necesariamente no sucede para grafos dirigidos.

Diámetro de un grafo.

En base a la distancia entre nodos es posible definir el diámetro de un grafo G como:

$$d_G = \text{máx}_{i,j} l_{ij} \quad (3.1)$$

3.1.2 LONGITUD DE CAMINO PROMEDIO Y COEFICIENTE DE AGRUPAMIENTO.

Longitud de camino promedio

La longitud de camino promedio se define como el valor promedio de los l_{ij} de todos los posibles $N(N - 1)$ pares que se pueden formar con los N nodos de la red. Entonces

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N - 1)} \sum_{i,j} l_{ij} \quad (3.2)$$

Nota: d_G es cota superior de $\langle l \rangle$.

Coeficiente de Agrupamiento.

Es importante conocer la estructura de la vecindad local de un nodo. Muchas redes naturales exhiben una tendencia de formar agrupaciones entre nodos de la red. El agrupamiento radica en que dos nodos conectados a un tercero por lo general están conectados entre sí. En forma general, la medida del agrupamiento consiste en obtener el grado en que dado un nodo, los nodos que están conectados a este también lo están entre sí.

Para cuantificar el agrupamiento se define el coeficiente de agrupamiento $C(i)$ de un nodo i con grado k_i , como la relación entre el número de conexiones existentes E_i con el número de conexiones posibles $k_i(k_i - 1)/2$. Entonces

$$C(i) = \frac{2E_i}{k_i(k_i - 1)} \quad (3.3)$$

El coeficiente de agrupamiento de toda la red es el promedio sobre el número total de nodos.

3.1.3 EJEMPLOS DE GRAFOS.

Grafos Regulares

Grafo regular es el grafo cuyos nodos tienen un mismo grado k . Al grafo se lo denomina k _regular.

Grafos Completos.

Un grafo completo es aquel cuyos nodos están todos conectados entre sí. Todo grafo completo es regular.

Grafos aleatorios.

Son grafos cuyas conexiones han sido efectuadas a través de un procedimiento aleatorio.

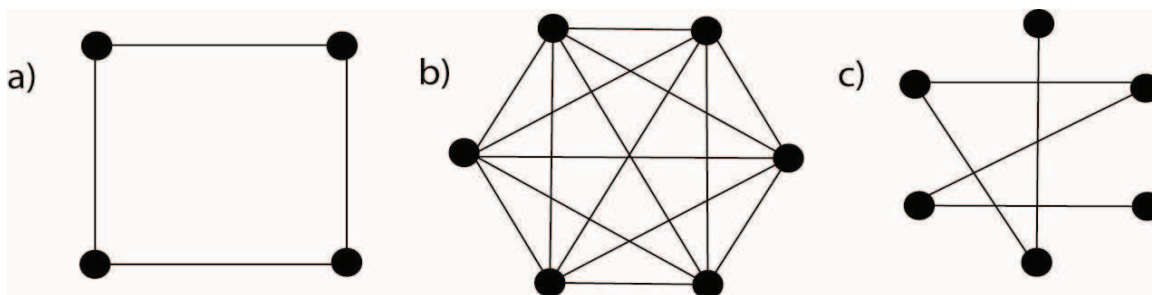


Fig. 3.2 Ejemplos de grafos. a), b) Grafos regulares y c) Grafo aleatorio

3.1.4 MATRIZ DE ADYACENCIA DE UN GRAFO.

- **Definición Matriz de Adyacencia**

Sea un grafo G de orden n , se llama matriz de adyacencia del grafo a la matriz $A = (a_{ij})$ tal que $a_{ij} = 1$ si $\{i, j\} \in E$ y $a_{ij} = 0$ en otro caso.

Esta matriz es simétrica para el caso de los grafos no dirigidos.

Ejemplo:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

- **Teorema.**

Sea G un grafo de n nodos con $n > 1$ y sea A su matriz de adyacencia. Se cumple que el valor del coeficiente a_{ij}^k de la matriz A^k es igual al número de caminos de k longitud con extremos i y j .

Demostración

Demostración por inducción:

- **Sea $k = 1$, por demostrar que a_{ij}^1 de A^1 es igual al número de caminos de longitud 1 con extremos i y j .**

Lo anterior queda demostrado simplemente al notar que $A^1 = A$ y por definición la matriz de adyacencia indica si existe camino de longitud 1 entre i y j .

- **Supóngase que es cierto para k , por demostrar que es cierto para $k + 1$.**

Nótese que $A^{k+1} = A^k A$, de esto se sabe que el término a_{ij}^{k+1} es el resultado de multiplicar la fila i de A^k con la columna k de A .

Por otro lado, el número de caminos de i a j que pasan por el nodo 1 antes de conectarse con j es 0 si no existe arista entre 1 y j , caso contrario coincidirá con el número de caminos de longitud k entre i y 1.

Nótese que el número de caminos con longitud k entre i y 1 es el primer elemento de la fila i de A^k , y el primer elemento de la columna j de A vale 0 o 1 dependiendo de si hay arista entre 1 y j . Se tiene que el número de caminos de longitud $k + 1$ entre i y j que por último lugar pasan por 1 será siempre $a_{i1}^k a_{1j}$.

De forma análoga, el número de caminos entre i y j que por último pasen por el nodo 2 será $a_{i2}^k a_{2j}$

Y sucesivamente para todas las posibilidades, que da como resultado que el número de caminos entre el nodo i y el nodo j sea $a_{i1}^k a_{1j} + a_{i2}^k a_{2j} + \dots + a_{in}^k a_{nj}$. Es decir el término (i, j) de la matriz A^{k+1} .

3.1.5 DISTRIBUCIÓN DE GRADO.

La distribución de grado en un grafo no dirigido se define como la probabilidad $P(k)$ de que un nodo escogido al azar tenga grado k . La distribución de grado de un grafo se obtiene construyendo el histograma normalizado del grado de los nodos de la red [8]. En el caso de los nodos dirigidos se encuentran dos distribuciones de grado, una de entrada $P_{en}(k_1)$ y otra de salida $P_{sal}(k_2)$. Las distribuciones anteriores representan la probabilidad de que un nodo escogido al azar tenga grado k_1 de entrada y grado k_2 de salida.

El grado promedio $\langle k \rangle$ de un grafo es definido como el promedio del valor de los grado de todos los nodos en la red

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N k_i = \sum_{i=0}^N P(k_i) k_i \quad (3.5)$$

- **Distribución de grado de grafos aleatorios.**

El modelo de Erdős y Rényi produce una distribución de grado binomial [7,8,14].

$$P(k) = Cp^k(1 - p)^{N-1-k} \quad (3.6)$$

Donde C representa el número de posibilidades en que se pueden seleccionar los k nodos para formar las conexiones.

El valor esperado de n es $E(n) = pN(N - 1)$ lo que conlleva a que $\langle k \rangle$ sea igual a:

$$\langle k \rangle = \frac{2n}{N} = p(N - 1) \approx pN \quad (3.7)$$

El siguiente programa de Matlab crea una red aleatoria utilizando el modelo de Erdős y Rényi. Ver histograma Figura 3.3.

```

1 function [A,k]=redaleat(N,p)
2 - A=sparse([]);
3 - for i=1:N-1
4 -     for j=i+1:N
5 -         if rand<p
6 -             A(i,j)=1;
7 -             A(j,i)=1;
8 -         end
9 -     end
10 - end
11 - k=sum(A);
12 - x =[1:2*p*N];
13 - hist(k,x);

```

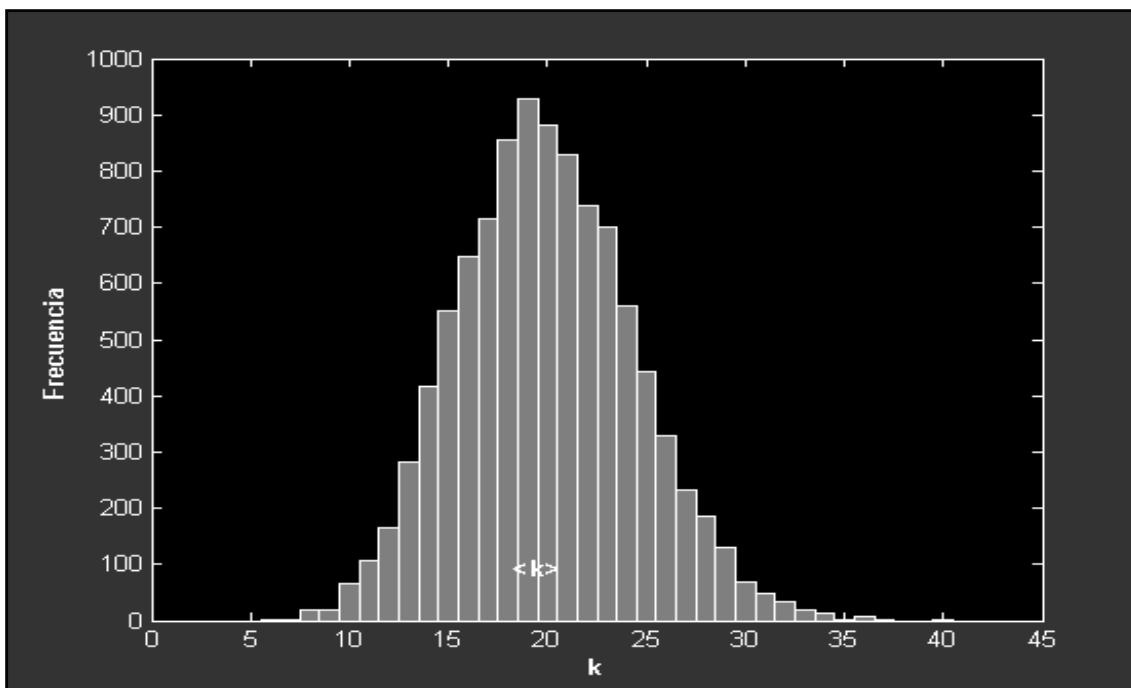


Fig. 3.3. Distribución de grado de la simulación en Matlab de un grafo aleatorio. Se ha generado un grafo aleatorio con $N = 10000$ nodos y $p = 0.002$.

3.2 REDES COMPLEJAS DEL MUNDO REAL

El mundo en el que vivimos no es un mundo simple y “aburrido”. Nuestro entorno no está conformado solamente por gases simples que pueden ser aproximados a un gas ideal o por materiales de estructuras cristalinas. Por ejemplo la superficie de la tierra es un conglomerado de montañas, océanos, islas, ríos, volcanes, glaciales y fallas geográficas, los paisajes que nos rodean varían de lugar a lugar y de era a era, entonces es conveniente definir a los sistemas con variabilidad grande como **complejos**

Aunque los sistemas físicos están regidos por leyes relativamente simples, ellos presentan comportamientos complejos. Si se observa la naturaleza se encuentra un conjunto de elementos que conforman un todo con propiedades muy diversas. Tales propiedades no son necesariamente manifestaciones de los elementos de los sistemas. Lo interesante son las interacciones de los componente, ellas determinan su comportamiento colectivo.

Como se menciona en [2], un comportamiento complejo refleja la tendencia de sistemas grandes con muchos componentes a atravesar estados críticos y pequeñas perturbaciones pueden llevar a resultados catastróficos en todo el sistema. Pues bien, los componentes de los sistemas complejos pueden ser

vistos como elementos que interactúan entre sí formando redes. Estas redes que se encuentran en la naturaleza presentan topologías no triviales.

El estudio de las redes naturales busca aclarar por qué ellas poseen propiedades universales a pesar de ser de distinta naturaleza y de cómo estas propiedades afectan a la dinámica de los procesos.

3.2.1 REDES DE MUNDO PEQUEÑO.

La longitud de camino promedio permite obtener una idea de lo “lejos” que están entre sí los nodos de una red. Por ejemplo si en una red sus nodos intercambian información, es de mucha importancia considerar que tan fácil es enviar un dato desde un nodo a cualquier otro. Inmediatamente se espera que, en una red donde la longitud de camino promedio sea pequeña, el envío de información se vea favorecido.

La cuestión es ¿la redes reales poseen $\langle l \rangle$ pequeños? efectivamente, un primer indicio de esta cualidad fue encontrado en redes sociales. El fenómeno llamado de mundo pequeño descubierto por el psicólogo social Stanley Milgram plantea que en una red de amigos la distancia entre dos personas cualquiera es corta [1]. Muchos análisis de otro tipo de redes reales también presentan cualidad de mundo pequeño, ello sugiere que el modelamiento de las redes reales debe tomar en cuenta esta propiedad.

Ya se ha dicho que las redes aleatorias han sido consideradas como un modelo para las redes reales. Por ello es importante determinar si en ella se presenta el fenómeno de mundo pequeño; es decir, medir la longitud de camino promedio.

Para ello se necesita retomar el modelo de Erdős y Rényi. La distribución de grado de las redes formadas por este modelo es binomial y está dada por (3.6). En el límite $N \rightarrow \infty$ tal distribución puede ser aproximada a la distribución de poisson.

$$P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!} \quad (3.8)$$

Donde $\langle k \rangle = Np$. A menudo el análisis de las redes reales consiste en determinar directamente $\langle k \rangle$ más no p . Considerando esto, p puede ser encontrado así:

$$p = \frac{\langle k \rangle}{N} \quad (3.9)$$

Para cualquier nodo, la probabilidad de que dos nodos cualesquiera conectados al primero estén conectados entre sí es p . Inmediatamente se tiene que el coeficiente de agrupamiento es:

$$\langle C \rangle = p = \frac{\langle k \rangle}{N} \quad (3.10)$$

Que muestra que para valores fijos de $\langle k \rangle$, el coeficiente de agrupamiento de la red $\langle C \rangle$ decrece con el tamaño de la misma. Que es de esperar ya que el coeficiente de agrupamiento evidencia el grado de orden de la red. El carácter aleatorio del modelo de Erdős y Rényi por definición no presenta ningún orden.

Por otra parte, el número de vecinos a distancia 1 de un nodo cualquiera es $\langle k \rangle$. Considerando la naturaleza aleatoria del grafo, se puede estimar el número de vecinos a una distancia d de la siguiente forma $\langle k \rangle^d$. Esta cantidad crece exponencialmente con el valor de d . Definiendo d' tal que $\langle k \rangle^{d'} \approx N$, la mayoría de nodos estarán a una distancia d' de un nodo i , entonces se puede aproximar la longitud de camino promedio con d' :

$$\langle l \rangle \approx \frac{\ln N}{\ln \langle k \rangle} \quad (3.11)$$

Esto muestra un crecimiento logarítmico con el valor de N y es el comportamiento encontrado en redes de mundo pequeño.

Nota: Para el caso del grafo cuya distribución de grado se muestra en la figura 3.3, se ha encontrado mediante un cálculo en matlab, que el coeficiente de agrupamiento de la red es 0.002, el cual coincide con el valor de p .

Regresando al problema de mundo pequeño, aunque los grafos aleatorios presenten esta cualidad no modelan otras propiedades importantes de las redes reales. Así como los seres humanos tienden a formar grupos de amistad de acuerdo a su afinidad, en muchas de las redes reales complejas también se presentan agrupaciones de sus nodos. Dicho de otra forma el coeficiente de agrupamiento es alto.

Muchas de las redes reales, si no todas, presentan un coeficiente de agrupamiento mucho mayor que su equivalente red aleatoria (red con el mismo número de nodos y mismo promedio de grado) [7]. Entonces, es fundamental considerar que las redes aleatorias obvian propiedades importantes que están presentes en el mundo real.

3.2.2 REDES SIN ESCALA.

László Barabási, un físico de origen Húngaro de la Universidad de Notre Dame, y su alumno Réka Albert se centraron en el estudio de las distribuciones de grado de las redes reales. Para ello estudiaron datos disponibles de redes complejas. Lo que ellos demostraron fue que muchas de las redes del mundo real tienen distribuciones de grado completamente diferentes a la de Poisson. Las redes reales a menudo presentan distribuciones de grado que siguen una ley potencial.

La ley potencial difiere mucho de una distribución de Poisson, ella no exhibe un pico en su valor medio y los valores que toma la variable aleatoria tienen un peso cercano al valor medio de forma similar a la distribución normal. Por ejemplo en la distribución de estatura de las personas el valor medio tiene un pico y todos los valores posibles están cercanos a este valor medio. En el caso de la ley potencial esto no ocurre y la cola de la distribución se aleja del valor medio. Ver Fig. 3.4

A las redes cuya distribución de grado sigue una ley potencial se las conoce como redes sin escala. Esto se debe a que la distribución de ley potencial se extiende sin producir un corte, a diferencia de una distribución normal donde sí existe. Las redes sin escala tienen la característica de que muchos nodos están “pobrementemente” conectados, mientras que muy pocos nodos en la red presentan un alto grado de conexiones.

La ley potencial depende de un exponente α :

$$p(k) \sim k^{-\alpha} \quad (3.12)$$

El origen de la distribución de Poisson se debe a que cada nodo tiene igual probabilidad de formar una nueva conexión independientemente de cuantos posea al momento. Sin embargo, según Barabási y Albert, en la vida real esto no se produce ya que los nodos que poseen más conexiones tienen mayor probabilidad de formar nuevas conexiones [1,7].

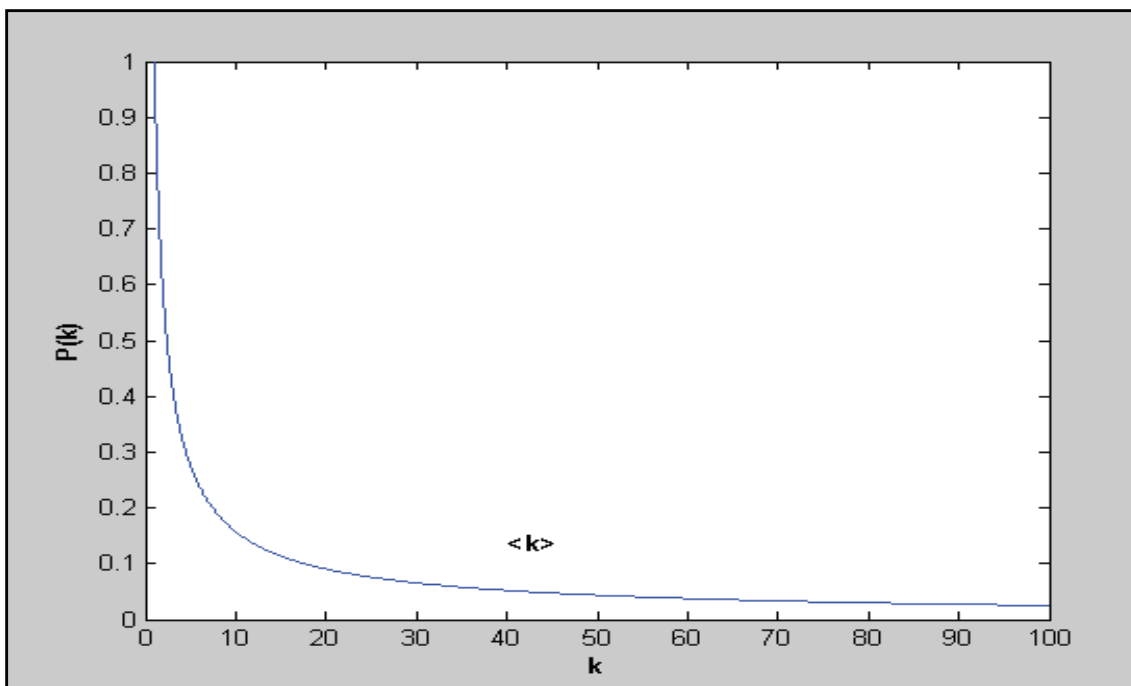


Fig. 3.4. Distribución de ley potencial. No existe un pico en el valor medio de la distribución.

Muchas redes de mundo real son sistemas abiertos que crecen porque continuamente se añaden nuevos nodos. Al principio en el sistema existen un número pequeño de nodos, el número de nodos va incrementando con el tiempo. Por ejemplo, la World Wide Web crece en el tiempo porque continuamente se adicionan nuevas páginas web al sistema. Muchas redes de mundo real también presentan enlaces preferenciales, tal que un nodo nuevo tiene más probabilidad de conectarse a nodos con alto grado de conectividad. Por ejemplo, preferentemente un nuevo link aparecerá en alguna página web con mayor conectividad por ser más conocida y fácil de encontrar.

Estas dos consideraciones, crecimiento y enlace preferencial dieron origen al modelo creado por Barabási y Albert. El algoritmo del modelo Barabási–Albert para crear redes sin escala es el siguiente:

1. **Crecimiento.** Se parte con un número pequeño m_0 de nodos, en cada iteración se añade un nuevo nodo con m aristas ($m \leq m_0$), que lo conectan a m diferentes nodos ya existentes en la red.
2. **Enlace preferencial.** ya que la elección de los nodos a los cuales el nuevo nodo se conectará depende del grado de los mismos, se asume que la probabilidad Π que un nuevo nodo sea conectado a un nodo i depende del grado k_i del nodo i , donde:

$$\Pi(k_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j} \quad (3.13)$$

Luego de t pasos se tendrá $N = m_0 + t$ nodos. La simulación numérica indica que la red obtenida a partir de este algoritmo es una red de libre escala cuyo exponente depende del valor m .

El siguiente programa de Matlab aplica el algoritmo del modelo Barabási-Albert para obtener redes sin escala. La fig 3.5 muestra una distribución de grado obtenida a partir de una simulación numérica.

```

1  %función que crea una red de libre escala según el modelo de
2  %Barabási-Albert
3  function [A,k]=barababert(mo,m,T)
4  - k=ones(1,mo);
5  - A=sparse([]);
6  - for t=1:T
7  -     i=mo+t;
8  -     for w=1:m %En esta parte se escojen m nodos
9  -         v=[1:mo+t-1];
10 -         u=rand;
11 -         P=0;
12 -         n=0;
13 -         j=0;
14 -         p=k/sum(k);%probabilidad de ser escogido depende de su grado
15 -         while j==0
16 -             if u<P
17 -                 j=v(n);
18 -             else
19 -                 n=n+1;
20 -                 P=P+p(n);
21 -             end
22 -         end
23 -         k(j)=0; % se hace cero para no escojerlo de nuevo
24 -         A(i,j)=1;
25 -         A(j,i)=1;
26 -     end
27 -     % El grado de los nodos es actualizado cada vez que ingresa un nuevo
28 -     % nodo al sistema
29 -     k=sum(A);
30 - end;
31
32 - kf=(full(max(k)))/2;
33 - x=[1:kf];
34 - hist(k,x);

```

El modelo Barabási-Albert reproduce exitosamente la distribución de libre escala que siguen muchas redes reales; además, las redes creadas por este modelo presentan que la longitud de camino promedio se incrementa aproximadamente con el logaritmo de N . El mejor ajuste sigue un algoritmo generalizado de la siguiente forma:

$$l = A \ln(N - B) + C \quad (3.14)$$

El coeficiente de agrupamiento del modelo Barabási-Albert decrece con el tamaño de la red que aproximadamente sigue una ley potencial.

$$C \sim \langle k \rangle N^{-0.75} \quad (3.15)$$

Aunque este comportamiento indica un decremento más lento del coeficiente que en el caso de los grafos aleatorios, ver (3.10), no describe la realidad. Pues las redes reales poseen un coeficiente de agrupamiento alto.

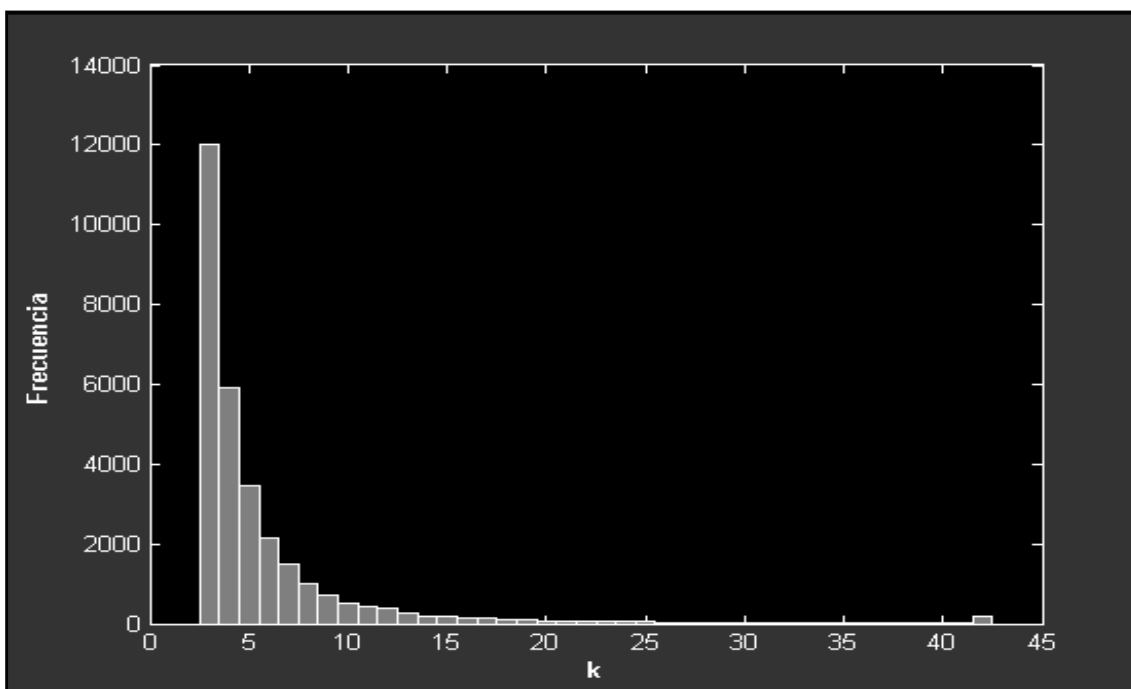


Fig. 3.5 Distribución de ley potencial obtenida con el modelo Barabási-Albert. Simulación de la evolución de la red con $N = m_0 + t=30003$ y $m_0 = m = 3$.

3.2.3 ALGUNAS REDES DEL MUNDO REAL.

La ayuda de la computación ha permitido la manipulación de grandes cantidades de datos de muchas redes de gran tamaño [7,8]. Estos análisis han servido para encontrar información sobre las estructuras de las redes y las propiedades funcionales. Dentro de las redes que se encuentran en el mundo real se encuentran las redes biológicas, sociales, ecosistemas, el internet, el World Wide Web (www), las redes eléctricas de los grandes países, etc.

Todas estas redes presentan características estructurales muy importantes pero en ellas también se producen procesos dinámicos. Por ejemplo en el caso de las

redes eléctricas se propaga energía, en una red social se puede propagar rumores, en el internet información, etc. Las estructuras de las redes influyen en la dinámica de ellas y en los fenómenos críticos que se pueden dar.

Es importante mencionar algunos ejemplos de redes y algunas propiedades que ellas poseen al describirlas como grafos.

Internet

La red del internet está caracterizada por los links físicos que conectan las computadoras, los routers y otros dispositivos. Esta es una red difícil de analizar por su rápido crecimiento y las diversas tecnologías que conllevan conectividades no homogéneas [8], pero en años recientes muchos investigadores han empezado a crear estructura y tecnología para poder estudiarlas.

Dicho estudio se lo ha hecho considerando dos niveles. El nivel de routers, donde cada router es considerado como un nodo y los vértices son las conexiones físicas entre ellos. El segundo nivel consiste en el grafo del sistema autónomo del internet, el cual consiste en los dominios administrativos autómatas que en principio corresponden a los proveedores de internet y a las organizaciones [7,8]. Faloutsos et al. (1999) ha estudiado los dos niveles encontrando que en ambos casos la distribución de grado sigue una ley de potencia [7].

El internet también exhibe agrupamiento y longitud de camino promedio pequeña. Yook et al. (2001a) y Pastor-Satorras et al (2001) estudiaron al internet con respecto al segundo nivel y encontraron que el coeficiente de agrupamiento está entre 0.18 y 0.3 comparado con 0.001 de un grafo aleatorio de la misma escala. La longitud de camino promedio encontrada por ellos en el mismo nivel fue de 3.7 y en el nivel de routers la longitud de de camino promedio fue de 9, lo que indica una naturaleza de mundo pequeño [7].

World Wide Web

La World Wide Web es una red virtual que existe en el internet. Esta red es quizá la red más grande para la cual la información sobre su topología es accesible. Los nodos de la red son las páginas web y las aristas son los hipervínculos que ligan un documento a otro. Esta red al igual que el internet tiene un gran crecimiento, ya para 1999 tenía cerca de mil millones de nodos (Lawrence and Giles, 1998, 1999). Esta red también presenta una distribución de grado que sigue una ley de potencia (Albert, Jeong, and Barabási, 1999; Kumar *et al.*, 1999).

La World Wide Web es un grafo direccionado entonces la red está caracterizada por dos distribuciones de grado. $P_{en}(k)$ representa la probabilidad de que un nodo tenga k hipervínculos que direccionen hacia ese nodo y $P_{sal}(k)$ consiste en la

probabilidad de que este nodo tenga k hipervínculos apuntando a sus respectivos nodos.

Ambas $P_{en}(k)$, $P_{sal}(k)$ siguen una ley de potencia.

$$P_{en}(k) \sim k^{-\gamma_{en}} \text{ y } P_{sal}(k) \sim k^{-\gamma_{sal}}$$

Los parámetros γ_{en} y γ_{sal} han sido estudiados por Albert, Jeong, y Barabási (1999). Ellos analizaron un subconjunto de la red World Wide Web que contiene 325729 nodos, encontrando $\gamma_{en} = 2.1$ y $\gamma_{sal} = 2.45$. Kumar *et al.*

(1999) estudió 40 millones de documentos de rastreo por Alexa Inc., obteniendo $\gamma_{en} = 2.1$ y $\gamma_{sal} = 2.38$. Otro estudio hecho por Broder *et al.* (2000) utiliza dos rastreos de Altavista (1999) conteniendo 200 millones de documentos, obteniendo $\gamma_{en} = 2.1$ y $\gamma_{sal} = 2.72$.

Más allá de que esta red tenga una cantidad enorme de nodos ella presenta propiedades de mundo pequeño. Como lo muestran Albert, Jeong, y Barabási (1999). La longitud de camino promedio para una cantidad de 325729 modos es de 11.2 y predijeron usando escalamiento finito que para la red completa la longitud de camino promedio sería de 19 [7,8].

El coeficiente de agrupamiento no puede ser determinado directamente por la definición (3.3) ya que el grafo es dirigido. Sin embargo para el cálculo es posible hacer que cada vértice sea bidireccional haciéndolo no dirigido. Adamic (1999) realizó este trabajo para 153127 nodos encontrando un coeficiente de agrupamiento $C = 0.1078$, un orden de magnitud más alta que un grafo aleatorio de las mismas dimensiones y promedio de grado que tiene $C_{alt} = 0.00023$.

Redes sociales.

Las redes sociales han sido objeto de estudio de sociólogos, matemáticos, físicos, etc. que han contribuido para el entendimiento de las interacciones de las personas. Las redes sociales son otras de las redes comprendidas dentro de la complejidad. Las relaciones de amigos, las redes de relaciones sexuales, las relaciones económicas entre las personas, etc. poseen propiedades interesantes en su topología (fig. 3.6).

En las redes de amigos es común formar grupos, por lo general los amigos de alguien son amigos entre sí. Otra cuestión interesante es que la mayoría de personas conoce a una cantidad similar de amigos. Sin embargo, muy pocas personas poseen la fama y la popularidad para tener cientos de amigos, esto se debe a que la red de amigo posee una distribución de grado distinta a la de poisson.

El experimento del psicólogo Stanley Milgram muestra a la red de amigos, como una red de mundo pequeño. Muchas redes sociales también presentan esta característica [1], facilitando, por ejemplo, la propagación de rumores o noticias falsas [1,3]; y en el caso de una red de relaciones sexuales la cercanía entre las personas determina un mayor riesgo a contraer enfermedades como el SIDA.

El acceso masivo de la humanidad a las tecnologías de la información ha permitido realizar estudios sobre muchas interacciones de carácter electrónico. Se han realizado análisis del intercambio de emails en grandes corporaciones e instituciones académicas (Ebel, Mielsch and Bornholdt, 2002; Newman, Forrest and Balthrop, 2002) [8].

Una red social que se ha estudiado cualitativamente es el que respecta a la colaboración de actores. Esta red consiste en definir un lazo entre dos actores si ellos han trabajado juntos en alguna película. La red de colaboración de actores también presenta cualidades de mundo pequeño [3].

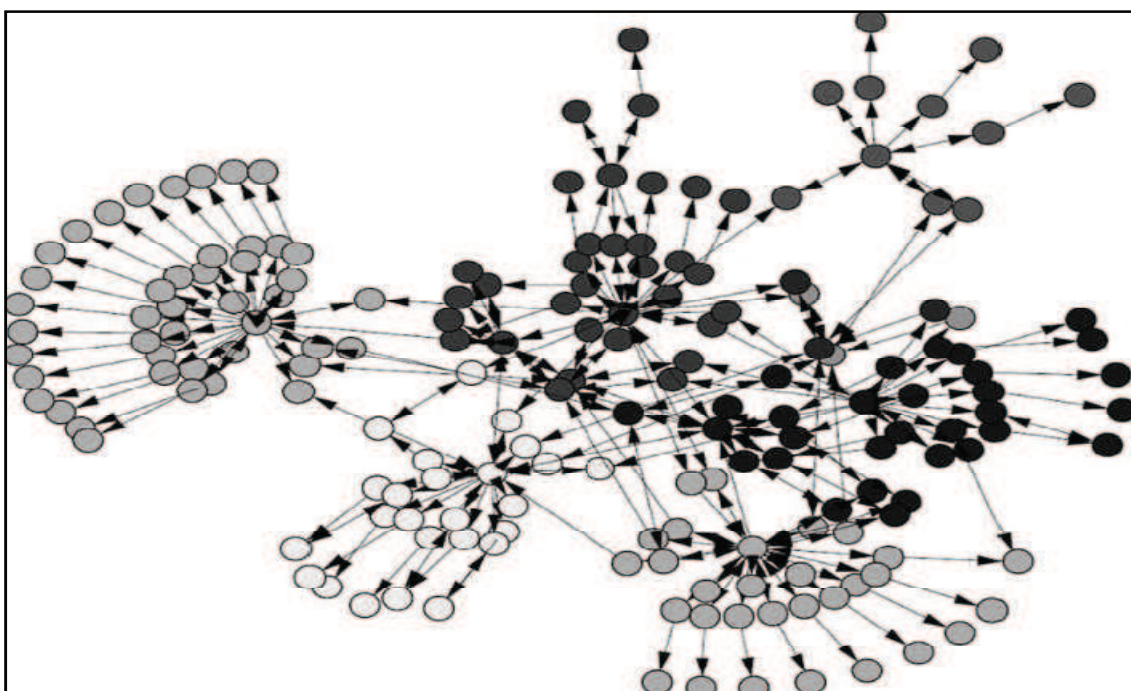


Fig. 3.6 Reprerentación gráfica de las redes sociales

Redes neuronales

Otro tipo de redes son las neuronales cuyos nodos son neuronas y los vértices representan a la sinapsis entre las células. Watts y Strogatz (1998) estudiaron la red neuronal del gusano *Caenorhabditis elegans*, esta red está compuesta de

pocos nodos ($N = 282$) [7]. Encontraron que esta red neuronal se muestra como una de mundo pequeño [3,7].

La cualidad de mundo pequeño es una de las muchas propiedades que se pueden estudiar en la estructura de las redes neuronales. El estudio de estas estructuras ha llevado a querer reproducirlas de forma artificial con el objeto de crear redes neuronales artificiales [4]. Es así que el desarrollo de herramientas en el ámbito de las redes complejas ha servido para aplicarlas en el campo de la neurociencia [7,8].

Las redes neuronales son de principal interés porque ellas se producen fenómenos extraordinarios como la percepción, la memoria, el lenguaje, etc. Desde este punto de vista es de mucha importancia investigar sobre la relación de tales fenómenos con las estructuras de las redes.

3.3 MODELOS DE REDES DE MUNDO PEQUEÑO.

Tanto los grafos aleatorios como el modelo de Barabási-Albert son modelos de redes que tienen propiedades de mundo pequeño. Pero como se mencionó, las redes reales presentan otra característica, sus coeficientes de agrupamiento son grandes [1,3-8]. Tanto las redes aleatorias como las obtenidas por Barabási-Albert poseen coeficientes de agrupamiento que decaen con el tamaño de la red. Ambos modelos no describen un coeficiente de agrupamiento grande que es la cualidad de las redes reales.

Por otro lado, el coeficiente de agrupamiento de las redes reales no depende del tamaño de la red, esta propiedad también es una característica de las redes ordenadas. Por ejemplo, el caso de red unidimensional con condiciones de frontera periódicas (anillo de nodos), en donde cada nodo está conectado a los K nodos más cercanos (Ver fig. 3.7). Para tal red el coeficiente de agrupamiento es

$$C = \frac{3(K-2)}{4(K-1)} \quad (3.16)$$

El cual converge a $\frac{3}{4}$ para valores altos de k . Sin embargo, estas redes no presentan propiedades de mundo pequeño. La distancia promedio entre los nodos crece proporcionalmente con N lo cual difiere del crecimiento logarítmico presente en los grafos aleatorios.

3.3.1 MODELO WATTS-STROGATZ (WS)

Watts y Strogatz (1998) desarrollaron un modelo que interpola entre una red regular de dimensión finita y un grafo aleatorio (Fig. 3.6). El objetivo es obtener redes que posean cualidades de mundo pequeño y un alto coeficiente de agrupamiento.

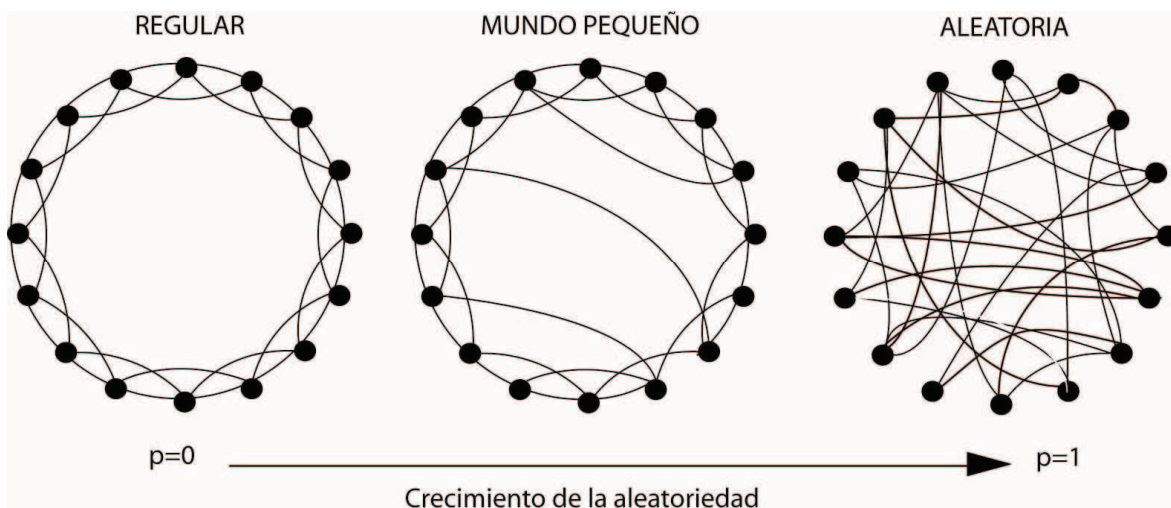


Fig. 3.7 Representación gráfica de la construcción de una red de mundo pequeño según el modelo Watts-Strogatz. Este modelo interpola entre una red regular y una red aleatoria.

Modelo para el caso unidimensional:

- 1. Partir con orden:** partir con un anillo de N nodos, donde cada nodo está conectado a sus K vecinos más cercanos ($K/2$ nodos a cada lado). Para construir una red dispersa pero conectada es importante considerar $N \gg K \gg \ln N \gg 1$.
- 2. Aleatoriedad:** Aleatoriamente reconectar con probabilidad p a cada arista de la red (manteniendo fijo un extremo de cada arista en dirección de izquierda a derecha), considerando que las conexiones duplicadas y auto conexiones sean excluidas.

Modelo para el caso bidimensional:

1. **Partir con orden:** partir con una red regular de lado L ($N = L \times L$ nodos), donde cada nodo está conectado a sus K vecinos más cercanos ($K/2$ nodos en cada dirección).
2. **Aleaoriedad:** Aleatoriamente reconectar con probabilidad p a cada arista de la red (manteniendo fijo un extremo de cada arista en direcciones de izquierda a derecha y arriba a abajo), considerando que las conexiones duplicadas y auto conexiones sean excluidas.

3.3.1.1 LONGITUD DE CAMINO PROMEDIO Y COEFICIENTE DE AGRUPAMIENTO.

El modelo Watts-Strogatz permite analizar el proceso de transición entre una red regular y una red aleatoria dependiendo del parámetro p . Y se puede examinar las propiedades heredadas tanto del grafo regular como del aleatorio. Se espera que para ciertos valores de p haya una coexistencia de longitud de camino pequeña y un agrupamiento de los nodos [3-8]. Watts y Strogatz estudiaron el comportamiento del coeficiente de agrupamiento y la longitud de camino promedio en función del parámetro p .

Para un anillo, $l(0) \approx \frac{N}{2k} \gg 1$ y $C(0) \approx 3/4$, obteniendo valores de l y C altos. En el otro extremo, el parámetro p toma valores cercanos a 1, la red converge a un grafo aleatorio y por tanto $l(1) \sim \ln N / \ln K$ y $C(1) \sim K/N$. Estos dos resultados muestran que en los límites los valores altos de l van de la mano con valores altos de C y valores pequeños de l con valores pequeños de C . Sin embargo, Watts y Strogatz también encontraron que existe una región muy amplia de valores de p en donde $l(p)$ está muy cercano a $l(1)$ pero $C(p)$ es mucho mayor que $C(1)$ (Ver fig. 3.8). En esta región $l(p)$ cae rápidamente pero $C(p)$ lo hace lentamente, lo que produce que la red obtenida tenga un coeficiente de agrupamiento alto y al mismo tiempo una longitud de camino promedio pequeña [4,6]. Esto es consistente con las propiedades de las redes de mundo pequeño reales.

La Longitud de camino promedio l de la red Watts-Strogatz se comporta de distinta manera según el valor de p . Para valores de p pequeños, l crece linealmente con el tamaño de la red; mientras que para valores de p grandes, l crece logarítmicamente. Como se dijo antes, en una región de p , l cae

rápidamente, esto se debe a que en esta región el apareamiento de un número pequeño de caminos cortos afecta a toda la red, provocando la caída drástica de la longitud de camino promedio.

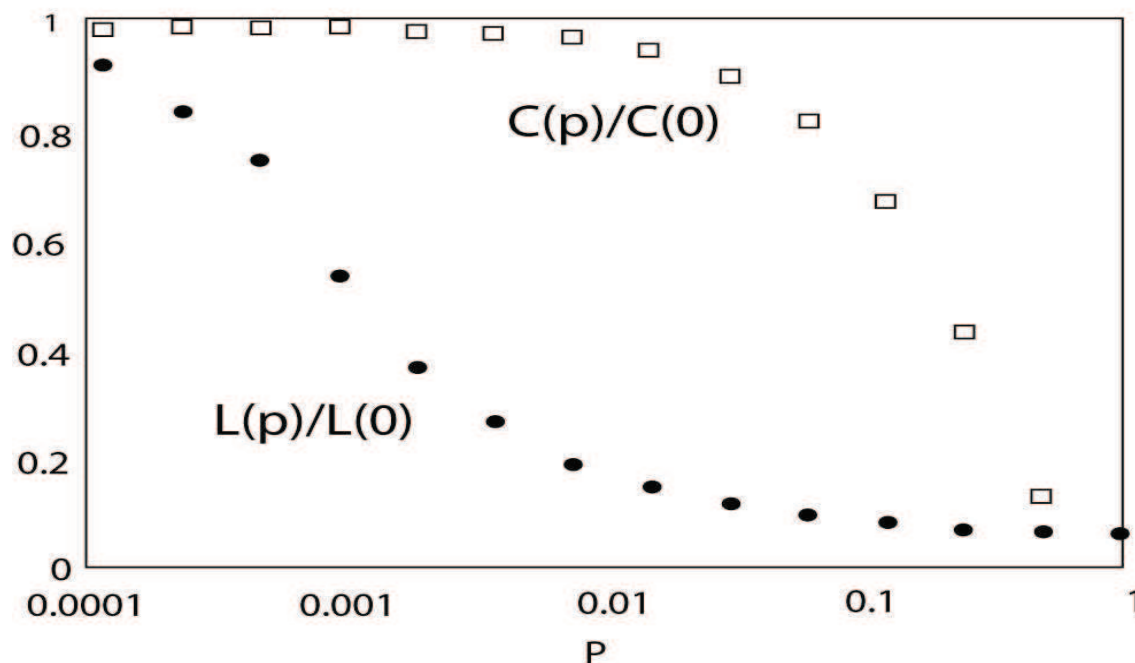


Fig. 3.8 Gráfica semilogarítmica del coeficiente de agrupamiento vs la longitud de camino promedio (Watts-Strogatz, 1998). Se muestra una región grande de valores de p donde l decrece rápidamente y C se mantiene casi constante.

El comportamiento del coeficiente de agrupamiento en función de p puede ser encontrado partiendo de una definición distinta a C pero equivalente. Esta definición fue introducida por Barrat y Weigt (2000) y consiste en definir el coeficiente de agrupamiento $C'(p)$, como la relación entre el número promedio de aristas existentes entre los vecinos de un nodo y el número medio de posibles aristas entre estos vecinos.

Newman, Watts y Strogatz (2001) proponen una visualización más gráfica de la definición anterior. Siendo C' lo siguiente.

$$C' = \frac{3(\text{Número de triángulos})}{\text{Número de triples conectados}} \quad (3.17)$$

Los triángulos consisten en tres nodos donde cada nodo está conectado a los otros dos (por eso el nombre de triángulo). Los triples son tres nodos donde al menos un nodo está conectado a los otros dos. El factor 3 se refiere a que cada triángulo colabora con al menos tres triples. Esta definición proviene de la sociología "fracción de triples transitivos" [7].

En el modelo Watts-Strogatz se puede calcular $C'(p)$ partiendo de $C(0)$. Los vecinos de un cierto nodo i que estaban conectados entre sí y al nodo i cuando $p = 0$, lo siguen estando cuando $p > 0$ con una probabilidad $(1 - p)^3$. Por esto, el coeficiente de agrupamiento $C'(p)$ está relacionado a $C(0)$ de la siguiente forma:

$$C'(p) \approx (1 - p)^3 C(0) \quad (3.18)$$

Barrat y Weigt mostraron que $C'(p)$ y $C(p)$ no difieren mucho cuando N es suficientemente grande [7].

3.3.1.2 DISTRIBUCIÓN DE GRADO

La distribución de grado del modelo Watts-Strogatz unidimensional depende del parámetro p . Para $p = 0$, el grafo es regular y todos los nodos tienen el mismo grado k , en este caso se tiene una distribución de Dirac. Para valores de $p > 0$ y puesto que sólo un extremo de las aristas es reconectado, todos los nodos tienen al menos $K/2$ conexiones. El grado de un nodo i puede ser expresado como la suma de dos términos:

$$k_i = K/2 + \alpha_i \quad (3.19)$$

α_i es el resultado de las reconexiones realizadas, la cual se puede dividir en dos términos:

$$\alpha_i = \alpha_i^1 + \alpha_i^2 \quad (3.20)$$

$\alpha_i^1 \leq K/2$ consiste en la posibilidad de que $K/2$ aristas pertenecientes al nodo i no hayan sido reconectadas, esto se da con probabilidad $1 - p$ cada una. El valor $\alpha_i^2 = \alpha_i - \alpha_i^1$ corresponde a las aristas que han sido reconectadas hacia el nodo i , cada una con probabilidad $\frac{1}{N}$. Las distribuciones que siguen α_i^1 y α_i^2 son las siguientes:

$$P_1(\alpha_i^1) = C_{k/2}^{\alpha_i^2} (1-p)^{\alpha_i^1} p^{\frac{K}{2}-\alpha_i^1} \quad (3.21)$$

y

$$P_2(\alpha_i^2) = C_{pNk/2}^{c_i^2} \left(\frac{1}{N}\right)^{\alpha_i^2} \left(1 - \frac{1}{N}\right)^{\frac{pNK}{2}-\alpha_i^2} \approx \frac{(pK/2)^{\alpha_i^2}}{\alpha_i^2!} e^{-pK/2} \quad (3.22)$$

Con estos dos resultados se puede expresar la distribución de grado del modelo:

$$P(k) = \sum_{n=0}^{\min(k-\frac{K}{2}, \frac{K}{2})} C_{\frac{K}{2}}^n (1-p)^n p^{\frac{K}{2}-n} \frac{(pK/2)^{k-\frac{K}{2}-n}}{(k-k/2-n)!} e^{-pK/2} \quad (3.23)$$

Esta distribución se asemeja a la de un grafo aleatorio, presenta un pico pronunciado en el valor medio $\langle k \rangle = K$ y decae exponencialmente para valores de k altos [7]. Ver fig. 3.9

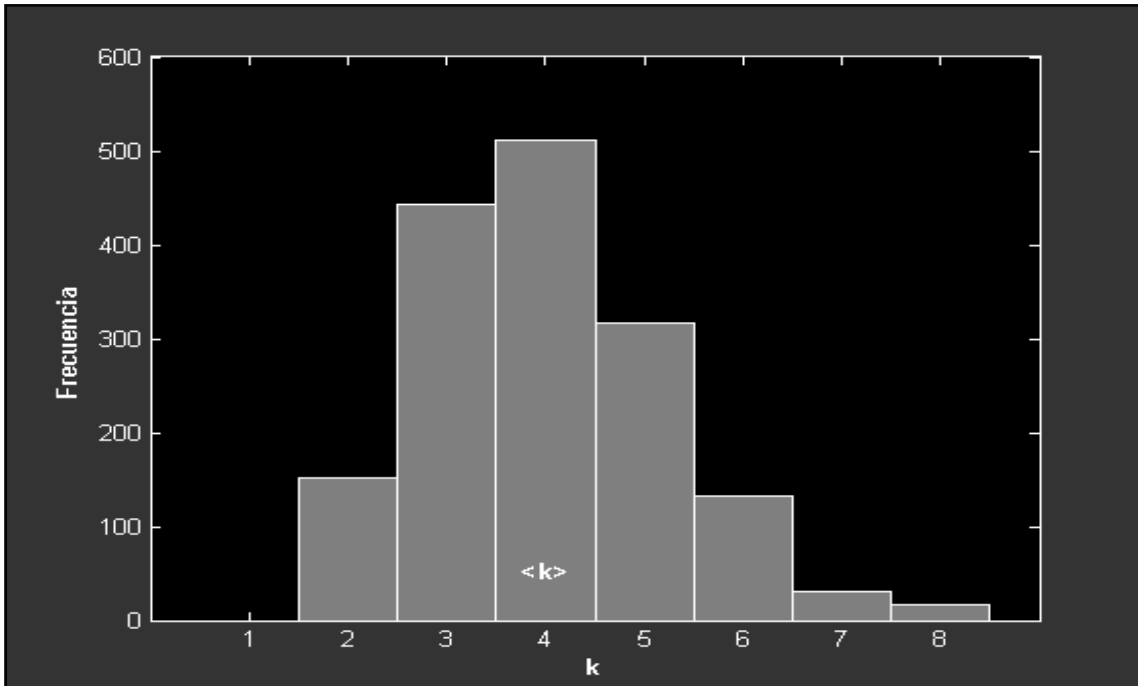


Fig. 3.9 Distribución de grado de una red creada con el modelo Watts-Strogatz unidimensional. $N=1601$ nodos y $K=4$, Pico pronunciado en $\langle k \rangle = 4$.

3.3.2 MODELO NEWMAN-WATTS (NW)

El modelo Watts-Strogatz presenta una dificultad, existe una probabilidad finita de que una parte de la red se desconecte del resto. Eso hace que exista una contribución infinita a la longitud de camino, produciendo que la misma longitud de camino promedio sea infinita. Una variante del modelo Watts-Strogatz ha sido propuesto por Newman y Watts (1999) que salva esta dificultad. En este modelo nuevas conexiones son añadidas con probabilidad p de la misma manera que en el modelo Watts- Strogatz, solo que ahora no se modifican las conexiones del grafo regular (ver fig. 3.10). Es decir, las conexiones iniciales permanecen intactas y nuevas conexiones son añadidas aleatoriamente a la red [4,5].

El modelo Newman-Watts es equivalente al modelo Watts-Strogatz para p pequeños [4,5], encontrándose la mayor diferencia para cuando p se acerca a 1. Por otro lado, de la misma forma que en el modelo Watts-Strogatz, el número de conexiones añadidas depende de las K aristas por nodo existentes en el grafo regular. Se tiene que en promedio el número de nuevas conexiones añadidas es

$$Kp/2$$

Y el promedio de grado

$$\langle k \rangle = K(1 + p) \quad (3.24)$$

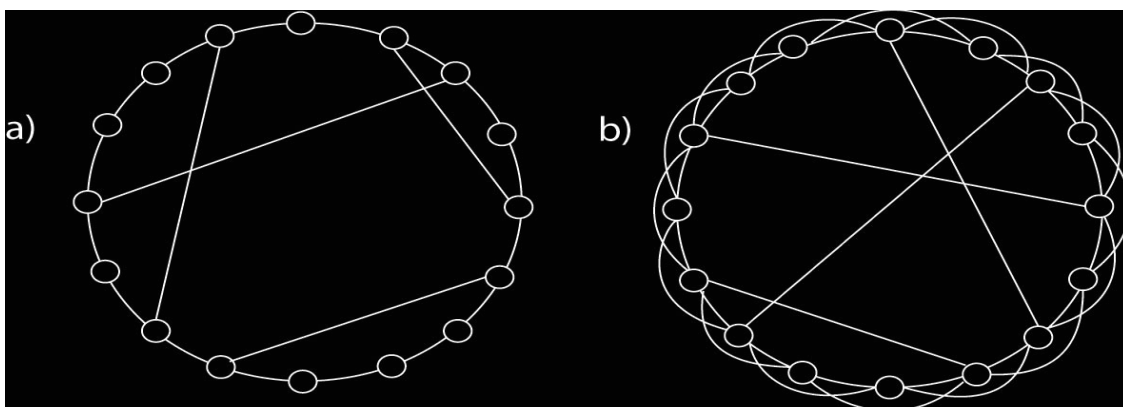


Fig. 3.10 a) Ejemplo de generación de una red de mundo pequeño mediante el modelo Newman-Watts. $N = 16$, $K = 2$. b) Generación de una red $N = 16$ y $K = 4$.

En el caso bidimensional la adición de conexiones sigue el mismo proceso que en el modelo Watts-Strogatz sin eliminar las conexiones iniciales. La siguiente figura ilustra el modelo a partir de una red bidimensional (ver fig. 3.11).

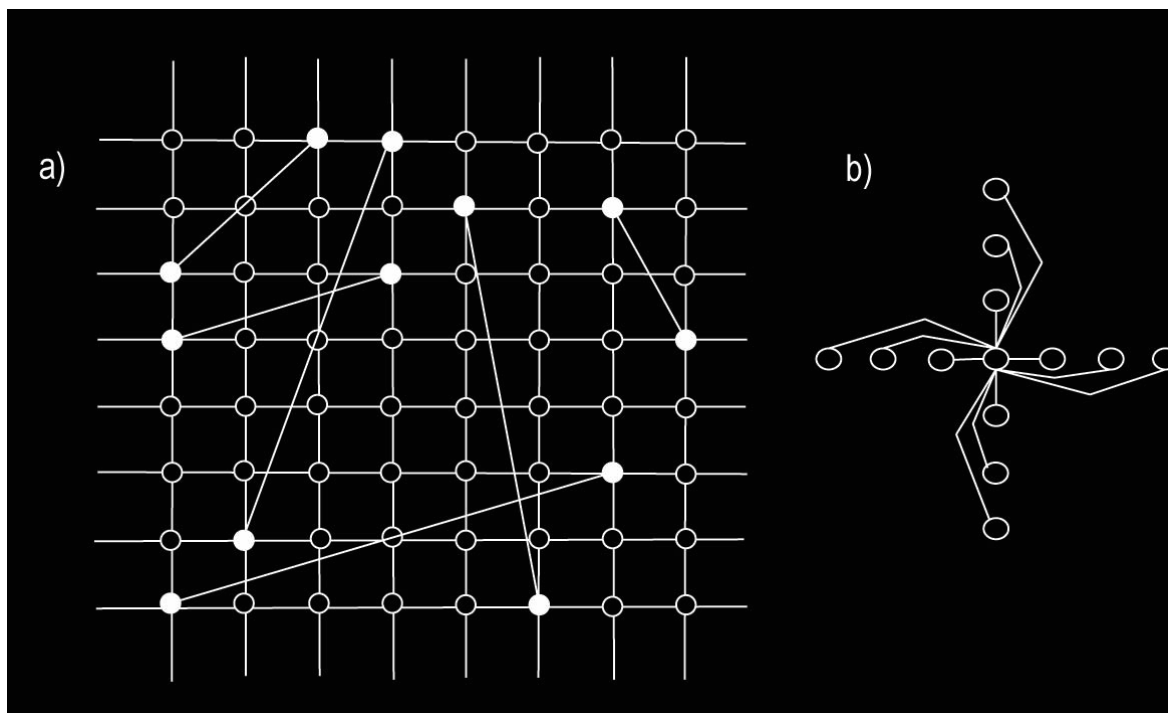


Fig. 3.11 a) Ejemplo de generación de una red de mundo pequeño mediante el modelo Newman-Watts en una red bidimensional, $K = 4$ b) Ejemplo de una red bidimensional regular con $K = 12$.

3.3.3 MODELO KUPERMAN-ABRAMSON (KA)

El modelo Kuperman-Abramson es una generalización de los dos modelos anteriores. Este modelo puede ser aplicado teniendo como base el modelo WS o el modelo NW. Kuperman y Abramson proponen que las reconexiones (para WS) o conexiones (para NW) sean gobernada por una distribución de distancias

$$\theta \sim d^{-m} \quad (3.25)$$

Donde m es un parámetro de la distribución. Cuando $m = 0$ el modelo converge a WS o NW (dependiendo si se realizaron reconexiones o se agregaron conexiones). Si $m \rightarrow \infty$ la red converge a una red regular. El modelo KA crea redes que también poseen cualidades de mundo pequeño y coeficientes de agrupamiento altos.

El presente trabajo se enfoca en el modelo KA que toma como base el modelo NW; en él nuevas conexiones son añadidas al sistema sin eliminar las conexiones del grafo regular. También la probabilidad de realizar una nueva conexión se toma

como $p = 1$, con el objeto de facilitar el modelo [6]. Entonces, al sistema se agregan N conexiones (una por cada nodo) y ellas están gobernadas por la distribución (3.25).

3.4 MODELO DE ISING EN REDES COMPLEJAS

El modelo de Ising ha sido estudiado brevemente en el capítulo II con el objeto de introducir los resultados físicos de este modelo sobre redes regulares. La expresión de la energía en el modelo de Ising depende de las interacciones de los espines y estas interacciones dependen de la red en la que los espines estén ubicados. Recordando el valor de la energía (2.53):

$$E = - \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j$$

Se puede interpretar a los valores de J_{ij} como la existencia o no de una conexión entre los espines i y j . Si $J_{ij} > 0$, existe una conexión entre el espín i y el espín j y si $J_{ij} = 0$, no la hay. Esto define la topología de una red de interacción [8]. La topología está completamente descrita con la matriz de transición A , entonces vamos a introducir la siguiente notación para la energía del sistema:

$$E = - \sum_A J_{ij} s_i s_j \quad (3.26)$$

Y si los $J_{ij} = J$ distintos de cero, se tiene:

$$E = -J \sum_A s_i s_j \quad (3.27)$$

El modelo de Ising ha sido utilizado para representar a sistemas muy distintos a los magnéticos. Modelos de propagación de enfermedades, de rumores, modelos simples de interacciones neuronales, sistemas de transportación y muchos otros se basan en el modelo de Ising. Particularmente, el modelo WS ha constituido una herramienta para el estudio de estos sistemas [3,7,25].

Trabajos teóricos y simulaciones computacionales se han realizado con el objeto de estudiar al modelo de Ising sobre redes de mundo pequeño WS, obteniendo resultados importantes. Barrat y Weigt (2000) estudiaron teóricamente el modelo de Ising en redes WS originadas de redes unidimensionales [7,20]. Encontraron que el sistema presenta transición de fase tipo campo medio para cualquier valor del parámetro $p > 0$. Esto muestra que la topología WS induce una transición de fase que no existía en el modelo unidimensional. Simulaciones computacionales como las hechas por Pekalski (2001) confirman estos resultados [21]. El modelo de Ising sobre redes KA generadas a partir de una red unidimensional también ha sido estudiado, mostrando que existe transición de fase tipo teoría de campo medio [24].

Herrero (2002) y Svenson y Johnston (2002) han realizado estudios numéricos en redes WS desarrolladas sobre redes regulares en 2D y 3D [7, 22,25]. Para las redes regulares en 2D y 3D se sabe que sí existe transición de fase a temperatura distinta de cero; en las redes WS sobre redes de 2D y 3D, Herrero calculó numéricamente los exponentes críticos, determinando que la nueva transición experimenta un comportamiento tipo teoría campo medio [22].

CAPÍTULO 4. SIMULACIÓN DE MONTE CARLO Y SU APLICACIÓN AL MODELO DE ISING.

Desde el nacimiento de la computación la posibilidad de realizar cálculos extensos ha ido incrementando. La física desde sus inicios se ha desarrollado teniendo en cuenta dos ramas: la experimental y la teórica, y puesto que la computación ha ganado espacio en muchos ámbitos del desarrollo humano, donde la física no ha sido la excepción, la simulación computacional se ha convertido en una tercera rama a parte de las dos tradicionales [13,14].

En muchos problemas físicos no siempre es posible encontrar la solución analítica al modelo teórico, impidiendo ser comparado con el experimento. Cuando se efectúa una simulación computacional lo que al fin y al cabo se está haciendo es realizar un “experimento” del cual se conoce y se controla todas las condiciones físicas del sistema. De antemano el conocimiento del hamiltoniano es aquel que induce las simulaciones, así que la comparación de los resultados experimentales con los computacionales permite verificar si la teoría describe la situación real del problema [14].

Otra característica de las simulaciones, que hacen de ella una herramienta importante, es que uno puede preparar sistemas que en el experimento son difíciles de obtener, ya sea por la sensibilidad de algunas magnitudes o simplemente porque no se dispone de los instrumentos lo suficientemente precisos [13,14].

La simulación computacional es una herramienta indispensable en el estudio de las redes complejas. Las propiedades de las redes a estudiar, como ya se observó en el capítulo anterior, dan realización a diferentes tipos de redes. Por ejemplo, se pueden crear redes de mundo pequeño siguiendo los algoritmos de los modelos WS, NW o KA, los cuales permiten simular computacionalmente la estructura de una red de mundo pequeño. El modelo de Ising sobre estas redes también puede ser estudiado ampliamente mediante simulación computacional.

Dentro de las simulaciones computacionales el método de Monte Carlo es muy utilizado, particularmente en problemas de la mecánica estadística. Sobre la transición de fase del modelo de Ising se han obtenido muchos resultados empleando este método y puesto que el presente trabajo tiene como objetivo determinar la temperatura de transición del Modelo de Ising en redes de mundo pequeño, es necesario abordar la metodología de las simulaciones de Monte Carlo y la forma en que se encuentra la temperatura crítica.

4.1 MÉTODO DE MONTE CARLO.

El método de Monte Carlo fue nombrado de esta manera en inspiración a “la capital de los juegos de azar” el Principado de Monte Carlo, por Nicolás Constantine Metropolis, físico, matemático y computador científico quien trabajó en el proyecto Manhattan. Con el desarrollo de las computadoras el método tomó gran importancia, siendo usado como una herramienta de investigación en el desarrollo de la bomba atómica [16].

Los métodos de Monte Carlo son usados en muchos problemas que van desde la integración en muchas variables hasta problemas relacionados en la física, química, medicina, etc. En cuanto a la física, el método de Monte Carlo se lo ha usado para simular un proceso físico directamente, es decir las ecuaciones del movimiento no se utilizan en la simulación. El único requerimiento es que el sistema esté descrito por funciones de distribución de probabilidad FDP's, en cuanto los FDP's estén determinadas, el método de Monte Carlo procede generando números aleatorios que siguen las distribuciones de probabilidad (se entenderá por qué su nombre) [13,14].

Básicamente se necesitan efectuar muchas simulaciones que proporcionan varios resultados congruentes con las distribuciones de probabilidad que describen el sistema físico. Los resultados importantes se los obtiene del promedio de todas las realizaciones de cada simulación. En algunos casos se puede estimar el error y consecuentemente definir el número de simulaciones de Monte Carlo que son necesarias de efectuar para encontrarnos dentro del intervalo de error dado [16].

Como hemos mencionado, dentro de la estrategia de Monte Carlo se necesita generar números aleatorios. Es por eso de gran importancia que la generación de números aleatorios provenga de algoritmos que los generen de manera adecuada.

Una de las aplicaciones donde se usa el Método de Monte Carlo es la integración, como ésta, algunas aplicaciones del método se exponen a continuación.

4.1.1 INTEGRACIÓN SIMPLE POR MONTE CARLO.

Suponiendo que se quiere evaluar la siguiente integral:

$$I = \int_0^1 f(x)dx \quad (4.1)$$

Los métodos usuales de resolución numérica de esta integral tales como los de Simpsons o Taylor consisten en la evaluación del integrando en valores particulares x_i en el intervalo $[0,1]$. En casos simples los valores de x son escogidos de tal forma que estén igualmente espaciados.

Pues bien, el método de Integración por Monte Carlo consiste en introducir la aleatoriedad en el cálculo, de tal forma que se escojan un total de N x_i 's aleatoriamente en el intervalo $[0,1]$. Inmediatamente la aproximación de la integral se reduce al valor promedio:

$$I \approx I_N = \sum_{i=1}^N f(x_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i = \bar{f} \approx \langle f \rangle \quad (4.2)$$

Donde la varianza σ_f^2 :

$$\sigma_f^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right)^2 \quad (4.3)$$

Si para un N fijo se realiza M veces el proceso de obtener los promedios \bar{f} se tendrá el valor medio :

$$\langle I \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \langle f \rangle_i \quad (4.4)$$

La varianza para estas medidas con $M = N$ es:

$$\sigma_N^2 = \frac{1}{N} \left[\left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right\rangle - \left(\left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right\rangle \right)^2 \right] \quad (4.5)$$

Separando el primer término del lado derecho de la ecuación (4.5) en una suma con $i = j$ y otra con $i \neq j$. Además, asumiendo que en un largo número de medidas solamente los términos con $i = j$ sobreviven, se tiene:

$$\sigma_N^2 \approx \frac{1}{N} (\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2) = \frac{\sigma_f^2}{N} \quad (4.6)$$

El algoritmo para la integración simple por Monte Carlo (muestreo simple) puede resumirse en:

1. Elegir N puntos x_i con distribución uniforme en el intervalo $[0,1]$.
2. Usar estos puntos para encontrar:

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i$$

$$\langle f^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^2$$

3. Estimar el error calculando σ_N de tal forma que:

$$I \approx \langle f \rangle \pm \sqrt{(\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2)/N} \quad (4.7)$$

La cuestión es como hacer que el error disminuya, en primera instancia aumentar el número de puntos N sería una opción válida. La otra opción es disminuir la varianza de las f_s , esto se logra con el llamado “muestreo por importancia”.

4.1.2 INTEGRACIÓN POR MONTE CARLO MEJORADA (MUESTREO POR IMPORTANCIA).

Tómese en cuenta otra vez la integral de (4.1). Anteriormente se consideró muestras de x tomadas uniformemente. Si la función $f(x)$ presenta variaciones grandes en la región de integración es natural pensar que se deba tomar de la muestra a puntos que aporten en mayor medida a la integral.

Considérese una función $p(x)$ que se parezca a $f(x)$ en cierta forma. Esto es, que ambas funciones tengan un comportamiento similar, en el sentido de que $p(x)$ sea grande cuando $f(x)$ lo sea y que sea pequeña cuando $f(x)$ también lo sea.

Imponiendo la siguiente condición a $p(x)$:

$$\int_a^b p(x)dx = 1 \quad (4.8)$$

Además, expresando la integral de la siguiente forma:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} p(x)dx \quad (4.9)$$

Definiendo $g(x) = \frac{f(x)}{p(x)}$, con lo anterior $p(x)$ se convierte en una densidad de probabilidad.

La expresión (3.9) queda:

$$I = \int_a^b g(x)p(x)dx \quad (4.10)$$

La aproximación de la integral puede ser calculada tomando como muestra a puntos x_i que siguen la densidad de probabilidad $p(x)$:

$$I \approx \langle g \rangle \pm \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2} \quad (4.11)$$

Siendo

$$\langle g \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i \quad (4.12)$$

Por la forma en que se ha construido g , $\langle g \rangle$ se acerca con mayor precisión al valor de la integral que en la aproximación (4.7)

4.1.3 SIMULACIÓN DE MONTE CARLO DE DOS SISTEMAS FÍSICOS ILUSTRATIVOS.

El desarrollo anterior ha introducido la técnica de Monte Carlo en el problema de resolución numérica de integrales. Ahora, lo siguiente se enfoca al desarrollo de Monte Carlo en dos sistemas físicos: Partículas encerradas en una caja y Decaimiento radiactivo.

Partículas encerradas en una caja.

Considérese el sistema físico de un conjunto de N partículas encerradas en una caja, la misma posee una división que la separa en dos volúmenes iguales. A $t = 0$ existen $n_{iz} = N$ partículas al lado izquierdo y el lado derecho está vacío, $n_{dr} = N - n_{iz} = 0$. Existe un orificio pequeño en la pared que divide los volúmenes, permitiendo que una partícula atraviese el orificio por unidad de tiempo. Después de un tiempo la cantidad de partículas en ambos lados será aproximadamente igual a $N/2$.

La probabilidad de que cualquier partícula atraviese al lado derecho durante un paso de tiempo es $p = \frac{n_{iz}}{N}$.

Para este problema el algoritmo de Monte Carlo consiste en:

1. Fijar el número N de partículas del experimento.
2. Realizar un lazo con un número de iteraciones mayor al número de partículas.
3. Para cada paso de tiempo t comparar el valor de un número aleatorio $u \in [0,1]$ con la probabilidad p .

4. Si $u < p$, una partícula del lado izquierdo debe moverse al derecho.

$$n_{iz} = n_{iz} - 1 \quad \text{Y} \quad n_{dr} = n_{dr} + 1$$

5. Finalizar el lazo.

En el equilibrio existen fluctuaciones que se puede medir con la desviación estándar:

$$\sigma^2 = \sqrt{\langle n_{iz}^2 \rangle - \langle n_{iz} \rangle^2} \quad (4.13)$$

El problema posee solución analítica y es enunciada a continuación para poder compararla con la simulación realizada en Matlab con $N = 1000$ partículas. Ver fig. 4.1

Si $n_{iz}(t)$ es el número de partículas que se encuentran en el lado izquierdo al tiempo t , el cambio en $n_{iz}(t)$ en el intervalo de tiempo Δt es:

$$\Delta n_{iz} = \left(\frac{N - n_{iz}(t)}{N} - \frac{n_{iz}(t)}{N} \right) \Delta t \quad (4.14)$$

Tomando el límite cuando $\Delta t \rightarrow 0$:

$$\frac{dn_{iz}(t)}{dt} = 1 - \frac{2n_{iz}(t)}{N} \quad (4.15)$$

Cuya solución reemplazando la condición inicial $n_{iz}(0) = N$ es:

$$n_{iz}(t) = \frac{N}{2} (1 + e^{-2t/N}) \quad (4.16)$$

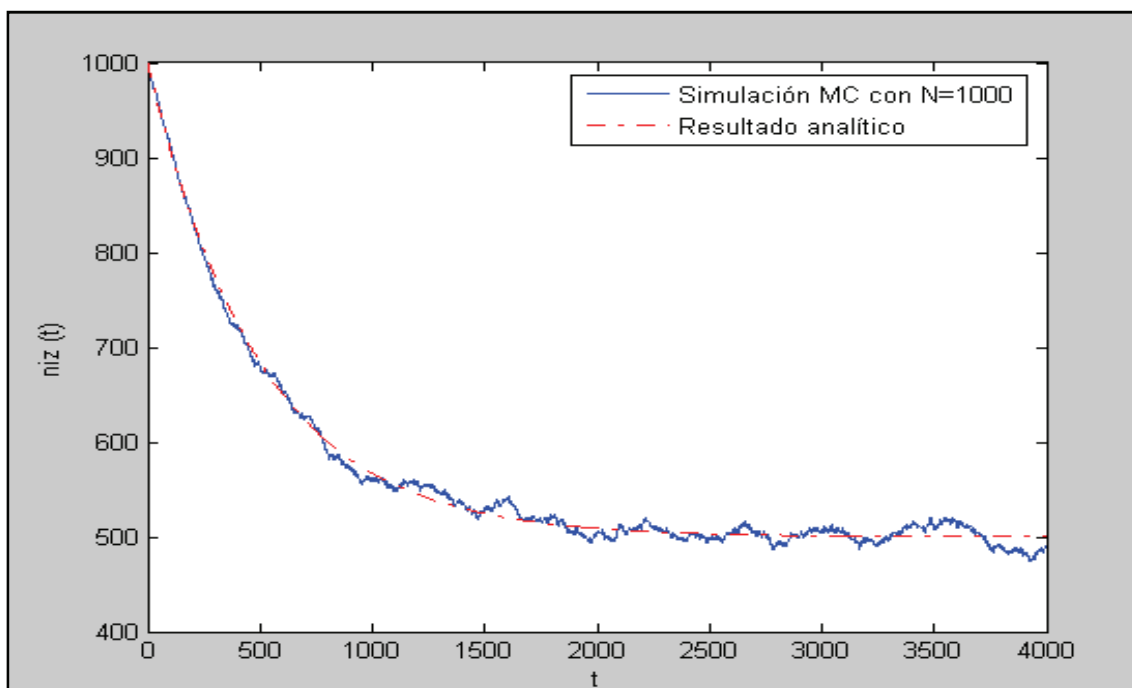


Figura 4.1. Número de partículas n_{iz} en el lado izquierdo de la caja en función del tiempo con $N = 1000$. Resultado de la simulación y el resultado analítico.

Decaimiento radioactivo.

La ley de decaimiento radioactivo describe el número de núcleos inestables que en el tiempo t aún no se han desintegrado. Considérese al tiempo $t = 0$ una cantidad N de núcleos inestables. La probabilidad p de que un núcleo decaiga en un intervalo de tiempo Δt es proporcional a dicho intervalo, es decir $p \propto \Delta t$. La constante de proporcionalidad se la conoce como tasa de decaimiento y se denota por λ . En un intervalo de tiempo Δt se habrán desintegrado $N\lambda\Delta t$ núcleos y el número de núcleos que aún no decaen se verán disminuidos en:

$$\Delta N = -N\lambda\Delta t \quad (4.17)$$

Tomando el límite cuando $\Delta t \rightarrow \infty$, se tiene la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt \quad (4.18)$$

La solución, conociendo que $N(0) = N_0$, es:

$$N = N_0 e^{-\lambda t} \quad (4.19)$$

El tiempo de vida media $t_{1/2}$ se define como el tiempo en el que la mitad de los núcleos han decaído y es igual a:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad (4.20)$$

La ley de decaimiento radioactivo puede ser simulada mediante Monte Carlo (Ver Fig. 4.2). El algoritmo es el siguiente:

1. Fijar el número N_0 de núcleos radioactivos, el valor de λ y el intervalo de tiempo a simular.
2. Para cada paso de tiempo t realizar un lazo con el número de iteraciones igual al número de núcleos que no decaen todavía.
3. Comparar un número aleatorio $u \in [0,1]$ con λ . Si $u < \lambda$, disminuir el número de núcleos radiactivos en uno.
4. Cerrar el lazo.
5. Terminar para el tiempo donde el número de núcleos que no han decaído sea igual a diez.

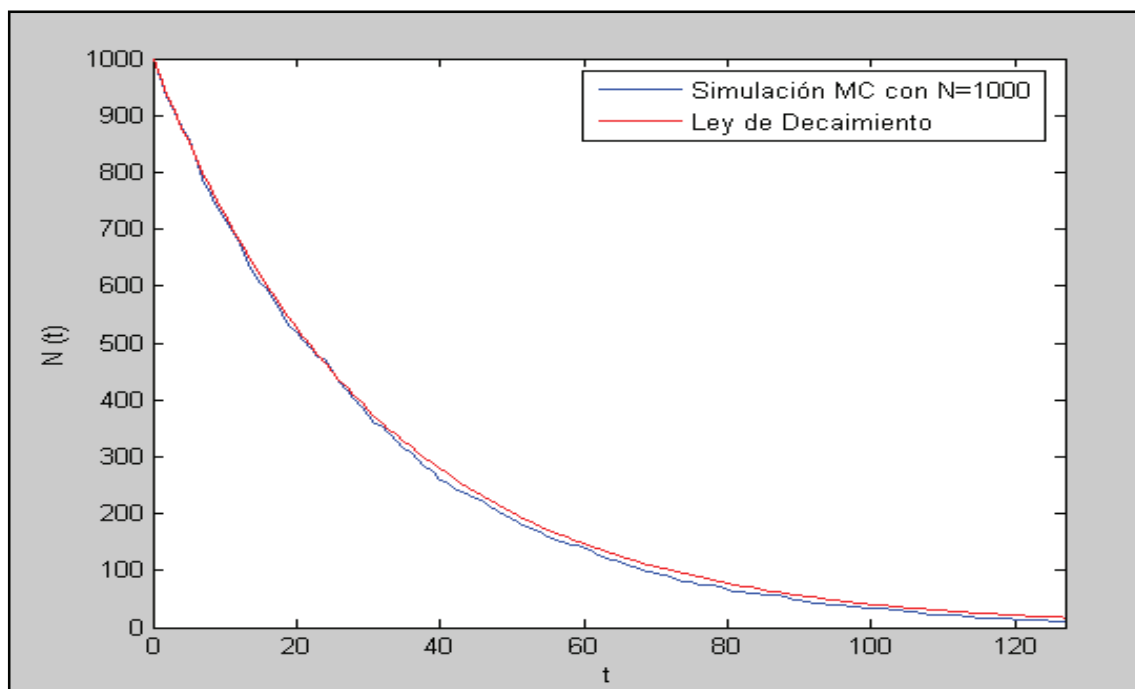


Fig. 4.2. Número de núcleos radiactivos N en función del tiempo t con $N_0 = 1000$ y $\lambda = 0.032$. Gráficas de resultado de la simulación y del resultado analítico.

4.2 LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN.

Desde hace mucho tiempo se han estudiado sistemas físicos sujetos a influencias aleatorias del ambiente. Considérese el famoso suceso donde el Botánico inglés observó el movimiento de partículas de polen en el agua, llamado movimiento Browniano, fue Albert Eintein quien realizó un análisis estadístico de tal fenómeno. [16].

Tómese en cuenta un conjunto de partículas que no interactúan y que efectúan movimientos Brownianos sobre el eje x . Se define a $\omega(x,t)dx$ como la probabilidad de encontrar a un número determinado de partículas entre x y $x + dx$ a un tiempo t . De acuerdo a evidencias experimentales se ha encontrado que el flujo de partículas $j(x,t)$ es proporcional al gradiente $\omega(x,t)$.

$$j(x,t) = -D \frac{\partial \omega(x,t)}{\partial x} \quad (4.21)$$

La constante de proporcionalidad D es conocida como constante de difusión.

Puesto que la cantidad de partículas se conserva:

$$\frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = \frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t} \quad (4.22)$$

(4.21) y (4.22) dan realización a la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t} = -D \frac{\partial^2 \omega(x, t)}{\partial x^2} \quad (4.23)$$

Por otro lado se puede calcular algunos valores medios:

$$\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \omega(x, t) dx \quad (4.24)$$

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \omega(x, t) dx \quad (4.25)$$

Inmediatamente se tiene la varianza $\sigma^2 = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2$

Pero considerando que $\omega(x, t)$ es una función de densidad de probabilidad, su integral debe ser 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(x, t) dx = 1 \quad (4.26)$$

Esto impone las siguientes restricciones sobre $\omega(x, t)$ y sus derivadas:

$$\omega(\pm\infty, t) = 0, \frac{\partial^n \omega(x, t)}{\partial x^n} (x = \pm\infty) = 0 \quad (4.27)$$

Usando estas restricciones y mediante la relación 4.19 se llega a:

$$\frac{\partial \langle x(t) \rangle}{\partial t} = 0 \quad (4.28)$$

Resultado que indica que $\langle x(t) \rangle$ no cambia respecto al tiempo. Si se toma la posición inicial $x(0)=0$, entonces el valor medio $\langle x(t) \rangle$ permanecerá en cero.

Usando (4.25) se tiene que $\frac{\partial \langle x(t)^2 \rangle}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial \omega(x,t)}{\partial t} dx$, he integrando por partes se obtiene:

$$\frac{\partial \langle x(t)^2 \rangle}{\partial t} = -Dx\omega(x = \pm\infty, t) + 2D \int_{-\infty}^{\infty} \omega(x, t) dx = 2D \quad (4.29)$$

Obteniendo la varianza:

$$\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = 2Dt \quad (4.30)$$

Y el desplazamiento cuadrático medio es:

$$\sqrt{2Dt}. \quad (4.31)$$

4.3 PROBLEMA DE CAMINO ALEATORIO EN UNA DIMENSIÓN.

Consideremos una partícula sujeta a moverse en el eje x que puede efectuar movimientos discretos tanto a la derecha como a la izquierda. La longitud de cada paso es l , después de N movimientos la partícula se encontrará en la posición ml , con $-N \leq m \leq N$. Del total de pasos que la partícula ha hecho, n_{iz} es el número de pasos que ha realizado hacia la izquierda y n_{dr} es el número de pasos efectuados a la derecha, evidentemente

$$N = n_{iz} + n_{dr}. \quad (4.32)$$

El valor de m es

$$m = n_{dr} - n_{iz} \quad (4.33)$$

La probabilidad $W_N(n_{iz})$ de que la partícula tome n_{iz} a la izquierda y n_{dr} pasos a la derecha es

$$W_N(n_{iz}) = \frac{N!}{n_{iz}! n_{dr}!} p^{n_{iz}} q^{n_{dr}} \quad (4.34)$$

Donde p es la probabilidad de que la partícula de un paso a su derecha y q la probabilidad de que la partícula se mueva hacia la izquierda. La función de probabilidad en (4.34) es conocida como distribución binomial.

Mediante la función de probabilidad (4.34) se obtienen los siguientes valores medios:

$$\overline{n_{iz}} = Nq \quad (4.35)$$

$$\overline{n_{dr}} = Np \quad (4.36)$$

Puesto que m se relaciona a n_{dr} y n_{iz} según (4.33), el valor medio de m está dado por:

$$\overline{m} = \overline{n_{dr}} - \overline{n_{iz}} = N(p - q) \quad (4.37)$$

De la misma manera se puede obtener la dispersión $\overline{(\Delta n_{dr})^2} = \overline{n_{dr}^2} - \overline{n_{dr}}^2$:

$$\overline{(\Delta n_{dr})^2} = Npq \quad (4.38)$$

4.4 CADENAS DE MARKOV (RELACIÓN ENTRE LOS CAMINOS ALEATORIOS Y LA DIFUSIÓN).

El proceso físico de la difusión y el problema unidimensional de camino aleatorio están relacionados de una forma muy cercana. Recurriendo a un proceso

estocástico (aleatorio) llamado cadenas de Markov se relacionan los dos problemas, llegando a establecer que la difusión es la manifestación continua de un camino aleatorio discreto.

Considérese un sistema que puede encontrarse en diferentes estados C_i . Por ejemplo en el caso de las integrales cada estado corresponde a los distintos valores de x . En un sistema de espines cada estado C_i corresponde al conjunto de valores de los espines $C_i = \{s_k\}$. A un proceso discreto de una sucesión de estados que son generados en forma aleatoria, donde cada estado futuro depende tan solo del estado presente, se lo conoce como una cadena de Markov.

En el camino aleatorio tanto el tiempo como el espacio han sido discretizados. La partícula puede moverse a izquierda o a derecha en longitudes de tamaño l . Cada posición en un tiempo $t + 1$ depende tan solo de la posición en el tiempo t , y además la nueva posición en $t + 1$ es generada en forma estocástica. El camino aleatorio puede ser visto como una cadena de Markov.

En el camino aleatorio, la partícula se encuentra en una posición $x = ml$ a un tiempo determinado t , a $t + 1$ la partícula se ha desplazado a $x = nl$. La función de distribución de probabilidad a $t = 0$ está dado por $\omega_m(t = 0)$, con m representando la posición en términos de l . Esta función es análoga a $\omega(x, t)$ en el caso del proceso de difusión.

Para el proceso de Markov se tiene la probabilidad de transición de la posición $x = ml$ a la posición $x = nl$ dada por:

$$W_{ij}(\epsilon) = W(ml - nl, \epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } |m - n| = 1 \\ 0 & \text{si no lo es} \end{cases} \quad (4.39)$$

En la probabilidad de transición anterior se ha definido la discretización del tiempo de tal forma que el intervalo entre dos tiempos inmediatos tenga el valor de ϵ .

La nueva distribución de probabilidad, en m y n respectivamente, están relacionadas a través de la probabilidad de transición:

$$\omega_n(t = \epsilon) = W(m \rightarrow n)\omega_m(t = 0) \quad (4.40)$$

Tanto ω como W son funciones de probabilidad y por tanto deben cumplir con la condición de normalización:

$$\sum_n \omega_n(t) = 1 \quad (4.41)$$

$$\sum_m W(m \rightarrow n) = 1 \quad (4.42)$$

La evolución de la función de probabilidad ω después de un tiempo $t = n\epsilon$ depende de todas las posiciones posibles en las que pudo estar a $t = 0$. Se tiene:

$$\omega_i(t_n) = \sum_j W_{ij}(t_n) \omega_j(0) \quad (4.43)$$

Está claro que para llegar al tiempo $t = n\epsilon$ es necesario aplicar la probabilidad de transición n veces:

$$W_{ij}(t_n) = W_{ij}(n\epsilon) = W(il - jl, n\epsilon) = (W^n(\epsilon))_{ij} \quad (4.44)$$

Remplazando (4.43) en (4.44) se obtiene:

$$\omega_i(n\epsilon) = \sum_j (W^n(\epsilon))_{ij} \omega_j(0) \quad (4.45)$$

De la misma se puede asignar a i como el índice de las filas en una matriz y j como el índice de sus columnas, obteniendo:

$$\omega(n\epsilon) = W^n(\epsilon) \omega(0) \quad (4.46)$$

Donde ω y W son matrices.

La matriz W es la suma de dos matrices:

$$W = \frac{1}{2}(I + D) \quad (4.47)$$

Siendo:

$$I = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

Esta es una ilustración puesto que las matrices W, I y D son infinitas porque están relacionadas al espacio en el que se desplaza la partícula. También como se puede ver D y I cumplen la siguiente condición:

$$ID = \hat{1} \quad (4.49)$$

Siendo $\hat{1}$ la matriz identidad.

Elevando la matriz W a la potencia n se obtiene:

$$W^n(n\epsilon) = \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} L^{n-2k} = \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} R^{2k-n} \quad (4.50)$$

Donde hemos usado la fórmula del binomio. Como $R_{ij}^m = \delta_{i,(j+m)}$ y $L_{ij}^m = \delta_{(i+m),j}$:

$$W(il - jl, n\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{1}{2}(n+i-j)}, & |i-j| \leq n \\ 0, & \text{para otros casos} \end{cases} \quad (4.51)$$

Si la posición inicial de la partícula es $x(0) = 0$ entonces la función de probabilidad ω a $t = 0$ se define como:

$$\omega_i(0) = \delta_{i,0} \quad (4.52)$$

Usando (4.45) y (4.51):

$$\omega_i(n\epsilon) = \sum_j (W^n(\epsilon))_{ij} \omega_j(0) = \sum_j \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{1}{2}(n+i-j)} \delta_{j,0} \quad (4.53)$$

Evidentemente el único sumando que aporta con un valor distinto de cero es $j = 0$. Así:

$$\omega_i(n\epsilon) = \frac{1}{2^n} \binom{n}{\frac{1}{2}(n+i)} \quad (4.54)$$

Según la relación de recursión del binomio se tiene:

$$\binom{n+1}{\frac{1}{2}(n+1+i)} = \binom{n}{\frac{1}{2}(n+1+i)} + \binom{n}{\frac{1}{2}(n+i)-1} \quad (4.55)$$

Puesto que $x = il, t = n\epsilon$ y $\omega(x, t) = \omega(il, n\epsilon) = \omega_i(n\epsilon)$, de (4.54) y (4.55) se tiene:

$$\omega(x, t + \epsilon) = \frac{1}{2} \omega(x + l, t) + \frac{1}{2} \omega(x - l, t) \quad (4.56)$$

La ecuación (4.56) es equivalente a la siguiente:

$$\frac{\omega(x, t + \epsilon) - \omega(x, t)}{\epsilon} = \frac{l^2}{2\epsilon} \frac{\omega(x + l, t) - 2\omega(x, t) + \omega(x - l, t)}{l^2} \quad (4.57)$$

$\frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t}$ puede ser aproximado de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t} \approx \frac{\omega(x, t + \epsilon) - \omega(x, t)}{\epsilon} \quad (4.58)$$

De la misma forma:

$$D \frac{\partial^2 \omega(x, t)}{\partial x^2} \approx D \frac{\omega(x + l, t) - 2\omega(x, t) + \omega(x - l, t)}{l^2} \quad (4.59)$$

Tomando los límites $l \rightarrow 0$ y $\epsilon \rightarrow 0$ en (4.59) y definiendo a $\frac{l^2}{2\epsilon}$ como D , se llega a la ecuación $\frac{\partial \omega(x,t)}{\partial t} = -D \frac{\partial^2 \omega(x,t)}{\partial^2 x}$, que es la ecuación de difusión (4.18).

4.5 MUESTREO SIMPLE Y MUESTREO POR IMPORTANCIA, UN ENFOQUE AL MÉTODO DE MONTE CARLO EN FÍSICA ESTADÍSTICA.

En las secciones 4.1.1 y 4.1.2 el método de Monte Carlo fue usado para aproximar una integral. Se expusieron dos formas de aproximarla, una simple en la que los números donde se evalúa la función son tomados sin importar cuánto aportan al resultado y la segunda tomando los valores de acuerdo a su "importancia" en el cálculo.

En el caso de la Física Estadística lo que interesa es calcular los valores medios de las magnitudes físicas. Por ejemplo, en el caso de un sistema descrito por el ensamble canónico y cuyos microestados de manera general forman un continuo, el valor medio de una magnitud A es:

$$\langle A \rangle_T = \frac{1}{Z} \int A(x) \exp(-H(x)/k_B T) dx \quad (4.60)$$

Siendo Z la función de partición:

$$Z = \int \exp(-H(x)/k_B T) dx \quad (4.61)$$

La idea del Método de Monte Carlo es aproximar la solución exacta de (4.60) tomando un subconjunto de puntos $\{x_1, x_2, \dots, x_M\}$ como en el caso de integración simple por Monte Carlo [16]. Como ya se mencionó, este muestreo es conocido como **Muestreo simple**. Así, el cálculo de la aproximación de $\langle A \rangle$ se reduce a una simple sumatoria:

$$\langle A \rangle_T \approx \frac{\sum_{i=1}^M A(x_i) \exp(-H(x_i)/k_B T)}{\sum_{i=1}^M \exp(-H(x_i)/k_B T)} \quad (4.62)$$

Para el caso de sistemas con grados de libertad discretos, como es el caso del modelo de Ising, la expresión (4.60) ya es una sumatoria, entonces la misma se reduce a un subconjunto de los estados posibles [13,14,16].

Para estimar (4.60) mediante muestreo por importancia, se debe seleccionar los puntos x_i de acuerdo a una probabilidad $P(x)$:

$$\langle A \rangle_T \approx \frac{\sum_{i=1}^M A(x_i) \exp(-H(x_i)/k_B T) / P(x_i)}{\sum_{i=1}^M \exp(-H(x_i)/k_B T) / P(x_i)} \quad (4.63)$$

Es natural elegir la función $P(x)$ tal que $P(x_i) \propto \exp(-E(x_i)/k_B T)$:

$$\langle A \rangle_T \approx \frac{1}{M} \sum_i^M A(x_i) \quad (4.64)$$

Es necesario encontrar un método para realizar este **muestreo por importancia**, la respuesta está encerrada en los procesos de Markov. Según Metrópolis et al. la idea es construir un proceso de Markov donde cada estado x_{i+1} es construido aleatoriamente y en dependencia de tan sólo el estado anterior x_i [8], para ello se hace uso de una probabilidad de transición $W(x_i \rightarrow x_{i+1})$, tal como se mencionó en la sección 4.1.6. En límite $i \rightarrow \infty$, la función de distribución $P(x_i)$ de los estados generados por el proceso deberán tender a la distribución de equilibrio [13,14,16]

$$P(x_i) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{H(x_i)}{k_B T}\right) \quad (4.65)$$

La condición suficiente para que ello suceda es imponer el principio de Balance Detallado [6,8], la cual consiste en:

$$P(x_i)W(i \rightarrow j) = P(x_j)W(j \rightarrow i) \quad (4.66)$$

De la cual obtenemos:

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \frac{P(x_j)}{P(x_i)} \quad (4.67)$$

Y usando la distribución de Boltzman (4.69):

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right) \quad (4.68)$$

Esta relación depende tan solo del cambio de energía $\Delta H = H(x_j) - H(x_i)$.

Hasta el momento no se ha dado a conocer explícitamente la forma de W , tan sólo se sabe que ella debe cumplir con la condición del Balance Detallado. Es decir la función W no está definida unívocamente, por lo que existen muchas maneras de definirla de tal forma que cumpla con (4.66). Una de ellas es la siguiente:

$$W(x_i \rightarrow x_j) = \begin{cases} \frac{1}{T_s} \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right), & \text{si } \Delta H > 0 \\ \frac{1}{T_s}, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (4.69)$$

Siendo T_s una constante de tiempo usada para convertir la probabilidad de transición del método de Metrópolis en una probabilidad de transición por unidad de tiempo.

Esta última expresión satisface la condición (4.66) y en definitiva (4.68). Se puede ver que la secuencia de estados x_i generada por (4.69) tiene la propiedad que su distribución de probabilidad converge a (4.65). Una forma de probarlo es considerar un largo número de cadenas de Markov generadas en paralelo por (4.69). En un tiempo dado existirán N_r sistemas, entre las diferentes cadenas, en el estado r , N_s sistemas en el estado s y así por el estilo. Suponiendo que $H(x_r) < H(x_s)$. Como ya se ha discutido, se puede lograr un paso del estado r al estado s , analizando la probabilidad de transición W y anulando el cambio de energía ΔH , se tiene que la probabilidad de transición para este movimiento debería ser simétrica: $W_{\Delta H=0}(x_r \rightarrow x_s) = W_{\Delta H=0}(x_s \rightarrow x_r)$. Con esta probabilidad se puede construir la probabilidad de transición que cumpla (4.72). Esto es:

$$\begin{aligned} W(x_r \rightarrow x_s) &= W_{\Delta H=0}(x_r \rightarrow x_s) \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right) \\ &= W_{\Delta H=0}(x_r \rightarrow x_s) \exp\left(-\frac{H(x_s) - H(x_r)}{k_B T}\right) \quad y \end{aligned} \quad (4.70)$$

$$W(x_s \rightarrow x_r) = W_{\Delta H=0}(x_s \rightarrow x_r)$$

El número esperado de transiciones $N(r \rightarrow s)$ desde el estado r hacia el estado s es:

$$\begin{aligned} N(r \rightarrow s) &= N_r W(x_r \rightarrow x_s) \\ &= N_r W_{\Delta H=0}(x_r \rightarrow x_s) \exp\left(-\frac{H(x_s - x_r)}{k_B T}\right) \text{ y} \end{aligned} \quad (4.71)$$

$$N(s \rightarrow r) = N_s W(x_s \rightarrow x_r) = N_s W_{\Delta H=0}(x_s \rightarrow x_r)$$

Obteniendo el valor neto de transiciones del estado r al estado s :

$$\begin{aligned} \Delta N(r \rightarrow s) &= N(r \rightarrow s) - N(s \rightarrow r) \\ &= N_r W_{\Delta H=0}(x_r \rightarrow x_s) \left(\frac{\exp(-H(x_s)k_B T)}{\exp(-H(x_r)k_B T)} - \frac{N_s}{N_r} \right) \end{aligned} \quad (4.72)$$

La última expresión indica claramente que para que $\Delta N(r \rightarrow s) > 0$, la relación $\frac{N_s}{N_r}$ tiene que ser más grande que el ratio de las probabilidades canónicas, pero $\frac{N_s}{N_r}$ seguirá decreciendo en función de las relaciones de las probabilidades canónicas y lo hará mientras sea mayor que ella. Además si $\Delta N(r \rightarrow s) < 0$, la relación $\frac{N_s}{N_r}$ tiene que ser más pequeña que el ratio de las probabilidades canónicas, pero $\frac{N_s}{N_r}$ seguirá creciendo en función de las relaciones de las probabilidades canónicas y lo hará mientras sea menor que ella. Esto indica que la distribución canónica es alcanzada con un número grande de cadenas de Markov. En la práctica no es necesario formar un conjunto paralelo de cadenas de Markov sino tan sólo una lo suficientemente larga [13,14].

4.6 ALGORITMO DE METRÓPOLIS

Si se analiza un sistema con un número grande pero finito de grados de libertad, como en el modelo de Ising, cada estado está definido por la configuración de espines que posea el sistema. Si el sistema se encuentra en un estado r , la transición a otro estado, dentro de la simulación de Monte Carlo, depende de la

elección de un espín en la red que será modificado y que podría llevar a un cambio en la energía del sistema.

La función de transición $W_{\Delta H=0}(r \rightarrow s)$ que es a priori al cambio de energía, puede ser vista como la probabilidad de elegir al espín en la red cuyo cambio de orientación lleve al estado s , esta probabilidad debe ser simétrica y debe ser la misma para todas las elecciones posibles. Si se tienen N espines en la red entonces $W_{\Delta H=0}(r \rightarrow s) = \frac{1}{N}$. Donde se ha prescindido de las x , porque los estados del sistema son discretos. De la misma manera se adopta la notación de E para el valor de energía y no de H como en el caso continuo [6,8].

El párrafo anterior muestra una manera de obtener la probabilidad de transición (4.73) y es la que da origen al llamado algoritmo de Metrópolis.

El algoritmo de Metrópolis se desarrolla de la siguiente manera:

1. Establecer una energía inicial del sistema E_o
2. Establecer un cambio aleatorio del estado del sistema (en el caso del modelo de Ising un cambio de estado sería el cambiar la orientación de un espín escogido aleatoriamente en la red).
3. Calcular la nueva energía del sistema E_t y la variación de la energía $\Delta E = E_t - E_o$.
4. Si $\Delta E < 0$, aceptar el nuevo estado del sistema.
5. Si $\Delta E > 0$, generar un número aleatorio u entre 0 y 1.
6. Si $u < \exp(-\Delta E/k_b T)$ aceptar el nuevo estado, si no, mantener el estado anterior.
7. Repetir los pasos 2-6 a efecto de generar una gran cantidad de estados del sistema.
8. Para la secuencia de valores producidos en la cadena de Markov calcular los valores medios de las magnitudes físicas de interés.

4.6.1 ALGORITMO DE METRÓPOLIS PARA EL MODELO DE ISING.

En el capítulo II se introdujo el modelo de Ising y algunos de sus resultados. Ahí se describieron los modelos de Ising en una y dos dimensiones. Ambos modelos tienen solución analítica y las magnitudes físicas pueden ser calculadas exactamente. Sin embargo, el modelo de Ising en tres dimensiones ya no tiene solución analítica y si la topología de la red es establecida de tal forma que no sea una red regular el cálculo de la función de partición se vuelve complicado y en algunos casos imposible.

Es importante conocer la metodología usada para simular el modelo de Ising en redes regulares y ver su eficacia al compararla con los resultados exactos. El interés es aplicar esta metodología a las redes de mundo pequeño y para ello es fundamental describir el algoritmo de Metrópolis usado en el modelo de Ising.

Básicamente el algoritmo de Metrópolis para el modelo de Ising seguirá el lineamiento general propuesto en la sección anterior. Lo que falta por especificar es cómo establecer el cambio aleatorio de los estados del sistema, es decir el punto 2 del algoritmo de Metrópolis.

Partiendo del hecho de que el sistema descrito por el modelo de Ising sigue la distribución canónica, la probabilidad de encontrar al sistema en un estado s está dada por:

$$P_s = \frac{e^{-(\beta E_s)}}{Z} \quad (4.73)$$

Recuérdese que $\beta = \frac{1}{k_B T}$, que la energía del estado s del sistema es E_s y Z es la función de partición.

El algoritmo de Metrópolis usado para la simulación del modelo de Ising queda de la siguiente forma:

1. Establecer una configuración inicial del sistema. Por ejemplo el sistema a una temperatura infinita, donde los espines en la red están configurados aleatoriamente.
2. Seleccionar aleatoriamente un nodo en la red y tomar su respectivo espín.
3. Cambiar la dirección del espín y calcular el cambio de energía ΔE .
4. Si $\Delta E < 0$ aceptar el cambio en el espín.
5. Si $\Delta E > 0$, generar un número aleatorio u entre 0 y 1.
6. Si $u < -\exp(\Delta E/k_b T)$ aceptar el nuevo estado, si no mantener el estado anterior del sistema.
9. Repetir los pasos anteriores a efecto de generar una gran cantidad de estados del sistema.

Las magnitudes físicas se obtienen promediando sobre los estados generados. Sin embargo, se debe esperar a que el sistema alcance el equilibrio y borre de su "memoria" el estado inicial que se ha determinado para la simulación.

Es necesario definir una medida para el tiempo de Monte Carlo. Esta medida se toma como un paso de Monte Carlo por espín (PMC/espín). Un PMC/espín corresponde a considerar en promedio a todos los espines una sola vez. Para el

Algoritmo de Metrópolis usado en un sistema de N espines, un PMC/espín corresponde a la consideración de N espines elegidos aleatoriamente. [13,14].

4.6.2 ALGORITMO DE METRÓPOLIS PARA EL MODELO DE ISING CONSIDERANDO VARIOS ESPINES POR ITERACIÓN.

El algoritmo de metrópolis anterior en cada iteración toma un solo espín para ser analizado. Un lenguaje computacional matricial permite fácilmente tomar todos los espines del sistema en lugar de elegir un espín en cada iteración. Sin embargo, al considerar todos los espines al mismo tiempo se produce una oscilación entre los microestados posibles y el sistema no evoluciona coherentemente con la función de partición [17].

Se puede utilizar la ventaja matricial de ciertos lenguajes, como matlab, en virtud de optimizar el tiempo computacional, explorando todos los sitios en cada iteración y para evitar la oscilaciones indeseadas se debe multiplicar la probabilidad de transición por un factor T_f menor a uno y mayor que cero, de la siguiente forma

$$W(x_i \rightarrow x_j) = \begin{cases} \frac{T_f}{T_s} \exp\left(-\frac{\Delta H}{K_B T}\right), & \text{si } \Delta H > 0 \\ \frac{T_f}{T_s}, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (4.74)$$

Esta variante del algoritmo de metrópolis emula la dinámica real donde todos los espines en la red tienen la misma posibilidad de fluctuar. Si bien, no todos los espines que minimizan la energía, inmediatamente cambian de dirección, muchos lo hacen al mismo tiempo porque no existe ninguna restricción [17].

4.7 ERROR ESTADÍSTICO EN LA SIMULACIÓN DE MONTE CARLO DEL MODELO DE ISING.

Supóngase que se han guardado sucesivamente n observaciones A_u de una magnitud A . El valor esperado del cuadrado del error estadístico es:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \left\langle \left[\frac{1}{n} \sum_{u=1}^n (A_u - \bar{A}) \right]^2 \right\rangle$$

$$\langle(\delta A)^2\rangle = \frac{1}{n^2} \sum_{u=1}^n \langle(A_u - \langle A \rangle)^2\rangle + \frac{2}{n^2} \sum_{u_1=1}^n \sum_{u_2=u_2+1}^n (\langle A_{u_1} A_{u_2} \rangle - \langle A \rangle^2) \quad (4.75)$$

Cambiando el índice de sumatoria u_2 a $u_1 + u$:

$$\langle(\delta A)^2\rangle = \frac{1}{n} \left[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 + 2 \sum_{u=1}^n \left(1 - \frac{u}{n}\right) (\langle A_0 A_u \rangle - \langle A \rangle^2) \right] \quad (4.76)$$

A un tiempo $t_u = \delta t u$ se obtiene la observación u , donde δt es el intervalo de tiempo entre dos observaciones sucesivas, es recomendable tomar $\delta t = T_s$ (Un paso de Monte Carlo por espín).

Transformando la sumatoria de (4.76) en una integral y eliminando el subíndice u de t_u , se obtiene

$$\begin{aligned} \langle(\delta A)^2\rangle &= \frac{1}{n} \left[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 + 2 \frac{1}{\delta t} \int_0^{t_n} \left(1 - \frac{t}{t_n}\right) [\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2] dt \right] \\ \langle(\delta A)^2\rangle &= \frac{1}{n} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \left[1 + 2 \frac{1}{\delta t} \int_0^{t_n} \left(1 - \frac{t}{t_n}\right) \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} dt \right] \quad (4.77) \end{aligned}$$

Se define a $\phi_A(t)$ como la función de correlación

$$\phi_A(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \quad (4.78)$$

La función ϕ_A es cuando $t = 0$ y cae a cero cuando $t \rightarrow \infty$. Asumiendo que ϕ_A ya ha caído muy cerca de cero para un tiempo T_{corr} , llamado tiempo de correlación o tiempo de relajación. Se asume que este tiempo existe y es:

$$T_{corr} = \int_0^{\infty} \phi_A(t) dt \quad (4.79)$$

ϕ_A difiere de cero notablemente sólo para valores de $t \ll t_n$, por lo que el término $\frac{t}{t_n}$ de (4.77) puede ser despreciado y si se cambia el límite superior de la integración por ∞ , la relación (4.77) queda:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{n} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \left(1 + 2 \frac{T_{corr}}{\delta t} \right) \quad (4.80)$$

Este es el error del muestreo del observable A . Si $\delta t \gg T_{corr}$ el error puede ser aproximado como se calculó en (4.12) para muestras estadísticamente independientes:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{n} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \quad (4.81)$$

4.8 EFECTOS DEL TAMAÑO FINITO

En el capítulo II se mencionó que una transición de fase de segundo orden presenta divergencias en las segundas derivadas de la energía libre. Matemáticamente tales divergencias existen únicamente para sistemas de tamaño infinito ya que si el sistema posee tamaño finito la función de partición es calculada sobre un conjunto finito de estados posibles, en tal caso, nunca se podría obtener una divergencia. En definitiva, las transiciones de fase incluidas las de primer orden, sólo existen en un sistema infinito, esto es, en el límite termodinámico [9,13,14].

Los sistemas reales aunque tienen un número de partículas muy grande ($\sim 10^{23}$) no son infinitos, esto quiere decir que estrictamente hablando desde el formalismo matemático de la Mecánica Estadística, los sistemas reales tampoco presentan transición de fase. Sin embargo, esta descripción formal permite obtener resultados muy cercanos a los del fenómeno real.

4.8.1 TEORÍA DE ESCALAMIENTO FINITO.

En primera instancia se puede pensar que la posibilidad de realizar simulaciones tan sólo para sistemas finitos sea un inconveniente, sin embargo, de acuerdo a la teoría de tamaño finito (Fisher, 1971; Privman, 1990; Binder, 1992) la parte singular (singular en límite termodinámico) de la energía libre puede ser descrita

por un ansatz de escalamiento, similarmente al escalamiento propuesto para la energía libre con las variables T y H (capítulo II) [13,14]. Asumiendo homogeneidad con respecto a T y L , tenemos

$$F(L, T) = L^{-\frac{(2-\alpha)}{\nu}} \tilde{F}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \quad (4.82)$$

Tomando las derivadas apropiadas de F y considerando un segundo argumento $HL^{\frac{(\gamma+\beta)}{\nu}}$ en la función de escalamiento \tilde{F} y luego haciendo $H = 0$ se encuentra que las magnitudes físicas siguen las siguientes formas de escala:

$$m = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \tilde{m}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \quad (4.83)$$

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \quad (4.84)$$

$$C = L^{-\frac{\alpha}{\nu}} \tilde{C}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \quad (4.85)$$

Donde han sido utilizadas las respectivas leyes de escala mostradas en el capítulo II.

En el punto crítico las funciones \tilde{m} , $\tilde{\chi}$ y \tilde{C} toman valores independientes del tamaño del sistema, obteniendo:

$$m \propto L^{-\frac{\beta}{\nu}} \quad (4.86)$$

$$\chi \propto L^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (4.87)$$

$$C \propto L^{-\frac{\alpha}{\nu}} \quad (4.88)$$

Ellas pueden ser usadas para obtener algunas relaciones entre los exponentes críticos. Por ejemplo, usando (4.87) se tiene que $\log \chi = \frac{\gamma}{\nu} \log L + C$, donde C es una constante que depende de la constante de proporcionalidad en (4.87), con esta relación mediante los distintos valores de χ obtenidos en simulaciones para diferentes tamaños (de redes en el caso del modelo de Ising) se puede obtener la relación $\frac{\gamma}{\nu}$.

4.8.2 CUMULANTE DE BINDER.

Mediante el análisis de los momentos de probabilidades de un orden superior a los analizados hasta ahora se puede obtener más información de fenómeno crítico. Un método efectivo es analizar el cumulante reducido de cuarto orden o

cumulante de Binder (Binder, 1981) [13,14,19] . Para el modelo de Ising donde los momentos impares desaparecen por simetría, el cumulante de Binder se reduce a:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \quad (4.89)$$

La probabilidad de que la magnetización tome el valor m para una red de lado L es $P_L(m)$, la cual para $T > T_c$ se convierte en una distribución Gaussiana centrada en cero, siendo el cumulante de binder cero (el cumulante de binder de una gaussiana es cero). Para $T < T_c$, $P_L(m)$ forma dos Gaussianas centradas en m_0 y $-m_0$, de la forma:

$$P_L(m) = \frac{1}{2} C \left\{ \exp \left[-\frac{(m + m_0)^2}{2\sigma^2} \right] + \exp \left[-\frac{(m - m_0)^2}{2\sigma^2} \right] \right\} \quad (4.90)$$

Donde $C = (2\pi\sigma^2)^{-1/2}$, la constante de normalización.

En el límite $L \rightarrow \infty$, $P_L(m)$ tiende a dos deltas de Dirac:

$$P_L(m) \rightarrow \frac{1}{2} \delta(m - m_0) + \frac{1}{2} \delta(m + m_0) \quad (4.91)$$

Calculando $\langle m^2 \rangle$ y $\langle m^4 \rangle$ con (4.90):

$$\langle m^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} m^2 P_L(m) = \sigma^2 + m_0^2 \quad (4.92)$$

$$\langle m^4 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} m^4 P_L(m) = 3\sigma^4 + 6\sigma^2 m_0^2 + m_0^4 \quad (4.93)$$

Permiten calcular el cumulante de Binder:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} = 1 - \frac{3\sigma^4 + 6\sigma^2 m_0^2 + m_0^4}{3(\sigma^2 + m_0^2)^2} \quad (4.94)$$

Cuando $L \rightarrow \infty$, $\sigma \rightarrow 0$ y $U_L \rightarrow \frac{2}{3}$. Notar que $\sigma \rightarrow 0$ es equivalente a utilizar directamente la distribución (4.91).

Entonces, se obtienen dos puntos, llamados puntos fijos triviales: $U^* = 0$ que es el punto fijo $T = \infty$ y $U^* = \frac{2}{3}$ conocido como el punto fijo $T = 0$.

Por otro lado, se espera que los momentos de la magnetización tengan un comportamiento similar a (4.83) [13,14], esto es:

$$m^{(n)} = L^{-\frac{n\beta}{\nu}} \tilde{m}^{(n)}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \quad (4.95)$$

Usando (4.95) obtenemos que U_L tiene la siguiente forma de escalamiento:

$$U = \tilde{U}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \quad (4.96)$$

Y en T_c :

$$U = \tilde{U}(0) \quad (4.97)$$

Que no depende del tamaño de la red y puede ser usado para estimar la temperatura crítica graficando varios U_L 's correspondientes a tamaños distintos de redes, obteniéndola a partir de la intersección de todas las curvas. Al valor donde existe la intersección se lo conoce como punto fijo no trivial $T = T_c$ [18].

La expresión (4.96) permite estimar el valor del exponente crítico ν . Si se grafica los datos de U_L de distintos tamaños de redes versus $\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}$, se puede variar ν hasta lograr el mejor colapso de todas las curvas, cuando ello se logre se habrá hallado una buena estimación de ν .

4.8.3 ESCALAMIENTO DE TAMAÑO FINITO POR ENCIMA DE LA DIMENSIÓN CRÍTICA SUPERIOR.

Una dimensión crítica es aquella dimensión donde el carácter de la transición cambia. Por debajo de la **dimensión crítica inferior** no existe transición de fase y por encima de la **dimensión crítica superior** los exponentes críticos toman los mismos valores que la teoría de campo medio [9,13,14].

Una consecuencia del cambio del carácter de la transición es que sobre la **dimensión crítica superior** la igualdad de Josephson (hiperescala) ya no se cumple, en el caso del modelo de Ising la **dimensión crítica superior** es $d_c = 4$.

Para dimensiones $d \geq 4$ la transición de fase exhibe los mismos exponentes críticos que la teoría de campo medio [9,13,14].

En el caso de la teoría de escalamiento finito anteriormente teníamos que (4.82) representa una homogeneidad sobre el lado de la red L , por ejemplo, para una red bidimensional ($d = 2$) con N nodos, $L = N^{1/2}$ y (4.81) se puede expresar así:

$$F(L, T) = N^{-\frac{(2-\alpha)}{d\nu}} \tilde{F} \left(\epsilon N^{\frac{1}{d\nu}} \right) = N^{-\frac{(2-\alpha)}{2\nu}} \tilde{F} \left(\epsilon N^{\frac{1}{2\nu}} \right) \quad (4.98)$$

Sin embargo se ha visto que esta relación de homogeneidad no se cumple para $d > 4$.

Para encontrar las formas de escalamiento para redes que pueden ser vistas como objetos de dimensión infinita $d \rightarrow \infty$ (por ejemplo redes de mundo pequeño) Los trabajos mostrados en la Ref. [19,25] proponen introducir una definición nueva $\xi_V \equiv$ "volumen de correlación" la cual es una generalización de la longitud de correlación ξ . Se tiene que $\xi_V \sim \xi^{def}$, donde def es una dimensión efectiva, la cual proporciona el carácter de la transición, siendo $def \leq d_c$. Es coherente pensar que ξ_V debe decaer junto al punto crítico de la siguiente forma:

$$\xi_V \sim |T - T_c|^{\bar{\nu}} \quad (4.99)$$

Por consiguiente, la expresión (4.98) para redes donde la dimensión puede ser vista como infinita queda:

$$F(L, T) = N^{-\frac{(2-\alpha)}{def\nu}} \tilde{F} \left(\epsilon N^{\frac{1}{def\nu}} \right) = N^{-\frac{(2-\alpha)}{\bar{\nu}}} \tilde{F} \left(\epsilon N^{\frac{1}{\bar{\nu}}} \right) \quad (4.100)$$

Encontrando las formas de escalamiento siguientes

$$m = N^{-\frac{\beta}{\bar{\nu}}} \tilde{m} \left(\epsilon N^{\frac{1}{\bar{\nu}}} \right) \quad (4.101)$$

$$\chi = N^{\frac{\gamma}{\bar{\nu}}} \tilde{\chi} \left(\epsilon N^{\frac{1}{\bar{\nu}}} \right) \quad (4.102)$$

$$C = N^{-\frac{\alpha}{\bar{\nu}}} \tilde{C} \left(\epsilon N^{\frac{1}{\bar{\nu}}} \right) \quad (4.103)$$

$$U = \tilde{U} \left(\epsilon N^{\frac{1}{\bar{\nu}}} \right) \quad (4.104)$$

Que son similares a las formas de escalamiento para $d < 4$ salvo por usar $\bar{\nu}$ en lugar de ν y el número de nodos N en lugar de L . Bajo estas consideraciones el procedimiento para estimar los exponentes críticos del modelo de Ising sobre redes de mundo pequeño debe utilizar las formas de escala (4.101 - 4.104) y la igualdad de hiperescala con la dimensión efectiva:

$$d_{\text{ef}} \nu = \bar{\nu} = 2 - \alpha \quad (4.105)$$

CAPITULO V

METODO Y RESULTADOS.

En el presente capítulo se expone la metodología usada para formular el problema y realizar las simulaciones respectivas. También se muestran los códigos desarrollados en Matlab para posteriormente describir los resultados obtenidos en el trabajo.

5.1 MÉTODO

En el presente trabajo se ha considerado crear redes de mundo pequeño en base de tres modelos importantes. Los modelos usados fueron WS, NW y KA, los cuales fueron descritos en el capítulo III. En base a ellos se crearon redes partiendo de una estructura regular unidimensional y bidimensional. Estas redes se crearon considerando algunas particularizaciones de los modelos. A continuación se describe el proceso de creación de las redes unidimensionales y bidimensionales.

5.1.1 CREACIÓN DE LAS REDES DE MUNDO PEQUEÑO.

5.1.1.1 REDES UNIDIMENSIONALES

Para crear las redes de mundo pequeño unidimensionales se realizaron dos programas en Matlab. Un programa que utiliza el modelo WS, en el cual se tomo el valor de $K = 4$ y p indefinido. El segundo programa sirve para crear redes KA y NW donde se ha tomado los valores $K = 2$, $p = 1$ y m no definido. Tomando $m = 0$ se obtienen redes NW, evitando así crear otro programa.

- **Creación de la red WS.**

Crear una red WS significa obtener la matriz de adyacencia que represente las conexiones de una red generada con el modelo WS. Para lograrlo se ha creado un programa que en su primera parte genera las conexiones de la red regular para luego realizar las reconexiones aleatorias. A medida que se establece las conexiones se va ingresando la información a una matriz A , la cual al final del proceso será la matriz de adyacencia.

El siguiente programa construye la matriz de adyacencia de una red WS


```

1  % generaci3n de red por medio del modelo de Watts y Strogatz con K=4
2  % (modelo unidimensional)
3  function A=watts(L,p)
4  -   A=sparse(zeros(L));
5  -   % A=zeros(L);
6  -   A(1,L)=1;
7  -   A(L,1)=1;
8  -   A(L,2)=1;
9  -   A(2,L)=1;
10 -   A(L-1,1)=1;
11 -   A(1,L-1)=1;
12 -   for i=1:L-1
13 -       A(i,i+1)=1;
14 -       A(i+1,i)=1;
15
16 -   end
17
18 -   for i=1:L-2
19 -       A(i,i+2)=1;
20 -       A(i+2,i)=1;
21 -   end
22
23 -   if rand<p
24 -       A(1,L)=0;
25 -       A(L,1)=0;
26 -       c=0;
27 -       while c==0
28 -           j=fix(rand*L+1);
29 -           if (j==L) || (A(j,L)==1)
30 -               else
31 -                   c=1;
32 -                   A(j,L)=1;
33 -                   A(L,j)=1;
34 -               end
35 -           end
36 -       end

37
38 -   if rand<p
39 -       A(2,L)=0;
40 -       A(L,2)=0;
41 -       c=0;
42 -       while c==0
43 -           j=fix(rand*L+1);
44 -           if (j==L) || (A(j,L)==1)
45 -               else
46 -                   c=1;
47 -                   A(j,L)=1;
48 -                   A(L,j)=1;
49 -               end
50 -           end
51 -       end
52
53 -   if rand<p
54 -       A(1,L-1)=0;
55 -       A(L-1,1)=0;
56 -       c=0;
57 -       while c==0
58 -           j=fix(rand*L+1);
59 -           if (j==L-1) || (A(j,L-1)==1)
60 -               else
61 -                   c=1;
62 -                   A(j,L-1)=1;
63 -                   A(L-1,j)=1;
64 -               end
65 -           end
66 -       end

```

```

67
68 -   for i=1:L-2
69 -       if rand<p
70 -           A(i,i+1)=0;
71 -           A(i+1,i)=0;
72 -           c=0;
73 -           while c==0
74 -               j=fix(rand*L+1);
75 -               if (j==i) || (A(i,j)==1)
76 -
77 -                   else
78 -                       c=1;
79 -                       A(i,j)=1;
80 -                       A(j,i)=1;
81 -                   end
82 -               end
83 -           end
84 -       if rand<p
85 -           A(i,i+2)=0;
86 -           A(i+2,i)=0;
87 -           c=0;
88 -           while c==0
89 -               j=fix(rand*L+1);
90 -               if (j==i) || (A(i,j)==1)
91 -
92 -                   else
93 -                       c=1;
94 -                       A(i,j)=1;
95 -                       A(j,i)=1;
96 -                   end
97 -               end
98 -           end
99 -       end
100 -   end

```

- **Creación de las redes KA y NW.**

El programa crea una matriz de adyacencia donde están registradas las conexiones que son añadidas al grafo regular. En estos modelos el grafo regular permanece inalterado; entonces, luego se adicionarán las conexiones del grafo regular dependiendo el caso. Esto se debe a que la simulación del modelo de Ising puede ser programada tomando de ante mano las aristas que siguen la topología del grafo regular y adicionalmente se considerará la matriz de adyacencia que sólo tiene información de las conexiones dependientes de la distancia.

Para calcular las propiedades de la red, longitud de camino promedio y coeficiente de agrupación, se necesita la matriz de adyacencia completa. En este caso a la matriz de adyacencia A se adicionará la información del grafo regular, lo que permitirá manipularla para los cálculos. El modelo KA sugiere una distribución de distancias de la forma $p(\theta) \sim \theta^{-d}$ y por eso se necesita una función que genere números aleatorios en base a una distancia definida en la red regular bidimensional. La distancia entre dos nodos i y j de la red regular se ha definido como:

$$d = |i - j|. \quad (5.1)$$

Considerando esto, la función que genera los números aleatorios es la siguiente:

```

1  function k=distrdist(L,m)%funcion que obtiene un valor k siguiendo una
2  %distribución dependiente de la distancia
3  - k=0;
4  - Nor=0;
5  - x=[2:L];%variable aleatoria
6  - p=ones(1,L-1);
7  - for l=2:L
8  -     Nor=Nor+l^-m;
9  - end
10 - for i=2:L
11 -     p(i-1)=(i^-m)*(Nor^-1);
12 - end
13 %Se obtien, por tanto, el número aleatorio k, siguiendo la distribución
14 %1-m de distancias utilizando el método de la transformada inversa
15 - u=rand;
16 - P=0;
17 - i=0;
18 - while k==0
19
20 -     if u<P
21 -         k=x(i);
22 -     else
23 -         i=i+1;
24 -         P=P+p(i);
25 -     end
26 - end

```

La siguiente función asigna a cada nodo una conexión nueva. La conexión depende de un número generado por la función anterior:

```

1  function A= redist(L,A,m)
2  for i=1:L
3      di=distrdist(L,m);
4
5      if i+di<=L
6          i2=i+di;
7      else
8          i2=i+di-L;
9      end
10     A(i,i2)=1;
11     A(i2,i)=1;
12 end
13 end
14

```

Y por último está la siguiente función que crea la red:

```

1  function A=genred_KA(L,m)
2  - A=sparse([]);
3  - A= redist(L,A,m);

```

5.1.1.2 REDES BIDIMENSIONALES.

El proceso de creación de las redes bidimensionales es similar a las redes unidimensionales. De nuevo se consideraron los tres modelos WS, NW y KA en base de ellos se crearon dos programas que generan este tipo de redes partiendo de grafos regulares bidimensionales. El programa para crear las redes WS parte de un grafo regular con $K = 8$ y p un parámetro por definirse. En la creación de las redes KA y NW se ha fijado $K = 4$ y $p = 1$ y m indefinido, de tal forma que haciendo $m = 0$ se tenga el modelo NW.

- **Creación de la red WS.**

Una forma fácil de crear la red WS bidimensional es establecer las conexiones del grafo regular al mismo tiempo que se crean las conexiones aleatorias. Hacer esto es equivalente a crear la red regular y posteriormente realizar las reconexiones. Para manipular debidamente la matriz de adyacencia ha sido de utilidad crear una matriz B que permite ligar las coordenadas de cada nodo con el respectivo lugar que el nodo ocupa en la matriz de adyacencia.

Ha bastado crear una sola función en matlab, la cual dependiendo del valor L (lado de la red regular), arroja la matriz de adyacencia de una red WS con $K = 8$ y p indefinido. El programa es el siguiente.

```

1  %modelo Watts-Strogatz red bidimensional K=4
2  function A=watts(L,p);
3  - N=L^2;
4  - B=zeros(L);
5  - for n=1:N
6  -     B(n)=n;
7  - end
8
9  - for i=1:L
10 -     for j= [1 2]
11 -         if rand<p;
12 -             c=B(i,L);
13 -             while c == B(i,L)
14 -                 c=fix(N*rand+1);
15 -             end
16 -             A(B(i,L),c)=1;
17 -             A(c,B(i,L))=1;
18 -         else
19 -             A(B(i,j),B(i,L))=1;
20 -             A(B(i,L),B(i,j))=1;
21 -         end
22 -     end
23
24 -     for j= [1 L]
25 -         if rand<p;
26 -             c=B(i,L-1);
27 -             while c == B(i,L-1)
28 -                 c=fix(N*rand+1);
29 -             end
30 -             A(B(i,L-1),c)=1;
31 -             A(c,B(i,L-1))=1;
32 -         else
33 -             A(B(i,j),B(i,L-1))=1;
34 -             A(B(i,L-1),B(i,j))=1;
35 -         end
36 -     end

```

```

37 -     end
38 -
39 -     for j=1:L-2
40 -         if rand<p
41 -             c=B(i,j);
42 -             while c == B(i,j)
43 -                 c=fix(N*rand+1);
44 -             end
45 -             A(B(i,j),c)=1;
46 -             A(c,B(i,j))=1;
47 -         else
48 -             A(B(i,j),B(i,j+1))=1;
49 -             A(B(i,j+1),B(i,j))=1;
50 -
51 -         end
52 -
53 -
54 -         if rand<p
55 -             c=B(i,j);
56 -             while c == B(i,j)
57 -                 c=fix(N*rand+1);
58 -             end
59 -             A(B(i,j),c)=1;
60 -             A(c,B(i,j))=1;
61 -         else
62 -             A(B(i,j),B(i,j+2))=1;
63 -             A(B(i,j+2),B(i,j))=1;
64 -
65 -         end
66 -
67 -     end
68 - end

```

```

67 -     end
68 - end
69 -
70 - for j=1:L
71 -
72 -     for i= [1 2]
73 -         if rand<p;
74 -             c=B(L,j);
75 -             while c == B(L,j)
76 -                 c=fix(N*rand+1);
77 -             end
78 -             A(B(L,j),c)=1;
79 -             A(c,B(L,j))=1;
80 -         else
81 -             A(B(i,j),B(L,j))=1;
82 -             A(B(L,j),B(i,j))=1;
83 -         end
84 -     end
85 -
86 -     for i= [1 L]
87 -         if rand<p;
88 -             c=B(L-1,j);
89 -             while c == B(L-1,j)
90 -                 c=fix(N*rand+1);
91 -             end
92 -             A(B(L-1,j),c)=1;
93 -             A(c,B(L-1,j))=1;
94 -         else
95 -             A(B(i,j),B(L-1,j))=1;
96 -             A(B(L-1,j),B(i,j))=1;
97 -         end
98 -     end
99 -
100 - end

```

```

101 -     for i=1:L-2
102 -         if rand<p
103 -
104 -             c=B(i,j);
105 -             while c == B(i,j)
106 -                 c=fix(N*rand+1);
107 -             end
108 -             A(B(i,j),c)=1;
109 -             A(c,B(i,j))=1;
110 -
111 -         else
112 -             A(B(i,j),B(i+1,j))=1;
113 -             A(B(i+1,j),B(i,j))=1;
114 -         end
115 -
116 -         if rand<p
117 -
118 -             c=B(i,j);
119 -             while c == B(i,j)
120 -                 c=fix(N*rand+1);
121 -             end
122 -             A(B(i,j),c)=1;
123 -             A(c,B(i,j))=1;
124 -
125 -         else
126 -             A(B(i,j),B(i+2,j))=1;
127 -             A(B(i+2,j),B(i,j))=1;
128 -         end
129 -     end
130 -
131 - end
132 -

```

- **Creación de las redes KA y NW.**

Como las conexiones en las redes KA siguen una distribución de distancia es necesario definir una distancia en la red regular bidimensional. La distancia entre dos nodos de coordenadas (i_1, j_1) y (i_2, j_2) se ha definido como

$$d = |i_1 - i_2| + |j_1 - j_2| \quad (5.2)$$

En base de ello se ha creado el programa que genera la matriz de adyacencia que contiene información de las conexiones agregadas. Las conexiones de la red regular no constan en esta matriz y deben ser añadidas según el caso, de la misma forma que en las redes unidimensionales. El programa contiene tres funciones, la función ***distridist*** la cual genera los números que siguen la distribución dependiente de la distancia, la función ***conexditridis*** que establece

las conexiones dependiendo del valor generado por la función anterior y la distancia (5.2), y finalmente **redistridis** que genera la matriz de adyacencia.

La función **distridist** es la misma que se utilizó en el modelo unidimensional. A continuación se muestran las dos funciones restantes:

Función conexditridis

```

1  %función que escoje una conexión dependiendo del nodo tomado en cuenta, de
2  %la magnitud de la arista L de la red y de el valor m de la distribución d
3  %distancias
4  function [x,y]=conexditridis(i,j,L,m)
5  - d=distridist(L,m); % generación de un número aleatorio en base a la
6  %distribución inversamente dependiente de las distancia
7  - B=zeros(L-1);%matriz donde se guardarán las posibles desplazamientos
8  %que cumplan con la distancia "d" respecto al punto (i,j)
9  - for dx=0:L-1
10 -     dy=d-dx;
11 -     if (dy <= L-1) && (dy>=0)
12 -         B(dx+1,dy+1)=1;
13 -     end
14 - end
15 - N=sum(sum(B)) ;%numero de posibles desplazamientos
16 - B=sparse(B);
17 %todos los posibles desplazamientos son equiprobables porque están a la
18 %misma distancia, entonces de todos ellos se toma uno:
19
20 - h=fix(rand*N+1);
21
22 - [f,g]=find(B); %aquí están las posiciones en la matriz B de los valores
23 %compatibles con la distancia "d"
24
25 - dx=f(h)-1;
26 - dy=g(h)-1;
27 - if rand<0.5
28 -     x=i+dx;
29 - else
30 -     x=i-dx;
31 - end
32 - if x<=0
33 -     x=x+L;
34 - end
35 - if x>L
36 -     x=x-L;
37 - end

```

```

38 -   if rand<0.5
39 -       y=j+dy;
40 -   else
41 -       y=j-dy;
42 -   end
43 -   if y<=0
44 -       y=y+L;
45 -   end
46 -   if y>L
47 -       y=y-L;
48 -   end

```

Función *redistribid*

```

1   function A=redistribid(L,m);
2   A=sparse([]);
3   n=1;
4   for j=1:L
5       for i=1:L
6           B(i,j)=n;
7           n=n+1;
8       end
9   end
10
11  for i=1:L
12      for j=1:L
13          [x,y]=conexditridis(i,j,L,m);
14          A(B(i,j),B(x,y))=1;
15          A(B(x,y),B(i,j))=1;
16      end
17  end

```

5.1.2 CÁLCULO DE LAS PROPIEDADES DE LAS REDES.

Las propiedades de la red: distribución de grado, coeficiente de agrupamiento y longitud de camino promedio deben ser analizadas para determinar si las cualidades obtenidas corresponden a lo predicho por los modelos usados. Para calcular estas propiedades se han realizado procedimientos basados en la matriz de adyacencia.

5.1.2.1 DISTRIBUCIÓN DE GRADO.

La suma a través de las columnas de la matriz de adyacencia permite obtener el grado de cada nodo. La gráfica de la frecuencia de grado muestra la distribución de grado de las redes creadas.

5.1.2.2 LONGITUD DE CAMINO PROMEDIO

Para calcular la longitud de camino promedio de las redes se ha realizado el siguiente programa que utiliza la definición (3.2) y el teorema que manifiesta que dada una matriz de adyacencia A , el valor del coeficiente a_{ij}^k de la matriz A^k es igual al número de caminos de k longitud con extremos i y j .

```

1  function Ldis =longcam(A);
2  -   B=A;
3
4  -   [a,b]=find(A);
5  -   c=0;
6  -   L=size(A,1);
7  -   N=L^2;
8  -   h2=size(a,1);
9  -   l=2;
10 -   while c==0
11
12 -       A2=A^l;
13 -       for i=1:N
14 -           if (B(i)==0) && (A2(i)~=0)
15 -               B(i)=1;
16 -           end
17 -       end
18 -       p=0;
19 -       for i=1:N
20 -           if B(i)==0
21 -               else
22 -                   p=p+1;
23 -               end
24 -           end
25 -           if N ==p;
26 -               c=1;
27 -           end
28 -           l=l+1;
29 -       end
30 -   B=B-diag(diag(B));
31 -   Ldis=(sum(sum(B)))/(L*(L-1));
32 -   L=mean(B);

```

5.1.2.3 COEFICIENTE DE AGRUPAMIENTO.

El coeficiente de agrupamiento debe ser calculado en base a la definición (3.3). Para hacerlo se ha creado un programa que tiene como dato de ingreso a la matriz de adyacencia. Utilizando la definición se calcula de cada nodo el

coeficiente de agrupamiento y luego se lo promedia para toda la red. El siguiente programa arroja el coeficiente de agrupamiento de toda la red:

```

1  %calculo coeficiente de agrupamiento
2  function Cred=coefagrup(A);
3  - C=[];
4  - L=size(A,1);
5  - k=sum(A);
6  - for i=1:L
7  -     E=0;
8  -     g=A(i,1:L);
9  -     [,j]=find(g);
10
11 -     for k1=j
12 -         for k2=j
13 -             if A(k1,k2)==1
14 -                 E=E+1/2;
15 -                 %E está dividido para dos porque la simetría de A provoca
16 -                 %contar dos veces la misma conexión
17 -             end
18 -         end
19 -     end
20 -     if k(i)==1
21 -         C(i)=0;
22 -     else
23 -         C(i)=2*E/(k(i)*(k(i)-1));
24 -     end
25 - end
26 %Coeficiente de agrupamiento de la red:
27 - Cred=mean(C);

```

5.1.3 SIMULACIÓN DE MODELO DE ISING EN LAS REDES CREADAS.

5.1.3.1 MODELO Y MÉTODO DE SIMULACIÓN

Hasta el momento se ha expuesto el método de creación de las redes de mundo pequeño, en lo siguiente se explica la formulación del modelo de Ising sobre estas redes y se describe el método de simulación empleado en este trabajo.

El modelo de Ising ha sido mencionado varias veces en capítulos anteriores. En ellos se han expuesto algunos resultados para redes de topología regular. Ahora, el modelo de Ising es formulado para redes que tienen una topología de mundo pequeño según WS, KA y NW. En este trabajo se ha considerado el modelo de Ising con $H = 0$ y las conexiones dependen de las distintas realizaciones de redes. De acuerdo a (3.27):

$$E = -J \sum_A s_i s_j \quad (5.3)$$

Donde el índice A representa la sumatoria sobre todas las conexiones representadas por la matriz de adyacencia.

Es necesario recordar el algoritmo de Metrópolis usual.

1. Establecer una configuración inicial del sistema. Por ejemplo el sistema a una temperatura infinita, donde los espines en la red están configurados aleatoriamente.
2. Seleccionar aleatoriamente un nodo en la red y tomar su respectivo espín.
3. Calcular E en función de la expresión (5.3)
4. Cambiar la dirección del espín y calcular el cambio de energía ΔE que ello produce.
5. Si $\Delta E < 0$ aceptar el cambio en el espín
6. Si $\Delta E > 0$, generar un número aleatorio $u \in [0,1]$.
7. Si $u < \exp(-\Delta E/k_b T)$ aceptar el nuevo estado, si no, mantener el estado anterior del sistema.
8. Repetir los pasos anteriores a efecto de generar una gran cantidad de estados del sistema.

En las simulaciones se ha usado el método de Monte Carlo Metrópolis con la variación indicada en la sección 4.62. Aprovechando las cualidades matriciales de Matlab, para mejorar la eficiencia computacional se consideraron pasos de Monte Carlo simultáneos. En cada iteración todos los espines son visitados, pero la probabilidad de transición es multiplicada por 0.1 para evitar oscilaciones indeseadas [17]. De esta forma un paso de Monte Carlo por espín es aproximadamente 10 iteraciones en el programa de Matlab (Ver Anexo).

Para calcular las magnitudes físicas magnetización, energía, susceptibilidad magnética y calor específico es necesario permitir que el sistema evolucione hasta alcanzar el equilibrio. El tiempo de equilibrio tomado fue de 2500 pasos de Monte Carlo por espín (25000 iteraciones en el programa de Matlab). Finalmente, el promedio térmico se tomó sobre 25000 pasos de Monte Carlo por espín. (250000 iteraciones en el programa de Matlab).

Para comprobar que la técnica matricial usada es efectiva, se ha realizado la simulación del modelo de Ising usual en una red de lado $L = 50$. La magnetización obtenida es:

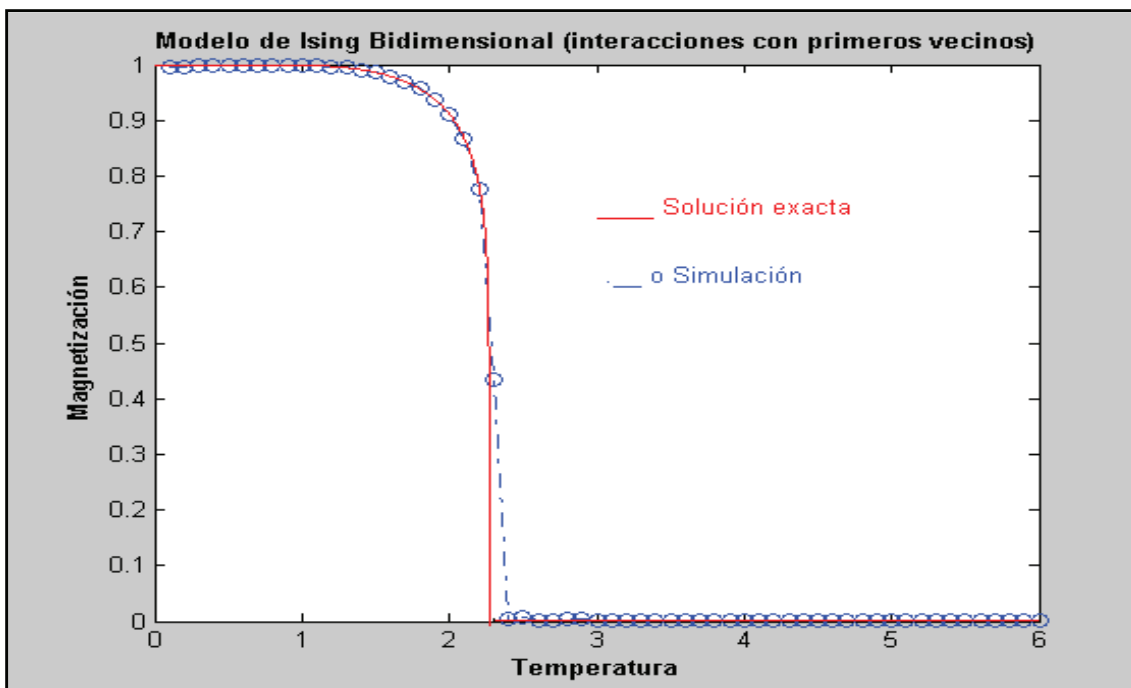


Fig. 5.1 Simulación del Modelo de Ising Bidimensional con interacciones de primeros vecinos mediante el programa de Matlab y solución de Onsager.

Se puede observar que la Magnetización es nula a partir de la temperatura crítica $T_c \approx 2.3$, resultado que se aproxima bastante bien al predicho en la solución de Onsager. Lo que lleva a concluir que la técnica es confiable y puede ser mejorada si los intervalos de temperatura son más cortos.

Regresando a las redes de mundo pequeño, las simulaciones fueron hechas sobre 10 redes generadas para cada modelo y tamaño. Las magnitudes físicas fueron obtenidas del promedio de las 10 redes. Esto se hizo con el objetivo de obtener datos generales. Tanto la magnetización, energía, susceptibilidad y calor específico son el resultado de su promedio térmico y de su promedio sobre el número de redes creadas.

5.1.3.2 REDES CONSIDERADAS PARA LA SIMULACIÓN DEL MODELO DE ISING.

- En el caso unidimensional se consideraron redes de longitud $L = 101, 401, 801, 1601$

En las redes WS se fijó el valor $p = 0.5$. El valor del parámetro p fue escogido de esta manera para asegura las características de mundo pequeño y un coeficiente de agrupamiento alto.

En las redes KA se estableció el valor $m = 1$. Las redes NW se crearon fijando $m = 0$ en el programa que crea redes KA.

- En el caso Bidimensional se consideraron redes de lado $L = 20, 30, 40, 50$

En las redes WS se fijó el valor $p = 0.5$. El valor del parámetro p fue escogido de esta manera para asegura las características de mundo pequeño y un coeficiente de agrupamiento alto.

En las redes KA se fijo el valor $m = 1$, (considerando agregar una conexión por cada nodo). Las redes NW se crearon con $m = 0$ en el programa que crea redes KA.

Finalmente, las redes y sus parámetros considerados para la simulación del modelo de Ising fueron:

Tabla 5.1 Redes consideradas para la simulación del modelo de Ising

Modelos sobre retículos unidimensionales	Modelos sobre retículos bidimensionales
L=101,401,801,1601	L=20,30,40,50
WS ($p=0.5, K=4$)	WS ($p=0.5, K=8$)
NW ($p=1, K=2$)	NW ($p=1, K=4$)
KA ($m=1, p=1, K=2$)	KA ($m=1, p=1, K=4$)

5.1.3.3 CÁLCULO DE LOS EXPONENTES CRÍTICOS Y ESTIMACIÓN DE LA TEMPERATURA CRÍTICA.

La estimación de la temperatura se la ha hecho mediante el uso de los cumulantes de Binder, se graficaron los cumulantes de los distintos tamaños de redes y la temperatura donde ellos se intersecan es la temperatura crítica estimada. El exponente crítico $\bar{\nu}$ se lo ha hallado obteniendo el mejor solapamiento de las curvas de los cumulantes de Binder graficados en función de $\epsilon L^{1/\bar{\nu}}$.

El exponente γ se calculó usando la ecuación

$$\chi = \chi_0 N^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (5.4)$$

Donde χ_0 es una constante, esta relación es válida en T_c .

El exponente α se calcula con la relación de hiperescala (4.105)

5.2 RESULTADOS.

5.2.1 RESULTADOS DE LAS PROPIEDADES DE LAS REDES GENERADAS.

Las redes generadas en matlab por los programas basados en los modelos WS, KA y NW han sido estudiadas y de ellas se ha calculado sus propiedades, encontrando los resultados que se exponen a continuación.

5.2.1.1 REDES UNIDIMENSIONALES

Distribuciones de grado de las redes generadas

Como se puede observar en la Fig. 5.2, la distribución de grado de la red WS es la pronosticada por el modelo (similar a la distribución de poisson con decaimiento exponencial para k altos), mientras que las distribuciones para las redes NW y KA no son tan simétricas como las de WS; sin embargo presentan el máximo en $\langle k \rangle$. El valor de $\langle k \rangle$ no depende del tamaño de las redes lo que es obvio puesto que los modelos intrínsecamente fijan su valor.

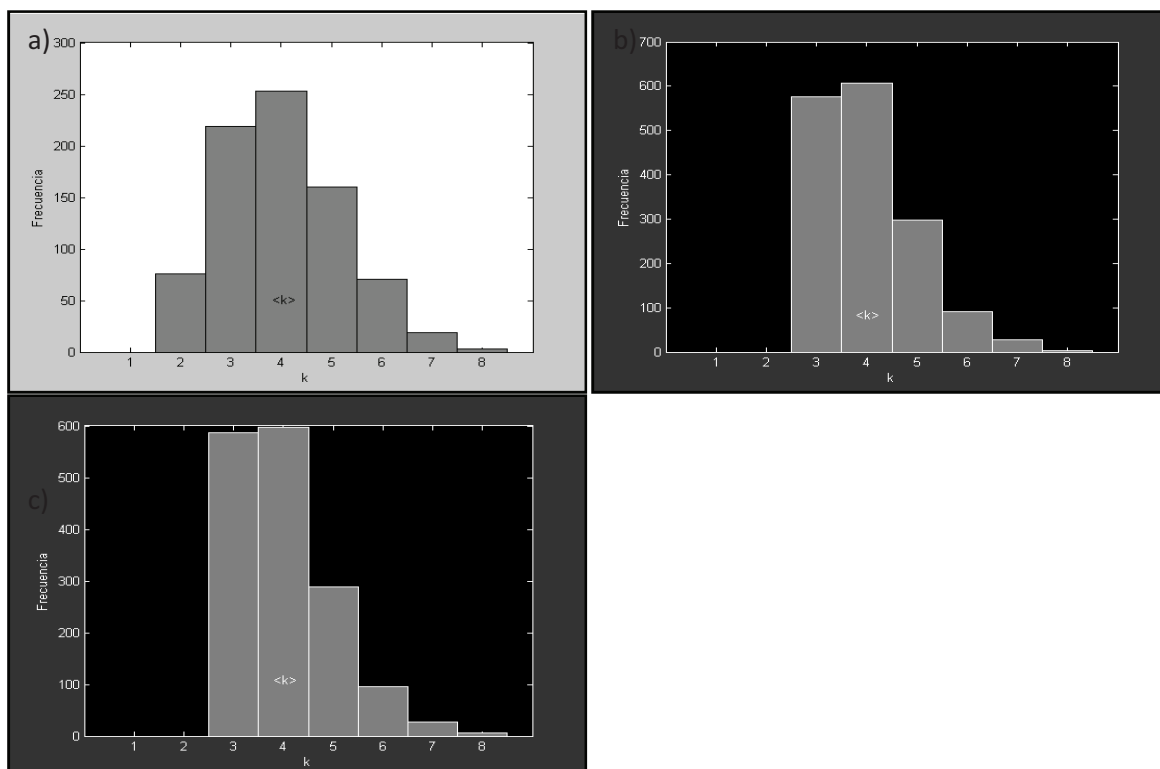


Fig. 5.2 Gráfica de las distribuciones de grado de las redes generadas de tamaño $L = 1601$. a) Red WS. b) Red KA. c) Red NW. Las distribuciones de grado de las redes generadas presentan distribuciones similares a las de poisson, con un pico en su valor medio.

Cálculo de C y l para las redes utilizadas en las simulaciones.

Los coeficientes de agrupamiento y las longitudes de camino promedio han sido calculados para las redes que serán usadas en las simulaciones del modelo de Ising. Los resultados son mostrados en la tabla **Tabla 5.2**, tanto el coeficiente de agrupamiento como la longitud de camino promedio han sido calculadas sobre el promedio de 10 redes generadas para cada modelo.

Tabla 5.2 Coeficiente de agrupamiento C y longitud de camino promedio l de las redes generadas a partir de redes unidimensionales que fueron utilizadas en las simulaciones (en la tabla 5.1 se muestran sus parámetros). Se ha promediado para un total de 10 redes generadas para cada modelo y tamaño.

	WS $\langle k \rangle = 4$				KA $\langle k \rangle = 4$			
L	101	401	801	1601	101	401	801	1601
C	0.1010	0.0790	0.0713	0.0701	0.0845	0.0573	0.0501	0.0434
l	3.5774	4.8057	5.4259	6.0008	3.6717	4.9622	5.6445	6.1974

	NW $\langle k \rangle = 4$			
L	101	401	801	1601
C	0.0343	0.0096	0.0045	0.0021
l	3.5356	4.6940	5.2852	5.8709

Se encontró que la longitud de camino promedio depende logaritmicamente del tamaño de la red (**Fig. 5.3**), demostrando que estas redes heredan este comportamiento de la aleatoriedad de las nuevas conexiones agregadas al sistema.

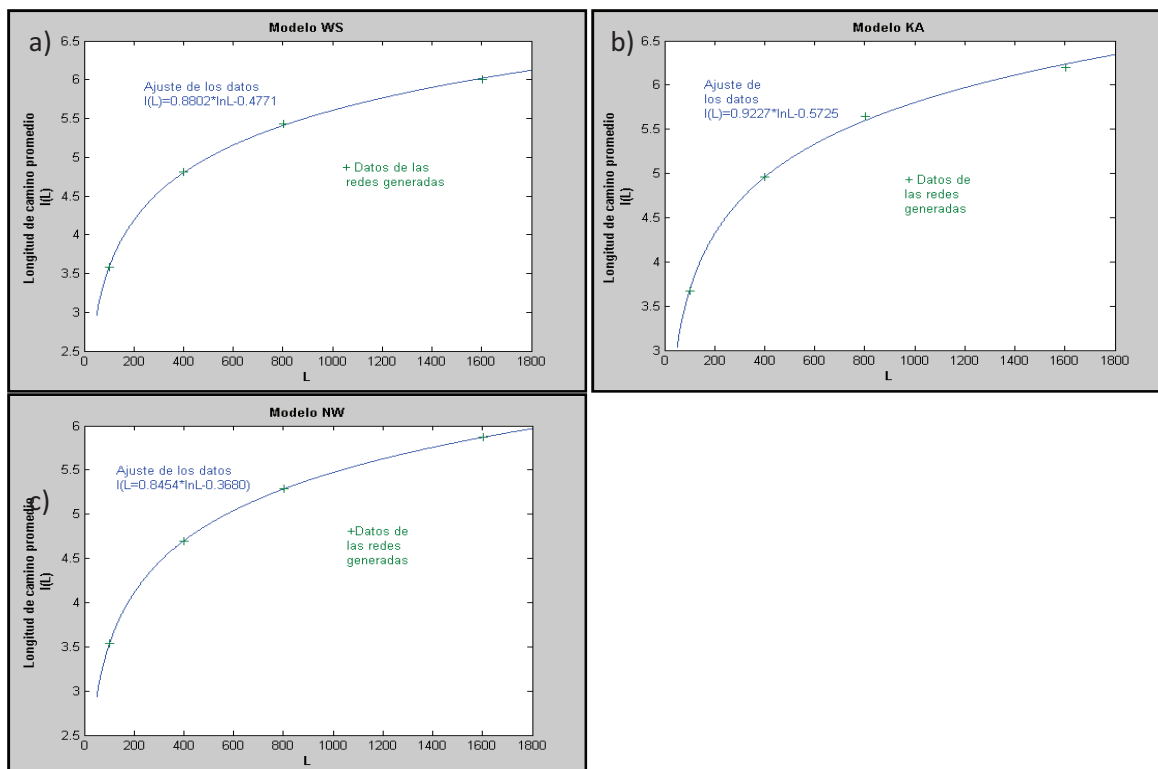


Fig. 5.3 Longitud de camino promedio en función del tamaño de la red. Los datos tienen un comportamiento logarítmico. Se ha realizado un ajuste logarítmico a los valores de l para las redes a) WS, b) KA y c) NW

Análisis de C y l en función de p de las redes generadas bajo el modelo WS.

Según el modelo WS existe una región de valores de p donde el coeficiente de agrupamiento prácticamente es constante y la longitud de camino promedio cae rápidamente (ver la **Fig. 3.7** del capítulo III), el mismo resultado ha sido encontrado en las redes creadas en este trabajo, **Fig. 5.4**.

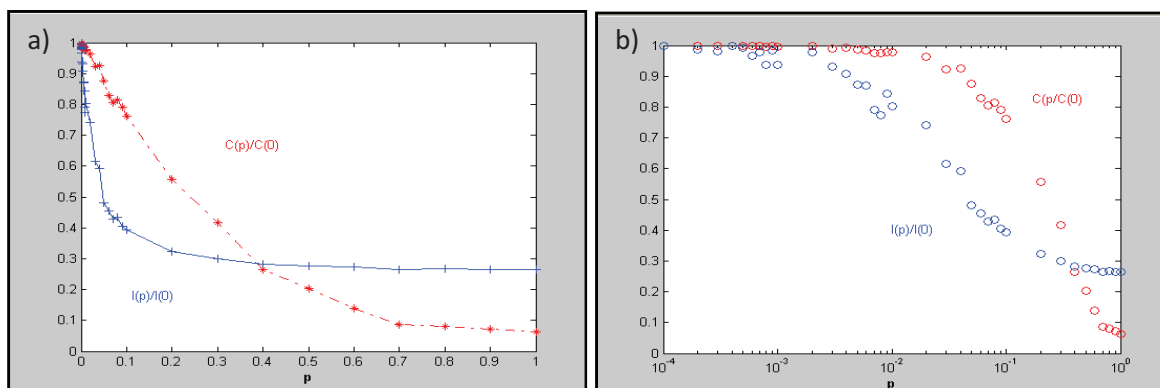


Fig. 5.4 a) Modelo WS ($L = 101, K = 2$). Coeficiente de agrupación y longitud de camino en función del parámetro p . Valores promediados sobre diez redes generadas. b) Gráfica semilogarítmica, se observa una región donde el coeficiente de agrupamiento es grande y la longitud de camino promedio empieza a caer rápidamente

Análisis de C y l en función de m de las redes generadas bajo el modelo KA

Para las redes generadas bajo el modelo KA el coeficiente de agrupamiento y la longitud de camino promedio dependen del valor del parámetro m . Cuando el valor de m crece la probabilidad de formar conexiones de larga distancia disminuye, ocasionando un agrupamiento mayor (Fig. 5.5 a)) y una longitud de camino promedio más grande (Fig. 5.5 b))

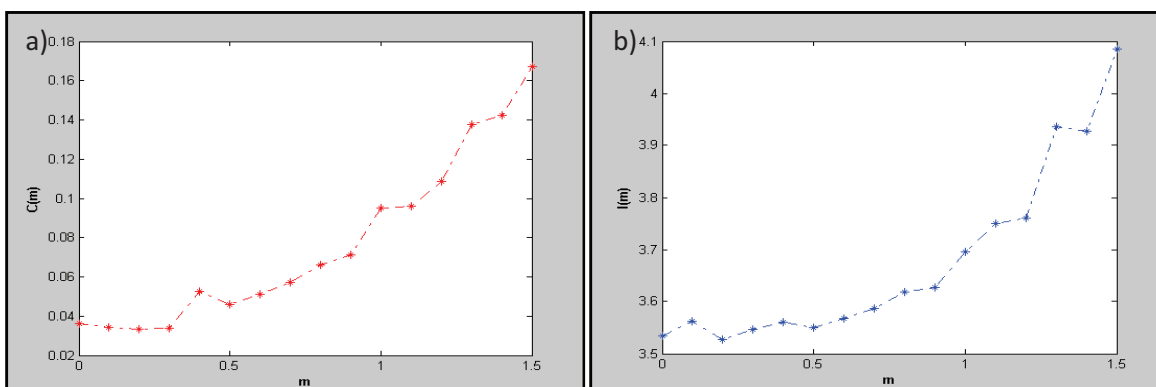
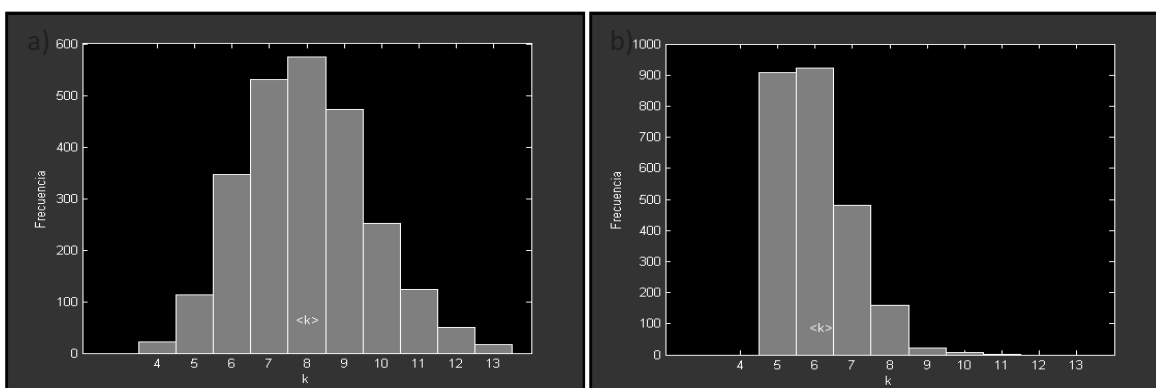


Fig. 5.5 a) Modelo KA ($L = 101, K = 2, p = 1$). Coeficiente de agrupamiento en función del parámetro m . El coeficiente de agrupamiento crece con m . b) Longitud de camino promedio en función del parámetro m . La longitud de camino promedio también crece con m .

5.2.1.2 Redes bidimensionales

Distribuciones de grado de las redes generadas.

Igual que en las redes unidimensionales, el modelo WS posee una distribución de grado muy similar a las redes aleatorias, con un decaimiento exponencial para k altos. También, las tres distribuciones presentan un pico en su valor medio.



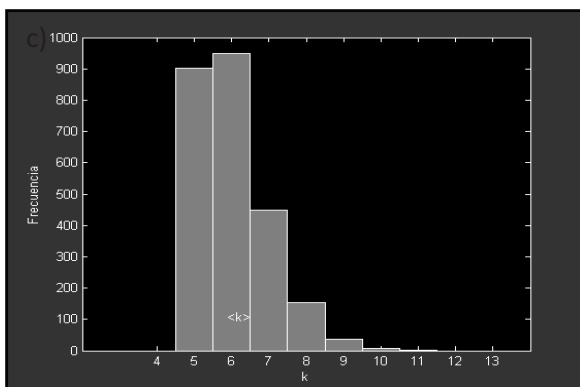


Fig. 5.6 Gráfica de las distribuciones de grado de las redes generadas de tamaño $L = 20$. a) Red WS. b) Red KA. c) Red NW.

Cálculo de C y l para las redes utilizadas en las simulaciones.

El cálculo de los coeficientes de agrupamiento y longitudes de camino promedio muestra que las redes WS, NW y KA sobre retículos bidimensionales manifiestan cualidades de mundo pequeño; es decir, longitudes de camino promedio cortas y por otro lado coeficiente de agrupamiento relativamente altos (**Tabla 5.3**). Las longitudes de camino promedio en función del tamaño de la red tienen un comportamiento logarítmico (**Fig. 5.7**), característica presente en las redes de mundo pequeño.

Tabla 5.3 Coeficiente de agrupamiento C y longitud de camino promedio l de las redes generadas a partir de redes bidimensionales que fueron utilizadas en las simulaciones (en la tabla 5.1 se muestran sus parámetros). Se ha promediado para un total de 10 redes generadas para cada modelo y tamaño.

	WS $\langle k \rangle = 8$				KA $\langle k \rangle = 6$			
L	20	30	40	50	20	30	40	50
C	0.0431	0.0340	0.0320	0.0291	0.0573	0.0410	0.0381	0.0357
l	3.1637	3.5857	3.8708	4.1216	3.9465	4.5096	4.9495	5.2879

NW $\langle k \rangle = 6$				
L	20	30	40	50
C	0.0242	0.0143	0.0096	0.0076
l	3.8260	4.3679	4.7470	5.0449

Por la forma en que se han creado las redes WS KA y NW, donde $K = 8$ se ha adicionado sólo una arista por cada nodo, estas redes tienen $\langle k \rangle$ menores a las redes WS, pero poseen longitudes de camino pequeñas y coeficientes de agrupamiento apreciables.

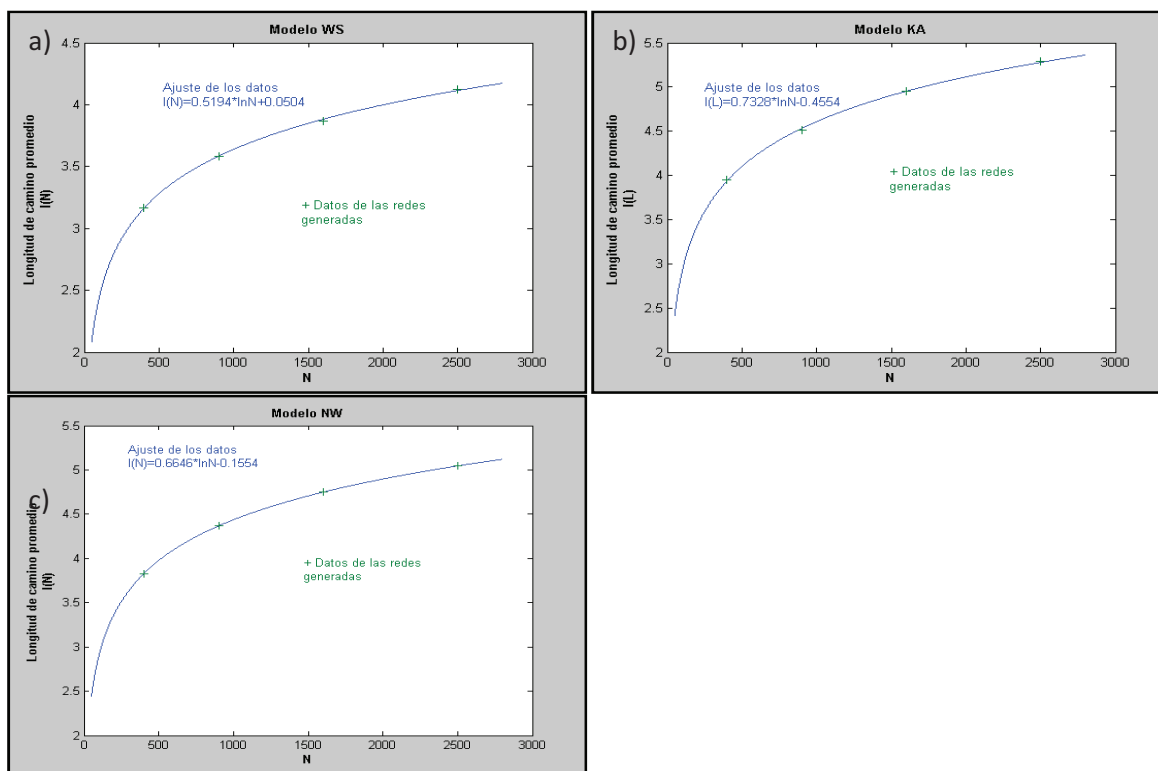


Fig. 5.7 Longitud de camino promedio en función del tamaño de la red. Los datos tienen un comportamiento logarítmico. Se ha realizado un ajuste logarítmico a los valores de l para las redes a) WS, b) KA y c) NW

Análisis de C y l en función de p de las redes generadas bajo el modelo WS.

El comportamiento del coeficiente de agrupamiento y la longitud de camino promedio es el mismo que predice el modelo WS (Fig. 5.8 similar a la Fig. 3.7 encontrada por Watts y Strogatz (1998))

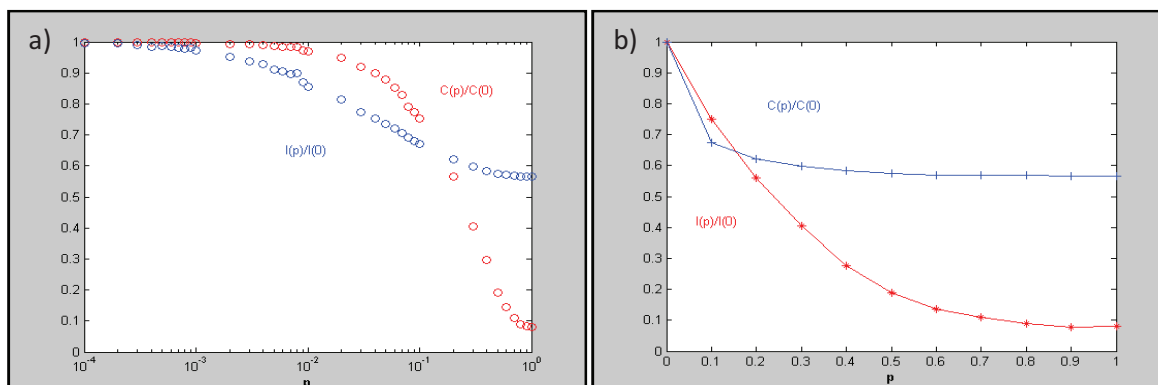


Fig. 5.8 a) Modelo WS ($L = 20, K = 8$). Coeficiente de agrupación y longitud de camino en función del parámetro p . Valores promediados sobre diez redes generadas. b) Gráfica semilogarítmica. Igual que en las redes unidimensionales, se observa una región donde el coeficiente de agrupamiento es grande y la longitud de camino promedio empieza a caer.

Análisis de C y l en función de m de las redes generadas bajo el modelo KA

Finalmente, la Fig. 5.9 muestra el comportamiento creciente de la longitud de camino promedio y el coeficiente de agrupamiento en función del parámetro m en las redes KA.

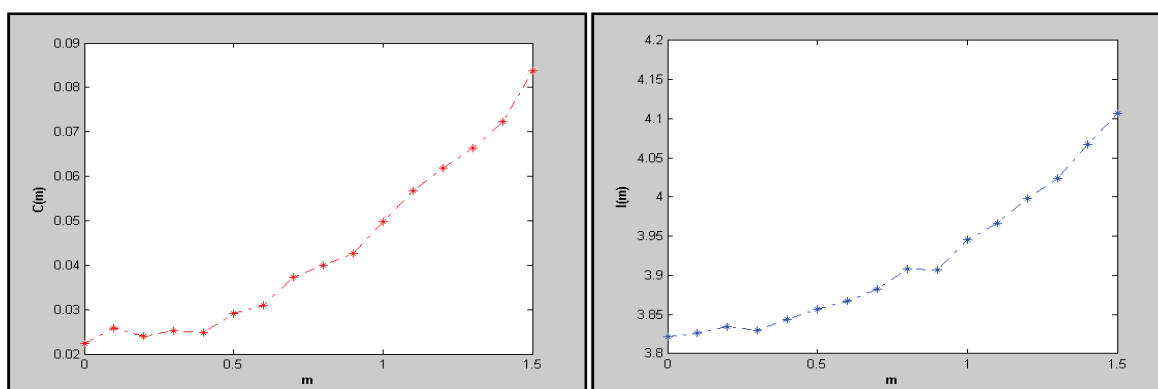


Fig. 5.9 a) Modelo KA ($L = 20, K = 4, p = 1$). Coeficiente de agrupamiento en función del parámetro m . El coeficiente de agrupamiento crece con m . B) Longitud de camino promedio en función del parámetro m . La longitud de camino promedio también crece con m .

5.2.2 RESULTADOS DE LAS SIMULACIONES DEL MODELO DE ISING

5.2.2.1 MODELOS UNIDIMENSIONALES.

Modelo WS ($\rho=0.5, K=4$)

Las simulaciones del modelo de Ising sobre la red WS han permitido calcular las magnitudes físicas relevantes (Fig. 5.10), la magnetización se anula para temperaturas mayores a aproximadamente $T_c = 3 \frac{J}{k}$ y la energía muestra un punto de inflexión. La susceptibilidad magnética presenta un pico en T_c , siendo más pronunciado para la red de lado $L = 1601$ e igualmente el calor específico presenta un pico en T_c , sugiriendo la divergencia de la susceptibilidad magnética y el calor específico en T_c en el límite termodinámico.

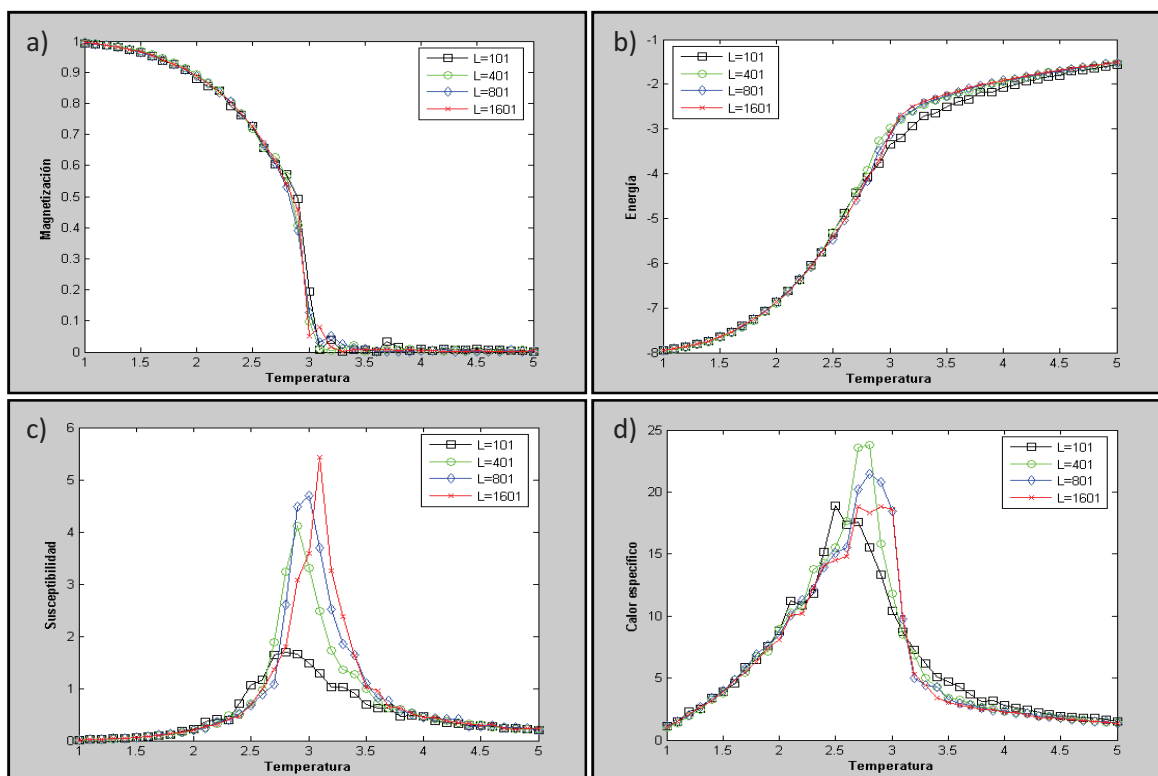


Fig. 5.10 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura: a) Magnetización, b) Energía por espín, c) Susceptibilidad magnética y d) Calor específico

Se ha estimado el valor de la temperatura crítica graficando los cumulantes de Binder para cada tamaño de la red, la intersección da el punto estimado $T_c \approx 3.1122 \frac{J}{k}$ (Fig. 5.11a). El mejor colapso de los cumulantes de Binder para los distintos tamaños se produce con $\bar{\nu} \approx 2$ (Fig. 5.11b) y mediante el análisis de

escalamiento finito de la susceptibilidad se encontró $\gamma \approx 1.0390$ ya que por la pendiente de la curva (Fig. 511c) se tiene que $\gamma \approx 0.5195\bar{\nu}$.

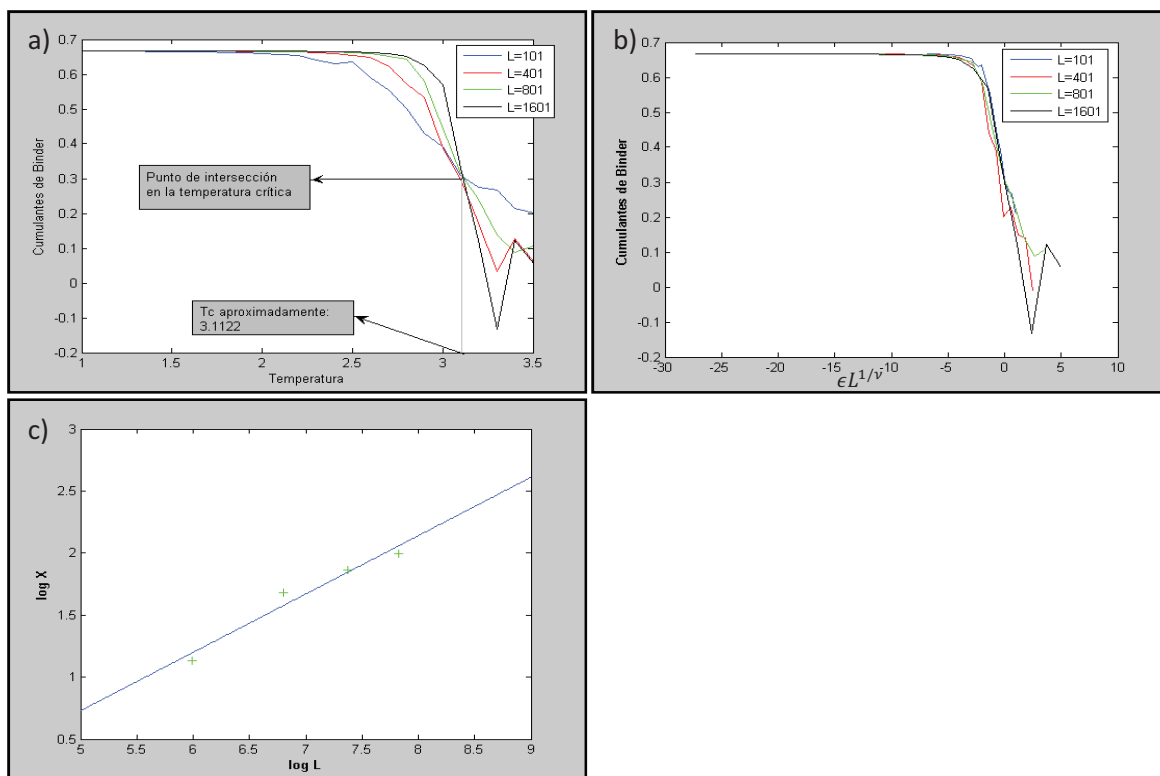
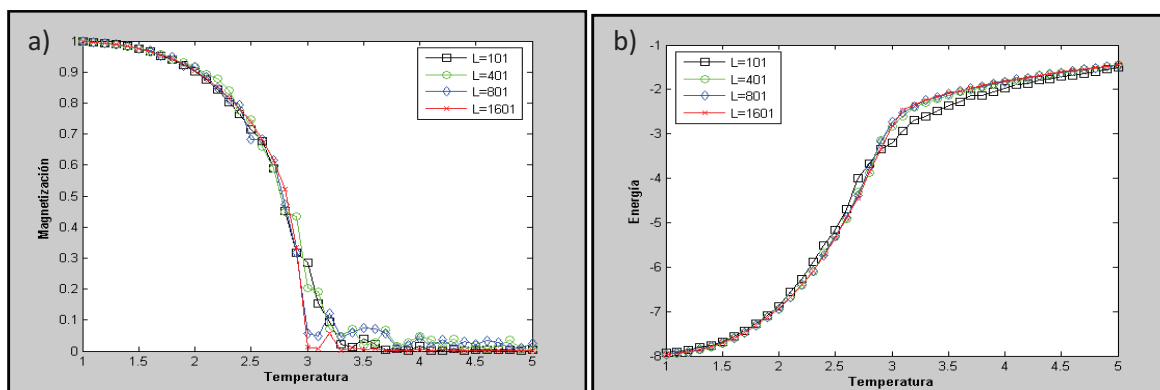


Fig. 5.11 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder, b) Colapso de los cumulantes de Binder usando $\bar{\nu} \approx 2$, c) Escalamiento finito de la susceptibilidad magnética la pendiente de la curva es aproximadamente $\gamma/\bar{\nu}$.

Modelo NW ($p=1, K=2$)

Para el modelo NW las simulaciones muestran una transición de fase que aproximadamente se da lugar en la temperatura de $3\frac{J}{k}$, en este punto la susceptibilidad magnética y el calor específico presentan un pico, sugiriendo una transición de segundo orden.



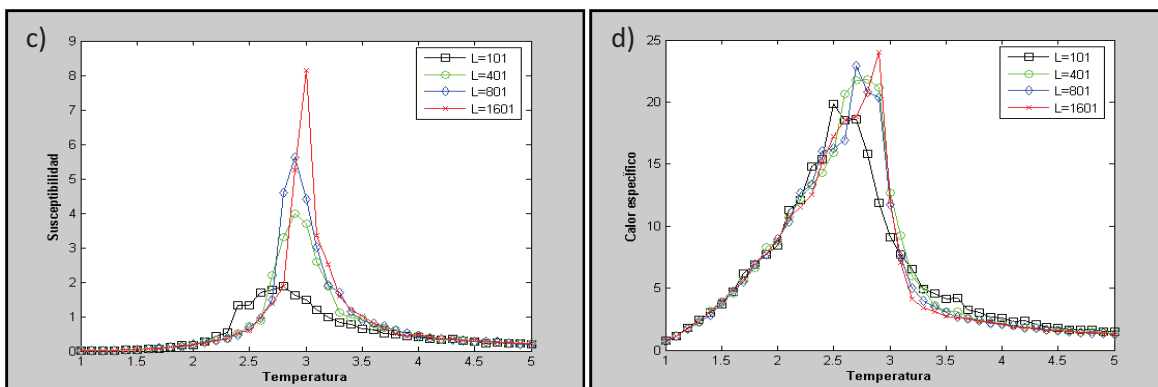


Fig. 5.12 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura: a) Magnetización, b) Energía por espín, c) Susceptibilidad magnética y d) Calor específico

Al igual que en el modelo WS es necesario estimar de mejor manera la temperatura crítica (Fig.5.13 a) y para ello se ha usado el método de los cumulantes de Binder, encontrando $T_c \approx 3.1 \frac{J}{k}$. Para el cálculo de los exponentes críticos se ha realizado el análisis de escalamiento, encontrando $\bar{\nu} \approx 2$ y $\gamma \approx 1.2522$ (Fig.5.13 b y c)

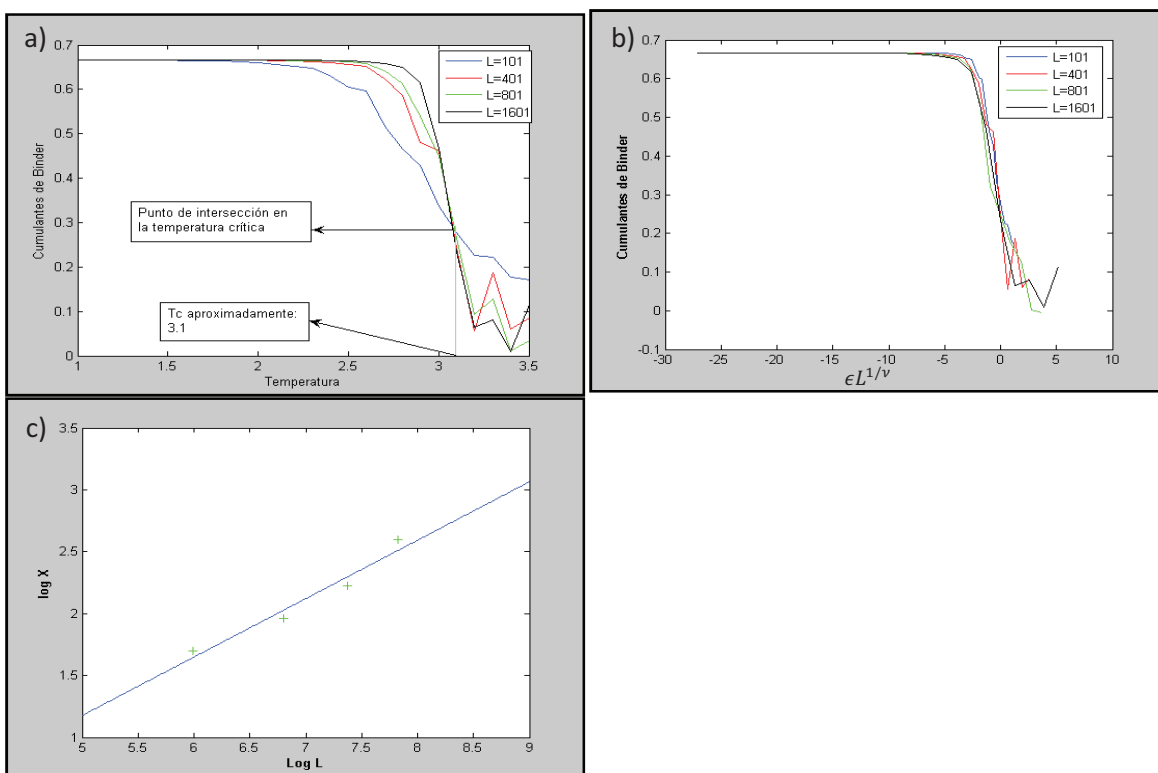


Fig. 5.13 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder, b) Colapso de los cumulantes de Binder usando $\bar{\nu} \approx 2$, c) Escalamiento finito de la susceptibilidad magnética la pendiente de la curva es aproximadamente $\gamma/\bar{\nu}$.

Modelo KA ($m=1$, $p=1$, $K=2$)

El modelo KA presenta transición de fase continua a una temperatura de $3\frac{J}{k}$. Cerca a esta temperatura la magnetización se anula; además, el comportamiento de la susceptibilidad y calor específico sugieren una divergencia en el límite termodinámico.

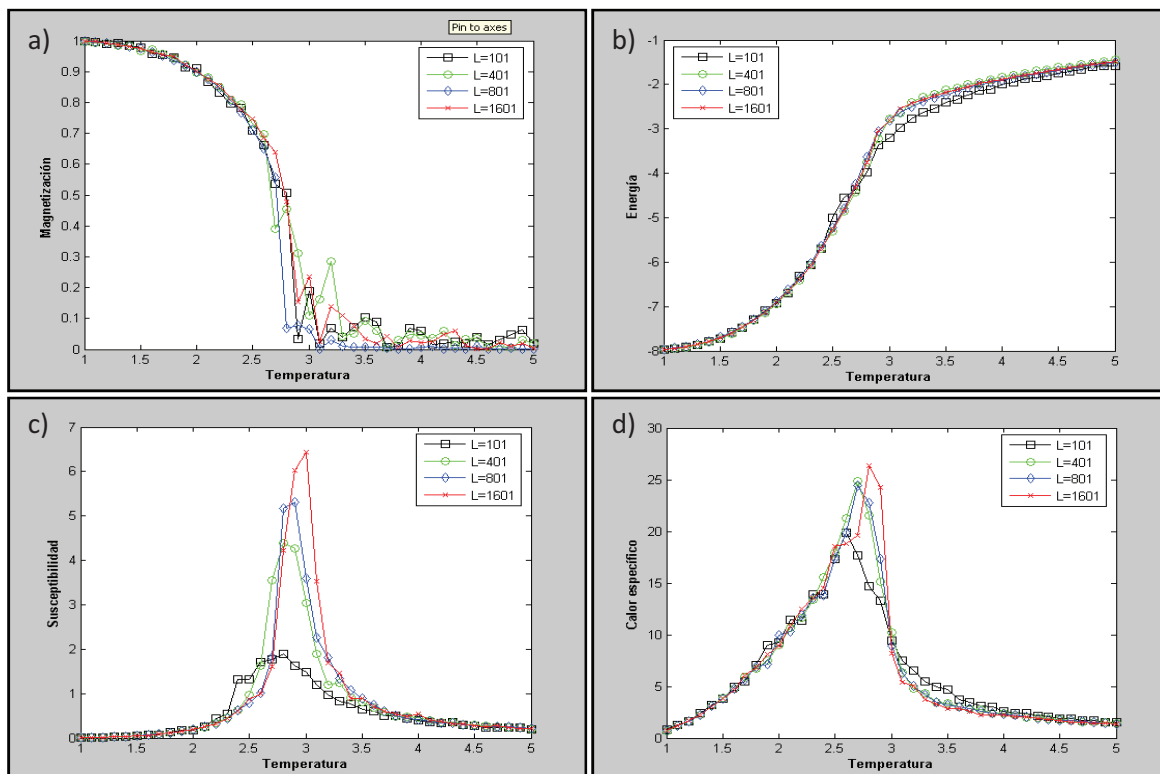
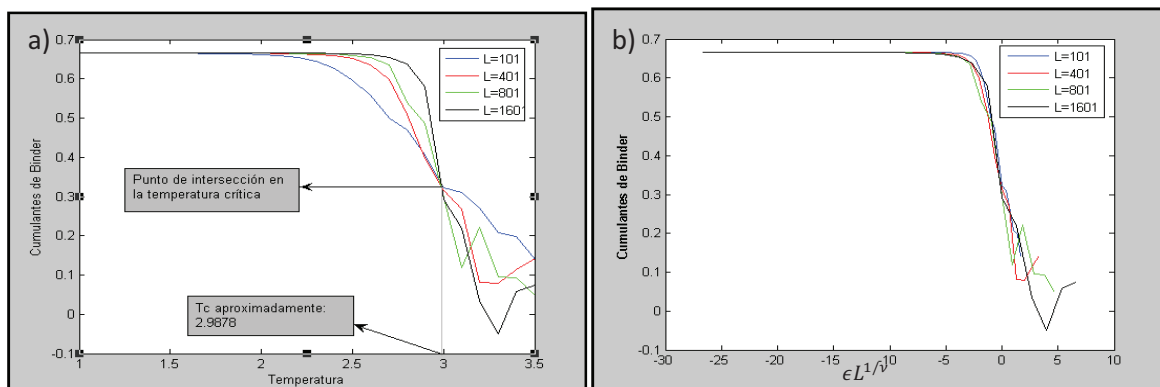


Fig. 5.14 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura: a) Magnetización, b) Energía por espín, c) Susceptibilidad magnética y d) Calor específico

El método de los cumulantes de Binder (Fig. 5.15 a) estima una temperatura $T_c \approx 2.9878\frac{J}{k}$. El colapso de los cumulantes de Binder y el escalamiento de la susceptibilidad magnética se muestran en las Fig. 5.15 b y c., cuyo análisis estima que $\bar{\nu} \approx 2$ y $\gamma \approx 1.0095$.



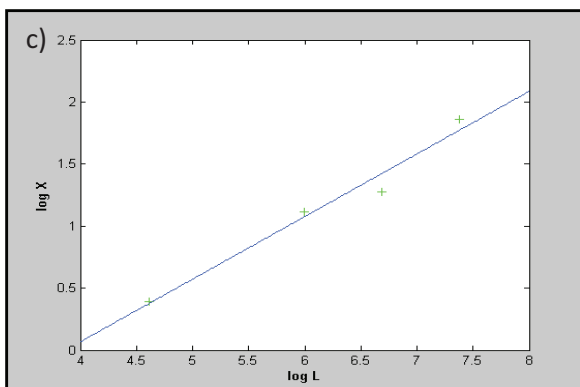


Fig. 5.15 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder, b) Colapso de los cumulantes de Binder usando $\bar{\nu} \approx 2$, c) Escalamiento finito de la susceptibilidad magnética la pendiente de la curva es aproximadamente $\gamma/\bar{\nu}$.

Resumen

Las simulaciones muestran transiciones de fase continuas, donde las temperaturas críticas son de aproximadamente $3\frac{J}{k}$ para los tres modelos. Mediante el método de los cumulantes de Binder se logra estimar de mejor manera la temperatura crítica, mostrando que existen diferentes valores para los tres modelos (Tabla 5.4).

Tabla 5.4 Comparación de la estimación de la temperatura crítica mediante las graficas de las magnitudes físicas y la estimación mediante el método de los cumulantes de Binder.

Modelo	Estimación de T_c mediante:	
	Magnitudes	Cumulantes
WS	$T_c \approx 3\frac{J}{k}$	$T_c \approx 3.1122\frac{J}{k}$
NW	$T_c \approx 3\frac{J}{k}$	$T_c \approx 3.1\frac{J}{k}$
KA	$T_c \approx 3\frac{J}{k}$	$T_c \approx 2.9878\frac{J}{k}$

En los tres modelos la transición de fase es tipo campo medio, ya que el valor de sus exponentes críticos se aproximan bastante bien a $\beta = \frac{1}{2}$, $\gamma = 1$, $\bar{\nu} = 2$ y $\alpha = 0$, donde los exponentes críticos β y α han sido calculados usando las igualdades de Igualdad de Rushbrooke e hiperescala respectivamente. Usando la teoría de campo medio se puede estimar T_c .

$$T_c = \frac{J\langle k \rangle}{k}$$

Tabla 5.5 Estimación de la temperatura crítica mediante la teoría de campo medio.

Aproximación con la teoría de campo medio		
WS	$\langle k \rangle = 4$	$T_c = 4 \frac{J}{k}$
NW	$\langle k \rangle = 4$	$T_c = 4 \frac{J}{k}$
KA	$\langle k \rangle = 4$	$T_c = 4 \frac{J}{k}$

La teoría de campo medio predice una temperatura crítica de $4 \frac{J}{k}$ en los tres modelos y es la misma predicción que hace para el modelo de Ising bidimensional con interacciones de primeros vecinos.

5.2.2.2 MODELOS BIDIMENSIONALES.

Modelo WS ($\rho=0.5, K=8$)

El modelo de Ising sobre la red WS creada a partir de una red regular bidimensional exhibe una transición de fase de segundo orden en la temperatura de $7 \frac{J}{k}$. En la Fig. 516 se muestran las magnitudes físicas encontradas para este modelo

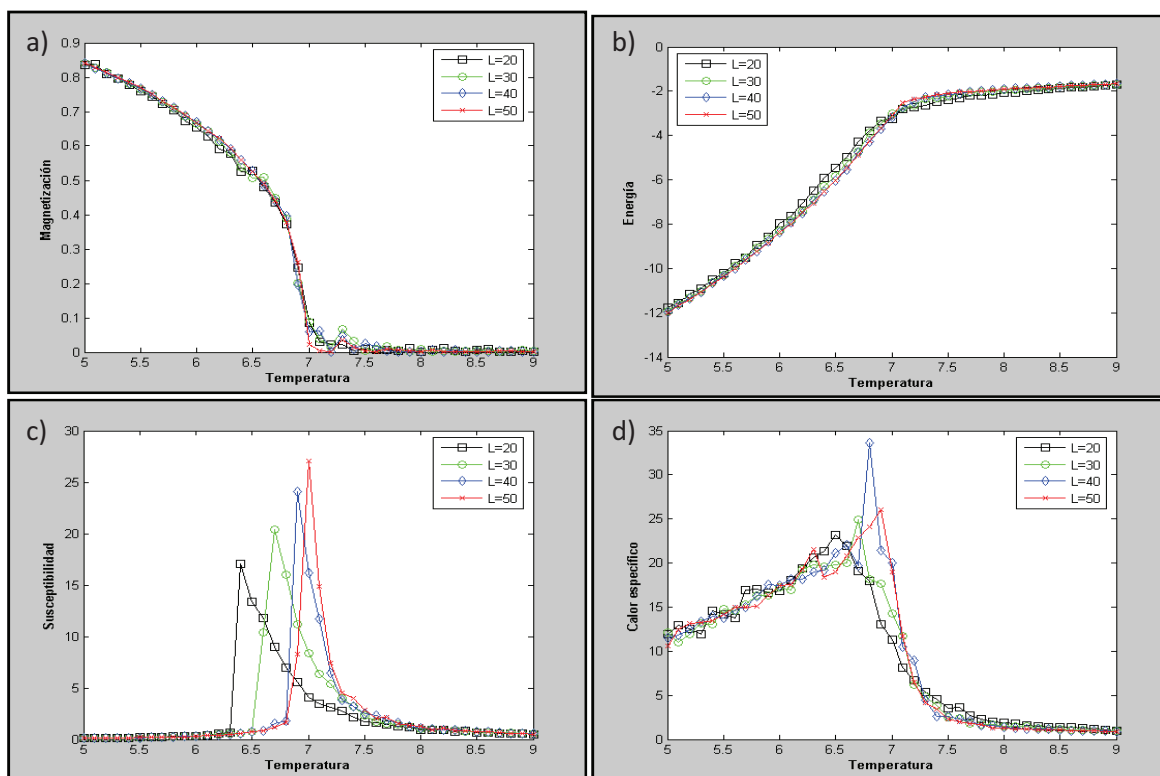


Fig. 5.16 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura: a) Magnetización, b) Energía por espín, c) Susceptibilidad magnética y d) Calor específico

El respectivo análisis de los cumulantes de Binder estima que la temperatura crítica es $T_c \approx 7.2 \frac{J}{k}$. Mediante el solapamiento de las curvas de los cumulantes de Binder se ha encontrado el exponente $\bar{\nu} \approx 2$ y el análisis de escalamiento finito de la susceptibilidad magnética estima el valor de $\gamma \approx 0.9409$. Estos análisis se muestran en la Fig. 5.17.

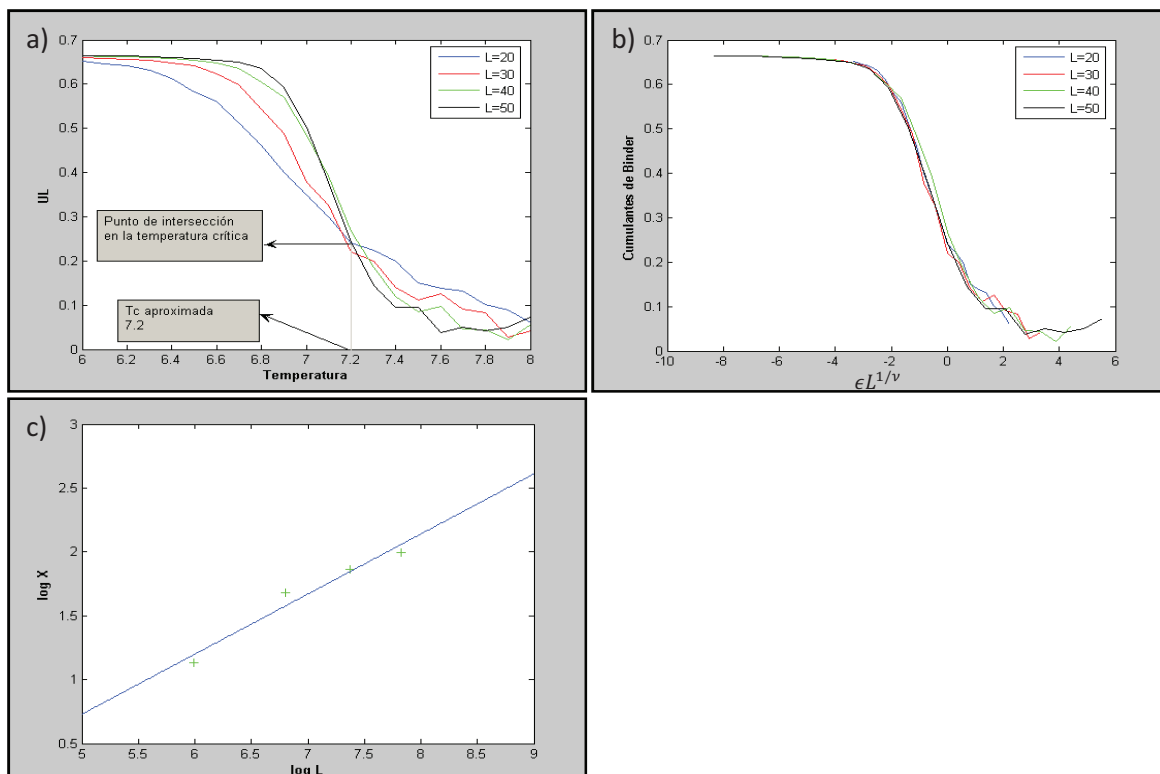
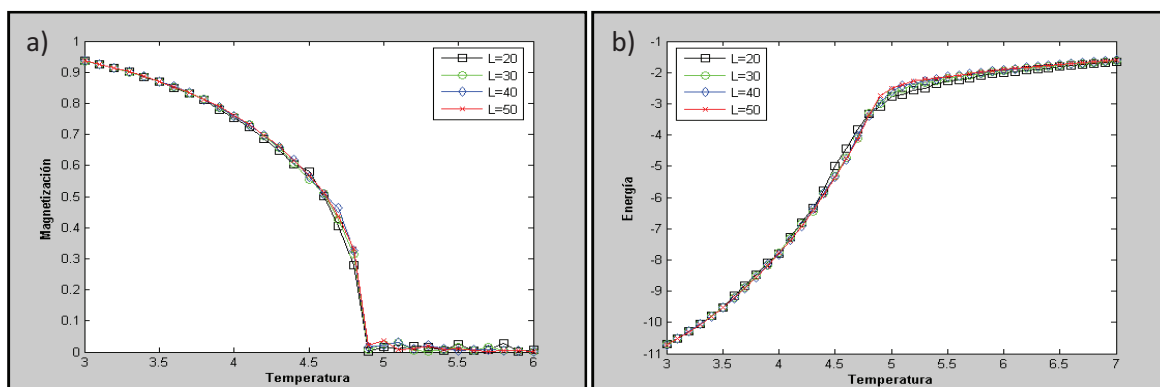


Fig. 5.17 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder, b) Colapso de los cumulantes de Binder usando $\bar{\nu} \approx 2$, c) Escalamiento finito de la susceptibilidad magnética la pendiente de la curva es $\gamma/\bar{\nu}$.

Modelo NW ($p=1$, $K=4$)

Las simulaciones sobre este modelo han permitido calcular las magnitudes físicas, demostrando que existe una transición de fase de segundo orden en una temperatura aproximada de $4.9 \frac{J}{k}$. La fig. 5.18 muestra estos resultados.



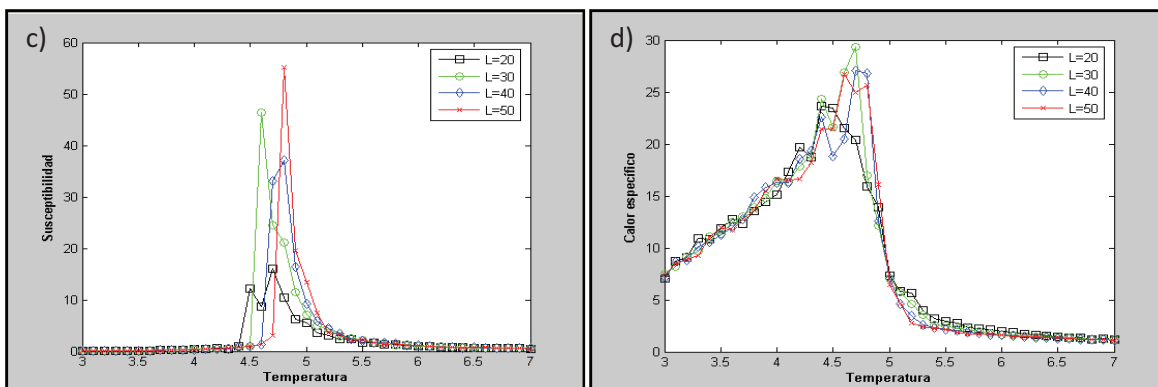


Fig. 5.18 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura: a) Magnetización, b) Energía por espín, c) Susceptibilidad magnética y d) Calor específico

La estimación de la temperatura crítica a través de los cumulantes de Binder es de $T_c \approx 4.9404$ (Ver Fig. 19 a). Para verificar si la transición de fase es de tipo teoría de campo medio se han calculado los exponentes críticos. El mejor solapamiento de las curvas de los cumulantes de Binder se produce con $\bar{\nu} \approx 2$ y el análisis de escalamiento de la susceptibilidad magnética muestra que $\gamma \approx 0.9441$ (Ver Fig. 19 b y c).

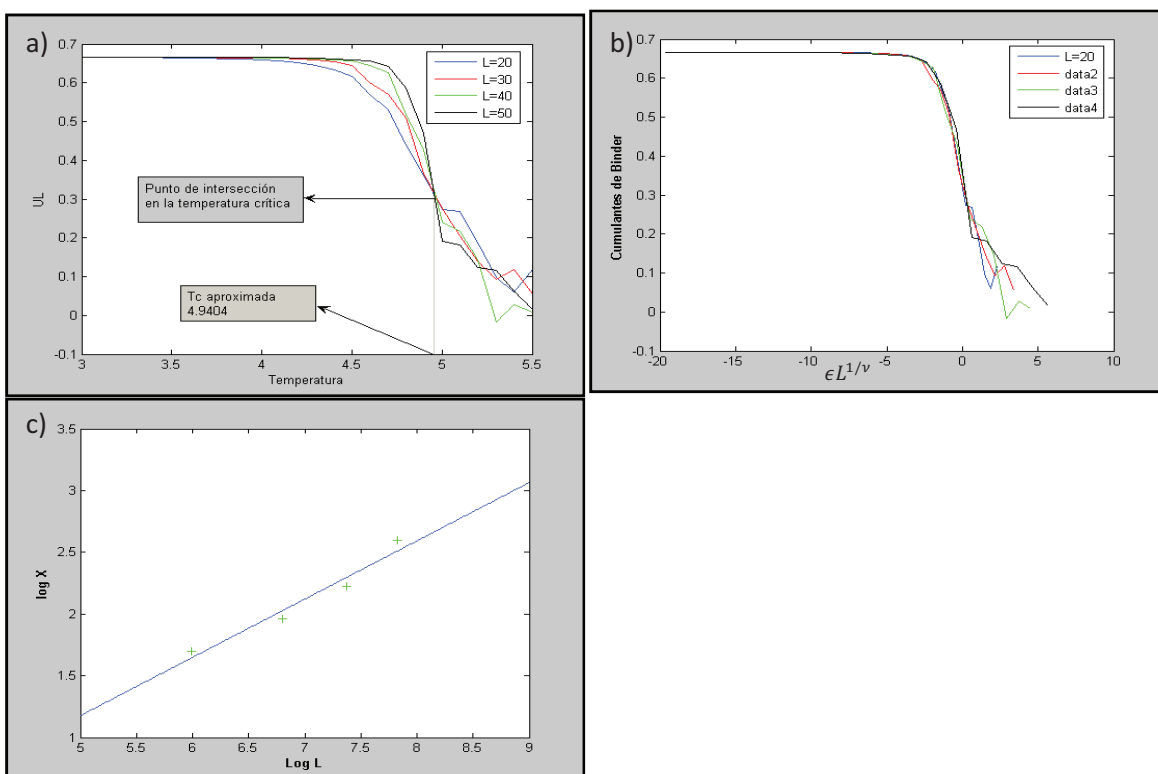


Fig. 5.19 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder, b) Colapso de los cumulantes de Binder usando $\bar{\nu} \approx 2$, c) Escalamiento finito de la susceptibilidad magnética la pendiente de la curva es $\gamma/\bar{\nu}$.

Modelo KA ($m=1, p=1, K=4$)

Finalmente, Las simulaciones del modelo de Ising en las redes KA también muestran transiciones de fase de segundo orden, se ha calculado las magnitudes físicas y mediante ellas se estima que la temperatura de transición es de aproximadamente $4.9 \frac{J}{k}$.

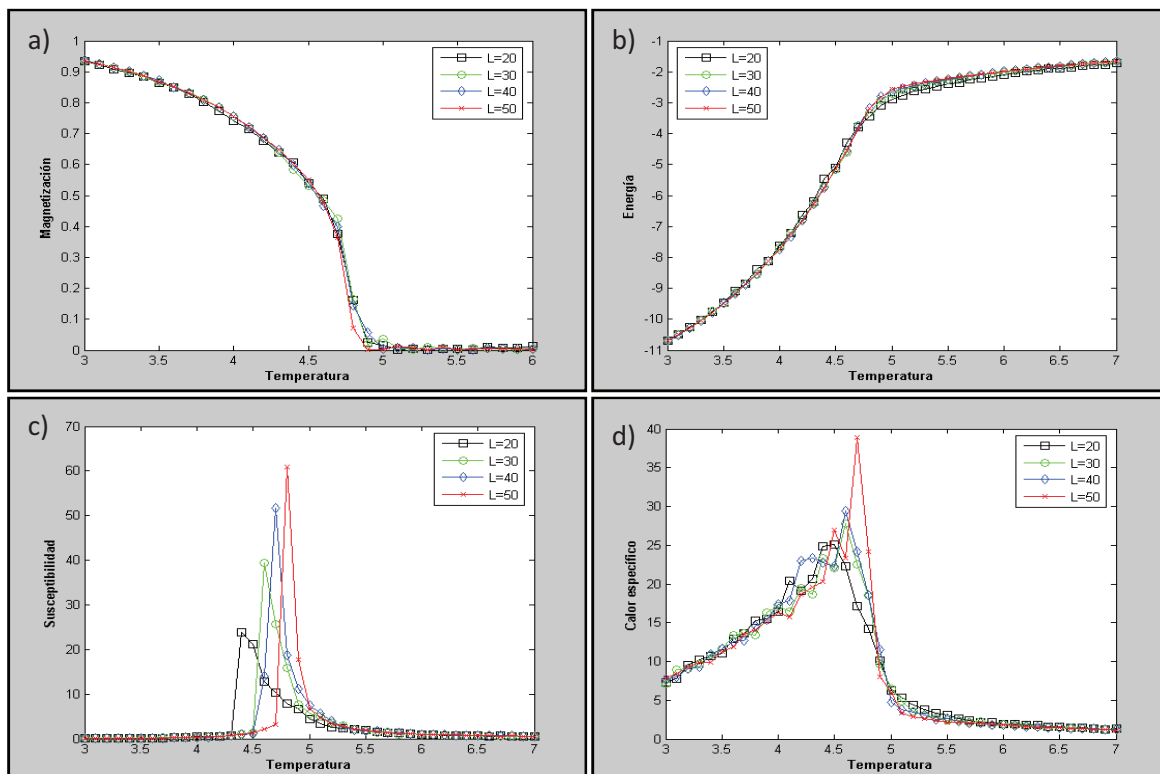
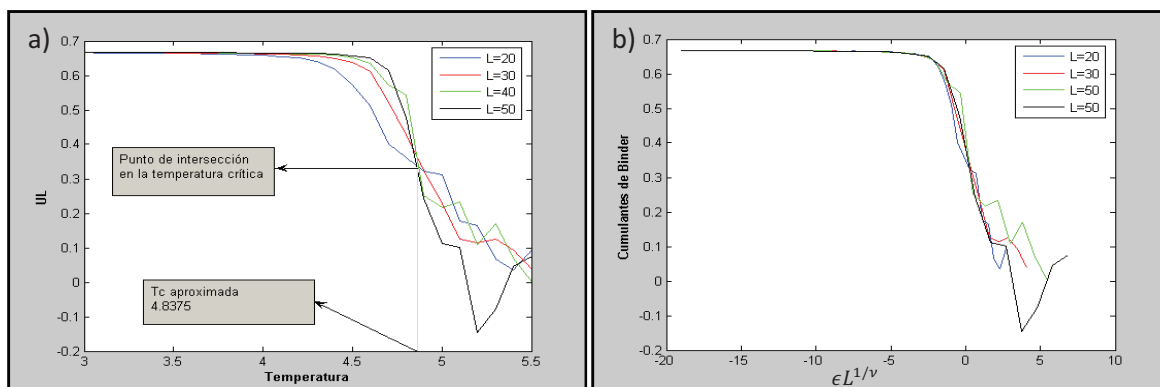


Fig. 5.20 Gráficas de las magnitudes físicas en función de la temperatura: a) Magnetización, b) Energía por espín, c) Susceptibilidad magnética y d) Calor específico

Se estimó la temperatura crítica usando los cumulantes de Binder, el punto de intersección sugiere que $T_c \approx 4.8375 \frac{J}{k}$ (Ver Fig. 519 a). A través del mejor solapamiento de los cumulantes de Binder se obtuvo $\bar{\nu} \approx 2$ y el escalamiento de la susceptibilidad magnética muestra que $\gamma \approx 1.1596$ (Ver Fig. 5.19 b y c).



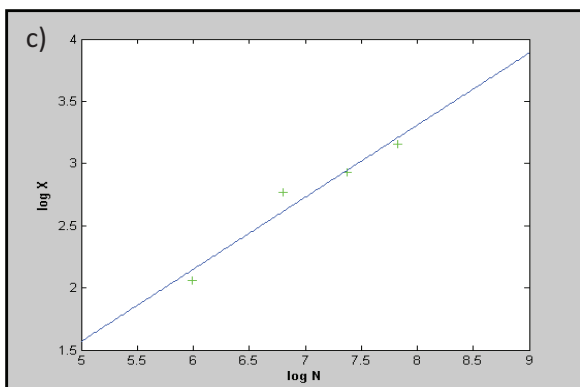


Fig. 5.21 a) Estimación de la temperatura crítica mediante la intersección de los cumulantes de Binder, b) Colapso de los cumulantes de Binder usando $\bar{\nu} \approx 2$, c) Escalamiento finito de la susceptibilidad magnética la pendiente de la curva es $\gamma/\bar{\nu}$.

Resumen

Las simulaciones del modelo de Ising sobre las redes creadas a partir de grafos regulares bidimensionales exhiben transiciones de fase tipo teoría de campo medio ya que los exponentes críticos lo confirman. Además, se confirma que el método de los cumulantes de Binder es efectivo y permite encontrar una estimación a la temperatura crítica mucho mejor que la que se puede encontrar mediante la utilización de los gráficos de las magnitudes (Ver tabla 5.6).

Tabla 5.6 Estimación de la temperatura crítica mediante los cumulantes de Binder y comparación con la estimación de la temperatura crítica a partir del comportamiento de las magnitudes Físicas.

Modelo	Estimación de T_c mediante:	
	Magnitudes	Cumulantes
WS	$T_c \approx 7 \frac{J}{k}$	$T_c \approx 7.2 \frac{J}{k}$
NW	$T_c \approx 4.9 \frac{J}{k}$	$T_c \approx 4.9404 \frac{J}{k}$
KA	$T_c \approx 4.8 \frac{J}{k}$	$T_c \approx 4.8375 \frac{J}{k}$

Las predicciones de la teoría de campo medio para los T_c son

$$T_c = \frac{J\langle k \rangle}{k}$$

Tabla 5.7 Estimación de la temperatura crítica mediante la teoría de campo medio.

Aproximación con la teoría de campo medio		
WS	$\langle k \rangle = 8$	$T_c = 8 \frac{J}{k}$
NW	$\langle k \rangle = 6$	$T_c = 6 \frac{J}{k}$
KA	$\langle k \rangle = 6$	$T_c = 6 \frac{J}{k}$

Como se dijo en el capítulo II, la teoría de campo medio predice mejor la T_c para $\langle k \rangle$ altos. La temperatura crítica de la teoría de campo medio para WS es la más cercana con respecto a las simulaciones.

CAPÍTULO VI

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

6.1 CONCLUSIONES.

En este trabajo se ha estudiado el modelo de Ising en redes de topología de mundo pequeño. Particularmente en redes creadas bajo los modelos WS, NW y KA. Estas redes fueron desarrolladas sobre grafos regulares unidimensionales y bidimensionales. Las redes creadas tienen propiedades que coinciden con la predicción de sus modelos.

Las longitudes de camino promedio crecen logarítmicamente con el tamaño de las redes, heredando este comportamiento de las redes aleatorias. Por otro lado, las redes generadas tienen coeficientes de agrupamiento relativamente grandes y mayores que los grafos aleatorios. Esto es coherente con lo anunciado en [6-9]; las redes que se generaron bajo los modelos WS, NW y KA poseen propiedades tanto de las redes regulares como de las aleatorias.

Las gráficas C y l vs p de las redes WS bidimensionales y unidimensionales coinciden con los análisis hechos por Watts y Strogatz (1998) en [6]. Por otro lado, las gráficas C y l vs m de las redes KA bidimensionales y unidimensionales son crecientes, comportamiento que es descrito en [9]. Las distribuciones de grado de las redes utilizadas presentan un pico en el valor medio. Ellas son similares a la distribución de poisson, tal comportamiento coincide con lo mencionado en la referencia [4].

Las generaciones de las redes no han requerido de mucho tiempo computacional. Igualmente, el cálculo de sus coeficientes de agrupamiento no ha utilizado muchos recursos. Sin embargo, el cálculo de las longitudes de camino promedio para las redes grandes ha necesitado de tiempos largos. Por este motivo las propiedades de las redes han sido obtenidas promediando las propiedades de solo 10 redes. Un mejor resultado se hubiera obtenido generando una cantidad más grande de redes.

En las simulaciones del modelo de Ising se utilizó el método de Monte Carlo Métrópolis con una modificación, la misma que consiste en explorar todos los espines en cada iteración. Esta técnica estudiada en la Ref. [17] para el modelo de Ising usual ha sido adaptada para este estudio, mostrando resultados satisfactorios. Los tiempos computacionales se han reducido notablemente pues la técnica permite realizar 10 pasos de Monte Carlo por cada 1 que se logran con el método usual.

Sobre las redes generadas con los parámetros descritos en la **tabla 5.1** se realizaron las simulaciones del modelo de Ising y los datos se obtuvieron al promediar los resultados de las simulaciones sobre diez redes generadas. Los

resultados de las simulaciones coinciden con trabajos similares, donde otros autores también han encontrado comportamiento de tipo teoría de campo medio en el modelo de Ising sobre redes de mundo pequeño, generadas a partir de redes regulares unidimensionales [20-24]. Los trabajos sobre redes de mundo pequeño generadas a partir de grafos bidimensionales no son muchos, existiendo resultados para el modelo WS [22,25], estos trabajos muestran los mismos resultados encontrados en nuestro análisis. Un aporte de este trabajo fue el haber incluido las redes KA generadas sobre grafos bidimensionales y demostrar que en ellas también existe una transición de tipo teoría de campo medio.

La topología de mundo pequeño ha inducido una transición de fase en las redes unidimensionales. Las redes unidimensionales regulares no presentan transiciones de fase; mientras que, si se añaden conexiones de acuerdo a los modelos WS, NW y KA, estas presentan una transición de fase a una temperatura distinta de cero. Las conexiones de larga distancia facilitan la correlación entre los espines de la red, haciendo que la longitud de correlación disminuya.

En el modelo de Ising sobre las redes de mundo pequeño generadas a partir de grafos unidimensionales se encontró que la temperatura de transición estimada con el método de los cumulantes de Binder fue de $3.1122 \frac{J}{k}$ para el modelo WS, $3.1 \frac{J}{k}$ en el modelo NW, y para el modelo KA la temperatura crítica encontrada fue de aproximadamente $2.9878 \frac{J}{k}$. Estas transiciones presentan un pico en la susceptibilidad y calor específico que permiten una estimación de $3 \frac{J}{k}$ para la temperatura crítica en los tres modelos.

Por otro lado, las redes WS, NW y KA generadas sobre grafos bidimensionales presentan una transición de fase en $7.2 \frac{J}{k}$, $4.8375 \frac{J}{k}$ y $4.9404 \frac{J}{k}$, respectivamente, estimadas mediante los cumulantes de Binder. Las temperaturas críticas se han desplazado en comparación con el modelo de Ising en la red regular, donde $T_c \approx 2.269185 \frac{J}{k}$. Las conexiones de mundo pequeño han facilitado el paso de la información entre espines.

Un resultado importante muestra que el análisis del escalamiento finito del modelo de Ising sobre redes no regulares puede ser llevado a cabo tomando en cuenta que existe una dimensión efectiva para la cual la relación de hiperescalamiento se cumple. La forma de escala de la susceptibilidad magnética y de los cumulantes de Binder fueron usados para calcular los exponentes críticos de las transiciones de fase, encontrando que todas ellas presentan transición de tipo teoría de campo medio.

El uso de Matlab en las simulaciones ha sido muy provechoso ya que su lenguaje matricial facilita la creación de las redes; además ha permitido mejorar los tiempos de simulación a efecto que en cada iteración se han visitado todos los sitios en la red. Los resultados pueden ser mejorados si los intervalos de temperatura disminuyen, obviamente esto conlleva a consumir mayores recursos computacionales.

Finalmente, es importante mencionar que muchos modelos sobre redes complejas se basan en el modelo de Ising. Existen modelos de propagación de rumores, de conexiones neuronales, de propagación de epidemias, etc. que han usado las herramientas del modelo de Ising. Existen algunos resultados teóricos de estos usos y en este trabajo se ha estudiado de manera general las consecuencias en el modelo cuando se usan redes con topología encontradas en la naturaleza.

6.2 RECOMENDACIONES.

El presente estudio se ha enfocado en describir el efecto que produce la topología de mundo pequeño en el modelo de Ising sin abordar los efectos que producirían los parámetros involucrados en cada modelo de las redes. Un estudio más detallado, por ejemplo, puede ser el abordar la influencia del parámetro p en las transiciones de fase. Principalmente ese estudio podría aportar con resultados interesantes en las redes KA generadas sobre redes bidimensionales. También, en estas redes se pueden analizar los efectos en la transición de fase que produce el parámetro m .

El uso de un lenguaje matricial para el estudio de este tipo de problemas ha permitido abordarlo de una manera sencilla y efectiva, se recomienda su uso para estudios con similares características. Por otro lado, el método matricial propuesto para las simulaciones en el que se exploran todos los espines de la red en cada iteración ha constituido un resultado importante que muestra la posibilidad de optimizar el algoritmo de metrópolis, sin embargo, este método puede ocasionar oscilaciones indeseadas que afectan los resultados de las simulaciones. Un estudio futuro sobre tales efectos puede ser llevado a cabo por trabajos posteriores.

El modelo de Ising es un modelo que ha sido adaptado para problemas muy diversos, dentro y fuera de la física. Por ejemplo, fenómenos de propagación de rumores e ideas han usado el modelo de Ising. Muchas de las adaptaciones han sido hechas sobre redes que no reproducen las cualidades reales presentes en las redes naturales. En este sentido es de mucha importancia partir de modelos que crean redes con características presentes en el mundo real, como los modelos tratados en este trabajo.

Finalmente, en este trabajo se han usado modelos de redes de mundo pequeño que no consideran otras características de las redes del mundo real como por ejemplo la distribución de libre escala. Esta característica ha sido mencionada en el trabajo con el fin de no dejar de lado este resultado importante aunque no ha sido considerado para las simulaciones del modelo de Ising. Trabajos futuros deberían incluir redes con distribución de grado de libre escala a más de poseer cualidades de mundo pequeño.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Duncan J. Watts, Seis Grados de Separación, Barcelona, Paidós, 2006.
- [2] Per Bak, How Nature Works, New York, Springer, 1996.
- [3] Watts D. J. and S.H. Strogatz, Nature (London) 393, 400 (1998).
- [4] Newman M. E. J. and Watts D. J., Phys. Lett. A 263, 341 (1999).
- [5] Newman M. E. J. and Watts D. J., Phys. Rev. E 60, 7332 (1999).
- [6] Kuperman Marcelo and Abramson Guillermo, Phys. Rev. E 64, 047103 (2001).
- [7] Albert R. and Barabási A-L, Statistical Mechanics on Complex Networks, Notre Dame (university of Notre Dame, 2002).
- [8] Alain Barrat, Marc Barthélemy and Alessandro Vespignani, Dynamical Processes on Complex Networks (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2008).
- [9] Harvey Gould and Jan Tobochnik
- [10] Greiner, Neise and Stöcker, Thermodynamics and Statistical Mechanics, New York, Springer, 1995.
- [11] F. Reif, Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, New York, McGraw-Hill, 1996.
- [12] Bhattacharjee M. S. and Khare A., Fifty Years of the Exact solution of the Two-dimensional Ising Model by Onsager (Institute of Physics , Sachivalaya Marg, India., 2008).
- [13] K. Binder and D.W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, Springer, England, fourth ed. (Springer-Verlag, London, 2002).
- [14] D.P. Landau and K Binder , A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, (2000)
- [15] D. B. West: "Introduction to Graph Theory". Prentice Hall, 1996.
- [16] M. Hjorth-Jensen, Computational Physics (Department Of Physics, University of Oslo, 2003)
- [17] Tobin Fricke, Monte Carlo investigation of the Ising model, (2006)
- [18] Binder K., Critical Properties from Monte Carlo Coarse Graining and Renormalization, Phys. Rev. Lett. 693 (1981)

[19] Botet R., Jullien R. and Pfeuty P., Size scaling for Infinitely Coordinated Systems, *Phys. Rev. Lett* **49**, 478 (1982)

[20] Barrat, A. and Weigt, M. (2000), On the properties of small-world network models, *Eur. Phys. J. B* **13**, 547–560.

[21] Pekalski, A., Ising model on a small world network, *Phys. Rev. E* **64**, 057104, (2001)

[22] Herrero, C., Ising model in small-world networks, *Phys. Rev. E* **65**, 066110, (2002).

[23] Hong, H., Kim, B. J. and Choi, M.Y., Comment on “Ising model on a small world network”, *Phys. Rev. E* **66**, 018101, (2002b)

[24] Yung Feng Chang, Liang Sun and Xu Cai, Phase transition of a one dimensional Ising model with distance-dependent connections, *Phys. Rev. E* **76**, 021101 (2007).

[25] Svenson, P. and Johnston, D. A., Damage spreading in small world Ising models, *Phys. Rev. E* **65**, 036105, (2002)

ANEXO A.

Código de las simulaciones del modelo de Ising.

Modelos Unidimensionales.

```

function [M,E,X,Cv]=isingredalt(L,T,A) %función que efectúa una simulación
%modelo de Ising para los modelos unidimensionales
k=1;
J=1;
Ms = [];
Es = [];
%estado inicial
S=(rand(1,L) > 0.5)*2 - 1;
%PARA ALCANZAR EL EQUILIBRIO TERMICO

for t=1:25000
    %V1 calcula la suma de los primeros vecinos red regular
    V1= circshift(S, [ 0 1]) + circshift(S, [0 -1]) ;
    %V2 es la suma de las conexiones adicionales que tiene cada nodo en
    %base a las conexiones representadas en la matriz de adyacencia A
    V2=vecinos(A,S,L);
    V=V2+V1; % vecinos totales
    %cambio energético
    DeltaE= 2 * J * (S.* V);
    %probabilidad de transición
    p_trans = exp(-DeltaE/(k * T));
    %transiciones
    transiciones = (rand(1,L) < p_trans ).*(rand(1,L)<0.1) * -2 + 1;
    S = S.* transiciones;

end
n=1;
%OBTENIENDO LOS VALORES MEDIOS
for t=1:250000
    V1= circshift(S, [ 0 1]) + circshift(S, [0 -1]) ;
    %V2 es la suma de las conexiones adicionales que tiene cada nodo en
    %base a las conexiones representadas en la matriz de adyacencia A
    V2=vecinos(A,S,L);
    V=V2+V1; % vecinos totales
    E_spin = -2 * J * (S .* V);
    %cambio energético
    DeltaE= 2 * J * (S.* V);
    %probabilidad de transición
    p_trans = exp(-DeltaE/(k * T));
    %transiciones
    transiciones = (rand(1,L) < p_trans ).*(rand(1,L)<0.1) * -2 + 1;
    S = S.* transiciones;
    %cada 1 MCS/spin obtener los datos
    if n==10
        Ms = [Ms sum(S)/L];
        Es = [Es sum( E_spin )];
        n=0;
    end
    n=n+1;

end

E=mean(Es/L);% Energía por espín
M=abs(mean(Ms));% Magnetización por espín
X=L*(var(Ms,1))/T;%susceptibilidad
Cv=(var(Es,1)/(T^2))/L;%calor específico

```



```
function [M,E,X,Cv]=isingen(L,T) %función que efectúa el modelo de ising
%sobre 10 redes generadas.
M=0;
E=0;
X=0;
Cv=0;
for Nr=1:10
    %GENERACIÓN DE LA RED
    %Dependiendo del modelo, utilizar cualquiera de estas tres líneas de
    %código:
    %   A=watts(L,0.5); % red WS
    %   A=genred_KA(L,0); % red NW
    %   A=genred_KA(L,1); % red KA

    [Ms,Es,Xs,Cvs]=isingredalt(L,T,A);
    %generando los valores medios respecto a las redes que se van creando
    M=M+Ms/10;
    E=E+Es/10;
    X=X+Xs/10;
    Cv=Cv+Cvs/10;
end
```

Modelos Bidimensionales.

```

function [M,E,X,Cv]=isingredalt(L,T,A) %función que efectúa una simulación
%modelo de Ising para los modelos bidimensionales
k=1;
J=1;
Ms = [];
N=L*L;
Es = [];
%estado inicial
S=(rand(L) > 0.5)*2 - 1;

%PARA ALCANZAR EL EQUILIBRIO TERMICO
for t=1:25000
%   V1 calcula la suma de los primeros vecinos red regular
    V1 = circshift(S, [ 0 1]) + ...
        circshift(S, [ 0 -1]) + ...
        circshift(S, [ 1 0]) + ...
        circshift(S, [-1 0]);
    %V2 es la suma de las conexiones adicionales que tiene cada nodo en
    %base a las conexiones representadas en la matriz de adyacencia A
    V2=vecinos(A,S,L);
    V=V2+V1; % vecinos totales
    %cambio energético
    DeltaE= 2 * J * (S.* V);
    %probabilidad de transición
    p_trans = exp(-DeltaE/(k * T));
    %transiciones
    transiciones = (rand(L) < p_trans ).*(rand(L)<0.1) * -2 + 1;
    S = S.* transiciones;

end
n=1;

%OBTENIENDO LOS VALORES MEDIOS
for t=1:250000
    V1 = circshift(S, [ 0 1]) + ...
        circshift(S, [ 0 -1]) + ...
        circshift(S, [ 1 0]) + ...
        circshift(S, [-1 0]);
    %V2 es la suma de las conexiones adicionales que tiene cada nodo en
    %base a las conexiones representadas en la matriz adyacencia A
    V2=vecinos(A,S,L);
    V=V2+V1; % vecinos totales
    E_spin = -2 * J * (S .* V);
    %cambio energético
    DeltaE= 2 * J * (S.* V);
    %probabilidad de transición
    p_trans = exp(-DeltaE/(k * T));
    %transiciones
    transiciones = (rand(L) < p_trans ).*(rand(L)<0.1) * -2 + 1;
    S = S.* transiciones;
    if n==10
        Ms = [Ms sum(sum(S))/N];
        Es = [Es sum(sum( E_spin ))];
        n=0;
    end
    n=n+1;
end
E=mean(Es/N);% Energía por espín
M=abs(mean(Ms));% Magnetización por espín
X=N*(var(Ms,1))/T; %susceptibilidad
Cv=(var(Es,1)/(T^2))/N;%calor específico

```

```
function [M,E,X,Cv]=isingen(L,T) %función que efectúa el modelo de ising
%sobre 10 redes generadas.
M=0;
E=0;
X=0;
Cv=0;
for Nr=1:10
    %GENERACIÓN DE LA RED
    %Dependiendo del modelo, utilizar cualquiera de estas tres lineas de
    %código:
    %   A=watts(L,0.5); % red WS
    %   A=redistridis(L,0); % red NW
    %   A=redistridis(L,1); % red KA

    [Ms,Es,Xs,Cvs]=isingredalt(L,T,A);
    %generando los valores medios respecto a las redes que se van creando
    M=M+Ms/10;
    E=E+Es/10;
    X=X+Xs/10;
    Cv=Cv+Cvs/10;
end
```

ANEXO B.

Cálculo de las Magnitudes físicas.

Tanto para el caso bidimensional como el caso unidimensional, las magnitudes físicas se las han obtenido con la siguiente función

```
1 function [M,E,X,Cv]=magnitudes(L,To,Tf) %función que obtiene las magnitudes
2 %físicas en un intervalo de temperatura [To, Tf]
3 - M=[];
4 - E=[];
5 - X=[];
6 - Cv=[];
7 - for T=To:0.1:Tf
8 -     [Ms,Es,Xs,Cvs]=isingen(L,T);
9 -     M=[M Ms];
10 -    E=[E Es];
11 -    X=[X Xs];
12 -    Cv=[Cv Cvs];
13 - end;
```