



Proyecto Teórico-Computacional

Propiedades críticas del modelo de Ising en retículos fractales

Viviana Gómez Ramírez

Departamento de Física, Universidad de los Andes
Bogotá D.C, Colombia

Profesor director: Gabriel Téllez Acosta PhD
Profesor revisor: Alejandro García Varela PhD

Resumen

El presente proyecto tiene como objetivo principal estudiar las transiciones de fase para modelos de Ising en retículos fractales con diferentes dimensiones de Hausdorff ($d_H \approx 1.892$ y $d_H \approx 1.595$). Se expone el modelo de Ising para los casos de un retículo unidimensional y bidimensional y se explica cómo las herramientas computacionales realizan su simulación. Luego, se presenta un análisis numérico para el caso fractal que, mediante la técnica Monte Carlo y el algoritmo de Metropolis, permite obtener un valor para la temperatura crítica y una función para la longitud de correlación. A su vez, se desarrollan métodos analíticos que permiten un contraste con los resultados obtenidos numéricamente.

Índice general

Resumen	I
1 Introducción	1
2 Marco teórico	2
2.1 Modelo de Ising	2
2.1.1 Modelo de Ising en 1D	3
2.1.2 Modelo de Ising en 2D	4
2.2 Teoría de Renormalización de Grupo (RG)	5
2.3 Retículos Fractales	8
2.3.1 Dimensión de Hausdorff	8
3 Pregunta de investigación	11
4 Metodología	12
4.1 Métodos analíticos	12
4.2 Simulaciones computacionales	12
4.2.1 Algoritmo de Metropolis	12
4.2.2 Cálculo de observables	13
4.2.3 Diseño de los retículos	14
4.2.4 Algoritmo de búsqueda de anchura (BFS)	14
5 Resultados	15
5.1 Resultados analíticos	15
5.2 Resultados computacionales	17
5.2.1 Modelo de Ising en 2D	17
5.2.2 Modelo de Ising en la alfombra de Sierpinski	18
5.2.3 Modelo de Ising en el triángulo de Sierpinski	19
6 Conclusión	24
7 Consideraciones éticas	25
Referencias	27

1

Introducción

La física estadística tiene como objetivo describir un sistema macroscópico mediante propiedades termodinámicas que se derivan de promedios estadísticos sobre las configuraciones microscópicas del sistema [1]. Una transición de fase describe un cambio drástico en alguna propiedad del sistema al variar alguno de sus parámetros, como la temperatura. El punto en el que sucede dicha transición recibe el nombre de punto crítico. En un punto crítico, las propiedades físicas del sistema exhiben comportamientos singulares.

El modelo de Ising, propuesto por Wilhelm Lenz como tesis para su alumno Ernst Ising en 1920, es un modelo teórico que permite estudiar las transiciones de fase en sistemas que están organizados en un retículo determinado [2]. En este modelo, las partículas del sistema se disponen en una estructura reticular y se someten a interacciones específicas entre ellas. A pesar de su aparente simplicidad, el modelo de Ising ha sido ampliamente estudiado y ha proporcionado información valiosa sobre las propiedades críticas de los sistemas en transición de fase.

En este proyecto usamos dos retículos fractales: la alfombra y el triángulo de Sierpienski, con dimensiones de Hausdorff $d_H \approx 1.892$ y $d_H \approx 1.585$, respectivamente, para identificar la temperatura crítica del modelo de Ising en diferentes dimensiones. Los retículos fractales son estructuras geométricas que exhiben propiedades fractales. A diferencia de los retículos regulares, como las cuadrículas o las mallas uniformes, un retículo fractal muestra un patrón repetitivo que exhibe autosimilitud a diferentes escalas. Estos sistemas, además de servir para modelar materiales presentes en la naturaleza como rocas porosas y esponjas [3], ofrecen herramientas para analizar datos complejos y series temporales, ayudando a identificar patrones, tendencias y comportamientos a diferentes escalas. También pueden ayudar a reducir el tamaño de datos complejos, como imágenes y señales, manteniendo su nivel de detalle y calidad visual [4, 5].

A continuación, se presenta un breve recuento del modelo de Ising (2.1) y su resolución analítica a lo largo de la historia (2.1.1, 2.1.2). Luego, se presentan los algoritmos que permiten su resolución numérica en un retículo cuadrado (5.2.1). También se presenta un estudio computacional de la alfombra de Sierpinski (5.2.2). Por último, se presenta un primer acercamiento al estudio analítico del triángulo de Sierpinkski (5.1), así como simulaciones computacionales (5.2.3) que nos permiten abordar descripciones de su comportamiento desde diferentes aproximaciones.

2

Marco teórico

2.1. Modelo de Ising

El modelo de Ising es un modelo físico paradigmático de la mecánica estadística que funciona para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos [2]. Este puede ser resuelto en una o más dimensiones. En 1925, Ising demostró que en una dimensión dicho sistema no presentaba una transición de fase. Luego, en 1944, Lars Onsager logró resolver el modelo bidimensional en un retículo cuadrado, demostrando así que la física estadística logra describir transiciones de fase. [6].

El modelo se basa en un sistema de N partículas, que cuentan con un momento magnético intrínseco no nulo, ubicadas en los nodos de una cadena -para el caso de una dimensión- o una red cuadrada -para el caso de dos dimensiones-. Dichos momentos se orientan según el eje Z , teniendo dos opciones (ver Figura 2.1): espín positivo o espín negativo ($\sigma = \pm 1$).

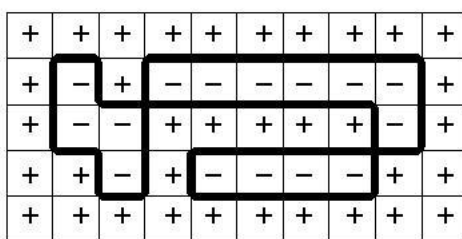


Figura 2.1: Modelo de Ising 2D para un retículo con 50 partículas. Los signos positivos indican un espín apuntando hacia arriba, mientras que los negativos un espín apuntando hacia abajo. Como describe el hamiltoniano, se favorece energéticamente la alineación de los espines.

Si los espines se encuentran ubicados de forma aleatoria, se habla de una magnetización nula. Por el contrario, si se ubican de forma que cuenten con cierto orden, se habla de magnetización neta (ferromagnetismo), incluso en la ausencia de campo magnético [2]. El hamiltoniano que describe este fenómeno es

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i \bar{\mu}_i \cdot \bar{B} \quad (2.1)$$

el cual supone una interacción entre los espines que favorece energéticamente a la alineación de los mismos. La magnitud de esta interacción está dada por el factor de acoplamiento J . El segundo término corresponde a la contribución energética del campo magnético externo aplicado.

2.1.1. Modelo de Ising en 1D

Para el caso uno dimensional (una cadena), en ausencia de campo externo y considerando solo las interacciones con los primeros vecinos, podemos escribir la función de partición del sistema como

$$Z = \sum_i e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta J(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \dots)} \quad (2.2)$$

Introduciendo la variable $\mu_i := \sigma_i \sigma_{i+1}$ podemos reescribir la función de partición de la forma

$$Z = 2 \cdot \sum_{\mu} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} \mu_i} \quad (2.3)$$

Entonces, en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} Z &= 2 \cdot \sum_{\mu_1=\pm 1} \sum_{\mu_2=\pm 1} \dots \sum_{\mu_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \dots + \mu_{N-1})} \\ &= 2 \cdot \sum_{\mu_1=\pm 1} \sum_{\mu_2=\pm 1} \dots \sum_{\mu_{N-2}=\pm 1} e^{\beta J(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \dots + \mu_{N-2})} \sum_{\mu_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J \mu_{N-1}} \end{aligned}$$

Usando que $e^{\beta J} + e^{-\beta J} = 2 \cosh(\beta J)$, se sigue que

$$\begin{aligned} Z &= 2 \cdot \sum_{\mu_1=\pm 1} \sum_{\mu_2=\pm 1} \dots \sum_{\mu_{N-2}=\pm 1} e^{\beta J(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \dots + \mu_{N-2})} 2 \cosh(\beta J) \\ &\approx [2 \cosh(\beta J)]^N \end{aligned} \quad (2.4)$$

Para demostrar que el modelo de Ising en este retículo no exhibe una transición de fase, calcularemos el promedio en el alineamiento de dos espines i e $i + j$, donde además hemos introducido diferentes valores de acoplamiento (J_i)

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_{i+j} \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \sigma_i \sigma_{i+j} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \sigma_i \sigma_{i+j} e^{\beta(J_1 \sigma_1 \sigma_2 + J_2 \sigma_2 \sigma_3 + J_3 \sigma_3 \sigma_4 + \dots)} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Reescribiendo

$$\begin{aligned}
\sigma_i \sigma_{i+j} &= \sigma_i \cdot 1 \cdot \dots \cdot 1 \cdot \sigma_{i+j} \\
&= (\sigma_i \sigma_{i+1})(\sigma_{i+1} \sigma_{i+2}) \dots (\sigma_{i+j-1} \sigma_{i+j}) \\
&= 2 \cosh \beta J_1 \dots 2 \sinh \beta J_i \dots \cosh \beta J_N
\end{aligned}$$

Ahora, análoga a la ecuación 2.4, la función de partición de este sistema con diferentes parámetros de acople puede ser escrita como

$$Z = 2 \cosh(\beta J_1) \dots 2 \cosh(\beta J_N) \quad (2.6)$$

de forma tal que

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+j} \rangle = \prod_{m=1}^j [\tanh \beta J_{i+m-1}]^j \quad (2.7)$$

Para el caso de un único J , la expresión 2.7, se simplificará a

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+j} \rangle = \prod_{m=1}^j [\tanh \beta J]^j \quad (2.8)$$

Entonces, para calcular la magnetización del sistema se tendrá que

$$\begin{aligned}
M &= mN \langle \sigma \rangle \\
M^2 &= m^2 N^2 \langle \sigma \rangle^2 \\
&= \lim_{j \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \sigma_{i+j} \rangle = 0 \quad \forall T > 0
\end{aligned} \quad (2.9)$$

donde m es el momento magnético de cada espín y N el número total de espines.

Se tiene que $[\tanh \beta J] \leq 1$ a excepción del caso $T = 0$. Entonces, podemos concluir que el modelo de Ising en una dimensión no tiene transiciones de fase a temperaturas finitas.

Ahora bien, en el modelo de Ising, la longitud de correlación es una medida de la distancia característica a la cual los espines adyacentes en el sistema están correlacionados entre sí [7]. En otras palabras, indica la extensión espacial sobre la cual las fluctuaciones de espín están correlacionadas. La función de correlación de dos puntos se define como

$$C(i, j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \propto e^{-\frac{|i-j|}{\xi}} \quad (2.10)$$

Entonces, de acuerdo al planteamiento anterior, para el caso uno dimensional

$$\xi \propto \frac{-1}{\ln(\tanh(\beta))} \quad (2.11)$$

2.1.2. Modelo de Ising en 2D

Para el caso dos dimensional (una retícula rectangular), la solución es significativamente más compleja. Sin embargo, la solución exacta, en ausencia de un campo magnético externo, fue encontrada por Lars Onsager en 1944 [8]. Su solución se basa en la transformación de la función de partición del sistema en una función de variables complejas conocidas

como funciones de transferencia, además del uso de funciones elípticas. Estas funciones de transferencia están relacionadas con las probabilidades de transición entre los diferentes estados de la red de espines.

Al manipular y analizar la función de partición transformada, Onsager pudo obtener expresiones analíticas para diferentes propiedades termodinámicas del modelo de Ising en 2D. Por ejemplo, pudo calcular la magnetización espontánea. También pudo determinar la temperatura crítica, que es la temperatura a la cual ocurre la transición de fase en el sistema. Para esta última se obtuvo que

$$T_c = 2 \ln^{-1}(1 + \sqrt{2}) \approx 2.269 \quad (2.12)$$

Además, se obtuvo que, cerca de la temperatura crítica, se puede modelar la longitud de correlación 2.10 (ver Figura 2.4) como una ley de potencias que se comporta de la forma

$$\xi(T) \propto \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^\gamma \quad (2.13)$$

donde γ recibe el nombre de **exponente crítico**. Dichos exponentes son de gran importancia: se ha demostrado que diferentes sistemas físicos, al estar cerca sus puntos críticos, se comportan como leyes de potencias con exponentes críticos iguales [8].

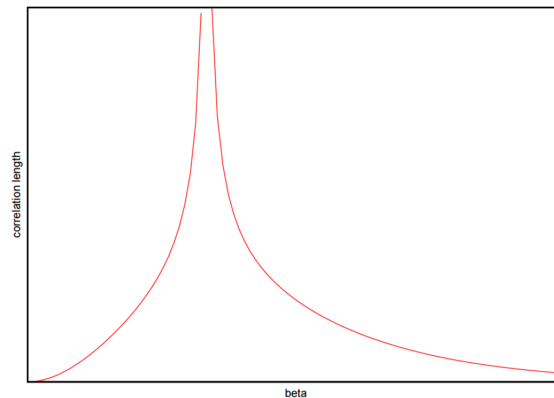


Figura 2.2: Longitud de correlación en función de la temperatura para en modelo de Ising en 2D. La divergencia da cuenta de una transición de fase. Tomado de [9]

2.2. Teoría de Renormalización de Grupo (RG)

Otra herramienta analítica útil para estudiar las propiedades críticas de un sistema es la teoría de la renormalización de grupo. Esta teoría proporciona un marco conceptual para comprender los comportamientos emergentes en sistemas físicos a diferentes escalas. A diferencia de los métodos anteriormente descritos, en lugar de intentar resolver el sistema a nivel microscópico, la RG se centra en estudiar cómo cambian las propiedades macroscópicas del sistema a medida que se realiza un promedio sobre diferentes escalas espaciales [10].

En esencia, la teoría de renormalización de grupo trata de cómo los efectos de las interacciones entre las partículas se modifican a medida que se consideran diferentes escalas de energía o longitud. A medida que aumentamos o disminuimos la escala, ciertos grados de libertad se vuelven menos relevantes y pueden ser integrados o promediados en nuevos parámetros que describen el comportamiento a una escala más grande [11].

Estos nuevos parámetros se llaman constantes de acoplamiento y pueden describir cómo cambian las propiedades del sistema a medida que nos alejamos o nos acercamos al punto crítico. La RG nos permite calcular estas constantes de acoplamiento y, a su vez, predecir las propiedades críticas del sistema.

Para comprender la esencia de la teoría de renormalización de grupo, centrémonos en el caso más simple, el modelo de Ising en una dimensión [12]. Para esto, redefinamos el hamiltoniano del sistema como

$$\tilde{\mathcal{H}} = K \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_i \sigma_i + c = -\beta \mathcal{H} \quad (2.14)$$

donde c es una constante. Entonces, la función de partición del sistema estará dada por

$$Z = \text{Tr}_N(e^{\tilde{\mathcal{H}}}) \quad (2.15)$$

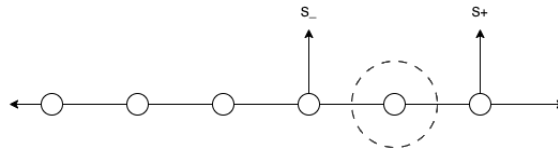


Figura 2.3: Proceso de eliminación de un espín al efectuar la decimación.

Ahora, se eliminarán todos los espines con índice impar. Esto implica que el factor de escala será $b = 2$ (se están eliminando la mitad de los espines). Para calcular la nueva función de partición, veamos primero la contribución de un espín en particular (ver Figura 2.3).

$$\begin{aligned} & e^{K\sigma_- \sigma_+ + \frac{1}{2}h(\sigma_- + \sigma_+) + c} e^{K\sigma \sigma_+ + \frac{1}{2}(\sigma + \sigma_+) + c} \\ & = e^{K\sigma(\sigma_- + \sigma_+) + h\sigma + h\frac{\sigma_- + \sigma_+}{2} + 2c} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Luego, se suma sobre todos los espines que serán eliminados, obteniendo que

$$\bar{Z} = \sum_{\sigma = \pm 1} \prod_{i=0, \pm 2, \pm 4, \dots} e^{h\frac{\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}}{2} + 2c} 2 \cosh K(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + h \quad (2.17)$$

donde hemos cambiado los índices σ_- y σ_+ por σ_{i-1} y σ_{i+1} .

Si deseamos realizar varias transformaciones sucesivas de RG, la estructura de $\tilde{\mathcal{H}}$ no debe cambiar después de cada transformación. Por lo tanto, estamos buscando una transformación desde el antiguo hamiltoniano $\tilde{\mathcal{H}}$ hasta el nuevo hamiltoniano $\tilde{\mathcal{H}}'$ que mantenga la estructura del hamiltoniano sin cambios en transformaciones sucesivas. Además, la transformación debe

ser tal que no modifique la función de partición. Esto es necesario porque garantiza que las propiedades físicas del sistema no se alteren.

Entonces, podemos definir nuevos K' , h' y c' tales que

$$e^{K\sigma_{i-1}\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}h'(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + c} = e^{h\frac{\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}}{2} + 2c} 2 \cosh K(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + h \quad (2.18)$$

Evaluando en los diferentes valores que puede tomar cada espín ($\sigma \pm 1$), obtendremos las siguientes ecuaciones

$$e^{2h'} = e^{2h} \frac{\cosh 2k + h}{\cosh(2k - h)} \quad (2.19)$$

$$e^{4K'} = \frac{\cosh(2K + h) \cosh(2K - h)}{\cosh^2 h} \quad (2.20)$$

$$e^{4c} = e^{8c} \cosh(2K + h) \cosh(2K - h) \cosh^2(K) \quad (2.21)$$

La pregunta será, entonces, si existe un punto en donde las constantes de acoplamiento no vayan a cambiar tras cada renormalización. Tomando $h = 0$, podemos usar la ecuación 2.20 de forma que

$$e^{4K'} = \cosh^2(2K) = \frac{1}{4}(e^{2K} + e^{-2K})^2 \quad (2.22)$$

Tomando $x = e^{-4K}$, podemos escribir la expresión 2.22 como

$$x' = \frac{4x}{(1+x)^2} \quad (2.23)$$

Esta ecuación solo tiene puntos fijos en $x = 0$ y $x = 1$. Esto quiere decir que las únicas transiciones de fase que exhibe el modelo son en $T = 0$ y $T = \infty$. Este resultado concuerda con el obtenido en 2.1.1.

Cerca del punto crítico, la longitud de correlación (ξ) en el modelo de Ising exhibe un comportamiento característico. La RG permite identificar los exponentes críticos asociados a este comportamiento y establecer relaciones de escala que describen cómo la longitud de correlación cambia con las variables relevantes del sistema. En nuestro caso, se tendrá que

$$\xi(T) = b\xi(T) \quad (2.24)$$

$$\xi(T^*) = b\xi(T^*) \quad (2.25)$$

Cerca al punto crítico dado por $x = 0$, podemos expandir el término de forma $x_0 = x^* + \delta x_0$. Tras repetir el proceso l -veces se tendrá que $x_l = x^* + \delta x_l$, de forma que $\delta x_l = 4^l \delta x_0$.

Volviendo a la relación de recursión 2.23, se tendrá que $x' = 4x$, $x'' = 4^2x$ y así sucesivamente. Entonces, tomando la temperatura reducida $t = e^{-4K}$, donde $t^{(l)} = b^{\lambda_1 l} t$ (nótese que $\lambda_1 = 2$)

$$\xi^{(l)} = b^{-l} t \quad (2.26)$$

tomando $t^l = 1$ y $\xi^{(l)} = \xi(1)$ obtendremos que el exponente crítico para ξ es $\nu = \frac{1}{\lambda_1}$. Finalmente

$$\begin{aligned}\xi(t) &= b\xi(t') = b\xi(b^{\lambda_1}t) \\ &= t^{-\frac{1}{\lambda_1}} \xi(1) = x^{-\nu} \xi(1) \\ &\approx e^{4K\nu} = e^{2K}\end{aligned}\tag{2.27}$$

Cuanto $T \rightarrow 0$, la expresión 2.11 es congruente con la expresión 2.27.

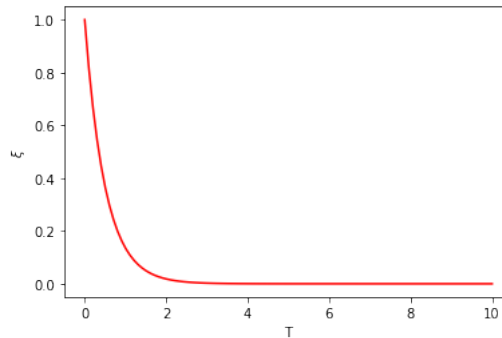


Figura 2.4: Longitud de correlación en función de la temperatura para en modelo de Ising en 1D. Para este modelo solo existe una transición de fase trivial en $T = 0$.

2.3. Retículos Fractales

Un retículo fractal es una estructura geométrica que exhibe propiedades fractales, lo cual significa que posee patrones repetitivos y autosimilares a diferentes escalas. A diferencia de los retículos regulares, como una cadena o una malla uniforme, un retículo fractal presenta una estructura más compleja y detallada. Esta complejidad y autosimilitud hacen que los retículos fractales sean especialmente adecuados para describir sistemas complejos y estudiar fenómenos que exhiben autosemejanza y complejidad a diferentes escalas, los cuales están presentes en diversos campos, como la física, la biología, entre otros.

2.3.1. Dimensión de Hausdorff

La dimensión de Hausdorff, también conocida como dimensión fractal, es una medida de la cantidad de espacio ocupado por un conjunto fractal. Fue introducida por el matemático alemán Felix Hausdorff y se utiliza para caracterizar la complejidad geométrica de objetos fractales [13]. A diferencia de la dimensión euclidiana, que es un número entero en espacios de dimensiones tradicionales (1, 2, 3), la dimensión de Hausdorff puede ser un número real no entero.

Si tomamos un objeto que se encuentra en una dimensión euclidiana D y reducimos su tamaño lineal en $1/r$ en cada dirección espacial, su medida (longitud, área o volumen)

aumentaría a $N = r^D$ veces el original. Por lo tanto, resolviendo para D

$$D = \frac{\log(N)}{\log(r)} \quad (2.28)$$

Alfombra de Sierpinski

La alfombra de Sierpinski (ver Figura 2.5) es un ejemplo clásico de un fractal y se construye utilizando un proceso iterativo de eliminación de patrones repetitivos:

1. Comenzar con un cuadrado.
2. Dividir el cuadrado en nueve cuadrados más pequeños del mismo tamaño, formando una cuadrícula 3×3 .
3. Eliminar el cuadrado central de la cuadrícula.
4. Repetir los pasos 2 y 3 para cada uno de los ocho cuadrados restantes de la cuadrícula original. En cada iteración, dividir cada cuadrado en nueve cuadrados más pequeños y eliminar el cuadrado central.
5. Repetir infinitamente.

Para este caso, $N = 8$ y $r = 3$, entonces $D_H \approx 1.892$

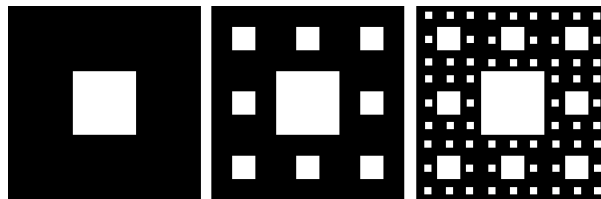


Figura 2.5: Construcción de la alfombra de Sierpinski tras 2 iteraciones.

Triángulo de Sierpinski

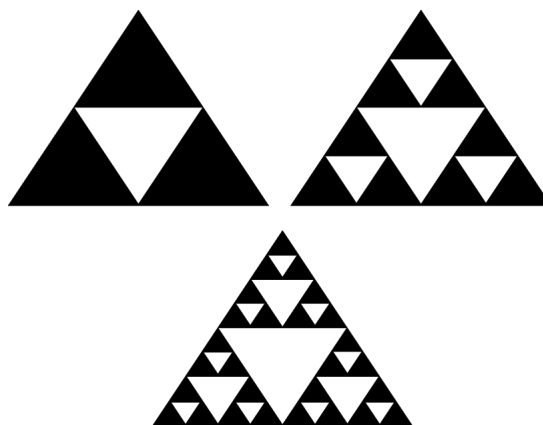


Figura 2.6: Construcción del triángulo de Sierpinski tras 2 iteraciones.

El triángulo de Sierpinski (ver Figura 2.6) se construye de forma análoga a la alfombra: se comienza con un triángulo equilátero. Luego, se divide cada triángulo en cuatro triángulos más pequeños, eliminando el triángulo central. Se repite este proceso infinitamente.

Para este caso, $N = 3$ y $r = 2$, entonces $D_H \approx 1.584$.

3

Pregunta de investigación

¿Qué condiciones son necesarias para que el modelo de Ising en un retículo fractal (ver Figuras 3.1 y 3.2) presente una transición de fase y cuáles son las propiedades de su comportamiento crítico?

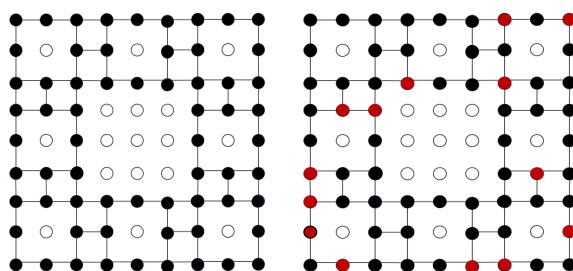


Figura 3.1: Modelo de Ising en la Alfombra de Sierpinski (AS) (a) con espines ordenados (b) con una configuración aleatoria. Los círculos vacíos representan los lugares donde no hay un espín asignado, mientras que las líneas representan las posibles interacciones entre espines.

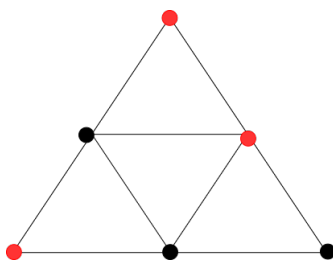


Figura 3.2: Modelo de Ising en el triángulo de Sierpinski (TS). A cada vértice se le asigna un espín.

4

Metodología

4.1. Métodos analíticos

Para estudiar el comportamiento crítico de manera analítica, se empleará la teoría de la renormalización descrita en 2.2.

4.2. Simulaciones computacionales

4.2.1. Algoritmo de Metropolis

El algoritmo de Metrópolis es una poderosa herramienta para estudiar propiedades del comportamiento crítico en sistemas complejos. Este algoritmo se basa en la simulación de Monte Carlo (generación de muestras aleatorias) y se emplea para muestrear configuraciones de un sistema de manera eficiente [14].

El objetivo de las simulaciones computacionales es encontrar el estado de equilibrio μ en el sistema en una temperatura específica β [15].

La probabilidad p_μ de estar en un estado μ con energía E_μ es

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu} \quad (4.1)$$

donde $Z = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu}$ es la función de partición. En equilibrio, se debe cumplir que

$$\sum_\nu p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_\nu p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (4.2)$$

donde $P(\mu \rightarrow \nu)$ es la probabilidad de ir desde el estado μ al estado ν . Esto se cumple bajo la condición

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (4.3)$$

Por tanto

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (4.4)$$

Los pasos básicos del algoritmo aplicados en el proyecto son:

1. Se escoge aleatoriamente un estado μ .
2. Se escoge aleatoriamente una partícula en la red y se invierte la dirección del espín. Este será el estado ν . Ahora, se busca la probabilidad $P(\mu \rightarrow \nu)$ para aceptar este nuevo estado.
3. Si $E_\nu > E_\mu$, entonces $P(\nu \rightarrow \mu) = 1$ y, por tanto, se acepta el estado con una probabilidad $P(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ (4.4). De lo contrario, si $E_\nu < E_\mu$, entonces $P(\mu \rightarrow \nu) = 1$ y, por tanto, se acepta el nuevo estado.
4. Repetir hasta alcanzar un estado de equilibrio.

*Nótese que el cambio de energía en cada nuevo estado puede ser calculado únicamente teniendo en cuenta al espín seleccionado y sus vecinos. Esto es, $-\beta(E_\nu - E_\mu) = -\beta J \sum_{k=1}^4 \sigma_i \sigma_k$ [15].

En nuestro caso, las simulaciones se corrieron con un total de 100.000 iteraciones.

4.2.2. Cálculo de observables

■ Energía

En el caso de la no presencia de un campo magnético externo, $B = 0$, de acuerdo a la ecuación 2.1, la energía del sistema se puede escribir como

$$E/J = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (4.5)$$

Entonces, para calcular la energía es necesario diseñar una función que recorra cada espín y realice una sumatoria sobre la multiplicación del valor del espín central y todos sus vecinos cercanos. Se tomarán en cuenta únicamente los valores de la última iteración, asumiendo que en esta ya se alcanzó un estado de equilibrio.

■ Capacidad calorífica

Una vez calculada la energía, se tiene que

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{\sigma_E^2}{T^2} \\ &= (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \cdot \beta^2 k_B^2 \\ &= \left(\left\langle \left(\frac{E}{J} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{E}{J} \right\rangle^2 \right) \cdot (\beta J k_B)^2 \\ &= \sigma_E \cdot (\beta J k_B)^2 \end{aligned} \quad (4.6)$$

■ Magnetización promedio

$$\bar{m} = \frac{\sum_i \sigma_i}{N} \quad (4.7)$$

4.2.3. Diseño de los retículos

Alfombra de Sierpinski

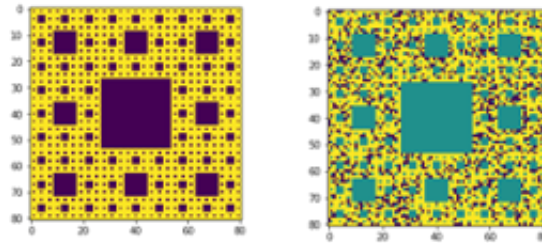


Figura 4.1: Representación de la alfombra de Sierpinski usando una matriz de Numpy (a) con espines ordenados (b) con una configuración aleatoria.

Se crea una matriz en numpy en la cada elemento puede tomar tres valores: 1, -1 o 0. Siguiendo la construcción del fractal 2.3.1, los bloques que son eliminados se asignan con 0. Todos los demás toman un valor aleatorio de 1 o -1 (ver Figura 4.1). En total, esta configuración cuenta con $N = 4096$ espines.

Triángulo de Sierpinski

1. Se define una unidad básica. En este caso, un triángulo. Su estructura va a estar completamente determinada por un diccionario en Python cuyas llaves son los vértices y cuyos valores son los vecinos cercanos de cada vértice (0: [1, 2], 1: [0, 2], 2: [0, 1]).
2. Se aplica la regla de construcción 2.3.1: se crea un nuevo vértice en la mitad de cada arista, y se conectan todos los nuevos vértices para crear un "triángulo interior". Se actualiza el diccionario.
3. Se repite la regla de construcción para cada subtriángulo que conforma el fractal. En total, esta configuración cuenta con $N = 366$ espines.

4.2.4. Algoritmo de búsqueda de anchura (BFS)

El método de búsqueda de anchura (BFS, por sus siglas en inglés), es un algoritmo utilizado para recorrer o buscar elementos en un grafo. Se basa en la idea de explorar los nodos o vértices en un nivel de anchura antes de pasar al siguiente nivel. El algoritmo comienza desde un nodo inicial y explora todos sus vecinos directos antes de pasar a los vecinos de los vecinos [16]. De esta manera, el método de búsqueda de anchura asegura que se visiten todos los nodos en el mismo nivel antes de descender a niveles inferiores. Durante el recorrido, se utiliza una estructura de datos llamada cola (o queue) para mantener un registro de los nodos que se van visitando. Cada vez que se visita un nodo, se marcará como visitado y se añadirán a la cola todos sus vecinos no visitados. Este proceso continúa hasta que se han visitado todos los nodos alcanzables desde el nodo inicial. El método de búsqueda de anchura es especialmente útil cuando se desea encontrar el camino más corto entre dos nodos en un grafo no ponderado o, en nuestro caso, fractales.

5

Resultados

5.1. Resultados analíticos

El hamiltoniano del modelo de Ising en el triángulo del Sierpinski (ver Figura 5.1) está dado por

$$\bar{\mathcal{H}} = -K(\sigma_1(\mu_2 + \mu_3) + \sigma_2(\mu_1 + \mu_3) + \sigma_3(\mu_1 + \mu_2) + \mu_1\mu_2 + \mu_2\mu_3 + \mu_3\mu_1) = -\beta\mathcal{H} \quad (5.1)$$

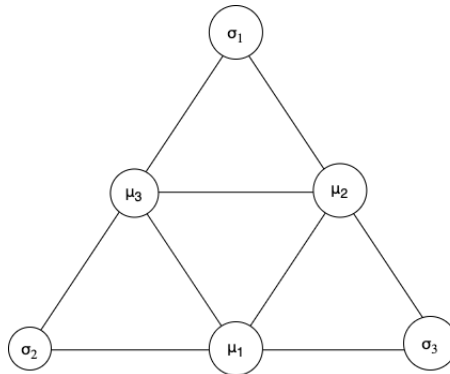


Figura 5.1

Siguiendo el proceso descrito en 2.2, eliminaremos los espines con índices μ_1 , μ_2 y μ_3 , de forma que $b = 2$ [17]. La contribución estará dada por

$$\begin{aligned} \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3 \pm 1} &= e^{K(2\sigma_1 + 2\sigma_2 + 2\sigma_3 + 3)} + e^{K(-2\sigma_1 - 2\sigma_2 - 2\sigma_3 + 3)} \\ &+ e^{K(2\sigma_1 - 1)} + e^{K(2\sigma_2 - 1)} + e^{K(2\sigma_3 - 1)} \\ &+ e^{K(-2\sigma_1 - 1)} + e^{K(-2\sigma_2 - 1)} + e^{K(-2\sigma_3 - 1)} \\ &= e^{K(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1) + E'} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Evaluando en las diferentes configuraciones ($\sigma_i \pm 1$), llegamos a las siguientes relaciones de

recursión

$$e^{3K'+E'} = e^{9K} + 3e^K + 4e^{-3K} \quad (5.3)$$

$$e^{-K'+E'} = e^{5K} + 4e^K + 3e^{-3K} \quad (5.4)$$

Dividiendo estas dos expresiones, obtenemos finalmente

$$e^{4K'} = \frac{e^{12K} + 3e^{4K} + 4}{e^{8K} + 4e^{4K} + 3} = \frac{e^{8K} - e^{4K} + 4}{e^{4K} + 3} \quad (5.5)$$

Tomando $x = e^{4K}$ y $x' = e^{4K'}$, la expresión 5.5, puede ser escrita como

$$x' = \frac{x^2 - x - 4}{x + 3} \quad (5.6)$$

Los únicos puntos fijos son $x = 1$ y $x = 0$, lo cual implica que este fractal no exhibirá transiciones de fase a temperaturas finitas.

Tomando como temperatura reducida $t = e^{-4K}$, la expresión 5.5 puede ser rescrita como

$$t' = t \frac{3t + 1}{-4t^2 - t + 1} \quad (5.7)$$

Ahora, expandiendo alrededor del punto fijo $t^* = 0$ ($x = 1$), se tiene que

$$t' = t(1 + 3t)(1 - t - 4t^2)^{-1} \approx t + 4t^2 + \mathcal{O}(3) \quad (5.8)$$

De acuerdo a la ecuación 5.8, se trata de un caso marginal. Esto quiere decir que la temperatura reducida t' obtenida tras una renormalización no cambia a primer orden. Por tanto, debemos tener en cuenta los términos de orden 2.

Entonces, tras una iteración

$$t_1 = t_0(1 + 4t_0) \quad (5.9)$$

Tras dos iteraciones

$$\begin{aligned} t_2 &= t_0(1 + 4t_0)(1 + 4t_0(1 + 4t_0)) \\ &= t_0(1 + 4t_0 + 4t_0 + \mathcal{O}(t_0^2)) \\ &= t_0(1 + 8t_0) \end{aligned} \quad (5.10)$$

Tras n iteraciones

$$t_n = t_0(1 + 4nt_0) \quad (5.11)$$

Demostración:

$$\begin{aligned} t_{n+1} &= t_n(1 + 4t) \\ &= t_0(1 + 4nt_0)(1 + 4t_0(1 + 4nt_0)) \\ &= t_0(1 + (4n + 4)t_0 + \mathcal{O}(t_0^2)) \\ &= t_0(1 + 4(n + 1)t_0 + \mathcal{O}(t_0^2)) \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (5.12)$$

Usando la aproximación

$$t' = t(1 + 4nt) \approx t(1 - 4nt)^{-1} \quad (5.13)$$

válida para $t \neq 1$, se tendrá que

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t}{1 - 4nt} \\ &= \frac{1}{\frac{1}{t} - 4n} \end{aligned} \quad (5.14)$$

y, por tanto,

$$4t' = \frac{1}{\frac{1}{t} - 4n} \quad (5.15)$$

Ahora bien, podemos fijar $4t' = cte$ y buscar el n necesario para llegar a allí, de forma que

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{4t} - \frac{1}{4t'} \\ &= \frac{1}{4t} + cte \end{aligned} \quad (5.16)$$

Entonces, como se mostró en 2.2, $\xi = \xi' 2^n$ ($b = 2$).

$$\begin{aligned} \xi &= \xi' 2^n \\ &= \xi' 2^{\frac{1}{4t} - \frac{1}{4t'}} \\ &= cte e^{\frac{\ln 2}{4} \frac{1}{t}} \end{aligned} \quad (5.17)$$

donde $t = e^{-4K}$. Finalmente,

$$\xi = cte e^{\frac{\ln 2}{4} e^{4K}} \quad (5.18)$$

5.2. Resultados computacionales

Usando los métodos explicados en 4.2, se obtuvieron los siguientes resultados:

5.2.1. Modelo de Ising en 2D

Para asegurarnos de que los métodos implementados son eficientes, se desarrolló en principio un modelo computacional para el modelo de Ising en 2D (2.1.2). En este, se usaron dos configuraciones iniciales: una con 75 % de los espines apuntando hacia arriba, y otra con 75 % de los espines apuntando hacia abajo. Esto con el fin de evidenciar a que valor tiende la fase ferromagnética y, en especial, si hay algún cambio en la transición de fase.

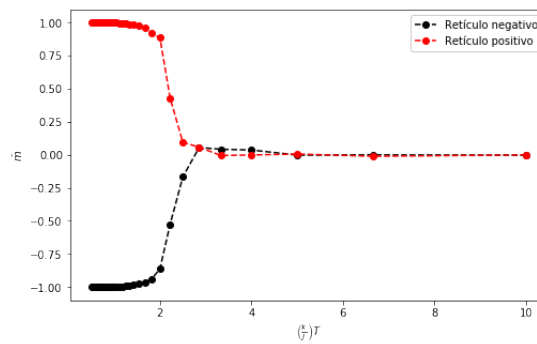


Figura 5.2: Gráfica del valor promedio de espines \bar{m} en función de la temperatura para el modelo de Ising en 2D. En la fase ferromagnética, el valor promedio de espines está en 1 o -1 , dependiendo de la configuración inicial. Luego de la temperatura crítica T_c , la energía térmica disturba el sistema y aleatoriza a los espines, por que su valor promedio tiende a 0.

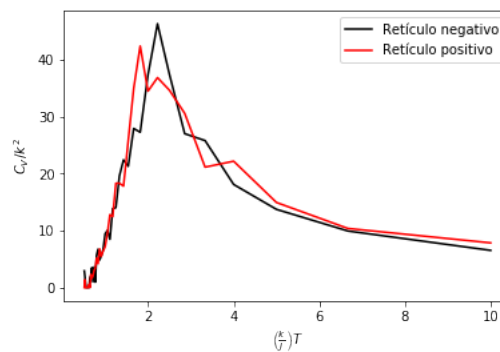


Figura 5.3: Gráfica de la capacidad calorífica C_v en función de la temperatura para el modelo de Ising en 2D. Los picos en la función indican una transición de fase

De acuerdo a las gráficas 5.2 y 5.3, existe una transición de fase del orden ferromagnético al orden paramagnético en $T \approx 2.2$, este valor coincide con el de su solución exacta (2.12).

5.2.2. Modelo de Ising en la alfombra de Sierpinski

Ahora bien, para la alfombra de Sierpinski, usando el retículo descrito en 4.2.3, también se usaron dos configuraciones iniciales: una con 75 % de de los espines apuntando hacia arriba, y otra con 75 % de los espines apuntando hacia abajo.

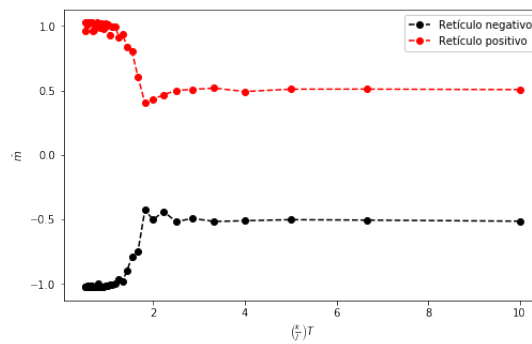


Figura 5.4: Gráfica del valor promedio de espines \bar{m} en función de la temperatura para el modelo de Ising en la alfombra de Sierpinski. En la fase ferromagnética, el valor promedio de espines está en 1 o -1 , dependiendo de la configuración inicial. Luego de la temperatura crítica T_c , la energía térmica disturba el sistema y aleatoriza a los espines, sin embargo, su valor promedio no llega a 0, si no que conserva información sobre la configuración inicial del sistema.

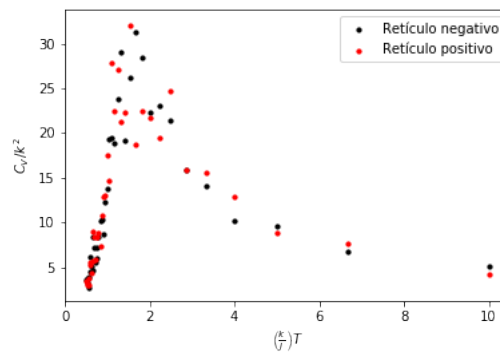


Figura 5.5: Gráfica de la capacidad calorífica C_v en función de la temperatura para la alfombra de Sierpinski.

De acuerdo a las gráficas 5.6 y 5.7, existe una transición de fase del orden ferromagnético al orden paramagnético en $T \approx 1.53$. Este resultado coincide con el reportado en [18].

5.2.3. Modelo de Ising en el triángulo de Sierpinski

Para el triángulo de Sierpinski, se usó el retículo descrito en 4.2.3.

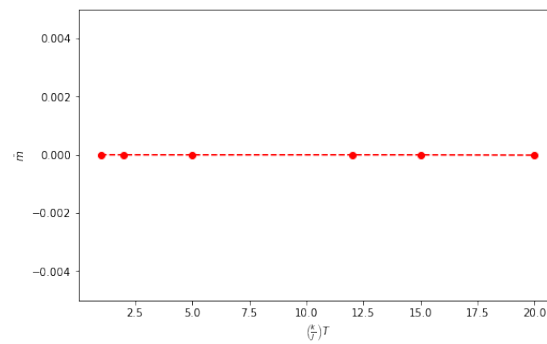


Figura 5.6: Gráfica del valor promedio de espines \bar{m} en función de la temperatura para el modelo de Ising en el triángulo de Sierpinski. El valor promedio de los espines siempre tiende a 0, lo que da indicios de que no hay una transición de fase.

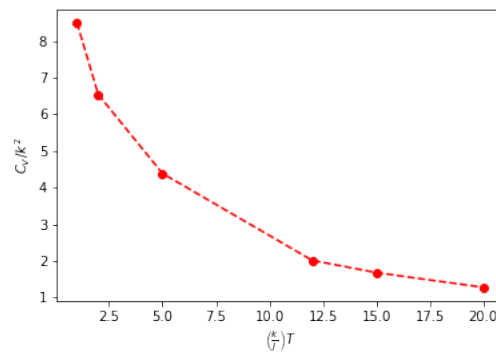


Figura 5.7: Gráfica de la capacidad calorífica C_v en función de la temperatura para el triángulo de Sierpinski. No hay picos en la función, lo que da indicios de que no hay una transición de fase.

Explorando más a fondo, podemos mirar cómo se comporta la correlación entre espines en este retículo. De acuerdo a la ecuación 2.10, la correlación entre espines se puede calcular de forma numérica usando un proceso similar al descrito en 4.2.2, pero teniendo en cuenta la magnetización promedio del producto entre dos espines.

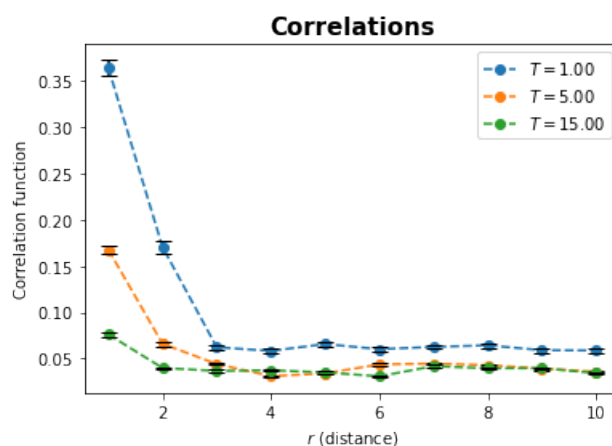


Figura 5.8: Correlación entre espines para diferentes temperaturas en el triángulo de Sierpinski.

Ahora bien, el triángulo de Sierpinski no es un retículo isótropico. Por tanto, a la hora de calcular la correlación realizamos un promedio sobre 100 espines cuyos primeros vecinos se encontraban al ir en direcciones diferentes. Como se evidencia en la gráfica 5.8, las barras de error asociadas a estos promedios son poco significativas. Esto quiere decir que la correlación entre espines no depende de la dirección del espín j respecto al espín i , si no únicamente de la distancia entre ellos. Para definir la distancia entre espines se usó el algoritmo de búsqueda de anchura (BFS) descrito en 4.2.4. Siguiendo este algoritmo, se tiene que la distancia entre espines corresponde al camino más corto para llegar de un espín al otro, donde cada espín recorrido en medio de este camino equivale a una unidad de distancia.

Volviendo a la gráfica 5.8, se puede inferir que la función de correlación tiene un comportamiento que podría seguir un decaimiento exponencial (2.10). Al realizar un ajuste lineal en escala logarítmica, se identifica el parámetro de decaimiento de la exponencial para una serie de valores de temperatura. Estos nos permiten construir una función $\xi(T)$ que puede ser contrastada con la expresión analítica (5.18) (ver Figura 5.9).

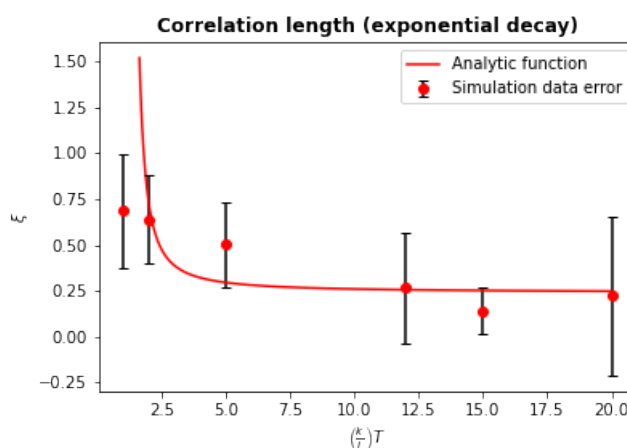


Figura 5.9: Longitud de correlación ξ en función de la temperatura. La función analítica fue obtenida usando la RG (5.1), mientras que los resultados de la simulación fueron obtenidos mediante un ajuste lineal en escala logarítmica de las correlaciones a diferentes temperaturas (5.8).

De acuerdo a la gráfica 5.9, es importante tener en cuenta que el algoritmo de Metrópolis tiene limitaciones computacionales que pueden generar diferencias en los resultados obtenidos en comparación con la teoría de renormalización de grupo (5.1). Estas diferencias pueden surgir debido a simplificaciones y aproximaciones realizadas en el algoritmo de Metrópolis, como el tamaño finito de la red utilizada en las simulaciones. Asimismo, que el punto crítico analizado se encuentre en $T^* = 0$ puede hacer que surjan imprecisiones. A bajas temperaturas, incluso pequeñas diferencias de energía pueden tener un impacto significativo en la probabilidad de aceptación (4.4). Esto significa que el algoritmo será más propenso a rechazar propuestas que aumenten la energía del sistema, lo que a su vez conduce a un muestreo más lento y a una exploración más limitada del espacio de estados.

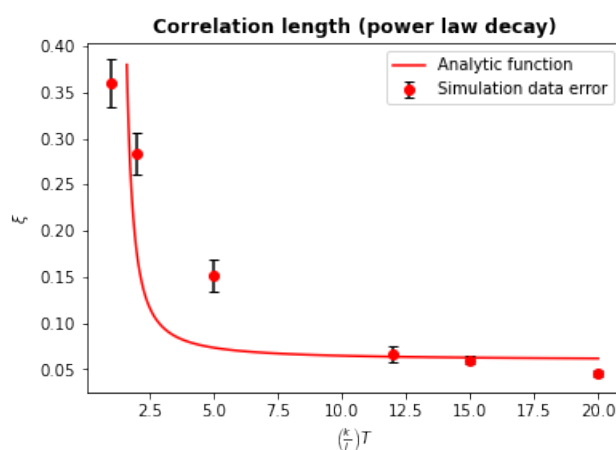


Figura 5.10: Longitud de correlación ξ en función de la temperatura. La función analítica fue obtenida usando la RG (5.1), mientras que los resultados de la simulación fueron obtenidos mediante un ajuste de ley de potencias de las correlaciones a diferentes temperaturas (5.8).

Otra opción a considerar es que la función de correlación no siga estrictamente el comportamiento dado por 2.10. Por ejemplo, esta podría seguir un decaimiento dado por una ley de potencias (Figura 5.10)

$$C(r) \propto r^{-\xi} \quad (5.19)$$

El hecho de que una función de correlación siga una ley de potencias sugiere la presencia de fenómenos o procesos que exhiben propiedades de autosimilaridad a diferentes escalas. Este comportamiento es típico, precisamente, en sistemas que exhiben geometría fractal.

6

Conclusión

Al aplicar el modelo de Ising en un retículo fractal, se estudiaron los fenómenos magnéticos y transiciones de fase específicos de estos sistemas. Esto permitió que se exploraran las interacciones entre las partículas del sistema -en particular, las correlaciones- y cómo estas evolucionan a medida que se cambian los parámetros del sistema, como la temperatura. Estas interacciones exhibieron comportamientos complejos, con propiedades físicas distintas de los sistemas regulares.

Los fractales con ramificación finita, como el triángulo de Sierpinski, no exhiben transiciones de fase a temperaturas no triviales. Esto puede ser verificado tanto analíticamente como computacionalmente. Sin embargo, limitaciones computacionales del algoritmo de Metropolis, como el tamaño finito de la red utilizada y un número no suficiente de iteraciones, generaron diferencias con los otros resultados obtenidos con la técnica de renormalización. Estas diferencias también están asociadas al comportamiento de la función de correlación que se asume de entrada. Los resultados numéricos para la función de correlación dan indicios de que esta sigue una ley de potencias, dado que los errores asociados a su parámetro son significativamente menores en comparación a un ajuste de decaimiento exponencial, teniendo como referencia al resultado analítico. El decaimiento en forma de ley de potencias en la función de correlación indica la existencia de fenómenos que exhiben propiedades de autosimilaridad a diversas escalas. Esta característica concuerda con lo que se espera ver en retículos con geometría fractal.

Por otro lado, fractales como la alfombra de Sierpinski sí revelan propiedades críticas a temperaturas finitas. En contraste al modelo de Ising en un retículo cuadrado, los resultados numéricos muestran que la configuración guarda memoria de su configuración inicial, aun después de una transición de fase. En este tipo de sistemas, la aplicación de la técnica de renormalización puede volverse más complicada dada su mayor dimensionalidad.

7

Consideraciones éticas

Durante la ejecución de mi proyecto, se priorizó el cumplimiento de las consideraciones éticas, incluyendo el uso apropiado de fuentes y la precisión de los datos. Se llevó a cabo una investigación exhaustiva para seleccionar fuentes confiables y autorizadas. Además, se atribuyó correctamente la propiedad intelectual mediante la citación adecuada de todas las fuentes, evitando cualquier forma de plagio. Para garantizar la precisión de los datos, se implementó un riguroso proceso de pruebas y análisis, asegurando la representatividad y la integridad de los resultados obtenidos.

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría agradecer al profesor Gabriel Téllez, quien desde el primer momento fue receptivo con mis ideas y me apoyó para realizar este proyecto. Sin su guía y valiosos conocimientos, este proyecto no habría tenido buenos resultados. Tener la oportunidad de trabajar con él fue una experiencia enriquecedora que me brindó valiosas lecciones. También me gustaría agradecer a los demás integrantes del grupo de Física Estadística, quienes contribuyeron activamente al desarrollo de este proyecto. Sus preguntas y comentarios fueron muy constructivos. Por último, quiero agradecer al profesor Jose Alejandro, quien estuvo pendiente de este proyecto y me brindó motivación y conocimientos.

En el ámbito personal, me gustaría agradecer a mi familia, quienes desde el principio han creído en mí y me han apoyado incondicionalmente. A mi pareja, quien me ha escuchado y brindado fortaleza y determinación en los momentos más difíciles. Y a mis amigos, quienes han compartido este camino conmigo.

Referencias

1. Reichl, L. E. *A modern course in statistical physics* 1999.
2. Brush, S. G. History of the Lenz-Ising model. *Reviews of modern physics* **39**, 883 (1967).
3. Bunde, A. y Havlin, S. *Fractals in science* (Springer, 2013).
4. Cherny, A. Y., Anitas, E., Osipov, V. y Kuklin, A. Deterministic fractals: Extracting additional information from small-angle scattering data. *Physical Review E* **84**, 036203 (2011).
5. Jacquin, A. E. Fractal image coding: A review. *Proceedings of the IEEE* **81**, 1451-1465 (1993).
6. Onsager, L. *Crystal Statistics. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition* (1944).
7. Di Francesco, P., Saleur, H. y Zuber, J. Critical Ising correlation functions in the plane and on the torus. *Nuclear Physics B* **290**, 527-581 (1987).
8. Bhattacharjee, S. M. y Khare, A. Fifty years of the exact solution of the two-dimensional Ising model by Onsager. *Current science* **69**, 816-821 (1995).
9. University, A. *The Ising model* <https://www.math.arizona.edu/~tgk/541/chap1.pdf>.
10. Wilson, K. G. The renormalization group and critical phenomena. *Reviews of Modern Physics* **55**, 583 (1983).
11. Téllez Acosta, G. *Mecánica Estadística* (Colombia, 2020-2021).
12. Suzuki, S. y Masatsugu. *Renormalization Group* <https://bingweb.binghamton.edu/~suzuki/ThermoStatFiles/16.12%20PT%20Renormalization%20group.pdf>. Binghamton University. 2016.
13. Schleicher, D. Hausdorff dimension, its properties, and its surprises. *The American Mathematical Monthly* **114**, 509-528 (2007).
14. Mathé, P. y Novak, E. Simple Monte Carlo and the metropolis algorithm. *Journal of Complexity* **23**, 673-696 (2007).
15. Lukepolson. *Python Metaphysics Series* https://github.com/lukepolson/youtube_channel/blob/main/Python%20Metaphysics%20Series/vid14.ipynb. 2021.
16. Awerbuch, B. y Gallager, R. G. *Distributed BFS algorithms en 26th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (sfcs 1985)* (1985), 250-256.
17. Gefen, Y., Mandelbrot, B. B. y Aharony, A. Critical Phenomena on Fractal Lattices. *Physical Review Letters* **45**, 855-858 (1980).

-
18. Carmona, J. M., Marconi, U. M. B., Ruiz-Lorenzo, J. J. y Tarancón, A. CRITICAL PROPERTIES OF THE ISING MODEL ON SIERPINSKI FRACTALS : A FINITE-SIZE SCALING-ANALYSIS APPROACH. *Physical Review B* **58**, 14387-14396 (1998).