

Universidad de Sevilla

FACULTAD DE FÍSICA

ESTUDIANDO PROCESOS DE NO
EQUILIBRIO CON MODELOS SENCILLOS

Trabajo Fin de Grado

Autor: D. Guillermo Cortés Guillén

Tutor: Dr. D. Antonio Prados Montaña

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Índice general

1. Introducción teórica	2
1.1. Revisión de los procesos estocásticos	2
1.1.1. Variables estocásticas	2
1.1.2. Procesos estocásticos	9
1.1.3. Procesos de Markov	10
1.1.4. La Ecuación maestra	12
1.2. Dinámica del modelo de Glauber	16
1.2.1. El Modelo de Ising	16
1.2.2. Ecuaciones de la dinámica de Glauber	17
1.2.3. Resolución de las ecuaciones de la dinámica de Glauber	18
2. Relajación de la energía en el régimen no lineal	23
2.1. Integración de la jerarquía de ecuaciones	23
2.2. Respuesta no lineal	27
2.3. Análisis asintótico de la respuesta no lineal	29
3. Simulaciones numéricas	33
3.1. Magnitudes adimensionales	33
3.2. El algoritmo de Metropolis	35
3.3. Resultados de las simulaciones	37
3.3.1. Relajación de la energía desde temperatura infinita	38
3.3.2. Relajación de la energía entre dos temperaturas finitas	39
3.3.3. Fluctuaciones de la energía	39
4. Resumen y conclusiones	42
Apéndice A. Relajación de la energía. Representación lineal	44
Anexo I. Script del algoritmo de Metropolis. $T_0^* = 10^4$	45
Anexo II. Script del algoritmo de Metropolis. $T_{01}^* = 4, T_{02}^* = 1$	50

Motivación, sinopsis y objetivos

El sistema físico objeto de nuestro estudio en el presente trabajo no existe más que como una mera abstracción mental. La naturaleza no es tan simple como los modelos que, habitualmente, somos capaces de describir analíticamente. No obstante, y, ¿por qué no decirlo?, sorprendentemente, una simplificación conceptual tan radical como la que plantea el Modelo de Ising ha permitido una resolución exacta a un problema ideal que explica multitud de fenómenos relacionados con las transiciones de fase que observamos en diversos sistemas reales (aunque, originalmente, fue planteado para explicar el ferromagnetismo, y el modelo solo presenta transición de fase para 2 ó más dimensiones).

De todos los comportamientos que pueden analizarse a partir de este modelo, el que ha motivado la elaboración de este trabajo es el estudio de la respuesta de un sistema de N espines descrito por el hamiltoniano de Ising a un salto finito de temperatura (en el régimen de respuesta no lineal).

Una vez enmarcado nuestro trabajo indefectiblemente en el corazón de la Física Estadística, es pertinente exponer, en primer lugar, una sucinta revisión de algunos conceptos fundamentales de la teoría de variables estocásticas y procesos estocásticos en el capítulo 1. Posteriormente, presentamos y discutimos los cálculos analíticos de la respuesta no lineal en el capítulo 2. Por otra parte, el capítulo 3 trata la respuesta no lineal mediante simulaciones numéricas de la ecuación maestra que gobierna la dinámica del sistema, utilizando el método de Metrópolis. Finalmente, exponemos las principales conclusiones de nuestro trabajo en el capítulo 4. El apéndice presenta algunas figuras adicionales y los anexos contienen los scripts de MATLAB que se han desarrollado y usado para obtener los resultados numéricos en este trabajo.

Capítulo 1

Introducción teórica

1.1. Revisión de los procesos estocásticos

Trataremos de explicar los fundamentos matemáticos de los procesos estocásticos. Seguiremos, en gran medida, el planteamiento propuesto en [1] de los capítulos I, III, IV y V, obviando ciertas cuestiones que se salen de la temática de nuestro trabajo. Si bien no nos adentraremos a un nivel profundo en la Teoría de la Probabilidad, abordaremos los conceptos que son necesarios entender para un tratamiento profundo de los procesos estocásticos en Física, como son las funciones de espín en el modelo de Ising con la dinámica de Glauber.

1.1.1. Variables estocásticas

Definir una variable estocástica X consiste en determinar su espacio muestral y la distribución de probabilidad asociada a éste.¹

El espacio muestral S de una variable estocástica es el conjunto de valores que ésta puede tomar. Este espacio puede ser discreto (cara y cruz, espín $+1$ ó $-1, \dots$), continuo (una componente de la velocidad de una partícula Browniana, ...), continuo-discreto (la energía de un electrón en presencia de núcleos a los que está ligados, ...) o multidimensional (N espines, cada uno pudiendo valer $+1$ ó $-1, \dots$).

A cada uno de los elementos que componen el espacio muestral le asignamos un número real no negativo mediante la función de densidad de probabilidad o distribución de probabilidad $P(x)$. Que sea no negativo es coherente con nuestra noción intuitiva de la probabilidad: (n^0 casos favorables/ n^0 casos posibles) >0 . Además, $P(x)$ debe estar normalizada para que la probabilidad de que X tome un valor cualquiera de los que componen el espacio muestral sea igual a 1.

También es de interés la función de distribución acumulada (el nombre más común entre los físicos) o función de distribución de probabilidad $\mathbb{P}(x)$, que nos da la probabilidad de que X tome cualquier valor menor o igual que x . Esta función es la preferida por los matemáticos ya que presenta menos problemas de regularidad que $P(x) = d\mathbb{P}(x)/dx$

¹Para una definición matemáticamente más rigurosa de variable estocástica y demás conceptos sobre la Teoría de la Probabilidad véase la Ref. [2].

	Discreto	Continuo
\mathcal{S}	$x_i; i = 1, 2, \dots, n$ ($n \in \mathbb{N}$, e.g., $n \rightarrow \infty$)	e.g. : $I \in \mathbb{R}; \forall x \in I$
$\mathbf{P}(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0}$	$\sum_{i=1}^n p_i \delta(x - x_i)$	$Prob(a \leq x \leq b) = \int_a^b dx P(x)$
$\mathbb{P}(\mathbf{x})$	$\int_{-\infty}^x dy P(y) = \sum_{i=1}^n p_i \Theta(x - x_i)$	$\int_{-\infty}^x dy P(y)$
Normalización	$\sum_{i=1}^n p_i = 1$	$\int_{-\infty}^{+\infty} dx P(x) = 1$

Tabla 1.1: Expresiones del espacio muestral \mathcal{S} , la distribución de probabilidad $P(x)$, la función de distribución acumulada $\mathbb{P}(x)$ y la condición de normalización para el caso discreto y continuo. $\Theta(x - x_i)$ es la función de Heaviside. En el caso continuo, $P(x)$ debe ser una función integrable.

(las condiciones de derivabilidad de una función son más exigentes que las condiciones de integrabilidad). Los físicos, generalmente, encontramos más intuitiva a $P(x)$, ya que se ajusta mejor a la idea frecuentista de probabilidad que ya hemos comentado.

Es importante conocer en muchas ocasiones, también, el valor esperado de una función de una variable estocástica $f(X)$, definido como

$$\langle f(X) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) P(x). \quad (1.1.1)$$

Un caso particular de valor esperado son los momentos m-ésimos μ_m , que definimos mediante

$$\mu_m \equiv \langle X^m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^m P(x), \quad (1.1.2)$$

y que nos dan información sobre la forma y extensión de la distribución de probabilidad, siendo los más significativos los momentos de orden más bajo. Podemos, incluso, definir combinaciones de momentos como la varianza σ^2

$$\sigma^2 \equiv \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \mu_2 - \mu_1^2, \quad (1.1.3)$$

que es el cuadrado de la desviación estándar σ . Esta última nos da una medida de cuánto se aleja la probabilidad de la media μ_1 o “centro de masas” de la distribución de probabilidad $P(x)$.

Otro caso particular de valor esperado que tiene relevancia es la función característica de la variable estocástica X

$$G(k) = \langle e^{ikX} \rangle = \int_I dx e^{ikx} P(x), \quad (1.1.4)$$

con rango I (I pueden ser todos los números reales o un subconjunto de ellos) y que, si recordamos la condición de normalización de la Tabla 1.1, vemos que cumple las propiedades

$$G(0) = 1; |G(k)| \leq 1. \quad (1.1.5)$$

Nos damos cuenta que la ecuación (1.1.4) puede expresarse, según la definición (1.1.2) y la serie de Taylor de la exponencial, como

$$G(k) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \mu_m. \quad (1.1.6)$$

Es lógico, entonces, el nombre de función generadora de momentos con el que denominamos a $G(k)$ en (1.1.6), ya que los coeficientes de su expansión de Taylor son los momentos que definimos en (1.1.2). Pero no acaba aquí la importancia de $G(k)$. Esta función también sirve como generadora de los cumulantes κ_m

$$\ln G(k) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \kappa_m. \quad (1.1.7)$$

Los cumulantes son ciertas combinaciones de los momentos²

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \mu_1; \quad \kappa_2 = \mu_2 - \mu_1^2 = \sigma^2; \quad \kappa_3 = \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3; \\ \kappa_4 &= \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4. \end{aligned} \quad (1.1.8)$$

Toda esta discusión sobre la función característica se cierra con la relación que se infiere de la ecuación (1.1.4), a saber,

$$\bar{P}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx G(k) e^{-ikx}, \quad (1.1.9)$$

lo que deja ver que la función característica es la transformada de Fourier de la función $\bar{P}(x)$, que coincide con la distribución de probabilidad dentro de I y se anula fuera de ese intervalo.³

Continuamos esta discusión teórica, a continuación, generalizando algunos de los aspectos comentados hasta ahora para el caso de varias variables. Sea, entonces, la variable multidimensional X que presenta r componentes X_1, X_2, \dots, X_r , cada una de ellas definidas en el mismo espacio muestral S . La distribución de probabilidad conjunta $P_r(x_1, x_2, \dots, x_r)$ será, entonces, la densidad de probabilidad de que X_1 valga x_1 , X_2 sea x_2 , y así sucesivamente hasta r . Si queremos saber la distribución de probabilidad de que $s < r$ componentes presenten los valores x_1, \dots, x_s , independientemente de lo que valgan el resto de $r - s$ componentes X_{s+1}, \dots, X_r , entonces tendremos que integrar la distribución de probabilidad conjunta sobre las variables x_{s+1}, \dots, x_r cuyo valor nos es indiferente:

$$P_s(x_1, \dots, x_s) = \int dx_{s+1} \dots dx_r P_r(x_1, \dots, x_s, x_{s+1}, \dots, x_r), \quad (1.1.10)$$

a la que denominamos distribución marginal.

Si pensamos calcular la distribución de probabilidad conjunta de $s < r$ variables,

²La expresión general de los cumulantes, a partir de la definición de serie de Taylor, es $\kappa_m = d^m (\ln G(k)) / d(ik)^m |_{k=0}$.

³Para una discusión más pormenorizada de la diferencia entre $\bar{P}(x)$ y $P(x)$, véase [1], sección I.2.

esta vez considerando que cada una de las variables X_{s+1}, \dots, X_r presenta un valor determinado (justo lo opuesto a la distribución marginal), estaremos hablando del concepto de probabilidad condicional, denotado $P_{s|r-s}(x_1, \dots, x_s | x_{s+1}, \dots, x_r)$. Según las definiciones de distribución marginal y probabilidad condicional, es intuitiva la relación entre ambos conceptos que nos enuncia el Teorema de Bayes

$$\begin{aligned} P_r(x_1, \dots, x_r) &= P_{r-s}(x_{s+1}, \dots, x_r) P_{s|r-s}(x_1, \dots, x_s | x_{s+1}, \dots, x_r) \\ \iff P_{s|r-s}(x_1, \dots, x_s | x_{s+1}, \dots, x_r) &= \frac{P_r(x_1, \dots, x_r)}{P_{r-s}(x_{s+1}, \dots, x_r)}. \end{aligned} \quad (1.1.11)$$

Existe una condición particular sobre la distribución de probabilidad conjunta $P_r(x_1, x_2, \dots, x_r)$ que implica que las variables X_1, \dots, X_s y X_{s+1}, \dots, X_r ($s < r$) no se relacionan de ninguna manera entre sí, es decir, son estadísticamente independientes. Esta condición es

$$P_r(x_1, \dots, x_r) = P_s(x_1, \dots, x_s) P_{r-s}(x_{s+1}, \dots, x_r). \quad (1.1.12)$$

Pero si se cumple la condición (1.1.12), entonces el Teorema de Bayes (1.1.11) se simplifica, resultando que

$$P_{s|r-s}(x_1, \dots, x_s | x_{s+1}, \dots, x_r) = P_s(x_1, \dots, x_s), \quad (1.1.13)$$

lo que es consistente con que las variables $\{X_1, \dots, X_s\}$ y $\{X_{s+1}, \dots, X_r\}$ ($s < r$) no se afecten de ninguna manera entre sí, siendo estadísticamente independientes.

Es el momento de exponer las expresiones análogas a (1.1.2), (1.1.4), (1.1.6) y (1.1.7) en el caso de la distribución de múltiples variables:

- Momento m_1, m_2, \dots, m_r -ésimo de una distribución de r variables:

$$\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \dots X_r^{m_r} \rangle = \int dx_1 dx_2 \dots dx_r x_1^{m_1} x_2^{m_2} \dots x_r^{m_r} P(x_1, x_2, \dots, x_r). \quad (1.1.14)$$

- Función característica de una distribución de r variables:

$$G(k_1, k_2, \dots, k_r) = \langle e^{i(k_1 X_1 + k_2 X_2 + \dots + k_r X_r)} \rangle. \quad (1.1.15)$$

- Función generadora de momentos de una distribución de r variables:

$$G(k_1, k_2, \dots, k_r) = \sum_{m_1, m_2, \dots, m_r=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{m_1} (ik_2)^{m_2} \dots (ik_r)^{m_r}}{m_1! m_2! \dots m_r!} \langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \dots X_r^{m_r} \rangle. \quad (1.1.16)$$

- Función generadora de los cumulantes (denotados $\langle\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \dots X_r^{m_r} \rangle\rangle$) de una dis-

tribución de r variables:

$$\ln G(k_1, k_2, \dots, k_r) = \sum_{m_1, m_2, \dots, m_r=0}^{\infty} \frac{(ik_1)^{m_1} (ik_2)^{m_2} \dots (ik_r)^{m_r}}{m_1! m_2! \dots m_r!} \langle \langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \dots X_r^{m_r} \rangle \rangle. \quad (1.1.17)$$

El concepto de varianza se generaliza a r dimensiones mediante la matriz de covarianza, que viene definida por

$$\langle \langle X_i X_j \rangle \rangle \equiv \langle (X_i - \langle X_i \rangle) (X_j - \langle X_j \rangle) \rangle = \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle, \quad (1.1.18)$$

en donde i y j toman los valores desde 1 hasta r . Los elementos de la diagonal de la matriz ($i = j$), recordando la definición (1.1.3), son las varianzas de cada una de las variables X_i . El resto de elementos ($i \neq j$) se denominan covarianzas. Podemos, también, normalizar la expresión (1.1.18), lo que nos da lugar a los coeficientes de correlación

$$\rho_{ij} = \frac{\langle \langle X_i X_j \rangle \rangle}{\sqrt{\langle \langle X_i^2 \rangle \rangle \langle \langle X_j^2 \rangle \rangle}} = \frac{\langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle}{\sqrt{(\langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2) (\langle X_j^2 \rangle - \langle X_j \rangle^2)}}. \quad (1.1.19)$$

Estas definiciones nos sirven, además, para expresar diversas condiciones de independencia estadística de manera muy simple. Exponemos, para el caso $r = 2, 3$ condiciones que determinan, cada una de ellas, la independencia estadística entre X_1 y X_2 (sólo es necesario que se cumpla una de las tres para que se dé la independencia estadística):

- a) Factorización de cualquiera de los momentos: $\langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \rangle = \langle X_1^{m_1} \rangle \langle X_2^{m_2} \rangle$.
- b) Factorización de la función característica: $G(k_1, k_2) = G_1(k_1) G_2(k_2)$.

Cuando se cumple esta condición, vemos claramente la ventaja de usar cumulantes en vez de momentos cuando trabajamos con variables estadísticamente independientes X_1 y X_2 porque

$$\ln(G(k_1, k_2)) = \ln(G_1(k_1) G_2(k_2)) = \ln(G_1(k_1)) + \ln(G_2(k_2)), \quad (1.1.20)$$

es decir, la función generadora de los cumulantes de una distribución de 2 variables es la suma de las funciones generadoras de los cumulantes de cada una de las variables X_1 y X_2 .

- c) Los cumulantes son nulos si m_1 y m_2 difieren de 0: $\langle \langle X_1^{m_1} X_2^{m_2} \rangle \rangle = 0$ si m_1 y $m_2 \neq 0$.

No obstante, hay situaciones en que no son necesarias condiciones tan estrictas como las que determinan la independencia estadística, y es suficiente con que se cumpla $\langle \langle X_1 X_2 \rangle \rangle = 0$, lo que significa que X_1 y X_2 están descorrelacionados.

Consideremos ahora la suma de 2 variables estocásticas $Y = X_1 + X_2$. Si su distribución de probabilidad conjunta es $P_X(x_1, x_2)$, para calcular la probabilidad de que Y esté entre

y e $y + \Delta y$ habrá que integrar la probabilidad conjunta sobre x_1 y x_2 con las restricciones de que su suma esté en el intervalo deseado

$$P_Y(y) \Delta y = \int \int_{y < x_1 + x_2 < y + \Delta y} P_X(x_1, x_2) dx_1 dx_2. \quad (1.1.21)$$

Pero si dividimos por Δy y tomamos el límite $\Delta y \rightarrow 0$ aparece la delta de Dirac que impone que la suma de las dos variables sea y

$$P_Y(y) = \int \int \delta(x_1 + x_2 - y) P_X(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \int P_X(x_1, y - x_1) dx_1, \quad (1.1.22)$$

lo que se convierte, recordando (1.1.12), en la convolución de sus probabilidades individuales cuando X_1 y X_2 son variables independientes

$$P_Y(y) = \int P_{X_1}(x_1) P_{X_2}(y - x_1) dx_1. \quad (1.1.23)$$

Pero no solo es importante el hecho de que aparezca la convolución. En este caso particular, las expresiones de los momentos se simplifican notoriamente.⁴ Exponemos, primero, la identidad universal

$$\langle Y \rangle = \langle X_1 \rangle + \langle X_2 \rangle, \quad (1.1.24)$$

válida tanto si X_1 y X_2 son independientes como si no lo son. Si X_1 y X_2 están descorrelacionadas, se tiene que

$$\langle \langle (X_1 + X_2)^2 \rangle \rangle = \langle \langle X_1^2 \rangle \rangle + \langle \langle X_2^2 \rangle \rangle \leftrightarrow \sigma_Y^2 = \sigma_{X_1}^2 + \sigma_{X_2}^2, \quad (1.1.25)$$

y si X_1 y X_2 son independientes, recordando (1.1.20) tenemos

$$G_Y(k) = G_{X_1}(k) G_{X_2}(k). \quad (1.1.26)$$

A continuación, definimos la distribución gaussiana. Nos detenemos en ella porque su relevancia va a hacer que aparezca en muchas situaciones en estadística, como veremos más adelante. Esta distribución se define como

$$P(x) \equiv (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp \left[-\frac{(x - \mu_1)^2}{2\sigma^2} \right], \quad -\infty < x < +\infty, \quad (1.1.27)$$

en donde μ_1 representa el valor medio y σ^2 la varianza de la distribución. Además, otra característica muy importante de la distribución gaussiana es que sus cumulantes se anulan a partir del tercero, es decir,

$$\kappa_1 = \mu_1; \kappa_2 = \sigma^2; \kappa_3 = \kappa_4 = \dots = 0. \quad (1.1.28)$$

Esta propiedad (1.1.28) simplifica la función característica de la distribución gaussiana

⁴Sus expresiones pueden deducirse a partir de la definición (1.1.14).

que, según (1.1.7), nos quedaría como

$$G(k) = e^{i\mu_1 k - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2}. \quad (1.1.29)$$

A continuación, exponemos otra de las propiedades más destacadas en relación a las distribuciones gaussianas, a saber, el Teorema de límite central. Supongamos que hay r variables estocásticas independientes X_1, X_2, \dots, X_r , cada una de ellas con la misma distribución gaussiana de probabilidad con media 0 y varianza σ^2 . Si tenemos en cuenta (1.1.25) y (1.1.27), podemos escribir la distribución de probabilidad de la suma Y de estas variables

$$P_Y(y) = [2\pi r\sigma^2]^{-1/2} \exp\left[-\frac{y^2}{2r\sigma^2}\right]. \quad (1.1.30)$$

Para quitar la dependencia lineal de la varianza de Y con r podemos definir una suma escalada con \sqrt{r} en el denominador, de tal manera que al aplicar el resultado (1.1.25) desaparezca la dependencia con r

$$Z = \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_r}{\sqrt{r}}, \quad (1.1.31)$$

y, por lo tanto,

$$P_Z(z) = [2\pi\sigma^2]^{-1/2} \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right], \quad (1.1.32)$$

es decir, obtenemos que la suma escalada de estas r variables estocásticas también presenta distribución de probabilidad gaussiana de media 0 y varianza σ^2 . No obstante, lo que afirma el teorema de límite central va más allá porque dice que, incluso si $P_X(x)$ no es gaussiano, en el límite $r \rightarrow \infty$ la igualdad (1.1.32) sigue siendo cierta.

Con la teoría que llevamos expuesta podemos demostrar el resultado de este teorema. Para ello, recurrimos a la definición de función generadora de momentos (1.1.6), que nos sirve, en este caso, para escribir los dos primeros términos no nulos de la serie

$$G_X(k) = 1 - \frac{1}{2}\sigma^2 k^2 + \dots, \quad (1.1.33)$$

dado un $P_X(x)$ cualquiera, con la única condición de que tenga media 0 y varianza σ^2 . Como una de las condiciones iniciales es que las r variables estocásticas eran independientes entre sí, según (1.1.20), la función característica total factoriza, es producto de las r funciones características de X_1, X_2, \dots, X_r iguales

$$G_Z(k) = \left[G_X\left(\frac{k}{\sqrt{r}}\right)\right]^r = \left[1 - \frac{\sigma^2 k^2}{2r}\right]^r. \quad (1.1.34)$$

Si tomamos el límite para $r \rightarrow \infty$ como nos dice el teorema, tenemos que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} G_Z(k) = \left[1 - \frac{\sigma^2 k^2}{2r}\right]^r = e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 k^2}, \quad (1.1.35)$$

lo que representa la función característica de una gaussiana, como explicamos en (1.1.29).

1.1.2. Procesos estocásticos

Una vez definido el concepto de variable estocástica, podemos generar infinitud de variables a partir de ella si la mapeamos con una función f . Si esta función f es, además, función de otra variable t ,

$$Y_X(t) = f(X, t), \quad (1.1.36)$$

tenemos lo que se denomina una función aleatoria. En física, t suele referirse al tiempo y entonces lo llamamos proceso estocástico. Si insertamos un posible valor concreto x de la variable X estaremos llevando a cabo una realización o función de muestra del proceso. El conjunto de estas posibles funciones de muestra configuran el proceso estocástico.

Seguidamente, exponemos definiciones similares a las que comentamos en la sección de variables estocásticas. En primer lugar, comenzaremos con el valor medio de un proceso estocástico

$$\langle Y(t) \rangle = \int dx Y_x(t) P_X(x), \quad (1.1.37)$$

que generalizamos escribiendo el n -ésimo momento

$$\langle Y(t_1) Y(t_2) \dots Y(t_n) \rangle = \int dx Y_x(t_1) Y_x(t_2) \dots Y_x(t_n) P_X(x). \quad (1.1.38)$$

De manera similar a la varianza, definimos la función de autocorrelación

$$\begin{aligned} \kappa(t_1, t_2) &\equiv \langle \langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle \rangle = \langle [Y(t_1) - \langle Y(t_1) \rangle] [Y(t_2) - \langle Y(t_2) \rangle] \rangle \\ &= \langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle - \langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle \end{aligned} \quad (1.1.39)$$

Si suponemos que $t_1 > t_2$, lo que nos ofrece esta función es información sobre la correlación del proceso estocástico en t_1 con una copia retrasada de la misma en t_2 . Parece intuitivo que, al menos para algunos sistemas, existe un intervalo de tiempo límite que si se sobrepasa, ya no existe correlación entre la función evaluada antes y después de ese intervalo. A este tiempo se le denomina tiempo de autocorrelación τ_c . Los procesos con valores no finitos de τ_c siempre se ven influidos en cualquier instante t por todo lo que ha sucedido antes.

Ahora que tenemos la variable temporal en nuestras magnitudes, es natural que aparezca el concepto de proceso estacionario, que se da cuando todos los momentos son invariantes ante traslación temporal, esto es,

$$\langle Y(t_1 + \tau) Y(t_2 + \tau) \dots Y(t_n + \tau) \rangle = \langle Y(t_1) Y(t_2) \dots Y(t_n) \rangle. \quad (1.1.40)$$

En particular, si el proceso es estacionario, la media $\langle Y \rangle$ será independiente del tiempo y podemos trabajar siempre con un proceso de media cero

$$\tilde{Y}(t) = Y(t) - \langle Y \rangle. \quad (1.1.41)$$

Abordamos ahora el caso en que $Y(t)$ presenta r componentes $Y_j(t)$ ($j = 1, 2, \dots, r$). Tenemos, entonces, la matriz de correlación, en vez de la función de correlación (similar a la matriz de covarianza), que se define

$$K_{ij}(t_1, t_2) \equiv \langle \langle Y_i(t_1) Y_j(t_2) \rangle \rangle. \quad (1.1.42)$$

Sus elementos diagonales son las autocorrelaciones y el resto las correlaciones cruzadas. Fijámonos en (1.1.39), la expresión de la matriz de correlación se simplifica cuando nuestro proceso sea estacionario y de media cero porque

$$K_{ij}(\tau) \equiv \langle Y_i(t) Y_j(t + \tau) \rangle = \langle Y_i(0) Y_j(\tau) \rangle, \quad (1.1.43)$$

y contando, además, con la propiedad

$$K_{ij}(\tau) = K_{ji}(-\tau), \quad (1.1.44)$$

cuando el proceso es estacionario.

1.1.3. Procesos de Markov

El sistema de estudio en nuestro trabajo sigue un proceso de Markov, que es un tipo de proceso estocástico que procedemos a explicar. Para la definición de proceso de Markov es necesario utilizar el concepto de probabilidad condicional (véase (1.1.11)) y el de proceso estocástico (véase (1.1.36)). Y es que el proceso de Markov es un tipo particular de proceso estocástico Y , en el cual se cumple la propiedad de Markov

$$P_{1|n-1}(y_n, t_n | y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}) = P_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}), \quad (1.1.45)$$

en donde hemos considerado que $t_1 < t_2 < \dots < t_n$. Lo que significa (1.1.45) es que la probabilidad condicional de que nuestro proceso estocástico tome los valores y_n en el instante t_n depende exclusivamente de los valores y_{n-1} que tenía en el instante t_{n-1} . Por lo tanto, todos los valores por los que ha pasado nuestro proceso de Markov para tiempos menores que t_{n-1} no afectan en absoluto a los valores que toma en el tiempo t_n . Teniendo en cuenta esto, es razonable que denominemos los procesos de Markov como *procesos carentes de memoria*. También parece lógico el nombre de probabilidad de transición con el que denominamos a $P_{1|1}$; esta probabilidad nos va a dar información sobre el cambio del valor de Y del tiempo t_{n-1} a t_n .

La propiedad (1.1.45) lleva a que cualquier proceso de Markov esté completamente determinado por $P_1(y_1, t_1)$ y $P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)$. Lo ilustraremos tomando $n = 3$,

$$\begin{aligned} P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) &= P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) P_{1|2}(y_3, t_3 | y_1, t_1; y_2, t_2) \\ &= P_1(y_1, t_1) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2), \end{aligned} \quad (1.1.46)$$

aunque es válido para cualquier valor de $n \in \mathbb{N}$. Queremos obtener una identidad que cumple siempre la probabilidad de transición de cualquier proceso de Markov. Para ello,

integraremos ambos miembros de la igualdad (1.1.46). Si recordamos la definición de distribución marginal (1.1.10), estableciendo $t_1 < t_2 < t_3$, entonces nos queda

$$P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) \int dy_2 P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2). \quad (1.1.47)$$

Dividimos (1.1.47) ahora por $P_1(y_1, t_1)$ en ambos miembros. Recordamos el Teorema de Bayes (1.1.11) y nos queda

$$P_{1|1}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int dy_2 P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1), \quad (1.1.48)$$

que se denomina la ecuación de Chapman-Kolmogorov. Matizamos que esta ecuación sigue siendo válida cuando y es un vector de r componentes y cuando y solo toma valores discretos, en cuyo caso la integral se convierte en un sumatorio.

Por lo tanto, sabemos por (1.1.46) que cualquier proceso de Markov está determinado por $P_1(y_1, t_1)$ y $P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)$. Además, estas dos cantidades deben satisfacer una última relación

$$P_1(y_2, t_2) = \int dy_1 P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_1(y_1, t_1), \quad (1.1.49)$$

que es una ecuación de consistencia, que nos dice simplemente que P_1 se puede obtener marginalizando P_2 . A la inversa también es cierto, es decir, cualesquiera 2 funciones que cumplan las condiciones (1.1.48) y (1.1.49) determinan de manera unívoca un proceso de Markov.

Al igual que en la sección de procesos estocásticos, estudiaremos los procesos estacionarios, en este caso, los procesos de Markov estacionarios. En el proceso de Markov, la cantidad que establece el desarrollo futuro del mismo es $P_{1|1}$. Cuando se alcanza el estado estacionario, $P_{1|1}$ no puede depender de los 2 tiempos t_1 y t_2 , porque entonces cada par cualquiera de instantes equiespaciados no serían equivalentes entre sí, algo que contradice la noción de estacionario. Es por eso que $P_{1|1}$ solamente depende del intervalo temporal $\tau = t_2 - t_1$ y la denotaremos

$$P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = T_\tau(y_2 | y_1), \quad \tau = t_2 - t_1. \quad (1.1.50)$$

Si sustituimos (1.1.50) en (1.1.48), teniendo en cuenta que $\tau = t_3 - t_2$, llegamos a

$$T_{\tau+\tau'}(y_3 | y_1) = \int dy_2 T_{\tau'}(y_3 | y_2) T_\tau(y_2 | y_1), \quad (\tau, \tau' > 0), \quad (1.1.51)$$

que es la ecuación de Chapman-Kolmogorov en el estado estacionario. También podemos escribirla (entendiendo la integral como el producto de dos matrices) como

$$T_{\tau+\tau'} = T_{\tau'} T_\tau, \quad \tau, \tau' > 0. \quad (1.1.52)$$

1.1.4. La Ecuación maestra

La ecuación maestra se deduce a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov (1.1.48), tomando el límite de $\tau' \rightarrow 0$. Se tiene que⁵

$$T_{\tau'}(y_2|y_1) = (1 - a_0(y_1)\tau')\delta(y_2 - y_1) + \tau'W(y_2|y_1) + o(\tau'), \quad (1.1.53)$$

en donde $W(y_2|y_1)$ es la probabilidad de transición por unidad de tiempo de y_1 a y_2 , con lo que no puede ser negativo

$$W(y_2|y_1) \geq 0, \quad (1.1.54)$$

y debe cumplir con la normalización $\int dy_2 T_{\tau'}(y_2|y_1) = 1$, por lo que

$$a_0(y_1) = \int dy_2 W(y_2|y_1). \quad (1.1.55)$$

Por tanto, tenemos $a_0(y_1)$ como término que indica la probabilidad de salida del estado y_1 en el tiempo τ' y $(1 - a_0(y_1)\tau')$ como la probabilidad de permanencia en el estado y_1 en τ' .

Una vez que tenemos la expresión de $T_{\tau'}(y_2|y_1)$ en el límite $\tau' \rightarrow 0$ lo que nos queda es introducirla en la ecuación de Chapman-Kolmogorov. Reescribimos, primero, (1.1.48) con la nueva notación

$$T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) = \int dy_2 T_{\tau}(y_3|y_2) T_{\tau'}(y_2|y_1). \quad (1.1.56)$$

Sustituimos (1.1.53) en (1.1.56)

$$T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) = [1 - a_0(y_3)\tau'] T_{\tau}(y_3|y_1) + \tau' \int dy_2 W(y_3|y_2) T_{\tau}(y_2|y_1). \quad (1.1.57)$$

Si dividimos entre τ' en el límite $\tau' \rightarrow 0$, teniendo en cuenta la definición de derivada, y aplicamos (1.1.55) a (1.1.57), nos queda

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} T_{\tau}(y_3|y_1) &= \lim_{\tau' \rightarrow 0} \frac{T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) - T_{\tau}(y_3|y_1)}{\tau'} \\ &= \int dy_2 [W(y_3|y_2) T_{\tau}(y_2|y_1) - W(y_2|y_3) T_{\tau}(y_3|y_1)]. \end{aligned} \quad (1.1.58)$$

No obstante, es más común expresar (1.1.58) como

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int dy' [W(y|y') P(y', t) - W(y'|y) P(y, t)], \quad (1.1.59)$$

que es la ecuación maestra para una variable de rango continuo Y . Debemos entender la solución de esta ecuación $P(y, t)$ como la probabilidad de transición $T_{t-t_1}(y|y_1)$ del proceso de Markov, dados los valores iniciales t_1 e y_1 cualesquiera, que viene completamente

⁵Véase cómo se obtiene (1.1.53) en la Ref. [1].

determinada por $t \geq t_1$ y la condición inicial $P(y, t_1) = \delta(y - y_1)$. Aunque hemos deducido (1.1.59) para la probabilidad de transición, también es válida para la distribución de un tiempo $P_1(y, t)$, como sugiere nuestra notación simplificada. En este último caso, la condición inicial ya no es una delta de Dirac, sino la condición inicial para la distribución de un tiempo $P_1(y, 0)$.

Si el rango de Y es discreto, entonces las integrales se convierten en sumatorios y la ecuación maestra quedaría

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_n [W_{nn'} p_{n'}(t) - W_{n'n} p_n(t)]. \quad (1.1.60)$$

Esta notación nos facilita la comprensión del significado de la ecuación maestra. Lo que representa esta ecuación es la variación con el tiempo de la probabilidad de presencia en el estado n ($\frac{dp_n(t)}{dt}$). Los dos términos compiten entre sí, provocando efectos contrarios en este cambio de la probabilidad con el tiempo. El primero es el término de ganancia debido a las transiciones desde otros estados n' a n y el segundo es de pérdida debido a las transiciones que se producen desde n a otros estados n' .

Podemos, ahora, simplificar la notación de la ecuación maestra introduciendo las matrices de clase \mathbb{W} , que vienen definidas según

$$\mathbb{W}_{nn'} = W_{nn'} - \delta_{nn'} \left(\sum_{n''} W_{n''n} \right), \quad (1.1.61)$$

una definición que nos permite escribir la ecuación maestra de manera más compacta

$$\dot{p}_n(t) = \sum_{n'} \mathbb{W}_{nn'} p_{n'}(t) \rightarrow \dot{p}(t) = \mathbb{W}p(t). \quad (1.1.62)$$

Su solución puede escribirse formalmente, dadas las condiciones iniciales $p_n(0)$, como

$$p(t) = e^{t\mathbb{W}} p(0). \quad (1.1.63)$$

Toda matriz que cumpla las propiedades⁶

$$\mathbb{W}_{nn'} \geq 0 \quad \text{para } n \neq n', \quad \sum_n \mathbb{W}_{nn'} = 0 \quad \text{para cada } n', \quad (1.1.64)$$

es una matriz de clase \mathbb{W} , y de esto podemos obtener muchas propiedades. Por ejemplo, de (1.1.64) se deduce que toda matriz de clase \mathbb{W} tiene uno o varios autovectores asociados al autovalor 0

$$\mathbb{W}\phi = 0. \quad (1.1.65)$$

Es ilustrativo también mencionar varios tipos de matrices \mathbb{W} en función de su estructura.

⁶Las propiedades que vamos a comentar son válidas para dimensión finita de las matrices \mathbb{W} , y en ocasiones, para sistemas cuyo rango es infinito numerable o continuo.

Uno de ellos es la matriz decomponible

$$\mathbb{W} = \begin{pmatrix} \mathbb{A} & 0 \\ 0 & \mathbb{B} \end{pmatrix}, \quad (1.1.66)$$

que representa 2 sistemas completamente independientes el uno del otro en tanto que las probabilidades de uno no afectan a la evolución del otro. Otro tipo de \mathbb{W} que comentamos es la incompletamente reducible

$$\mathbb{W} = \begin{pmatrix} \mathbb{A} & \mathbb{D} \\ 0 & \mathbb{B} \end{pmatrix}, \quad (1.1.67)$$

en la que ya sí afecta b a la evolución de a , pero no a la inversa (compruébese con (1.1.62)), de tal manera que a los estados de b los llamamos transitorios y a los de a absorbentes. Yendo un poco más allá, de manera análoga, tendríamos la matriz partida

$$\mathbb{W} = \begin{pmatrix} \mathbb{A} & 0 & \mathbb{D} \\ 0 & \mathbb{B} & \mathbb{E} \\ 0 & 0 & \mathbb{C} \end{pmatrix}, \quad (1.1.68)$$

en donde los estados transitorios son los de c , que serían absorbidos por los de a y b . Pero, en todos los casos, cuando $t \rightarrow \infty$, todas las soluciones de la ecuación maestra tienden a la solución estacionaria (o a las soluciones estacionarias en caso de matriz incompletamente reducible o matriz partida).⁷

La ecuación maestra (1.1.60) ya nos ofrece cuál es la ecuación que debe satisfacer un sistema en estado estacionario, ya que, por definición del mismo

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = 0 \implies \sum_{n'} W_{nn'} p_{n'}^e = \left(\sum_{n'} W_{n'n} \right) p_n^e. \quad (1.1.69)$$

Lo que establece esta ecuación es que la suma de las transiciones de estados n' a un estado n debe compensarse con las de n al resto de estados n' , una propiedad que cumplen todos los sistemas en estado estacionario. La condición que va un paso más allá de la recién comentada, que se cumple para cada par de estados n y n' , es

$$W_{nn'} p_{n'}^e = W_{n'n} p_n^e, \quad (1.1.70)$$

y se denomina balance detallado.⁸ Esta propiedad se da en los sistemas físicos, cerrados, aislados y finitos que cumplen ciertas restricciones.⁹ Además, parece seguir la idea intuitiva que tenemos al pensar en el estado de equilibrio de varias reacciones químicas que se dan a la vez, porque las reacciones en un sentido tienen que compensarse con las que se dan en sentido contrario para que se dé el equilibrio, y bloquear una de las reacciones no afectará

⁷La demostración de esta propiedad de la ecuación maestra se puede encontrar en [1].

⁸La prueba del balance detallado en sistemas clásicos cerrados y aislados puede verse en [1].

⁹Véase la Ref. [1], sección V.6 para mayor detalle.

al equilibrio ni la velocidad de las otras reacciones. Si se cumple el balance detallado se dará también (1.1.69), pero no a la inversa.

Cuando se cumple balance detallado estamos añadiendo una nueva condición (de cierta simetría) a las matrices \mathbb{W} , aparte de (1.1.64) y (1.1.64). Lo que queremos comprobar, a continuación, es si, en el caso que se cumpla el balance detallado, es posible expresar cualquier solución de la ecuación $p(t)$ como una combinación lineal de autovectores de \mathbb{W} . Si el balance detallado implica que \mathbb{W} es hermítica con cierta definición de producto escalar, el álgebra lineal nos dice que esta matriz puede ser diagonalizada. Escribimos la ecuación de autovalores y autovectores de \mathbb{W}

$$\mathbb{W}\Phi_\lambda = -\lambda\Phi_\lambda, \quad (1.1.71)$$

en donde Φ_λ son los autovectores asociados a los autovalores $-\lambda$, que forman una base como consecuencia de ser hermítica \mathbb{W} . A partir de los elementos de esta base se puede escribir cualquier función

$$p(t) = \sum_\lambda c_\lambda \Phi_\lambda e^{-\lambda t} = \sum_\lambda p(0) e^{-\lambda t}. \quad (1.1.72)$$

Tenemos que demostrar es que (1.1.70) implica que \mathbb{W} es hermítica. Para ello, definimos en el espacio de las funciones reales $\Phi(y)$ el producto escalar entre cualesquiera dos funciones Φ, Ψ como

$$(\Phi, \Psi) \equiv \int \frac{\Phi(y) \Psi(y)}{\Phi_0(y)} dy = (\Psi, \Phi), \quad (1.1.73)$$

en donde Φ_0 es la distribución de equilibrio, que es única. Según (1.1.70) en el caso continuo y la definición (1.1.73) podemos expresar el balance detallado como

$$(\Phi, \mathbb{W}\Psi) = (\Psi, \mathbb{W}\Phi) = (\mathbb{W}\Phi, \Psi), \quad (1.1.74)$$

que es, precisamente, la condición de simetría para una matriz \mathbb{W} .

Con todo esto, ya podemos expresar la solución de la ecuación maestra en función de la condición inicial $P(y, 0)$, teniendo en cuenta (1.1.72),

$$P(y, t) = \sum_\lambda C_\lambda(0) \Phi_\lambda(y) e^{-\lambda t} = \sum_\lambda (\Phi_\lambda(y'), P(y', 0)) \Phi_\lambda(y) e^{-\lambda t}. \quad (1.1.75)$$

Aplicando (1.1.73) resulta

$$P(y, t) = \sum_\lambda \Phi_\lambda(y) e^{-\lambda t} \int dy' \frac{\Phi_\lambda(y')}{\Phi_0(y')} P(y', 0) dy'. \quad (1.1.76)$$

De aquí obtenemos la relación de cierre

$$\sum_\lambda \frac{\Phi_\lambda(y) \Phi_\lambda(y')}{\Phi_0(y')} = \delta(y - y'). \quad (1.1.77)$$

1.2. Dinámica del modelo de Glauber

Explicamos en esta sección la dinámica introducida por Glauber [3] en el Modelo de Ising. Esta será la base teórica de la que partimos en el sistema de espines para el que vamos a analizar su respuesta no lineal.

1.2.1. El Modelo de Ising

El modelo de Ising propone un sistema compuesto por N partículas interactuantes con sus vecinas próximas y en contacto (todas) con un foco térmico a la temperatura T . Estas partículas, colocadas en línea una al lado de la otra sucesivamente,¹⁰ vienen caracterizadas por el espín (σ_j ; $j = 1, \dots, N$), que puede tomar los valores $+1$ ó -1 . Para una representación gráfica de esta variable podemos asignar una flecha apuntando hacia arriba (\uparrow) a $\sigma_j = +1$ y viceversa (\downarrow a $\sigma_j = -1$).

Asumiremos la siguiente forma para el hamiltoniano del modelo

$$H(\boldsymbol{\sigma}) = -J \sum_l \sigma_l \sigma_{l+1}, \quad (1.2.1)$$

en donde J es una constante que proporciona la energía de interacción entre espines. Con esta expresión, estamos admitiendo que sólo hay interacción entre primeros vecinos. Suponemos, además, unas condiciones de contorno periódicas,

$$\sigma_{k+N} = \sigma_k, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (1.2.2)$$

con lo cual, los primeros vecinos del espín 1 son el N y el 2, y los primeros vecinos del espín N son el $N-1$ y el 1. En equilibrio, la distribución de probabilidades de las configuraciones de espines es [4]

$$\rho(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{e^{-\beta H(\boldsymbol{\sigma})}}{Z} \propto \exp\left(-\frac{H}{k_B T}\right), \quad (1.2.3)$$

en donde Z es la función de partición,

$$Z = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \exp\left(\beta J \sum_l \sigma_l \sigma_{l+1}\right). \quad (1.2.4)$$

Las expresiones (1.2.1), (1.2.3) y (1.2.4) describen el estado de equilibrio de los N espines de nuestro sistema; recordemos que $\rho(\boldsymbol{\sigma})$ no depende del tiempo en la situación de equilibrio.

Podemos simplificar el sumatorio de la función de partición de nuestro sistema (1.2.4), lo que es un cálculo estándar de la Física Estadística [4].¹¹ Tomando el logaritmo de Z

¹⁰En todo el trabajo estudiaremos el caso monodimensional del Modelo de Ising, debido a que refleja muchas propiedades físicas interesantes y presenta una complejidad considerablemente menor al multidimensional.

¹¹Está resuelto en el problema 9.3 de la primera edición considerando que el sistema no tiene condiciones de contorno periódicas, y por lo tanto los espines 1 y N no interactúan entre sí. La única diferencia entre

queda

$$\ln Z = N \{ \ln 2 + \ln [\cosh (\beta J)] \}, \quad (1.2.5)$$

una expresión que nos permite obtener la energía de equilibrio promedio [4],

$$\bar{E}_{eq} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -NJ \tanh (\beta J). \quad (1.2.6)$$

Como el nuestro es un sistema estadístico, el valor de su energía en el estado de equilibrio presenta fluctuaciones respecto a su valor promedio (1.2.6). Estas fluctuaciones vienen cuantizadas por la varianza [4],

$$\Sigma^2 \equiv \overline{(E - \bar{E}_{eq})^2} = -\frac{\partial \bar{E}_{eq}}{\partial \beta} \implies \Sigma^2 = \frac{NJ^2}{\cosh^2 (\beta J)}, \quad (1.2.7)$$

la cual nos determina el calor específico de nuestro sistema,

$$C_V \equiv \frac{\partial \bar{E}_{eq}}{\partial T} = \frac{\Sigma^2}{k_B T^2}. \quad (1.2.8)$$

1.2.2. Ecuaciones de la dinámica de Glauber

Lo que propone la dinámica de Glauber es una expresión sencilla para la probabilidad por unidad de tiempo de que el espín j -ésimo cambie de σ_j a $-\sigma_j$, estando el resto fijos,

$$w_j(\sigma_j) = \frac{1}{2}\alpha \left[1 - \frac{1}{2}\gamma\sigma_j(\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) \right], \quad (1.2.9)$$

en donde α es una constante con dimensiones de frecuencia y

$$\gamma = \tanh \left(\frac{2J}{k_B T} \right). \quad (1.2.10)$$

La expresión (1.2.9) puede tomar 3 formas distintas en función de las orientaciones relativas de los espines j , $j+1$ y $j-1$. Si los espines contiguos al j -ésimo son paralelos entre sí y paralelos respecto al j -ésimo,

$$w_j^{(1)}(\sigma_j) = \frac{1}{2}\alpha(1 - \gamma). \quad (1.2.11)$$

Si los espines contiguos al j -ésimo son antiparalelos entre sí,

$$w_j^{(2)}(\sigma_j) = \frac{1}{2}\alpha. \quad (1.2.12)$$

el hamiltoniano de este sistema y el del nuestro es que no aparece el término $-J\sigma_N\sigma_1$, con lo cual su función de partición queda $Z = 2^N \cosh^{N-1}(\beta J)$.

Si los espines contiguos al j -ésimo son paralelos entre sí y antiparalelos respecto al j -ésimo,

$$w_j^{(3)}(\sigma_j) = \frac{1}{2}\alpha(1 + \gamma). \quad (1.2.13)$$

Siguiendo la definición de w_j , podemos construir la ecuación que determina la evolución de la probabilidad $p(\boldsymbol{\sigma}, t)$ como función del tiempo: la ecuación maestra¹²

$$\frac{d}{dt}p(\sigma_1, \dots, \sigma_N, t) = - \left[\sum_j w_j(\sigma_j) \right] p(\sigma_1, \dots, \sigma_N, t) + \sum_j w_j(-\sigma_j) p(\sigma_1, \dots, -\sigma_j, \dots, \sigma_N, t). \quad (1.2.14)$$

Esta ecuación rige la dinámica (estocástica) de los espines de nuestro sistema; tanto para el estado transitorio de no equilibrio como para el estado final de equilibrio termodinámico.

No es posible encontrar una solución analítica en forma cerrada de la ecuación maestra (1.2.14). Tal solución nos proporcionaría la información más completa posible del sistema, ya que $p(\boldsymbol{\sigma}, t)$ permite obtener el valor medio de una función arbitraria de los espines. No obstante, hay otras magnitudes derivadas de $p(\boldsymbol{\sigma}, t)$ que simplifican la resolución de (1.2.14) y nos aportan información física importante sobre el sistema, aunque no tan completa como $p(\boldsymbol{\sigma}, t)$. La primera de estas magnitudes es el valor esperado de los espines

$$q_j(t) = \langle \sigma_j(t) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_j p(\sigma_1, \dots, \sigma_N, t) \quad (1.2.15)$$

y la segunda es el valor esperado del producto de los espines j, k -ésimos (funciones de correlación espacial)

$$r_{j,k}(t) = \langle \sigma_j(t) \sigma_k(t) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_j \sigma_k p(\sigma_1, \dots, \sigma_N, t). \quad (1.2.16)$$

Multiplicando (1.2.14) por σ_k , sumando sobre todos los posibles valores de los espines y usando (1.2.9) llegamos a las ecuaciones diferenciales acopladas para q_k ,

$$\frac{d}{d(\alpha t)} q_k(t) = -q_k(t) + \frac{1}{2}\gamma [q_{k-1}(t) + q_{k+1}(t)]. \quad (1.2.17)$$

Análogamente, multiplicar (1.2.14) por $\sigma_j \sigma_k$, sumar sobre las variables de espín y emplear (1.2.9) nos lleva a las ecuaciones diferenciales acopladas para $r_{j,k}$,

$$\frac{d}{d(\alpha t)} r_{j,k}(t) = -2r_{j,k}(t) + \frac{1}{2}\gamma [r_{j,k-1}(t) + r_{j,k+1}(t) + r_{j-1,k}(t) + r_{j+1,k}(t)]. \quad (1.2.18)$$

1.2.3. Resolución de las ecuaciones de la dinámica de Glauber

Las soluciones de las ecuaciones (1.2.17) y (1.2.18) presentan características esencialmente diferentes dependiendo de que el número de espines que tenga nuestro sistema sea

¹²Véase la discusión teórica en 1.1.4.

finito o infinito. Comenzamos estudiando las soluciones de (1.2.17) para infinitos espines (anillo infinito). Para ello, definimos la función generatriz

$$F(\lambda, t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \lambda^k q_k(t). \quad (1.2.19)$$

Utilizando (1.2.17), deducimos la ecuación diferencial para $F(\lambda, t)$,

$$\frac{d}{d(\alpha t)} F(\lambda, t) = -F(\lambda, t) + \frac{1}{2} \gamma (\lambda + \lambda^{-1}) F(\lambda, t), \quad (1.2.20)$$

cuya solución es

$$F(\lambda, t) = F(\lambda, 0) \exp \left[-\alpha t + \frac{1}{2} \gamma (\lambda + \lambda^{-1}) \alpha t \right]. \quad (1.2.21)$$

La expresión anterior puede expresarse en términos de la función modificada de Bessel¹³ $I_n(x)$. Si, además, consideramos como condiciones iniciales para los valores esperados de espín $q_k(0) = \delta_{k,0}$, entonces tenemos la expresión cerrada para la función generatriz

$$F(\lambda, t) = e^{-\alpha t} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \lambda^k I_k(\gamma \alpha t). \quad (1.2.22)$$

Ahora entendemos la idoneidad en la elección de (1.2.19) como función generatriz, porque si lo comparamos con (1.2.22) tenemos

$$q_k(t) = e^{-\alpha t} I_k(\gamma \alpha t), \quad (1.2.23)$$

que es la solución para el valor esperado del espín k -ésimo en un anillo infinito cuando, inicialmente, su valor era 1 y 0 para el resto de valores esperados ($q_k(0) = \delta_{k,0}$). La solución general para el conjunto de condiciones iniciales arbitrarias $q_k(0)$ es, por superposición lineal,

$$q_k(t) = e^{-\alpha t} \sum_{m=-\infty}^{\infty} q_m(0) I_{k-m}(\gamma \alpha t). \quad (1.2.24)$$

Planteamos una solución distinta cuando el número de espines de nuestro sistema es N finito (anillo finito). En este caso,

$$q_k(t) = A \zeta^k e^{-\nu t}, \quad (1.2.25)$$

siendo A una constante. Pero nuestra solución (1.2.25) debe ser periódica en k con periodo N para que se ajuste a las condiciones de anillo finito, es decir, $\zeta^0 = \zeta^N = 1$, lo que impone

¹³Véase [5] para mayor información sobre estas funciones.

que las raíces de ζ sean

$$\zeta_m = \exp\left(\frac{2\pi im}{N}\right), \quad m = 0, 1, \dots, N-1. \quad (1.2.26)$$

Sustituyendo (1.2.25) en la ecuación (1.2.17) y exigiendo la condición (1.2.26), los autovalores ν_m asociados a ζ_m nos quedan

$$\nu_m = \alpha \left[1 - \gamma \cos\left(\frac{2\pi m}{N}\right) \right]. \quad (1.2.27)$$

De esta manera, tenemos ya una base ortogonal para nuestro anillo formada por las funciones $q_k^{(m)} = \exp\left(\frac{2\pi imk}{N}\right)$. Con lo cual, cualquier $q_k(t)$ de nuestro anillo deberá poder expresarse (recordemos (1.2.25)) como combinación lineal de los elementos de esta base

$$q_k(t) = \sum_{m=0}^{N-1} A_m \exp\left(\frac{2\pi imk}{N} - \nu_m t\right). \quad (1.2.28)$$

Las necesarias relaciones de ortogonalidad entre los elementos de nuestra base nos permiten encontrar una expresión para las constantes A_m , lo que nos lleva a la solución buscada

$$q_k(t) = \frac{1}{N} \sum_{l,m} q_l(0) \exp\left[\frac{2\pi im}{N}(k-l) - \nu_m t\right] = e^{-\alpha t} \sum_{l=1}^N \sum_{j=-\infty}^{\infty} q_l(0) I_{k-l+jN}(\gamma\alpha t), \quad (1.2.29)$$

que no es más que (1.2.24) llevando a cabo la suma en m explícitamente. Esto es consistente con el hecho de que resolver el anillo finito es equivalente a resolver el infinito introduciendo valores esperados de espín iniciales periódicos de período N .

Procedemos, a continuación, a estudiar el caso en el que un espín está fijo en el tiempo. Esto nos ayudará a encontrar la solución para las correlaciones de espín $r_{k,k+m}$, una magnitud clave en nuestro estudio de la respuesta no lineal. Si fijamos el espín $\sigma_0 = 1$, el sistema de ecuaciones (1.2.17) es válido para $k \neq 0$. En particular, para $k = 1$, nos queda

$$\frac{d}{d(\alpha t)} q_1(t) = -q_1(t) + \frac{1}{2}\gamma[1 + q_2(t)]. \quad (1.2.30)$$

El término constante en el miembro de la derecha de (1.2.30) convierte a nuestro sistema de ecuaciones diferenciales en inhomogéneo. Busquemos primero una solución particular del mismo. Para ello, pensemos en el estado de equilibrio de nuestro sistema, es decir, cuando $\frac{d}{d(\alpha t)} q_k(t) = 0$. En esta situación, nuestro sistema de ecuaciones diferenciales se simplifica quedando

$$q_k = \frac{1}{2}\gamma(q_{k-1} + q_{k+1}), \quad k \neq 0; \quad q_0 = 1. \quad (1.2.31)$$

Proponemos la solución¹⁴

$$q_k = \xi^{|k|} \quad (1.2.32)$$

al sistema de ecuaciones en diferencias acopladas (1.2.31). Esto obliga a ξ a cumplir¹⁵

$$\xi^2 - 2\gamma^{-1}\xi + 1 = 0 \implies \xi = \gamma^{-1} \left[1 - (1 - \gamma^2)^{1/2} \right], \quad (1.2.33)$$

lo que, según (1.2.10) concluye con la igualdad

$$\xi = \tanh \left(\frac{J}{k_B T} \right), \quad (1.2.34)$$

con lo que podemos reescribir la energía de equilibrio promedio (1.2.6),

$$\bar{E}_{eq} = -NJ\xi. \quad (1.2.35)$$

Una vez encontrada la solución particular de nuestro sistema de ecuaciones diferenciales inhomogéneo, nos queda encontrar la solución general del sistema homogéneo para hallar la solución total como suma de ambas. Pero esta solución ya la tenemos: es (1.2.24), con algunos matices. La inhomogeneidad en el sistema de ecuaciones (1.2.17) es introducida cuando fijamos $\sigma_0 = 1 \implies q_0 = 1$. Por lo tanto, la ecuación homogénea la obtenemos anulando la inhomogeneidad, es decir, imponiendo que $q_0(t) = 0$. Esta condición divide nuestras soluciones en k positivos y negativos (conjuntos de soluciones que no se influyen entre sí) con la condición $q_0(t) = 0$, una situación idónea para utilizar el método de las imágenes: a partir de la solución del problema seminfinito (para $k > 0$ y nulo en $k = 0$), lo extendemos al problema infinito imponiendo que la función sea impar. En nuestro problema: suponemos unas condiciones iniciales η_k para $k > 0$ y las opuestas para k negativos ($q_{-k}(0) = -\eta_k$; $k > 0$) y $q_0(0) = 0$. El conjunto de condiciones iniciales de la solución homogénea se obtendrán, por tanto, restando la solución inhomogénea a las condiciones iniciales totales, es decir, $q_k(0) - \xi^k$. Y así, el valor esperado del espín k -ésimo será la suma de la solución particular inhomogénea más la general de la homogénea,

$$q_k(t) = \xi^k + e^{-\alpha t} \sum_{l=1}^{\infty} [q_l(0) - \xi^l] [I_{k-l}(\gamma\alpha t) - I_{k+l}(\gamma\alpha t)], \quad k > 0, \quad (1.2.36)$$

teniendo una solución análoga para $k < 0$.

Si queremos calcular, ahora, la solución de (1.2.18), es relevante comentar que el estado inicial de nuestro sistema presenta, a menudo, invariancia traslacional.¹⁶ De esta manera, $r_{j,k}(0)$ solo depende de la diferencia $j - k$ y podemos escribir las funciones de correlación,

$$C_m = r_{k,k+m}. \quad (1.2.37)$$

¹⁴Véase [5] para más información sobre ecuaciones en diferencias.

¹⁵Nos quedamos con la solución de la ecuación de 2º grado cuyo valor absoluto es menor que 1, porque si no, q_k divergiría para un anillo infinito.

¹⁶Este no es el caso más general, pero nos será suficiente para el objetivo de nuestro trabajo. Para más información, véase la Ref. [3].

El sistema de ecuaciones (1.2.18) para (1.2.37) se convierte en

$$\frac{d}{d(\alpha t)} C_m(t) = -2C_m(t) + \gamma [C_{m-1}(t) + C_{m+1}(t)], \quad m \neq 0; C_0(t) = 1, \quad (1.2.38)$$

que no es más que el que hemos resuelto en el caso del espín fijo (exceptuando un factor multiplicativo). Por lo tanto, de (1.2.36) se sigue que

$$C_m(t) = \xi^m + e^{-2\alpha t} \sum_{l=1}^{\infty} [C_l(0) - \xi^l] [I_{m-l}(2\gamma\alpha t) - I_{m+l}(2\gamma\alpha t)], \quad (1.2.39)$$

con

$$C_l(0) = \xi_0^l = \left[\tanh \left(\frac{J}{k_B T_0} \right) \right]^l. \quad (1.2.40)$$

Hemos llegado, al fin, a la expresión que necesitamos para el estudio de la respuesta de nuestro sistema. Esto es así porque la respuesta del sistema viene caracterizada por su valor de la energía en función del tiempo, que es, teniendo en cuenta la expresión de su hamiltoniano (1.2.1) y la invariancia traslacional,

$$\begin{aligned} \bar{E}(t) &= -NJ \langle \sigma_j(t) \sigma_{j+1}(t) \rangle = -NJC_1(t) \\ &= \bar{E}_{eq} + NJe^{-2\alpha t} \sum_{l=1}^{\infty} [C_l(0) - \xi^l] [I_{1-l}(2\gamma\alpha t) - I_{1+l}(2\gamma\alpha t)]. \end{aligned} \quad (1.2.41)$$

Es fácil comprobar que en el límite $t \rightarrow \infty$, la energía promedio de nuestro sistema $\bar{E}(t)$ relaja a su valor de equilibrio promedio \bar{E}_{eq} , que es un comportamiento que observaremos en las simulaciones que hemos realizado y que exponemos en el Capítulo 3.

Capítulo 2

Relajación de la energía en el régimen no lineal

La relajación de la energía en el modelo de Ising con dinámica de Glauber se ha estudiado en distintas situaciones físicas de interés, tanto en el régimen de respuesta lineal cuando los saltos de temperatura son infinitesimales [6] como en el régimen no lineal cuando los saltos de temperatura son de tamaño finito [7]. En este capítulo nosotros nos centraremos en este último caso.

2.1. Integración de la jerarquía de ecuaciones

Empezaremos por resolver, nuevamente, la jerarquía de ecuaciones (1.2.39), siguiendo un planteamiento distinto. Es lógico preguntarse por qué hacemos esto, si ya conocemos su solución (1.2.41). Hay dos motivos, principalmente. El primero es que alcanzamos un mayor grado de comprensión del problema cuando lo abordamos desde distintas perspectivas. El segundo es que la expresión (1.2.41) conlleva un sumatorio infinito, algo que no es muy manejable desde el punto de vista numérico, y queremos encontrar una expresión análoga que sea más conveniente para su representación numérica.

Recordamos la jerarquía de ecuaciones que tenemos que resolver, a partir de (1.2.38),

$$\dot{C}_n = -2\alpha C_n + \alpha\gamma (C_{n-1} + C_{n+1}), \quad n \neq 0. \quad (2.1.1)$$

Las definiciones (1.2.16) y (1.2.37) nos permiten determinar las condiciones de contorno que debe cumplir (2.1.1), que son

$$C_0 = 1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} C_n = 0. \quad (2.1.2)$$

Intuitivamente, estas condiciones son razonables para $n \rightarrow \infty$ porque cuanto más alejado esté un espín de otro, tanto menor será su correlación, hasta llegar a la completa desco-relación para espines infinitamente alejados. Para $n = 0$ es exacto, puesto que $\sigma^2 = 1$.

Aprovechamos la linealidad de la jerarquía de ecuaciones para separar las correlaciones

en dos contribuciones,

$$C_n(t) \equiv C_n^{eq} + \Delta_n(t), \quad (2.1.3)$$

en donde C_n^{eq} hace referencia a la solución de equilibrio¹ de (2.1.1) y Δ_n a la solución del estado transitorio de no equilibrio. Comencemos por las ecuaciones de equilibrio

$$0 = -2\alpha C_n^{eq} + \alpha\gamma (C_{n-1}^{eq} + C_{n+1}^{eq}), \quad (2.1.4)$$

que representa un sistema de ecuaciones en diferencias acopladas entre sí. Proponiendo como solución² $C_n^{eq} = x^n$ llegamos, desde (2.1.4), a

$$0 = -2x^n + \gamma (x^{n-1} + x^{n+1}). \quad (2.1.5)$$

Si ahora multiplicamos (2.1.5) por x^{-n+1} entonces nos queda la ecuación de segundo grado

$$0 = x^2 - \frac{2}{\gamma}x + 1 = (x - x_+)(x - x_-) = x^2 - (x_+ + x_-)x + x_+x_-, \quad (2.1.6)$$

con soluciones

$$x_{\pm} = \frac{1}{\gamma} \pm \sqrt{\frac{1}{\gamma^2} - 1}. \quad (2.1.7)$$

Por lo tanto, la solución de equilibrio será una combinación lineal de las soluciones (2.1.7)

$$C_n^{eq} = A_+x_+^n + A_-x_-^n, \quad (2.1.8)$$

que debe cumplir sus condiciones de contorno correspondientes.³ Precisamente, son estas condiciones de contorno las que nos permiten determinar los valores que toman las constantes A_+ y A_- . Por una parte, si recordamos la definición de γ (1.2.10) sabemos que $0 < \gamma < 1$ y, por lo tanto, $x_+ > 1$. Como (2.1.6) exige que $x_+x_- = 1$, entonces $x_- < 1$. De esta manera,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} C_n^{eq} = 0 \implies A_+ = 0. \quad (2.1.9)$$

La otra condición de contorno nos permite determinar A_- , que es

$$C_0^{eq} = 1 = A_-, \quad (2.1.10)$$

lo que nos lleva a obtener la correlación de equilibrio que buscábamos:

$$C_n^{eq} = x_-^n = \xi^n = \left(-\frac{\overline{E}_{eq}}{NJ} \right)^n, \quad (2.1.11)$$

igualdad que se demuestra fácilmente utilizando identidades trigonométricas. Pasemos al

¹Es decir, la solución en la que las funciones de correlación son independientes del tiempo: $dC_n^{eq}/dt = 0$.

²Para más información sobre ecuaciones en diferencias, véase la Ref. [5].

³Asumimos las condiciones de contorno del problema total para las ecuaciones de equilibrio, es decir, $C_0^{eq} = 1$; $\lim_{n \rightarrow \infty} C_n^{eq} = 0$. De esta manera, teniendo en cuenta (2.1.2), dejamos las condiciones de contorno homogéneas para las ecuaciones de no equilibrio.

	Mecánica Cuántica	Ising+Glauber
Ecuación	$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t)\rangle = H \psi(t)\rangle$	$\frac{d}{dt} C_n = -2\alpha C_n + \alpha\gamma (C_{n-1} + C_{n+1})$
Base	$\{u_j(\mathbf{r})\}$ ó $\{ j\rangle\}$	$\{\phi_n(q)\}$
Relación de cierre	$\sum_j u_j^*(\mathbf{r}') u_j(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$	$\int_0^\pi dq \phi_n(q) \phi_m(q) = \delta_{nm}$
Ortonormalidad	$\int d\mathbf{r} u_j^*(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}) = \delta_{jk}$	$\sum_{n=0}^\infty \phi_n(q) \phi_n(q') = \delta(q - q')$
Soluciones	$ \psi(t)\rangle = \sum_j c_j j\rangle e^{-i \frac{E_j}{\hbar} t}$	$C_n(t) = \xi^n + \int_0^\pi dq c(q) \phi_n(q) e^{-\lambda(q)\alpha t}$
Proyecciones	$c_j = \int d\mathbf{r} u_j^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, 0)$	$c(q) = \sum_{n=0}^\infty \Delta_n(0) \phi_n(q)$

Tabla 2.1: Comparativa del problema cuántico con el que tratamos en este trabajo. Hemos usado la notación de Dirac o no en cada caso para que la comparación sea lo más ilustrativa posible. Destacamos que, mientras la base cuántica está compuesta por un conjunto discreto de funciones de una variable continua espacial, la base de Ising+Glauber es un rango continuo de funciones de una variable discreta de espín. De ahí que los sumatorios e integrales y las deltas de Dirac y de Kronecker estén intercambiadas entre sí.

problema de no equilibrio que, según (2.1.1) y (2.1.3), nos queda

$$\dot{\Delta}_n = -2\alpha\Delta_n + \alpha\gamma(\Delta_{n-1} + \Delta_{n+1}), \quad (2.1.12)$$

con condiciones de contorno homogéneas

$$\Delta_0 = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \Delta_n = 0. \quad (2.1.13)$$

Podemos definir el tiempo adimensional,

$$t^* \equiv \alpha t, \quad (2.1.14)$$

y expresar la ecuación (2.1.12) en función de t^* ,

$$\frac{d\Delta_n}{dt^*} = -2\Delta_n + \gamma(\Delta_{n-1} + \Delta_{n+1}), \quad \Delta_0 = \Delta_\infty = 0. \quad (2.1.15)$$

Resolvemos esta ecuación por un método de autovalores y autovectores. Para ello, comenzamos proponiendo la solución,

$$\Delta_n = \phi_n e^{-\lambda t^*}, \quad (2.1.16)$$

que, sustituyendo en (2.1.15), queda

$$-\lambda\phi_n = -2\phi_n + \gamma(\phi_{n-1} + \phi_{n+1}). \quad (2.1.17)$$

Reordenando esta ecuación y teniendo en cuentas las condiciones de contorno en (2.1.15) llegamos a⁴

$$\phi_{n+1} - \frac{2-\lambda}{\gamma}\phi_n + \phi_{n-1} = 0, \quad \phi_0 = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n < \infty. \quad (2.1.18)$$

Hemos llegado a una ecuación similar al caso de equilibrio (2.1.5), con lo que la solución será

$$\phi_n = A_1 x_1^n + A_2 x_2^n, \quad (2.1.19)$$

lo que, de manera análoga a (2.1.6) nos lleva a

$$x^2 - \frac{2-\lambda}{\gamma}x + 1 = x^2 - (x_1 + x_2)x + x_1 x_2 = 0. \quad (2.1.20)$$

Sin embargo, las condiciones de contorno que imperan ahora nos llevarán a unas soluciones distintas a las de equilibrio. Apliquémoslas a nuestra solución (2.1.18) suponiendo, primero, que x_1 y x_2 son reales. De (2.1.19) se deduce que $x_1 > 1$ y $x_2 < 1$, con lo que tenemos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n < \infty \implies A_1 = 0, \quad (2.1.21)$$

lo que lleva, entonces, a

$$\phi_0 = 0 = A_2 \implies \phi_n = 0, \quad (2.1.22)$$

es decir, no existen autofunciones si x_1 y x_2 son reales. Supongamos, entonces, que x_1 y x_2 son complejos. De (2.1.20) se infieren sus expresiones

$$\begin{cases} x_1 x_2 = 1 \rightarrow x_1 = e^{iq}, x_2 = e^{-iq}, & q \in [0, \pi]. \\ x_1 + x_2 = \frac{2-\lambda}{\gamma} \rightarrow 2 \cos q = \frac{2-\lambda}{\gamma} \implies \lambda(q) = 2(1 - \gamma \cos q) > 0, \end{cases} \quad (2.1.23)$$

lo que nos lleva a reescribir (2.1.19) como

$$\phi_n = A_1 e^{inq} + A_2 e^{-inq} = B_1 \cos(nq) + B_2 \sin(nq). \quad (2.1.24)$$

Impongamos las condiciones de contorno de no equilibrio. En este caso, ϕ_n ya cumple que no diverge nunca, nos queda la otra condición

$$\phi_0 = 0 = B_1 \implies \phi_n = B_2 \sin(nq). \quad (2.1.25)$$

Por lo tanto, (2.1.23) y (2.1.25) nos llevan a escribir nuestra solución de no equilibrio como una combinación lineal de la solución que propusimos (2.1.16) para cada uno de los posibles valores de λ (autovalores)

$$\Delta_n(t) = \sum_{\lambda} C_{\lambda} \phi_{\lambda,n} e^{-\lambda \alpha t}, \quad (2.1.26)$$

con el matiz de que, en este problema, los autovalores toman valores continuos desde

⁴No imponemos la condición $\phi_{\infty} = 0$ porque, según demostraremos a continuación, escribiremos Δ_n como un sumatorio en λ de $\phi_n e^{-\lambda t}$ y lo que se tiene que cumplir es $\Delta_{\infty} = 0$.

$\lambda_{mín} = 2(1 - \gamma)$ hasta $\lambda_{máx} = 2(1 + \gamma)$, por lo que aparece la integral

$$\Delta_n(t) = \int_0^\pi dq C(q) \phi_n(q) e^{-\lambda(q)\alpha t}. \quad (2.1.27)$$

Queremos determinar $C(q)$ y B_2 . Para ello, hacemos uso de la relación de cierre, que ha de cumplirse en el espacio de Hilbert formado por la base ortonormal continua en q de nuestro problema $\{\phi_n(q)\}$. Lo comprobamos

$$\begin{aligned} \int_0^\pi dq \phi_n(q) \phi_m(q) &= B_2^2 \int_0^\pi dq \text{sen}(nq) \text{sen}(mq) = B_2^2 \frac{\pi}{2} \delta_{nm} \implies B_2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \\ \implies \phi_n &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \text{sen}(nq). \end{aligned} \quad (2.1.28)$$

Determinar $C(q)$ es posible teniendo en cuenta la ortogonalidad de los elementos de la base $\{\phi_n(q)\}$ (véase la Tabla 2.1). Entonces,

$$C(q) = \int_0^\pi dq' C(q') \sum_{m=0}^{\infty} \phi_m(q) \phi_m(q') = \sum_{m=0}^{\infty} \Delta_m(0) \phi_m(q). \quad (2.1.29)$$

Así, hemos resuelto (2.1.1), siendo su solución

$$C_n(t) = \xi^n + \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dq \left(\sum_{m=0}^{\infty} \Delta_m(0) \text{sen}(mq) \right) \text{sen}(nq) e^{-2\alpha(1-\gamma \cos q)t}. \quad (2.1.30)$$

2.2. Respuesta no lineal

La expresión (2.1.30) determina completamente la solución de (2.1.1) siempre que conozcamos todos los términos de no equilibrio de la función de correlación en el instante inicial ($\Delta_n(0)$, $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$). Dado que el sistema que estamos estudiando en este trabajo posee un único parámetro externo que pueda controlarse,⁵ que es la temperatura del foco térmico con el que está en contacto, si el sistema se encuentra en equilibrio, lo único que podrá sacarlo de él es un cambio de temperatura de dicho baño térmico. Para cambios de temperatura suficientemente pequeños, podemos aproximar

$$\Delta_n(0) = C_n^{eq}(T + \Delta T) - C_n^{eq}(T) \simeq \frac{dC_n^{eq}}{dT} \Delta T = n \xi^{n-1} \frac{d\xi}{dT} \Delta T = \text{cte } n \xi^{n-1}, \quad (2.2.1)$$

lo que denominamos respuesta lineal.⁶ En nuestro trabajo nos queremos centrar en la situación en la que la aproximación (2.2.1) ya no pueda considerarse válida; nuestro sistema estaba en equilibrio a una temperatura T_0 antes de $t = 0$, y justo en ese instante, se

⁵Véase la Ref. [3] para un estudio del comportamiento de nuestro sistema ante la presencia de un campo magnético externo.

⁶Para un estudio detallado de la respuesta lineal de nuestro sistema véase la Ref. [6].

produce un cambio brusco a la temperatura T , de manera que

$$\Delta_n(0) = \xi_0^n - \xi^n, \quad (2.2.2)$$

que es lo que se conoce como respuesta no lineal.

Como comentamos al final de la sección 1.2.3, la expresión de la energía promedio de nuestro sistema en función del tiempo es la función que caracteriza la respuesta de nuestro sistema. De esta manera, recordando (1.2.41) y usando nuestro resultado (2.1.30) para $n = 1$ junto con (2.2.2) podemos encontrar la respuesta de nuestro sistema. Antes de escribirla, simplificamos la expresión de $C(q)$ para la respuesta no lineal que estamos considerando,

$$\begin{aligned} C(q) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_n (\xi_0^n - \xi^n) \operatorname{sen}(nq) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_n (\xi_0^n - \xi^n) \frac{e^{inq} - e^{-inq}}{2i} \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2i} \sum_{n=1}^{\infty} [(\xi_0 e^{iq})^n - (\xi_0 e^{-iq})^n - (\xi e^{iq})^n + (\xi e^{-iq})^n], \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

la cual, recordando la definición de serie geométrica, se simplifica a

$$C(q) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2i} \left[\frac{1}{1 - \xi_0 e^{iq}} - \frac{1}{1 - \xi_0 e^{-iq}} - \frac{1}{1 - \xi e^{iq}} + \frac{1}{1 - \xi e^{-iq}} \right]. \quad (2.2.4)$$

Si cogemos los factores comunes adecuados llegamos a

$$C(q) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{sen} q \left[\frac{\xi_0}{1 - 2\xi_0 \cos q + \xi_0^2} - \frac{\xi}{1 - 2\xi \cos q + \xi^2} \right], \quad (2.2.5)$$

con lo cual, la energía analítica promedio en función del tiempo de nuestro sistema queda, recordando (1.2.41) y usando nuestro resultado (2.1.30) para $n = 1$ junto con (2.2.2) y (1.2.35),

$$\bar{E}(t) = \bar{E}_{eq} - NJ \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dq \operatorname{sen}^2 q \left[\frac{\xi_0}{1 - 2\xi_0 \cos q + \xi_0^2} - \frac{\xi}{1 - 2\xi \cos q + \xi^2} \right] e^{-2\alpha(1-\gamma \cos q)t}. \quad (2.2.6)$$

Si queremos tener una función que nos indique cuánto se aleja la energía de nuestro sistema del equilibrio podemos definir la función respuesta,

$$\varphi(t) = \frac{\bar{E}(t) - \bar{E}(\infty)}{\bar{E}(0) - \bar{E}(\infty)} = \frac{-NJC_1(t) + NJC_1^{eq}}{-NJC_1(0) + NJC_1^{eq}} = \frac{-C_1(t) + C_1^{eq}}{-C_1(0) + C_1^{eq}} = \frac{\Delta_1(t)}{\Delta_1(0)}, \quad (2.2.7)$$

en donde hemos tenido en cuenta (1.2.41) y (2.2.2). Siempre que el estado de equilibrio inicial de nuestro sistema sea distinto del final, es decir, $C_1(0) \neq C_1^{eq}$, la función respuesta valdrá 1 en el estado inicial y tanto más próximo a 0 será su valor cuanto más cerca del

estado de equilibrio final se encuentre el sistema, siendo 0 para $t \rightarrow \infty$. Para la respuesta no lineal, teniendo en cuenta (2.2.6) y (2.2.7), nos queda la función respuesta no lineal,

$$\varphi^{(n.l.)}(t) = \frac{2}{\pi(\xi_0 - \xi)} \int_0^\pi dq \operatorname{sen}^2 q \left[\frac{\xi_0}{1 - 2\xi_0 \cos q + \xi_0^2} - \frac{\xi}{1 - 2\xi \cos q + \xi^2} \right] e^{-2\alpha(1-\gamma \cos q)t}. \quad (2.2.8)$$

2.3. Análisis asintótico de la respuesta no lineal

Si bien ya conocemos la expresión analítica exacta de la función respuesta de nuestro sistema para el caso no lineal (2.2.8), podemos obtener una expresión analítica más sencilla que sea equivalente a esta para valores de tiempo suficientemente grandes, es decir,

$$\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t) \sim \varphi^{(n.l.)}(t), \quad t \rightarrow \infty \iff \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t)}{\varphi^{(n.l.)}(t)} = 1, \quad (2.3.1)$$

lo que quiere decir que $\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t)$ y $\varphi^{(n.l.)}(t)$ son equivalentes asintóticamente [5]. Para encontrar dicha expresión haremos uso del cálculo asintótico. Comenzamos con un cambio de variable en la integral de (2.2.8)

$$\left. \begin{array}{l} \lambda = 2\alpha(1 - \gamma \cos q) \\ d\lambda = 2\alpha\gamma \operatorname{sen} q dq \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} q = 0 \implies \lambda_1 = 2\alpha(1 - \gamma) \\ q = \pi \implies \lambda_2 = 2\alpha(1 + \gamma) \end{array} \right\}, \quad 0 < \gamma < 1 \implies \lambda_2 > \lambda_1, \quad (2.3.2)$$

en donde λ_1 y λ_2 son las velocidades mínima y máxima de relajación, respectivamente. Este cambio de variable nos permite expresar el integrando en función de $\lambda - \lambda_1$, ya que

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos q = 1 - \frac{\lambda - \lambda_1}{2\alpha\gamma} \\ \operatorname{sen} q = \sqrt{\frac{\lambda - \lambda_1}{\alpha\gamma} \left(1 - \frac{\lambda - \lambda_1}{4\alpha\gamma} \right)} \\ \xi^2 - 2\xi \cos q + 1 = (\xi - 1)^2 + \xi \frac{\lambda - \lambda_1}{\alpha\gamma} \end{array} \right., \quad (2.3.3)$$

con lo cual, (2.2.8) queda

$$\begin{aligned} \varphi^{(n.l.)}(t) = & \frac{e^{-\lambda_1 t}}{\pi(\xi_0 - \xi)(\alpha\gamma)^{3/2}} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda (\lambda - \lambda_1)^{1/2} \sqrt{1 - \frac{\lambda - \lambda_1}{4\alpha\gamma}} e^{-(\lambda - \lambda_1)t} \\ & \times \left[\frac{\xi_0}{(\xi_0 - 1)^2} \frac{1}{1 + \frac{\xi_0}{(\xi_0 - 1)^2} \frac{\lambda - \lambda_1}{\alpha\gamma}} - \frac{\xi}{(\xi - 1)^2} \frac{1}{1 + \frac{\xi}{(\xi - 1)^2} \frac{\lambda - \lambda_1}{\alpha\gamma}} \right]. \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

En lo que hemos hecho hasta ahora no hay ningún tipo de cálculo asintótico, solo un cambio de variable que nos será conveniente para lo que explicamos a continuación. Siguiendo el método de Laplace [5], vamos a tomar el límite en el que $t \rightarrow \infty$. En esta situación, como nuestro integrando en (2.3.4) contiene una exponencial de t , solamente los valores que hacen máxima a la función de λ que multiplica a t en el exponente van

a contribuir de manera notoria en el resultado final de nuestra integral. En nuestro caso, esto sucede para λ_1 y valores muy próximos, con lo que podemos aproximar nuestra integral cambiando sus límites de integración y desarrollar en serie de Taylor los términos que dependen de $\lambda - \lambda_1$ (hasta primer orden), puesto que esto va a tener un valor muy pequeño⁷, y nos queda

$$\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t) = \frac{e^{-\lambda_1 t}}{\pi(\xi_0 - \xi)(\alpha\gamma)^{3/2}} \int_{\lambda_1}^{\lambda_1 + \varepsilon} d\lambda (\lambda - \lambda_1)^{1/2} \left(1 - \frac{\lambda - \lambda_1}{8\alpha\gamma}\right) [\Xi(\xi_0) - \Xi(\xi)] e^{-(\lambda - \lambda_1)t}, \quad (2.3.5a)$$

$$\Xi(x) \equiv \frac{x}{(x-1)^2} \left(1 - \frac{x}{(x-1)^2} \frac{\lambda - \lambda_1}{\alpha\gamma}\right), \quad (2.3.5b)$$

con $\varepsilon \in \mathbb{R} \mid \varepsilon \ll 1$. Siendo esto así, podemos despreciar también los términos de primer orden de los desarrollos en serie de Taylor, lo que da lugar a

$$\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t) = \frac{e^{-\lambda_1 t}}{\pi(\xi_0 - \xi)(\alpha\gamma)^{3/2}} \overbrace{\left[\frac{\xi_0}{(\xi_0 - 1)^2} - \frac{\xi}{(\xi - 1)^2} \right]}^C \int_{\lambda_1}^{\lambda_1 + \varepsilon} d\lambda (\lambda - \lambda_1)^{1/2} e^{-(\lambda - \lambda_1)t}. \quad (2.3.6)$$

Si hacemos otro cambio de variable, $(\lambda - \lambda_1)t = x$, nos queda la integral

$$\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t) = C \frac{1}{t} \int_0^{\varepsilon t} dx \left(\frac{x}{t}\right)^{1/2} e^{-x}. \quad (2.3.7)$$

Como t es muy grande, la idea es que siempre podemos tomar $\varepsilon \ll 1$ (de manera que el desarrollo de Taylor de los factores del integrando que no son la exponencial es lícito) pero tal que $\varepsilon t \gg 1$ y podemos extender la integral (2.3.7) hasta infinito (con un error exponencialmente pequeño, del orden de $e^{-\varepsilon t}$),

$$\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t) = C \frac{1}{t^{3/2}} \int_0^{\infty} dx x^{1/2} e^{-x} = C \frac{\Gamma(3/2)}{t^{3/2}}, \quad (2.3.8)$$

es decir,

$$\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t) = \left[\frac{\xi_0}{(\xi_0 - 1)^2} - \frac{\xi}{(\xi - 1)^2} \right] \frac{\Gamma(3/2)}{\pi(\xi_0 - \xi)} \frac{e^{-\lambda_1 t}}{(\alpha\gamma t)^{3/2}}. \quad (2.3.9)$$

Una vez obtenida la expresión que buscábamos, representaremos gráficamente la función respuesta en el caso no lineal exacta junto con la asintótica para apreciar, visualmente, la bondad de nuestros cálculos. En la Figura 2.1 observamos que $\varphi^{(n.l.)}(t)$ y $\varphi_{asint}^{(n.l.)}(t)$ son equivalentes asintóticamente porque cumplen que su cociente tiende a la unidad cuando $t \rightarrow \infty$, como estipulamos en (2.3.1). Además, cuanto más pequeña sea la temperatura final del sistema T , vemos que la función respuesta en el caso no lineal asintótica tarda

⁷De aquí la conveniencia de nuestro cambio de variable (2.3.2).

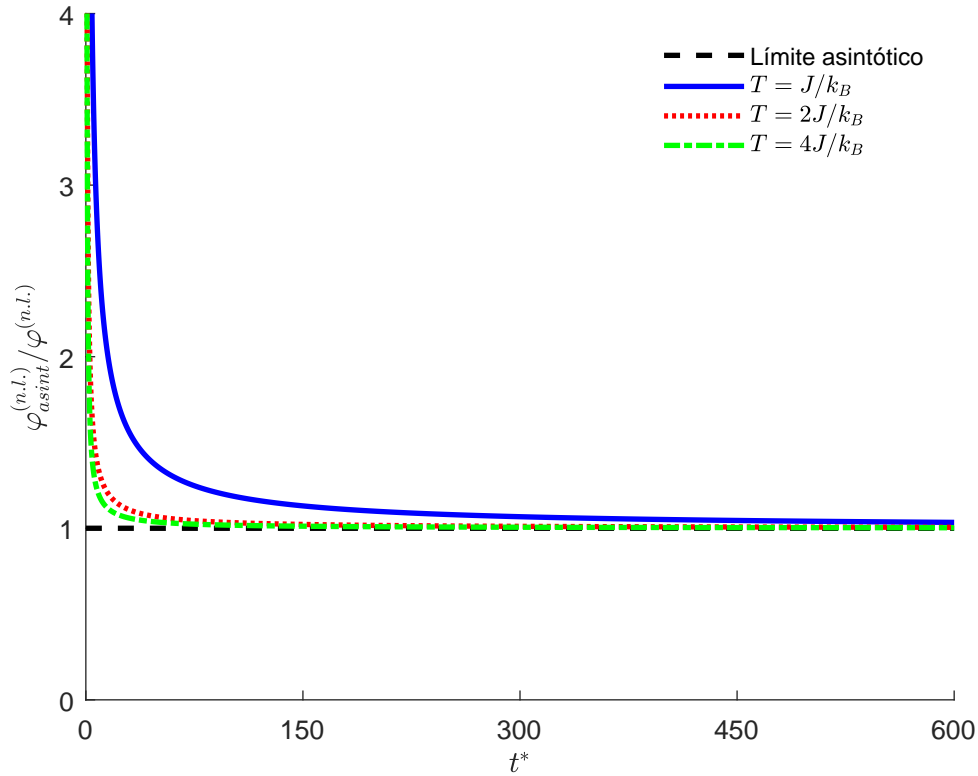


Figura 2.1: Cociente $\varphi_{asint}^{(n.l.)}/\varphi^{(n.l.)}$ como función del tiempo. Mostramos las curvas para tres relajaciones desde temperatura infinita, correspondientes a las temperaturas finales $T = J/k_B$, $2J/k_B$, $4J/k_B$. Observamos claramente que, en todos los casos, el cociente tiende a la unidad para $t^* \rightarrow \infty$, de acuerdo con la definición (2.3.1).

más tiempo en aproximarse a su función respuesta exacta correspondiente. Esto es consistente con la expresión de la energía analítica que obtuvimos para nuestro sistema (2.2.6), ya que, si partimos de una temperatura infinita, cuanto menor sea la temperatura T , esta expresión nos dice que mayor será el tiempo que tarde la energía en aproximarse a su valor de equilibrio, es decir, mayor será el tiempo de relajación.

En la Figura 2.2 advertimos que la función respuesta en el caso no lineal asintótica se aproxima a su correspondiente función exacta cuanto mayor es el tiempo. El interés de esta gráfica está en que, al ser logarítmica en la función respuesta, podemos apreciar más claramente que cuanto menor sea la temperatura final T , más tiempo tardará el sistema en relajar a su estado de equilibrio, por las razones que explicamos en el párrafo anterior.

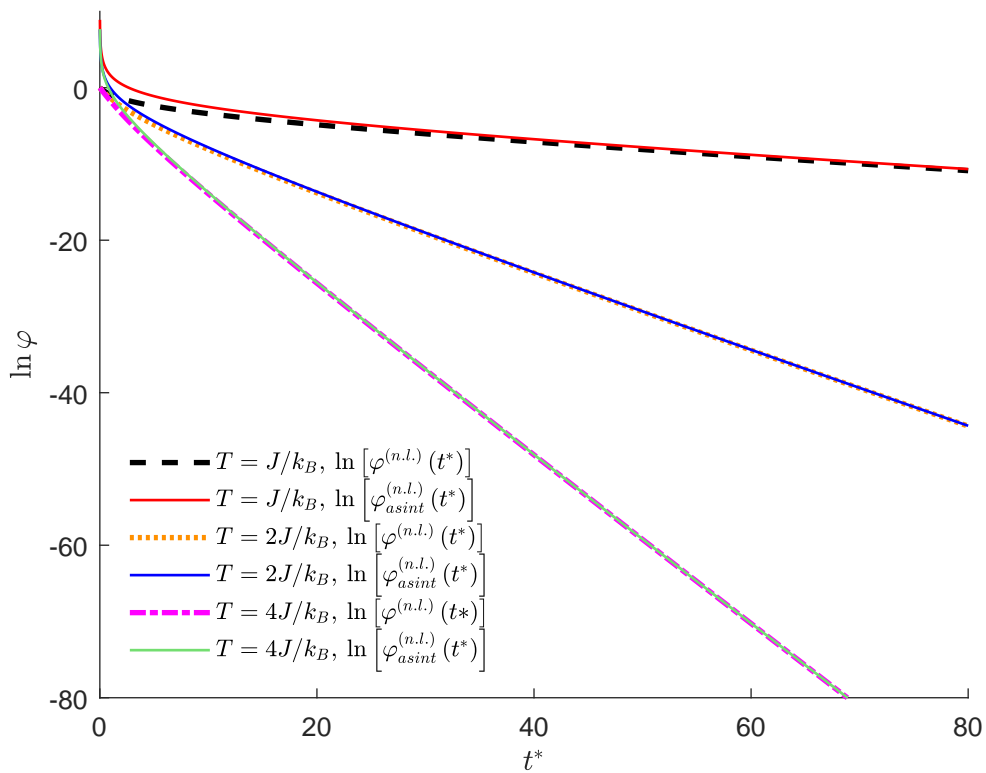


Figura 2.2: Logaritmo de la función de relajación no lineal como función del tiempo. Los casos mostrados son los mismos que en la Figura 2.1, pero aquí representamos la expresión exacta (2.2.8) y el comportamiento asintótico (2.3.9) por separado. La escala logarítmica nos permite apreciar más claramente la tendencia hacia el comportamiento asintótico para tiempos grandes.

Capítulo 3

Simulaciones numéricas

Estudiamos numéricamente la respuesta no lineal de nuestro sistema de espines. La dinámica de Glauber que éste obedece es simulada con el algoritmo de Metropolis-Hastings [8] con el programa MATLAB.

3.1. Magnitudes adimensionales

En primer lugar, es conveniente establecer las magnitudes adimensionales con las que vamos a trabajar en nuestras simulaciones. Todas ellas se definen en función de sus magnitudes dimensionales correspondientes, que ya comentamos en las secciones 1.2.1 y 1.2.2.

En primer lugar, tenemos la temperatura adimensional,

$$T^* \equiv \frac{k_B T}{J} \implies \beta^* = \frac{J\beta}{k_B}. \quad (3.1.1)$$

Seguidamente, recordamos que ya definimos el tiempo adimensional en la expresión (2.1.14). A continuación, establecemos la energía adimensional,

$$e \equiv \frac{\bar{E}}{NJ}. \quad (3.1.2)$$

La energía de equilibrio adimensional de nuestro sistema queda, teniendo en cuenta (1.2.6) y (3.1.1),

$$e_{eq} \equiv \frac{\bar{E}_{eq}}{NJ} = -\tanh\left(\frac{1}{T^*}\right) \equiv -\xi^*. \quad (3.1.3)$$

Análogamente, la expresión de la energía adimensional en función del tiempo adimensional será, según (2.2.6) y (2.1.14),

$$\begin{aligned} e(t^*) &\equiv \frac{\bar{E}(t^*)}{NJ} \\ &= e_{eq} - \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dq \operatorname{sen}^2 q \left[\frac{\xi_0^*}{1 - 2\xi_0^* \cos q + \xi_0^{*2}} - \frac{\xi^*}{1 - 2\xi^* \cos q + \xi^{*2}} \right] e^{-2(1-\gamma^* \cos q)t^*}, \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

donde hemos definido

$$\gamma^* \equiv \tanh\left(\frac{2}{T^*}\right). \quad (3.1.5)$$

En la simulación, la energía de equilibrio se obtiene como el promedio de aquellas energías obtenidas a partir de la evolución dinámica de nuestro sistema, una vez que este ha relajado completamente a su estado de equilibrio. ¿Cómo determinamos, cuantitativamente, el tiempo mínimo adimensional a partir del cual podemos considerar que nuestro sistema ha relajado completamente al equilibrio? No existe un único criterio que nos determine el valor de este tiempo mínimo adimensional. Nosotros calcularemos el tiempo medio de relajación [6],

$$\langle \tau \rangle = \int_0^\infty dt^* \varphi^{(n.l.)}(t^*), \quad (3.1.6)$$

y, observando la gráfica de cada simulación, calcularemos la media de todas las energías obtenidas mediante la simulación correspondientes a tiempos t^* desde $d \cdot \langle \tau \rangle$ (siendo d un número tal que la energía de nuestro sistema haya relajado claramente al equilibrio) hasta el tiempo adimensional final de simulación. Como comentamos en la sección 2.3, si partimos de $T_0^* = +\infty$, cuanto menor sea T^* , mayor será el tiempo que tarde el sistema en relajarse al equilibrio, y por lo tanto, mayor será el tiempo mínimo a partir del cual tomaremos los datos de simulación para calcular el valor medio de la energía. Con esto, el intervalo de tiempo de simulación sobre el que promediamos será

$$I \equiv [d \langle \tau \rangle, t_{final}^*], \quad t_{prom}^* \equiv t_{final}^* - d \langle \tau \rangle. \quad (3.1.7)$$

Pasamos a la varianza de la energía. Teniendo en cuenta (1.2.7), (3.1.2) y (3.1.3),

$$\sigma_e^2 \equiv \overline{(e - e_{eq})^2} \Big|_I = \frac{\Sigma^2}{(NJ)^2} = \frac{1}{N \cosh^2(1/T^*)} = \frac{T^{*2}}{N} \frac{\partial e_{eq}}{\partial T^*}, \quad (3.1.8)$$

lo que nos permite conocer la expresión del calor específico analítico adimensional (recordemos (1.2.8)),

$$c_V \equiv \frac{\partial e_{eq}}{\partial T^*} = \frac{N}{T^{*2}} \sigma_e^2. \quad (3.1.9)$$

De manera análoga, la varianza en la simulación la calcularemos a partir de la dispersión de las energías alrededor del valor medio medido en la simulación. Esto nos permitirá también medir la capacidad calorífica en la simulación, usando (3.1.9). Definimos, también, una expresión adimensional correspondiente a la probabilidad por unidad de tiempo que establecía la dinámica de Glauber (1.2.9),

$$w_j^*(\sigma_j) \equiv \frac{w_j(\sigma_j)}{\alpha} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \gamma^* \sigma_j (\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) \right], \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (3.1.10)$$

con sus 3 posibles formas: espines contiguos al j -ésimo son paralelos entre sí y paralelos respecto al j -ésimo,

$$w_j^{*(1)}(\sigma_j) \equiv \frac{w_j^{(1)}(\sigma_j)}{\alpha} = \frac{1 - \gamma^*}{2} = w^{*(1)}, \quad (3.1.11)$$

espines contiguos al j -ésimo antiparalelos entre sí,

$$w_j^{*(2)}(\sigma_j) \equiv \frac{w_j^{(2)}(\sigma_j)}{\alpha} = \frac{1}{2} = w^{*(2)}, \quad (3.1.12)$$

y espines contiguos al j -ésimo paralelos entre sí y antiparalelos respecto al j -ésimo

$$w_j^{*(3)}(\sigma_j) \equiv \frac{w_j^{(3)}(\sigma_j)}{\alpha} = \frac{1 + \gamma^*}{2} = w^{*(3)}. \quad (3.1.13)$$

Para acabar esta sección, comentamos que, a partir de las expresiones obtenidas para las fluctuaciones, podemos encontrar el intervalo de energías alrededor del valor medio de equilibrio en el que se encuentran el 99,74 % de los datos de la simulación, que es 3σ según la distribución de Gauss.

3.2. El algoritmo de Metropolis

Como comentamos en las secciones 1.2.3 y 2.2, la respuesta de nuestro sistema viene caracterizada por su energía en función del tiempo. Numéricamente, podemos calcular la energía promedio de simulación de nuestro sistema para una configuración cualquiera de N espines¹ promediando la expresión de la energía de nuestro sistema (1.2.1) y adimensionalizándola según (3.1.2),

$$e(t^*) = -\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j(t^*) \sigma_{j+1}(t^*), \quad (3.2.1)$$

en donde $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ porque nuestro sistema tiene condiciones de contorno periódicas (recordemos (1.2.2)).

Pero, ¿cómo podemos determinar los valores de estos N espines de nuestra simulación para cada t^* que estemos simulando? Es esta la pregunta que responde el algoritmo de Metropolis, que es un método de Monte Carlo en cadena de Markov. Comentemos los pasos de este algoritmo cuando lo aplicamos a nuestro sistema:

1. Selección del candidato a saltar: escogemos uno de los N espines con probabilidad $1/N$.
2. Decidimos si el espín seleccionado en 1. cambia su valor o no. Para ello, calculamos la probabilidad adimensional w_i^* (3.1.10) que nos ofrece la dinámica de Glauber para ese espín en concreto y generamos un número aleatorio r en el intervalo $[0, 1]$. Si $r < w_i^*$ el espín cambia su valor, si no, mantiene el que tiene y decimos que se ha producido un rechazo.
3. Cálculo de la energía de simulación de la configuración de espines a la que se llega tras aplicar 1.+2. evaluando la expresión (3.2.1).

¹Recordemos que solo existen 2 valores posibles de espín: $+1$ y -1 . Además, N debe ser finito porque el ordenador no puede almacenar un número infinito de datos.

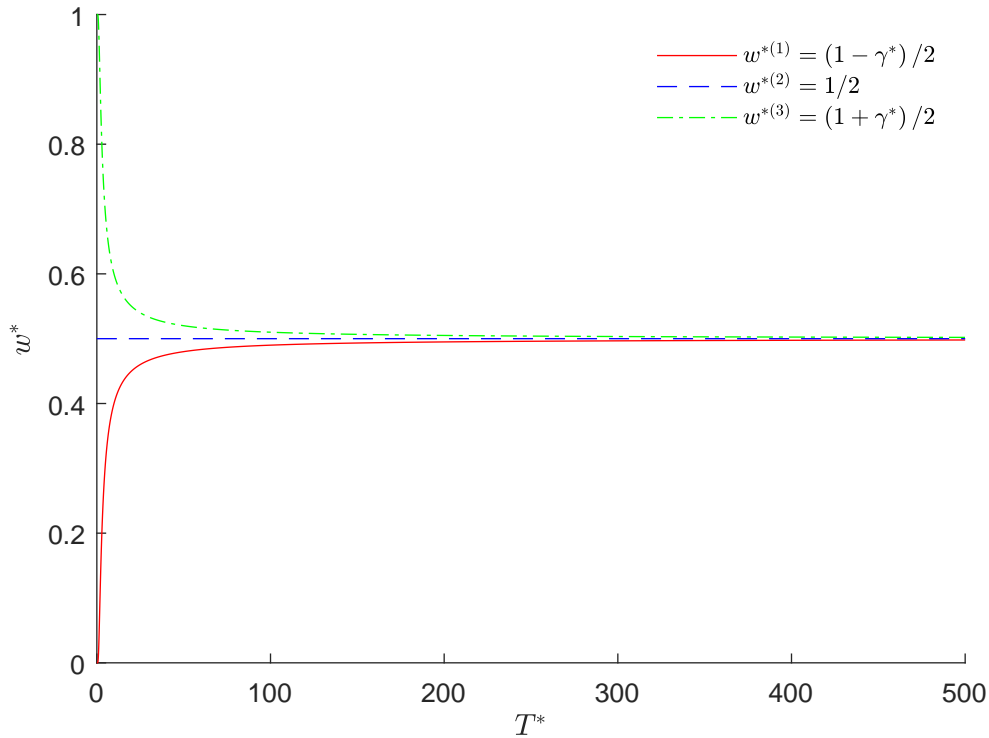


Figura 3.1: Probabilidades de transición de un espín para la dinámica de Glauber como función de la temperatura T^* . En concreto, mostramos $w^{*(1)}$, $w^{*(2)}$ y $w^{*(3)}$, dadas por las ecuaciones (3.1.11), (3.1.12) y (3.1.13), respectivamente. En el límite de temperaturas altas, todas ellas tienden al valor común $1/2$. En el límite de temperaturas bajas, el espín con sus dos vecinos paralelos (antiparalelos) tiene una probabilidad de transición nula (igual a la unidad).

Repetimos los pasos 1., 2. y 3. un número $n_{iter} = N \cdot t_{final}^*$ de veces, de manera que, en promedio, preguntamos una vez a cada uno de los espines de nuestro sistema en cada unidad de tiempo t^* que simulamos.

Comentamos, a continuación, algunos detalles importantes en relación con este algoritmo. El primero es que estos 4 pasos de nuestro algoritmo se aplican sobre una configuración inicial de espines de nuestro sistema que nosotros tenemos que establecer antes de ejecutar este algoritmo. El estado inicial más simple que podemos describir es el que se da a $T^* = +\infty$, porque en ese caso, la probabilidad de transición del espín i -ésimo w_i^* es,

$$\lim_{T^* \rightarrow +\infty} w_i^*(\sigma_i) = \lim_{T^* \rightarrow +\infty} \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{2}{T^*} \right) \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \right] = \frac{1}{2}, \quad (3.2.2)$$

es decir, cada uno de los espines de nuestro sistema tendrá, con igual probabilidad, un valor $+1$ ó -1 . Debido a su sencillez para programarlo, escogemos éste como el estado inicial de nuestro script que simula la respuesta del sistema de espines que estamos tratando.²

²Véase el código de MATLAB de nuestro script en el Anexo I.

En el límite de bajas temperaturas, la probabilidad de transición de un espín antiparalelo a sus dos vecinos paralelos entre sí tiende a 1,

$$\lim_{T^* \rightarrow 0} w^{*(3)} = \lim_{T^* \rightarrow 0} \frac{1 + \tanh(2/T^*)}{2} = 1, \quad (3.2.3)$$

lo que favorece la creación de dominios, que son conjuntos de espines contiguos paralelos todos entre sí. El límite de bajas temperaturas de la probabilidad de transición de un espín con sus dos vecinos antiparalelos entre sí es

$$\lim_{T^* \rightarrow 0} w^{*(2)} = \frac{1}{2}. \quad (3.2.4)$$

Esto implica que los espines que están en la frontera de los dominios siguen un camino aleatorio unidimensional, porque tienen la misma probabilidad de cambiar de valor que de mantener el que tienen. En este camino aleatorio, un espín de frontera puede convertirse en uno de dominio, y viceversa. En el límite de bajas temperaturas, la probabilidad de transición de un espín paralelo a sus dos vecinos paralelos entre sí tiende a 0,

$$\lim_{T^* \rightarrow 0} w^{*(1)} = \lim_{T^* \rightarrow 0} \frac{1 - \tanh(2/T^*)}{2} = 0. \quad (3.2.5)$$

Esto favorece también la creación de dominios. Además, cada vez que el algoritmo de Metropolis se encuentra con esta orientación relativa de espines, se produce un rechazo con mucha probabilidad (una probabilidad que tiende al 100% cuando $T^* \rightarrow 0$). Esto provoca que el algoritmo de Metropolis sea menos eficiente en el límite $T^* \rightarrow 0$, porque el número de rechazos, es decir, el número de iteraciones del algoritmo en el que el sistema no cambia respecto a la anterior iteración, aumenta cuanto más baja es la temperatura. Esto no quiere decir que el algoritmo de Metropolis sea menos preciso para bajas temperaturas, puesto que el algoritmo simula correctamente la ecuación maestra de nuestro sistema para cualquier temperatura. Existen algoritmos más eficientes, que eliminan o disminuyen los rechazos a bajas temperaturas [9] y [10], pero no los trataremos en este trabajo.

Concluimos esta sección exponiendo la expresión de la probabilidad de que el espín i -ésimo rote (P_i) según nuestro algoritmo. Como los pasos 1. y 2. son estadísticamente independientes (véase 1.1.12),

$$P_i = \Delta t^* w_i^* = \frac{1}{N} w_i^*. \quad (3.2.6)$$

Es por esto que el tiempo asociado a la posible rotación de un espín es $1/N$, y una unidad de tiempo se corresponde con N intentos de rotación.

3.3. Resultados de las simulaciones

Presentamos, en esta sección, las gráficas obtenidas con nuestras simulaciones del sistema de espines y comentamos sus rasgos más relevantes. Aclaremos que, en estas gráficas,

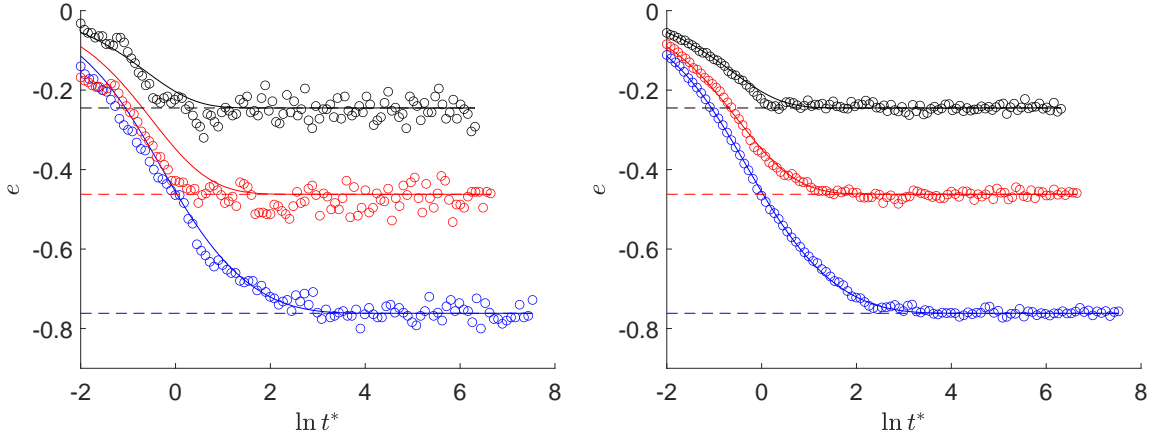


Figura 3.2: Evolución temporal de la energía media por espín. Concretamente, representamos los resultados de simulación para un sistema de $N = 10^3$ espines (izquierda) y $N = 10^4$ espines (derecha) en función del logaritmo del tiempo adimensional. Se muestra el intervalo $e^{-2} \leq t^* \leq t_{final}^* = 22 \langle \tau \rangle + 10^3 \langle \tau \rangle$ para $T_0^* = +\infty$ y $T^* = 1$ (azul), $T^* = 2$ (rojo) y $T^* = 4$ (negro). Los círculos son las energías de simulación, las líneas continuas representan las expresiones analíticas para la relajación (3.1.4), y las líneas de guiones son las energías de equilibrio analíticas.

no representamos los resultados de todas las iteraciones que realiza el algoritmo. Esto es debido a que el número total de iteraciones n_{iter} es muy elevado (véase la sección 3.2), lo que ralentizaría innecesariamente el tiempo de ejecución de nuestra simulación. Para poder observar un número de datos de simulación suficientemente representativo del total y, a la vez, tener un tiempo de ejecución de nuestra simulación razonable, representamos 100 datos de simulación equiespaciados en todo el rango de tiempo de simulación.

3.3.1. Relajación de la energía desde temperatura infinita

El tiempo que tarda el sistema en alcanzar su energía de equilibrio es mucho más pequeño que t_{prom}^* , definido en (3.1.7). Es este motivo el que nos lleva a escoger una representación logarítmica en el tiempo para las gráficas en la Figura 3.2. De esta manera, podemos mostrar un número significativo de puntos pertenecientes al intervalo de tiempo en que el sistema no ha alcanzado el equilibrio al mismo tiempo que exponemos las energías del intervalo I (recuérdese (3.1.7)). Los puntos pertenecientes al intervalo I estarán más distanciados en el tiempo que los de la región de no equilibrio, pero como las fluctuaciones de las energías de simulación se mantienen constantes en todo el intervalo I (véase (3.1.8)), son suficientes para visualizar el comportamiento del sistema en esta región. La desventaja de esta representación es que no podemos mostrar la energía inicial del sistema, que se da para $\ln t^* \rightarrow -\infty$. Es por esto que exponemos en el Apéndice A la representación lineal correspondiente a las gráficas de la Figura 3.2.

Por otra parte, la expresión (3.1.8) indica que las fluctuaciones de la energía entorno a e^{eq} disminuyen cuando T^* decrece y cuando N aumenta. Observamos ambas tendencias

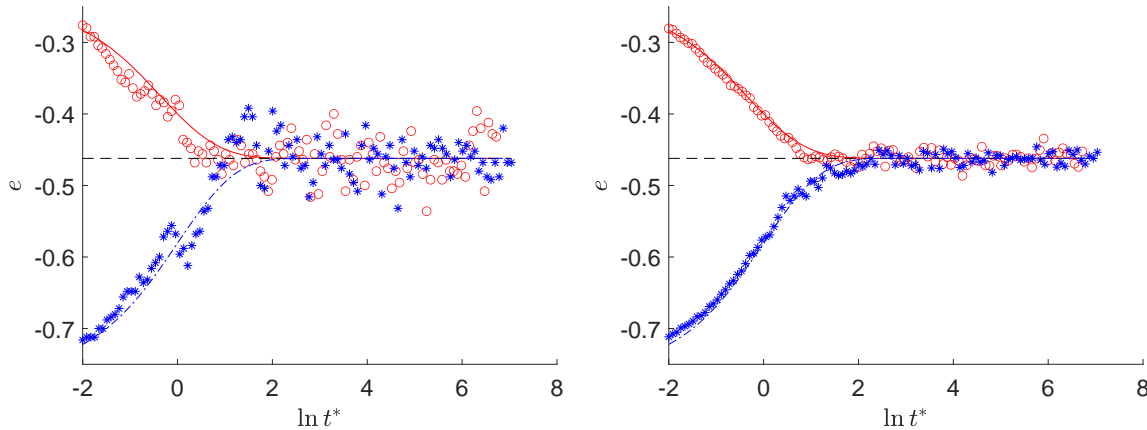


Figura 3.3: Evolución temporal de la energía media por espín. Concretamente, representamos los resultados de simulación para un sistema de $N = 10^3$ espines (izquierda) y $N = 10^4$ espines (derecha) en función del logaritmo del tiempo adimensional. Se muestra el intervalo $e^{-2} \leq t^* \leq t_{final}^* = 22 \langle \tau \rangle + 10^3 \langle \tau \rangle$ para $T_{01}^* = 4$ (rojo), $T_{02}^* = 1$ (azul) y $T^* = 2$ (cuya energía de equilibrio se muestra con una línea horizontal de guiones). Los círculos y los asteriscos son los datos de simulación para $T_{01}^* = 4$ y $T_{02}^* = 1$, respectivamente. La línea continua y la línea de guiones y puntos representan las expresiones analíticas (3.1.4), evaluadas para $T_{01}^* = 4$ y $T_{02}^* = 1$, respectivamente.

en las gráficas de la Figura 3.2, aunque es más evidente la dependencia con el número de espines, lo que es consistente también con (3.1.8).

3.3.2. Relajación de la energía entre dos temperaturas finitas

Comentamos en la sección 3.2 que podíamos programar de manera sencilla la configuración de espines para $T_0^* = +\infty$. Cuando la temperatura inicial del sistema es finita, lo que hacemos para encontrar su estado inicial es ejecutar el algoritmo con estado inicial correspondiente a $T_0^* = +\infty$ hasta que el sistema se encuentre en equilibrio con la temperatura finita deseada. La última configuración de espines será nuestro estado inicial, y, a partir de esta, volvemos a ejecutar el algoritmo de Metropolis para ver cómo relaja nuestro sistema a la temperatura final deseada (véase el código de MATLAB en el Anexo II). Así es como hemos procedido para conseguir las gráficas de la Figura 3.3, en las cuales hemos representado únicamente las relajaciones de temperatura inicial finita.

Remarcamos que la subida y bajada de temperatura del sistema hacia el equilibrio no son simétricas respecto a la energía de equilibrio, en concordancia con lo predicho por la expresión analítica (3.1.4).

3.3.3. Fluctuaciones de la energía

Estudiamos las fluctuaciones de la energía de simulación en torno a la energía de equilibrio. Primeramente, en la Figura 3.4, analizamos la bondad de las energías de

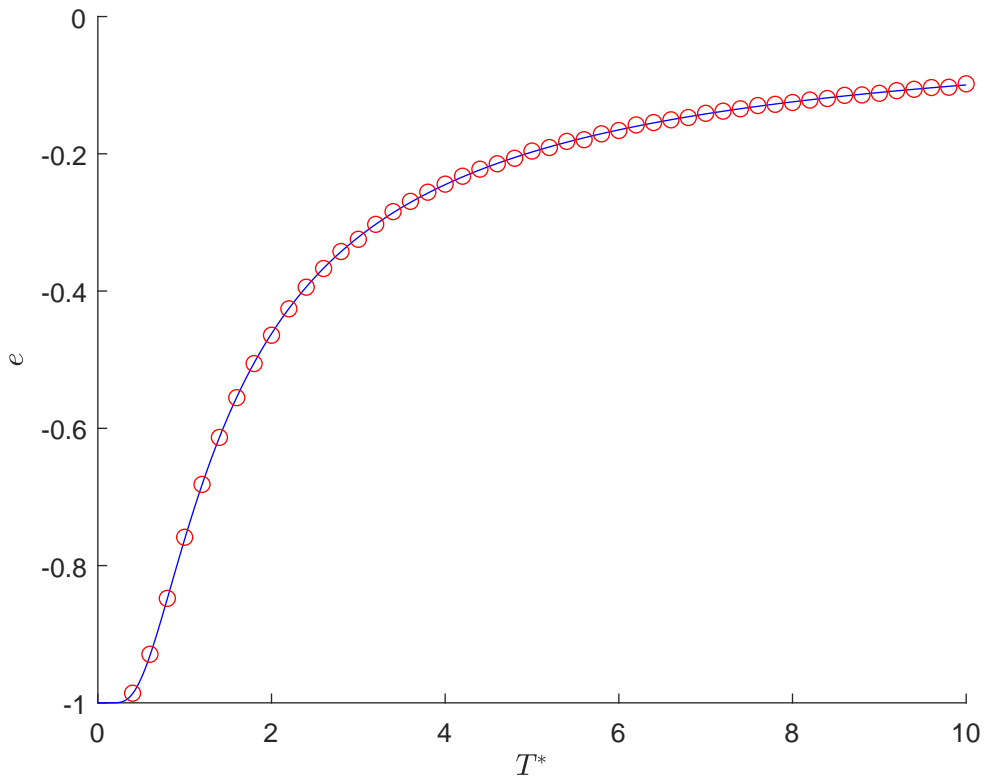


Figura 3.4: Energía de equilibrio en función de la temperatura adimensional. Se ha considerado un tiempo de promediado $t_{prom}^* = 10^3 \langle \tau \rangle$ en un sistema de $N = 10^3$ espines. La línea continua azul representa la expresión analítica (3.1.3) y los círculos rojos muestran los resultados de simulación.

equilibrio que obtenemos a partir de nuestras simulaciones en función de la temperatura, comparándolas con las predicciones analíticas. Para los datos de la Figura 3.4, tenemos: $\overline{\varepsilon_{eq}} (\%) = 0,5021 \%$, $\varepsilon_{eq} (\%)|_{mín} = 0,0140 \%$, $\varepsilon_{eq} (\%)|_{máx} = 1,6414 \%$ y $\text{Var} [\varepsilon_{eq} (\%)] = 0,1753 \%$. Estos son errores pequeños, lo que significa que el tiempo sobre el que promediamos nuestros datos de simulación $t_{prom}^* = 10^3 \langle \tau \rangle$ en el intervalo I es suficiente para obtener unas energías de simulación correctas, lo que justifica que lo hayamos usado en las simulaciones de las secciones 3.3.1 y 3.3.2.

Procedemos de manera análoga con la varianza de la energía. Para ello, representamos en la Figura 3.5 el comportamiento analítico que predice la expresión (3.1.8) junto con los resultados que obtenemos de nuestras simulaciones. En este caso, tenemos: $\overline{\varepsilon_{\sigma_e^2}} (\%) = 3,3743 \%$, $\varepsilon_{\sigma_e^2} (\%)|_{mín} = 0,0918 \%$, $\varepsilon_{\sigma_e^2} (\%)|_{máx} = 10,4518 \%$ y $\text{Var} [\varepsilon_{\sigma_e^2} (\%)] = 7,3249 \%$. A diferencia de lo que ocurría en la Figura 3.4, en esta ocasión $t_{prom}^* = 10^3 \langle \tau \rangle$ es un tiempo demasiado pequeño; las fluctuaciones de simulación difieren demasiado de las analíticas.

Para reducir los errores entre teoría y simulación, aumentamos el tiempo sobre el que promediamos nuestros datos de simulación a $t_{prom}^* = 10^4 \langle \tau \rangle$ en el intervalo I , y exponemos la comparativa en la Figura 3.5. Visualmente, apreciamos que los resultados de simulación se ajustan mejor a la curva analítica. Cuantitativamente, tenemos: $\overline{\varepsilon_{\sigma_e^2}} (\%) = 0,9996 \%$,

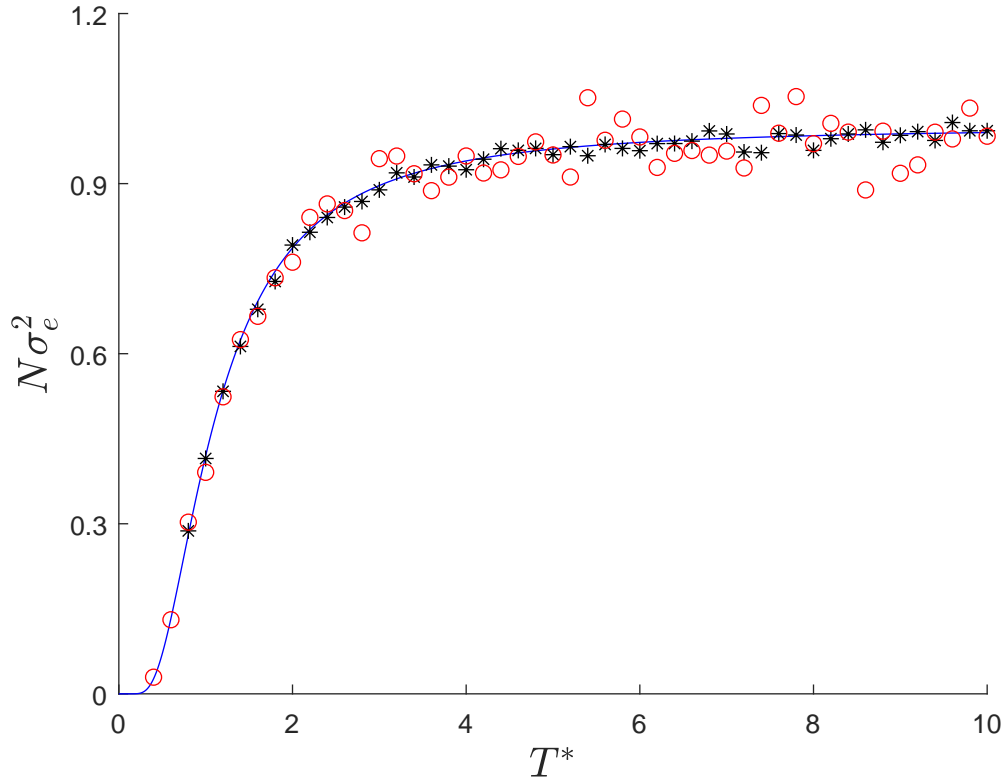


Figura 3.5: Varianza de la energía como función de la temperatura. En las simulaciones se ha utilizado un sistema con $N = 10^3$ espines, y dos tiempos de promediado: $t_{prom}^* = 10^3 \langle \tau \rangle$ (círculos rojos) y $t_{prom}^* = 10^4 \langle \tau \rangle$ (asteriscos negros). La línea continua azul representa la expresión analítica (3.1.8). Se observa claramente que los resultados de simulación tienden hacia el resultado analítico al aumentar el tiempo de promediado.

$\varepsilon_{\sigma_e^2} (\%)|_{min} = 0,0302 \%$, $\varepsilon_{\sigma_e^2} (\%)|_{max} = 2,7891 \%$ y $\text{Var} [\varepsilon_{\sigma_e^2} (\%)] = 0,5685 \%$. Hemos confirmado que aumentar el tiempo sobre el que promediamos los datos de simulación implica que las fluctuaciones de la energía de simulación se asemejan más a la que tendría nuestro sistema desde el punto de vista analítico.

Remarcamos, para finalizar esta sección, que en la Figura 3.5 no hemos representado las varianzas de simulación para $T^* = 0$ y $T^* = 0,2$ en la gráfica de la izquierda y para $T^* = 0$, $T^* = 0,2$, $T^* = 0,4$ y $T^* = 0,6$. El motivo es las limitaciones que tienen nuestros recursos informáticos, que nos impiden simular una trayectoria suficientemente “larga” para temperaturas bajas, debido al crecimiento del tiempo de relajación.

Capítulo 4

Resumen y conclusiones

Enumeramos, a continuación, las ideas principales a las que llegamos con la elaboración de este trabajo.

Hemos comenzado revisando brevemente algunos elementos fundamentales de la teoría de variables estocásticas y procesos estocásticos. En particular, nos hemos detenido especialmente en los procesos de Markov y en la ecuación maestra que gobierna su dinámica.

A continuación, hemos introducido el modelo de Ising con dinámica de Glauber, para el caso monodimensional. En esta dinámica, los eventos elementales son las rotaciones de un único espín, y las probabilidades de transición de la ecuación maestra verifican la condición de balance detallado. Esto asegura que el sistema, en el límite de tiempos grandes, tiende al estado de equilibrio descrito por la distribución canónica, a partir de cualquier condición inicial. La ecuación maestra, a pesar de su sencillez, no puede resolverse exactamente, pero sí las ecuaciones de evolución de ciertas jerarquías de momentos para varias situaciones físicas de interés.

Hemos obtenido la evolución temporal de la energía, a partir de cualquier condición inicial, empleando un método de autovalores y autovectores. Este método proporciona la solución del problema como una integral sobre modos de relajación con un continuo de tiempos característicos. Esta expresión es adecuada para comparar con resultados de simulación de Monte Carlo, y también nos ha permitido deducir analíticamente el comportamiento asintótico de la relajación de la energía para tiempos grandes.

Los resultados teóricos que hemos deducido se han comparado con simulaciones de la ecuación maestra, usando el algoritmo de Metropolis. Hemos observado un acuerdo muy bueno entre los resultados teóricos (que son exactos en el límite de un sistema infinito) y los resultados numéricos (obtenidos con una red finita). El acuerdo mejora, como era previsible, al aumentar el número de espines, tanto para la evolución dinámica del sistema como para los valores de equilibrio.

Nuestro trabajo acaba aquí, pero el estudio analítico de sistemas estadísticos de espines interactuantes sigue más allá. Es el caso del modelo de Potts [11], que generaliza el modelo de Ising permitiendo a los espines tomar más de 2 valores, distribuyéndose uniformemente en un círculo. No solamente pueden analizarse modelos más complejos, también nuestro modelo de Ising monodimensional puede emplearse para investigar situaciones físicas más complejas. Por ejemplo, en los últimos años se ha estudiado el denominado

efecto Mpemba (donde un sistema inicialmente más caliente se equilibra más rápido que un sistema inicialmente más frío) con sistemas markovianos [12]. Sería interesante investigar si un efecto análogo puede estar presente en un modelo tan sencillo como el modelo de Ising monodimensional con dinámica de Glauber, y determinar las condiciones para que aparezca.

Apéndice A. Relajación de la energía. Representación lineal

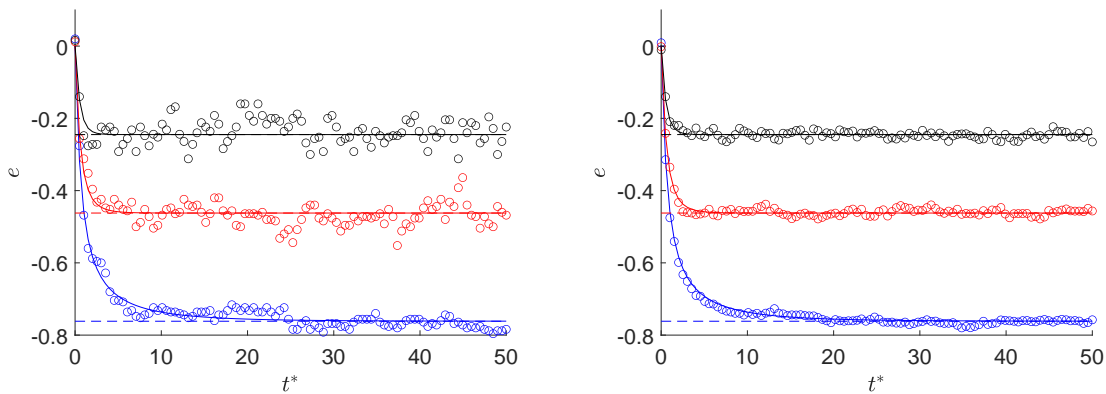


Figura 1: Representación lineal en el tiempo de los datos de la Figura 3.2. El código de colores y de marcadores o tipos de líneas es el mismo que en la figura de referencia. Izquierda: $N = 10^3$. Derecha: $N = 10^4$.

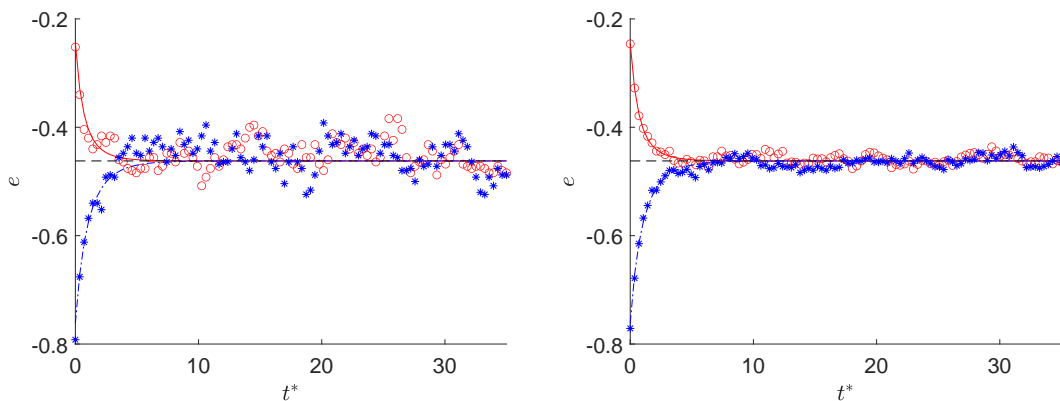


Figura 2: Representación lineal en el tiempo de los datos de la Figura 3.3. El código de colores y de marcadores o tipos de líneas es el mismo que en la figura de referencia. Arriba: $N = 10^3$. Abajo: $N = 10^4$.

Anexo I. Script del algoritmo de Metropolis. $T_0^* = 10^4$

```
1 % Este script ejecuta el algoritmo de Metropolis para simular la ...
   respuesta
2 % no lineal de un sistema de N espines que obedece el modelo de Ising con
3 % la dinámica de Glauber. Se representa gráficamente dicha simulación ...
   junto
4 % a las expresiones analíticas de la respuesta no lineal y de la ...
   energía de
5 % equilibrio.
6 clear
7 clc
8 close all
9 format long
10
11 %% Solución analítica
12 % Definición de los parámetros del sistema.
13 xi0 = 0;
14 T = 1;
15 xi = tanh(1./T);
16 gamma = tanh(2./T);
17
18 % Integración de la jerarquía de ecuaciones
19
20 I1 = @(q,t) 2*(pi).^(-1).*(sin(q)).^2.*exp(-2.*(1-gamma.*cos(q))...
21     .*t).*(xi0.*(xi0.^2-2*xi0.*cos(q)+1).^(-1)-xi.*(xi.^2-2*xi.*cos(q)+...
22     1).^(-1));
23
24 D1 = @(t) integral(@(q) I1(q,t),0,pi);
25
26 fr = @(t) (xi0-xi)^(-1).*integral(@(q) I1(q,t),0,pi);
27
28 %% Simulación numérica
29
30 % Tiempo a partir del cual consideramos en equilibrio al sistema.
31
32 tau = integral(fr,0,Inf,'ArrayValued',true);
33 d = 22;
34 dtau = d*tau
```

```

35
36 % Promediamos durante 1000*<tau>.
37
38 tprom=10^3*tau;
39 tfinal = dtau+tprom
40
41 % Definición de los parámetros del sistema para la simulación
42
43 N = 10^3;
44 Ntfinal = N*tfinal;
45 t = linspace(0,tfinal,Ntfinal);
46 S = zeros(N+2,1);
47
48 %% Estado inicial del sistema
49
50 for b=2:N+1
51     ri=rand;
52     if ri>0.5
53         S(b)=1;
54     else
55         S(b)=-1;
56     end
57 end
58 S(1)=S(N+1);
59 S(N+2)=S(2);
60
61 C1 = zeros(1,length(t));
62
63 C1(1) = sum(S(2:N+1).*S(3:N+2));
64
65 %% Algoritmo de Metropolis
66
67 W = zeros(N,1);
68
69 for d=1:length(t)-1
70     s=randi(N)+1;
71     W(s)=(1-gamma./2*S(s)*(S(s-1)+S(s+1)))/2;
72     r=rand;
73     if r<W(s)
74         C1(d+1)=C1(d)-S(s-1)*S(s)-S(s)*S(s+1);
75         S(s)=-S(s);
76         S(1)=S(N+1);
77         S(N+2)=S(2);
78         C1(d+1)=C1(d+1)+S(s-1)*S(s)+S(s)*S(s+1);
79     else
80         C1(d+1)=C1(d);
81     end
82 end
83
84 esim = -C1(1,:)./N;
85
86 %% Cálculo de propiedades del sistema

```



```

87
88 % 1. Energía de equilibrio del sistema.
89
90 eeqan = -tanh(1/T)
91
92 postauMC = find(abs(t-dtau)==min(abs(t-dtau)));
93 B = length(t)-postauMC+1;
94
95 eeqsim=sum(esim(postauMC:length(t)));
96 eeqsim = eeqsim/B
97
98 ereeq = 100*abs((eeqsim-eeqan)/eeqan)
99
100 % 2. Varianza de la energía de la simulación.
101
102 Varsim = 0;
103 for g=postauMC:length(t)
104     Varsim=Varsim+(esim(g)-eeqsim).^2;
105 end
106
107 Varsim = Varsim/B
108
109
110 % 3. Calor específico del sistema.
111
112 cvan = (T*(cosh(1./T))).^(-2)
113 cvsim = N*Varsim/(T^2)
114
115 ercv = 100*abs((cvsim-cvan)/cvan)
116
117 % 4. Varianza de la energía analítica
118
119 Varan = T^2*cvan./N
120
121 erVar = 100*(Varsim-Varan)/Varan
122
123 % 5. Sigma.
124
125 sigmaan = T*sqrt(cvan./N);
126 sigma3an = 3*sigmaan
127
128 sigmasim = sqrt(Varsim);
129 sigma3sim = 3*sigmasim
130
131 er3sigma = 100*abs((sigma3sim-sigma3an)/sigma3an)
132
133 %% Representación gráfica
134
135 % Representamos 100 datos equiespaciados entre 0 y length(t).
136 lnt = log(t);
137 a100 = lnt(length(lnt))/100;
138 uno = 1/a100;

```

```

139 tMC = a100*(-2*uno:1.2:100);
140 etMC = exp(tMC);
141 postMC = zeros(1,length(etMC));
142 for a=1:length(etMC)
143     postMC(a)=find(abs(t-etMC(a))==min(abs(t-etMC(a))));
144 end
145
146 % Energía de equilibrio.
147
148 eeqang = eeqan*ones(1,length(tMC));
149
150 % Energía analítica.
151
152 Cli = zeros(1,length(tMC));
153 for g=1:length(tMC)
154     Cli(1,g)=xi+D1(t(postMC(g)));
155 end
156 %Cli = xi+D1(postMC(1:length(etMC)));
157 ean = -Cli;
158
159 % Energía de simulación.
160
161 Clg=C1(postMC(1:length(etMC)));
162 esimg = -Clg(1,:)./N;
163
164 figure(1)
165 hold on
166 p1 = plot(tMC,ean,'-k');
167 p2 = plot(tMC,esimg,'ok');
168 p3 = plot(tMC,eeqang,'--k');
169 xlabel('$\ln t^*$','interpreter','latex','FontSize',16)
170 ylabel('$e$', 'interpreter','latex','FontSize',16)
171 xlim([-2 8])
172 ylim([-0.9 0])
173 xticks([-2 0 2 4 6 8])
174 yticks([-0.8 -0.6 -0.4 -0.2 0])
175 legend('$T^*=1, \:e^{\text{an}}\left(t^*\right)$',...
176     '$T^*=1, \:e^{\text{sim}}\left(t^*\right)$', '$T^*=1, \:e_{\text{eq}}^{\text{an}}$',...
177     '$T^*=2, \:e^{\text{an}}\left(t^*\right)$',...
178     '$T^*=2, \:e^{\text{sim}}\left(t^*\right)$', '$T^*=2, \:e_{\text{eq}}^{\text{an}}$',...
179     '$T^*=4, \:e^{\text{an}}\left(t^*\right)$',...
180     '$T^*=4, \:e^{\text{sim}}\left(t^*\right)$',...
181     '$T^*=4, \:e_{\text{eq}}^{\text{an}}$', 'interpreter','latex')
182 legend('boxoff')
183 %hold off
184
185 frg = zeros(1,length(tMC));
186
187 for g=1:length(tMC)
188     frg(g)=fr(t(postMC(g)));
189 end
190

```

```
191 figure(2)
192 hold on
193 plot(tMC, frg, '-.k')
194 xlabel('$\ln t^*$', 'interpreter', 'latex', 'FontSize', 16)
195 ylabel('$\varphi^{\left(n.l.\right)}$', 'interpreter', 'latex', ...
196       'FontSize', 16)
197 xlim([-2 8])
198 ylim([0 1])
199 xticks([-2 0 2 4 6 8])
200 yticks([0 0.2 0.4 0.6 0.8 1])
201 legend('$T^*=1$', '$T^*=2$', '$T^*=4$', 'interpreter', 'latex')
202 legend('boxoff')
203 %hold off
```

Anexo II. Script del algoritmo de Metropolis. $T_{01}^* = 4$, $T_{02}^* = 1$

```
1 % Este script ejecuta el algoritmo de Metropolis para simular la ...
   respuesta
2 % no lineal de un sistema de N espines que obedece el modelo de Ising con
3 % la dinámica de Glauber. Se representa gráficamente dicha simulación ...
   junto
4 % a las expresiones analíticas de la respuesta no lineal y de la ...
   energía de
5 % equilibrio para 2 cambios finitos de temperatura del foco térmico.
6 clear
7 clc
8 close all
9 format long
10
11 %% Preparación del sistema 1 en el equilibrio a  $T_{01}^*=4$ 
12 %% Solución analítica
13 % Definición de los parámetros del sistema.
14 xi0 = 0;
15 T = 4;
16 xi = tanh(1./T);
17 gamma = tanh(2./T);
18
19 % Integración de la jerarquía de ecuaciones.
20
21 I1 = @(q,t) 2*(pi).^(-1).*(sin(q)).^2.*exp(-2.*(1-gamma.*cos(q))...
22     .*t).*(xi0.*(xi0.^2-2*xi0.*cos(q)+1).^(-1)-xi.*(xi.^2-2*xi.*...
23     cos(q)+1).^(-1));
24
25 D1 = @(t) integral(@(q) I1(q,t), 0, pi);
26
27 fr = @(t) (xi0-xi)^(-1).*integral(@(q) I1(q,t), 0, pi);
28
29 %% Simulación numérica
30
31 % Tiempo a partir del cual consideramos en equilibrio al sistema.
32
33 tau = integral(fr, 0, Inf, 'ArrayValued', true);
34 d = 22;
```

```

35 dtau = d*tau
36
37 % Queremos encontrar la energía de equilibrio de simulación, es ...
    suficiente
38 % con simular hasta dtau+10tau.
39
40 tprom=10*tau;
41 tfinal = dtau+tprom
42
43 % Definición de los parámetros del sistema para la simulación.
44
45 N = 10^3;
46 Ntfinal = N*tfinal;
47 t = linspace(0,tfinal,Ntfinal);
48 S = zeros(N+2,1);
49
50 %% Estado inicial del sistema
51
52 for b=2:N+1
53     ri=rand;
54     if ri>0.5
55         S(b)=1;
56     else
57         S(b)=-1;
58     end
59 end
60 S(1)=S(N+1);
61 S(N+2)=S(2);
62
63 C1 = zeros(1,length(t));
64
65 C1(1) = sum(S(2:N+1).*S(3:N+2));
66
67 %% Algoritmo de Metropolis
68
69 W = zeros(N,1);
70
71 for d=1:length(t)-1
72     s=randi(N)+1;
73     W(s)=(1-gamma./2*S(s)*(S(s-1)+S(s+1)))/2;
74     r=rand;
75     if r<W(s)
76         C1(d+1)=C1(d)-S(s-1)*S(s)-S(s)*S(s+1);
77         S(s)=-S(s);
78         S(1)=S(N+1);
79         S(N+2)=S(2);
80         C1(d+1)=C1(d+1)+S(s-1)*S(s)+S(s)*S(s+1);
81     else
82         C1(d+1)=C1(d);
83     end
84 end
85

```

```

86 esim = -C1(1, :)./N;
87
88 %% Bajada de temperatura en el sistema 1 de  $T_{01}^{\{*\}}=4$  a  $T^{\{*\}}=2$ 
89 %% Solución analítica
90 % Definición de los parámetros del sistema.
91 T0 = 4;
92 xi0 = tanh(1./T0);
93 T = 2;
94 xi = tanh(1./T);
95 gamma = tanh(2./T);
96
97 % Integración de la jerarquía de ecuaciones.
98
99 I1 = @(q,t) 2*(pi).^(-1).*(sin(q)).^2.*exp(-2.*(1-gamma.*cos(q))...
100     .*t).*(xi0.*(xi0.^2-2*xi0.*cos(q)+1).^(-1)-xi.*(xi.^2-2*xi.*...
101     cos(q)+1).^(-1));
102
103 D1 = @(t) integral(@(q) I1(q,t), 0, pi);
104
105 fr = @(t) (xi0-xi)^(-1).*integral(@(q) I1(q,t), 0, pi);
106
107 %% Simulación numérica
108
109 % Tiempo a partir del cual consideramos en equilibrio al sistema.
110
111 tau = integral(fr, 0, Inf, 'ArrayValued', true);
112 d = 22;
113 dtau = d*tau
114
115 % Promediamos durante 1000*<tau>.
116
117 tprom=10^3*tau;
118 tfinal = dtau+tprom
119
120 % Definición de los parámetros del sistema para la simulación.
121
122 N = 10^3;
123 Ntfinal = N*tfinal;
124 t = linspace(0, tfinal, Ntfinal);
125
126 %% Estado inicial del sistema
127
128 % No hace falta especificar en el código el estado inicial de espines,
129 % porque el valor actual de S es ya su estado inicial.
130
131 C1 = zeros(1, length(t));
132
133 C1(1) = sum(S(2:N+1).*S(3:N+2));
134
135 %% Algoritmo de Metropolis
136
137 W = zeros(N, 1);

```

```

138
139 for d=1:length(t)-1
140     s=randi(N)+1;
141     W(s)=(1-gamma./2*S(s)*(S(s-1)+S(s+1)))/2;
142     r=rand;
143     if r<W(s)
144         C1(d+1)=C1(d)-S(s-1)*S(s)-S(s)*S(s+1);
145         S(s)=-S(s);
146         S(1)=S(N+1);
147         S(N+2)=S(2);
148         C1(d+1)=C1(d+1)+S(s-1)*S(s)+S(s)*S(s+1);
149     else
150         C1(d+1)=C1(d);
151     end
152 end
153
154 esim = -C1(1,:)./N;
155
156 %% Cálculo de propiedades del sistema
157
158 % 1. Energía de equilibrio del sistema.
159
160 eeqan = -tanh(1/T)
161
162 postauMC = find(abs(t-dtau)==min(abs(t-dtau)));
163 B = length(t)-postauMC+1
164
165 eeqsim=sum(esim(postauMC:length(t)));
166 eeqsim = eeqsim/B;
167
168 ereeq = 100*abs((eeqsim-eeqan)/eeqan)
169
170 % 2. Varianza de la energía de la simulación.
171
172 Varsim = 0;
173 for g=postauMC:length(t)
174     Varsim=Varsim+(esim(g)-eeqsim).^2;
175 end
176
177 Varsim = Varsim/B
178
179
180 % 3. Calor específico del sistema.
181
182 cvan = (T*(cosh(1./T))).^(-2)
183 cvsim = N*Varsim/(T^2)
184
185 ercv = 100*abs((cvsim-cvan)/cvan)
186
187 % 4. Varianza de la energía analítica.
188
189 Varan = T^2*cvan./N

```

```

190
191 erVar = 100*(Varsim-Varan)/Varan
192
193 % 5. Sigma.
194
195 sigmaan = T*sqrt(cvan./N);
196 sigma3an = 3*sigmaan
197
198 sigmasim = sqrt(Varsim);
199 sigma3sim = 3*sigmasim
200
201 er3sigma = 100*abs((sigma3sim-sigma3an)/sigma3an)
202
203 %% Representación gráfica del sistema 1
204
205 % Representamos 100 datos equiespaciados entre 0 y length(t).
206 lnt = log(t);
207 a100 = lnt(length(lnt))/100;
208 uno = 1/a100;
209 tMC = a100*(-2*uno:1.2:100);
210 etMC = exp(tMC);
211 postMC = zeros(1,length(etMC));
212 for a=1:length(etMC)
213     postMC(a)=find(abs(t-etMC(a))==min(abs(t-etMC(a)))));
214 end
215
216 % Energía de equilibrio.
217
218 % eeqang = eeqan*ones(1,length(tMC));
219
220 % Energía analítica.
221
222 Cli = zeros(1,length(tMC));
223 for g=1:length(tMC)
224     Cli(1,g)=xi+D1(t(postMC(g)));
225 end
226 %Cli = xi+D1(postMC(1:length(etMC)));
227 ean = -Cli;
228
229 % Energía de simulación.
230
231 Clg=C1(postMC(1:length(etMC)));
232 esimg = -Clg(1,:)./N;
233
234 figure(1)
235 hold on
236 plot(tMC,ean,'-r');
237 plot(tMC,esimg,'or');
238 %plot(tMC,eeqang,'--k');
239 xlabel('$\ln t^*$','interpreter','latex')
240 ylabel('$e$', 'interpreter','latex')
241

```



```

242 frg = zeros(1,length(tMC));
243
244 for g=1:length(tMC)
245     frg(g)=fr(t(postMC(g)));
246 end
247
248 figure(2)
249 hold on
250 plot(tMC,frg,'-r')
251 xlabel('$\ln t^*$','interpreter','latex')
252 ylabel('$\varphi^{\left(n.l.\right)}$',...
253     'interpreter','latex')
254
255 %% Preparación del sistema 2 en el equilibrio a  $T_{02}^*=1$ 
256 %% Solución analítica
257 % Definición de los parametros del sistema.
258 xi0 = 0;
259 T = 1;
260 xi = tanh(1./T);
261 gamma = tanh(2./T);
262
263 % Integración de la jerarquía de ecuaciones.
264
265 I1 = @(q,t) 2*(pi).^(-1).*(sin(q)).^2.*exp(-2.*(1-gamma.*cos(q))...
266     .*t).*(xi0.*(xi0.^2-2*xi0.*cos(q)+1).^(-1)-xi.*(xi.^2-2*xi.*...
267     cos(q)+1).^(-1));
268
269 D1 = @(t) integral(@(q)I1(q,t),0,pi);
270
271 fr = @(t) (xi0-xi)^(-1).*integral(@(q)I1(q,t),0,pi);
272
273 %% Simulación numérica
274
275 % Tiempo a partir del cual consideramos en equilibrio al sistema.
276
277 tau = integral(fr,0,Inf,'ArrayValued',true);
278 d = 22;
279 dtau = d*tau
280
281 % Queremos encontrar la energía de equilibrio de simulación, es ...
282     suficiente
283 % con simular hasta dtau+10tau.
284
285 tprom=10*tau;
286 tfinal = dtau+tprom
287
288 % Definición de los parametros del sistema para la simulación.
289
290 N = 10^3;
291 Ntfinal = N*tfinal;
292 t = linspace(0,tfinal,Ntfinal);
293 S = zeros(N+2,1);

```

```

293
294 %% Estado inicial del sistema
295
296 for b=2:N+1
297     ri=rand;
298     if ri>0.5
299         S(b)=1;
300     else
301         S(b)=-1;
302     end
303 end
304 S(1)=S(N+1);
305 S(N+2)=S(2);
306
307 C1 = zeros(1,length(t));
308
309 C1(1) = sum(S(2:N+1).*S(3:N+2));
310
311 %% Algoritmo de Metropolis
312
313 W = zeros(N,1);
314
315 for d=1:length(t)-1
316     s=randi(N)+1;
317     W(s)=(1-gamma./2*S(s)*(S(s-1)+S(s+1)))/2;
318     r=rand;
319     if r<W(s)
320         C1(d+1)=C1(d)-S(s-1)*S(s)-S(s)*S(s+1);
321         S(s)=-S(s);
322         S(1)=S(N+1);
323         S(N+2)=S(2);
324         C1(d+1)=C1(d+1)+S(s-1)*S(s)+S(s)*S(s+1);
325     else
326         C1(d+1)=C1(d);
327     end
328 end
329
330 esim = -C1(1,:)./N;
331
332 %% Subida de temperatura en el sistema 2 de  $T_{02}^{\{*\}}=1$  a  $T^{\{*\}}=2$ 
333 %% Solución analítica
334 % Definición de los parametros del sistema.
335 T0 = 1;
336 xi0 = tanh(1./T0);
337 T = 2;
338 xi = tanh(1./T);
339 gamma = tanh(2./T);
340
341 % Integración de la jerarquía de ecuaciones.
342
343 I1 = @(q,t) 2*(pi).^(-1).*(sin(q)).^2.*exp(-2.*(1-gamma.*cos(q))...
344     .*t).*(xi0.*(xi0.^2-2*xi0.*cos(q)+1).^(-1)-xi.*(xi.^2-2*xi.*...

```

```

345     cos(q)+1).^(-1));
346
347 D1 = @(t) integral(@(q)I1(q,t),0,pi);
348
349 fr = @(t) (xi0-xi)^(-1).*integral(@(q)I1(q,t),0,pi);
350
351 %% Simulación numérica
352
353 % Tiempo a partir del cual consideramos en equilibrio al sistema.
354
355 tau = integral(fr,0,Inf,'ArrayValued',true);
356 d = 22;
357 dtau = d*tau
358
359 % Promediamos durante 1000*<tau>.
360
361 tprom=10^3*tau;
362 tfinal = dtau+tprom
363
364 % Definición de los parámetros del sistema para la simulación.
365
366 N = 10^3;
367 Ntfinal = N*tfinal;
368 t = linspace(0,tfinal,Ntfinal);
369
370 %% Estado inicial del sistema
371
372 % No hace falta especificar en el código el estado inicial de espines,
373 % porque el valor actual de S es ya su estado inicial.
374
375 C1 = zeros(1,length(t));
376
377 C1(1) = sum(S(2:N+1).*S(3:N+2));
378
379 %% Algoritmo de Metropolis
380
381 W = zeros(N,1);
382
383 for d=1:length(t)-1
384     s=randi(N)+1;
385     W(s)=(1-gamma./2*S(s)*(S(s-1)+S(s+1)))/2;
386     r=rand;
387     if r<W(s)
388         C1(d+1)=C1(d)-S(s-1)*S(s)-S(s)*S(s+1);
389         S(s)=-S(s);
390         S(1)=S(N+1);
391         S(N+2)=S(2);
392         C1(d+1)=C1(d+1)+S(s-1)*S(s)+S(s)*S(s+1);
393     else
394         C1(d+1)=C1(d);
395     end
396 end

```

```

397
398 esim = -C1(1, :)./N;
399
400 %% Cálculo de propiedades del sistema
401
402 % 1. Energía de equilibrio del sistema.
403
404 eeqan = -tanh(1/T)
405
406 postauMC = find(abs(t-dtau)==min(abs(t-dtau)));
407 B = length(t)-postauMC+1
408
409 eeqsim=sum(esim(postauMC:length(t)));
410 eeqsim = eeqsim/B;
411
412 ereeq = 100*abs((eeqsim-eeqan)/eeqan)
413
414 % 2. Varianza de la energía de la simulación.
415
416 Varsim = 0;
417 for g=postauMC:length(t)
418     Varsim=Varsim+(esim(g)-eeqsim).^2;
419 end
420
421 Varsim = Varsim/B
422
423
424 % 3. Calor específico del sistema.
425
426 cvan = (T*(cosh(1./T))).^(-2)
427 cvsim = N*Varsim/(T^2)
428
429 ercv = 100*abs((cvsim-cvan)/cvan)
430
431 % 4. Varianza de la energía analítica.
432
433 Varan = T^2*cvan./N
434
435 erVar = 100*(Varsim-Varan)/Varan
436
437 % 5. Sigma.
438
439 sigmaan = T*sqrt(cvan./N);
440 sigma3an = 3*sigmaan
441
442 sigmasim = sqrt(Varsim);
443 sigma3sim = 3*sigmasim
444
445 er3sigma = 100*abs((sigma3sim-sigma3an)/sigma3an)
446
447 %% Representación gráfica del sistema 2
448

```

```

449 % Representamos 100 datos equiespaciados entre 0 y length(t).
450 lnt = log(t);
451 a100 = lnt(length(lnt))/100;
452 uno = 1/a100;
453 tMC = a100*(-2*uno:1.2:100);
454 etMC = exp(tMC);
455 postMC = zeros(1,length(etMC));
456 for a=1:length(etMC)
457     postMC(a)=find(abs(t-etMC(a))==min(abs(t-etMC(a))));
458 end
459
460 % Energia de equilibrio.
461
462 eeqang = eeqan*ones(1,length(tMC));
463
464 % Energia analítica.
465
466 Cli = zeros(1,length(tMC));
467 for g=1:length(tMC)
468     Cli(1,g)=xi+D1(t(postMC(g)));
469 end
470 %Cli = xi+D1(postMC(1:length(etMC)));
471 ean = -Cli;
472
473 % Energía de simulación.
474
475 Clg=C1(postMC(1:length(etMC)));
476 esimg = -Clg(1,:)./N;
477
478 figure(1)
479 hold on
480 plot(tMC,eeqang,'--k');
481 plot(tMC,ean,'-.b');
482 plot(tMC,esimg,'*b');
483 xlabel('$\ln t^*$','interpreter',...
484     'latex','FontSize',16)
485 ylabel('$e$','interpreter','latex',...
486     'FontSize',16)
487 xlim([-2 8])
488 ylim([-0.75 -0.25])
489 xticks([-2 0 2 4 6 8])
490 yticks([-0.7 -0.6 -0.5 -0.4 -0.3])
491 legend('$T^*_{01}=4, \backslash:e^{\text{an}}\left(t^*\right)$',...
492     '$T^*_{01}=4, \backslash:e^{\text{sim}}\left(t^*\right)$','$e^{\text{an}}_{\text{eq}}$',...
493     '$T^*_{02}=1, \backslash:e^{\text{an}}\left(t^*\right)$',...
494     '$T^*_{02}=1, \backslash:e^{\text{sim}}\left(t^*\right)$','interpreter','latex')
495 legend('boxoff')
496
497 frg = zeros(1,length(tMC));
498
499 for g=1:length(tMC)
500     frg(g)=fr(t(postMC(g)));

```

```

501 end
502
503 figure(2)
504 hold on
505 plot(tMC, frg, '-.b')
506 xlabel('$\ln t^*$', 'interpreter', ...
507         'latex', 'FontSize', 16)
508 ylabel('$\varphi^{\left(n.l.\right)}$', ...
509         'interpreter', 'latex', 'FontSize', 16)
510 xlim([-2 8])
511 ylim([0 1])
512 xticks([-2 0 2 4 6 8])
513 yticks([0 0.2 0.4 0.6 0.8 1])
514 legend('$T^*_{01}=4, \backslash:T^*=2$', '$T^*_{02}=1, \backslash:T^*=2$', 'interpreter', ...
515         'latex')
516 legend('boxoff')

```

Bibliografía

- [1] N. G. Van Kampen. *Stochastic processes in physics and chemistry*. (Elsevier, Madrid, 2007).
- [2] A. N. Kolmogorov. *Foundations of the Theory of Probability*. (Chelsea Publishing Company, New York, 1956).
- [3] R. J. Glauber. “Time-Dependent Statistics of the Ising Model”. En: *Journal of Mathematical Physics* **4**, 294-307 (1963).
- [4] J. J. Brey Abalo, J. de la Rubia Pacheco y J. de la Rubia Sánchez. *Mecánica Estadística*. (Universidad Nacional de Educación a Distancia, Madrid, 2001).
- [5] C. M. Bender y S. A. Orszag. *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I. Asymptotic Methods and Perturbation Theory*. (Springer, New York, 1999).
- [6] J. J. Brey y A. Prados. “Stretched exponential decay at intermediate times in the one-dimensional Ising model at low temperatures”. En: *Physica A* **197**, 569-582 (1993).
- [7] D. Bedeaux, K. E. Shuler e I. Oppenheim. “Decay of correlations. III. Relaxation of spin correlations and distribution functions in the one-dimensional Ising lattice”. En: *Journal of Statistical Physics* **2**, 1-19 (1970).
- [8] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller y E. Teller. “Equation of state calculations by fast computing machines”. En: *The Journal of Chemical Physics* **21**, 1087-1092 (1953).
- [9] A. Prados, J. J. Brey y B. Sánchez-Rey. “A dynamical Monte Carlo algorithm for master equations with time-dependent transition rates”. En: *Journal of Statistical Physics* **89**, 709-734 (1997).
- [10] A. B. Bortz, M. H. Kalos y J. L. Lebowitz. “A dynamical Monte Carlo algorithm for master equations with time-dependent transition rates”. En: *Journal of Computational Physics* **17**, 10-18 (1975).
- [11] F. Y. Wu. “The Potts model”. En: *Reviews of Modern Physics* **54**, 235-268 (1982).
- [12] Z. Lu y O. Raz. “Nonequilibrium thermodynamics of the Markovian Mpemba effect and its inverse”. En: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **114**, 1087-1092 (2017).