

# Índice

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Transiciones de 1<sup>er</sup> orden débiles</b>	<b>13</b>
2.1	Introducción . . . . .	13
2.2	Cristales líquidos . . . . .	15
2.3	Potenciales efectivos . . . . .	17
2.4	Un modelo simple . . . . .	23
2.5	El modelo de Potts . . . . .	23
2.6	Resultados analíticos . . . . .	25
2.6.1	Aproximación del campo medio . . . . .	25
2.6.2	Resultados usando potenciales efectivos . . . . .	28
2.7	Resultados numéricos . . . . .	30
2.7.1	Método numérico . . . . .	31
2.7.2	Observables . . . . .	31
2.7.3	Resultados para $q = 7$ . . . . .	33
2.7.4	Resultados para $q = 10$ . . . . .	35
2.8	Crossing . . . . .	36
2.8.1	Resultados numéricos . . . . .	41
2.9	Conclusiones . . . . .	43
<b>3</b>	<b>El Modelo U(1)–Higgs</b>	<b>45</b>
3.1	Introducción . . . . .	45
3.2	Formulación del modelo . . . . .	46
3.3	Comportamiento crítico . . . . .	46
3.3.1	Descripción del espacio de parámetros . . . . .	46
3.4	Sistemas relacionados . . . . .	53
3.5	Observables . . . . .	54
3.6	El método numérico . . . . .	56
3.7	Medidas . . . . .	60
3.8	Resultados . . . . .	62

3.8.1	Calor latente . . . . .	62
3.8.2	Autovalor máximo . . . . .	66
3.8.3	Susceptibilidad . . . . .	67
3.8.4	Calor específico . . . . .	69
3.8.5	Análisis de tamaño finito . . . . .	69
3.9	Conclusiones . . . . .	73
<b>4</b>	<b>U(1)–Higgs <math>q = 8</math> y <math>Z(8)</math> puro gauge.</b>	<b>75</b>
4.1	Introducción . . . . .	75
4.2	El modelo $Z(8)$ puro gauge . . . . .	78
4.3	El modelo U(1)–Higgs con carga $q = 8$ . . . . .	82
4.4	Conclusiones . . . . .	84
<b>5</b>	<b>Vidrios de Espín: Generalidades</b>	<b>87</b>
5.1	Introducción . . . . .	87
5.2	Generalidades . . . . .	87
5.3	Desorden <i>Annealed</i> y <i>Quenched</i> . . . . .	89
5.4	El modelo SK generalizado . . . . .	90
5.5	Caracterización de los estados puros . . . . .	99
5.6	El modelo SK generalizado de nuevo . . . . .	101
5.7	Modelos de alcance finito . . . . .	104
<b>6</b>	<b>El modelo de Ising <math>4d</math> Spin Glass</b>	<b>107</b>
6.1	Introducción . . . . .	107
6.2	El modelo . . . . .	108
6.3	Observables . . . . .	108
6.4	Detalles de la simulación . . . . .	113
6.5	Resultados . . . . .	115
6.5.1	Resultados para $h = 0$ . . . . .	115
6.5.2	Resultados para $h = 0.6$ . . . . .	117
6.5.3	Resultados para $h = 0.3$ . . . . .	120
6.6	Conclusiones . . . . .	128
<b>7</b>	<b>RTN</b>	<b>129</b>
7.1	La máquina RTN . . . . .	129
<b>8</b>	<b>Utilización de RTN en C</b>	<b>135</b>
8.1	Introducción . . . . .	135
8.2	Root.c . . . . .	135
8.3	Controller.c . . . . .	136
8.4	Worker.c . . . . .	142
8.5	Paralelización de un programa tipo . . . . .	145

<b>A</b>	<b>Método de la densidad espectral</b>	<b>153</b>
A.1	Método de la densidad espectral . . . . .	153
A.1.1	Histogramas unidimensionales . . . . .	153
A.1.2	Histogramas Múltiples . . . . .	155
<b>B</b>	<b>El Método del jackknife</b>	<b>157</b>
<b>C</b>	<b>Exponentes críticos y tamaño finito</b>	<b>159</b>
C.1	Exponentes críticos . . . . .	159
C.2	Relaciones de escala . . . . .	162
C.3	Tamaño finito . . . . .	164
C.3.1	Transiciones de fase de segundo orden . . . . .	164
C.3.2	Transiciones de fase de primer orden . . . . .	166
<b>D</b>	<b>Programación paralela en C</b>	<b>169</b>
D.1	Introducción . . . . .	169
D.2	Dos ejemplos . . . . .	169
D.2.1	Dos procesos en un mismo procesador . . . . .	169
D.2.2	Dos procesos en dos procesadores . . . . .	173



# Índice de Figuras

2.1	Estimación asintótica del inverso de la longitud de correlación para QCD a temperatura finita. El ajuste que se sobreimpone corresponde con $\nu = 1/2$ . . . . .	14
2.2	Potencial efectivo de De Gennes. . . . .	16
2.3	Envolvente convexa de un potencial efectivo no convexo. . .	18
2.4	Forma usual de la función $J = J(\vec{O})$ . Se representa además la construcción de Maxwell. . . . .	20
2.5	Mínimo absoluto de $\Gamma(\vec{O}) + J\vec{O}$ como función de $J$ . . . . .	20
2.6	Energía libre de Gibbs $\phi$ . . . . .	21
2.7	Calor específico y longitud de correlación tanto para Potts $q = 7$ como $q = 10$ . Los puntos sobre el eje X (eje central) representan nuestra estimación de $\beta^*$ . . . . .	32
2.8	Masa al cuadrado frente a $\beta$ para Potts con 7 estados (círculos llenos). Con rombo se señala la estimación del inverso del cuadrado de la longitud de correlación en $\beta_c$ . . . . .	34
2.9	Masa al cuadrado frente a $\beta$ para Potts con 10 estados (círculos llenos). Con rombo se señala la estimación del inverso del cuadrado de la longitud de correlación en $\beta_c$ . . . . .	35
2.10	Inverso de la longitud de correlación para el modelo de Ising tridimensional. En línea discontinua se representa la estimación asintótica $m = 5.0(\beta - \beta_c)^\nu$ con $\beta_c = 0.221654$ y $\nu = 0.629$ . Los símbolos son los siguientes: $L = 16$ rombos, $L = 24$ triángulos invertidos, $L = 36$ cuadrados y $L = 48$ triángulos. . . . .	39
2.11	Inverso de la longitud de correlación para el modelo de Potts tridimensional con tres estados para tres retículos diferentes. Los símbolos utilizados son: $L = 8$ rombos, $L = 12$ triángulos invertidos y $L = 24$ cuadrados. . . . .	40

2.12	<i>Crossing</i> en el modelo de Potts con 4 estados. Las líneas continuas se han calculado mediante el método de la densidad espectral basado en simulaciones a $\beta = 1.08$ . Los símbolos que caracterizan las curvas anteriores son: $L = 10$ triángulo invertido vacío, $L = 16$ cuadrado vacío y $L = 24$ rombo vacío. También se superponen los resultados de tres simulaciones directas realizadas en $\beta = 1.04$ . Para estos puntos usamos: $L = 10$ triángulo invertido lleno, $L = 16$ cuadrado lleno y $L = 24$ rombo lleno. . . . .	42
3.1	Diagrama de fases del modelo U(1)–Higgs. . . . .	52
3.2	En la parte superior presentamos un histograma tipo de la variable $E_{\perp}$ . En la parte inferior representamos el ajuste con un <i>cubic spline</i> a los dos máximos que nos permite evaluar el calor latente. Los datos corresponden a 500000 pasos de Monte Carlo en un retículo $L = 16$ en el punto $(\beta, \kappa) = (0.8495, 0.525)$ . . . . .	57
3.3	En la parte superior presentamos $E_{\perp}$ y en la inferior $\partial E_{\perp} / \partial c_{\perp}$ obtenidos usando el método de la densidad espectral en una simulación a $(\beta, \kappa) = (0.8495, 0.525)$ con 500000 pasos de Monte Carlo. Los círculos llenos representan el punto de la simulación. . . . .	58
3.4	Ejemplo de algunos histogramas usados en el método de la densidad espectral de $L = 8$ en la parte superior y $L = 12$ en la parte inferior. La columna de la izquierda corresponde a los parámetros $(\beta, \kappa) = (0.854, 0.52)$ mientras que en la columna de la derecha $(\beta, \kappa) = (0.835, 0.54)$ . . . . .	59
3.5	Valor medio de $E_L$ como función de $(\beta, \kappa)$ calculado mediante el método de los multihistogramas cerca del punto crítico en un retículo $L = 8$ . . . . .	60
3.6	$E_{\perp}$ como función de $c_{\perp}$ . Las líneas continuas son ajustes tipo potencias a los datos. . . . .	63
3.7	Calor latente al cuadrado $(\Delta E)^2$ como función de $1/L^2$ . . . . .	64
3.8	Calor latente al cuadrado, $\Delta E_{\perp}^2$ , en función de $c_{\parallel}$ . . . . .	65
3.9	Máximo autovalor de la matriz de fluctuaciones en función de $c_{\parallel}$ . La línea continua ha sido obtenida mediante el método de los multihistogramas. . . . .	66
3.10	Inverso de la susceptibilidad en ausencia de coexistencia de fases como función de $c_{\parallel}$ . La línea continua se ha obtenido mediante el método de los multihistogramas. . . . .	67

3.11	Inverso de la susceptibilidad a ambos lados de la transición. Sólo para datos de los retículos $L = 16$ (círculos) y $L = 24$ (triángulos). . . . .	68
3.12	Autovalor mínimo de la matriz de fluctuaciones en función de $c_{\parallel}$ . . . . .	70
3.13	$c_{\parallel}^c(L)$ en función de $1/L^2$ . . . . .	71
3.14	Punto crítico aparente $k^c$ en función de $1/L^2$ . . . . .	72
4.1	Descripción cualitativa del diagrama de fases del modelo U(1)-Higgs con carga $q \geq 5$ . . . . .	77
4.2	Gráfico bilogarítmico para el calor específico como función del tamaño del retículo para $\kappa = \infty(Z_8)$ y $\kappa = 3$ . La pendiente de la línea discontinua corresponde a un comportamiento de primer orden. . . . .	80
4.3	Histogramas de energía de nuestras simulaciones para $L = 8, 12, 16$ . . . . .	81
4.4	Calor latente como función del inverso del tamaño del retículo al cuadrado. Las líneas continuas corresponden a ajustes lineales. . . . .	82
5.1	El elemento de matriz $Q_{ab}$ se obtiene calculando el solapamiento del primer ancestro común de las réplicas (estados) $a$ y $b$ . . . . .	98
6.1	Cumulante de Binder a campo magnético nulo para tres tamaños $L = 3, 4, 5$ . Los símbolos son: círculo lleno $L = 3$ , triángulo $L = 4$ y rombo $L = 5$ . . . . .	115
6.2	Análisis de tamaño finito para la susceptibilidad no lineal a campo magnético nulo. Los mismos símbolos que en la figura anterior. . . . .	116
6.3	Gráfico bilogarítmico de la susceptibilidad no lineal para campo magnético $h = 0.6$ en función del tamaño del retículo para 7 diferentes temperaturas. Los símbolos son: $T = 2.5$ círculo lleno, $T = 2.25$ triángulo, $T = 2.0$ rombo, $T = 1.75$ $\times$ , $T = 1.5$ $+$ , $T = 1.25$ cuadrado vacío y $T = 1.0$ cuadrado lleno. . . . .	118
6.4	Estudio de tamaño finito para la susceptibilidad no lineal a campo $h = 0.6$ para diferentes tamaños y temperaturas. Los símbolos son: círculo lleno $L = 3$ , triángulo $L=4$ , rombo $L = 5$ , $\times$ $L = 6$ y $+$ $L = 7$ . . . . .	119
6.5	Cumulante de Binder a campo magnético $h = 0.4$ . . . . .	120
6.6	<i>Skewness</i> a campo magnético $h = 0.4$ . . . . .	121

6.7	$P( q )$ para $h = 0.3$ y $T = 1.25$ para tres tamaños. Nótese la contribución de los solapamientos negativos. . . . .	122
6.8	$P^e(q^e)$ para $h = 0.3$ y $T = 1.25$ para tres tamaños. Se observan claramente dos picos y la ausencia de contribución de los solapamientos negativos . . . . .	123
6.9	Gráfico bilogarítmico de $\chi_{nl}^e$ en función del tamaño del retículo para $h = 0.3$ . . . . .	124
6.10	Estudio de tamaño finito de $\chi_{nl}^e$ para $h = 0.3$ . . . . .	125
6.11	Gráfico bilogarítmico de $\chi_{nl}$ en función del tamaño del retículo para $h = 0.3$ . . . . .	126
6.12	Estudio de tamaño finito de $\chi_{nl}$ para $h = 0.3$ . . . . .	127
7.1	Diagrama lógico de la máquina RTN. . . . .	130
7.2	Tarjeta Base. . . . .	131
7.3	Control de las señales de Event por la Altera. . . . .	132
7.4	Interconexiones entre las 8 tarjetas. . . . .	134
8.1	Descripción de la distribución en blancas y negras en un retículo bidimensional. En línea continua se representa la parte del retículo correspondiente a un transputer, mientras que con línea discontinua se marca la parte del retículo almacenada en el transputer anterior. . . . .	146
D.1	Dos procesos en un mismo procesador. . . . .	170
D.2	Dos procesos en dos procesadores. . . . .	173

# Capítulo 1

## Introducción

En las décadas de los 50 y 60 se encontraron profundas conexiones entre la Teoría Cuántica de Campos (TCC) y la Mecánica Estadística. Una TCC definida en un espacio de Minkowski  $D$ -dimensional ( $D - 1$  direcciones espaciales y una dirección temporal) está relacionada con una TCC definida en el espacio euclídeo  $D$ -dimensional mediante continuación analítica (Rotación de Wick).

Si ahora cuantizamos esta última teoría mediante integrales de camino obtenemos una Mecánica Estadística Clásica (MEC). Obviamente la MEC es una disciplina mucho más antigua que la TCC y tenemos una intuición física mucho mayor: es más directo trabajar con probabilidades (pesos de Boltzmann) que amplitudes complejas. Así que podemos usar todas las herramientas desarrolladas en MEC para estudiar problemas en TCC.

Obviamente la relación entre ambas disciplinas es bidireccional. Uno de los mayores logros en MEC ha sido el cálculo de los exponentes críticos mediante técnicas desarrolladas en TCC (diagramas de Feynman, funciones  $\beta$ , ecuaciones de Callan-Symanzik, etc)

Con el trabajo de Wilson [1] podemos definir una TCC, incluso para valores grandes de la constante de acoplamiento, estudiando los puntos fijos de las Transformaciones del Grupo de Renormalización (TGR) de la MEC subyacente.

El trabajo presentado en esta tesis se enmarca en la anterior presentación. Debido que para definir una TCC no trivial, es condición necesaria pero no suficiente encontrar puntos en el espacio de fases en los cuales la longitud de correlación diverge. Es decir, debemos buscar transiciones de fase de segundo orden donde definir el límite continuo de la MEC para obtener la TCC.

Algunas veces en la búsqueda de estos puntos críticos donde la lon-

gitud de correlación diverge nos encontramos con transiciones de primer orden con longitud de correlación muy grande. Si simulamos numéricamente estas transiciones encontramos unos efectos pretransicionales muy fuertes que algunas veces difuminan la verdadera transición de primer orden y nos hacen creer en la existencia de una transición de segundo orden. En TCC un ejemplo del comportamiento anterior es la transición de fase desconfiante en QCD a temperatura finita [2]. En el capítulo segundo estudiamos estos efectos en el modelo de Potts bidimensional. Veremos como podemos caracterizar estos efectos pretransicionales mediante la distancia entre el verdadero punto crítico y el punto donde desaparecen los estados metaestables desordenados. También caracterizaremos los citados efectos mediante unos “exponentes críticos”.

Otra posible fuente de confusión a la hora de determinar el orden de una transición ha sido el estudio de tamaño finito de la longitud de correlación. En la transición de fase de QCD anteriormente citada se encontró que las curvas de la masa se cortaban en un entorno del punto crítico. Debido a que se asumía que la existencia de este cruzamiento implicaba que la transición era de primer orden éste fue uno de los argumentos que se proporcionó para afirmar que la anterior transición era de primer orden, lo que realmente ocurre. En la última sección del capítulo segundo presentaremos un ejemplo, también basado en el modelo de Potts bidimensional, en el que aparece *crossing* en una transición de segundo orden. Demostrando, así, que el argumento de que sólo existe *crossing* en las transiciones de fase de primer orden es falaz.

En los capítulos tercero y cuarto estudiamos los modelos de electrodinámica escalar con cargas  $q = 1$  y  $q = 8$ . En ambos casos estudiamos una gran región del espacio de parámetros. Encontramos para  $q = 1$  la existencia de una línea de transiciones de primer orden que finaliza en una transición de segundo orden análoga a la transición líquido–vapor. Hemos caracterizado numéricamente tanto esta línea como el punto final y hemos calculado los exponentes críticos. En el caso  $q = 8$  hemos estudiado el modelo  $Z(8)$  y la línea que emerge de él y que finaliza en el modelo XY y hemos encontrado, en contra de lo que hasta ahora se creía, que presenta una transición de primer orden y que la línea que emerge es de primer orden, no de segundo como consta en la bibliografía. Como se ha citado anteriormente la búsqueda de puntos críticos constituye el primer paso para definir un límite no trivial de una TCC.

Otro campo de la MEC que está siendo muy activo es el estudio de sistemas desordenados, en particular de los vidrios de espín (*spin glass*). Ciertamente no existe una relación estrecha, por ahora, entre lo tratado en los primeros capítulos y estos sistemas aunque existen algunos trabajos que relacionan a los vidrios de espín con las teorías gauge. [3].

Uno de los mayores avances en este campo fue la solución de Parisi [4, 5] para la teoría de campo medio [3] que describe una fase *spin-glass* compuesta por un conjunto de estados puros, cuyo número diverge en el límite termodinámico, y que están separados por altas barreras de energía libre. Algunos autores la critican porque su comportamiento les parece muy patológico [79] y creen que no sobrevivirá si la interacción es de corto alcance. Por lo tanto, es muy interesante examinar si todas las características de esta solución se mantienen en estos modelos (más realistas físicamente).

Los vidrios de espín son sistemas computacionalmente complejos (NP-completos) [3] y por lo tanto un esfuerzo de cálculo muy grande es necesario. Para estudiar estos sistemas hemos usado la máquina RTN descrita anteriormente. En el capítulo quinto presentamos un compendio de resultados sobre vidrios de espín motivándolos con la resolución del modelo SK generalizado. También aprovechamos este capítulo para introducir la notación del capítulo siguiente.

En el capítulo sexto estudiamos la transición de fase del modelo de Ising 4-dimensional *spin-glass*. Este estudio es el paso previo para un estudio en profundidad del modelo tridimensional que es bastante más difícil computacionalmente al estar más cerca de la dimensión crítica inferior. Este estudio lo realizamos con y sin campo magnético. Los resultados están de acuerdo con la visión que emana de la solución de Parisi y son contrarios a algunas predicciones de la teoría de los *droplets* [72]. Hemos caracterizado la línea de la transición y dado sus exponentes críticos.

Una parte de la tesis ha consistido en el desarrollo de *software* de control para la máquina RTN (que ha sido usada para realizar gran parte de los cálculos de esta tesis). Una descripción de esta máquina se realiza en el capítulo séptimo. Este *software* permite trabajar con topologías toroidales muy útiles cuando se requieren condiciones de contorno periódicas. Los programas desarrollados se describen en el capítulo octavo. Junto a estos programas de control se describe el procedimiento que hemos seguido en la paralelización de los programas que hemos usado en esta tesis.

Finalmente presentamos cuatro apéndices complementarios a la tesis en los que se describen técnicas muy usadas en los capítulos anteriores como son el método de la densidad espectral (Apéndice A), cálculo de errores (Apéndice B), técnicas de tamaño finito (Apéndice C) y una introducción a la paralelización de programas en C (Apéndice D).



## Capítulo 2

# Transiciones de fase de primer orden débiles

### 2.1 Introducción

Las transiciones de primer orden débiles son bastante frecuentes en los sistemas que usualmente se estudian en Mecánica Estadística. Podemos caracterizar estas transiciones por el hecho de que las discontinuidades que aparecen son pequeñas, *e.g.* el calor latente. En esta tesis se profundiza en la caracterización de estas transiciones mediante el estudio de su comportamiento pretransicional que ha sido apuntado en las referencias [6, 7]. Veremos que este comportamiento está dominado por la temperatura a la cual desaparecen los estados metaestables, lo que nos da una medida de la debilidad de la transición: la distancia entre la citada temperatura y el verdadero punto crítico.

Comprobaremos que cerca de la transición, pero no demasiado (que podemos definir como zona pretransicional) la transición se comporta como si fuera de segundo orden con un punto de divergencia que está más allá del punto de primer orden. Por lo tanto podemos adelantar una imagen de las transiciones de fase de primer orden débiles. La verdadera transición de primer orden se ve anticipada por un efecto precursor, efecto pretransicional, que consiste en un comportamiento tipo ley de potencia, figura 2.1. Este comportamiento, si se “continuase”, divergiría a la temperatura a la cual desaparecen los estados metaestables desordenados. Esta “continuación” se ve interrumpida por la aparición de la transición de primer orden<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>De la discusión anterior se desprende que no hay ningún impedimento para extender el argumento a las transiciones de primer orden. Lo que ocurrirá es que la diferencia

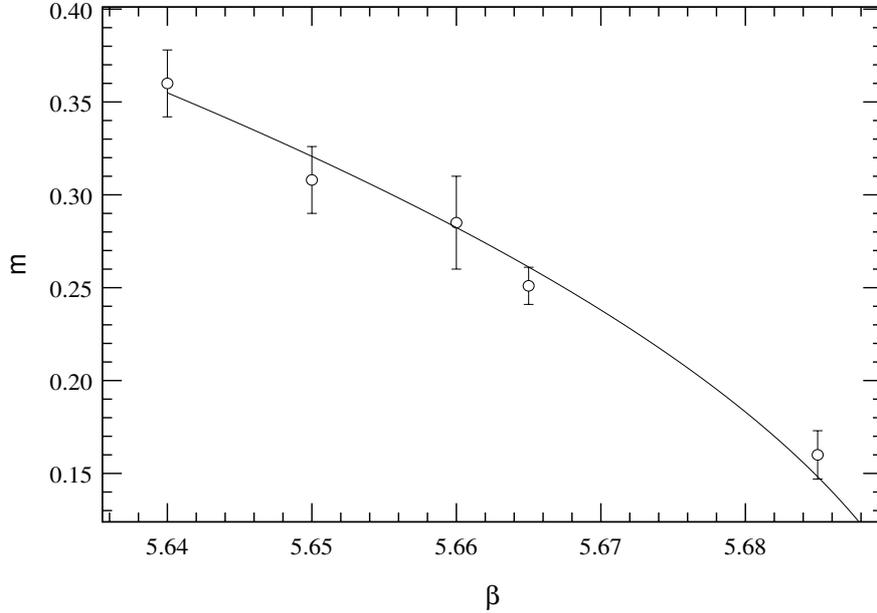


Figura 2.1: Estimación asintótica del inverso de la longitud de correlación para QCD a temperatura finita. El ajuste que se sobrepone corresponde con  $\nu = 1/2$ .

Como ejemplo claro de lo anterior podemos citar la transición de fase desconfiante de la Cromodinámica Cuántica (QCD) a temperatura finita [2].

En la figura 2.1 representamos la longitud de correlación en la transición de fase desconfiante. Se puede apreciar que los puntos representados ajustan a un comportamiento tipo

$$\xi \propto (\beta - \beta^*)^{-1/2}, \quad \beta^* > \beta_c. \quad (2.1)$$

Es decir que la longitud de correlación diverge con el exponente clásico aunque no en el punto de la transición. En este sistema  $\Delta\beta \equiv \beta^* - \beta_c \sim 0.01$ .

Comenzaremos este capítulo describiendo los cristales líquidos, en los cuales se ha encontrado una fenomenología muy cercana a la nuestra para pasar a estudiar nuestro sistema físico que será el modelo de Potts en dos

---

entre el punto de la transición y donde desaparecen los estados metaestables es grande y será difícil la observación de los efectos citados.

dimensiones. Variando el número de estados podemos pasar de transiciones de primer orden a otras de segundo orden, siendo así un buen sistema para estudiar los citados efectos pretransicionales.

Seguidamente estudiaremos estos efectos mediante la aproximación de campo medio. Estos cálculos se encuentran muy dispersos y poco detallados en la literatura por lo que se ha considerado conveniente rehacerlos detalladamente desde el principio. Se presenta además un cálculo basado en potenciales efectivos que predice el comportamiento encontrado numéricamente.

Además en este modelo estudiaremos numéricamente la longitud de correlación lejos del punto crítico y veremos que se comporta igual que en los experimentos con cristales líquidos y como en QCD [8].

Finalmente damos un contraejemplo a la asunción de que el *crossing* de la longitud de correlación con el tamaño del retículo cerca del punto crítico es una señal inequívoca de que la transición es de segundo orden. Hemos encontrado el citado *crossing* en el modelo de Potts bidimensional con  $q = 4$ . Este argumento se ha usado para diferenciar una transición de primer orden débil de una de segundo orden.

## 2.2 Cristales líquidos

Considérese la transición entre la fase desordenada (isótropa) y la nemática de los cristales líquidos [9]. La fase nemática se caracteriza por que no existe un alineamiento global de las moléculas en una dirección dada sino que sólo localmente dos moléculas tienden a ser paralelas. Este orden local persiste hasta distancias del orden de  $\xi(T)$ . Esta transición está caracterizada mediante el parámetro de orden  $Q_{ab}$ , que *grosso modo* está relacionado con el tensor susceptibilidad magnética  $\chi_{ab}$  ( $M_a = \chi_{ab}H_b$ ).

De razones puramente geométricas la transición nemática-isótropa debe de ser de primer orden<sup>2</sup>. Esto es debido a que si se expande  $F$ , la energía libre, en el parámetro de orden  $Q_{ab}$  se obtiene la siguiente ecuación (en ausencia de campo magnético):

$$F = F_0 + \frac{1}{2}A(T)Q_{ab}Q_{ba} + \frac{1}{3}B(T)Q_{ab}Q_{bc}Q_{ca} + O(Q^4), \quad (2.2)$$

donde se considera una suma implícita sobre índices repetidos. Los términos que se han escrito son invariantes bajo una rotación de los ejes  $(x, y, z)$ . No hay término lineal en  $Q$ , esto asegura que el estado de mínima energía libre es un estado de  $Q = 0$ . Hay que resaltar que existe un

---

<sup>2</sup>Según en la aproximación de Landau

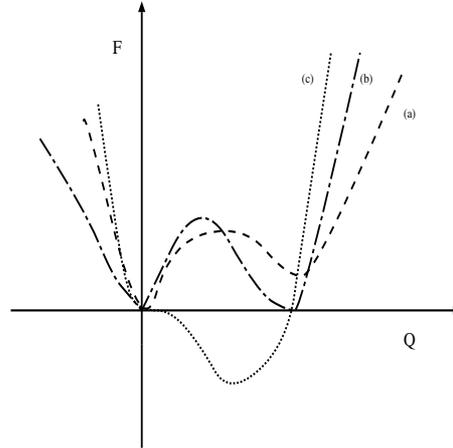


Figura 2.2: Potencial efectivo de De Gennes.

término no nulo en  $Q^3$ . La razón es que no hay simetría entre  $Q_{ab}$  y  $-Q_{ab}$ . Por lo tanto la transición debe de ser de primer orden siempre y cuando  $B(T) \neq 0$ . Además los experimentos han sostenido la anterior descripción, habiéndose medido discontinuidades en la densidad y en el calor específico, aunque se ha encontrado que las anteriores discontinuidades son débiles, es decir, la transición es de primer orden débil. Esto implica que el coeficiente  $B(T)$ , que proporciona el carácter de primer orden, debe de ser pequeño. En la figura 2.2 se reproducen las características más importantes del potencial anterior.

Para  $T > T_c$  el mínimo absoluto corresponde a  $Q = 0$  (fase isótropa), fig. 2.2(a). Para  $T < T_c$  el mínimo corresponde a  $Q \neq 0$  (fase nemática). En  $T = T_c$  hay coexistencia de fases. La transición es, por tanto, de primer orden, fig. 2.2(b). La temperatura  $T^*$  corresponde a la desaparición de los estados metaestables de la fase isótropa, fig. 2.2(c).

Debido a que la transición es de primer orden débil se espera que la longitud de correlación sea muy grande, en el caso que nos ocupa del orden de unos cientos de Amstrong (del orden de 10 veces el tamaño molecular).

Se han realizado diferentes experimentos para estudiar la transición anterior. Uno de ellos consistió en el estudio del cambio de fase mediante la dispersión de la luz. Un grupo del MIT encontró para la intensidad de *scattering*  $I$  de la luz la siguiente expresión

$$I \sim (T - T^*). \quad (2.3)$$

Una ley de escala, compatible con el experimento anterior, para la lon-

gitud de correlación es:

$$\xi = \xi_0 \left( \frac{T^*}{T - T^*} \right)^{1/2}, \quad (2.4)$$

donde  $\xi_0$  es la longitud de las moléculas. La ecuación anterior es válida dentro de la aproximación de la teoría de Landau. Por lo tanto  $I \sim \xi^{-2}$ .

Experimentalmente se ha encontrado que

$$\frac{T_c - T^*}{T_c} \sim 2 \times 10^{-3}. \quad (2.5)$$

Resumiendo, se han descrito muchas características críticas de los cristales líquidos que pueden entenderse introduciendo la temperatura pseudo-crítica  $T^*$ . Hay divergencias de diversos observables regidas por los exponentes clásicos, y la debilidad de la transición de primer orden está descrita por  $\Delta T \equiv T_c - T^*$ .

## 2.3 Potenciales efectivos

Antes de continuar conviene fijar la notación y las propiedades de los potenciales que aparecerán a lo largo de esta tesis.

La energía libre  $\phi(\beta, h)$ , en el límite termodinámico, es una función cóncava <sup>3</sup> de  $\beta$  y de  $h$

$$\phi(\beta, h) = \lim_{V \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{1}{\beta V} \log \mathcal{Z}(\beta, h) \right\}. \quad (2.7)$$

Se define<sup>4</sup>  $F(\beta, M)$  como la transformada de Legendre de  $\phi(\beta, h)$ , esta función es convexa en  $M$  y cóncava en  $\beta^{-1}$  [10].

En algunas partes de esta tesis se postularán dependencias funcionales o descripciones cualitativas de potenciales tipo  $F(\beta, M)$  que no satisfarán las

---

<sup>3</sup>Se usará la siguiente definición de función cóncava:  $f(x)$  es una función cóncava en un intervalo  $[a, b]$  si verifica que:

$$f(\alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2) \geq \alpha f(x_1) + (1 - \alpha)f(x_2) \quad (2.6)$$

$\forall x_1, x_2 \in [a, b]$  y  $\forall \alpha \in [0, 1]$ .

Si  $f(x) \in C^2$  una condición necesaria y suficiente de concavidad es:

$$d^2 f / dx^2 \leq 0.$$

$f(x)$  es convexa si  $-f(x)$  es cóncava.

<sup>4</sup>Usualmente a  $\phi(\beta, M)$  se la denomina energía libre de Gibbs, mientras que a  $F(\beta, M)$  se le denomina energía libre de Helmholtz.

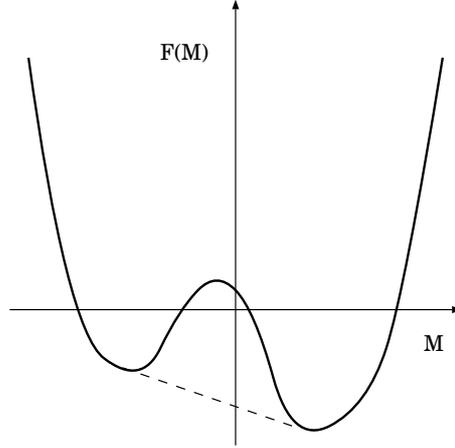


Figura 2.3: Envolvente convexa de un potencial efectivo no convexo.

condiciones de convexidad. Esto se resuelve tomando la envolvente convexa de la función. El resultado será una función convexa <sup>5</sup>.

Por ejemplo se puede suponer una energía libre de Helmholtz

$$F(\beta, M) = \frac{1}{4}M^4 + \frac{1}{2}(\beta_c - \beta)M^2. \quad (2.9)$$

En la figura 2.3 se representa la función anterior para un valor fijo de  $\beta$  y se señala con línea punteada la envolvente convexa.

Se puede dar una interpretación más microscópica de lo anterior [11]. Considérese un sistema, con acción  $S[\psi]$ , acoplado a una fuente  $J$ ; sean  $\phi(\beta, J)$  la energía libre de Gibbs<sup>6</sup>,  $O(x) \equiv O(\{\psi(x)\})$  un observable genérico y  $V$  el volumen que ocupa el sistema. Entonces <sup>7</sup>

$$e^{-V\phi(\beta, J)} = \int d[\psi] e^{-\beta S[\psi] - J \int d^d x O(x)}, \quad (2.10)$$

y la ecuación de estado será

$$\frac{\partial \phi}{\partial J} = \frac{1}{V} \int d^d x \langle O(x) \rangle \equiv \bar{O}(J). \quad (2.11)$$

<sup>5</sup>La envolvente convexa,  $f^{**}(x)$ , de una función  $f(x)$  está definida mediante:

$$f^{**}(t) = \sup_x [-f(x) - xt] = -\inf_x [f(x) + xt], \quad (2.8)$$

es decir, es la doble transformada de Legendre de  $f(x)$ .

<sup>6</sup>Se ha reabsorbido en la definición el factor  $\beta$ .

<sup>7</sup>Para fijar ideas se puede pensar en  $J$  como el campo magnético y en  $O$  como la magnetización.

Esta ecuación relaciona  $\bar{O}$  con su variable conjugada  $J$ . Cerca de una transición de fase la función  $\bar{O} = \bar{O}(J)$  puede ser discontinua, es decir hay un rango de valores de  $\bar{O}$  que no se corresponden con ningún  $J$ .

Podrá definirse el potencial efectivo asociado al observable  $O$

$$e^{-V\Gamma(\bar{O})} \equiv \int d[\psi] e^{-\beta S[\psi]} \delta\left[\frac{1}{V} \int d^d x O(x) - \bar{O}\right]. \quad (2.12)$$

Es fácil ver que

$$e^{-V\phi(\beta, J)} = \int d\bar{O} e^{-V(\Gamma(\bar{O}) + J\bar{O})}. \quad (2.13)$$

Para volúmenes grandes la integral está dominada por el punto silla

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{O}} = -J. \quad (2.14)$$

Y se puede concluir que  $\phi(\beta, J)$  es la transformada de Legendre de  $\Gamma$

$$\phi(\beta, J) = \Gamma(\bar{O}) + J\bar{O}. \quad (2.15)$$

En la ecuación (2.14) está definida la función  $J = J(\bar{O})$ ,  $\forall \bar{O}$ . Si asumimos una dependencia funcional para  $J = J(\bar{O})$  como la expuesta en la figura 2.4 vemos que es una función continua pero no es invertible en todo el intervalo de definición <sup>8</sup>.

Integrando la ecuación (2.14) se obtiene, salvo constante de integración, la forma de  $\Gamma$ , que es análoga a la de la figura 2.3 cambiando  $M$  por  $\bar{O}$  y  $F$  por  $\Gamma$ .

Si se quiere determinar  $\phi$  mediante (2.14) y (2.15) se tiene el inconveniente que  $J(\bar{O})$  no es invertible.

Pero en la ecuación (2.13) se deberá elegir aquel  $\bar{O}$  que de un mínimo global de  $\Gamma(\bar{O}) + J\bar{O}$ . La contribución de los otros mínimos estará exponencialmente suprimida.

En nuestro caso  $\Gamma(\bar{O}) + J\bar{O}$  tiene dos mínimos locales para  $J_1 < J < J_2$ . Uno de ellos será el mínimo absoluto si  $J < J_c$  y el otro lo será si  $J > J_c$ . En  $J_c$  ambos mínimos dan el mismo valor de  $\Gamma(\bar{O}) + J\bar{O}$ , *i.e.* cuando  $J = J_c + \epsilon$  el mínimo absoluto de  $\Gamma(\bar{O}) + J\bar{O}$  será  $\bar{O}_A$  mientras que para  $J = J_c - \epsilon$  el mínimo absoluto es  $\bar{O}_B$ , por lo tanto  $J_c$  es determinado por

$$\left. \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{O}} \right|_{\bar{O}_A} = \left. \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{O}} \right|_{\bar{O}_B} = -J_c, \quad (2.16)$$

$$\Gamma(\bar{O}_A) + J_c \bar{O}_A = \Gamma(\bar{O}_B) + J_c \bar{O}_B. \quad (2.17)$$

---

<sup>8</sup>Un ejemplo físico es la relación entre la presión y el volumen en un gas de Van der Waals.

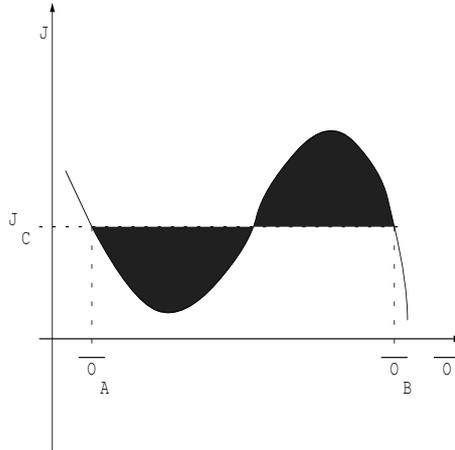


Figura 2.4: Forma usual de la función  $J = J(\bar{O})$ . Se representa además la construcción de Maxwell.

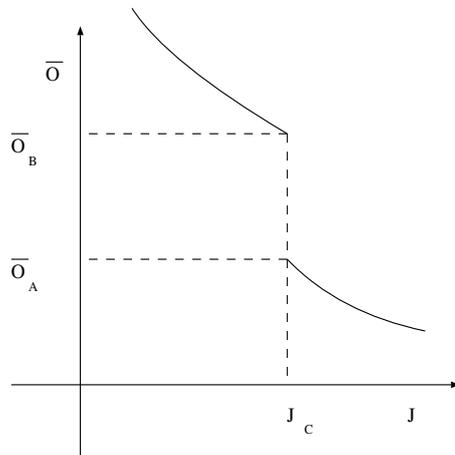
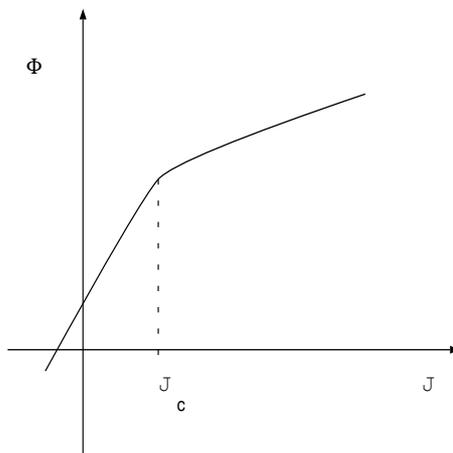


Figura 2.5: Mínimo absoluto de  $\Gamma(\bar{O}) + J\bar{O}$  como función de  $J$ .

Figura 2.6: Energía libre de Gibbs  $\phi$ .

Lo anterior se corresponde con la construcción de Maxwell, las dos áreas son iguales. Por lo tanto se obtiene el diagrama para el mínimo absoluto de  $\Gamma(\bar{O}) + J\bar{O}$  como función de  $J$  que está recogido en la figura 2.5 y para la energía libre de Gibbs tenemos el gráfico de la figura 2.6.

Sin embargo, hay una definición de la transformada de Legendre, que denominaremos transformada de Legendre rigurosa o TLR, de una función  $f(x)$ , que denotaremos por  $f^*(t)$  que existe para todo  $t$  y que hemos ya definido en la ecuación (2.8). Digamos que hasta aquí hemos usado una definición *naive* de la transformada de Legendre, por ejemplo en la ecuación (2.15). Es decir hemos obviado el *mínimo* en su definición.

Usaremos durante la tesis la versión *naive*, sirva esta sección para dar la justificación matemática y siempre que sea necesario matizar usaremos el acrónimo TLR.

De la discusión anterior es claro que  $\phi$  es la TLR de  $\Gamma$ :

$$\phi(\beta, J) = -\Gamma^*(\beta, J), \quad (2.18)$$

y además

$$\phi^*(\beta, J) = -\Gamma^{**}(\bar{O}), \quad (2.19)$$

por lo tanto la TRL de  $\phi$  dará la envolvente convexa del potencial efectivo, que obviamente es una función convexa. Para  $\bar{O} \in [\bar{O}_A, \bar{O}_B]$ ,  $\Gamma^{**}$  es una función lineal.

Una función no monótona  $J(\bar{O})$  no puede ser obtenida de una teoría microscópica imponiendo una ligadura  $\langle O(x) \rangle = \bar{O}$ . La razón es que para

una función no monótona  $J(\bar{O})$ , el sistema encuentra favorable para  $\bar{O}$  un estado mezcla consistente en dos subsistemas  $V_1$  y  $V_2$  con  $\bar{O}_A$  y  $\bar{O}_B$  respectivamente:

$$\bar{O} = \frac{V_1 \bar{O}_A + V_2 \bar{O}_B}{V}. \quad (2.20)$$

El potencial efectivo de esta configuración es menor que el correspondiente a una configuración homogénea<sup>9</sup>. En el límite  $V \rightarrow \infty$ <sup>10</sup>

$$\Gamma_{\text{mezcla}} = \frac{V_1 \Gamma(\bar{O}_A) + V_2 \Gamma(\bar{O}_B)}{V} = \Gamma^{**}(\bar{O}) < \Gamma(\bar{O}). \quad (2.21)$$

Concluyendo: para un sistema con ligadura  $\frac{1}{V} \int d^d x O(x) = \bar{O}(x)$  cerca de una transición de fase de primer orden,  $J(\bar{O})$  será la obtenida por medio de la construcción de Maxwell, es decir una función monótona creciente. Su correspondiente potencial es siempre convexo,  $\Gamma(\bar{O}) = \Gamma^{**}(\bar{O})$ .

La parte cóncava del potencial proviene de un comportamiento no monótono en  $J(\bar{O})$ , esto sólo se puede dar en un sistema en el que no coexisten fases, es decir un sistema homogéneo.

Una posible salida consiste en trabajar en un sistema finito. En tal sistema los efectos de frontera son importantes y el sistema puede permanecer homogéneo. La coexistencia se da porque  $\Gamma_{\text{mezcla}} < \Gamma_{\text{Homog}}$ . Si por efecto del volumen conseguimos que la desigualdad cambie, entonces  $\Gamma$  será cóncavo en alguna región. Lo anterior se puede conseguir contando con la interfase. De nuevo cuando  $V \rightarrow \infty$  recuperamos el potencial convexo.

Veámoslo detalladamente. Para fijar ideas consideremos el potencial efectivo de la energía. A la temperatura crítica las dos fases<sup>11</sup> puras tienen energías por unidad de volumen  $e_1$  y  $e_2$  respectivamente. Consideremos un estado mezcla que consiste en  $\alpha$  de la fase 1 y  $1 - \alpha$  de la fase 2 ( $\alpha \in [0, 1]$ ). Su energía será

$$e = \alpha e_1 + (1 - \alpha) e_2 + e_{\text{if}} \frac{1}{L}, \quad (2.22)$$

donde  $e_{\text{if}}$  es la energía de la interfase por unidad de superficie, y  $L = V^{1/d}$ . La energía libre de esta configuración será

$$f = \alpha f_1 + (1 - \alpha) f_2 + f_{\text{if}} \frac{1}{L}, \quad (2.23)$$

donde  $f_1$  y  $f_2$  son las energías libres por unidad de volumen de las fases 1 y 2 y  $f_{\text{if}}$  es la energía libre de la interfase por unidad de superficie. Obviamente

<sup>9</sup>La entropía de una configuración mezcla es mayor que la entropía de una configuración homogénea así que su energía libre es menor.

<sup>10</sup>Así se podrá despreñar la energía libre de la interfase.

<sup>11</sup>Consideramos por simplicidad la coexistencia de dos fases únicamente.

$f$  es mayor que la combinación convexa de  $f_1$  y  $f_2$  que tendríamos en el volumen infinito. Si la energía de la interfase  $e_{if}$  es pequeña esta contribución se dará en el intervalo  $[e_1, e_2]$  y la energía libre dejará de ser convexa. Claramente si hacemos  $L \rightarrow \infty$  recuperamos la convexidad. Si la energía de la interfase es grande, la contribución caerá fuera del intervalo  $[e_1, e_2]$ .

Por lo tanto si la energía de la interfase es pequeña podemos encontrar para un rango de tamaños concavidad en la energía libre.

La discusión anterior puede generalizarse a temperaturas cercanas a la temperatura de la transición.

## 2.4 Un modelo simple

Considérese el siguiente potencial efectivo *à la* Landau

$$\phi = a_2(\beta)M^2 - a_3M^3 + a_4M^4, \quad (2.24)$$

donde  $a_3$  y  $a_4$  son positivos. Este modelo presenta una transición de fase en  $\beta_c$  si

$$a_2(\beta_c) = \frac{a_3^2}{4a_4}. \quad (2.25)$$

Por otra parte en este modelo desaparecerán los estados metaestables cuando se anule el término cuadrático, lo que ocurrirá a una temperatura  $T = 1/\beta^*$ , es decir cuando  $a_2(\beta^*) = 0$ . Se puede postular, con esta ligadura, la forma funcional más sencilla para  $a_2$

$$a_2(\beta) = c(\beta - \beta^*), \quad (2.26)$$

donde  $c$  es una constante.

Calculando la discontinuidad de la magnetización con la anterior dependencia funcional se obtiene

$$\Delta M = \frac{1}{4}\sqrt{c(\beta^* - \beta_c)}. \quad (2.27)$$

Por lo que si  $\beta^* - \beta_c \equiv \Delta\beta$  es pequeña la transición de primer orden será débil, ya que la discontinuidad en la magnetización es pequeña.

## 2.5 El modelo de Potts

El Hamiltoniano de este modelo es [12]:

$$-\beta\mathcal{H} \equiv \beta \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + h \sum_i \delta_{\sigma_i, 1}. \quad (2.28)$$

La suma anterior se extiende a todos los puntos del retículo y a sus vecinos más próximos en las  $d$  direcciones positivas. Las variables de espín  $\sigma_i$  pueden tomar  $q$  valores:  $1, \dots, q$  y hemos acoplado un campo magnético a una de las  $q$  componentes. Este modelo fue resuelto exactamente por Baxter[13] en el caso bidimensional. Algunos de sus resultados exactos se refieren a los diferentes comportamientos críticos dependiendo del valor de  $q$  del modelo. Lo siguiente se refiere a campo nulo.

Si  $q \leq 4$  el sistema presenta una transición continua, mientras que si  $q \geq 5$  entonces la transición es de primer orden. Los exponentes críticos para  $q \leq 4$  y dimensión 2 se resumen en la siguiente tabla (para la definición de los exponentes críticos consúltese el apéndice C)

$q$	$\alpha = \alpha'$	$\beta$	$\gamma = \gamma'$	$\delta$	$\nu$	$\eta$
0	$-\infty$	1/6	$\infty$	$\infty$	$\infty$	0
1	-2/3	5/36	43/18	91/5	4/3	5/24
2	0	1/8	7/4	15	1	1/4
3	1/3	1/9	13/9	14	5/6	4/15
4	2/3	1/12	7/6	15	2/3	1/2

La  $\beta$  crítica es:

$$\beta_c = \log(1 + \sqrt{q}). \quad (2.29)$$

Inicialmente el interés en el modelo de Potts fue teórico aunque últimamente se han encontrado sistemas físicos que siguen bastante bien las predicciones de este modelo.

Casos particulares son bastante conocidos. El Hamiltoniano de Potts se convierte en el modelo de Ising para  $q = 2$  y es bien sabido que hay muchos materiales magnéticos que siguen este modelo, como por ejemplo el  $\text{CoCs}_2\text{Br}_5$  en 2 dimensiones.

Se ha encontrado que un ferromagneto cúbico con tres ejes en un campo magnético diagonal puede ser visto como un modelo de Potts con  $q = 3$ . Un estudio experimental de uno de tales materiales,  $\text{DyAl}_2$ , ha sido llevado a cabo y los resultados, transición de primer orden (hay campo magnético), son consistentes con los estudios analíticos.

Experimentos de absorción de  $\text{N}_2$  en láminas de grafito con Kriptón han sugerido que pueden ser explicadas con  $q = 4$

Incluso se pueden encontrar sistemas que pueden ser modelados con  $q$  menores de 1, por ejemplo algunos tipos de polímeros.

El caso de  $q = 1$  está muy relacionado con problemas de percolación.

## 2.6 Resultados analíticos

### 2.6.1 Aproximación del campo medio

Se realizarán los cálculos partiendo de la desigualdad convexa [14]<sup>12</sup>. Sea  $d\rho[C] \equiv d\mu[C] \exp(\rho)$  una medida sobre un espacio de configuraciones  $C$ , y  $f$  una función de este espacio en  $\mathcal{R}$ , entonces:

$$\langle e^f \rangle_\rho \geq e^{\langle f \rangle_\rho}. \quad (2.30)$$

Sea la siguiente función de un parámetro real  $g(\lambda)$ :

$$g(\lambda) = \log \int d\rho[C] \exp(\lambda f) = \log \int d\mu[C] \exp(\rho + \lambda f). \quad (2.31)$$

Las dos primeras derivadas son

$$\begin{aligned} g'(\lambda) &= \langle f \rangle_{\rho + \lambda f}, \\ g''(\lambda) &= \langle f^2 \rangle_{\rho + \lambda f} - \langle f \rangle_{\rho + \lambda f}^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Por lo tanto  $g(\lambda)$  es una función convexa, que verificará

$$g(\lambda) \geq g(0) + \lambda g'(0), \quad (2.33)$$

particularizando a  $\lambda = 1$  y exponenciando la desigualdad anterior obtenemos la desigualdad convexa.

En el modelo de Potts se elegirá como  $\rho$ :

$$\rho \equiv \frac{\exp(H + h) \sum_i \delta_{\sigma_i, 1}}{\sum_{[\sigma]} \exp(H + h) \sum_j \delta_{\sigma_j, 1}}, \quad (2.34)$$

donde  $H$  es un parámetro variacional con dimensiones de campo magnético. Para  $f$  queda

$$f = \beta \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - H \sum_i \delta_{\sigma_i, 1}. \quad (2.35)$$

La energía libre intensiva se definirá como  $f \equiv -\frac{1}{\beta N} \log \mathcal{Z}$  y estará dada por

$$\beta f \leq \beta f_{\text{MF}} = -\log \mathcal{Z}_H - d\beta \frac{e^{2(H+h)} + q - 1}{\mathcal{Z}_H^2} + H \frac{e^{H+h}}{\mathcal{Z}_H}, \quad (2.36)$$

donde  $\mathcal{Z}_H \equiv e^{H+h} + q - 1$ .

<sup>12</sup>Por completitud y por ser sencilla, se dará la demostración

En esta aproximación la magnetización por espín, intensiva, es:

$$m = \langle \delta_{\sigma_i, 1} \rangle_\rho = \frac{e^{H+h}}{e^{H+h} + q - 1}. \quad (2.37)$$

Con esta definición  $m = \frac{1}{q}$  a alta temperatura, ya que todas las orientaciones son igualmente probables <sup>13</sup>.

Para calcular el potencial efectivo  $v(m)$  (intensivo) hay que invertir la magnetización en función de  $h + H$  y posteriormente realizar una transformación de Legendre <sup>14</sup>. Obtenemos para la inversión de la magnetización:

$$H + h = \log \frac{(q-1)m}{1-m}. \quad (2.38)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \beta f_{\text{MF}} + hm &\equiv v(m) = (m-1) \log(q-1) + (1-m) \\ &\quad \log(1-m) + m \log m - \frac{d\beta}{q-1} (qm^2 - 2m + 1) \end{aligned} \quad (2.39)$$

Para

$$\beta = \frac{q}{2d} \quad (2.40)$$

se anula el término cuadrático y por lo tanto se identificará esta  $\beta$  con  $\beta^*$ , ya que a esta  $\beta$  desaparece el estado metaestable con  $m = 0$  (para una  $\beta$  un poco más pequeña  $m = 0$  era un estado metaestable, localmente su potencial era cuadrático, mientras que para  $\beta^*$  desaparece el mínimo local anterior pasando a ser un punto de inflexión). Examinando la fórmula de la energía libre puede concluirse que esta aproximación predice transiciones de segundo orden para  $q = 1$  y  $q = 2$ . Mientras que la transición será de primer orden para  $q \geq 3$ , en contra de los resultados exactos; de primer orden si  $q \geq 5$  y de segundo orden si  $q \leq 4$ . Podemos calcular  $\beta_c(q)$  en esta aproximación, cuando el valor del potencial en los dos mínimos es el mismo, resultando ser:

---

<sup>13</sup> Para tener una buena definición de la magnetización habría que redefinirla como:  $m_{\text{new}} = m - 1/q$ . Aunque en los cálculos que presentamos usamos  $m$  en vez de  $m_{\text{new}}$ .

<sup>14</sup> Versión *naive*.

q	$\beta_c$	$\beta_c^{\text{mf}}$	$\beta_{\text{mf}}^*$	$\Delta\beta$
2	0.8814	0.5	0.5	0
3	1.0050	0.7	0.75	0.05
4	1.0986	0.825	1	0.175
5	1.1743	0.93	1.25	0.32
6	1.2382	1.00	1.5	0.5
7	1.2935	1.075	1.75	0.675
8	1.3424	1.135	2	0.865
9	1.3862	1.19	2.25	1.06
10	1.4260	1.235	2.5	1.265

En la última columna de la tabla se ha representado la diferencia entre  $\beta^*$  y  $\beta_c$  pudiéndose observar que esta diferencia aumenta con  $q$ , igual que la fuerza de la transición (a mayor  $q$  mayor calor latente). Obsérvese que en el  $q$  para el cual la transición es de segundo orden se tiene  $\beta^* = \beta_c$ , y por lo tanto no hay  $\Delta\beta$ , consistentemente con lo expuesto.

Podemos calcular la divergencia de la susceptibilidad en esta pseudo-transición:

$$\left. \frac{d^2v(m)}{dm^2} \right|_{m=1/q} = \frac{q}{q-1}(q-2\beta d) \equiv \frac{2dq}{q-1}(\beta^* - \beta)^{\gamma^*}. \quad (2.41)$$

Obviamente  $\beta^*$  coincide con el resultado previo y  $\gamma^* = 1$ . Por lo tanto la aproximación de campo medio sustenta la imagen descrita en la introducción basada en el parámetro  $\beta^*$ .

Se puede calcular la longitud de correlación en esta aproximación. Para ello se deberá modificar el Hamiltoniano de partida y hacer que el campo magnético externo  $h$  dependa del punto, pasando a ser  $h_i$ . La correlación entre dos espines, en la fase de alta temperatura, es proporcional al inverso del Hessiano del potencial efectivo  $V(m_i)$ , potencial extensivo, evaluado en los estados desordenados. Para ello reescribiremos el potencial efectivo, función ahora de  $N$  variables  $m_i$  definidas por (ver nota a pié de página (13)):

$$m_i = \frac{e^{H+h_i}}{e^{H+h_i} + q - 1}. \quad (2.42)$$

Como

$$\begin{aligned} \beta F_{\text{MF}} + \sum_i h_i m_i = V(m_i) &= \sum_i (m_i \log m_i - (1 - m_i) \log(1 - m_i)) + \\ & \left( \sum_i m_i - N \right) \log(q - 1) - \frac{\beta}{q - 1} \sum_{\langle i,j \rangle} (q m_i m_j - m_i - m_j + 1), \end{aligned}$$

obtenemos para el Hessiano  $M_{rs}$  la siguiente expresión:

$$M_{rs} \equiv \left. \frac{\partial^2 V}{\partial m_r \partial m_s} \right|_{m=1/q} = \frac{q^2}{q-1} \left( \delta_{rs} - \frac{\beta}{q} J_{rs} \right), \quad (2.43)$$

donde la matriz  $J_{rs}$  vale uno si  $r$  y  $s$  son puntos vecinos y cero en el resto de los casos.

Podemos invertir  $M$  en el espacio de momentos y obtener:

$$(M^{-1})_{kl} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_B d^d p G^0(p) \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{l})\mathbf{p}], \quad (2.44)$$

$$G^0(p) = \frac{q-1}{q^2} \left( 1 - \frac{2\beta}{q} \sum_{\nu=1}^d \cos(p_\nu) \right)^{-1}, \quad (2.45)$$

donde  $B$  es la primera zona de Brillouin del retículo ( $B \equiv [0, 2\pi]^d$ )<sup>15</sup>. Por lo tanto

$$m^2(\beta) \sim (q - 2d\beta), \quad (2.46)$$

donde  $m$  es el inverso de la longitud de correlación. De nuevo se encuentra que  $\beta^* = q/(2d)$  ( $\beta_c$  para  $q \leq 2$ ) y se ve que

$$\nu^* = \frac{1}{2}, \quad (2.47)$$

que será  $\nu$  cuando  $q \leq 2$ .

## 2.6.2 Resultados usando potenciales efectivos

Se pueden discutir las propiedades de la transición usando un potencial no convexo, bastaría tomar la envolvente convexa para recuperar el potencial convexo. Sea el potencial

$$\phi^\beta(E) \equiv -\log P^\beta(E), \quad (2.48)$$

donde  $E$  es la energía total y  $P^\beta(E)$  es la probabilidad<sup>16</sup> de encontrar una configuración de energía  $E$  a una  $\beta$  dada.

Cerca de  $\beta_c$ ,  $\phi^\beta(E)$  tiene dos mínimos locales en  $E_1(\beta)$  y  $E_2(\beta)$ . La  $\beta_c$  estará definida por la condición

$$\phi^{\beta_c}(E_1) = \phi^{\beta_c}(E_2), \quad (2.49)$$

<sup>15</sup>Los índices  $k$  y  $l$  van de 1 a  $N$ , así  $M$  es una matriz  $N \times N$ . Pero se puede reexpresar asignando a  $k$  un vector  $d$ -dimensional  $\mathbf{k}$ , que daría la posición de este punto en un sistema de coordenadas  $d$ -dimensional. Esta representación es la que usamos en el cálculo de la transformada de Fourier.

<sup>16</sup>Siempre que se cite en esta tesis probabilidad de encontrar el valor de una variable continua deberá cambiarse probabilidad por densidad de probabilidad.

Para  $\beta$  un poco mayor que  $\beta_c$  tendremos un mínimo absoluto en  $E_2(\beta)$ , mientras que  $E_1(\beta) (> E_2(\beta))$  será un mínimo local y estará relacionado con los estados metaestables. Para  $\beta$  mayor el mínimo en  $E_1$  desaparece convirtiéndose en un punto de inflexión, y los estados metaestables también desaparecen. Esta  $\beta$  puede identificarse con  $\beta^*$ , y puede ser fijada por la condición

$$\left. \frac{d^2 \phi^{\beta^*}}{dE^2} \right|_{E=E_1(\beta^*)=E^*} = 0. \quad (2.50)$$

Por lo tanto

$$\phi^{\beta^*}(E) = a_0 + a_3(E - E^*)^3 + \dots \quad (2.51)$$

Usando la relación

$$P^{\beta'}(E) = P^\beta(E) \exp(-(\beta' - \beta)E), \quad (2.52)$$

encontramos que para  $\beta$  cercana a  $\beta^*$

$$\phi^{\beta^*}(E) = a_0 + a_3(E - E^*)^3 + (\beta - \beta^*)E + \dots \quad (2.53)$$

que presenta un mínimo local en

$$E_1(\beta) = E^* + \sqrt{\frac{\beta^* - \beta}{3a_3}}, \quad (2.54)$$

por lo tanto el calor específico queda

$$\frac{1}{C_v} \sim \frac{d^2 \phi^\beta}{dE^2} \sim 2\sqrt{3a_3}(\beta^* - \beta)^{1/2}. \quad (2.55)$$

De la ecuación anterior concluimos que el sistema se comporta como si tuviera una transición de segundo orden en  $\beta^*$  con un exponente crítico

$$\alpha^* = \frac{1}{2}. \quad (2.56)$$

Un procedimiento equivalente puede ser seguido para un potencial dependiente de la magnetización total,  $\phi^\beta(M)$ . Aunque ahora el mínimo de la fase desordenada, metaestable, es siempre  $M = 0$  y entonces podemos escribir

$$\phi^\beta(M) = b_0(\beta) + b_2(\beta)M^2 + \dots \quad (2.57)$$

En  $\beta^*$ ,  $b_2$  debe de ser cero. Si se asume un comportamiento analítico de  $b_2$  cerca de  $\beta^*$ , se obtiene para la susceptibilidad

$$\frac{1}{\chi} \sim \left. \frac{d^2 \phi^\beta}{dM^2} \right|_{M=0} = 2b_2(\beta) \sim (\beta^* - \beta) + O((\beta^* - \beta)^2). \quad (2.58)$$

Por lo tanto en el punto crítico aparente el exponente crítico de la susceptibilidad es

$$\gamma^* = 1. \quad (2.59)$$

que coincide con el resultado previo de campo medio, hecho que no causa sorpresa ya que se ha exigido analiticidad.

No es posible usar aproximaciones similares para encontrar el resto de los exponentes críticos. Pero si se usa la relación de escala

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (2.60)$$

y se supone que el exponente  $\eta = 0$ , que está relacionado con la dimensión anómala del campo, podemos concluir que  $\nu = \frac{1}{2}$ .

Si se examina la relación de escala

$$\alpha = 2 - \nu D, \quad (2.61)$$

se ve que usando los exponentes calculados anteriormente sólo en  $D = 3$  son compatibles los resultados obtenidos de ambas relaciones de escala. Estos exponentes ( $\gamma = 1, \nu = 1/2$ ) han sido observados en algunas simulaciones numéricas. En 2 dimensiones la relación de escala es violada, dado que implicaría  $\nu = \frac{3}{4} (\eta = \frac{2}{3})$ , exponentes que son excluidos por los datos de Monte Carlo que se presentarán posteriormente.

Análogamente, hay un punto pseudocrítico en  $\beta^{**} < \beta$ , que está relacionado con los estados metaestables ordenados. Una derivación similar a la anterior daría  $\alpha^{**} = \frac{1}{2}$ , aunque el exponente de la susceptibilidad no puede ser calculado de forma análoga al no ser nula la magnetización de los estados desordenados metaestables.

## 2.7 Resultados numéricos

Es necesario comprobar los anteriores resultados mediante simulaciones numéricas, desgraciadamente esto es bastante complicado debido a la presencia de configuraciones inhomogéneas, véase la sección dedicada a los potenciales efectivos. Por ello hemos realizado las simulaciones a cierta distancia del punto crítico para eliminar la posibilidad de que aparezcan las configuraciones inhomogéneas.

Se han simulado dos valores de  $q$ :  $q = 7$  y  $q = 10$ . Para valores más pequeños de  $q$ ,  $q = 5$  o  $q = 6$ , la gran longitud de correlación en el punto crítico los hace intratables numéricamente.

El objetivo de estos cálculos ha sido cuantificar la diferencia  $\beta_c - \beta^*$  y dar una estimación lo más precisa del exponente crítico  $\nu^*$ .

### 2.7.1 Método numérico

Hemos usado el método del baño caliente para realizar el update. Se han simulado una amplia gama de tamaños: desde  $32 \times 32$  hasta  $128 \times 128$  para diferentes valores de  $\beta$ .

El número de pasos de Monte Carlo realizados han sido entre uno y dos millones. Hemos ejecutado el código tanto en una red de transputers como en un ordenador VAX9000.

En cada medida se almacenaba la energía total, la magnetización y la función de correlación entre líneas. En el análisis de los datos se usó el método de la densidad espectral, descrito en el apéndice A, aunque para un mejor control de los errores se realizaron simulaciones directas a diferentes valores de  $\beta$ .

Los errores estadísticos han sido estimados mediante el método de jack-knife (ver Apéndice B) y el generador de números random que se ha usado es el propuesto en la referencia [15].

### 2.7.2 Observables

Además de la magnetización y la energía se midió la correlación entre líneas paralelas de espines, o correlación entre espines a momento nulo. En un retículo  $L \times L$

$$C(d) \equiv \frac{1}{2L^3} \left( \sum_x \mathbf{M}_{x+d} \mathbf{M}_x + \sum_y \mathbf{M}_{y+d} \mathbf{M}_y \right) - \frac{1}{q}, \quad (2.62)$$

con

$$\mathbf{M}_x = \sum_y \mu_{xy}, \quad (2.63)$$

donde  $\mu_{xy}$  es el valor del espín en el punto  $(x, y)$  expresado como un  $q$ -vector. Para un espín en un estado  $\sigma \in \{1, \dots, q\}$  la componente  $n$ -ésima de  $\mu$  es  $\delta_{n\sigma}$ .

A largas distancias  $C(d)$  tenderá a cero de forma exponencial  $e^{-md}$  donde  $m$  es la masa, igual al inverso de la longitud de correlación  $\xi$ . Pero debido a las condiciones de contorno periódicas  $C(d)$  tendrá dos contribuciones: una debida a la distancia  $d$  entre dos líneas y otra a la distancia  $L - d$  entre las dos citadas líneas,

$$C(d) \sim e^{-md} + e^{-m(L-d)} \sim \cosh\left(m\left(d - \frac{L}{2}\right)\right). \quad (2.64)$$

Por lo tanto los datos numéricos se ajustarán a la ecuación anterior para estimar la masa.

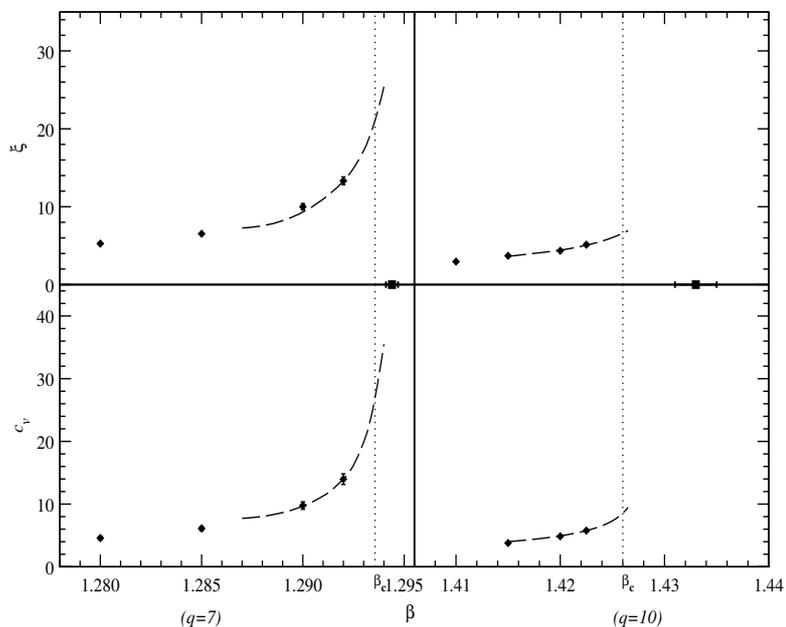


Figura 2.7: Calor específico y longitud de correlación tanto para Potts  $q = 7$  como  $q = 10$ . Los puntos sobre el eje X (eje central) representan nuestra estimación de  $\beta^*$ .

Una buena medida de la longitud de correlación obliga a que las configuraciones sean homogéneas<sup>17</sup>. Por lo tanto se han simulado  $\beta$ 's lejanas de  $\beta_c$ , donde están fuertemente suprimidas estas configuraciones, para así evitarlas. En el caso de  $q = 7$  no se ha tenido evidencia de estas configuraciones inhomogéneas después de varios millones de iteraciones para  $\beta \leq 1.292$ .

Se han simulado diversos retículos y analizado el comportamiento asintótico de la longitud de correlación. Con la estadística acumulada los resultados que se presentarán están libres de efectos de tamaño finito.

Presentamos en la figura 2.7 los resultados tanto para el calor específico como para la longitud de correlación en el límite  $V \rightarrow \infty$ . Además están marcados tanto el punto crítico como el punto *pseudocrítico*. Se puede observar que el comportamiento divergente es mayor en  $q = 7$  que en  $q = 10$

<sup>17</sup>En la sección dedicada al *crossing* se ampliarán estas consideraciones

### 2.7.3 Resultados para $q = 7$

Como primer paso se ha calculado el exponente  $\nu^*$  y  $\beta^*$  mediante un ajuste a tres parámetros a la función:

$$m(\beta) = A(\beta^* - \beta)^{\nu^*}. \quad (2.65)$$

Los resultados son:

$$\nu^* = 0.53(8), \quad (2.66)$$

$$\beta^* = 1.2945(9). \quad (2.67)$$

Este valor es incompatible con la predicción de escala  $\nu = 0.75$  y está de acuerdo con un exponente clásico  $\nu = \frac{1}{2}$ .

Desgraciadamente no es posible dar una estimación precisa de  $\beta^*$  mediante un ajuste triparamétrico, aunque es claro que

$$\beta^* > \beta_c = \log(1 + \sqrt{7}) = 1.29356.$$

La predicción de las técnicas de tamaño finito para una transición de primer orden y dos dimensiones es que el *shift* de  $\beta_c$  en función del tamaño del retículo es proporcional a  $L^{-2}$ . Se ha comprobado este corrimiento con los datos de los retículos simulados y se ha hallado que  $\beta_c(L = 128) = 1.2933$  (mediante el pico del calor específico, el error afecta sólo a la última cifra).

Sin embargo, asumiendo que  $\nu = \frac{1}{2}$  se puede disminuir el error en  $\beta^*$  obteniendo por tanto una mejor estimación. En la figura 2.8 se presenta la masa  $m$  al cuadrado como función de  $\beta$ . Como se observa el comportamiento lineal es muy claro. Se ha obtenido  $\beta^*$  realizando un ajuste lineal tanto de los puntos obtenidos de las simulaciones como de los puntos obtenidos mediante el método de la densidad espectral a partir de  $\beta = 1.292$ , siendo ambos resultados compatibles. Nuestra estimación final de  $\beta^*$  es

$$\beta^* = 1.2944(3). \quad (2.68)$$

Otra cantidad interesante es la longitud de correlación máxima (en  $\beta_c$ ). Asumiendo los valores anteriores de  $\beta^*$  y  $\nu^*$  se obtiene:

$$\xi_{\max} = 24(5), \quad (2.69)$$

a comparar con la estimación de 30 dada en la referencia [16] basada en la extrapolación de resultados obtenidos en  $q = 10$ .

La transición en  $q = 7$  es muy débil así que es muy difícil medir la longitud de correlación máxima o  $\beta^*$ . Se necesitó simular grandes retículos ( $128 \times 128$ ) y realizar varios millones de pasos de Monte Carlo debido al *critical slowing down* efectivo.

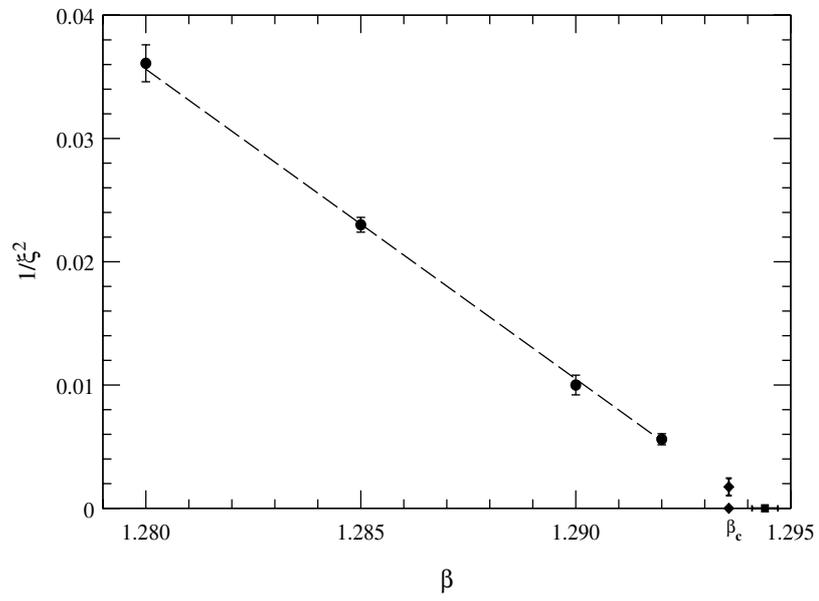


Figura 2.8: Masa al cuadrado frente a  $\beta$  para Potts con 7 estados (círculos llenos). Con rombo se señala la estimación del inverso del cuadrado de la longitud de correlación en  $\beta_c$ .

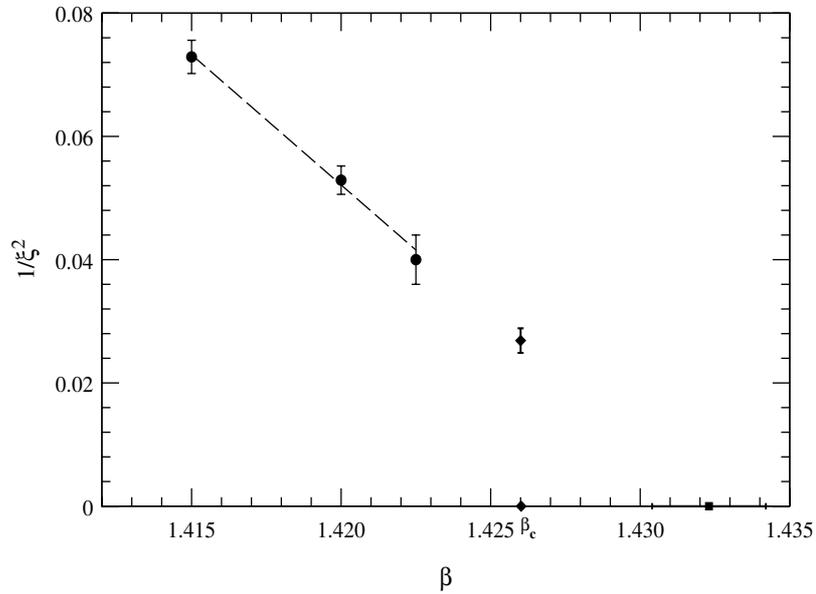


Figura 2.9: Masa al cuadrado frente a  $\beta$  para Potts con 10 estados (círculos llenos). Con rombo se señala la estimación del inverso del cuadrado de la longitud de correlación en  $\beta_c$ .

Se espera que en una transición de primer orden más fuerte la longitud de correlación máxima sea más pequeña y que  $\beta^*$  esté más alejado de  $\beta_c$ , y en consecuencia más fácil de calcular. Aunque, por otra parte, el comportamiento *pseudo* de segundo orden no será tan claro como en una transición más débil.

#### 2.7.4 Resultados para $q = 10$

Para comprobar lo anterior se simuló  $q = 10$  en retículos de hasta  $96 \times 96$ . Los resultados están recogidos en la figura 2.9.

Aunque el comportamiento lineal no es tan claro como en  $q = 7$  todavía es visible. Por lo tanto se asumirá que  $\nu^* = \frac{1}{2}$ .

La correlación máxima que se ha encontrado es

$$\xi_{\max} = 6.1(5), \quad (2.70)$$

a comparar con el valor  $\xi = 5.9(7)$  de la referencia [16].

Habiendo fijado  $\nu^*$  a  $1/2$  se calcula  $\beta^*$ , obteniendo

$$\beta^* = 1.433(2), \quad (2.71)$$

mientras que  $\beta_c = 1.4260$  y la  $\beta$  crítica aparente debido a los efectos de tamaño finito es  $\beta_c(L = 96) = 1.4254$ , de nuevo el error afecta sólo a la última cifra, obtenida mediante el máximo del calor específico.

## 2.8 Crossing

Se sabe que la longitud de correlación es finita en las transiciones de primer orden mientras que es divergente en las transiciones de segundo orden. Sin embargo, hay que precisar la definición de la longitud de correlación [17].

Sea  $G_0(z)$  la función de correlación no conexas proyectada a momento cero. Se puede definir la siguiente *masa* en un retículo infinito:

$$m_{V=\infty} \equiv - \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{z} \log G_0(z). \quad (2.72)$$

En la fase simétrica,  $\beta < \beta_c$ , hay un único estado fundamental, el primer estado excitado tendrá una separación finita de él y la masa definida en (2.72) nos da la separación en energía. En la fase rota,  $\beta > \beta_c$ , el estado fundamental es degenerado, hay coexistencia de fases, y cada estado tiene un valor medio del parámetro de orden diferente de cero. La definición (2.72) correspondería a un valor nulo.

La diferencia entre una transición de primer orden y otra de segundo es el comportamiento de  $m_{V=\infty}$  cuando  $\beta \rightarrow \beta_c^-$ . En la de primer orden permanece finita, mientras que en las de segundo tiende a cero siguiendo una ley

$$m_{V=\infty} \approx (\beta_c - \beta)^\nu. \quad (2.73)$$

Cuando el tamaño del sistema es finito las descripciones anteriores se modifican. En una transición de primer orden, al haber coexistencia de fases, los estados fundamentales de la fase rota y de la fase simétrica se cruzan en  $\beta = \beta_c$ , sus energías libres son iguales. Debido a que las barreras energéticas entre los diversos estados fundamentales crecen con el volumen, la situación anterior cambia cuando el volumen es finito debido al *tunneling*, que mezclará estos niveles y romperá la degeneración resultando una pequeña energía. El comportamiento a larga distancia de  $G_0(z)$  estará dominado por esta energía y la masa obtenida será igual a ella. Lejos de  $\beta_c$  el *tunneling* será muy raro y la masa será muy cercana a la que se obtendría a volumen infinito. Cuando aumente el volumen el *tunneling* ocurrirá sólo si  $\beta$  es muy cercana a  $\beta_c$ . Esto implicará que las curvas  $m_V(\beta)$  para dos

volúmenes diferentes cruzarán en  $\beta_{\text{cr}}(V)$  que dependerá de los volúmenes fijados. Es decir  $m_V(\beta)$  crecerá para  $\beta < \beta_{\text{cr}}(V)$  mientras que disminuirá si  $\beta > \beta_{\text{cr}}(V)$ .

Esto se puede estudiar cuantitativamente. Para ello seguimos las referencias [16, 18]. Consideremos un retículo con geometría cilíndrica, finita en  $d - 1$  dimensiones y muy larga en una dirección, que denominaremos “dirección temporal”. La longitud de correlación está determinada por la matriz de transferencia  $d - 1$  dimensional y es independiente de la dirección temporal. Las contribuciones dominantes de la matriz de transferencia, serán, *grosso modo*

$$e^{-F_o(\beta)L^{d-1}L_t}, \quad (2.74)$$

para los estados ordenados y

$$e^{-F_d(\beta)L^{d-1}L_t}, \quad (2.75)$$

para los estados desordenados.  $F_o(\beta)$  y  $F_d(\beta)$  son las energías libres, intensivas, de la fase ordenada y de la desordenada respectivamente, que serán iguales en el punto crítico. Pero además hay que considerar la posible aparición de dominios de espines de signo contrario debido al *tunneling*, la energía libre será la correspondiente a una interfase, es decir  $AL^{d-1}$ , donde  $A$  es la energía libre de la interfase entre los dos vacíos<sup>18</sup>. La longitud de correlación está dada por

$$\xi^{-1} = \log \frac{\lambda_1}{\lambda_2}, \quad (2.76)$$

donde  $\lambda_1 \geq \lambda_2$  son los dos autovalores máximos de la matriz de transferencia. Por lo tanto para calcular la longitud de correlación tenemos que diagonalizar

$$\begin{pmatrix} \exp(-FV) & \exp(-FV + AL^{d-1}) \\ \exp(-FV - AL^{d-1}) & \exp(-FV) \end{pmatrix}, \quad (2.77)$$

donde  $V = L^{d-1}L_t$ . Los autovalores son

$$\lambda_{1,2} = e^{-(FV)(1 \pm \exp(-AL^{d-1}))}. \quad (2.78)$$

Entonces<sup>19</sup>

$$\xi \approx e^{AL^{d-1}}. \quad (2.79)$$

Por lo que aparece una longitud de correlación muy grande, o lo que es equivalente, una masa muy pequeña.

<sup>18</sup>Generalizar a más vacíos, por ejemplo un vacío  $q$ -degenerado, es fácil.

<sup>19</sup> $\exp(-AL^{d-1}) \ll 1$  y se puede realizar un desarrollo en serie del logaritmo de la ecuación (2.76)

Además de la masa definida en la ecuación (2.72) se puede definir lo que se denomina masa física,  $m_{\text{phys}}$ , que es la diferencia de energía entre el estado fundamental y el primer excitado en cada fase. El cálculo numérico de esta cantidad es muy complicado debido a que los niveles se mezclan por el *tunneling*, cuando el volumen es finito.

De la fase pura, simétrica, la masa física puede extraerse mediante la ecuación (2.72).

Tal como se ha definido la  $m_{\text{phys}}$  deberemos calcularla en fases puras, es decir, si estamos en la fase rota, dividir nuestra sucesión de configuraciones en submuestras en las cuales se sepa, por ejemplo mediante el parámetro de orden, que con toda seguridad se encuentran en una fase pura.

Para ello se usará la siguiente ecuación

$$G_0(z) - \langle S \rangle^2 \equiv G_{\text{conex}}(z) \approx e^{-m_{\text{phys}}z}, \quad (2.80)$$

es decir, extraemos la masa física de la correlación conexa, para tener en cuenta los efectos que provienen del hecho de que  $\langle S \rangle \neq 0$ . En la fase no rota podemos usar la no conexa ya que el valor esperado de los espines es cero.

En algunos trabajos, *e.g.* [17, 19], se sugiere que la aparición de *crossing* es una señal muy clara de que la transición de fase de primer orden. Si no hay tal comportamiento la transición es continua.

Usaban como ejemplo el modelo de Ising tridimensional, ver figura 2.10, que presenta una transición de fase de segundo orden, en el cual se ve claramente la no existencia del *crossing*. Las masas tienden “uniformemente” al valor asintótico. Mientras que en el modelo de Potts, también tridimensional, aparece el *crossing*, figura 2.11. Este modelo presenta una transición de fase de primer orden que ha sido establecida mediante métodos numéricos con técnicas de tamaño finito. La importancia de este modelo es que, se ha sugerido<sup>20</sup>, pertenece a la misma clase de universalidad que QCD 4-dimensional a temperatura finita. Tanto la relación de universalidad de QCD a temperatura finita con Potts 3d y la aparición de *crossing* se han aceptado como prueba de que la transición de fase de QCD es de primer orden.

En la referencia [6] se discrepa de la identificación de la no aparición del *crossing* con transición de fase de segundo orden. Se asume que si la transición es de primer orden aparece el *crossing*. Para ello se apoyan en un argumento de M. Lusher [20].

Lusher demuestra que en una teoría escalar con autointeracción ( $\lambda_0\phi^3$ ), la masa del mesón calculada en un caja de tamaño  $L^{d-1}$ , con el eje temporal

<sup>20</sup>En sentido estricto sólo puede hablarse de universalidad en transiciones de segundo orden.

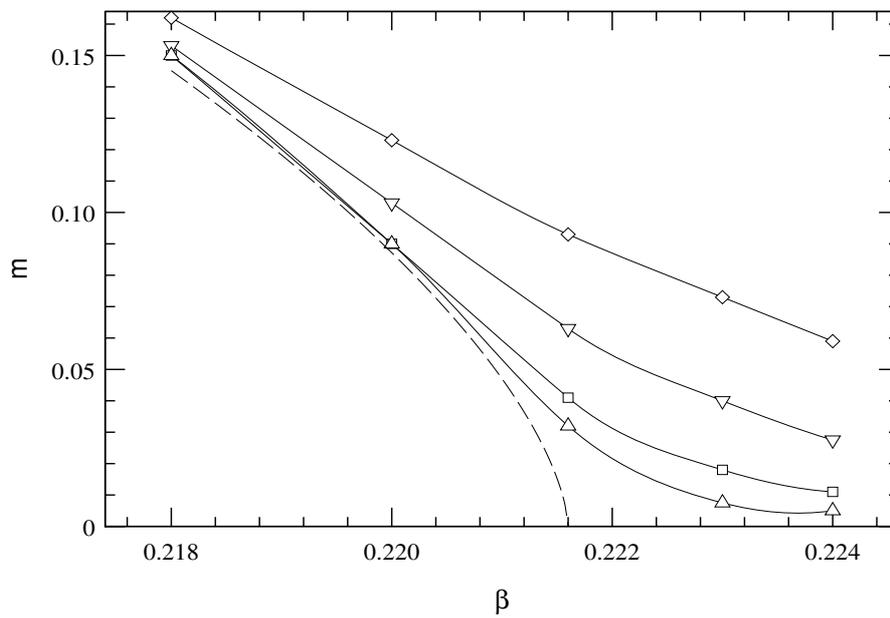


Figura 2.10: Inverso de la longitud de correlación para el modelo de Ising tridimensional. En línea discontinua se representa la estimación asintótica  $m = 5.0(\beta - \beta_c)^\nu$  con  $\beta_c = 0.221654$  y  $\nu = 0.629$ . Los símbolos son los siguientes:  $L = 16$  rombos,  $L = 24$  triángulos invertidos,  $L = 36$  cuadrados y  $L = 48$  triángulos.

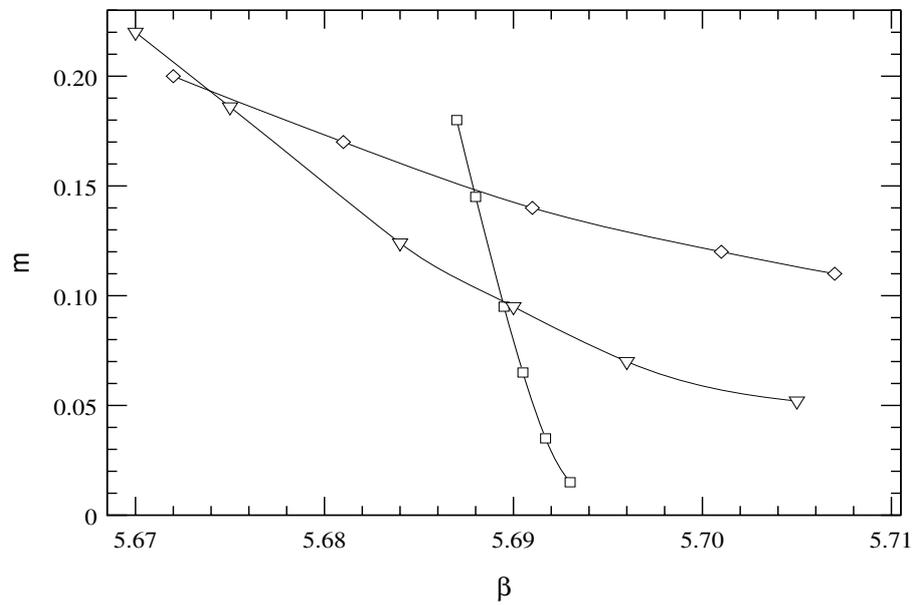


Figura 2.11: Inverso de la longitud de correlación para el modelo de Potts tridimensional con tres estados para tres retículos diferentes. Los símbolos utilizados son:  $L = 8$  rombos,  $L = 12$  triángulos invertidos y  $L = 24$  cuadrados.

infinito, que denotaremos por  $M(L)$ , tiende al valor continuo,  $m \equiv M(\infty)$  de la siguiente forma

$$\Delta m \equiv m - M_L = -\frac{3}{16\pi m^2 L} \left\{ \lambda^2 e^{-\frac{\sqrt{2}}{2} m L} + O(e^{-mL}/L^{5/4}) \right\}, \quad (2.81)$$

donde

$$\lambda = \Gamma(p, q, k) \quad (2.82)$$

$$p + q + k = 0, \quad p^2 = q^2 = k^2 = -m^2, \quad (2.83)$$

y  $\Gamma$  es la función de correlación 1PI (1-particle irreducible) a tres puntos.

Es evidente de la ecuación (2.81) que  $M_L$  crece con el volumen cuando  $\beta < \beta_c$ , [6, 7], al menos cuando  $L$  es grande.

En la referencia [6] se afirma que el argumento de que en las transiciones de segundo orden no hay *crossing* es una nueva versión de la *vieja* teoría de Landau de las transiciones de fase. Landau afirma que si tenemos una teoría efectiva de campos y la simetría de la interacción permite el término  $\phi^3$ , entonces la transición debe de ser de primer orden. Pero es posible que el coeficiente del término  $\phi^3$  tienda a cero cuando la temperatura tienda a la temperatura crítica, lo que debe ocurrir, por ejemplo, en el modelo de Potts bidimensional para  $q < 5$ . La equivalencia entre la teoría de Landau y la existencia de *crossing* se obtiene mediante el argumento de Lusher presentado en párrafos anteriores. Si tenemos una interacción a tres partículas, *i.e.* una interacción  $\phi^3$ , la masa crece cuando  $L$  crece, al menos cuando  $L$  es muy grande y no estamos en la región crítica.

Por lo tanto el criterio de *crossing* se violaría en el caso de la existencia de una transición de segundo orden para un sistema para el cual, siguiendo a Landau, la transición fuera de primer orden.

Un posible candidato es el modelo de Potts bidimensional con 4 estados, para el cual la teoría de campo medio predice una transición de primer orden mientras que Baxter ha demostrado [13] analíticamente que la transición es de segundo orden. En la sección siguiente estudiamos numéricamente este modelo y observaremos la existencia de *crossing*.

### 2.8.1 Resultados numéricos

La definición de la correlación es la ya citada en la ecuación (2.62). Se ha usado el método de la densidad espectral para obtener las curvas y además se han realizado simulaciones lejos del punto de origen del método de la densidad espectral, para mejor control de los errores.

Los resultados están presentados en la figura 2.12, en donde se observa claramente la existencia de *crossing*, contradiciendo la hipótesis de que en las transiciones de fase de segundo orden no se observa *crossing*.

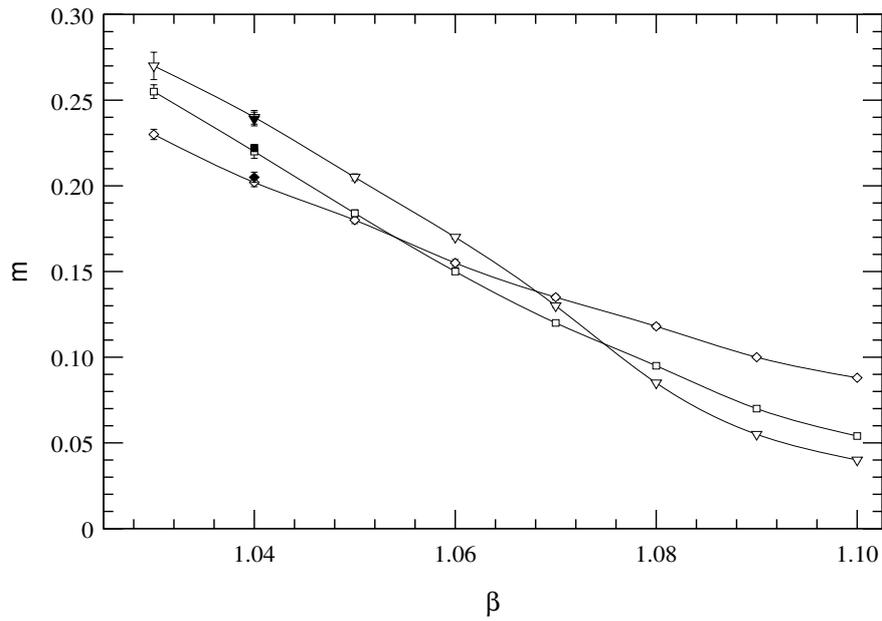


Figura 2.12: *Crossing* en el modelo de Potts con 4 estados. Las líneas continuas se han calculado mediante el método de la densidad espectral basado en simulaciones a  $\beta = 1.08$ . Los símbolos que caracterizan las curvas anteriores son:  $L = 10$  triángulo invertido vacío,  $L = 16$  cuadrado vacío y  $L = 24$  rombo vacío. También se superponen los resultados de tres simulaciones directas realizadas en  $\beta = 1.04$ . Para estos puntos usamos:  $L = 10$  triángulo invertido lleno,  $L = 16$  cuadrado lleno y  $L = 24$  rombo lleno.

## 2.9 Conclusiones

Se han analizado las propiedades de las transiciones de fase de primer orden débiles en el marco del modelo de Potts bidimensional obteniendo una muy buena descripción de su comportamiento considerando la existencia de una transición de fase de segundo orden en la fase metaestable.

Pensamos que esta descripción es general a todas las transiciones de fase de primer orden débiles, obteniendo una pseudouniversalidad, que está apoyada por el estudio de otros modelos teóricos y experimentales (*e.g.* cristales líquidos).

Caracterizamos la transición mediante la distancia entre el punto crítico y el punto crítico aparente. Encontramos exponentes críticos los cuales han sido medidos también en diversos experimentos.

También hemos dado un ejemplo de transición de fase de segundo orden donde aparece el *crossing*, rebatiendo el argumento de que éste sólo se presenta para transiciones de primer orden.



## Capítulo 3

# El Modelo $U(1)$ –Higgs

### 3.1 Introducción

El método clásico de construcción de las teorías cuánticas de campos (TCC) está basado en un desarrollo perturbativo asumiendo que la constante de acoplamiento es muy pequeña. Obviamente esto elimina la posibilidad de construir una TCC a un valor de la constante grande.

Este problema lo resolvió Wilson mediante su construcción [1]. Una buena exposición de esta idea puede encontrarse en [21].

Por lo tanto el primer paso para intentar construir una TCC es caracterizar los diferentes puntos críticos y posteriormente calcular los flujos del grupo de renormalización [22, 23, 24, 25, 26, 27]

En este capítulo hemos abordado el primer punto del programa enumerado en párrafos anteriores, es decir hemos caracterizado una amplia región del espacio de parámetros y hemos encontrado un punto crítico con exponentes gaussianos, que no implican trivialidad de la teoría donde es susceptible de definirse la teoría continua.

Hemos simulado numéricamente la región que separa las fases confinante y Higgs, ver figura 3.1. Hemos encontrado una línea de transiciones de primer orden que finaliza en un punto crítico.

Para limitarnos a un espacio biparamétrico hemos fijado el módulo de los campos de Higgs a 1, o lo que es equivalente hemos tomado el límite  $\lambda \rightarrow \infty$ . Se asume generalmente que la teoría con módulo fijo pertenece a la misma clase de universalidad que la teoría completa [27, 29, 28].

Para el cálculo de los exponentes críticos hemos usado fundamentalmente técnicas de tamaño finito, ver Apéndice C. Los resultados presentados son el producto de 8 meses de CPU de la máquina RTN de Zaragoza.

En la primera sección exponemos la formulación del modelo, en la siguiente describimos los casos límites del modelo dando, por completitud de la presentación, algunos cálculos de campo medio y la demostración del Teorema de Shrock. Hemos creído útil desarrollar con detalle los cálculos ya que estos se presentan en la literatura de forma muy esquemática. Pasamos posteriormente a describir algunos sistemas relacionados. Luego se definen los diferentes observables medidos. Finalmente damos los resultados de las simulaciones y las conclusiones [30, 31, 32].

## 3.2 Formulación del modelo

La acción de un campo escalar con autointeracción y con una simetría  $U(1)$  local (modelo  $U(1)$ -Higgs) puede escribirse en el retículo como

$$S = -\beta \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu\nu} - \kappa \sum_{\mathbf{r}, \mu} \text{Re } \bar{\Phi}_{\mathbf{r}} U_{\mathbf{r}, \mu} \Phi_{\mathbf{r}+\mu} + \lambda \sum_{\mathbf{r}} (|\Phi_{\mathbf{r}}|^2 - 1)^2 + 4\kappa \sum_{\mathbf{r}} |\Phi_{\mathbf{r}}|^2, \quad (3.1)$$

donde por  $\mathbf{r}$  denotamos un punto en el espacio 4-dimensional, los índices griegos  $\mu, \nu \in \{1, 2, 3, 4\}$  representan las 4 direcciones,  $\Phi_{\mathbf{r}}$  es el valor del campo escalar en  $\mathbf{r}$ ,  $U_{\mathbf{r}, \mu}$  es el campo gauge, perteneciente al grupo  $U(1)$ , y finalmente  $U_{\mathbf{r}, \mu\nu}$  es la plaqueta definida por el punto  $\mathbf{r}$  y las direcciones  $\mu$  y  $\nu$ .

Asumiremos que la acción (3.1) para  $\lambda$  finito pertenece a la misma clase de universalidad que aquella en la cual se ha tomado el límite  $\lambda \rightarrow \infty$ . Se puede ver que tomar este límite es equivalente a fijar el módulo de los campos Higgs a 1, por lo cual, salvo una constante aditiva, la acción queda como

$$S = -\beta \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu\nu} - \kappa \sum_{\mathbf{r}, \mu} \text{Re } \bar{\Phi}_{\mathbf{r}} U_{\mathbf{r}, \mu} \Phi_{\mathbf{r}+\mu}. \quad (3.2)$$

Con las definiciones actuales se puede ver que tanto los campos gauge como el campo escalar toman valores en el grupo  $U(1)$ .

## 3.3 Comportamiento crítico

### 3.3.1 Descripción del espacio de parámetros

En esta sección estudiaremos someramente los diferentes límites de la acción (3.2) cuando los parámetros  $\beta$  y  $\kappa$  toman valores extremos.

$\beta = \infty$

En este caso los campos gauge están congelados y la acción que queda es:

$$S = -\kappa \sum_{\mathbf{r}, \mu} \text{Re} \bar{\Phi}_{\mathbf{r}} \Phi_{\mathbf{r}+\mu}. \quad (3.3)$$

Esta acción tiene una simetría  $O(2)$  global. Genéricamente el modelo  $O(N)$  en cuatro dimensiones presenta una transición continua entre una fase desordenada, con simetría explícita  $O(N)$  a bajo  $\kappa$ , y una fase ordenada, a alto  $\kappa$ , donde la simetría  $O(N)$  se ha roto quedando una simetría  $O(N-1)$ . El teorema de Goldstone nos dice que la fase ordenada tiene  $N-1$  bosones de Goldstone sin masa (ondas de espín). La transición de fase es de segundo orden [33]. Podemos estimar la  $\kappa_c$  usando la aproximación de campo medio (MF) para ello usaremos la desigualdad convexa (2.30). Podemos reescribir la acción de este modelo como:

$$S = -\kappa \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) - h \sum_j \cos(\phi_j), \quad (3.4)$$

donde  $h$  es el campo magnético. Introduzcamos un parámetro variacional  $H$  con dimensiones de campo magnético y siguiendo la notación del capítulo 2 denotemos:

$$\rho = \frac{\exp((H+h)\cos\phi)}{\int_0^{2\pi} d\phi \exp((H+h)\cos\phi)}, \quad (3.5)$$

$$f = \kappa \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) - H \sum_j \cos\phi_j. \quad (3.6)$$

Siguiendo los mismos pasos llegamos a la siguiente cota superior a la energía libre por espín del sistema:

$$f_{xy} \leq H \frac{I_1(H+h)}{I_0(H+h)} - \log I_0(H+h) - \kappa d \left( \frac{I_1(H+h)}{I_0(H+h)} \right)^2 \equiv f. \quad (3.7)$$

Donde  $d$  es la dimensión del sistema y  $f \equiv -\frac{1}{V} \log \mathcal{Z}$ . A esta cota superior la denominaremos energía libre en la aproximación de campo medio. Además en esta aproximación la magnetización por espín será:

$$m = \langle \cos \phi \rangle = \frac{I_1(H+h)}{I_0(H+h)}. \quad (3.8)$$

$I_0$  está definida por:

$$I_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{z \cos \theta}, \quad (3.9)$$

e  $I_1$  es la derivada primera de la función  $I_0$  (Funciones de Bessel reducidas [34]). Para calcular el potencial en términos de la magnetización deberemos realizar una transformada de Legendre e invertir la relación entre  $M$  y  $H+h$ . Desarrollando en serie de Taylor la ecuación (3.8) tenemos:

$$m(z) = \frac{z}{2} - \frac{z^2}{16} + \frac{z^5}{96} - \frac{11z^7}{6144} + \frac{19z^9}{61440} + O(z^{11}), \quad (3.10)$$

donde  $z \equiv H + h$ . Invertiendo esta serie obtenemos:

$$z(m) = 2m + m^3 + \frac{5m^5}{6} + \frac{19m^7}{24} + \frac{147m^9}{180} + O(m^{11}). \quad (3.11)$$

Por otra parte la transformación de Legendre a realizar es:

$$v(\beta, M) = hm + f(\beta, h). \quad (3.12)$$

Sustituyendo los valores calculados anteriormente tenemos:

$$v(m) = (1 - \kappa d)m^2 + \frac{m^4}{4} + \frac{5m^6}{36} + \frac{19m^8}{192} + \frac{61m^{10}}{600} + O(m^{12}). \quad (3.13)$$

Por lo tanto, siguiendo a Landau [35] podemos afirmar, a la vista de este potencial, que el sistema presenta una transición de fase de segundo orden en  $\kappa = \frac{1}{d}$ .

Dado que el campo medio elimina fluctuaciones esta estimación de  $\kappa_c$  es una cota inferior al valor verdadero.

Para encontrar una cota superior podemos partir de la desigualdad siguiente demostrada por Frölich, Simon y Spencer [36]

$$0 \leq \widehat{G}(p) \leq \kappa^{-1} \frac{1}{\sum_{j=1}^d (1 - \cos(k_j))}, \quad (3.14)$$

donde  $\widehat{G}(p)$  es la transformada de Fourier de

$$G(x) = \langle \cos(\phi_x - \phi_0) \rangle - \langle \cos \phi_0 \rangle^2. \quad (3.15)$$

Tomando la transformada de Fourier inversa evaluada en  $x = 0$  tenemos

$$0 \leq G(0) \leq \kappa^{-1} I(d), \quad (3.16)$$

donde

$$I(d) \equiv \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_1 \dots dk_d}{(2\pi)^d} \frac{1}{\sum_{j=1}^d (1 - \cos k_j)}. \quad (3.17)$$

Es importante notar que  $I(d)$  es divergente en  $d = 2$  (donde no es aplicable el argumento que sigue y donde la transición es de orden infinito) y que cuando  $d$  es grande  $I(d) \sim d^{-1}$  y que si  $\kappa > I(d)$

$$\langle \cos(\phi_0) \rangle^2 = 1 - G(0) \geq 1 - \kappa^{-1} I(d) > 0, \quad (3.18)$$

independientemente de  $h$ , por lo que

$$\langle \cos \phi_0 \rangle|_{h=0} > 0. \quad (3.19)$$

Es decir, si  $\kappa > I(d)$ , hay magnetización espontánea, así tenemos la siguiente cota superior

$$\kappa_c \leq I(d). \quad (3.20)$$

por lo que la transición tendrá que ser en  $I(d)$  o a  $\kappa$  inferior. Si particularizamos ambos resultados a dimensión 4 tenemos:

$$0.250 \leq \kappa_c \leq 0.311. \quad (3.21)$$

#### $\kappa = 0$

La acción resultante es la teoría U(1) pura. Este sistema presenta una transición entre una fase máximamente desordenada, fase Confinante (a  $\beta$  baja), y una fase tipo Coulomb (que presenta fotones libres y un potencial estático entre dos cargas) a  $\beta$  alta [37]. La transición es de primer orden, situada aproximadamente en  $\beta = 1$ .

Aplicando un teorema debido a Shrock [38], se puede reescribir la teoría completa a pequeño  $\kappa$  como una teoría U(1) pura con un acoplamiento que difiere de  $\beta$  en un término proporcional a  $\kappa^4$ . Así podemos extender la transición de  $\kappa = 0$  a pequeños  $\kappa$ 's. Para demostrar este teorema desarrollaremos mediante *strong coupling* la parte Higgs, ya que asumimos que  $\kappa \ll 1$ , obteniendo:

$$\mathcal{Z} = \int d[U] \exp\{\beta \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu\nu}\} \times \\ \int d[\phi] \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{2}\right)^2 \left( \sum_l (\mathcal{L}_l + \mathcal{L}_l^+) \right)^2 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\kappa}{2}\right)^4 \left( \sum_l (\mathcal{L}_l + \mathcal{L}_l^+) \right)^4 \right\},$$

donde  $\mathcal{L}_l \equiv \bar{\Phi}_{\mathbf{r}} U_{\mathbf{r}, \mu} \Phi_{\mathbf{r}+\mu}$ ,  $l$  denota el link y  $\sum_l$  es la suma a todos los links. Las potencias impares no aparecen ya que al pertenecer los campos Higgs al grupo U(1) se anulan porque

$$\int_0^{2\pi} d\theta e^{n\theta} = 0, \quad \text{si } n \neq 0. \quad (3.22)$$

con tantos  $\mathcal{L}_l$  como  $\mathcal{L}_l^+$ . Realizando las sumas obtenemos que el coeficiente de  $(\frac{\kappa}{2})^2$  es el número de links del retículo. No aparecen campos gauge a este orden ya que se agrupan como  $UU^+$ , que al ser matrices unitarias dan lugar a la identidad.

El orden cuarto nos proporciona una contribución análoga a la anterior y otra que es proporcional a la plaqueta ( $U_{\mathbf{r},\mu\nu}$ ), esto es debido a que el término que contribuye es del tipo:

$$\sum_{i,j,k,l} \mathcal{L}_i \mathcal{L}_j \mathcal{L}_k^+ \mathcal{L}_l^+. \quad (3.23)$$

Emparejando los links  $i, k$  y  $j, l$  obtenemos una contribución independiente de  $U$  (obviamente también hay que considerar  $i, l$  y  $j, k$ ). Pero si elegimos los cuatro links de forma que construyan una plaqueta, cosa que podemos hacer al estar dos de ellos conjugados, la contribución final será proporcional a la plaqueta. Calculando los correspondientes factores combinatorios obtenemos la siguiente expresión para la función de partición

$$\mathcal{Z} = \int d[U] e^{\beta \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu \nu} \times} \\ \left( 1 + \left(\frac{\kappa}{2}\right)^2 n_l + \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{2}\right)^4 n_l^2 + \left(\frac{\kappa}{2}\right)^4 \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu \nu} \right).$$

donde por  $n_l$  hemos denotado el número de links del retículo. Si reexpresamos como exponenciales los polinomios anteriores (a orden  $O(\kappa^6)$  ambas son equivalentes) tenemos

$$\mathcal{Z} = C \int d[U] e^{\beta_{\text{eff}} \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu \nu}}, \quad (3.24)$$

donde  $C$  es una constante que depende sólo de  $\kappa$  y por lo tanto es irrelevante y

$$\beta_{\text{eff}} = \beta + \left(\frac{\kappa}{2}\right)^4. \quad (3.25)$$

Por lo tanto está demostrado el teorema.

$\kappa = \infty$

Podemos realizar la siguiente transformación gauge local del sistema

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{r}} &= \bar{\phi}_{\mathbf{r}}, \\ g_{\mathbf{r}+\mu} &= \bar{\phi}_{\mathbf{r}+\mu}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Donde  $g_{\mathbf{r}}$  es la transformación gauge local en el punto  $\mathbf{r}$ . Es posible realizar esta elección ya que los campos de Higgs pertenecen también al grupo gauge  $U(1)$ . Es decir, hemos elegido el gauge unitario. En esta elección de gauge desaparecen los campos de Higgs, todos son iguales a la unidad, y la acción (3.2) se reduce a:

$$S = -\beta \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu\nu} - \kappa \sum_{\mathbf{r}, \mu} \text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu}. \quad (3.27)$$

Si realizamos el límite  $\kappa \rightarrow \infty$  obtenemos que las únicas configuraciones de los campos gauge que contribuyen son aquellas que verifican  $\text{Re } U_{\mathbf{r}, \mu} = 1$ . Por lo tanto la acción queda trivial y no hay transición de fase. La situación cambia cuando los campos de Higgs tienen carga mayor que 1, en este caso la teoría límite es la teoría gauge  $Z(q)$ .

### $\beta = 0$

La situación corresponde a un modelo de espines con un desorden *annealed* (el desorden está en equilibrio termodinámico con los campos de Higgs [39], consultar el capítulo 6 para una discusión del desorden más amplia). La acción es:

$$S = -\kappa \sum_{\mathbf{r}, \mu} \text{Re } \bar{\Phi}_{\mathbf{r}} U_{\mathbf{r}, \mu} \Phi_{\mathbf{r}+\mu}. \quad (3.28)$$

Este modelo no presenta una transición de fase ya que podemos trabajar en el gauge unitario y llevar los campos de Higgs a 1. La integral funcional sobre los campos de Higgs es trivial y la parte gauge es una teoría separable, sin interacción.

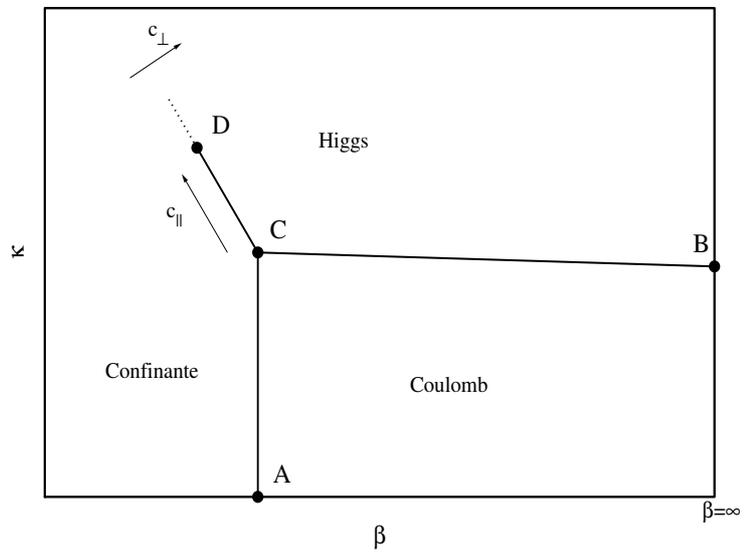
### Interior del espacio de parámetros

El diagrama de fases de este modelo fue estudiado en la referencia [40] y está recogido en la figura 3.1. Posteriores estudios han completado sus resultados.

En el punto “C”, punto triple, hay consistencia de las tres fases: Coulomb, Higgs y Confinante.

Si consideramos  $\lambda \neq \infty$  la mayor modificación es que el punto final “D” tiende al eje  $\beta = 0$  conforme  $\lambda$  crece y finalmente lo corta.

La línea “B-C” es una línea de transiciones de segundo orden, la línea vertical “A-C” es de primer orden y veremos en este capítulo que la línea “D-C” es, de nuevo, de primer orden. El punto final “D” de acuerdo con nuestro estudio es de segundo orden.

Figura 3.1: Diagrama de fases del modelo  $U(1)$ -Higgs.

### 3.4 Comportamiento crítico en sistemas relacionados

La estructura de la línea “C-D” sugiere que nuestro modelo es similar a una amplia variedad de sistemas como por ejemplo el modelo de Ising con campo magnético o la transición de fase líquido-vapor.

El modelo de Ising con interacción de primeros vecinos tiene como acción

$$S = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \quad (3.29)$$

que presenta una línea de transiciones de fase de primer orden ( $h = 0, J > J_c$ ) que finaliza en un punto crítico  $J_c$ .

La posición de este punto se puede determinar estudiando el comportamiento crítico de la magnetización sobre la línea de primer orden, que en este caso debido a la simetría de la acción  $h \rightarrow -h$  es una línea recta con  $h = 0$ . La magnetización se comporta como:

$$M \sim (J - J_c)^\beta, \quad J > J_c. \quad (3.30)$$

Los exponentes  $\alpha$  y  $\gamma$  son definidos respectivamente del comportamiento crítico del calor específico y de la susceptibilidad:

$$C \sim |J - J_c|^{-\alpha}, \quad (3.31)$$

$$\chi \sim |J - J_c|^{-\gamma}. \quad (3.32)$$

Los tres exponentes críticos definidos anteriormente verifican la relación de escala:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (3.33)$$

Como ya se ha citado, otro modelo análogo es la transición líquido-vapor. Se puede ver que ambos modelos pertenecen a la misma clase de universalidad [18]. Asumimos para ello que las partículas están situadas en una red discreta, y definimos un número de ocupación  $n_i$  en cada punto  $i$ , que puede ser 0 o 1. Si postulamos un potencial de interacción tipo esferas duras podemos asignar a este potencial una interacción a primeros vecinos que favorezca la ocupación de los vecinos vacíos. Si finalmente añadimos un potencial químico, es decir, una fuente acoplada al número de partículas, obtenemos

$$-\beta\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i, \quad (3.34)$$

que está relacionado trivialmente con el modelo de Ising mediante la transformación  $S_i = 2n_i - 1$ .

La falta de una simetría implica que la línea de las transiciones de fase de primer orden ya no es una línea recta y que desconocemos la localización sobre esta línea del punto crítico. En este sistema se han medido los exponentes críticos resultando iguales, dentro del error experimental, a los del modelo de Ising en 3 dimensiones.

Por otra parte, en nuestro modelo no tenemos una simetría explícita del tipo de la del modelo de Ising así que no podemos determinar la posición y la pendiente de la línea de transición, la cual debe de ser calculada mediante métodos numéricos. Sin embargo, podemos definir los exponentes críticos de una manera similar.

### 3.5 Observables

Debido a la existencia de dos acoplamientos podemos definir las energías de las plaquetas y de los links (intensivas) como:

$$E_P = \frac{1}{6V} \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re} U_{\mathbf{r}, \mu \nu}, \quad (3.35)$$

$$E_L = \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{r}, \mu} \text{Re} \bar{\Phi}_{\mathbf{r}} U_{\mathbf{r}, \mu} \Phi_{\mathbf{r}+\mu}, \quad (3.36)$$

donde  $V = L^4$  es el volumen del retículo, en términos de las energías definidas la acción puede ser escrita como

$$-S = \beta E_P 6V + \kappa E_L 4V. \quad (3.37)$$

Con estas definiciones  $E_P$  y  $E_L$  toman valores en el intervalo  $[-1, 1]$ .  $E_P \rightarrow 1$  cuando  $\beta \rightarrow \infty$  y  $E_L \rightarrow 1$  cuando  $\kappa \rightarrow \infty$ . Además  $\langle E_P \rangle = \langle E_L \rangle = 0$  cuando  $\beta = \kappa = 0$ .

Finalmente podemos escribir la función de partición de la siguiente forma

$$\mathcal{Z}(\beta, \kappa) = \int d[U] d[\Phi] e^{-S}. \quad (3.38)$$

Debido a que el número de links ( $4V$ ) es diferente del número de plaquetas ( $6V$ ) es conveniente introducir el parámetro  $\kappa' \equiv 2\kappa/3$  para simetrizar la acción.

Podemos calcular, en estos nuevos parámetros, la matriz de fluctuaciones, o de correlaciones conexas,

$$F_{ij} \equiv \langle E_i E_j \rangle - \langle E_i \rangle \langle E_j \rangle = \frac{1}{(6V)^2} \frac{\partial^2 \log \mathcal{Z}(x_i, x_j)}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (3.39)$$

donde

$$x_1 = \beta, \quad x_2 = \kappa', \quad E_1 = E_P, \quad E_2 = E_L. \quad (3.40)$$

En cada punto del espacio de parámetros  $(\beta_0, \kappa'_0)$  la matriz  $F$  puede ser diagonalizada, llamaremos  $\lambda_{\max}$  y  $\lambda_{\min}$  al autovalor máximo y mínimo respectivamente. La matriz  $F$  será diagonal en las nuevas coordenadas, que estarán relacionadas con las originales mediante una rotación de ángulo  $\theta$

$$c_{\perp} \equiv \beta \cos \theta + \kappa' \sin \theta, \quad (3.41)$$

$$c_{\parallel} \equiv -\beta \sin \theta + \kappa' \cos \theta. \quad (3.42)$$

De lo anterior se deduce que los siguientes operadores están descorrelacionados

$$E_{\perp} \equiv E_1 \cos \theta + E_2 \sin \theta, \quad (3.43)$$

$$E_{\parallel} \equiv -E_1 \sin \theta + E_2 \cos \theta. \quad (3.44)$$

En términos de estas nuevas cantidades podemos reescribir la acción como

$$-S = (c_{\perp} E_{\perp} + c_{\parallel} E_{\parallel}) 6V. \quad (3.45)$$

Si asumimos que el punto “D” es de segundo orden, se esperarán divergencias en algunas magnitudes termodinámicas. Si usamos la analogía con el modelo de Ising desarrollada en la sección anterior, podemos escribir las siguientes fórmulas para las, previamente definidas, cantidades termodinámicas:

$$\Delta E_{\perp}(c_{\parallel}) \equiv \left. \frac{\partial f}{\partial c_{\perp}} \right|_{c_{\perp}=a^+} - \left. \frac{\partial f}{\partial c_{\perp}} \right|_{c_{\perp}=a^-} \sim (c_{\parallel} - c_{\parallel}^c)^{\beta}, \quad c_{\parallel} < c_{\parallel}^c, \quad (3.46)$$

$$\chi(c_{\parallel}) \equiv \left. \frac{\partial^2 f}{\partial c_{\perp}^2} \right|_{c_{\perp}=a} = (6V) \lambda_{\max} \sim |c_{\parallel} - c_{\parallel}^c|^{-\gamma}, \quad (3.47)$$

$$C(c_{\parallel}) \equiv \left. \frac{\partial^2 f}{\partial c_{\parallel}^2} \right|_{c_{\perp}=a} = (6V) \lambda_{\min} \sim |c_{\parallel} - c_{\parallel}^c|^{-\alpha}, \quad (3.48)$$

donde  $f \equiv \frac{1}{6V} \log \mathcal{Z}$  es la energía libre intensiva,  $\chi$  es la susceptibilidad y  $C$  es el calor específico. Hemos denotado por  $a$  el valor de  $c_{\perp}$  en la línea de transiciones de primer orden, que como veremos es independiente de  $c_{\parallel}$  en la región del espacio de parámetros de interés para nosotros, zona cercana al punto “D”.

El comportamiento crítico para  $\Delta E_{\perp}$  es análogo a la magnetización en el modelo de Ising. Denotamos por  $\Delta E_{\perp}$  la diferencia entre  $E_{\perp}$  en la fase confinante y en la fase Higgs cuando  $c_{\perp} \rightarrow a$ .

### 3.6 El método numérico

Para simular el grupo  $U(1)$  hemos usado el subgrupo  $Z_N$  con  $N = 1024$ , debido a que en la región de interés las fluctuaciones de las variables son grandes, típicamente del orden de un radián, y la transición de fase asociada a este grupo discreto,  $Z_N$ , aparece a una  $\beta = 0.78/(1 - \cos \frac{2\pi}{N})$  [41], si  $N = 1024$  entonces  $\beta = 1.36 \times 10^8$  que está muy lejos de la región de  $\beta$ 's que vamos a estudiar en este trabajo.

El algoritmo de *update* es Metropolis con paso variable y con una aceptación del 60 %.

Además, hemos usado intensivamente el método de la densidad espectral para movernos en el espacio de parámetros. Ha resultado muy útil para encontrar el pico del calor específico y corregir los valores de los parámetros para ir acercándonos a la transición. Concretamente trabajamos fijando el valor de  $\kappa$  y buscando el valor de  $\beta$ , punto crítico aparente, para el cual la fluctuación de la energía tuviera un máximo y si la simulación no está suficientemente cerca del “punto crítico aparente”, ajustar de nuevo los parámetros para una nueva simulación.

Para construir los histogramas hemos discretizado  $E_{\perp}$  usando cien subintervalos, construyendo así su correspondiente histograma (figura 3.2, parte superior). Mediante este histograma y con la ayuda del método de la densidad espectral calculamos los distintos valores de  $E_{\perp}$  y  $\partial E_{\perp} / \partial c_{\perp}$  (correlación conexas de  $E_{\perp}$ ), en el entorno del punto de la simulación, determinando la mejor aproximación al punto fijo buscando el máximo de la derivada (figura 3.3).

También nos hemos movido en ambas direcciones. El autovector correspondiente al autovalor mínimo de la matriz de fluctuaciones, es paralelo a la línea de transición. Por lo que el rango de aplicabilidad en la dirección  $c_{\parallel}$  es grande (ver Apéndice A).

También hemos usado, el método de los multihistogramas (apéndice A). Este método aúna toda la información proveniente de un retículo dado. Este método ha sido muy útil para algunos observables. (figura 3.4).

Normalmente el método de la densidad espectral es muy útil para encontrar el valor del acoplamiento donde el valor de algún observable es máximo. En este capítulo lo hemos usado para localizar la línea de transiciones “C-D” fijando  $c_{\parallel}$ . Sin embargo, para localizar el punto “D”, nos deberíamos mover en la dirección  $c_{\parallel}$ , pero no hemos encontrado el máximo de ningún observable sencillo en esta dirección, así que la utilidad de este método para encontrar el punto “D” es muy reducida.

Los errores asociados a las medidas han sido estimados mediante el método del jackknife (Apéndice A). Para estimar el tamaño de los bloques realizamos una primera estimación de la correlación en el tiempo de Monte

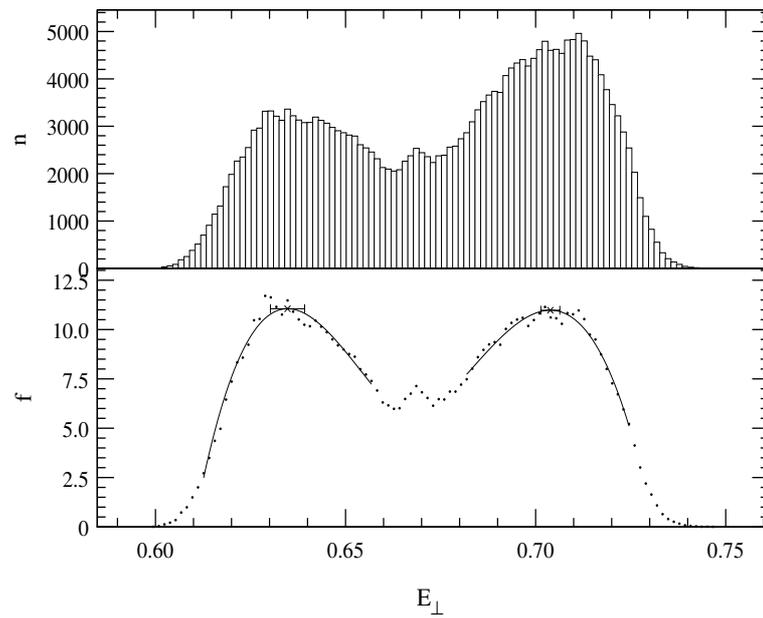


Figura 3.2: En la parte superior presentamos un histograma tipo de la variable  $E_{\perp}$ . En la parte inferior representamos el ajuste con un *cubic spline* a los dos máximos que nos permite evaluar el calor latente. Los datos corresponden a 500000 pasos de Monte Carlo en un retículo  $L = 16$  en el punto  $(\beta, \kappa) = (0.8495, 0.525)$ .

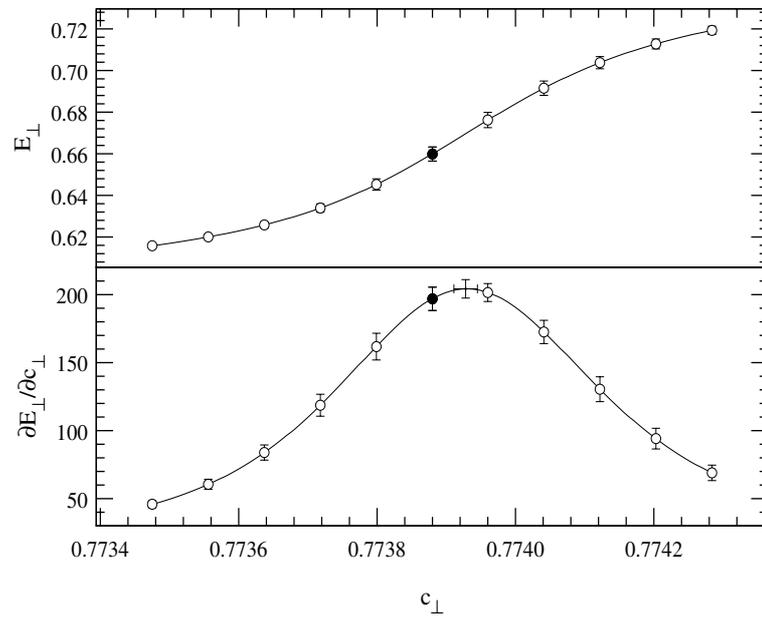


Figura 3.3: En la parte superior presentamos  $E_{\perp}$  y en la inferior  $\partial E_{\perp} / \partial c_{\perp}$  obtenidos usando el método de la densidad espectral en una simulación a  $(\beta, \kappa) = (0.8495, 0.525)$  con 500000 pasos de Monte Carlo. Los círculos llenos representan el punto de la simulación.

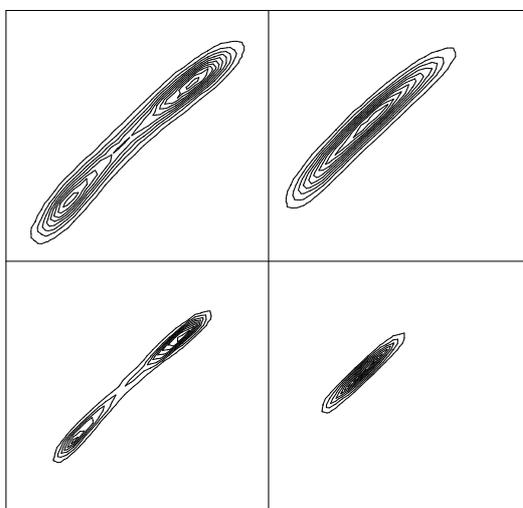


Figura 3.4: Ejemplo de algunos histogramas usados en el método de la densidad espectral de  $L = 8$  en la parte superior y  $L = 12$  en la parte inferior. La columna de la izquierda corresponde a los parámetros  $(\beta, \kappa) = (0.854, 0.52)$  mientras que en la columna de la derecha  $(\beta, \kappa) = (0.835, 0.54)$ .

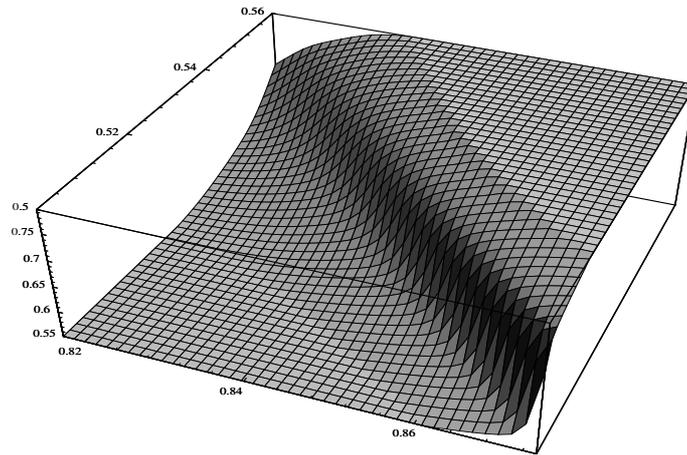


Figura 3.5: Valor medio de  $E_L$  como función de  $(\beta, \kappa)$  calculado mediante el método de los multihistogramas cerca del punto crítico en un retículo  $L = 8$ .

Carlo y construimos bloques estadísticamente independientes.

Para realizar los ajustes hemos usado fundamentalmente la rutina MINUIT que está incluida en las librerías del CERN.

### 3.7 Medidas

En cada simulación ( $\beta$  y  $\kappa$  fijos) almacenamos las energías de las plaquetas y de los links para construir sus correspondientes histogramas. Finalmente construimos un histograma bidimensional en el plano  $(E_P, E_L)$  (figura 3.4).

Uno puede moverse en cualquier dirección del plano  $(\beta, \kappa)$  usando el método de la densidad espectral en su versión bidimensional (Apéndice A). Como ejemplo de esto, en la figura 3.5, está representado el valor medio de  $E_L$  como función de los parámetros mediante el método de los multihistogramas.

Sin embargo la mayor parte del trabajo presentado en este capítulo ha sido obtenido mediante histogramas unidimensionales. Para realizar esto efectuamos una rotación en el espacio de parámetros en orden a discretizar la energía  $E_{\perp}$ . Hemos usado la simplificación de usar el mismo ángulo de rotación para todos los tamaños y todos los puntos en el espacio de parámetros. Esto lo hacemos así ya que en la región de interés este ángulo varía menos que el 1%, así que el error cometido es despreciable en la mayoría de los observables. Únicamente hemos medido el mínimo autovalor  $\lambda_{\min}$  diagonalizando directamente la matriz de fluctuaciones en cada simulación.

Otra cantidad importante de calcular es el calor latente, que es la diferencia de  $E_{\perp}$  a ambos lados de la línea de primer orden. Debido al efecto túnel este observable no está bien definido en un retículo finito. Nosotros lo estimaremos a partir del histograma de energías en el punto crítico, el calor latente será la distancia entre los dos mínimos del potencial efectivo en la línea de primer orden, esto es, la distancia entre los dos máximos en el histograma (figura 3.2, parte superior). Desafortunadamente los datos numéricos nos producen un histograma que es una función suave con una componente de ruido. Por lo tanto es difícil realizar una estimación del máximo. Nosotros hemos utilizado, para disminuir el error estadístico, un ajuste mediante un *cubic spline* de cada una de las dos regiones cercanas a los dos máximos, así se puede medir fácilmente la distancia entre los máximos de dos funciones suaves, que será nuestra estimación del calor latente (figura 3.2, parte inferior).

El número de iteraciones realizadas en los retículos más grandes para  $\kappa \in [0.52, 0.54]$  han sido

L	$\kappa$	n° iteraciones de Monte Carlo
16	0.52	$200 \times 10^3$
16	0.525	$500 \times 10^3$
16	0.5275	$600 \times 10^3$
16	0.53	$800 \times 10^3$
16	0.54	$200 \times 10^3$
24	0.52	$100 \times 10^3$
24	0.5275	$800 \times 10^3$
24	0.53	$200 \times 10^3$

así que en el entorno del punto crítico hemos realizado alrededor de cien mil iteraciones de Monte Carlo.

## 3.8 Resultados

En primer lugar fijaremos

$$\theta \equiv 0.96, \quad (3.49)$$

que es dentro del 1% el valor que hemos usado para el ángulo de la matriz de fluctuación.

Dado que no hay una simetría explícita como en el modelo de Ising la rectitud de la línea de transiciones de primer orden no puede ser asumida y por lo tanto el ángulo de rotación obtenido diagonalizando la matriz de fluctuaciones no es constante sobre la línea de primer orden, sin embargo hemos obtenido numéricamente, que sobre la línea,  $c_{\perp}$  es prácticamente constante, cambia menos que el 0.01% para  $\kappa \in [0.52, 0.54]$ , o en términos del otro nuevo parámetro  $c_{\parallel} \in [-0.501, -0.478]$ .

### 3.8.1 Calor latente

Como se ha escrito anteriormente el exponente asociado con el comportamiento del calor latente en las vecindades del punto crítico es  $\beta$ .

Sobre la línea de primer orden hay una discontinuidad en  $E_{\perp}$  y la diferencia entre los valores a ambos lados de la línea, en el límite termodinámico, será el calor latente. Como se ha expresado anteriormente medimos el calor latente a partir del histograma de energías ajustando cada uno de los dos picos mediante un polinomio. Evidentemente si la altura de los dos picos no es la misma el histograma necesita, mediante el método de la densidad espectral, una modificación en  $c_{\perp}$ , para igualarlos.

Debido a que  $E_{\parallel}$  es continua sobre la línea cualquier combinación lineal de  $E_{\perp}$  y  $E_{\parallel}$  presentará la discontinuidad con la única condición que el coeficiente de  $E_{\perp}$  sea no nulo. En esta sección presentaremos medidas del calor latente a partir de la energía de la plaqueta y la compararemos con los datos extraídos de la combinación óptima teórica de las energías de plaquetas y links, que es precisamente  $E_{\perp}$ . En la figura 3.6 presentamos los datos relativos a  $E_{\perp}$  frente a  $c_{\parallel}$ , mientras que en la figura 3.7, presentamos los datos referidos a la energía de la plaqueta, en función de  $L$ .

Aunque el comportamiento crítico de este observable en ambas figuras es apreciable en principio es difícil una determinación precisa del exponente crítico  $\beta$ .

En principio hay que remarcar que la ecuación (3.46) sólo se satisface en el límite termodinámico. En un retículo finito uno esperaría violaciones a la ley  $\Delta E_{\perp} = A(c_{\parallel} - c_{\parallel}^c)^{\beta}$ , sin embargo podríamos suponer que la citada violación se tradujera en una dependencia de los parámetros  $A, c_{\parallel}^c$  y  $\beta$  con el tamaño del retículo. En particular uno esperaría una dependencia

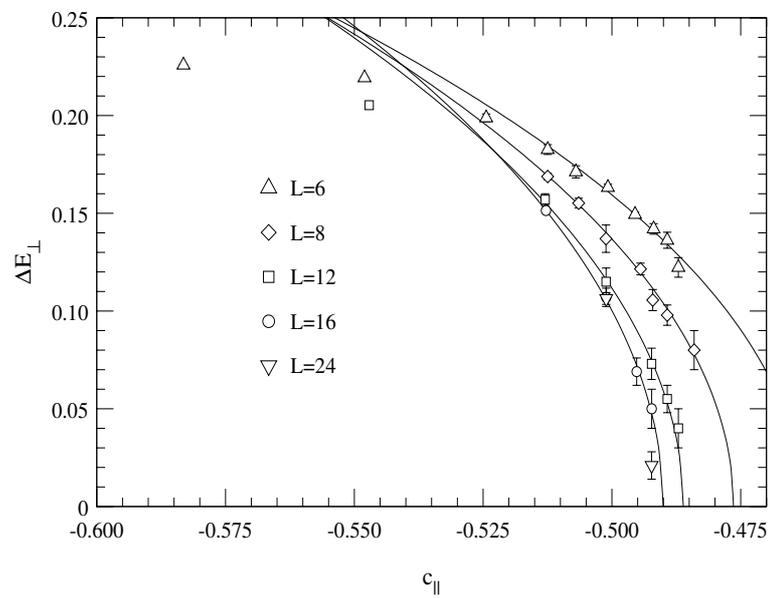


Figura 3.6:  $E_{\perp}$  como función de  $c_{\perp}$ . Las líneas continuas son ajustes tipo potencias a los datos.

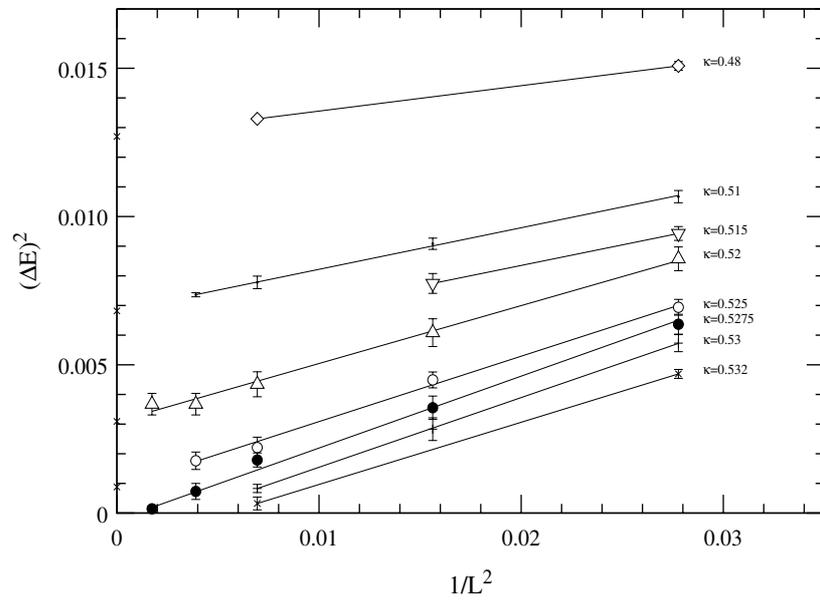


Figura 3.7: Calor latente al cuadrado  $(\Delta E)^2$  como función de  $1/L^2$ .

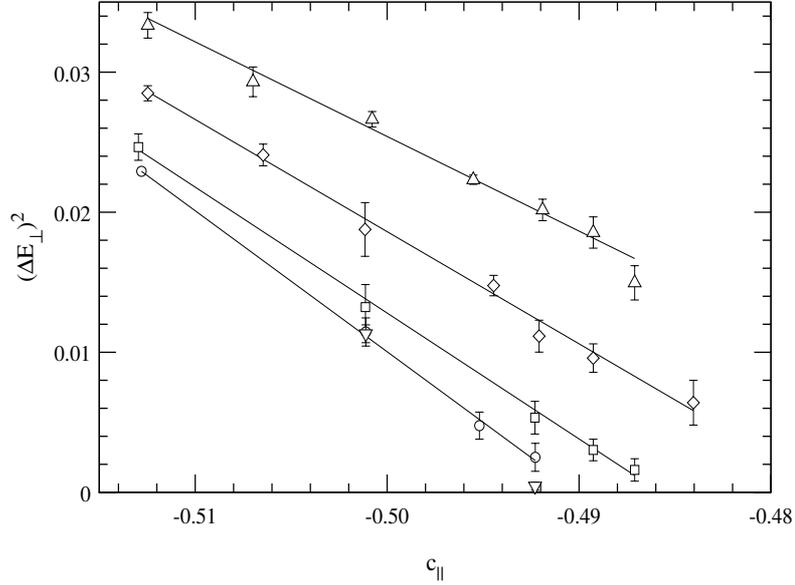


Figura 3.8: Calor latente al cuadrado,  $\Delta E_{\perp}^2$ , en función de  $c_{\parallel}$ .

muy fuerte de  $c_{\parallel}^c$  con  $L$  como estudiaremos en el apéndice C. Para calcular los exponentes ajustaremos todos los datos con  $\beta$  independiente de  $L$ , permitiendo una dependencia en el tamaño finito de los otros parámetros. Sucesivamente iremos eliminando los datos del retículo más pequeño para ir observando el comportamiento asintótico de los parámetros. El resultado para la plaqueta es

$$\begin{aligned} L = 12, 16 & \quad \beta = 0.54(6) \\ L = 16 & \quad \beta = 0.47(9) \end{aligned} \quad (3.50)$$

Mientras que para los datos de  $E_{\perp}$

$$\begin{aligned} L = 6, 8, 12, 16 & \quad \beta = 0.53(7) \\ L = 8, 12, 16 & \quad \beta = 0.53(7) \\ L = 12, 16 & \quad \beta = 0.55(9) \\ L = 16 & \quad \beta = 0.50(11) \end{aligned} \quad (3.51)$$

Aunque, en ambos casos, los errores estadísticos no nos permiten observar una tendencia monótona, ambas series apuntan al valor clásico del exponente, *i.e.*  $\beta = \frac{1}{2}$ .

En la figura 3.8 presentamos los datos del calor latente al cuadrado

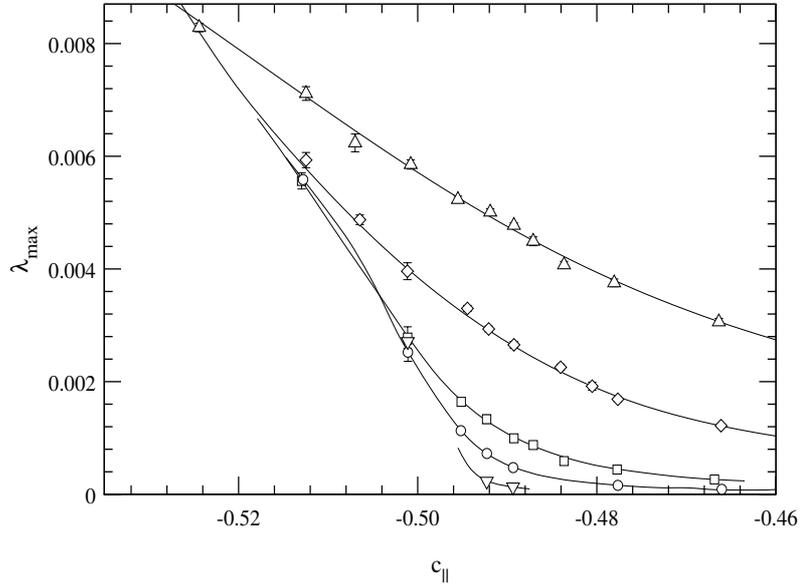


Figura 3.9: Máximo autovalor de la matriz de fluctuaciones en función de  $c_{\parallel}$ . La línea continua ha sido obtenida mediante el método de los multihistogramas.

extraído de  $E_{\perp}$  en función del parámetro  $c_{\parallel}$  para los puntos cercanos al punto crítico. Los datos son compatibles con un ajuste lineal.

Aunque ambos conjuntos de datos están correlacionados,  $E_P$  y  $E_{\perp}$ , no son completamente dependientes, de modo que las estimaciones anteriores además de ser útiles como test de consistencia permiten mejorar la estimación para el valor de  $\nu$ .

### 3.8.2 Autovalor máximo

Una forma alternativa de calcular el exponente  $\beta$  es midiendo la fluctuación de la energía. Anteriormente hemos denotado por  $\lambda_{\max}$  la fluctuación en  $E_{\perp}$ . En el límite termodinámico se verifica que  $\lambda_{\max} = (\Delta E_{\perp})^2/4$  (la distribución de probabilidad de  $E_{\perp}$  está compuesta por la suma de dos deltas de Dirac). Es interesante remarcar que medir  $\lambda_{\max}$  es equivalente a medir el cuadrado de la magnetización (en un sistema magnético) para eliminar así cancelaciones debidas al efecto túnel.

En la figura 3.9 presentamos la evolución de  $\lambda_{\max}$  como función de  $c_{\parallel}$

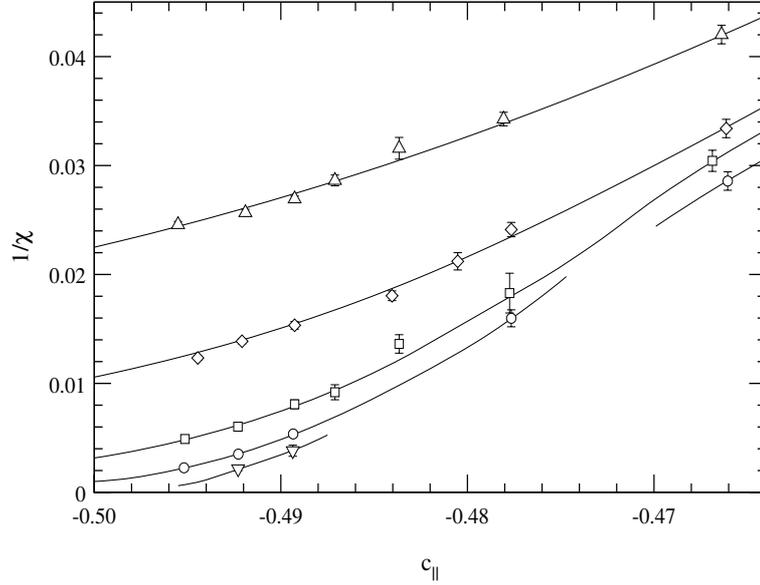


Figura 3.10: Inverso de la susceptibilidad en ausencia de coexistencia de fases como función de  $c_{\parallel}$ . La línea continua se ha obtenido mediante el método de los multihistogramas.

para diferentes retículos. Vemos una ventana, para los retículos grandes, que es casi lineal. Como  $\lambda_{\max} = A(c_{\parallel} - c_{\parallel}^c)^{2\beta}$  entonces  $\beta$  es cercano a  $1/2$ .

Hay que señalar que el error estadístico de  $\lambda_{\max}$  es mucho menor que el correspondiente al calor latente. Desgraciadamente la desviación del autovalor máximo del cuadrado del calor latente es grande debido a efectos de tamaño finito y por lo tanto no es directo obtener una estimación precisa del exponente  $\beta$  y su error a partir del autovalor máximo. En la figura 3.9, se muestra el comportamiento prácticamente lineal de  $\lambda_{\max}(c_{\parallel})$ .

### 3.8.3 Susceptibilidad

La susceptibilidad  $\chi = \partial E_{\perp} / \partial c_{\perp}$  está relacionada con el autovalor máximo de la matriz de fluctuaciones cuando no hay coexistencia de fases y su medida es directa:  $\chi = 6V\lambda_{\max}$ . Cuando  $c_{\parallel} < c_{\parallel}^c$  deberemos medir  $\chi$  en  $c_{\perp}$  cerca de la línea de primer orden y después de esto tomar el límite a la línea desde uno de los dos lados. Alternativamente, y este es el método que seguiremos, podemos dividir el histograma en  $E_{\perp}$  en dos partes y medir

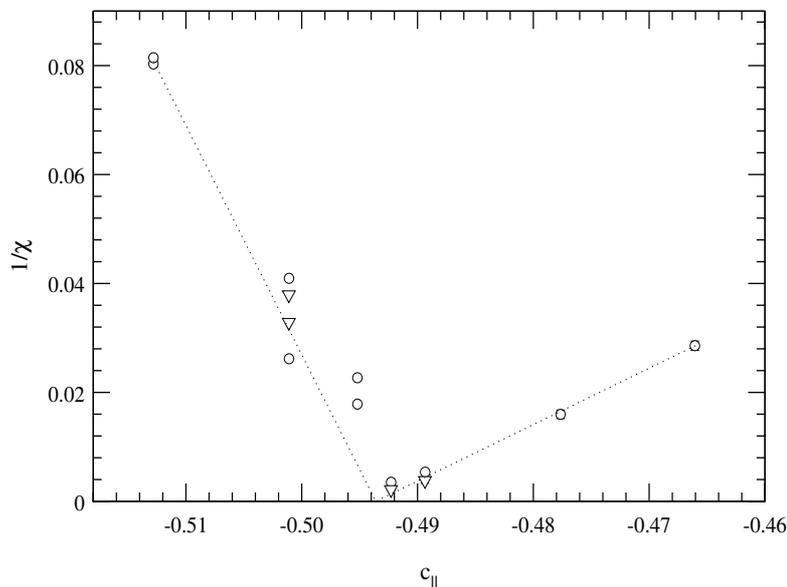


Figura 3.11: Inverso de la susceptibilidad a ambos lados de la transición. Sólo para datos de los retículos  $L = 16$  (círculos) y  $L = 24$  (triángulos).

la fluctuación en cada mitad. En el límite termodinámico ambos métodos son equivalentes. Sin embargo, para retículos pequeños y cerca del punto crítico los dos picos del histograma se solapan y la medida de  $\chi$  no puede ser precisa.

En la figura 3.10 representamos  $6V\lambda_{\max}$  que sólo puede llamarse susceptibilidad cuando  $c_{||} > c_{||}^c$ .

Los efectos de tamaño finito no nos permiten usar los puntos calculados para ajustar a la ley asintótica (3.47) y calcular  $\gamma$ . Para conseguir esto tenemos que tomar el límite termodinámico de los datos y entonces realizar el ajuste requerido. Hay que apuntar que el tomar el límite termodinámico introduce un error sistemático difícil de calcular y por lo tanto el error que damos es sólo la parte estadística. Nuestro resultado es

$$\gamma = 1.13(17) \quad (3.52)$$

que está de acuerdo con la predicción de la Teoría de Campo Medio,  $\gamma = 1$ .

En la figura 3.11 representamos los resultados para  $\chi$  en los retículos grandes, incluyendo también los valores para  $c_{||} < c_{||}^c$  obtenidos dividiendo en dos partes el histograma. Podemos obtener una estimación más precisa

calculando la dispersión excluyendo la región central; calculamos la dispersión en la primera fase integrando sobre la parte izquierda del primer pico, y en el segundo, integrando sobre la parte derecha del segundo pico. El error que acumulamos es difícil de evaluar, pero podemos estimarlos comparando los resultados de ambos picos (figura 3.10).

Si imponemos en el ajuste que los exponentes críticos son los mismos a ambos lados de la transición ( $\gamma = \gamma'$ ) obtenemos (después de excluir los puntos cercanos al punto crítico, los cuales tienen grandes correcciones a tamaño finito) un valor para  $\gamma$  cercano a 1.

Además, es importante señalar que la divergencia de la susceptibilidad mientras nos acercamos al punto crítico es una clara evidencia de un comportamiento de segundo orden en el punto final "D".

### 3.8.4 Calor específico

El autovalor pequeño de la matriz de fluctuaciones está relacionado con la energía  $E_{\parallel}$

$$\lambda_{\min} = \frac{1}{6V} \frac{\partial E_{\parallel}}{\partial c_{\parallel}} \quad (3.53)$$

Así que siguiendo la analogía con el modelo de Ising lo llamaremos calor específico. Dado que  $\partial E_{\parallel}/\partial c_{\parallel} \approx A|c_{\parallel} - c_{\parallel}^c|^{-\alpha}$ ,  $V\lambda_{\min}$  presentará una divergencia en el punto crítico si  $\alpha > 0$ . Si  $\alpha = 0$  la divergencia será logarítmica y por lo tanto muy difícil de observar.

Determinar el autovalor pequeño de una matriz con el otro autovalor bastante mayor no es una tarea fácil. Sin embargo, hemos obtenido determinaciones precisas. Nótese que el autovalor pequeño es la anchura del histograma bidimensional (ver figura 3.4) el cual puede claramente distinguirse de su longitud (autovalor máximo).

En la figura 3.12 representamos  $V\lambda_{\min}$  como función de  $c_{\parallel}$ . La ausencia de una divergencia en el punto crítico excluye prácticamente la posibilidad de un valor positivo de  $\alpha$ .

En sentido estricto, cuando hay coexistencia de fases hay que calcular el autovalor mínimo para las dos fases. Para retículos grandes el histograma bidimensional se hace muy estrecho, y la diferencia del ángulo en cada fase hace que el autovalor mínimo para el histograma completo crezca (figura 3.12). En cualquier caso esto no modifica nuestras conclusiones sobre el comportamiento cerca del punto crítico.

### 3.8.5 Análisis de tamaño finito

El exponente crítico  $\nu$  ha sido calculado mediante técnicas de tamaño finito. Concretamente hemos estudiado el corrimiento del punto crítico aparente

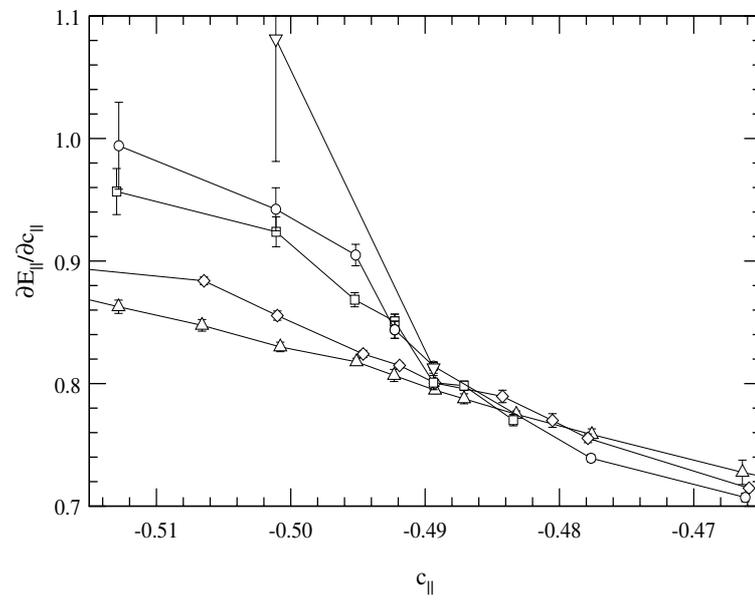
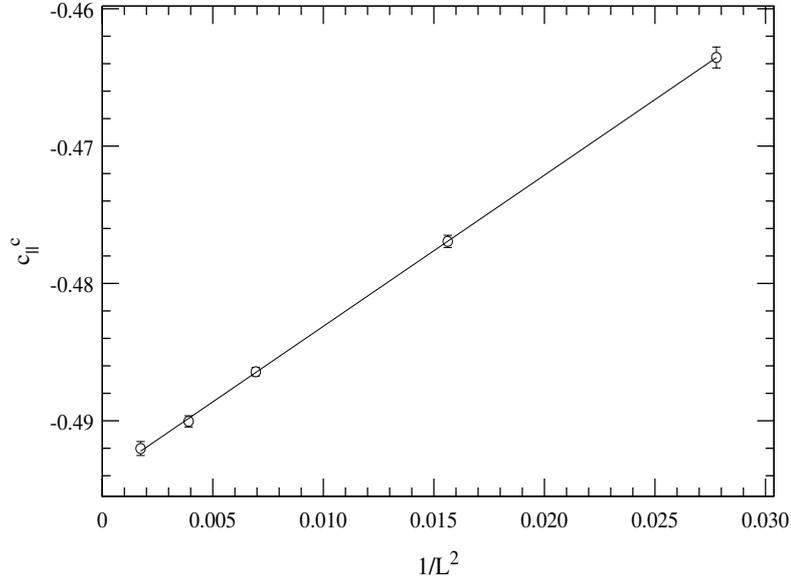


Figura 3.12: Autovalor mínimo de la matriz de fluctuaciones en función de  $c_{||}$ .

Figura 3.13:  $c_{||}^c(L)$  en función de  $1/L^2$ .

como función del tamaño del retículo. Esperamos que el desplazamiento siga la siguiente ley (Apéndice C.)

$$\Delta c_{||}^c(L) \sim L^{-\frac{1}{\nu}}. \quad (3.54)$$

En la figura 3.13 dibujamos los valores obtenidos ajustando los datos provenientes del calor latente para cada retículo, habiendo fijado el valor de  $\beta$  igual a  $1/2$ . Haciendo un ajuste a tres parámetros obtenemos

$$\nu = 0.52(4). \quad (3.55)$$

Hemos comprobado que moviéndonos en  $\beta$ , dentro de su error, el valor anterior se mantiene dentro del error. Si usamos los datos de la energía de la plaqueta obtenemos el siguiente resultado, ver figura 3.14,

$$\nu = 0.47(4). \quad (3.56)$$

De ambas estimaciones de  $\nu$  se puede prácticamente excluir que  $\nu \neq \frac{1}{2}$ . Para el pico del calor específico esta teoría de tamaño finito predice una ley

$$C_{\max}(L) \sim L^{\alpha/\nu}. \quad (3.57)$$

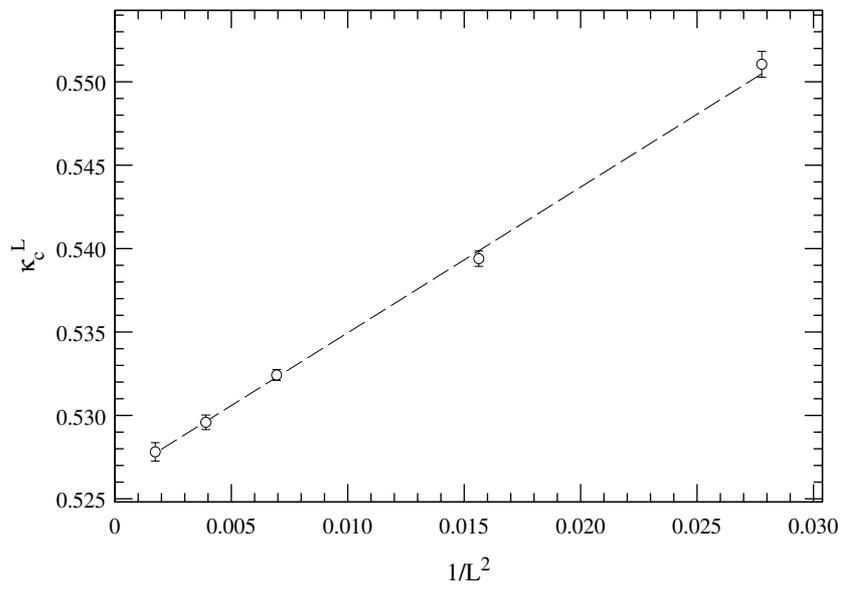


Figura 3.14: Punto crítico aparente  $k^c$  en función de  $1/L^2$ .

En la sección anterior hemos encontrado fuertes evidencias de que  $\alpha \leq 0$  por lo que hemos intentado ajustar el *scaling* del pico del calor específico con el tamaño del retículo con una fórmula similar a la que aparece en la teoría  $\lambda\phi_4^4$ , es decir:

$$C_{\max}(L) \sim (\log L)^b. \quad (3.58)$$

Donde  $b = 1/3$  en la teoría  $\lambda\phi_4^4$ , desgraciadamente los errores estadísticos no han sido suficientemente pequeños para que el MINUIT pudiera realizar un buen ajuste, por lo que no podemos dar resultados. Esto mismo les ha ocurrido a los autores de la referencia [42] en el caso de la electrodinámica no compacta ( $S_{\text{gauge}} \sim \sum U_{ij}^2$ ).

### 3.9 Conclusiones

Hemos encontrado un punto crítico donde podemos definir unos exponentes críticos análogamente a como se definen en los modelos de espines ferromagnéticos. Hemos localizado con precisión este punto que tiene como coordenadas:

$$\begin{aligned} c_{\perp}^c &= 0.77391(2), \\ c_{\parallel}^c &= -0.494(1). \end{aligned} \quad (3.59)$$

que corresponden a  $\beta^c = 0.8485(8)$ ,  $\kappa^c = 0.5260(9)$ . Aunque anteriormente hemos fijado en (3.49) el ángulo de rotación  $\theta$ , nuestra mejor estimación de este ángulo, que diagonaliza la matriz de fluctuación en el punto crítico, es  $\theta = 0.963(3)$ .

La extrapolación al límite termodinámico de los valores del calor latente para diferentes retículos tiene un límite diferente de cero cuando  $c_{\parallel} < c_{\parallel}^c$  lo que demuestra que la línea entre la fases Higgs y Confinante es una línea de primer orden.

Ajustando nuestras estimaciones del límite termodinámico para el inverso de la susceptibilidad vemos que se aproxima a cero cuando nos aproximamos al punto "D", lo que da una fuerte evidencia de que en este punto hay una transición de fase de segundo orden, *i.e.* es un punto crítico.

Nuestras estimaciones de los exponentes críticos son compatibles con los valores clásicos de estos:  $\alpha = 0, \beta = 1/2, \gamma = 1, \nu = 1/2$ .

Como problema abierto queda la caracterización del flujo del grupo de renormalización en el entorno de este punto <sup>1</sup>. El examen de los autovalores

---

<sup>1</sup>Debido a la poca estadística de cálculos previos [27] sería conveniente calcular el flujo en todo el espacio de parámetros. En este trabajo dan un flujo del grupo de renormalización en la línea diagonal, la que hemos estudiado en este capítulo, hacia el punto crítico final. De los datos que hemos presentado es claro que la longitud de correlación aumenta conforme nos acercamos al punto final por lo que el flujo de renormalización irá en sentido contrario.

en el entorno del punto crítico nos dirá cuantos parámetros independientes tendrá el límite continuo renormalizado de la teoría . El número de los parámetros independientes de la teoría renormalizada será igual al número de autovalores relevantes o marginales relevantes, es decir, igual al número de acoplamientos relevantes.

Otra posibilidad es calcular las constantes renormalizadas en el entorno de este punto siguiendo los cálculos citados en la referencia [43].

## Capítulo 4

# Los Modelos $U(1)$ –Higgs con carga $q = 8$ y $Z(8)$ puro gauge

### 4.1 Introducción

Históricamente los modelos que primero se simularon, dentro de las teorías gauge en el retículo, fueron los modelos gauge abelianos. Concretamente se estudiaron los grupos discretos  $Z(N)$ , que cuando  $N$  es grande simulan prácticamente el grupo  $U(1)$ , el cual es de gran interés físico. El estudio de estos grupos permite extraer comportamientos típicos que posteriormente se observan en los grupos abelianos continuos y es muy accesible de realizar numéricamente [41].

El modelo  $Z(2)$  gauge presenta una transición de primer orden [44], en 4 dimensiones, entre dos regiones masivas:  $\beta$  pequeña, región de acoplamiento fuerte, donde la carga eléctrica está confinada, conocida como fase confinante; y la región de gran  $\beta$ , donde la carga magnética está confinada y la eléctrica es libre [45], conocida como fase de Higgs.

Esta descripción puede extrapolarse en el límite  $N \rightarrow \infty$ , obteniendo el modelo  $U(1)$ . Este último modelo presenta una transición de fase entre una fase confinante y una fase Coulomb, sin masa, donde las cargas eléctricas y magnéticas son libres. Esta última fase es cualitativamente diferente de la fase Higgs en  $Z(2)$ .

El estudio de valores intermedios de  $N$  aumentará el conocimiento de cómo se enlazan los comportamientos a bajo  $N$  y gran  $N$ , es decir  $U(1)$ .

Hasta  $N \leq 4$  el modelo  $Z(N)$  presenta una única transición de fase de primer orden. Mientras que para  $N \geq 5$  presenta dos transiciones de fase [45, 46]. La primera de ellas ocurre a una  $\beta$  cercana a 1, es prácticamente independiente de  $N$ . Separa una fase desordenada confinante, donde el *loop* de Wilson decae siguiendo una ley de área (la carga eléctrica está confinada) y una fase de Coulomb, donde el *loop* de Wilson decae con una ley perimetral y con masa cero (fotones libres). La segunda transición separa la fase de Coulomb de una fase de Higgs donde la carga eléctrica es libre, los monopolos magnéticos están confinados y el *gap* de masas es diferente de cero.

Además de lo anteriormente reseñado los grupos  $Z(N)$  son importantes porque usualmente se suelen usar en las simulaciones de Monte Carlo para reemplazar al grupo  $U(1)$  [47]. Cuando  $N$  es grande la segunda transición que presenta  $Z(N)$  aparece a una  $\beta$  muy alta, no interfiriendo prácticamente nada en la transición de  $U(1)$ , que aparece en  $\beta \sim 1$ .

Recientemente estos modelos han sido estudiados debido a su relación con los modelos gauge con Higgs.

Si consideramos el modelo  $U(1)$ -Higgs, con los campos de Higgs de carga  $N$ , en el límite de gran acoplamiento Gauge-Higgs, obtenemos el modelo  $Z(N)$ , hecho ya citado en el capítulo anterior. Para  $\kappa$  finito continúa la transición en el plano  $\beta - \kappa$  [40, 48, 49, 50, 51], finalizando, cuando  $\beta \rightarrow \infty$ , en el punto crítico del modelo XY, que presenta una transición de fase de segundo orden.

Las transformaciones de dualidad juegan un gran papel en el estudio de estos modelos. Si tomamos como acción de partida la de Wilson, los modelos  $Z(N)$  son autoduales, para  $N = 2, 3, 4$ , mientras que para  $N \geq 5$  la autodualidad es sólo aproximada [52, 53].

Mientras que si el modelo es exactamente autodual podemos conocer la temperatura del sistema exactamente (lo cual está estrechamente relacionado con que sólo hay una transición de fase en  $Z(N)$  con  $N \leq 4$ ), mientras que cuando tenemos autodualidad aproximada lo que obtenemos es una relación entre las temperaturas críticas de las dos transiciones que aparecen.

El orden de las transiciones de fase de  $Z(N)$  para  $N \geq 5$  ha sido muy controvertido. La transición con  $\beta \sim 1$  fue considerada inicialmente de segundo o mayor orden, mientras que actualmente se considera que es de primer orden [37]. Hasta ahora la transición a  $\beta$  grande, Coulomb-Higgs, se había considerado de segundo orden, aunque la autodualidad aproximada parece apuntar a que el orden es el primero. En este capítulo presentaremos datos numéricos que sostienen que la transición es de primer orden para  $Z(8)$  (ver figura 4.1).

Considerando el modelo  $Z(8)$  como límite de un modelo  $U(1)$ -Higgs

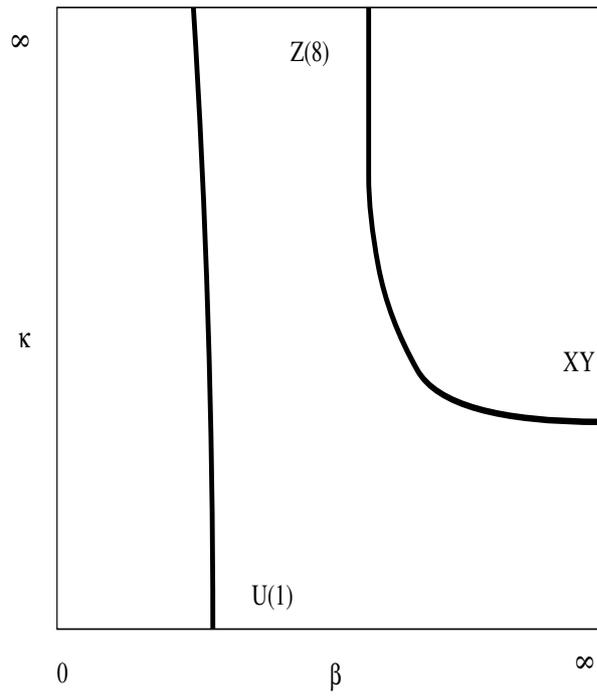


Figura 4.1: Descripción cualitativa del diagrama de fases del modelo  $U(1)$ -Higgs con carga  $q \geq 5$ .

con carga ocho podemos estudiar la curva de transiciones que emerge de la transición de fase anterior de  $Z(8)$ . Esta línea se ha considerado de segundo orden. Hemos estudiado este sistema y nuestros resultados son compatibles con que la línea anterior es de primer orden al menos en una región considerable del espacio de parámetros. No es posible distinguir si la zona de primer orden acaba en la transición de modelo XY o si finaliza en un punto intermedio [54].

## 4.2 El modelo $Z(8)$ puro gauge

Para estudiar este modelo usaremos la acción de Wilson

$$S = -\beta \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re} U_{\mathbf{r}, \mu \nu} \quad (4.1)$$

donde hemos usado las mismas notaciones que en el capítulo anterior.

Como hemos dicho anteriormente este modelo presenta dos transiciones, una en  $\beta \sim 1$  y otra en  $\beta \sim 0.78/(1 - \cos \frac{2\pi}{8}) \sim 2.56$  que aparece como un efecto de la naturaleza discreta del grupo.

Hemos elegido  $N = 8$  como una muestra representativa de  $N \geq 5$ , Nótese que conforme aumenta  $N$ , la segunda transición tiende a la zona de  $\beta$  muy grande, es decir a una zona donde la termalización será muy difícil, el sistema está congelado.

Hemos usado un algoritmo de Metropolis con 3 *hits*. El rango de retículos simulados ha ido de  $L = 8$  a  $L = 24$ . Hemos simulado los retículos menores que 16 en WorkStations mientras que para  $L \geq 16$  hemos usado la máquina RTN.

El número de iteraciones realizadas se encuentra recogido en la siguiente tabla:

L	n°. pasos de MC
8	800000
12	170000
16	260000
24	750000

además de las iteraciones de termalización y de localización del punto crítico.

Partimos de configuraciones frías ya que queremos estudiar el sistema a baja temperatura y por tanto estas configuraciones están más cerca de las configuraciones finales de equilibrio que si partimos de una configuración completamente desordenada. Medimos además de la energía del sistema el

*loop* de Polyakov. Este último observable no ha sido usado para la determinación de las cantidades termodinámicas relevantes, aunque ha sido de gran utilidad para determinar la región crítica.

Como en capítulos anteriores hemos usado el método de la densidad espectral para encontrar el punto crítico y medir con precisión diversos observables en el punto de transición. Los errores los hemos estimado mediante el método del jackknife (Apéndice B).

Hemos obtenido para el coupling crítico aparente

L	$\beta_c(L)$
8	2.6812(3)
12	2.6776(2)
16	2.67679(14)

Si ajustamos los valores anteriores a una ley del tipo

$$\Delta\beta_c(L) \equiv \beta_c(\infty) - \beta_c(L) \sim L^{-y} \quad (4.2)$$

obtenemos

$$y = 3.3(9) \quad (4.3)$$

que es compatible con el valor que uno esperaría obtener en una transición de primer orden,  $y = 4$  (en 4 dimensiones).

En la figura 4.2 presentamos en una escala bilogarítmica los máximos del calor específico en función del tamaño del retículo. Encontramos que la pendiente de esta curva, relacionada con el exponente  $\alpha/\nu$ , crece hasta tomar el valor correspondiente a una transición de primer orden, que es  $\alpha/\nu = 4$ . Para que el lector pueda comparar hemos superpuesto en la citada figura una línea discontinua de pendiente 4. Podemos concluir que la transición es de primer orden, aunque con una longitud de correlación grande, ya que sólo hay una evidencia clara para retículos mayores que 16, por lo tanto podremos afirmar que  $\xi \sim 16$ .

Otra confirmación, más fuerte, del carácter de primer orden de la transición es la estimación del calor latente a partir de los histogramas de energía. En la figura 4.3, columna de la izquierda, presentamos tres histogramas de energía en nuestra estimación del punto crítico aparente para  $L = 8, 12$  y 16. En  $L = 8$  se puede percibir que podría estar naciendo una estructura con dos picos, mientras que esta estructura es muy clara para  $L \geq 12$ . Los dos picos son lo bastante claros para calcular el calor latente. Los resultados para el calor latente se presentan en la figura 4.4. En el caso del retículo  $L = 24$  debido a que el tiempo de permanencia en cada una de las fases es muy grande hemos realizado simulaciones a ambos lados de la transición. El error sistemático debido a la falta de medición del punto crítico aparente

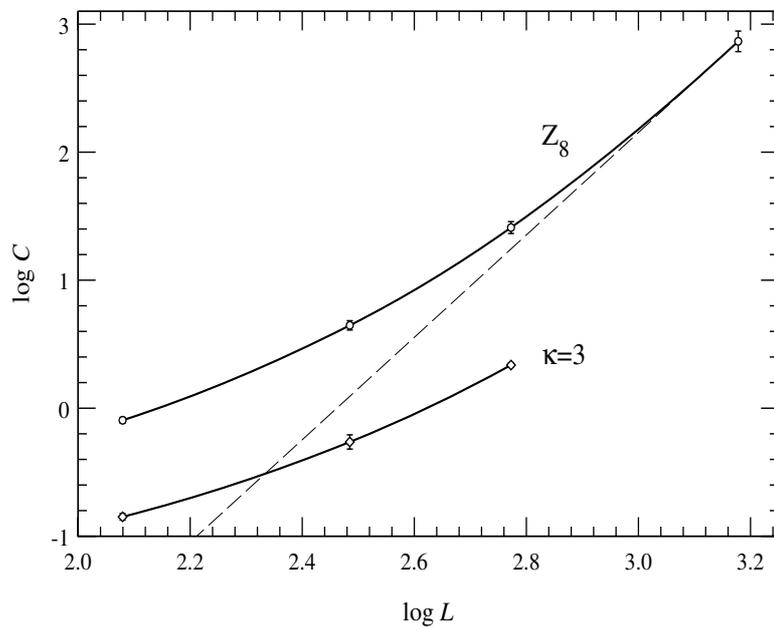


Figura 4.2: Gráfico bilogarítmico para el calor específico como función del tamaño del retículo para  $\kappa = \infty (Z_8)$  y  $\kappa = 3$ . La pendiente de la línea discontinua corresponde a un comportamiento de primer orden.

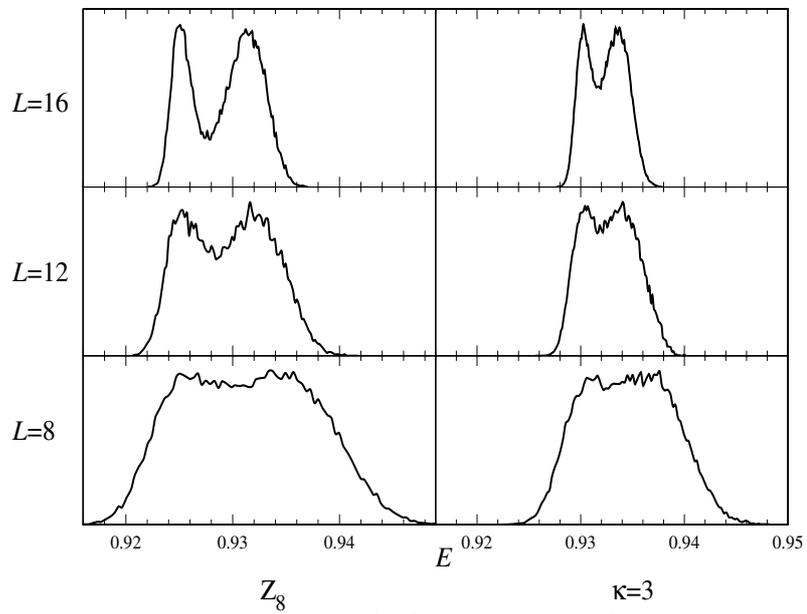


Figura 4.3: Histogramas de energía de nuestras simulaciones para  $L = 8, 12, 16$ .

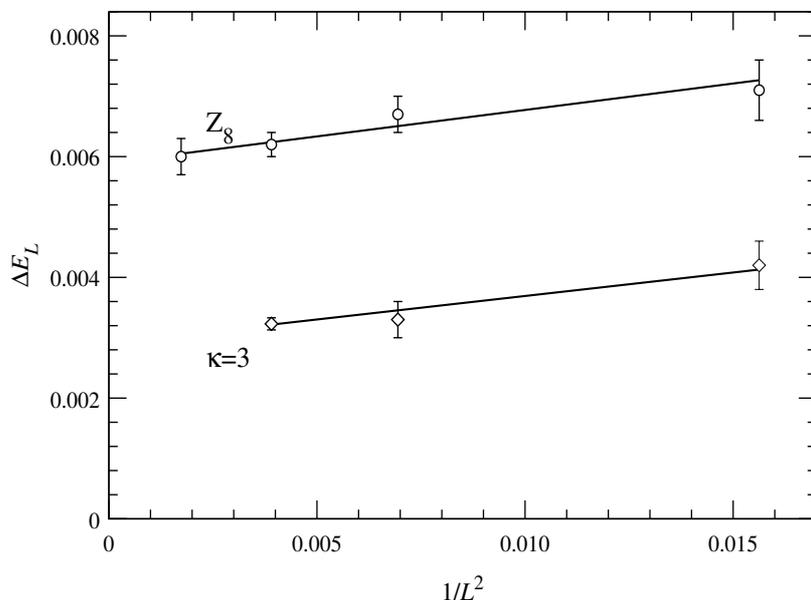


Figura 4.4: Calor latente como función del inverso del tamaño del retículo al cuadrado. Las líneas continuas corresponden a ajustes lineales.

ha sido estimado del error en la extrapolación de  $\beta_c(L = 24)$  y añadido al error estadístico.

De la figura 4.4 se deduce que existe un límite no nulo del calor latente cuando tomamos el límite termodinámico, lo cual excluye que la transición sea de segundo orden, como se ha asumido hasta ahora. Nuestra estimación para el calor latente es:

$$\Delta E = 0.0058(4). \quad (4.4)$$

### 4.3 El modelo $U(1)$ -Higgs con carga $q = 8$

La transición anterior de  $Z(8)$  puede verse como el límite de la línea de transiciones del modelo  $U(1)$ -Higgs con carga  $q = 8$  con acción

$$S = -\beta \sum_{\mathbf{r}, \mu < \nu} \text{Re} U_{\mathbf{r}, \mu\nu} - \kappa \sum_{\mathbf{r}, \mu} \text{Re} \bar{\phi}_{\mathbf{r}} U_{\mathbf{r}, \mu}^q \phi_{\mathbf{r}+\mu}. \quad (4.5)$$

Asumimos que los Higgs tienen módulo unidad, y que por tanto  $\phi$  y  $U$  pertenecen al grupo  $U(1)$ .

En el límite  $\kappa \rightarrow \infty$  los campos de Higgs están congelados y las variables gauge deberán satisfacer la relación  $U^q = 1$ , es decir, son variables de  $Z(q)$ .

En el límite  $\beta \rightarrow \infty$  el modelo se reduce al modelo XY, del cual se sabe que presenta una transición de segundo orden.

Ha sido presentado en la literatura que la línea que conecta estos dos límites es de segundo orden. Sin embargo ya hemos dado evidencia de la naturaleza de primer orden de la transición de  $Z(8)$ .

Para determinar el orden de la transición de la línea hemos realizado simulaciones a  $\kappa$  finito. Hemos trabajado fundamentalmente en  $\kappa = 3$  ( $\beta \sim 3$ ), que está separada de los dos límites anteriores.

Hemos usado un algoritmo de Metropolis con 3 *hits* en la parte gauge y 2 *hits* en la parte Higgs, con una distribución de intentos adaptada a nuestro modelo. Hemos usado  $Z(1024)$  para reproducir  $U(1)$ .

Las estadísticas con las iteraciones realizadas las recogemos en la tabla siguiente

L	n°. pasos de MC
8	130000
12	140000
16	250000

Hemos simulado retículos  $L = 8, 12$  y  $16$  con un número total de pasos de Monte Carlo (en miles de pasos) de 130, 140 y 250 respectivamente, después de las termalizaciones y la localización del punto crítico.

Para  $L \geq 12$  hemos encontrado que los histogramas de energía en el punto crítico aparente presentan una estructura de dos picos muy clara, que nos permitirá medir el calor latente de la transición (figura 4.4).

Sin embargo los valores del calor latente son bastante más bajos que los encontrados previamente en  $Z(8)$  y por lo tanto más difíciles de estimar. Hay que señalar también que la estimación que damos del calor latente para  $L = 8$  hay que tomarla con mucha precaución debido a que la estructura de doble pico no es clara en su histograma.

Nuestros resultados para el punto crítico aparente, definido como en la sección anterior, son

L	$\beta_c(L)$
8	3.0433(5)
12	3.0369(3)
16	3.03592(16)

En la figura 4.2, presentamos el comportamiento del calor específico. Ahora el régimen asintótico (pendiente 4) comienza después que en  $Z(8)$ , indicando que la longitud de correlación es bastante mayor.

En la figura 4.3, columna de la derecha, observamos que la forma del histograma para  $L = 16$  para  $\kappa = 3$  es análoga al del  $L = 12$  en  $Z(8)$ . Esto nos da una estimación somera de como ha crecido la longitud de correlación al bajar por la línea de transiciones

$$\xi(\kappa = 3) \sim \frac{4}{3}\xi(\kappa = \infty). \quad (4.6)$$

Finalmente en la figura 4.4 presentamos el comportamiento del calor latente con el tamaño del retículo  $L$ . El límite termodinámico da un valor del calor latente claramente diferente de cero. Nuestro resultado para el calor latente es

$$\Delta E = 0.0029(3) \quad (4.7)$$

También hemos realizado simulaciones en  $\kappa = 2$  donde el comportamiento de primer orden sigue siendo claro, aunque el comportamiento asintótico es más difícil de observar.

Evidentemente con los datos presentados no podemos eliminar el hecho de que el límite de calor latente cero se alcance antes de llegar al modelo XY.

## 4.4 Conclusiones

Hemos estudiado la transición Coulomb-Higgs tanto en el modelo  $U(1)$ -Higgs con carga 8 y módulo fijo como en la teoría  $Z(8)$  pura gauge.

Al contrario de los resultados previamente publicados hemos encontrado que la línea de transiciones del modelo  $U(1)$ -Higgs  $q = 8$  finaliza en una transición de primer orden en el límite  $Z(8)$  con calor latente  $\Delta E = 0.0058(4)$ .

La transición permanece de primer orden en una gran parte del espacio de parámetros. Hemos medido el calor latente en  $\kappa = 3$ , encontrando  $\Delta E = 0.0029(3)$ . Hemos obtenido evidencia de que el calor latente en  $\kappa = 2$  es diferente de cero aunque no hemos medido el límite de volumen infinito.

No hemos seguido disminuyendo  $\kappa$  y calculando el calor latente sólo por impedimentos técnicos, ya que la longitud de correlación aumenta a lo largo de la línea, en dirección al modelo XY, y necesitaríamos simular retículos mucho más grandes para obtener resultados con el grado de fiabilidad aquí presentado. Nuestros medios computacionales nos limitan a retículos del orden de 24.

El calor latente ha disminuido en un factor 2 al pasar de  $\kappa = \infty$  a  $\kappa = 3$  por lo que parece ser que no disminuye rápidamente. Conjeturamos que el calor latente se anulará sólo en el punto final de la línea, en el modelo XY,

aunque no podemos eliminar la posibilidad de que el calor latente se anule a una  $\kappa < 2$ .

Los resultados presentados cambian completamente la imagen que se tenía de este modelo. Esto es: la línea que separa las fases Coulomb-Higgs es de primer orden, o al menos gran parte de ella, y sólo el punto final es de segundo orden, el cual es el modelo XY. Este tipo de comportamiento se da en diversos sistemas entre los cuales se puede citar la transición líquido-vapor, el modelo U(1)-Higgs en la representación fundamental o el modelo de Ising con campo magnético, en los cuales sólo el punto final de la línea de transiciones es de segundo orden.



## Capítulo 5

# Vidrios de Espín: Generalidades

### 5.1 Introducción

En este capítulo comenzaremos exponiendo las características más importantes de los vidrios de espín y posteriormente se presentará la resolución del llamado *vidrio de espín más simple*. La resolución será muy autocontenida y veremos cómo este sistema recoge cualitativamente las propiedades y soluciones de modelos más complicados. Este modelo es un sistema con interacción a largo alcance y en la última sección describiremos someramente que cualidades de los modelos de largo alcance se espera que pervivan en modelos de corto alcance más realistas físicamente.

### 5.2 Generalidades

En la naturaleza se pueden encontrar diversos materiales que pueden ser clasificados como vidrios de espín. Una característica común de estos materiales [66] es la naturaleza aleatoria de la interacción a dos espines, unas veces es ferromagnética y otras veces es antiferromagnética. Consecuentemente aparecerá frustración, *i.e.* no se pueden minimizar simultáneamente todos los términos presentes en el Hamiltoniano.

Un ejemplo bastante usual de vidrios de espín son las aleaciones con una baja concentración de material magnético como el  $\text{Fe}_x\text{Au}_{100-x}$ , con una concentración de hierro  $x = 5$ . En este caso la interacción entre los espines localizados en los átomos de hierro es inducida por las deformaciones

de la superficie de Fermi del oro. El Hamiltoniano se puede aproximar por

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,k} J(x_i - x_k) \sigma_i \sigma_k + \text{anisotropías.} \quad (5.1)$$

La función  $J(x)$  es rápidamente oscilante, así que en el límite diluido (donde la concentración  $x$  tiende a cero) puede ser considerada como random. Para estudiar el sistema tendremos que dar la distribución de probabilidad de los acoplamientos. No conocemos cuál es el Hamiltoniano aunque sí conocemos cuál es su distribución. La existencia de impurezas, que a su vez inducen una distribución de probabilidad en las  $J$ , nos introduce por tanto desorden en el sistema. Pasamos de un sistema determinista, sin impurezas, a un sistema estocástico, que denominaremos desordenado, por efecto de la presencia de impurezas.

Un modelo físico que recoge la mayoría de las características descritas anteriormente es el modelo de Edward y Anderson y está dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ik} \sigma_i \sigma_k, \quad (5.2)$$

las variables  $\sigma_i$  son tipo Ising, la suma es a primeros vecinos (como siempre que usamos la notación  $\langle ij \rangle$ ) y las variables  $J_{ik}$  son random. Aunque este Hamiltoniano es mucho más simple que el Hamiltoniano definido en (5.1), simulaciones numéricas no han demostrado diferencias cruciales con los datos experimentales.

Una generalización muy estudiada del modelo de Edward–Anderson (EA) es el modelo de Sherrington–Kirkpatrick (SK), que consiste en extender la suma a primeros vecinos del modelo EA a suma a todos los vecinos.

Experimentalmente se pueden identificar los vidrios de espín porque poseen las siguientes propiedades características [67]:

- Divergencia de la susceptibilidad no lineal.<sup>1</sup>
- No aparece un pico definido del calor específico.
- Por debajo de la temperatura crítica,  $T_c$ , la respuesta de la magnetización depende de la historia.
- Por debajo de  $T_c$  la magnetización remanente decae lentamente con el tiempo.
- La susceptibilidad comienza a desviarse de la ley de Curie cuando  $T \gg T_c$

---

<sup>1</sup>La susceptibilidad no lineal se define como el coeficiente del campo magnético al cubo en la expansión de la magnetización:  $m = \chi h + \chi_{nl} h^3$ .

- Por debajo de  $T_c$  no hay evidencias, mediante el scattering de Bragg, de orden de largo alcance.

### 5.3 Desorden *Annealed* y *Quenched*

Hay dos formas de estudiar un sistema desordenado: el desorden *annealed* y el desorden *quenched*[67, 39].

En primer lugar se tiene el desorden *annealed*, en el cual las impurezas ( $I$ ), que actúan vía las  $J$ 's, se consideran en equilibrio termodinámico con los átomos base ( $S$ ), por lo tanto la función de partición del sistema es <sup>2</sup>

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\{S\}, \{I\}} \exp(-\beta \mathcal{H}(\{S\}, \{I\})), \quad (5.3)$$

y la energía libre

$$F = -\beta^{-1} \log \mathcal{Z}. \quad (5.4)$$

En segundo lugar en un desorden *quenched* las las impurezas están casi congeladas. Es decir la dinámica de los átomos base es muchísimo más rápida que la dinámica de las impurezas <sup>3</sup>. Por lo tanto, es evidente que no se puede tratar en igualdad de condiciones a las impurezas y a los átomos base. En este caso se calcula la energía libre correspondiente a una configuración dada de impurezas

$$F(\{I\}) = -\beta^{-1} \log \mathcal{Z}(\{I\}), \quad (5.5)$$

donde

$$\mathcal{Z}(\{I\}) = \text{Tr}_{\{S\}} \exp -\beta \mathcal{H}(\{S\}, \{I\}), \quad (5.6)$$

y posteriormente se promedia la energía libre para todas las realizaciones del desorden

$$F_{\text{quen}} = \int F(\{I\}) P(\{I\}) d\mu[I]. \quad (5.7)$$

La ecuación se puede justificar de la siguiente manera. Considérese un retículo muy grande que se dividirá en un gran número de subretículos, cada uno de ellos a su vez muy grande, de tal forma que cada uno de estos subretículos se podrá considerar como miembro de un conjunto de sistemas generados por la distribución de probabilidad de las impurezas (se podrá pensar que en cada subretículo hay una realización del desorden). Ya que los subretículos son muy grandes, se desprejará la interacción entre ellos.

<sup>2</sup>Por traza entendemos la suma a todas las posibles configuraciones de espines e impurezas.

<sup>3</sup>Esto es análogo a la aproximación de Born-Oppenheimer en Física Molecular; hay dos escalas de tiempo: la de los núcleos (impurezas) y la de los electrones (átomos base).

En el caso *annealed* como las impurezas no están congeladas cada subretículo pasará por todas las posibles configuraciones.

Pero en el caso *quenched* no, y la energía libre, al desprestigiar los efectos de frontera, es la suma de las energías libres de cada subretículo. O de otro modo, ya que los subretículos son entidades independientes, la función de partición del retículo inicial se factoriza en el producto de las funciones de partición de cada una de las subunidades. Esto justifica la ecuación (5.7).

Como se puede observar es matemáticamente más factible tratar el desorden *annealed* que el desorden *quenched*. En este último caso se tendrá que calcular el promedio de un logaritmo. Para realizarlo se suele usar el *truco* de la réplica, que esta basado en la siguiente propiedad del logaritmo:

$$\overline{\log \mathcal{Z}} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (\overline{\mathcal{Z}^n} - 1). \quad (5.8)$$

$\mathcal{Z}^n$  es la función de partición de  $n$  réplicas iguales que no interactúan entre ellas con las mismas impurezas. Un problema es que el límite  $n \rightarrow 0$  nos lleva a realizar algunos pasos no muy justificables matemáticamente.

En lo sucesivo siempre se considerará la aproximación *quenched*.

## 5.4 El modelo SK generalizado

En este ejemplo aparecen todas las características que normalmente se consideran fundamentales en el modelo SK, como son la rotura de las réplicas, ultrametricidad, un número muy grande de estados fundamentales separados por altas barreras energéticas, etc.

El sistema que estudiamos<sup>4</sup> es la generalización del modelo SK con interacciones a  $p$ -espines. Describe una cadena de  $N$  espines ( $\sigma_i = \pm 1$ ) con una interacción de alcance infinito entre  $p$  espines en el límite termodinámico. Como siempre se considera que nuestra interacción es random y quenched:

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p}. \quad (5.9)$$

Las acoplamientos de interacción son variables random que pueden ser tomadas como gaussianas. Para que la energía libre sea extensiva (proporcional a  $N$ ) la distribución de probabilidad de las  $J$ 's debe de ser reescalada como sigue:

$$P(J_{i_1 i_2 \dots i_p}) = \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p!}} \exp\left(-\frac{(J_{i_1 i_2 \dots i_p})^2 N^{p-1}}{J^2 p!}\right), \quad (5.10)$$

<sup>4</sup>Se seguirá muy de cerca el artículo de Gross y Mezard *The simplest spin glass* [68]. Otra referencia muy importante en este tema es [3] y referencias incluidas.

es decir las  $J$ 's son variables gaussianas con varianza  $J^2$  y media cero <sup>5</sup>.

Este modelo se reduce al modelo SK cuando  $p = 2$ . Lo estudiaremos en el límite  $p \rightarrow \infty$  donde se simplifica mucho la resolución <sup>6</sup>.

Se verá en primer lugar que este modelo presenta una distribución gaussiana de los niveles de energía.

Para ello se calculará la probabilidad de que una configuración dada  $\{\sigma\}$  tenga una energía  $E$ :

$$P(E) = \overline{\delta(E - \mathcal{H}(\sigma))}. \quad (5.11)$$

Por  $\bar{O}$  se denota:

$$\overline{O(J, \sigma)} = \int \prod dJ P(J) O(J, \sigma), \quad (5.12)$$

y por  $\langle O \rangle$  :

$$\langle O(J, \sigma) \rangle = \frac{1}{Z_J} \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{-\beta \mathcal{H}(J, \sigma)} O(J, \sigma), \quad (5.13)$$

donde  $Z_J \equiv \langle 1 \rangle$ .

Para realizar el valor medio en la ecuación (5.11) se usará la la representación integral de la delta de Dirac

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{isx}$$

Sustituyendo la anterior identidad se puede realizar la integración sobre las  $J$ 's sin más que completar cuadrados y realizar la integral resultante que es gaussiana. El resultado es en el límite  $N \rightarrow \infty$ :

$$P(E) = \frac{1}{\sqrt{N\pi J^2}} \exp\left(-\frac{E^2}{NJ^2}\right) \quad (5.14)$$

Nótese que el resultado es independiente de  $p$  y de la configuración de los espines elegida  $\{\sigma\}$ .

También se puede calcular la probabilidad de que dos configuraciones de espines  $\{\sigma^{(1)}\}$  y  $\{\sigma^{(2)}\}$  tengan energías  $E_1$  y  $E_2$ . Debido a la invariancia gauge del sistema <sup>7</sup> sólo dependerán del solapamiento entre ellas,  $q^{(1,2)}$ , definido por:

$$q^{(1,2)} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(1)} \sigma_i^{(2)} = q. \quad (5.15)$$

<sup>5</sup>Un sencillo cálculo asumiendo desorden *annealed* nos lleva a que la función de partición dependiente del volumen,  $N$ , es  $Z(N) = \exp(C\beta^2)$  donde  $C = J^2/(4N^{p-1})$ . Por lo tanto vemos que el modelo *annealed* no tiene ningún interés físico.

<sup>6</sup>Hay que tomar primero el límite termodinámico y después el límite en  $p$ .

<sup>7</sup> $\mathcal{H}(\sigma, J) = \mathcal{H}(\sigma', J')$  y que  $P(J) = P(J')$  si  $J'_{i_1 i_2 \dots i_p} = J_{i_1 i_2 \dots i_p}(\sigma_1 \sigma'_1) \dots (\sigma_p \sigma'_p)$ .

Se encuentra que en el límite  $N \rightarrow \infty$  y cuando  $p \rightarrow \infty$

$$P(E_1, E_2, q) = P(E_1)P(E_2) \quad (|q| < 1). \quad (5.16)$$

Si finalmente se calcula la distribución de probabilidad de las energías  $E_1, \dots, E_n$  de  $n$  configuraciones de espines  $\sigma^{(1)}, \dots, \sigma^{(n)}$ , cuando  $N$  y  $p$  tienden a infinito encontramos

$$P(E_1, E_2, \dots, E_n; q^{(i,j)}) = \prod_{i=1}^n P(E_i) \quad (|q^{(i,j)}| < 1). \quad (5.17)$$

Por lo tanto, en el límite  $p \rightarrow \infty$ , los niveles de energía son independientes, por lo que la física es idéntica al modelo REM (Random Energy Model)[69] de Derrida que consiste en  $2^N$  niveles distribuidos según la distribución dada por la ecuación (5.14).

Dado que los niveles de energía son variables random independientes, el número medio de niveles por unidad de energía,  $\langle n(E) \rangle$ , es simplemente el número de niveles,  $2^N$ , multiplicado por la densidad de probabilidad,  $P(E)$ , de encontrar una energía  $E \in (E, E + dE)$

$$\langle n(E) \rangle = \frac{1}{\sqrt{N\pi J^2}} \exp N \left( \log 2 - \left( \frac{E}{NJ} \right)^2 \right). \quad (5.18)$$

La energía a la que se anula el exponente es  $E_0 \equiv NJ\sqrt{\log 2}$ . Si  $|E| < E_0$  entonces  $\langle n(E) \rangle$  es muy grande, dado que los niveles son estadísticamente independientes, los errores son proporcionales a  $\sqrt{\langle n(E) \rangle}$  (como en un histograma). El error relativo irá como el inverso de la raíz y por lo tanto será despreciable ya que  $\langle n(E) \rangle$  es muy grande. Por lo tanto se considerara que no hay fluctuaciones y  $n(E) \approx \langle n(E) \rangle$ . Cuando  $|E| > E_0$  no hay niveles (recuérdese el factor  $N$  en la exponencial). Con lo anterior ya se puede calcular la entropía

$$S(E) \equiv \log n(E) \approx \log \langle n(E) \rangle \approx N \left( \log 2 - \left( \frac{E}{JN} \right)^2 \right), \quad |E| < E_0, \quad (5.19)$$

donde se ha usado que  $E = O(N)$  y que  $\log N \ll N$ . Utilizando que  $dS/dE = 1/T$  encontramos

$$T = -\frac{NJ^2}{2E}. \quad (5.20)$$

Como  $|E| < E_0$ ,  $T$  comienza a ser positiva cuando  $E = -E_0$  y será infinita si  $E = 0$ . Si se siguiera aumentando la energía la temperatura tomaría

valores negativos. Esta negatividad se puede interpretar como que  $T$  llega a infinito y sigue creciendo, es decir las temperaturas negativas son “más altas” que las temperaturas positivas<sup>8</sup>.

La energía libre  $F \equiv E - TS$  será

$$\frac{F}{N} = \begin{cases} -T \log 2 - \frac{J^2}{4T} & T > T_c \\ -J\sqrt{\log 2} & T < T_c \end{cases} \quad (5.21)$$

Donde la temperatura crítica es

$$T_c = \frac{J}{2\sqrt{\log 2}}, \quad (5.22)$$

que se corresponde con la energía  $-E_0$ , que es la mínima accesible. La transición se podrá describir de la siguiente forma: si  $T < T_c$  los  $2^N$  niveles tendrán energía  $-E_0$ , anulándose la entropía, mientras que si  $T > T_0$  los citados  $2^N$  se van distribuyendo con energías  $E \geq -E_0$ .

En esta sección vamos a usar la discusión de la sección anterior para describir el sistema. Vamos a ver que la solución simétrica sólo es válida a alta temperatura y que a baja temperatura hay que usar el *Ansatz* de Parisi [3].

Se puede calcular la energía libre de este modelo usando el truco de la réplica. En primer lugar hay que calcular  $\overline{\mathcal{Z}^n}$ .

$$\overline{\mathcal{Z}^n} = \int \prod dJ_{i_1 \dots i_p} P(J_{i_1 \dots i_p}) \text{Tr}_{[\sigma_i^a]} \left[ \exp \beta \sum_{a=1}^n \left( \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \dots i_p} \sigma_{i_1}^a \dots \sigma_{i_p}^a + h \sum_i \sigma_i^a \right) \right]. \quad (5.23)$$

La integral sobre el desorden se realiza fácilmente completando cuadrados (la integral resultante es gaussiana) y el resultado se expresa fácilmente introduciendo el solapamiento entre dos réplicas

$$Q_{ab}(\sigma) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^a \sigma_i^b, \quad (5.24)$$

---

<sup>8</sup>Esta interpretación se puede encontrar en el libro de Física Estadística de Landau [35].

obteniéndose <sup>9</sup>

$$\overline{Z}^n = \text{Tr}_{[\sigma_i^a]} \exp \left[ \frac{1}{4} \beta^2 N (n + \sum_{a \neq b} Q_{ab}^p(\sigma)) + \beta h \sum_{i,a} \sigma_i^a \right]. \quad (5.26)$$

La traza sobre los espines puede ser realizada introduciendo deltas de Dirac:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} d\lambda e^{\lambda x}. \quad (5.27)$$

Además

$$\exp \left( N \log \text{Tr}_{[\sigma_a]} \exp \left( \sum_{a < b} \lambda_{ab} \sigma_a \sigma_b \right) \right) = \text{Tr}_{[\sigma_i^a]} \exp \left( \sum_{a < b} \lambda_{ab} \sum_i \sigma_i^a \sigma_i^b \right), \quad (5.28)$$

resultando finalmente <sup>10</sup>

$$\overline{Z}^n = e^{nN\beta^2/4} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{a < b} dQ_{ab} \int_{-i\infty}^{i\infty} \prod_{a < b} \frac{d\lambda_{ab}}{2\pi} e^{-NG(Q_{ab}, \lambda_{ab})}, \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned} G(Q_{ab}, \lambda_{ab}) &\equiv -\frac{1}{2} \beta^2 \sum_{a < b} Q_{ab}^p + \sum_{a < b} \lambda_{ab} Q_{ab} - \\ &\log \text{Tr}_{\{\sigma_a\}} \exp \left( \sum_{a < b} \lambda_{ab} \sigma_a \sigma_b + \beta h \sum_a \sigma_a \right). \end{aligned} \quad (5.30)$$

En el límite  $N \rightarrow \infty$ , el comportamiento de  $\overline{Z}^n$  estará dado por el punto silla dominante de  $G$ , y la energía libre por espín será

$$\beta \frac{F}{N} = \lim_{n \rightarrow 0} \left( \frac{G}{n} - \frac{\beta^2}{4} \right) \quad (5.31)$$

Para aplicar el método del punto silla se debe encontrar el mínimo, o los mínimos, absoluto, absolutos, de  $G$ . Pero debido al límite  $n \rightarrow 0$  hay que calcular el máximo absoluto de  $G$  como ilustra el siguiente ejemplo:

<sup>9</sup>También se ha hecho uso de la igualdad:

$$\frac{p!}{N^p} \sum_{i_1 < \dots < i_p} \left( \sum_a \sigma_{i_1}^a \dots \sigma_{i_p}^a \right)^2 = \sum_{a,b} Q_{ab}^p + O \left( \left( \frac{1}{N} \right)^{p-2} \right). \quad (5.25)$$

<sup>10</sup>También se obtiene un factor  $\left( \frac{i}{N} \right)^{n(n-1)}$  que no contribuirá cuando calculemos el punto silla, ya que hay términos  $O(N)$  y éste es  $O(\log N)$ .

Sea  $Q$  una matriz simétrica,  $n \times n$  con diagonal nula, y queremos calcular la siguiente integral en el límite  $N \rightarrow \infty$ :

$$I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{a < b} dQ_{ab} e^{-N \text{Tr} Q^2}. \quad (5.32)$$

Para usar el método del punto silla deberemos responder a la siguiente pregunta: ¿cuál es el mínimo de  $f(Q) = \text{Tr} Q^2$ ? Se podría contestar que  $Q = 0$  es el mínimo, lo cual es correcto ya que el Hessiano es

$$H_{(rs);(cd)} = \left. \frac{\partial^2 f(Q)}{\partial Q_{rs} \partial Q_{cd}} \right|_{Q=0} = 2\delta_{rs}\delta_{cd}, \quad (5.33)$$

que tiene como autovalores el 2, degenerado, aunque si nos restringimos al siguiente subespacio,

$$Q_{ab} = q \quad \forall a \neq b, \quad Q_{aa} = 0, \quad (5.34)$$

que contiene el mínimo  $Q = 0$ , se encuentra que

$$\text{Tr} Q^2 = n(n-1)q^2. \quad (5.35)$$

El punto  $q = 0$  es, para  $n < 1$ , un máximo como función de  $q$  no un mínimo. La solución a esta aparente paradoja es exigir, siempre, que el Hessiano tenga autovalores positivos, así podremos calcular la raíz del determinante del Hessiano que aparece al evaluar las correcciones gaussianas al punto silla dadas por

$$I \sim \frac{1}{\sqrt{\det H}} e^{-NQ_{sp}}. \quad (5.36)$$

Para calcular  $Q$  debemos de hacer algunas hipótesis sobre la estructura de  $Q_{ab}$  y  $\lambda_{ab}$ . Se sabe que en la fase de alta temperatura la hipótesis de réplica simétrica es razonable, así que

$$\begin{aligned} Q_{ab} &= q, \\ \lambda_{ab} &= \lambda. \end{aligned} \quad (5.37)$$

que denominaremos *Ansatz* simétrico.

Por lo tanto en la aproximación simétrica  $G$  vale:

$$\begin{aligned} G(q, \lambda) &= -\frac{1}{4}\beta^2 n(n-1)q^2 + \frac{1}{2}n(n-1)\lambda q \\ &- \log \text{Tr}_{[\sigma_a]} \exp \left[ \frac{1}{2}\lambda \sum_{a \neq b} \sigma_a \sigma_b + \beta h \sum_a \sigma_a \right] \end{aligned} \quad (5.38)$$

Para calcular la traza vamos a usar la siguiente identidad que es bastante útil en Mecánica Estadística.

$$\exp\left(\frac{\beta}{2N}\sum_{i,j}s_i s_j + \beta h\sum_i s_i\right) = \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\left[-\frac{N\beta z^2}{2} + \sum_i(\beta z + \beta h)s_i\right], \quad (5.39)$$

de este modo quedan desacoplados los espines y la traza da contribuciones de cosenos hiperbólicos. El resultado es:

$$\log \text{Tr}_{[\sigma^a]} \exp\left[\frac{1}{2}\lambda\sum_{a \neq b}\sigma_a\sigma_b + \beta h\sum_a\sigma_a\right] = \log\left(e^{-\lambda n/2}\left(\frac{n^2\lambda}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp\left(\frac{n^2\lambda s^2}{2} + n\log(2\cosh(\lambda ns + \beta h))\right)\right).$$

Tomando el límite  $n \rightarrow 0$  obtenemos finalmente<sup>11</sup>

$$\frac{1}{n}G(q, \lambda) \stackrel{n \rightarrow 0}{=} \frac{1}{4}\beta^2 q^p - \frac{1}{2}\lambda q - \int_{-\infty}^{\infty} Dz \log[2\cosh(z\sqrt{\lambda} + \beta h)] + \frac{\lambda}{2}, \quad (5.40)$$

donde

$$Dz \equiv \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2}.$$

Calculemos ahora las ecuaciones de punto silla, que hay que derivar sobre la función  $G$  antes de sustituir el *Ansatz* simétrico, posteriormente sustituiremos el *Ansatz* y finalmente tomaremos el límite  $n \rightarrow 0$ .

Se procede como en la ecuación precedente usando la identidad (5.39), aunque ahora en vez de calcular la función de partición del hamiltoniano efectivo  $\mathcal{H}_{\text{ef}} = \frac{1}{2}\lambda\sum\sigma_a\sigma_b + \beta h\sum\sigma_a$  tenemos que calcular  $\langle\sigma_a\sigma_b\rangle_{\mathcal{H}_{\text{ef}}}$

El resultado es

$$\begin{aligned} q &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \int Dz \tanh^2(\sqrt{\lambda}z + \beta h), \\ \lambda &= \frac{1}{2}p\beta^2 q^{p-1}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

La solución en el límite  $p \rightarrow \infty$  es

$$\begin{aligned} \lambda &= 0, \\ q &= \tanh^2(\beta h), \end{aligned} \quad (5.42)$$

<sup>11</sup>El sumando  $\lambda/2$  no aparece en la referencia [68].

y la energía libre valdrá

$$\frac{F}{N} = -\frac{1}{4T} - T \log 2 - T \log \cosh \frac{h}{T}. \quad (5.43)$$

Esta solución simétrica es estable a gran  $T$  y contiene un sólo estado puro. La entropía de esta fase es<sup>12</sup>

$$S = \log 2 - \frac{1}{4T^2} + \log \cosh \frac{h}{T} - \frac{h}{T} \tanh \frac{h}{T}, \quad (5.44)$$

que claramente es negativa para  $T \leq T_1(h)$ . Esto implica que existe una transición de fase en algún  $T \geq T_1(h)$ <sup>13</sup>.

Para subsanar la negatividad de la entropía debemos de buscar otras soluciones del punto silla. Para ello vamos a seguir el *Ansatz* de Parisi conocido como rotura de la simetría de las réplicas, que consiste en [4, 5]:

- Agrupamos las  $n$  réplicas en  $n/m_1$  *clusters* de  $m_1$  réplicas, donde  $m_1$  es divisor de  $n$ . Dos réplicas,  $a \neq b$ , dentro del mismo *cluster* tendrán solapamiento  $Q_{ab} = q_1$  mientras que réplicas en grupos diferentes tendrán  $Q_{ab} = q_0 \geq q_1$ .
- A cada *cluster* de tamaño  $m_1$  le aplicamos el proceso anterior, introduciendo un  $m_2$  que divida a  $m_1$  y un  $q_2$ . Aplicamos el punto anterior identificando  $m_1$  con  $n$ ,  $m_2$  con  $m_1$ ,  $q_1$  con  $q_0$  y  $q_2$  con  $q_1$ .
- Iteramos este proceso las veces que sean necesarias hasta encontrar la solución correcta.

Si elegimos  $n = 8$ ,  $m_1 = 4$  y  $m_2 = 2$  tendríamos el siguiente *Ansatz* para la matriz  $Q$

$$Q_{ab} = \left( \begin{array}{cc|cc|cccc} 1 & q_2 & q_1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_2 & 1 & q_1 & q_1 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ \hline q_1 & q_1 & 1 & q_2 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ q_1 & q_1 & q_2 & 1 & q_0 & q_0 & q_0 & q_0 \\ \hline q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & 1 & q_2 & q_1 & q_1 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_2 & 1 & q_1 & q_1 \\ \hline q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & q_1 & 1 & q_2 \\ q_0 & q_0 & q_0 & q_0 & q_1 & q_1 & q_2 & 1 \end{array} \right) \quad (5.45)$$

El proceso de rotura de Parisi se puede visualizar introduciendo una representación tipo árbol que está descrito en la figura 5.1.

<sup>12</sup>Usando  $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ .

<sup>13</sup>Haciendo  $h = 0$  e igualando a cero al entropía obtenemos  $T_1(0) = 1/(2\sqrt{\log 2})$ . Este resultado coincide con el previamente obtenido en el modelo REM. Hay que recordar que estamos trabajando con  $J = 1$ .

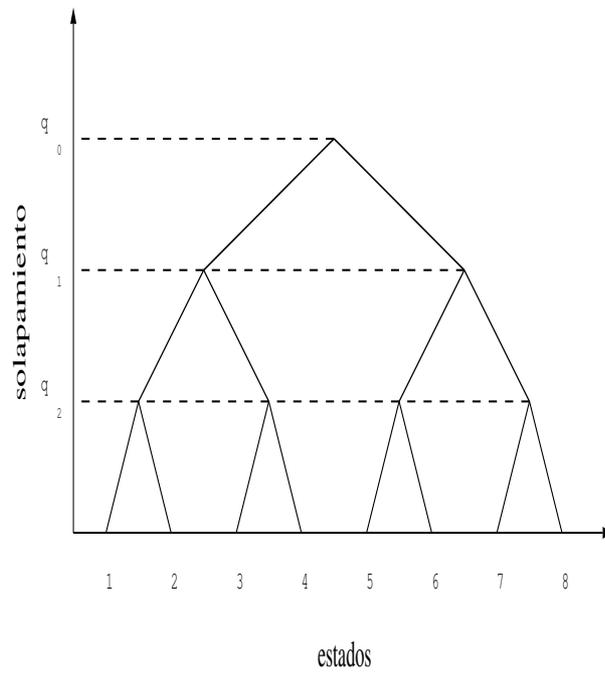


Figura 5.1: El elemento de matriz  $Q_{ab}$  se obtiene calculando el solapamiento del primer ancestro común de las réplicas (estados)  $a$  y  $b$ .

Podemos estudiar la estructura jerárquica entre los solapamientos introducidos en la solución de Parisi, veremos que aparece una organización ultramétrica.

Un espacio es ultramétrico si se verifica la siguiente condición [70]:

$$d_{\alpha,\gamma} \geq \max(d_{\alpha,\beta}, d_{\beta,\gamma}), \quad (5.46)$$

para tres estados arbitrarios  $\alpha, \beta$  y  $\gamma$ . Si expresamos la ecuación anterior en función de los solapamientos tenemos

$$q_{\alpha,\gamma} \geq \min(q_{\alpha,\beta}, q_{\beta,\gamma}). \quad (5.47)$$

Obviamente todo espacio ultramétrico es métrico. Examinando el árbol de la figura 5.1 vemos que por construcción es ultramétrico. Así la estructura jerárquica de los estados está implícita en la solución de Parisi.

En general tendremos que nuestra matriz  $Q_{ab}$  dependerá de los siguientes parámetros:

$$\begin{aligned} n &\geq m_1 \geq m_2 \geq \dots \geq m_k \geq 1, \\ q_k &\geq q_{k-1} \geq \dots \geq q_1 \geq q_0. \end{aligned} \quad (5.48)$$

En algunos casos es necesario realizar una rotura infinita. Para ello partimos de un  $n$  grande, parametrizamos las matrices siguiendo el esquema de Parisi y posteriormente tomamos el límite  $n \rightarrow 0$ . Definamos la siguiente función

$$q(x) = q_i \text{ si } m_i < x < m_{i+1}. \quad (5.49)$$

Al tomar el límite  $n \rightarrow 0$  la función  $q(x)$  se convierte en una función continua y monótona creciente, y además la primera desigualdad de (5.48) se invierte

$$0 \leq m_1 \leq m_2 \leq \dots \leq m_k \leq 1 \quad (5.50)$$

## 5.5 Caracterización del espacio de los estados puros

Desde la solución de Parisi de la rotura de la simetría de las réplicas, que hemos presentado anteriormente, es admitido que la mejor forma de caracterizar la fase spin-glass es describiendo el espacio de estados de equilibrio del sistema. A cada estado de equilibrio<sup>14</sup>, que se denotará por  $\alpha$ , se le

<sup>14</sup>Caracterizaremos los estados puros o de equilibrio por la propiedad, *clustering*, de que las funciones de correlación conexas se anulan en el límite termodinámico. O equivalentemente que las magnitudes intensivas no fluctúan en el anterior límite. Un estado mezcla o de Gibbs será una combinación lineal convexa de estados puros [14].

asignará un peso estadístico  $P_\alpha$ , determinado por su energía libre  $F_\alpha$

$$P_\alpha = \frac{\exp -F_\alpha/T}{\sum_\gamma \exp -F_\gamma/T}. \quad (5.51)$$

Debido a que se ha roto la ergodicidad, el valor medio de cualquier observable  $O$  estará dado por

$$\langle O \rangle = \sum_\alpha P_\alpha \langle O \rangle_\alpha, \quad (5.52)$$

donde  $\langle O \rangle_\alpha$  es el valor medio de  $O$  en el estado de equilibrio  $\alpha$ .

Una medida de la distancia entre dos estados de equilibrio es su solapamiento [70]:

$$q^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i^\alpha m_i^\beta, \quad (5.53)$$

donde  $m_i^\alpha = \langle \sigma_i \rangle_\alpha$  es la magnetización del espín  $i$ -ésimo en el estado puro o de equilibrio  $\alpha$ .

A partir de  $q^{\alpha\beta}$  se obtiene una verdadera distancia mediante

$$\begin{aligned} d^2(\alpha, \beta) &= 2(q^{\alpha\alpha} - q^{\alpha\beta}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (m_i^\alpha - m_i^\beta)^2. \end{aligned} \quad (5.54)$$

A esta distancia se la denomina distancia de Haming. No es la única que se puede definir, otra posibilidad es por ejemplo  $q_{\alpha\beta} = \exp(-d_{\alpha\beta})$ . Usualmente a  $q^{\alpha\alpha}$  se la denomina parámetro de orden de Edward-Anderson  $q_{EA}$  y es independiente del estado  $\alpha$  elegido.

Finalmente se puede calcular la distribución de probabilidad de que elegidos al azar dos estados de equilibrio tengan solapamiento  $q$

$$P_J(q) = \sum_{\alpha, \beta} P_\alpha P_\beta \delta(q - q^{\alpha\beta}). \quad (5.55)$$

Caracterizaremos la estructura de la fase spin-glass mediante, el promedio de  $P_J(q)$  a todos los acoplamientos  $J$ 's,  $\overline{P}(q)$ . Usaremos esta distribución como parámetro de orden de la transición de fase.

En el modelo de Ising usual (sin desorden) tenemos que en la fase de alta temperatura el solapamiento es cero. Mientras que en la fase ordenada el solapamiento vale  $q^2 = m^2$  donde  $m$  es la magnetización. Por lo tanto tenemos que la distribución de solapamientos toma formas diferentes según la fase en la que estemos. En la fase desordenada es una delta de Dirac

centrada en cero, mientras que en la fase ordenada es la suma de dos deltas de Dirac centradas en  $m$  y  $-m$  respectivamente.

Dentro de la solución de Parisi veremos que existe un número muy grande de soluciones y por lo tanto se espera que la distribución  $P(q)$  sea no trivial. A campo magnético nulo  $P(q)$  será simétrica y el valor medio de  $q$  será cero, por lo tanto representaremos  $P(|q|)$ . En el modelo SK se obtiene que  $P(|q|)$  tiene soporte compacto en  $(0, q_{\max})$ . Mientras que si hay campo magnético  $P(q)$  deja de ser simétrica y tendrá soporte compacto en el intervalo  $(q_{\min}, q_{\max})$ . Donde  $q_{\max}$  y  $q_{\min}$  son el solapamiento máximo y mínimo respectivamente. La forma más general de  $P(q)$  es:

$$P(q) = a\delta(q - q_{\min}) + g(q) + b\delta(q - q_{\max}), \quad (5.56)$$

donde  $a$  y  $b$  son constantes positivas y  $g(q)$  es una función regular con soporte compacto en  $(q_{\min}, q_{\max})$ . La solución de Parisi nos proporciona los siguientes comportamientos para las cantidades anteriores a campo magnético muy pequeño:

$$q_{\min} \propto h^{2/3}, \quad (5.57)$$

mientras que  $q_{\max}$  apenas varía con la temperatura. Cuando el campo magnético es grande  $q_{\min} \rightarrow q_{\max}$  recuperando la solución simétrica y  $P(q)$  será sólo una delta de Dirac.

## 5.6 El modelo SK generalizado de nuevo

Calculemos la solución a orden primero en el esquema de Parisi. El término que presenta más dificultades es el término de traza. En este caso tendremos que aplicar la fórmula (5.39) varias veces. Para ello reescribamos <sup>15</sup>  $\exp \mathcal{H}_{ef}$  como sigue

$$\sum_{a \neq b} \lambda_{ab} \sigma_a \sigma_b = q_0 \left( \sum_a \sigma_a \right)^2 - q_0 \sum_{\text{clusters}} \left( \sum_{a \in \text{cluster}} \sigma_a \right)^2 + q_1 \sum_{\text{clusters}} \left( \sum_{a \in \text{cluster}} \sigma_a \right)^2 - nq_1.$$

En el primer sumando consideramos que los  $n^2$  elementos son  $q_0$ , luego quitamos  $q_0$  de los  $n/m_1$  clusters, posteriormente añadimos  $q_1$  en estos  $n/m_1$  bloques diagonales ( $\equiv$  clusters) y finalmente quitamos los  $n$   $q_1$  que hemos puesto en la diagonal, ya que la diagonal esta formada por unos. Se

<sup>15</sup>Para  $\lambda$  también usamos el mismo esquema de Parisi.

puede observar que cada uno de los términos lo podemos reexpresar como una integral mediante la ecuación (5.39).

Obtenemos finalmente la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{G}{n} = & \frac{\lambda_1}{2} - \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} D_q z \log \left( \int_{-\infty}^{\infty} D_{q_1 - q_0} \xi \cosh^m [q_0 z + (q_1 - q_0) \xi] \right. \\ & \left. - \log 2 + \frac{1}{4} \beta^2 [(1 - m) q_1^p + m q_0^p] - \frac{1}{2} [(1 - m) q_1 \lambda_1 + m q_0 \lambda_0] \right), \end{aligned}$$

donde

$$D_q z \equiv \sqrt{\frac{q}{2\pi}} e^{-qz^2/2} dz. \quad (5.58)$$

Las ecuaciones del punto silla son

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \beta^2 p q_i^{p-1}, \quad (5.59)$$

$$q_0 = \tanh^2(\beta h m), \quad (5.60)$$

$$q_1 = 1. \quad (5.61)$$

Para obtener la rotura de las réplicas debemos buscar que  $q_0 < q_1 \leq 1$ , así tendríamos que  $\lambda_0 = 0$ . Si  $q_1$  es también menor que 1, entonces  $\lambda_1 = 0$  y recuperaríamos la solución simétrica  $q_0 = q_1 = \tanh^2(\beta h)$ . Por lo tanto  $q_1 = 1$ , en concordancia la solución a las ecuaciones del punto silla, y  $\lambda_1 = \infty$ .

Bajo estas hipótesis podemos evaluar la integral que hay en  $G$  obteniendo

$$\begin{aligned} -\frac{1}{n} G = & -\frac{1}{4} \beta^2 (m q_0^p + (1 - m) q_1^p) + \\ & \frac{1}{2} (m \lambda_0 q_0 + (1 - m) \lambda_1 q_1) - \frac{1}{2} \lambda_1 + \frac{1}{2} m \lambda_1 + \frac{1}{m} \log(2 \cosh(m \beta h)) - \\ & \frac{1}{2} m \lambda_0 \tanh^2(m \beta h) + O(\lambda_0^2, 1/\lambda_1). \end{aligned} \quad (5.62)$$

Finalmente la variación respecto a  $m$  proporciona:

$$m^2 \beta^2 = 4 [\log 2 + \log(m \beta h) - m \beta h \tanh(m \beta h)]. \quad (5.63)$$

De la ecuación anterior obtenemos que  $m \beta \equiv \beta_c$  es independiente de la temperatura y que  $\beta_c$  está dada por

$$\beta_c^2 = 4 [\log(2 \cosh(\beta_c h)) - \beta_c h \tanh(\beta_c h)]. \quad (5.64)$$

Dado que  $m \leq 1$ , ya que si no el Hessiano tendría autovalores negativos, la solución existe sólo para  $T < T_c = 1/\beta_c$ .  $T_c$  es precisamente la temperatura  $T_1(h)$ , a la cual la entropía de la solución simétrica era negativa. La energía libre para  $T < T_c$  puede ser calculada usando la anterior solución

$$\frac{F}{N} = -\frac{1}{2T_c} - h \tanh \frac{h}{T_c}, \quad (5.65)$$

que también fue encontrado por Derrida como solución de baja temperatura del modelo REM. La magnetización<sup>16</sup> será  $\hat{m} = \tanh(h/T_c)$  y la susceptibilidad es independiente de la temperatura,  $\chi = 1/(T_c \cosh^2(h/T_c))$ .

Los dos valores posibles de  $q$  los podemos reescribir como

$$q(x) = \tanh^2(\beta_c h) \theta \left( \frac{T}{T_c} - x \right) + \theta \left( x - \frac{T}{T_c} \right) \quad (5.66)$$

Por tanto la probabilidad de encontrar un solapamiento  $q$  será

$$\overline{P(q)} = \frac{T}{T_c} \delta(q - \tanh^2(\beta_c h)) + \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right) \delta(q - 1) \quad (5.67)$$

El pico en  $q = 1$  implica el solapamiento de una réplica consigo misma. Mientras que el pico  $q = \tanh^2(\beta_c h)$  implica que dos mínimos tienen un solapamiento igual al cuadrado de la magnetización.

Uno podría pensar de la discusión anterior que sólo hay dos estados, pero no es así. Para ello calcularemos la distribución de los diferentes pesos  $P_\alpha$  para diferentes *clusters*. Elijamos un solapamiento dado  $q$ , y agrupemos todos los mínimos con solapamiento mayor o igual a  $q$ , en *clusters* etiquetados por  $I$ , y les asignaremos un peso  $P_I = \sum_{\alpha \in I} P_\alpha$ . Se puede demostrar que el número promedio de *clusters* con un peso dado  $P_I$  está dado por

$$f(P) = \overline{\sum_I \delta(P_I - P)} = \frac{P^{y-2} (1-P)^{-y}}{\Gamma(y) \Gamma(1-y)}, \quad (5.68)$$

que depende obviamente de la escala de solapamientos  $q$  elegida ya que

$$y \equiv y(q) = \int_q^1 dq' \overline{P(q')}, \quad (5.69)$$

que es la probabilidad de encontrar un solapamiento mayor que  $q$ , y  $\Gamma(y)$  es la función Gamma usual.

<sup>16</sup>Para que no exista confusión entre el parámetro  $m$  de la rotura y la magnetización, denotaremos a esta última como  $\hat{m}$ .

Si elegimos  $\tanh^2(\beta_c h) < q < 1$ , entonces  $y(q) = 1 - T/T_c$  y cada *cluster* contiene un estado puro<sup>17</sup>. Por lo tanto, bajo estas circunstancias, el número promedio de estados puros con peso  $P = P_\alpha$  es

$$f(P) = \frac{P^{-1-T/T_c}(1-P)^{-1+T/T_c}}{\Gamma(1-T/T_c)\Gamma(T/T_c)}. \quad (5.70)$$

Esto nos permite calcular el número total de estados puros que será

$$N = \sum_{\alpha} 1 = \int_0^1 dP f(P) = \infty. \quad (5.71)$$

Esta divergencia ocurre debido a la existencia de muchos mínimos con un pequeño peso. Si introducimos un *cut-off* en los solapamientos,  $P \geq \epsilon$ , tenemos

$$N(\epsilon) \sim \left(\frac{1}{\epsilon}\right)^{T/T_c}. \quad (5.72)$$

El hecho de que  $N$  crezca con la temperatura en la fase spin-glass es un poco sorprendente, uno esperaría lo contrario: que la estructura de mínimos se complicara conforme bajara la temperatura. En nuestro caso el sistema está congelado para  $T \leq T_c$ ,  $F$  permanece constante para  $T \leq T_c$  y lo único que se puede modificar son los pesos de los diferentes mínimos. Mínimos con mucha energía son menos significativos cuando se baja la temperatura<sup>18</sup>, y esto deja un decrecimiento de  $N$  con la temperatura.

Mientras que en el caso  $p = 2$  (Modelo SK) hay que ir a  $k = \infty$ , es decir romper infinitamente la simetría de las réplicas, en el límite  $p \rightarrow \infty$  encontramos la solución exacta a primer orden de rotura de las réplicas<sup>19</sup>.

## 5.7 Modelos de alcance finito

Hemos descrito en las secciones anteriores un vidrio de espín con interacción a todos los vecinos. Hemos caracterizado diversas propiedades de estos sistemas que podemos resumir en<sup>20</sup>:

<sup>17</sup>Ya que en  $I$  están todos los mínimos cuyos solapamientos sean mayores que  $q$ , que en este caso es mayor que  $\hat{m}^2$ , por lo que sólo el autosolapamiento de un estado puro consigo mismo satisface la condición y por lo tanto es el único miembro de este cluster. En cuanto hubiera dos mínimos tendríamos que uno de los 3 solapamientos que podemos definir, sería  $\hat{m}^2$ , violando la condición.

<sup>18</sup>Esto puede verse haciendo un desarrollo tipo punto silla, ya que  $\beta \gg 1$ , en la función de partición, los estados con energía muy grande no contribuirán.

<sup>19</sup>Los autores de la referencia [68] prueban que las coordenadas del punto silla no varían al aumentar el orden de la rotura.

<sup>20</sup>Para enlazar con el capítulo siguiente enumeraremos aquí propiedades del modelo SK [3]

1. Existencia de dos fases: una de alta temperatura y otra de baja, que hemos denominado fase *spin-glass*.
2. Existencia de un número muy grande de estados puros en la fase *spin-glass* que diverge en el límite termodinámico como  $e^{|c|N^{1/2}}$ . Esto ocurre tanto a campo magnético nulo como no nulo.
3. Existencia de una línea de transiciones de fase en el plano  $(T, h)$ : línea de Almeida-Thouless [74]. Precisamente es la línea donde el Hessiano de la solución simétrica comienza a tener autovalores negativos.
4. Los estados puros se organizan jerárquicamente formando un espacio ultramétrico.
5. Estos estados puros están separados por altas barreras de energía libre por lo que se rompe la ergodicidad del sistema
6. El parámetro de orden es la función de distribución de los solapamientos  $P(q)$ .

Podemos preguntarnos si las características anteriores sobreviven en un modelo donde las interacciones sean de corto alcance.

Para contestar a la pregunta anterior se desarrolló la teoría de los *droplets* [72, 73].

Esta teoría guarda mucha relación con el estudio mediante ondas de espín del modelo XY. Afirman que no existe la línea de Almeida-Thouless, que la fase de baja temperatura a campo nulo contiene sólo dos estados puros y que por tanto  $P(q)$  es trivial (consistente en dos deltas de Dirac).



## Capítulo 6

# El modelo de Ising $4d$ Spin Glass

### 6.1 Introducción

En este capítulo intentaremos determinar si las predicciones de la teoría de campo medio con la solución de Parisi se cumplen cuando el alcance de la interacción es finito, que denominaremos RSB (Replica Symmetry Breaking), o si por el contrario las predicciones de la teoría de los *droplets*, descritas en el capítulo anterior, son las correctas.

Vamos a estudiar las siguientes puntos:

- Existencia de la línea de Almeida–Thouless(AT)
- En caso que exista dar sus coordenadas.
- Determinar el orden de la transición y si es de segundo orden dar sus exponentes críticos.

Como ya ha sido citado en el capítulo anterior la teoría de los *droplets* predice la no existencia de la línea de Almeida–Thouless, mientras que la RSB predice una transición de fase entre una fase paramagnética y una tipo spin–glass con las mismas características que en el modelo SK, *i.e.* existencia de un número muy grande de estados puros, organizados jerárquicamente y con barreras de energía libre del orden de la unidad.

Otro tipo de estudios tendentes a clarificar la controversia entre los *droplets* y RSB [75, 76, 77, 78, 79] han estudiado otros aspectos como son la pervivencia de la ultrametricidad, solapamientos máximo y mínimo, dinámica, modelo de Ising  $3d$  con campo magnético, etc.

Hemos realizado simulaciones numéricas fundamentalmente en la máquina RTN de la Universidad de Roma II, aunque hemos complementado con algunos *runs* en WorkStations.

En primer lugar describiremos el modelo, para pasar a describir el tipo de observables que vamos a medir. Finalmente daremos los resultados, primero para campo magnético nulo y posteriormente para campo magnético no nulo. Los resultados de este trabajo se encuentran recogidos en las referencias [60, 61].

## 6.2 El modelo

Nuestro sistema es el modelo de Ising con acoplamientos random a primeros vecinos, estos acoplamientos,  $J_{ij}$ , son variables *quenched* que pueden tomar valores discretos  $\pm 1$  con probabilidad  $1/2$ . El Hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (6.1)$$

Nuestra elección de una distribución de probabilidad discreta para las  $J$ 's viene dada por haber habido trabajos previos que han usado una distribución gaussiana y es interesante comprobar que ambas teorías pertenecen a la misma clase de universalidad. Esto ha sido comprobado ya que se han obtenido exponentes críticos compatibles en el error con los obtenidos en el modelo gaussiano.

## 6.3 Observables

Nuestro observable fundamental ha sido el solapamiento entre dos réplicas con la misma realización del desorden, que denotaremos por  $q$ :

$$q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(1)} \sigma_i^{(2)}, \quad (6.2)$$

donde por  $\sigma_i^{(j)}$  denotamos el espín  $i$ -ésimo perteneciente a la réplica  $j$ -ésima y  $N$  es el número total de espines.

Podemos calcular la probabilidad  $P(q)$  de que dos réplicas tengan el mismo solapamiento  $q$ , que estará dada por

$$P(q) = \overline{\langle \delta(q - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(1)} \sigma_i^{(2)}) \rangle}, \quad (6.3)$$

donde, como es usual, denotamos por  $\overline{(\dots)}$  el promedio sobre el desorden *quenched* (sobre las  $J$ 's). Podemos calcular los momentos de esta distribución <sup>1</sup>

$$\overline{\langle q^k \rangle} \equiv \int_{-1}^1 dq q^k P(q). \quad (6.4)$$

Definimos la susceptibilidad spin glass<sup>2</sup>

$$\chi_{\text{SG}} = N(\overline{\langle q^2 \rangle} - \overline{\langle q \rangle}^2). \quad (6.5)$$

También podemos calcular el cumulante de Binder de la distribución de probabilidad (6.3), que estará dado por

$$g = \frac{1}{2} \left( 3 - \frac{\overline{\langle q^4 \rangle}}{\overline{\langle q^2 \rangle}^2} \right), \quad (6.6)$$

cuando el campo magnético es nulo, habiendo que reemplazar los valores medios anteriores por sus valores conexas cuando hay campo magnético <sup>3</sup>.

Otra cantidad importante para describir la distribución de probabilidad es la *skewness* definida por

$$s = \frac{\overline{\langle q^3 \rangle}}{\overline{\langle q^2 \rangle}^{3/2}}, \quad (6.7)$$

de nuevo si hay campo magnético hay que sustituir los valores medios usando la prescripción anterior.

Es interesante conocer el comportamiento de la distribución de probabilidad  $P(q)$  cuando el tamaño del retículo es finito. Se espera que se comporte, en el modelo SK, como [81]

$$P(q > q_{\text{max}}) \sim L^{d_q} f(\lambda_+ N(q - q_{\text{max}})^{d/d_q}), \quad (6.8)$$

$$P(q < q_{\text{min}}) \sim L^{d_q} f(\lambda_- N(q_{\text{min}} - q)^{d/d_q}). \quad (6.9)$$

Los coeficientes  $\lambda_+$  y  $\lambda_-$  están relacionados con las *colas* de la distribución  $P(q)$  y han sido calculadas en la teoría de campo medio resultando ser

<sup>1</sup>Puede sorprender la notación usada para los momentos de la distribución  $P(q)$ . La razón es la siguiente: para cada realización del desorden calculamos su correspondiente distribución de solapamientos que denotamos por  $P_J(q)$  y podemos definir sus correspondientes momentos  $\langle q^k \rangle$ . Si promediamos sobre el desorden,  $\overline{(\dots)}$ , tendremos que  $P_J(q)$  pasa a  $P(q) \equiv \overline{P_J(q)}$  y sus momentos son  $\overline{\langle q^k \rangle}$ .

<sup>2</sup>Que se corresponde con la susceptibilidad no lineal en la fase paramagnética [80].

<sup>3</sup> $\overline{\langle q^k \rangle} \rightarrow \langle (q - \overline{\langle q \rangle})^k \rangle$  ya que en presencia de campo magnético la distribución de solapamientos ya no es simétrica y por tanto  $\overline{\langle q \rangle} \neq 0$ .

$\lambda_+ = 10\lambda_-$ .  $f(x) \sim \exp(-|x|)$  cuando  $|x| \gg 1$ <sup>4</sup> y  $d_q$  es la dimensión de  $q$  medida en momentos. Por lo tanto verificará

$$\overline{\langle q \rangle} = q_0 + O(L^{-d_q}). \quad (6.10)$$

Este exponente está relacionado con el exponente crítico  $\eta$ <sup>5</sup>

$$d_q = \frac{d-2+\eta_q}{2}, \quad \eta_q \equiv \eta. \quad (6.11)$$

En los modelos de alcance finito, como en nuestro sistema, se encuentra que la región de solapamientos negativos se suprime muy lentamente<sup>6</sup> cuando aumenta el volumen del sistema, ya que  $\lambda_+ \gg \lambda_-$ . Por lo tanto es muy difícil encontrar el segundo máximo correspondiente al mínimo solapamiento, mientras que el del máximo solapamiento sí que se ve fácilmente. Para evitar el efecto anterior vamos a sustituir la ecuación (6.5) para la susceptibilidad no lineal por

$$\chi_{\text{SG}} = N(\overline{\langle q^2 \rangle} - \overline{\langle |q| \rangle}^2). \quad (6.12)$$

Esta definición disminuye el efecto de los valores negativos de  $q$ , cuando  $h \neq 0$  y para tamaños grandes tiende a la definida en (6.5).

Una cantidad interesante es el solapamiento de las energías de los links entre dos réplicas

$$q^e = \frac{1}{8N} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^{(1)} \sigma_j^{(1)} \sigma_i^{(2)} \sigma_j^{(2)}, \quad (6.13)$$

ya que  $J_{ij}^2 = +1$ . Este observable fue introducido en el estudio del modelo de Ising tridimensional spin-glass [77]. Posteriormente fue usado para estudiar la fase de baja temperatura en el modelo 4-dimensional.

Análogamente podemos calcular la probabilidad que dos réplicas tengan un solapamiento en energía igual a  $q^e$ , que denotaremos por  $P^e(q^e)$

$$P^e(q^e) = \overline{P_j^e(q^e)} = \overline{\langle \delta(q^e - \frac{1}{8N} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^{(1)} \sigma_j^{(1)} \sigma_i^{(2)} \sigma_j^{(2)}) \rangle}, \quad (6.14)$$

<sup>4</sup>De la discusión anterior es claro que  $P(q)$  desarrollará una singularidad tipo delta de Dirac tanto en  $q_{\min}$  como en  $q_{\max}$  cuando  $L \rightarrow \infty$ .

<sup>5</sup>Los exponentes que se obtienen en la teoría de campo medio son  $\eta = 0$ ,  $\nu = 1/2$  y  $\alpha = -1$ , siendo la dimensión crítica 6. Esto es debido a que los vidrios de espín se pueden estudiar mediante una teoría  $\phi^3$  que tiene como dimensión crítica 6 [82].

<sup>6</sup>Asumimos que las correcciones de la ecuación (6.9) son válidas para un sistema con interacción de corto alcance.

de nuevo podemos calcular el parámetro de Binder, la *skewness* y la susceptibilidad no lineal calculando los correspondientes promedios con la distribución  $P^e(q^e)$ .

En la teoría de campo medio (límite termodinámico del modelo SK) se demuestra que

$$q^e = q^2, \quad (6.15)$$

por lo que la ecuación anterior nos pone en correspondencia uno a uno las funciones  $P(q)$  y  $P^e(q^e)$ . Si en la teoría de campo medio obtenemos que en la fase vidrio de espín  $P(q)$  es no trivial y no es autopromediada tendremos la misma situación para  $P^e(q^e)$  y viceversa. Esta predicción está en contradicción con el modelo de los *droplets*. Cuando dos configuraciones difieren en un dominio compacto de espines, en el interior del cual los espines están invertidos respecto a la primera configuración (un *droplet*) entonces

$$\begin{aligned} q &= 1 - \frac{2v}{V}, \\ q_e &= 1 - \frac{2s}{3V}, \end{aligned} \quad (6.16)$$

donde  $v$  es el número de espines que hay dentro del dominio compacto, mientras que  $s$  es el número de links que hay en la superficie (posiblemente fractal) del *droplet* y  $V$  es el volumen total del sistema. En orden a que  $q$  y  $q_e$  sean sustancialmente diferentes uno de otro, los *droplets* deben de tener dimensión fractal igual a la dimensión del espacio [77].

A campo magnético nulo y dimensión 4 se ha encontrado [76] que  $P(q^e)$  desarrolla dos máximos como reminiscencia de las de  $P(q)$ . La ventaja numérica de  $P^e(q^e)$  es que es nula para valores negativos del solapamiento y que es poco sensible al campo magnético hecho que no ocurría con  $P(q)$ .

En la línea crítica esperamos que

$$\overline{\langle q^e \rangle} = q_0^e + O(L^{-d_e}), \quad (6.17)$$

donde los valores medios se toman respecto a la distribución de solapamientos de energía  $P^e(q^e)$ .

Podemos relacionar  $q_e$  con su dimensión anómala <sup>7</sup>

$$d_e = \frac{d-2+\eta_{q_e}}{2} = d - \frac{1}{\nu}. \quad (6.19)$$

<sup>7</sup>Que en el caso de una teoría escalar con una interacción arbitraria denominaríamos dimensión anómala de  $\phi^2$  y denotaríamos por  $d_{\phi^2}$ , que es igual a (a campo magnético nulo),

$$d_{\phi^2} \equiv d_e = d - \frac{1}{\nu}, \quad (6.18)$$

donde  $d$  es la dimensión del sistema.

De la ecuación (6.15) esperamos que por encima de la dimensión crítica ( $d_c = 6$ )  $d_e = d_q = 2$  ya que  $q_0 \neq 0$ <sup>8</sup> y esperamos que por debajo de la dimensionalidad crítica  $d_e > d_q$ , hecho que comprobaremos numéricamente<sup>9</sup>.

Podemos preguntarnos cual será el tipo de relación que obtendremos simulando retículos pequeños.

Se ha encontrado en el modelo SK que la susceptibilidad no lineal diverge como  $L^2$  ( $\eta = 0$ ) o equivalentemente como  $N^{1/3}$ . Uno esperará de esta divergencia que la corrección a la energía interna, a campo no nulo, irá como  $N^{-1/3}$ , ya que la energía interna es proporcional a  $q^2$ . Sin embargo se encuentra, que las correcciones se comportan como  $N^{-2/3}$ . La explicación es que el coeficiente del término dominante,  $N^{-1/3}$ , es muy pequeño y observamos el término subdominante,  $N^{-2/3}$ . Es claro que en el límite  $N \rightarrow \infty$  se verá el término dominante.

Podemos desarrollar más este último punto. Podemos reescribir la ecuación (6.9) para el modelo SK

$$P(q) \sim N^{\frac{1}{3}} f(N(q - q_{\max}(N))^3), \quad q > q_{\max}. \quad (6.21)$$

En la teoría de campo medio  $q_{\max}(N)$  tiene correcciones  $N^{-1/3}$  y la varianza de  $P(q)$  es proporcional a  $N^{-2/3}$  [83]. De la ecuación anterior (6.21) observamos dos tipos de correcciones que afectan a los momentos: la primera es la variación de  $q_{\max}$  con  $N$  y la segunda es el progresivo estrechamiento del pico cuya varianza decrece como  $N^{-2/3}$ . Podemos calcular las correcciones a la energía teniendo en cuenta que<sup>10</sup>

$$U = -\frac{\beta}{2} \left( 1 - \int_0^1 dq q^2 P(q) \right). \quad (6.22)$$

Sustituyendo la ecuación (6.21) en la ecuación (6.22) obtenemos dos tipos de correcciones: uno de orden  $N^{-1/3}$  y otro de orden  $N^{-2/3}$ , resultando el coeficiente del segundo mucho mayor que el del primero [83, 81]. Esto

---

<sup>8</sup>Podemos hacer los siguientes cálculos en la teoría de Campo Medio. Como  $q = q_0 + a/L^{d_q}$  y  $q^e = q^2$  entonces:

$$q^e = q_0^2 + 2aq_0/L^{d_q} + a^2/L^{2d_q}. \quad (6.20)$$

Si el campo magnético es nulo, entonces  $q_0 = 0$  y  $d_e = 2d_q$ . Pero si hay un campo magnético, entonces  $q_0 \neq 0$  y  $d_e = d_q$ . Pero puede ocurrir que  $q_0$  sea muy pequeño por lo que para un cierto rango de  $L$ ,  $L < L_c$ , el término "dominante" será  $L^{-2d_q}$  como a campo magnético nulo. Obviamente para  $L$  grandes obtendremos el comportamiento correcto y  $d_e = d_q$ .

<sup>9</sup>Basamos esta conjetura en el hecho que a campo magnético nulo se verifica  $d_e > 2d_q$  [76]. Esto puede ser demostrado mediante técnicas del grupo de renormalización [82].

<sup>10</sup>Estrictamente sólo es válida en campo medio, aunque la usaremos en forma aproximada.

explica por qué las correcciones a la energía con el tamaño van como  $N^{-2/3}$  sobre la línea AT.

De estas consideraciones parece claro que el cociente  $d_e/d_q$  que encontremos simulando retículos no muy grandes será alrededor del doble de su verdadero valor.

Toda la información del sistema está contenida en la distribución de solapamientos  $P(q)$ . Tanto la temperatura de la transición como los exponentes críticos pueden ser calculados usando técnicas de tamaño finito. En los sistemas desordenados podemos aplicar las mismas hipótesis de escala que en los sistemas ordenados (Apéndice C).

Las leyes de escala que seguirán los observables anteriores, cerca de la temperatura crítica, son:

$$\chi_{\text{SG}} = L^{2-\eta} \bar{\chi}(L^{1/\nu}(T - T_c)), \quad (6.23)$$

$$g = \bar{g}(L^{1/\nu}(T - T_c)), \quad (6.24)$$

y análogamente seguirán estos comportamientos las mismas cantidades calculadas a partir de  $P^e(q^e)$ . Si dibujamos el cumulante de Binder en función de  $T$  para cada  $L$ , las diversas gráficas se cortarán en  $T_c$  y podremos así estimar la temperatura crítica del sistema.

## 6.4 Detalles de la simulación

Como se señaló anteriormente hemos usado fundamentalmente la máquina RTN de Roma. Hemos simulado en cada *run* 64 copias del desorden (diferentes elecciones de  $J_{ij}$ ) cada una de ellas en un transputer. Además 8 réplicas se simulan en paralelo en cada transputer, mediante un código multiespín, para poder calcular los solapamientos, cada una de ellas con la misma realización del desorden <sup>11</sup>.

Para estudiar la fase de baja temperatura hemos implementado un esquema de *simulated annealed* <sup>12</sup>. Este método es muy usado para encontrar el mínimo absoluto de funciones con muchos mínimos locales [85]. Supongamos que tenemos que encontrar el mínimo absoluto de una función  $H(X)$ , donde  $X$  denota a un elemento del espacio de configuraciones, que tiene dimensión  $N$  (donde  $N$  es usualmente un número muy grande). Para resolver este problema no conocemos ningún algoritmo capaz de encontrar el mínimo en un tiempo polinómico en  $N$ . En este caso podríamos intentar resolverlo

<sup>11</sup>En las simulaciones que estamos realizando actualmente, retículos  $L = 16$  y  $24$  con campo magnético, estamos simulando sólo una configuración del desorden y rompemos el retículo entre los 64 transputer usando el procedimiento descrito en el capítulo 7.

<sup>12</sup>Seguimos la referencia [84].

mediante un método tipo máxima pendiente eligiendo el punto de partida al azar. Si el número de mínimos es proporcional a  $e^{\gamma N}$ ,  $\gamma \neq 0$ , tendremos que realizar en promedio un número exponencial de intentos,  $\sim e^{\delta N}$ , con  $\delta < \gamma$  [84].

En el método del *simulating annealed* se considera un algoritmo dependiente de un parámetro  $\beta$  el cual genera las configuraciones  $X$  con una distribución de Gibbs de probabilidad  $e^{-\beta H}$ . Se comienza con simulaciones a  $\beta$  bajo y se va aumentando poco a poco ésta hasta llegar al caso que nos interesa  $\beta = \infty$ .

Este método ha sido usado para el diseño de circuitos, problemas combinatorios (*e.g.* el problema del viajante), y para realizar simulaciones en sistemas desordenados.

Para el caso  $h = 0$  el esquema usado ha consistido en comenzar en una temperatura alta,  $T = 2.8$ , y posteriormente ir enfriando el sistema, simulando 10 temperaturas hasta llegar a  $T = 1.5$ . Para cada temperatura se realizaron 15000 pasos de termalización y 20000 pasos de Monte Carlo. Para campo nulo hemos simulado las siguientes realizaciones del desorden (*samples*)

$L$	$N_{\text{samples}}$
3	2500
4	2500
5	1200

(6.25)

Para campo no nulo usamos el siguiente esquema de *simulating annealed*

$$\begin{aligned} \beta_k &= \frac{\beta}{1 - 0.1k\beta}, \\ n_k &= n_0(1.8\beta_k)^4, \quad k = 0 \dots 13, \end{aligned} \quad (6.26)$$

donde  $\beta$  y  $n_0(1.8\beta)^4$  son el inverso de la temperatura y el número de termalizaciones iniciales respectivamente.  $\beta_k$  y  $n_k$  son el inverso de la temperatura y el número de termalizaciones en el paso  $k$ -ésimo del *simulating annealed*. Hemos usado  $n_0$  en el rango (10000, 20000) dependiendo del tamaño del retículo y  $\beta^{-1} = 2.5$  tanto para  $h = 0.6$  y  $h = 0.3$ . Para los tamaños más grandes  $L = 7, 8$  termalizábamos 10000 pasos de Monte Carlo en  $T = 2.5$  que se aumentó progresivamente hasta llegar a 100000 en  $T = 1.25$  siguiendo el esquema anterior. Después de esta termalización realizábamos 20000 pasos de Monte Carlo donde se realizaban las medidas. El número de realizaciones del desorden osciló entre la centena (retículos grandes) y el millar (retículos pequeños).

Figura 6.1: Cumulante de Binder a campo magnético nulo para tres tamaños  $L = 3, 4, 5$ . Los símbolos son: círculo lleno  $L = 3$ , triángulo  $L = 4$  y rombo  $L = 5$ .

## 6.5 Resultados

### 6.5.1 Resultados para $h = 0$

En la figura 6.1 presentamos nuestros resultados para el parámetro de Binder. Se puede observar el corte de las curvas de diferentes  $L$ . Esto nos permite evaluar la temperatura crítica <sup>13</sup>

$$T_c = 2.06(2). \quad (6.27)$$

Dado que  $\bar{g}$  ( y análogamente  $\bar{\chi}$ ) son funciones universales, podemos ir variando el exponente  $\nu$ , fijando  $T_c$  al valor dado en la ecuación anterior, hasta que todos los puntos correspondientes a los diferentes  $L$  caigan en una misma curva (figura 6.2). Esto nos da una buena estimación del exponente

---

<sup>13</sup>La teoría de campo medio predice una temperatura crítica de  $T_c^{\text{MF}} = \sqrt{8} = 2.83$ , que nos da una cota superior a la temperatura crítica.

Figura 6.2: Análisis de tamaño finito para la susceptibilidad no lineal a campo magnético nulo. Los mismos símbolos que en la figura anterior.

$\nu$ . Nuestro resultado para  $\nu$  es

$$\nu = 0.7(2). \quad (6.28)$$

Introduciendo  $T_c$  en la ecuación (6.23) obtenemos, figura 6.2,

$$\chi(L, T_c) = \text{Cte } L^{2-\eta}. \quad (6.29)$$

El valor de  $\chi(L, T_c)$  lo obtenemos haciendo una interpolación de los datos que tenemos y  $\eta$  lo calculamos de un ajuste de mínimos cuadrados en la ecuación (6.29) considerando los errores:

$$\eta = -0.25(10). \quad (6.30)$$

Si aplicamos la relación de escala

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (6.31)$$

obtenemos

$$\gamma = 1.8(4). \quad (6.32)$$

Estos valores de los exponentes críticos son muy parecidos con los obtenidos en la referencia [80] ( $T_c = 1.75(5)$ ,  $\nu = 0.80(15)$ ,  $\gamma = 1.8(4)$ ,  $\eta = -0.30(15)$ ) para un desorden gaussiano, lo que indica que ambos modelos están en la misma clase de universalidad. También nuestros valores están en concordancia con los obtenidos de un desarrollo de alta temperatura ( $T_c = 2.02(6)$ ,  $\gamma = 2.0(4)$ )[?].

Finalmente podemos calcular las dimensiones anómalas

$$\begin{aligned} d_q &= 0.88(1), \\ d_e &= 2.6(4), \end{aligned} \tag{6.33}$$

por lo que a campo nulo

$$\frac{d_e}{d_q} = 2.9(4). \tag{6.34}$$

a comparar con el valor de 2.7 que obtienen en la referencia [76] usando métodos basados en el acoplo de dos réplicas.

### 6.5.2 Resultados para $h = 0.6$

En este campo magnético sólo medimos la susceptibilidad no lineal del solapamiento entre réplicas. Examinando donde presenta la susceptibilidad una divergencia potencial estimamos los exponentes críticos. Es decir, fijamos una temperatura y hacemos un ajuste bilogarítmico, figura 6.3, y calculamos  $\chi^2$ . Entonces estimamos la temperatura crítica como aquella que minimiza  $\chi^2$ . La situación consistirá en una no divergencia en la fase paramagnética y la aparición de una divergencia de tipo potencial en  $T_c$  que se continúa de forma no potencial en la fase *spin glass*. Los resultados son los siguientes

$$T_c = 1.1(2), \tag{6.35}$$

$$\eta = -0.7(2), \tag{6.36}$$

Introducimos estos valores en la ecuación (6.23) y obtenemos el último exponente (figura 6.4)

$$\nu = 0.8(2). \tag{6.37}$$

Podemos comparar la temperatura crítica obtenida con la predicha por la aproximación de campo medio modificada para tener en cuenta un número de coordinación finito. Si  $T_{AT}(h)$  es la función que nos da la curva de Almeida-Thouless, la estimación  $T_c(h = 0.6) = T_{AT}(0.6/\sqrt{c})$ , donde  $c$  es el número de coordinación, que en nuestro caso es 8, se encuentra finalmente

Figura 6.3: Gráfico bilogarítmico de la susceptibilidad no lineal para campo magnético  $h = 0.6$  en función del tamaño del retículo para 7 diferentes temperaturas. Los símbolos son:  $T = 2.5$  círculo lleno,  $T = 2.25$  triángulo,  $T = 2.0$  rombo,  $T = 1.75$   $\times$ ,  $T = 1.5$   $+$ ,  $T = 1.25$  cuadrado vacío y  $T = 1.0$  cuadrado lleno.

Figura 6.4: Estudio de tamaño finito para la susceptibilidad no lineal a campo  $h = 0.6$  para diferentes tamaños y temperaturas. Los símbolos son: círculo lleno  $L = 3$ , triángulo  $L=4$ , rombo  $L = 5$ ,  $\times$   $L = 6$  y  $+$   $L = 7$ .

Figura 6.5: Cumulante de Binder a campo magnético  $h = 0.4$ .

que  $T_c^{\text{MF}} = 1.4$ . Vemos que la estimación numérica de la temperatura crítica es bastante cercana a la de campo medio <sup>14</sup>.

### 6.5.3 Resultados para $h = 0.3$

Siguiendo las técnicas usadas en la sección anterior hemos intentado encontrar un punto de corte en el cumulante de Binder y en la *skewness* tanto para el solapamiento de energías como para el solapamiento entre réplicas. Los resultados se presentan en las figuras 6.5 y 6.6 para campo magnético  $h = 0.4$  (las análogas para  $h = 0.3$  son muy parecidas). Claramente se aprecia un comportamiento errático que no se corta como ocurría en  $h = 0$ . Esto se puede explicar dado que  $P(q)$  tiene una contribución muy importante en los solapamientos negativos y esto dificulta cualquier cálculo de los momentos de su distribución, ver figura 6.7. Obviamente si se simulan retículos mayores se deberá encontrar el corte de las funciones anteriores. También presentamos la figura 6.8 para la función  $P^e(q^e)$ .

Para encontrar los exponentes críticos vamos a examinar la divergencia con el volumen de la susceptibilidad no lineal del solapamiento en energías.

---

<sup>14</sup>A campo magnético alto se deben recuperar las características de campo medio.

Figura 6.6: *Skewness* a campo magnético  $h = 0.4$ .

Figura 6.7:  $P(|q|)$  para  $h = 0.3$  y  $T = 1.25$  para tres tamaños. Nótese la contribución de los solapamientos negativos.

Figura 6.8:  $P^e(q^e)$  para  $h = 0.3$  y  $T = 1.25$  para tres tamaños. Se observan claramente dos picos y la ausencia de contribución de los solapamientos negativos

Figura 6.9: Gráfico bilogarítmico de  $\chi_{n1}^e$  en función del tamaño del retículo para  $h = 0.3$ .

Para ello a cada temperatura examinamos el tipo de divergencia que aparece. En la fase de baja temperatura divergirá, aunque sólo en el punto crítico lo hará de forma potencial. Siguiendo estos principios obtenemos los siguientes resultados (ver figura 6.9):

$$T_c = 1.75(2), \quad (6.38)$$

$$\eta_e = 1.0(1). \quad (6.39)$$

Introduciendo estos valores en la ecuación (6.23) se obtiene, figura 6.10:

$$\nu = 0.9(1). \quad (6.40)$$

Sustituyendo estos valores en la fórmula de la susceptibilidad no lineal del solapamiento entre réplicas y ajustando los valores en el punto crítico

Figura 6.10: Estudio de tamaño finito de  $\chi_{n1}^e$  para  $h = 0.3$ .

Figura 6.11: Gráfico bilogarítmico de  $\chi_{nl}$  en función del tamaño del retículo para  $h = 0.3$ .

a una ley potencial obtenemos que (figura 6.11),

$$\eta = -0.6(1). \quad (6.41)$$

Podemos comprobar la relación de escala (6.23) para el solapamiento entre réplicas. El resultado está en la figura 6.12.

Por lo tanto  $d_e = 1.50(5)$ ,  $d_q = 0.70(5)$  y  $\frac{d_e}{d_q} = 2.2(2)$ , que es muy similar al dado a campo nulo. De la discusión en la sección dedicada a los observables es claro que este valor debe de ser intermedio entre su valor a campo cero ( $\sim 2.9(4)$ ) y su valor real ( $> 1$ ). Esto parece confirmar el hecho de que estamos observando el término subdominante en el solapamiento de energía y no el dominante. Ya que  $d_e$  presenta la contribución subdominante, su valor verdadero será la mitad,  $d_e \sim 0.75$ , por lo que el cociente tendrá un valor  $\frac{d_e}{d_q} \sim 1.1$ .

Figura 6.12: Estudio de tamaño finito de  $\chi_{n1}$  para  $h = 0.3$ .

## 6.6 Conclusiones

Hemos simulado el modelo de Ising 4-dimensional con acoplos  $\pm 1$  con probabilidad  $\frac{1}{2}$  y hemos calculado sus exponentes críticos estando en muy buen acuerdo con los calculados a partir de series de alta temperatura o los obtenidos de simulaciones numéricas con distribución gaussiana de los acoplamientos.

A campo  $h = 0.6$  hemos encontrado una divergencia de la susceptibilidad no lineal en  $T_c = 1.1$  cerca de donde lo predice la teoría de campo medio. No hemos encontrado los efectos de tamaño finito que aparecieron en  $h = 0.3$  ya que estos efectos se suprimen muy rápidamente cuanto mayor es el campo magnético,  $q_{\min}$  aumenta conforme aumenta el campo magnético así que en  $P(q)$  tenderán a desaparecer los solapamientos negativos.

A campo  $h = 0.3$  hemos encontrado unos efectos de tamaño finito muy fuertes que nos impiden ver el término dominante en el solapamiento en energías. Hemos encontrado que los exponentes a campo magnético no nulo son similares para los diferentes campos magnéticos simulados y distintos de los obtenidos a campo nulo. El exponente  $\nu$  es compatible en el error en ambos casos, pero el exponente  $\eta$  es claramente diferente.

La imagen que surge de lo anterior, que debe de confirmarse realizando simulaciones en retículos más grandes, es la existencia de la línea de Almeida-Thouless con exponentes críticos diferentes, independientes de  $h$  ( $h > 0$ ), de los encontrados a campo nulo. Este resultado es completamente contrario a una de las predicciones más importantes de la teoría de los *droplets*.

La existencia de esta línea también ha sido comprobada por otro grupo de investigadores simultáneamente a nuestro trabajo [86].

Queda abierto por tanto simular retículos más grandes en orden a confirmar los exponentes dados para campo no nulo.

# Capítulo 7

## RTN

### 7.1 La máquina RTN

En esta sección vamos a describir sucintamente la máquina RTN (Reconfigurable Transputer Network) <sup>1</sup>. Esta máquina ha sido desarrollada en el seno de una colaboración entre los Departamentos de Física Teórica de las Universidades de Zaragoza y Autónoma y Complutense de Madrid.

RTN es una máquina MIMD (Multiple Instruction Multiple Data) que consiste en 8 tarjetas de 8 transputers INMOS T805 que tienen una frecuencia de reloj de 20 MHz [58] y un crosslink C004 más una tarjeta controladora (figura 7.1).

La tarjeta base tiene 8 transputers a 20 MHz que pueden acceder de 1 a 4 MBytes de memoria RAM dinámica (DRAM). Cada transputer accede directamente a su propio banco de memoria y además puede establecer una comunicación asíncrona con cualquier otro banco a través de sus links de comunicación. La topología de la tarjeta es reconfigurable mediante el uso del crosslink C004 con el que van equipadas (figura 7.2).

La tarjeta controladora consiste en un crosslink C004, que nos permite reconfigurar las 8 tarjetas, de un transputer T805, de 4 Mbytes de DRAM y de un chip ALTERA, figura 7.1 recuadro inferior. Esta tarjeta está conectada a una tarjeta B004 a través del link 0, que a su vez está conectada a un host. Esta tarjeta controladora se encarga, además, de gestionar las señales de Error, Reset y Analyse de RTN.

Debido a que en algunas aplicaciones se usa una red toroidal en la que no quedan links libres, se ha diseñado un procedimiento para informar al

---

<sup>1</sup>Para una información más detallada de la máquina consúltense las referencias [55, 56, 57].

Figura 7.1: Diagrama lógico de la máquina RTN.

Figura 7.2: Tarjeta Base.

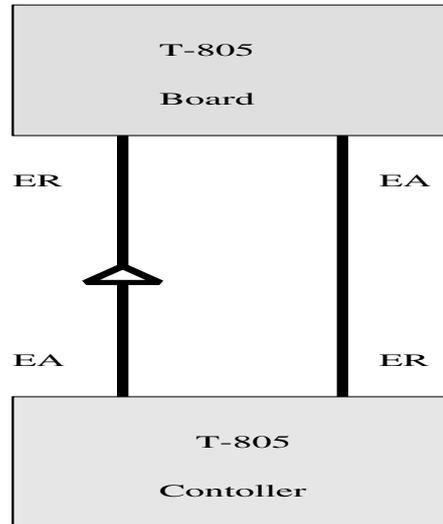


Figura 7.3: Control de las señales de Event por la Altera.

controller que debe de reconfigurar los crosslinks para abrir la red. Este proceso está basado en la gestión de las señales de EventRequest (EventReq o ER), ver figura 7.3, Event y EventAcknowledgment (EventAck o EA), siendo las dos primeras señales de entrada y la última de salida. Event sólo recibe entradas y no descifra la señal que recibe. Todas estas señales están interrelacionadas.

Cuando EventReq está alto y se lee el Event, que sólo se puede leer si el EventReq está alto, entonces EventAck se pone alto. Posteriormente el EventReq se pone bajo y casi inmediatamente el EventAck baja.<sup>2</sup> Esto nos proporciona un método para hacer llegar información al controller.

Partamos de una situación simplificada con un controller y un sólo transputer y supongamos que tenemos una configuración donde el EventReq está alto en el transputer<sup>3</sup>, cuando el transputer acaba de realizar los cálculos y necesita que la red se abra para mandar los datos al controller, lee el canal Event, esto hace que inmediatamente se ponga alto el EventAck. Tal como se ha diseñado el hardware, ver figura 7.3, esto hace que el EventReq

<sup>2</sup>Por alto y bajo entendemos que la señal correspondiente está a 5V o a 0V respectivamente.

<sup>3</sup>En la situación realista de la máquina completa, lo que se hace es que el controller manda una señal EventOut que la ALTERA descodifica poniendo los EventReq de los transputers 0 de las 8 tarjetas alto, a la vez que manda una señal a sus canales Event.

del controller se ponga alto y podamos leer el Event en el controller<sup>4</sup>, con lo que sabemos que hay que reconfigurar la red. Posteriormente todas las señales se ponen bajas<sup>5</sup>.

Las 8 tarjetas base y la tarjeta controladora están conectadas en la máquina RTN mediante un Back-Plane en un crate estándar VME. Las diferentes conexiones de los links están dibujadas en la figura 7.4. Hay que señalar que 14 links que van de tarjeta a tarjeta van de crosslink a crosslink (los números 8 a 14 y 24 a 30 del crosslink de la tarjeta) mientras los 8 links van de crosslink al conector y de ahí a la tarjeta (los números 16 a 23, de nuevo del crosslink de la tarjeta) mientras los links 15 y 31 del crosslink de cada tarjeta van al controller. Finalmente los 8 links 0 de cada tarjeta van al conector y reciben los 8 links de la tarjeta vecina que también van al conector.

Esto nos permite llegar a una potencia máxima de 640 Mips o unos 100 Mflops.

Hasta el presente las dos máquinas actualmente en funcionamiento, una en Zaragoza y la otra en Roma, han estado dedicadas al estudio de diversos temas: U(1)-Higgs [30, 31, 32, 54], SU(2) Twisted [59], Spin-Glasses [60, 61, 56], campos escalares en 2 dimensiones [62, 63] y simulaciones de movimiento de placas tectónicas [64].

---

<sup>4</sup>En RTN lo que ocurre es que el EventAck del transputer se pone alto y va a la ALTERA y ésta pone alto el EventReq del controller y le manda una señal a su Event. Cuando el controller lo lee se ponen bajos los EventReq de las tarjetas via hardware.

<sup>5</sup>La puerta lógica NOT que aparece en la Fig. 7.3 sirve para poner bajas las señales de EventReq de las tarjetas. Cuando el ER de la tarjeta está alto el EA del controller está bajo. Pero cuando se lee el Event en el controller su EA se pone alto y esto implica que el ER del transputer se ponga a cero.

Figura 7.4: Interconexiones entre las 8 tarjetas.

## Capítulo 8

# Utilización de RTN en C

### 8.1 Introducción

En este capítulo expondremos algunas de las rutinas que hemos desarrollado en C para el control de la máquina, concretamente es un conjunto de programas que permiten utilizar RTN configurada como una red bidimensional cerrada [55, 65].

En las tres primeras secciones describiremos las rutinas realizadas dependiendo de la función que desarrolla el transputer (root, controller o worker).

Para fijar la notación denominaremos `root.c` al programa que corre en el root, `ctrl.c` al programa que corre en el controller y `worker.c` al que corre en cada uno de los 64 transputer de RTN.

En la última sección describiremos cómo hemos paralelizado los programas utilizados, concretamente los usados para spin-glasses,  $U(1)$ -Higgs y  $Z(8)$ . Los detalles del tipo de acción son prácticamente irrelevantes a excepción que todas las interacciones son a próximos vecinos.

### 8.2 Root.c

La tarea fundamental de `root.c` es leer los datos iniciales (que pueden incluir eventualmente backups de configuraciones) del disco duro del host y enviar estos datos al controller. Posteriormente recibirá los resultados de la simulación del controller y los guardará en disco. Esto lo podemos escribir en el siguiente ejemplo, donde no hemos especificado totalmente todos los elementos definidos pero que sirve para entender el proceso.

```

/* root.c :
Se ejecuta en el transputer conectado directamente al host */

#include "root.h"
/* headers de i/o, comunicaciones, estructuras, ... */

int main(void)
{
    DATOSTOT datos;
    RESULTOT resultados;

    lee_datos_del_host(&datos);
    ChanOut(to_controller, datos, sizeof(datos));
    ChanIn(from_controller, resultados, sizeof(resultados));
    escribe_datos_en_host(&resultados);
}

```

Otra posibilidad alternativa es que el programa root se ejecute directamente en el host, en cuyo caso ChanIn y ChanOut son rutinas que escriben sobre el bus del host.

### 8.3 Controller.c

La tarea del controller es un poco más complicada que la del root, esto es debido a que debe de realizar las diversas reconfiguraciones de la red además de recibir los datos del root y mandarlos a los 64 transputers y posteriormente recibir los resultados de los 64 transputers y mandarlos al root.

Una vez recibidos los datos del root, el controller tiene que seleccionar cada uno de los 64 transputers mediante la función `Conecta_transputer[i]`. Una vez seleccionado le envía su parte de los datos. Realizado esto, el controller reconfigura los crosslinks de forma que se obtenga una red toroidal bidimensional mediante la función `Cierra_Red`. Después manda un aviso a todos los transputers que les indica que ya pueden comenzar. Esto lo hace mediante el Event puesto que la red ya es toroidal y no queda ningún link físico libre. Análogamente, de nuevo mediante el Event, el controller espera una señal desde la máquina que le indique que se ha finalizado la parte del cálculo, para que reconfigure la red. Recibida esta señal el controller selecciona de nuevo cada uno de los 64 transputers mediante la misma función que anteriormente. Aunque ahora es necesario que un transputer dado conozca que tiene comunicación directa con el controller. Para ello el

controller le envía un carácter, cuando el transputer lo recibe conoce que la conexión está abierta y puede empezar a mandar los resultados. Tras recibir los resultados de cada uno de los transputers, suma los datos para reducir su tamaño y manda estos datos promediados al procesador root.

```

/* ctrl.c */

#include "ctrl.c"

int main(void)
{
    DATOSTOT datos_totales;
    DATOSPAR datos_parciales[numero_transputer];

    RESULTOT resul_totales;
    RESULTPAR resul_parciales[numero_transputers];

    ChanIn(from_root, &datos_totales, sizeof(datos_totales));
    Extrae_datos_parciales(&datos_totales, datos_parciales);
    for (i=0; i<numero_transputers; i++)
    {
        Conecta_transputers(i);
        ChanOut(to_RTN, &datos_parciales[i],
                sizeof(datos_parciales[i]));
    }
    Cierra_Red(); /* Configura un toro bidimensional */
    Manda_Aviso_RTN(); /* Indica a RTN que puede comenzar */

    /* RTN esta realizando el cálculo */

    /* Espera que finalice RTN, está leyendo el Event*/
    Espera_Aviso_RTN();
    for (i=0; i<numero_transputers; i++)
    {
        Conecta_transputer(i);
    /* Avisa al transputer i-ésimo que ya puede
    comenzar a mandar los resultados
    ya que el crosslink ha sido reconfigurado */
        ChanOutChar(to_RTN, 'o');
        ChanIn(from_RTN, &resul_parciales[i],
                sizeof(resul_parciales[i]));
    }
}

```

```

Integra_Resultados(resul_parciales,&resul_totales);
ChanOut(to_root,&resul_totales,sizeof(resul_totales);
}

```

A continuación vamos a describir las funciones usadas en el programa anterior.

Comenzaremos con la función `Conecta_transputer(k)`. Para conectar el controller con el transputer  $k$ -ésimo lo que debemos determinar en primer lugar es a qué tarjeta pertenece de las 8 y cuál es su orden dentro de la anterior tarjeta. Esto se hace fácilmente calculando la división entera de  $k$  con 8 (que nos da la tarjeta) y el resto (que nos da el orden dentro de la tarjeta). Para enlazar con la tarjeta dada debemos configurar en primer lugar el crosslink del controller. Para ello recordemos cómo se configura un crosslink. Para configurarlo usaremos el link de configuración que poseen los crosslinks, que en nuestro caso está unido al link 3 del controller.

En primer lugar mandamos el byte 1, esto le indica que los dos siguientes bytes que reciba serán los links que debe de conectar. Después de mandar los dos bytes citados le mandamos el cuarto byte que será el 3, esto le indicará que debe de grabar la configuración de los links. Si queremos unir más de dos links del crosslink mandaremos el 1, luego tantos pares de bytes como links queramos unir y finalmente el byte 3. A veces se manda el byte 4 para borrar todas las uniones existentes.

Como vamos a usar el link 1 del controller, que va al link 30 del C004 del controller, para comunicarnos con el C004 de la tarjeta dada, tendremos que mandar como bytes de configuración el 30 y el número de la tarjeta. Así todo lo que salga del link 1 del controller acabará en el link de configuración del C004 de la tarjeta seleccionada, que más abajo denotaremos por  $j$ . Además uniremos el link 31 del C004 del Controller, que está unido al link 2 del controller, con el link 31 del C004 de la tarjeta, que conectaremos posteriormente al transputer dado. Finalmente deberemos configurar el C004 de la tarjeta dada. Para ello mandamos por el link 1 del controller el vector de configuración. Uniremos el link 31 del C004 de la tarjeta, al cual ya tenemos acceso, con el link del C004 que va al transputer  $i$ -ésimo, que tal como se ha desarrollado el hardware es el link  $i$ -ésimo del C004 de la tarjeta, así que mandamos  $(4,1,31,i,3)$ . Por lo tanto todo lo que parta del link 2 del controller irá a parar al link 2 del transputer  $i$ -ésimo de la tarjeta  $j$ -ésima.

El código será:

```

#include <channel.h>

Channel *conf_ctrl =LINK3OUT,

```

```

        *conf_board=LINK10UT;
/* Las variables LINK30UT,... se encuentran definidas en el
header channel.h */
char conecta_ctrl[5] = {4,1,0,30,1,16,31,3},
    conecta_board[3] = {4,1,0,31,3};

void conecta_transputer(int k)
{
    int i,j;
    i=k%8; /* Transputer i */
    j=k/8; /* de la tarjeta j */
    conecta_ctrl[2] = (char) j;
    conecta_ctrl[5] = (char) (j+16);
    ChanOut(conf_ctrl,conecta_ctrl,sizeof(conecta_ctrl));
/* ya hemos configurado el C004 del controller */
/* ahora configuraremos el C004 de la tarjeta j */
    conecta_board[2]= (char) i;
    ChanOut(conf_board,conecta_board,
        sizeof(conecta_board));
}

```

A continuación vamos a describir la rutina que usamos para cerrar la red de forma que obtengamos un toro bidimensional.

De nuevo lo primero que hacemos es configurar el C004 del controller. La configuración la haremos secuencial, fijada una tarjeta,  $i$ , procederemos con sus 8 transputers,  $j$ . Para ello mandaremos al crosslink del controller los bytes de configuración 30 e  $i$ , por el Link 3 del controller. Ahora ya tenemos acceso al link de configuración del crosslink de la tarjeta  $i$ -ésima a través del link 1 del controller. Por este link mandaremos 8 pares de bytes de configuración para unir los 8 transputers. Tal como se ha diseñado el hardware cada transputer está unido a sus dos vecinos mediante los links 1 y 3. Los 8 links 0 van a un conector que los envía al crosslink de la tarjeta  $i+1$ . El link 0 del transputer  $j$ -ésimo de la tarjeta  $i$ -ésima va conectado con el link  $j+16$  del C004 la tarjeta  $i+1$ . Mientras que los links 2 van a su propio crosslink. El link 2 del transputer  $j$ -ésimo va conectado al link  $j$ -ésimo del crosslink. Para conseguir la configuración toroidal uniremos el link 2 del transputer  $j$ -ésimo de la tarjeta  $i$ -ésima con el link 0 del transputer  $j$ -ésimo de la tarjeta  $i+1$ . Para ello mandaremos por el link 1 del controller los pares  $(j, j+16)$ ,  $j=0..7$ . Realizando la misma operación en las restantes 7 tarjetas obtenemos una configuración toroidal cerrada.

El código que lo realiza es:

```

#include <channel.h>

Channel *conf_ctrl =LINK3OUT,
        *conf_board=LINK1OUT;

char cierra_ctrl[5] ={4,1,0,30,3},
     cierra_board[3]={1,0,16};

void Cierra_Red(void)
{
    int i,j;
    for (i=0;i<8;i++) /* Bucle en tarjetas */
    {
        cierra_ctrl[2]=(char) i;
        ChanOut(conf_ctrl,cierra_ctrl,sizeof(cierra_ctrl));
        ChanOutChar(conf_board,(char) 4);
        for (j=0;j<8;j++) /* Bucle en transputers */
        {
            cierra_board[1]=(char) j;
            cierra_board[2]=(char) (j+16);
            ChanOut(conf_board,cierra_board,
                    sizeof(cierra_board));
        }
        ChanOutChar(conf_board,(char) 3);
    }
}

```

A continuación describiremos la rutina `Manda_Aviso_RTN`. Esta rutina avisa a los 64 transputers que ya pueden comenzar el cálculo. La rutina es la siguiente:

```

#include <channel.h>

#define EV_OUT (int *) 0x0000000C
#define ERR    (int *) 0x00000004
#define EV_ACK (int *) 0x00000008

void Manda_Aviso_RTN(void)
{
    int any,result;

```

```

    *EV_OUT=1;
    ChanInChar(EVENT);
/* La variable EVENT se encuentra definida en channel.h */
    any=*ERR;
    result=*EV_ACK;
    *EV_OUT=0;
}

```

Análogamente la rutina Recibe\_Aviso\_RTN será:

```

#include <channel.h>

#define EV_OUT (int *) 0x0000000C
#define ERR    (int *) 0x00000004
#define EV_ACK (int *) 0x00000008

void Recibe_Aviso_RTN(void)
{
    int any, result;

    *EV_OUT=1;
    ChanInChar(EVENT);
    any=*ERR;
    result=*EV_ACK;
    *EV_OUT=0;
}

```

Y finalmente, aunque no la hemos incluido en el ejemplo ctrl.c, la rutina para resetar el event, Reset\_Event, es:

```

#include <channel.h>

#define EV_OUT (int *) 0x0000000C
#define ERR    (int *) 0x00000004
#define EV_ACK (int *) 0x00000008

void Reset_Event(void)
{
    int any, result;

    if (ChanInTimeFail(EVENT,&any,4,10)>0)

```

```

    {
        any=*ERR;
        result=*EV_ACK;
        *EV_OUT=0;
    }
    else
        *EV_OUT=0;
}

```

## 8.4 Worker.c

Pasamos finalmente al programa que se ejecuta en cada uno de los 64 transputers, que denominaremos worker.c, cuyo código será:

```

/* worker.c:
   Se ejecuta en cada transputer de RTN. */

#include "worker.h"

int main(void)
{
    DATOSPAR datos_parciales;
    RESULPAR resul_parciales;
    int *transputer;

    /* Lee el número de transputer del
    fichero de configuración (.cfs) */
    transputer= (int *) get_param(1);

    ChanIn(from_ctrl,&datos_parciales,
           sizeof(datos_parciales));

    Espera_Aviso_Controller();
    /* se ejecuta esta rutina cuando la red esta cerrada. */
    Subrutina_Principal();
    /* La subrutina principal puede incluir comunicación
    con los transputer vecinos */

    Manda_Aviso_Controller();

    ChanInChar(from_ctrl);

```

```

    ChanOut(to_ctrl,&resul_parciales,sizeof(resul_parciales);
}

```

Ahora pasamos a describir las diferentes rutinas incluidas en el programa anterior.

En primer lugar tenemos la rutina Espera\_Aviso\_Controller:

```

#include <channel.h>

extern int *transputer;

void Espera_Aviso_Controller(void)
{
    if (*transputer==0)
        ChanInChar(EVENT);

    /* El transputer 0 de la tarjeta 0 manda un aviso a los
    transputer 0 de cada tarjeta */
    if (*transputer%8==0)
    {
        if (*transputer==0)
        {
            ChanOutChar(LINK2OUT,'o');
            ChanInChar(LINK0IN);
        }
        else
        {
            ChanInChar(LINK0IN);
            ChanOutChar(LINK2OUT,'o');
        }
    }

    /* El transputer 0 de cada tarjeta envía una señal ('o')
    a cada uno del resto de los transputers de la tarjeta */
    if (*transputer%8==0)
    {
        ChanOutChar(LINK1OUT,'o');
        ChanInChar(LINK3IN);
    }
    else
    {
        /* como no es el T0 espera el carácter

```

```

y cuando lo recibe por el vecino lo envía
al otro vecino */
    ChanInChar(LINK3IN);
    ChanOutChar(LINK1OUT,'o');
}
/* Todos los transputers han terminado
y es posible abrir la red */
}

```

Lo primero que hace la rutina anterior es comprobar si el transputer que la está ejecutando es el transputer 0 de la máquina. Si lo es, lee el EVENT; si no lo es comprueba si es el transputer 0 de alguna tarjeta, si es así comprueba de nuevo si es el transputer 0 de la máquina y si es verdad manda por el link 2 un carácter y posteriormente espera a que le llegue un carácter por el link 1. En caso contrario, es decir es el transputer 0 de una tarjeta diferente de la 0, espera a que le llegue un carácter por el link 1, y posteriormente enviará un carácter por el link 2. Tal como está la configuración el link 0 del transputer 0 de una tarjeta está conectado con el link 2 del transputer 0 de la siguiente tarjeta. Así lo que se consigue es que el transputer 0 de la tarjeta 0 mande una señal al resto de los transputers 0 de las otras tarjetas.

De nuevo comprueba si el transputer dado es el 0 de una tarjeta, si lo es, manda al resto de los transputers de la tarjeta un carácter, esto lo hace mandándole al vecino un carácter. Si no es el transputer 0 de cualquier tarjeta esperará recibir por el link 3 el carácter que ha mandado el transputer 0 si es su vecino, o de su propio vecino si no es el caso. Cuando se cierra el ciclo es que todos los transputers han terminado de ejecutar su código, en este caso el input/output con el controller y se puede cerrar la red.

A continuación describimos la rutina Manda\_Aviso\_Controller, que no detallaremos al ser muy parecida a la anterior.

```

void Manda_Aviso_Controller(void)
/* El transputer 0 de la tarjeta 0 envía un aviso a
los 0 de cada tarjeta de que ha terminado */
    if (*transputer %8==0)
    {
        if (*transputer==0)
        {
            ChanOutChar(LINK2OUT,'o');
            ChanInChar(LINK0IN);

```

```

    }
    else
    {
        ChanInChar(LINK0IN);
        ChanOutChar(LINK2OUT, 'o');
    }
}
/* Los transputer 0 notifican a los demás de
la propia tarjeta que han terminado */

if (*transputer %8 ==0)
{
    ChanOutChar(LINK1OUT, 'o');
    ChanInChar(LINK3IN);
}
else
{
    ChanInChar(LINK3IN);
    ChanOutChar(LINK1OUT, 'o');
}
/* Todos los T's han terminado,
el transputer 0 de la tarjeta 0 lo comunica a
través del EVENT al controller */

if (*transputer ==0)
    ChanInChar(EVENT);
}

```

## 8.5 Paralelización de un programa tipo

La estrategia de paralelización ha consistido en lo siguiente. Dividimos las direcciones  $x$  e  $y$  entre todos los procesadores. Cada uno de ellos tendrá que trabajar sobre parte del retículo en las direcciones  $x$  e  $y$  y con el retículo entero en las direcciones  $z$  y  $t$ . Por lo tanto cada transputer tendrá un subretículo de puntos y todos estos subretículos podrán ser “actualizados” en paralelo. Un problema que se presenta es la interacción a segundos vecinos que aparece en la acción, para una teoría gauge. Los puntos de la frontera de estos subretículos necesitan conocer, para poder realizar el *update*, los puntos vecinos y sus links correspondientes.

Uno podría pensar en que cada transputer pidiera a su correspondiente vecino la información que necesitara en cada momento. Pero esto presenta

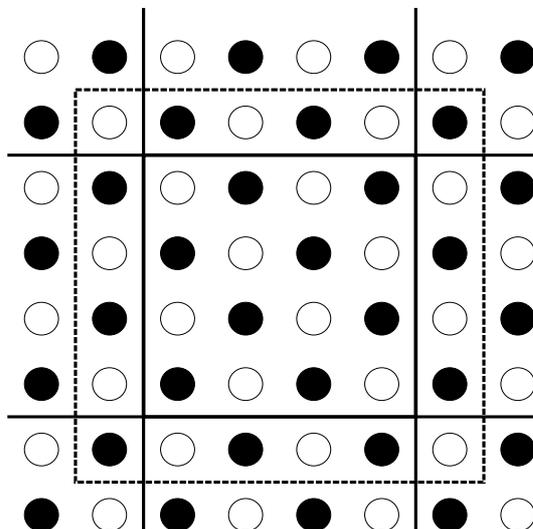


Figura 8.1: Descripción de la distribución en blancas y negras en un retículo bidimensional. En línea continua se representa la parte del retículo correspondiente a un transputer, mientras que con línea discontinua se marca la parte del retículo almacenada en el transputer anterior.

el problema de sincronización entre los diferentes procesadores. Además transmitir paquetes pequeños de información no es eficiente y finalmente tendríamos que estar abriendo y cerrando continuamente procesos paralelos.

Para evitar esto, hemos introducido las variables de los procesadores vecinos que necesitamos para hacer el *update* (las fronteras) en el transputer dado, así que cada procesador contiene además de su subretículo la frontera de éste, tanto de sites como de links. Ya podemos realizar el *update* enteramente dentro del procesador. Realizaremos este *update* simultáneamente en todos los procesadores a la vez. Para posibilitar la transmisión de las nuevas variables, producto del *update*, dividiremos el retículo en sites blancos y en sites negros. El vecino de un site blanco es un site negro y viceversa (Figura 8.1). En el caso de una teoría gauge los links tienen el color del site de origen.

En primer lugar hacemos el *update* de todos los sites blancos y seguidamente transmitimos las fronteras, sólo la parte blanca. Así los procesadores vecinos tienen la información actualizada para realizar el correspondiente *update* de los sites negros, para lo que necesitan sólo los sites blancos que ya han sido actualizados en el paso anterior. Si trabajamos con una teoría

gauge es necesario realizar el *update* de los links blancos y negros en una dirección antes de proseguir con la siguiente.

Así en un retículo  $16^4$  en la máquina RTN con una topología  $8 \times 8$  cada transputer tendrá un subretículo de  $4 \times 4 \times 16 \times 16$ .

Con este método hemos obtenido una eficiencia paralela cercana al 95 %. Es decir sólo el 5% del tiempo se ha dedicado a transmisiones entre procesadores vecinos. Con este esquema de paralelización podemos llegar a simular hasta retículos  $24^4$ . Esta limitación está impuesta por la memoria de cada transputer.

Ahora detallaremos con partes de código escrito en C cómo se transmiten las fronteras<sup>1</sup> para el programa que simula a los vidrios de espín.

En el worker realizamos las siguientes definiciones:

```
/* Definimos el tipo spin como entero largo,
aunque para el T800 int=long */

typedef spin long int

int *transputer;

/* Tenemos cuatro fronteras: right,left,up y down */

/* Declaramos el vector en el que transmitiremos
la frontera derecha outright[], el vector por el
que recibiremos la frontera derecha inright[],...*/

spin outright[nf1],outleft[nf1],inright[nf1],inleft[nf1],
    outdown[nf2],    outup[nf2], indown[nf2], inup[nf2];

/*Declaramos los procesos que usaremos
para mandar y recibir las fronteras */

Process *xleft, *xright, *xup, *xdown;
Process *xleft1, *xright1, *xup1, *xdown1;

/*Declaramos los canales */

extern Channel *down_chan, *up_chan,
    *link_outr,*link_outl,*link_outu,*link_outd,
    *link_inr,*link_inl,*link_inu,*link_ind;
```

---

<sup>1</sup>Las comunicaciones del programa worker con el controller son análogas a las descritas en los ejemplos del Apéndice D

```

/* Declaramos las funciones que se corrieran en paralelo,
que tienen como argumento uno de los procesos anteriores,
el canal por el que se manda o recibe,
dependiendo del tipo de funcion, y un puntero a la
variable que se pasa. */

extern void mandaf1(Process *,Channel *, spin *);
extern void mandaf2(Process *,Channel *, spin *);
extern void recibe1(Process *,Channel *, spin *);
extern void recibe2(Process *,Channel *, spin *);

/* Declaramos como externa la función
que extrae las correspondientes
fronteras, las manda y recibe */

extern void Frontera(int);

...

int main(void)
{
    ...

    transputer = (int *) get_param(1);

/* Alojamos e inicializamos los procesos anteriores */

    if ((xleft1=
        ProcAlloc(recibe1,0,long1,link_inr,inright))==NULL)
        debug_stop();
    if ((xright1=
        ProcAlloc(recibe1,0,long1,link_inl,inleft))==NULL)
        debug_stop();
    if ((xdown1=
        ProcAlloc(recibe2,0,long2,link_inu,inup))==NULL)
        debug_stop();
    if ((xup1=
        ProcAlloc(recibe2,0,long2,link_ind,indown))==NULL)
        debug_stop();

    if ((xleft=

```

```

        ProcAlloc(mandaf1,0,long1,link_outl,outleft))==NULL)
        debug_stop();
    if ((xright=
        ProcAlloc(mandaf1,0,long1,link_outr,outright))==NULL)
        debug_stop();
    if ((xdown=
        ProcAlloc(mandaf2,0,long2,link_outd,outdown))==NULL)
        debug_stop();
    if ((xup=
        ProcAlloc(mandaf2,0,long2,link_outu,outup))==NULL)
        debug_stop();

/* long1 y long 2 son el tamaño de
las diferentes fronteras */
    ...

    Frontera(...)

}

    mientras que la rutina frontera:
    ...

extern Channel *link_inl, *link_inr, *link_ind, *link_inu;
extern Channel *link_outl,*link_outr,*link_outd,*link_outu;
extern Process *xleft, *xright, *xup, *xdown;
extern Process *xleft1, *xright1, *xup1, *xdown1;
extern spin outright[],outleft[],inright[],inleft[],
        outdown[],outup[],indown[],inup[];
    ...
/* Mandará frontera right o left */

void mandaf1(Process *p, Channel *canal,spin *vector)
{
    p = p;
    ChanOut(canal,vector,nf1*4);
/*nf1*4 es el tamaño del vector */
}

/* Mandará frontera up o down */

void mandaf2(Process *p, Channel *canal,spin *vector)

```

```

{
    p = p;
    ChanOut(canal,vector,nf2*4);
}
/* Recibirá frontera right o left */

void recibe1(Process *p, Channel *canal,spin *vector)
{
    p = p;
    ChanIn(canal,vector,nf1*4);
}

/* Recibirá frontera up o down */

void recibe2(Process *p, Channel *canal,spin *vector)
{
    p = p;
    ChanIn(canal,vector,nf2*4);
}

void Frontera(int color)
/*transmisión de la frontera cambiada */
{
    ...
/* Hasta aquí la rutina frontera ha extraído
las cuatro fronteras y las
ha guardado en las variables
outright, outleft, outup, outdown */

/* El proceso xleft manda la frontera
izquierda (outleft) y xleft1
recibe la frontera derecha,
que guardará en inright */

/* Ambos procesos se mandan en paralelo
y con la misma prioridad */

    ProcPar(xleft,xleft1,NULL);

/* Cuando finaliza la transmisión de
izquierda a derecha comienza la
transmisión de derecha a izquierda */

```

```
    ProcPar(xright,xright1,NULL);

/* De abajo a arriba...*/

    ProcPar(xdown,xdown1,NULL);

/* Y de arriba a abajo */

    ProcPar(xup,xup1,NULL);

/* Ya hemos transmitido las fronteras
y podemos actualizar las variables...*/
    ...
}
```



# Apéndice A

## Método de la densidad espectral

### A.1 Método de la densidad espectral

En este apéndice presentaremos los fundamentos del método de la densidad espectral que ha sido ampliamente utilizado a lo largo de la tesis<sup>1</sup>.

Comenzaremos con los histogramas unidimensionales, la generalización a histogramas en varias dimensiones es directa, para finalizar con la técnica de los histogramas múltiples.

#### A.1.1 Histogramas unidimensionales

Consideremos una evolución de Monte Carlo, cada una de las configuraciones generadas tiene energía  $E$ , y podemos calcular el número de veces que aparece una energía dada,  $\bar{N}(E)$ , dividida por el número total de configuraciones generadas en la evolución de Monte Carlo,  $n$ . En el límite cuando el número de configuraciones generadas es infinito, el histograma anterior tiende a la probabilidad de que aparezca una energía  $E$  en el sistema. En este caso el histograma obtenido lo denotaremos por  $\langle N(E) \rangle$ .

Cuando el sistema esté definido de forma que la energía sea continua, consideraremos una discretización y realizaremos el proceso anterior.

De la Mecánica Estadística Clásica sabemos que la probabilidad de que

---

<sup>1</sup>Este método fue originalmente presentado en las referencias [87, 88], aunque fue “redescubierto y “relanzado” en [89]. Nosotros seguimos en nuestra presentación la referencia [90].

aparezca una energía  $E$  es

$$p(E) = \frac{1}{\mathcal{Z}} W(E) \exp(-\beta E), \quad (\text{A.1})$$

donde  $W(E)$  es el número de estados con energía  $E$ . Si definimos  $f \equiv \beta F$ , donde  $F$  es la energía libre extensiva tenemos

$$f = -\log \mathcal{Z}. \quad (\text{A.2})$$

Por lo tanto en el límite en el cual el número de configuraciones,  $n$ , es infinito tenemos

$$\frac{\langle N(E)_\beta \rangle}{n} \equiv p_\beta(E) = W(E) \exp(-\beta E + f). \quad (\text{A.3})$$

Es decir podemos calcular numéricamente la densidad de estados salvo el factor  $\exp(-f)$ . Con esta estimación ya podemos calcular la probabilidad de la energía a otra  $\beta$  y relacionarla con la ya calculada.

$$p_{\beta'}(E) = \frac{p_\beta(E) \exp\{-(\beta' - \beta)E\}}{\sum_E p_\beta(E) \exp\{-(\beta' - \beta)E\}}. \quad (\text{A.4})$$

Las ecuaciones anteriores son exactas en el límite  $n \rightarrow \infty$ , mientras que para una simulación de Monte Carlo serán aproximadas, tendremos  $\bar{N}(E)$  en vez de  $\langle N(E) \rangle$ . Dada una simulación en  $\beta$  podremos calcular  $p_{\beta'}(E)$  siempre y cuando la diferencia  $\beta' - \beta$  sea pequeña. Podemos cuantificar lo anterior de la siguiente forma: todas las energías mayores (menores) que  $E \pm A\sigma(E)$ , con  $A \sim 1$ , deben de estar suprimidas en la nueva  $p_{\beta'}$  ya que el histograma original apenas nos da información sobre estas energías al estar a más de una desviación típica de la media (el error en un histograma va como la raíz cuadrada del número de puntos que hay en cada intervalo, así que  $\sigma^2(N(E)) \sim \langle N(E) \rangle$  y como lejos de  $\bar{E}$  apenas se encuentran configuraciones el error será del 100%)<sup>2</sup>. Podremos exigir por ejemplo

$$|\beta - \beta'| \sigma(E) = A. \quad (\text{A.5})$$

Con  $A = 3$  la nueva probabilidad tendrá un factor  $e^{-3}$  respecto a la probabilidad máxima en estos puntos. Es decir, prácticamente no contribuirán.

Además es interesante realizar la simulación lo más cerca posible de la transición. Pero cerca de la transición las fluctuaciones serán máximas y tendremos un histograma lo más ancho posible. Por lo tanto de la ecuación anterior observamos que nos podremos mover muy poco de la temperatura

<sup>2</sup>En la práctica puede conseguirse una precisión razonable para distancias algo mayores que  $\sigma$ .

de la simulación. A pesar de este inconveniente el método de la densidad espectral se ha revelado muy útil para localizar la transición.

Es fácil reescribir las fórmulas anteriores para un sistema con varios observables.

En el sistema U(1)–Higgs teníamos la energía de la plaqueta  $E_P$  y la energía de los links  $E_L$ . En este problema realizamos una simulación en  $(\beta, \kappa)$  y construimos el histograma de las dos energías  $\bar{N}(E_P, E_L)/n$ , que sabemos que en límite de  $n \rightarrow \infty$  tiende a la probabilidad de que el sistema tenga energías  $(E_P, E_L)$   $p_{\beta, \kappa}(E_P, E_L)$ <sup>3</sup>. La probabilidad de tener  $E_P$  y  $E_L$  a otro par de couplings  $(\bar{\beta}, \bar{\kappa})$  es

$$P_{(\bar{\beta}, \bar{\kappa})}(E_P, E_L) = \frac{p_{\beta, \kappa}(E_P, E_L) e^{(\bar{\beta} - \beta)6VE_P + (\bar{\kappa} - \kappa)4VE_L}}{\sum_{E_P, E_L} p_{\beta, \kappa}(E_P, E_L) e^{(\bar{\beta} - \beta)6VE_P + (\bar{\kappa} - \kappa)4VE_L}}. \quad (\text{A.6})$$

La validez de esta ecuación estará dada por las fluctuaciones de  $E_P$  y  $E_L$ . Para el parámetro  $\beta$  el intervalo accesible será  $\Delta\beta \sim \frac{1}{\sigma(E_P)6V}$ , mientras que para  $\kappa$  tendremos  $\Delta\kappa \sim \frac{1}{\sigma(E_L)V}$ .

Si partimos de la acción anterior reescrita en términos de las variables rotadas  $c_\perp$  y  $c_\parallel$ , podremos movernos en intervalos de los anteriores couplings que satisfagan  $\Delta c_\perp \sim \frac{1}{\sqrt{\lambda_{\max}6V}}$  y  $\Delta c_\parallel \sim \frac{1}{\sqrt{\lambda_{\min}6V}}$  respectivamente, por lo que tendremos un intervalo mucho mayor en la dirección paralela.

### A.1.2 Histogramas Múltiples

El fundamento de este método es obtener la máxima información posible de simulaciones realizadas a diferentes temperaturas. Así aumentamos enormemente el rango de validez de los histogramas unidimensionales.

Supongamos que hemos realizado  $R$  simulaciones a temperaturas  $1/\beta_i$  habiéndose obtenido sus correspondientes histogramas,  $\bar{N}_i(E)$ . A partir de estos datos podemos obtener una estimación de la densidad de estados mediante una combinación lineal de la densidad de estados calculada en cada una de las simulaciones,

$$W_{\text{est}}(E) = \sum_{i=1}^R p_i(E) \bar{N}_i(E) n_i^{-1} \exp(\beta_i E - f_i), \quad (\text{A.7})$$

donde los pesos  $p_i(E)$  están normalizados a 1,

$$\sum_{i=1}^R p_i(E) = 1. \quad (\text{A.8})$$

---

<sup>3</sup>La notación utilizada es la del capítulo dedicado a U(1)–Higgs.

Podemos elegir los pesos anteriores,  $p_i(E)$ , optimizando para cada cada valor de  $E$  independientemente, de tal forma que se minimice el error en la densidad de estados ya que conocemos que la estimación del error ( $\delta N$ ) de los  $R$  histogramas que está dada por

$$(\delta(N_i(E)))^2 = g_i \bar{N}_i(E) \sim g_i W(E) n_i \exp(-\beta_i + f_i). \quad (\text{A.9})$$

Donde  $g_i \equiv 1 + 2\tau_i$  y  $\tau_i$  es el tiempo de correlación integrado. Entonces tenemos:

$$\frac{(\delta(W_{\text{est}}(E)))^2}{W(E)} = \sum_{i=1}^R \frac{g_i}{n_i} \exp(\beta_i E - f_i) p_i^2(E). \quad (\text{A.10})$$

Minimizando la ecuación anterior sujeta a la ligadura (A.8) obtenemos

$$p_i = \frac{n_i g_i^{-1} \exp(-\beta_i + f_i)}{\sum_{j=1}^R g_j^{-1} n_j \exp(f_j - \beta_j E)}. \quad (\text{A.11})$$

Hay que reseñar que  $W(E)$  no depende de los pesos  $p_i$ , mientras que por definición  $W_{\text{est}}$  si que depende. Por lo tanto el resultado final para  $W(E)$  es

$$W_{\text{est}}(E) = \frac{\sum_{i=1}^R g_i^{-1} \bar{N}_i(E)}{\sum_{i=1}^R g_i^{-1} n_i \exp(f_i - \beta_i E)}. \quad (\text{A.12})$$

Las  $f_i$  son las energías libres a las temperaturas de las simulaciones, por lo tanto se debe de verificar la siguiente ecuación

$$\exp(-f_i) = \sum_E W(E) \exp(-\beta_i E). \quad (\text{A.13})$$

La solución de las dos últimas ecuaciones puede ser encontrada por medio de un esquema simple de iteración, aunque en algunos casos se pueden usar métodos de aceleración. Dado que las ecuaciones quedan invariantes si añadimos una constante a todas las  $f_i$  tendríamos sólo  $R - 1$  constantes independientes.

Calculando el error relativo obtenemos finalmente

$$\frac{\delta(W_{\text{est}}(E))}{W(E)} = \left( \sum_{i=1}^R g_i^{-1} \bar{N}_i(E) \right)^{-1/2}. \quad (\text{A.14})$$

De la ecuación anterior se puede deducir que la precisión del método aumenta siempre añadiendo datos, lo cual no es cierto en algunos métodos. Aunque su utilidad para nosotros ha sido bastante limitada.

## Apéndice B

# El Método del jackknife

Sean  $\{Q_i, i = 1, \dots, N\}$ <sup>1</sup> los valores que un observable  $Q$  toma en una evolución de Monte Carlo. Nuestra estimación del valor medio  $\langle Q \rangle$  (con estadística infinita) será como es usual:

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i. \quad (\text{B.1})$$

Podemos estimar el error de  $\bar{Q}$  mediante el método del jackknife como

$$\delta \bar{Q} = \sqrt{\frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (\bar{Q}_i - \bar{Q})^2}, \quad (\text{B.2})$$

donde

$$\bar{Q}_i = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} Q_j, \quad (\text{B.3})$$

es el promedio de los datos ignorando el dato  $i$ -ésimo.

El problema del método anterior es que asume que los  $N$  datos están descorrelacionados. Para considerar la correlación entre los sucesivos datos se introduce una pequeña modificación que permite tener en cuenta el efecto de la correlación en la estimación del error.

En primer lugar se divide el conjunto de  $N$  datos en  $K$  bloques que contengan  $n = N/K$  datos. Sea  $\bar{Q}_k^n$  ( $k = 1, \dots, K$ ) el promedio de los datos obtenido después de eliminar el bloque  $k$ -ésimo, es decir todos los datos  $j$

---

<sup>1</sup>Seguimos la presentación de la referencia [17].

tales que  $n(k-1) + 1 \leq j \leq nk$ ,

$$\bar{Q}_k^n = \frac{1}{N-n} \left( \sum_{i=1}^{n(k-1)} Q_i + \sum_{i=nk+1}^N Q_i \right). \quad (\text{B.4})$$

Tomaremos como estimación del error

$$\delta \bar{Q}_n = \sqrt{\frac{K-1}{K} \sum_{k=1}^K (\bar{Q}_k^n - \bar{Q})^2}. \quad (\text{B.5})$$

Podemos ver que la fórmula anterior nos da una estimación no sesgada del error, para ello tomaremos valores medios ( $\langle \dots \rangle$ ) en ambos miembros de la ecuación

$$\langle (\delta \bar{Q}_n)^2 \rangle = \frac{1}{N} (\langle Q_i^2 \rangle - \langle Q_i \rangle^2) \equiv \sigma^2(Q) \frac{1}{N}. \quad (\text{B.6})$$

Si el tamaño del bloque,  $n$ , es muy pequeño comparado con la longitud de correlación entre medidas, el estimador  $\delta \bar{Q}_n$  deberá crecer, *grosso modo*, en un factor  $\sqrt{2}$  cada vez que doblamos el tamaño del bloque. Este crecimiento de la estimación del error cesará cuando el tamaño del bloque sea mayor que la correlación entre las medidas. El valor de este *plateau* nos da una estimación del error teniendo en cuenta los efectos de la correlación. Esto puede verse de la siguiente manera. Sabemos que el error en una magnitud es inversamente proporcional a la raíz cuadrada del número de datos independientes (numero de datos dividido por la longitud de correlación). Si decimos que el número de datos independientes es 4 veces superior al real entonces el error que daremos será un factor  $\sqrt{2}$  veces el error que daríamos si dijéramos que el número de datos independientes es dos veces superior al real. Obviamente el número de bloques no puede ser excesivamente pequeño, 2 o 3, ya que entonces el error volverá a crecer un factor  $\sqrt{2}$  y no tendremos una buena estimación. Lo usual es escoger un valor del número de bloques alrededor de la decena.

Obviamente la longitud de correlación va a depender del tipo de observable. Estrictamente uno debería repetir el proceso anterior para cada uno de los observables medidos, aunque en la práctica se escoge un tamaño de bloque,  $n$ , en uno de los observables, por ejemplo la energía, y se asume su validez para los demás.

## Apéndice C

# Exponentes críticos y tamaño finito

### C.1 Exponentes críticos

Consideremos el Hamiltoniano de Ising en un volumen finito  $V$ <sup>1</sup>

$$\mathcal{H}_V = -J \sum_{\langle i,j \rangle \in V} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i \in V} \sigma_i, \quad (\text{C.1})$$

donde  $\sum_{\langle i,j \rangle}$  es la suma a pares de próximos vecinos. La función de partición para el volumen  $V$  será

$$\mathcal{Z}_V = \sum_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}_V}. \quad (\text{C.2})$$

Podemos definir la densidad de energía libre de Gibbs para este volumen  $V$

$$\Phi_V(\beta, h) = -\frac{1}{\beta V} \log \mathcal{Z}_V(\beta, h). \quad (\text{C.3})$$

Denotaremos por  $\Phi(\beta, h)$  el límite termodinámico de  $\Phi_V(\beta, h)$ . Puede probarse que  $\Phi(\beta, h)$  es independiente de las condiciones de contorno y que es una función cóncava de  $\beta$  y  $h$ .

Las cantidades termodinámicas pueden expresarse mediante derivadas de  $\Phi(\beta, h)$  respecto a  $\beta$  y/o  $h$

- Magnetización:  $M = -\frac{\partial \Phi}{\partial h}$ .

---

<sup>1</sup>Usaremos la notación y definiciones de la referencia [10].

- Susceptibilidad Magnética:  $\chi = \frac{\partial M}{\partial h}$ .
- Entropía:  $S = \beta^2 \frac{\partial \Phi}{\partial \beta}$ .
- Energía interna:  $U = \Phi + \frac{1}{\beta} S + hM$ .
- Calor específico:  $C_h = -\beta^3 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \beta^2}$ .

Formalmente las cantidades anteriores pueden calcularse mediante funciones de correlación:

$$M = \langle \sigma_0 \rangle, \quad (\text{C.4})$$

$$\chi = \sum_x \langle \sigma_0 \sigma_x \rangle, \quad (\text{C.5})$$

$$U = -J \sum_{\langle i,0 \rangle} \langle \sigma_0 \sigma_i \rangle, \quad (\text{C.6})$$

$$C_h = (\beta J)^2 \sum_{\langle 0,i \rangle, \langle x,j \rangle} \langle \sigma_0 \sigma_i; \sigma_x \sigma_{x+j} \rangle, \quad (\text{C.7})$$

donde  $\langle A; B \rangle \equiv \langle AB \rangle_c \equiv \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$ .

También podemos introducir algunas otras cantidades como la longitud de correlación

$$\xi \equiv \lim_{|x| \rightarrow \infty} \sup \frac{-|x|}{\log \langle \sigma_0; \sigma_x \rangle} \equiv m^{-1}, \quad (\text{C.8})$$

o la constante renormalizada a 4 puntos adimensional  $g$

$$g \equiv \frac{-\bar{u}_4}{\chi^2 \xi^d}, \quad (\text{C.9})$$

donde

$$\bar{u}_4 \equiv \sum_{x_1, x_2, x_3, x_4} u_4(x_1, x_2, x_3, x_4); \quad (\text{C.10})$$

$$u_4(x_1, x_2, x_3, x_4) \equiv \langle \sigma_{x_1} \sigma_{x_2} \sigma_{x_3} \sigma_{x_4} \rangle - \langle \sigma_{x_1} \sigma_{x_2} \rangle \langle \sigma_{x_3} \sigma_{x_4} \rangle - \langle \sigma_{x_1} \sigma_{x_3} \rangle \langle \sigma_{x_2} \sigma_{x_4} \rangle - \langle \sigma_{x_1} \sigma_{x_4} \rangle \langle \sigma_{x_2} \sigma_{x_3} \rangle. \quad (\text{C.11})$$

Esta cantidad tiene mucha importancia en el estudio de la trivialidad de una teoría.

Las cantidades termodinámicas anteriores tienen los siguientes comportamientos cerca del punto crítico ( $T = T_c, h = 0$ ):

$$M(T_c, h) \sim |h|^{1/\delta}, \quad (\text{C.12})$$

$$M_0(T) \equiv \lim_{h \rightarrow 0} M(T, h) \sim (-t)^\beta, \quad (\text{C.13})$$

$$\chi(T) \sim |t|^{-\gamma}, \quad (\text{C.14})$$

$$C_h \sim |t|^{-\alpha}, \quad (\text{C.15})$$

$$\xi(t) \sim |t|^{-\nu}, \quad (\text{C.16})$$

$$g \sim t^\rho \equiv t^{d\nu - 2\Delta_4 + \gamma}, \quad (\text{C.17})$$

$$\langle \sigma_x \sigma_y \rangle_{\beta=\beta_c, h=0} \sim |x - y|^{-(d-2+\eta)}, \quad |x - y| \rightarrow \infty, \quad (\text{C.18})$$

donde  $t \equiv T - T_c$ . La notación

$$f(x) \sim x^\lambda, \quad (\text{C.19})$$

implica que existen dos constantes  $f_+$  y  $f_-$  tales que

$$f_- x^\lambda \leq f(x) \leq f_+ x^\lambda, \quad (\text{C.20})$$

cuando  $x \rightarrow 0$ , o equivalentemente que

$$\lambda = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\log f(x)}{\log x}. \quad (\text{C.21})$$

Se puede demostrar que para sistemas de espines en  $d > 4$  obtendremos los exponentes de campo medio. En  $d = 4$  esperamos las leyes anteriores con los exponentes de campo medio pero con términos multiplicativos logarítmicos.

Recogemos a continuación en la siguiente tabla los exponentes críticos en diversos modelos, análoga a la presentada en el Capítulo 2 para el modelo de Potts [18]

Modelo	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\nu$
Ising ( $d = 2$ )	0(Log)	1/8	7/4	1
Ising ( $d = 3$ )	0.105(10)	0.312(5)	1.2385(25)	0.6305(15)
Campo Medio	0(Disc)	1/2	1	1/2
$\lambda\phi_d^4, d > 4$	2-d/2	1/2	1	1/2
XY ( $d = 3$ )	0.00(2)	0.3485(35)	1.33(2)	0.672(7)
Agua, líquido-vapor	0.108(7)	0.322(5)	1.24(1)	0.625(6)

## C.2 Relaciones de escala

Vamos a exponer brevemente las relaciones de escala y su deducción haciendo hincapié en las hipótesis que usamos en la deducción de cada relación. Seguiremos la referencia [33].

Consideremos un campo escalar y midamos las longitudes en términos del espaciado de la red,  $a$ .

Definamos la función de correlación a dos puntos

$$G(\mathbf{x}) = \langle \phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{0}) \rangle. \quad (\text{C.22})$$

Ignorando anisotropías esta función de correlación satisface <sup>2</sup>

$$\frac{G(r_2)}{G(r_1)} = \gamma\left(\frac{r_2}{r_1}, \frac{r_1}{a}\right), \quad (\text{C.23})$$

con  $r \equiv |\mathbf{x}|$ . Si nos acercamos al punto crítico tenemos que  $\xi$  aumenta. Esto hecho lo podemos reinterpretar diciendo que  $a$  disminuye. Por lo tanto la teoría se hace crítica en el límite  $a \rightarrow 0$  y la fórmula anterior se simplifica

$$\frac{G(r_2)}{G(r_1)} = \gamma\left(\frac{r_2}{r_1}\right) \quad r_1, r_2 \gg a. \quad (\text{C.24})$$

La ley de grupo

$$\frac{G(r_3)}{G(r_1)} = \frac{G(r_3)}{G(r_2)} \frac{G(r_2)}{G(r_1)}, \quad (\text{C.25})$$

implica que la función  $\gamma$  es una función homogénea que satisface  $\gamma(1) = 1$ . Por lo tanto se obtiene

$$G(r_2) = G(r_1) \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{d-2+\eta} \quad \text{si } \theta = 0, \quad (\text{C.26})$$

donde  $\theta \equiv (T/T_c - 1)$ , y hemos usado la definición usual de la dimensión anómala  $\eta$ .

En la fase desordenada ( $\theta > 0$ ), muy cerca del punto crítico, podemos distinguir tres dominios de distancias. El primer dominio está definido por  $a \ll r \ll \xi$  y a todos los efectos podemos trabajar como si la longitud de correlación fuera infinita. La segunda región verifica que  $r \sim \xi \gg a$  y comienzan a aparecer desviaciones fuertes del anterior comportamiento. Finalmente cuando  $r \gg \xi \gg a$  la correlación entre espines se anula exponencialmente.

---

<sup>2</sup>Ya que es adimensional sólo puede ser función de cantidades adimensionales.

La discusión anterior puede ser recogida en la siguiente fórmula

$$G(r, \theta) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} g\left(\frac{r}{\xi(\theta)}\right), \quad (\text{C.27})$$

donde  $g$  es una función regular en el origen, excepto correcciones logarítmicas en los casos marginales, mientras que decrece exponencialmente cuando su argumento es grande.

Para calcular la primera relación de escala asumiremos lo que se conoce como hipótesis de escala: la única longitud relevante en el estudio del sistema es la longitud de correlación  $\xi$ .

La susceptibilidad es proporcional a la integral de la función a dos puntos <sup>3</sup>

$$\chi(\theta) = \int_{|\mathbf{x}| < \xi(\theta)} d^d \mathbf{x} \frac{1}{|\mathbf{x}|^{d-2+\eta}} \sim \theta^{2-\eta}. \quad (\text{C.29})$$

Como  $\chi \sim \theta^{-\gamma}$  y  $\xi \sim \theta^{-\nu}$  obtenemos la primera relación de escala

$$\gamma = \nu(2 - \eta). \quad (\text{C.30})$$

Nótese que sólo hemos usado la hipótesis de escala <sup>4</sup>. Para deducir una relación de escala para el exponente del calor específico tenemos que asumir la hipótesis de hiperescala (*hyperscaling*) que consiste en suponer que las fluctuaciones contribuyen a la parte singular de la densidad de energía libre como

$$f_{\text{sing}} \sim \frac{1}{\xi(\theta)^d} \sim \theta^{\nu d}. \quad (\text{C.31})$$

Como el calor específico es la derivada segunda de la densidad de energía libre, obtenemos

$$C(\theta) \sim \theta^{-(2-\nu d)}, \quad (\text{C.32})$$

por lo que

$$\alpha = 2 - \nu d. \quad (\text{C.33})$$

---

<sup>3</sup>O en su versión discreta:

$$\chi = \sum_j \langle \phi_i \phi_0 \rangle. \quad (\text{C.28})$$

<sup>4</sup>La hipótesis de escala está tanto en los límites de integración como en la forma de la función a dos puntos,  $\propto g(r/\xi)$

Remarcamos que para obtener esta relación se ha hecho uso tanto de la hipótesis de escala como la de hiperescala<sup>5 6</sup>.

Análogamente se pueden deducir las relaciones correspondientes a los exponentes  $\beta$  y  $\delta$ , usando la hipótesis de escala, obteniéndose<sup>7</sup>

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \quad (\text{C.37})$$

$$\gamma = 2\beta\delta + \alpha - 2, \quad (\text{C.38})$$

que se convierten en

$$\delta = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta}, \quad (\text{C.39})$$

$$\beta = \frac{1}{2}\nu(d - 2 + \eta), \quad (\text{C.40})$$

si se asume la relación de hiperescala.

Las relaciones anteriores también pueden ser deducidas mediante técnicas del Grupo de Renormalización.

## C.3 Tamaño finito

### C.3.1 Transiciones de fase de segundo orden

Como es bien sabido es imposible obtener magnitudes divergentes en el retículo, todas las sumas son finitas, y por lo tanto todas las magnitudes que vamos a obtener serán funciones analíticas de los parámetros de la teoría (sumas de funciones analíticas). No obstante observando como crecen o disminuyen los observables en función del tamaño del sistema es posible

---

<sup>5</sup>Podemos justificar de forma intuitiva la hipótesis de hiperescala. Supongamos que la densidad de energía libre tenga un comportamiento singular del tipo  $\theta^{2-\alpha}$ . En la fase desordenada ( $\theta > 0$ ) tenemos una longitud de correlación  $\xi$  y esto produce una fluctuación en la energía libre extensiva de  $\Delta F \sim \theta^{2-\alpha}l^d$ , donde  $l$  es el alcance de la fluctuación. La probabilidad de que esta fluctuación ocurra es proporcional a  $e^{-\Delta F}$ , que será despreciable cuando  $\Delta F \sim 1$ , lo que implica que  $l_{\max} \sim \xi \sim \theta^{-(2-\alpha)/d}$ .

<sup>6</sup>Obviamente esta relación se viola en la teoría de campo medio donde  $\alpha = 0$  y  $\nu = 1/2$  independientemente de  $d$ . Esto es debido a que el campo medio elimina las fluctuaciones.

<sup>7</sup>Se asume en la derivación que se verifica la siguiente ecuación de estado

$$H = M^\delta f_H(\theta M^{-1/\beta}), \quad (\text{C.34})$$

que satisface

$$M(\theta) \sim (-\theta)^\beta \text{ si } \theta \rightarrow 0^-, \quad (\text{C.35})$$

y

$$M(H, \theta = 0) \sim H^{1/\delta} \text{ si } H \rightarrow 0, \quad (\text{C.36})$$

que por otra parte es la definición de los exponentes críticos  $\delta$  y  $\beta$ .

extraer información sobre parámetros que gobiernan las divergencias en el límite termodinámico<sup>8</sup>.

Para ello asumimos que nuestro sistema es un retículo de volumen  $L^d$  y lado  $L$ , que presenta una transición de fase continua (de segundo orden o superior) en  $T_c \equiv T_c(\infty)$ . Según nos vamos acercando a  $T_c$  la longitud de correlación del sistema va creciendo hasta que satura el tamaño del sistema  $L$  y empiezan a aparecer los efectos de tamaño finito. Diremos que hemos alcanzado la temperatura crítica aparente, que denotaremos por  $T_c(L)$  cuando  $L \sim \xi$ . Asumiendo la anterior definición es fácil deducir cómo escala  $T_c(L)$  con  $L$  ya que

$$\xi(T_c(L)) \propto L \sim (T_c(L) - T_c)^{-\nu}, \quad (\text{C.41})$$

y

$$T_c(L) - T_c \sim L^{-\frac{1}{\nu}}. \quad (\text{C.42})$$

Uno espera, que en la región de temperaturas donde la longitud de correlación es del orden del tamaño del sistema, la dinámica esté gobernada por sólo una variable  $L/\xi \sim Lt_L^\nu$  donde  $t_L$  es la temperatura reducida definida por

$$t_L \equiv (T - T_c(L))/T_c(L). \quad (\text{C.43})$$

Esto implica un comportamiento, para un observable genérico de los definidos en la sección anterior, del tipo

$$\mathcal{O}_L \sim L^\omega f(Lt_L^\nu), \quad (\text{C.44})$$

donde  $f$  es una función “universal” en el sentido que es independiente de  $L$  pero dependiente del observable  $\mathcal{O}$ . Cuando  $L \rightarrow \infty$  debemos recuperar el comportamiento descrito en la sección anterior que para  $\mathcal{O}$  escribiremos como

$$\mathcal{O}(t) \sim t^\omega \quad (\text{C.45})$$

cuando  $t \rightarrow 0$ . Esto nos impone una condición sobre la función de escala  $f(x)$

$$f(x) \sim x^{\omega/\nu}, \quad x \rightarrow \infty, \quad (\text{C.46})$$

y otra condición sobre  $\omega$

$$\omega = -\frac{\sigma}{\nu}. \quad (\text{C.47})$$

Por lo que

$$\mathcal{O}_L(t) \sim L^{-\frac{\sigma}{\nu}} f(Lt^\nu). \quad (\text{C.48})$$

---

<sup>8</sup>En esta sección seguimos la referencia [33].

Si particularizamos en el punto crítico aparente tendremos el valor máximo o mínimo de  $\mathcal{O}_L$  (dependiendo que  $\nu$  sea positivo o negativo respectivamente)

$$\mathcal{O}_L^{\max} \sim L^{-\frac{\nu}{\nu-1}}. \quad (\text{C.49})$$

Hay que modificar ligeramente el esquema anterior para tener en cuenta las divergencias de tipo logarítmico

$$\mathcal{O} \sim \log t. \quad (\text{C.50})$$

Ahora escribiremos

$$\mathcal{O}_L(t) \sim L^\omega (f(Lt^\nu) - f(Lt_0^\nu)) + \mathcal{O}_L(t_0). \quad (\text{C.51})$$

Donde  $t_0$  es una temperatura reducida arbitraria diferente de cero.

Para encontrar (C.50) tendremos que exigir que

$$\omega = 0 \quad (\text{C.52})$$

y que

$$f(x) \sim \log x, \quad x \rightarrow \infty. \quad (\text{C.53})$$

### C.3.2 Transiciones de fase de primer orden

El comportamiento de la densidad de energía cerca de una transición de primer orden como función del tamaño del retículo puede ser descrita como sigue. Sea  $P_L(E)$  la distribución de probabilidad de la energía. Lejos del punto de transición tenemos<sup>9</sup>

$$P_L = N e^{-\beta E L^d + S_L L^d}, \quad (\text{C.54})$$

donde tanto  $E$  como  $S_L$  son magnitudes intensivas y  $N$  es el factor de normalización.

Cuando  $L \gg \xi$  la dependencia de la entropía con el volumen es muy débil ( $\sim \exp -(\text{Cte}L/\xi)$ ) [14] y uno puede desarrollar el exponente alrededor del máximo

$$-\beta E + S_L = -\beta F_L(\beta) - \frac{(E - \bar{E}_L(\beta))^2 \beta^2}{2C_L(\beta)}, \quad (\text{C.55})$$

donde  $F_L(\beta)$  está definida por

$$F_L(\beta) = \bar{E}_L(\beta) - S_L(\bar{E}_L(\beta))/\beta \quad (\text{C.56})$$

<sup>9</sup>Seguimos en la exposición la referencia [16].

y  $\bar{E}_L(\beta)$ , que denominaremos energía interna a la temperatura  $\beta^{-1}$ , es solución de la ecuación

$$\left. \frac{dS}{dE} \right|_{\bar{E}_L(\beta)} = \beta. \quad (\text{C.57})$$

$C_L \equiv dE/dT$  es el calor específico.

Esto demuestra que la distribución de la energía interna es gaussiana en el límite de gran volumen

$$P_L \sim \exp \left[ -\frac{L^d \beta^2 (E - \bar{E}_L(\beta))^2}{2C_L} \right]. \quad (\text{C.58})$$

En un entorno de la transición de primer orden la ecuación (C.57) tiene dos soluciones (en volumen finito  $S(E)$  no tiene porque ser convexa) y  $P_L(E)$  es la suma de dos gaussianas, en general  $N$  gaussianas en el caso de que tengamos  $N$  fases coexistentes.

Si el tamaño del retículo es grande, podemos despreciar la dependencia con  $L$  de la energía interna y del calor específico. Si expandimos  $\bar{E}(\beta)$  en  $\beta_c$ , obtenemos

$$P_L = A \left( \frac{a_o}{\sqrt{C_o}} \exp -\frac{L^d \beta^2 (E - E_o - C_o \delta T)^2}{2C_o} + \frac{a_d}{\sqrt{C_d}} \exp -\frac{L^d \beta^2 (E - E_d - C_d \delta T)^2}{2C_d} \right), \quad (\text{C.59})$$

donde  $E_d$  y  $C_d$  (respectivamente  $E_o$  y  $C_o$ ) son la energía y el calor específico en el límite termodinámico de la fase desordenada (respectivamente ordenada) en  $\beta = \beta_c$ ,  $\delta T \equiv (\beta_c - \beta)/\beta^2$  y  $A$  es un factor de normalización. Los coeficientes  $a_o$  y  $a_d$  dan el peso total de cada componente y están dados por

$$a_o \equiv qe^{-\Delta} \quad a_d \equiv e^{-\Delta}, \quad (\text{C.60})$$

con

$$\Delta = \frac{L^d}{2} \beta (F_o(\beta) - F_d(\beta)) \sim \frac{L^d}{2} (\beta - \beta_c) \left( E_o - E_d + \frac{1}{2} (C_o - C_d) \delta T \right), \quad (\text{C.61})$$

donde hemos supuesto la existencia de  $q$  fases ordenadas.

Si no estamos en la transición sólo una de las dos gaussianas sobrevive dando lugar a una delta de Dirac. Pero si estamos en la transición,  $F_o(\beta) = F_d(\beta)$ , y contribuyen los dos picos.

Calculando la correlación conexas de la energía obtendremos el calor específico que tendrá un máximo en  $\beta_{\max}^C$  con valor  $C_L^{\max}$  dado por

$$\beta_{\max}^C = \beta_c - \frac{\log q}{E_d - E_o} \frac{1}{L^d} + O(L^{-2d}) \quad (\text{C.62})$$

que diverge como el inverso del volumen y

$$C_{\max} = L^d \frac{\beta_c^2}{4} (E_o - E_d)^2 + O(1) \quad (\text{C.63})$$

que diverge con el volumen.

Se puede ver que se aplican las mismas ecuaciones de la sección anterior aunque asignando a los exponentes críticos los siguientes valores:

$$“\nu” = \frac{1}{d}, “\alpha” = 1, “\gamma” = 1 \quad (\text{C.64})$$

En la práctica cuando se estudia el comportamiento de tamaño finito de una transición, la aparición de los exponentes anteriores (ecuación (C.64)) nos indica inequívocamente que la transición es de primer orden.

Para finalizar es interesante reseñar que dentro de esta aproximación podríamos haber introducido más términos en la expansión del punto silla, lo que modificaría los momentos de la energía. Además podríamos incluir los efectos debidos a las configuraciones mezcla. Ya hemos visto que la energía libre extensiva de un estado mezcla es la suma de las energías libres de sus componentes, que son proporcionales a  $L^d$  y la contribución debida a la interfase, la cual es proporcional a  $L^{d-1}$ . La contribución de la interfase dominará la distribución de probabilidad para  $E_o < E < E_d$  ya que para grandes retículos la contribución de los estados puros irá como  $\exp(-f(E)L^d)$ .

## Apéndice D

# Programación paralela en C

### D.1 Introducción

En este apéndice pretendemos describir algunos fundamentos de programación paralela ilustrándolo con ejemplos escritos en C, usando las extensiones paralelas del C de INMOS [65]. Aprovecharemos la realización de dos ejemplos para ir describiendo las rutinas más importantes que se usan en la programación de los transputers en C.

### D.2 Dos ejemplos

Vamos a escribir dos programas que simplemente pasan unos caracteres de un proceso a otro. En el primer ejemplo los dos procesos están en el mismo procesador, mientras que en el segundo ejemplo están en dos procesadores diferentes. Un programa realista, como se describió en el capítulo 8 auna características de ambos ejemplos <sup>1</sup>.

#### D.2.1 Dos procesos en un mismo procesador

Supongamos el sistemas de procesos que se representa en la figura D.1.

Tenemos dos procesos: el master y el worker. Se comunican entre ellos usando canales, que son ToWorker y FromWorker. El proceso host se comunica con el host usando los canales FromHost y ToHost. Por ahora estos

---

<sup>1</sup>Ambos ejemplos están motivados en la referencia [91].

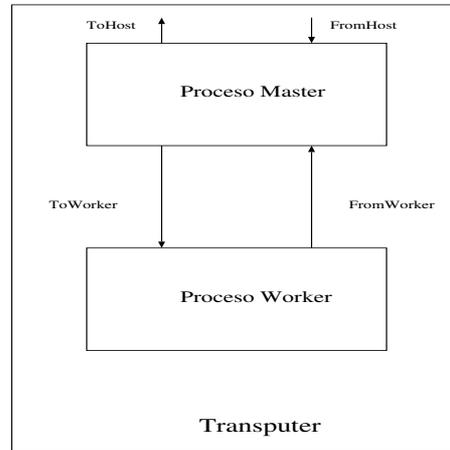


Figura D.1: Dos procesos en un mismo procesador.

canales son canales lógicos que en principio hay que asignar a links físicos, pero esto en este ejemplo no será necesario, aunque sí en el siguiente.

El código es el siguiente <sup>2</sup> :

```

/* Dos headers de C estándar */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
/*Dos headers de C paralelo */
#include <channel.h>
#include <process.h>

/* Definiremos los procesos worker y master
como funciones externas */

/* En C todos los programas son funciones */

extern void
  Master( Process *p,Channel *ToWork, Channel *FromWork);
extern void
  Worker( Process *p,Channel *FromMast, Channel *ToMast);

/* Comienza el programa */

```

<sup>2</sup>Otra posibilidad, que hemos utilizado en algunos programas, es identificar main y MasterPtr y lanzar dentro de MasterPtr el proceso WorkerPtr con la rutina ProcRun.

```
int main(void)
{
/* Declaramos los procesos que vamos a usar */
    Process *WorkerPtr, *MasterPtr;

/* Declaramos los canales */
    Channel *ToWorker, *FromWorker;

/* Inicializamos y asignamos memoria a los canales internos*/
    if ( (ToWorker=ChanAlloc() )==NULL)
    {
        printf(" No se ha podido alojar
                en memoria el canal ToWorker \n");
        exit( EXIT_FAILURE);
    }
/* Si ChanAlloc falla retorna el puntero nulo, NULL */
    if (( FromWorker=ChanAlloc() )==NULL)
    {
        printf(" No se ha podido alojar
                en memoria el canal FromWorker \n");
        exit( EXIT_FAILURE);
    }

/* Iniciamos y asignamos memoria a los procesos */
    if ( ( WorkerPtr =
        ProcAlloc(Worker,0,2,ToWorker,FromWorker) )==NULL)
    {
        printf(" No se ha podido alojar
                en memoria el proceso Worker \n");
        exit( EXIT_FAILURE);
    }
/* El primer argumento de ProcAlloc es el nombre del proceso,
0 es el workspace por defecto (4 KBytes), 2 es el número
de argumentos de Worker sin contar Process *p, ToWorker es
el primer argumento, que debe de ser un canal y FromWorker
es el segundo argumento que también será un canal.*/

    if ( (MasterPtr=
        ProcAlloc(Master,0,2,ToWorker,FromWorker))==NULL)
    {
        printf(" No se ha podido alojar
                en memoria el proceso Master \n");
    }
}
```

```
        exit(EXIT_FAILURE);
    }

    /* Lanzamos los dos procesos que tenemos:
    WorkerPtr y MasterPtr en paralelo. */

    ProcPar(MasterPtr,WorkerPtr,NULL);

    /* El ProcPar finalizará cuando los
    dos procesos hayan finalizado. */

    /* Realmente hemos tenido tres programas corriendo:
    main(), MasterPtr y WorkerPtr. */
    printf("Fin del programa.\n");
}

/* Declaramos la función master
Pasará un carácter a worker
y éste le contestará con otro. */

void Master( Process *p,Channel *ToWork, Channel *FromWork)
{
    char c;

    /* Previene un warning del compilador
    por no haber usado p, aunque no genera código */
    p=p;

    /* Manda el master un carácter a worker
    Mandamos el carácter 'a' por el canal ToWorker */
    ChanOutChar(ToWork,'a');

    /* Recibe un carácter de worker
    Recibimos un carácter por el canal FromWorker */
    c = ChanInChar(FromWork);
}

/* Declaramos la función worker
Recibirá un carácter de master
y le contestará con otro. */

void Worker( Process *p,Channel *FromMast, Channel *ToMast)
```

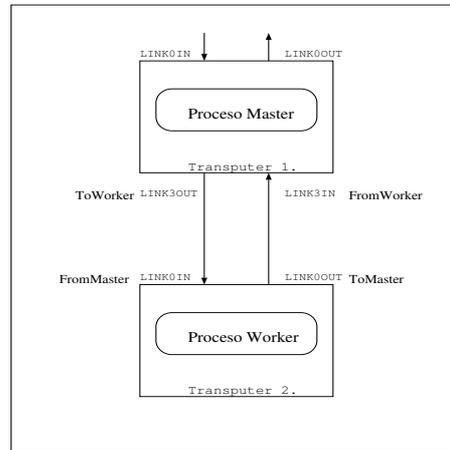


Figura D.2: Dos procesos en dos procesadores.

```

{
    char c;
    /* Previene un warning del compilador
    por no haber usado p!!! */
    p=p;

    /* Recibe de master un carácter*/
    c = ChanInChar(FromMast);

    /* Manda un carácter a master */
    ChanOutChar(ToMast, 'b');
}

```

### D.2.2 Dos procesos en dos procesadores

En este caso la situación está esquematizada en la figura D.2. Ahora sí que hay que asignar a los canales lógicos que hemos definido los canales físicos de los transputers. Esto lo haremos en el fichero de configuración.

Tendremos por lo tanto dos programas que correrán en dos procesadores diferentes, el master.c y el worker.c. De nuevo, para simplificar al máximo, la única labor de estos dos programas será pasarse mutuamente un carácter y recibirlo.

Comenzamos con el programa master.c

```

/* Dos headers de C estándar */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
/*Dos headers de C paralelo */
#include <channel.h>
#include <process.h>
#include <misc.h>
int main(void)
{
    char c;
    /* Declaramos los canales */
    Channel *FromWorker, *ToWorker;

    /* Definimos los canales de configuración externos,
    que identificaremos con links en el fichero conf.cfs */

    FromWorker = (Channel *) get_param(3);
    ToWorker   = (Channel *) get_param(4);
    /* La función del get_param quedará clara en el
    fichero de configuración*/

    ChanOutChar(ToWorker, 'a');
    c = ChanInChar(FromWorker);
    printf("Fin del programa\n");
    exit_terminate(0);
}

```

Y el programa worker.c sería

```

/* Dos headers de C estándar */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
/*Dos headers de C paralelo */
#include <channel.h>
#include <process.h>
#include <misc.h>

int main(void)
{
    char c;
    /* Declaramos los canales */

```

```

Channel *FromMaster, *ToMaster;

/* Definimos los canales de configuración externos,
que identificaremos con links en el fichero conf.cfs */

FromMaster = (Channel *) get_param(1);
ToMaster = (Channel *) get_param(2);
/* La función del get_param quedará clara
en el fichero de configuración*/

c = ChanInChar(FromMaster);
ChanOutChar(ToMaster, 'b');
exit_terminate(0);
}

```

Ahora describiremos el fichero de configuración conf.cfs.

```

/* Declaramos el hardware de que disponemos,
en nuestro caso dos T800 con 1M de memoria */

T800 (memory = 1M) root;
T800 (memory = 1M) slave;

/* Declaramos como están unidos, el link 0 del root
con el host y el link 3 del root con el link 0 del slave */

connect root.link[0], host;
connect root.link[2], slave.link[0];

/* Describimos nuestros procesos */

process (stacksize=1K, heapsize=50k,
        interface( input fs, output ts,
        input FromWorker, output ToWorker) )Master;

/* ts, fs son los canales que van al host */

/* fs es get_param(1) en master.c,
ts es get_param(2),
From_Worker es get_param(3) ...*/

```

```
process (stacksize=1K, heapsize=50k,
        interface( input FromMaster,
                   output ToMaster) )Worker;

/* FromMaster es get_param(1) en Worker.c ... */
/* Definimos las conexiones lógicas de los parámetros */

input from_host;
output to_host;

connect Master.fs, from_host;
connect Master.ts, to_host;
connect Master.ToWorker, Worker.FromMaster;
connect Master.FromWorker, Worker.ToMaster;

/* Asignamos los programas compilados (.lku)
a los procesos */

use "master.lku" for Master;
use "worker.lku" for Worker;

/* Asignamos los procesos y los canales lógicos
en los transputers y en los links respectivamente */

place Master on root;
place Worker on slave;

place from_host on host;
place to_host on host;

place Master.fs on root.link[0];
place Master.ts on root.link[0];

place Master.ToWorker on root.link[2];
place Master.FromWorker on root.link[2];

place Worker.ToMaster on slave.link[0];
place Worker.FromMaster on slave.link[0];
```

# Bibliografía

- [1] K. Wilson. *The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys. **47** (1975)772–840.
- [2] M. P. Lombardo. *Lattice simulation of QCD deconfining transition. Proc. of Workshop on Monte Carlo Methods in theoretical physics*. EIPC Isola d’Elba. Italy.
- [3] M. Mezard, G. Parisi y M. A. Virasoro. *Spin glass theory and beyond*. World Scientific Lecture Notes in Physics. Vol.9 (1987).
- [4] G.Parisi. *The order parameter for spin-glasses: a function on the interval 0–1*. J. Phys. A.**13** (1980)1101–1112.
- [5] G.Parisi. *Magnetic properties of spin-glasses in a new mean field theory*. J. Phys. A **13** (1980) 1887–1895.
- [6] Colaboración APE. *The APE with small jump. Capri Symposium on Lattice Theories*. September 1989.
- [7] M. Bernaschi, M. Guanelli, E. Marinari y S. Patarnello *A finite size scaling study of the diamond 3d 3q Potts model*. Nucl. Phys. **B360** (1991) 283–296.
- [8] L. A. Fernández, M. P. Lombardo, J. J. Ruiz–Lorenzo y A. Tarancón. *Weak first order transition. The two dimensional Potts model*. Phys. Lett. **B 277** (1992) 485–490.
- [9] P. G. De Gennes. *The physics of the liquid crystals*. Oxford (1975).
- [10] R. Fernández, J. Frölich y A. Sokal. *Random walks, critical phenomena and triviality in quantum field theory*. Springer–Verlag (1992).
- [11] U. M. Heller y N. Seiberg *Method for numerical simulations of metastable states*. Phys. Rev **D 27** (1983)2980–2989.

- [12] F. Y. Wu. *The Potts model*. Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 235.
- [13] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic Press. New York (1992).
- [14] G. Parisi. *Statistical field theory*. Addison Wesley (1988).
- [15] G. Parisi y F. Rapuano. *Effects of the random number generation on computer simulations*. Phys. Lett. **B 157** (1985) 301–302.
- [16] A. Billoire. *A Monte Carlo study of the Potts model in two and three dimensions*. Procc. of Workshop on Monte Carlo Methods in theoretical physics. EIPC Isola d'Elba. Italy.
- [17] M. Fukugita, M. Okawa y A. Ukawa. *Finite-size scaling study of the deconfining phase transition in pure  $SU(3)$  lattice gauge theory*. Nucl. Phys. **B337** (1990) 181–232.
- [18] J. Zinn–Justin. *Quantum field theory and critical phenomena*. Oxford Science Publications (1990).
- [19] M. Fukugita, M. Okawa y A. Ukawa. *Order of the deconfining phase transition of the pure  $SU(3)$  gauge pure theory*. Nucl. Phys. (Procc. Suppl) **B16** (1990) 562–566.
- [20] M. Lusher. *Volume dependence of the energy spectrum in massive quantum field theories*. Commun. Math. Phys. **104**, 177–206 (1986).
- [21] M. Le Bellac. *Quantum and statistical field theory*. Oxford Science Publications. (1991).
- [22] D. J. E. Callaway. *Triviality pursuit*. Phys. Rep. **165** (1988)5.
- [23] D. J. E. Callaway y R. Petronzio. *Can elementary scalar particles exists?* Nucl. Phys. **B 267** (1986)253.
- [24] D. J. E. Callaway y R. Petronzio. *Determination of critical points and flow diagrams by Monte Carlo groups methods*. Phys. Lett. **B 139** (1984)189.
- [25] D. J. E. Callaway y R. Petronzio. *Monte Carlo renormalization group trajectories in lattice gauge theories*. Phys. Lett. **B 145** (1984)381.
- [26] D. J. E. Callaway y R. Petronzio. *Is the standard model Higgs mass predictable?* Nucl. Phys. **B 292** (1987)497.

- [27] D. J. E. Callaway y R. Petronzio. *Monte Carlo renormalization group study of the abelian Higgs model*. Nucl. Phys. **B 280** (1987)481–486.
- [28] M. Aizenman. *Proof of the triviality of  $\phi_d^4$  field theory and some mean field features of Ising models for  $d > 4$* . Phys. Rev. Lett **47** (1981)1.
- [29] K. Jansen , J. Jersak, C. B. Lang, T. Neuhaus y G. Vones. *Phase structure of scalar compact QED*. Nucl. Phys. **B 265** (1986)187.
- [30] Colaboración R. T. N. *The Confining-Higgs phase transition in  $U(1)$ -Higgs LGT*. Phys. Lett. **B 296** 154–158 (1992).
- [31] Colaboración R. T. N. *The  $U(1)$  Higgs Model: study of the confining-Higgs Transition*. Nucl. Phys **B 30** (Procc. Supp.) (1992)701–704.
- [32] Colaboración R. T. N. *The  $U(1)$  Higgs Model: Critical Behaviour in the Confining–Higgs region*. Nucl. Phys **B 405** (1993)574–592.
- [33] C. Itzykson y J. M. Drouffe. *Statistical field theory*. Vol. 1. Cambridge University Press (1989).
- [34] M. Abramowitz y I. Stegun (ed). *Handbook of mathematical functions*. Dover (1970).
- [35] L. Landau. *Física Estadística*. Reverté. (1969).
- [36] J. Frölich, B. Simon y T. Spencer. *Infrared bounds, phase transitions and continuous symmetry breaking*. Commun. Math. Phys. **50** (1976)79–85.
- [37] L. A. Fernández, A. Muñoz–Sudupe, R. Petronzio y A. Tarancón. *Finite size renormalization group study of  $U(1)$  gauge theory*. Phys. Lett. **B 267** (1991)100.
- [38] R. E. Shrock. *The phase structure of  $SU(2) \times U(1)_Y$  lattice gauge theory*. Nucl. Phys. **B 267** (1986)301.
- [39] S. K. Ma. *Modern Theory of critical phenomena*. Benjamin 1976.
- [40] E. Fradkin y S. H. Shenker. *Phase diagram of lattice gauge theories with Higgs fields*. Phys. Rev **D 19** (1979)3682.
- [41] M. Creutz, L. Jacobs y C. Rebbi. *Experiments with a gauge invariant Ising system*. Phys. Rev. Lett **42** (1979)1390.
- [42] M. Baig, H. Fort, J. B. Kogut, S. Kim y D. K. Sinclair. *On the logarithmic triviality of scalar quantum electrodynamics*. Preprint hep-lat #9305008.

- [43] B. Freedman, P. Smolensky y D. Weingarten. *Monte carlo evaluation of the continuum limit of  $\phi_4^4$  y  $\phi_3^4$* . Phys. Lett. **B 113** (1987)25.
- [44] R. Balian, J. M. Drouffe y C. Itzykson. *Gauge fields on a lattice: II. Gauge invariant Ising model*. Phys. Rev. **D 11** (1975)2098.
- [45] S. Elitzur, R. B. Pearson y J. Shigemitsu. *Phase structure of discrete abelian spin and gauge system*. Phys. Rev **D 19** (1979)3715.
- [46] D. Horn, M. Weinstein y S. Yankielowicz. *Hamiltonian approach to  $Z(N)$  lattice gauge theories*. Phys. Rev **D 19** (1979)3715.
- [47] M. Creutz, L. Jacobs y C. Rebbi. *Monte Carlo study of abelian lattice gauge theories*. Phys. Rev **D 20** (1979)1915.
- [48] A. Ukawa, P. Windey y A. H. Gurth. *Dual variables for lattice gauge theories and the phase structure  $Z(N)$  system*. Phys. Rev **D 21** (1980)1013.
- [49] P. H. Damgaard y U. M. Heller. *Vortices and phase structure of the multiply charged  $U(1)$ -Higgs model*. Nucl. Phys. **B324** (1989)532.
- [50] A. Tarancón. *Monte Carlo study of the multicharged  $U(1)$ -Higgs model with radial degree of freedom*. Phys. Rev **D 36** (1987)3211.
- [51] J. Ranft, J. Kriofanz y G. Ranft. *Phase structure, magnetic monopoles and vortices in lattice abelian Higgs model*. Phys. Rev. **D28** (1983)360.
- [52] C. P. Korthals-Altes. *Duality for  $Z(N)$  gauge theories*. Nucl. Phys. **B 144** (1978)315.
- [53] T. Yoneya.  *$Z(N)$  topological excitations in Yang-Mills theories: duality and confinement*. Nucl. Phys. **B 144**(1978)195.
- [54] L.A.Fernández, A. Muñoz Sudupe, J.J. Ruiz-Lorenzo y A.Tarancón. *The Coulomb-Higgs phase transition in  $Z(8)$  and  $q = 10$   $U(1)$ -Higgs models*. Phys. Lett. **B 312** (1993) 305–309.
- [55] Colaboración RTN. *Manual de RTN*. (Nota Interna). 1991.
- [56] J. C. Ciria. *Aplicación de métodos numéricos al estudio de cuestiones de Mecánica Estadística*. Tesis Doctoral. Universidad de Zaragoza. 1993.
- [57] Colaboración RTN. *Experience on RTN, Proceedings of the International Conference on Computing in High Energy Physics*. Annecy 1992.

- [58] *The Transputer Data Book*. Inmos, 1989.
- [59] M. García Pérez y la Colaboración RTN. *Instanton like contributions to the dynamics of Yang–Mills fields on the twisted torus*. Phys. Lett. **B 305** (1993)366–374.
- [60] D. Badoni, J. C. Ciria, G. Parisi, J. Pech, F. Ritort y J. J. Ruiz Lorenzo. *Numerical Evidence of a critical line in the 4d Ising spin glass*. Europhys. Lett. **21** (1993)495.
- [61] J. C. Ciria, G. Parisi, F. Ritort y J. J. Ruiz–Lorenzo. *The de Almeida–Thouless line in the four dimensional Ising spin glass*. J. de Phys (France). En prensa.
- [62] J. Casahorrán, J. C. Ciria, J. García Esteve y A. Tarancón. *The vacuum structure in scalar bidimensional models with  $\phi^4$  and  $\phi^6$  self-interactions. A lattice study*. Phys. Lett. **B 303** (1993)99–102.
- [63] J. C. Ciria y A. Tarancón. *Renormalization group study of the soliton mass on the  $\lambda\phi_{1+1}^4$  lattice model*. Preprint DFTUZ 93/04.
- [64] J. B. Gómez, D. Iñiguez y A. F. Pacheco. *Solvable fracture model with local load transfer*. Phys. Rev. Lett. (1993) 71(3) 380(4).
- [65] Inmos. *IMS ANSI C toolset user manual*. Inmos (1990).
- [66] G. Parisi. *Spin glasses, complexity and all that*. Physica **A 194** Nos. 1–4. Procc. of the 18th International Conference on Statistical Physics.
- [67] D. Chowdhury. *Spin glass and other frustrated system*. World Scientific (1986).
- [68] D. J. Gross y M. Mezard. *The simplest spin glass*. Nucl. Phys. **B240** [FS12] (1984)431–452.
- [69] B. Derrida. *Random–energy model: An exactly solvable model of disorder systems*. Phys. Rev. **B 24** (5) 1981.
- [70] R. Rammal, G. Toulouse y M. A. Virasoro. *Ultrametricity for physicist*. Rev. Mod. Phys. **58** 3 (1986)765.
- [71] J.R. de Almeida y D.J.Thouless. *Stability of the Sherrington–Kirkpatrick solution of a spin-glass*. J. Phys. A. **11** (1978) 983.
- [72] D. S. Fisher y D. A. Huse. *Equilibrium behaviour of the spin-glass ordered phase*. Phys. Rev. **B 38** (1988)386.

- [73] D. S. Fisher y D. A. Huse. *Ordered phase of short-range Ising spin-glass*. Phys. Rev. Lett. **56** 12 (1986)1601.
- [74] J. R. de Almeida and D. J. Thouless, *Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model*. J. Phys. A **11** (1978)983.
- [75] J. C. Ciria, G. Parisi y F. Ritort. preprint ROMA2F.
- [76] G. Parisi y F. Ritort. *Replica symmetry breaking in four dimensional spin glasses*. preprint ROMA2F.
- [77] S. Caracciolo, G. Parisi, S. Patarnello y N. Sourlas. *3d Ising spin-glasses in a magnetic field and mean-field theory*. Europhys. Lett. **11** (8) (1990)783–789.
- [78] S. Caracciolo, G. Parisi, S. Patarnello y N. Sourlas. *On computer simulations for spin glasses to test mean field predictions*. J. Phys. I **1** (1991)627–628.
- [79] D. S. Fisher y D. A. Huse. *On the behaviour of Ising spin glasses in a uniform magnetic field*. J. Phys. I **1** (1991)621–625.
- [80] R. N. Bhatt y A. P. Young. Numerical studies of Ising spin glasses in two, three and four dimensions. Phys. Rev. **B37** (1988)5606.
- [81] S. Franz, G. Parisi y M. Virasoro. *The replica method and off equilibrium*. J.Phys.I. (France) **2** (1992) 1869.
- [82] J. E. Green.  *$\epsilon$ -expansion for the critical exponents of a vector spin glass*. J.Phys A.:Math. Gen **17** (1985)L43–L47.
- [83] G. Parisi, F. Ritort y F. Slanina. *Several results on the finite-size corrections on the Sherrington-Kirkpatrick spin-glass model*. J of Phys. A. **26**(15) (1993)3775.
- [84] E. Marinari y G. Parisi. *Simulated Tempering: a new Monte Carlo scheme*. Europhys. Lett. **19**(6) (1992)451–459.
- [85] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt y M. P. Vecchi. *Optimization by simulating annealing*. Science, **220** (1983)671–680.
- [86] E. R. Grannan y R. E. Hetzel. *Susceptibility of two-, three-, and four-dimensional spin glasses in a magnetic field*. Phys. Rev. Lett. **67**. 7 (1991)907–910.

- [87] M. Falcioni, E. Marinari, M. L. Paciello, G. Parisi y B. Taglienti. *Complex zeroes in the partition function of the 4d  $SU(2)$  lattice gauge model*. Phys. Lett. **108** (1982) 331.
- [88] E. Marinari. *Complex zeroes of the  $d = 3$  Ising model: finite-size scaling and critical amplitudes*. Nucl. Phys. **B 235** (1984)123.
- [89] A. M. Ferrenberg y R. H. Swendsen. *New Monte Carlo technique for studying phase transition*. Phys. Rev. Lett. **61** (1988)2635.
- [90] R. H. Swendsen. *Modern methods of analyzing Monte Carlo computer simulations*. Physica **A 194** Nos. 1–4. Procc. of the 18th International Conference on Statistical Physics.
- [91] Inmos. *Developing parallel C programs for transputers*. Inmos. Technical Note # 68. (1991)