



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INSTITUTO DE FÍSICA

TRANSICIÓN DE FASE EN UN SISTEMA
BIDIMENSIONAL DE AGENTES
BROWNIANOS CON INTERACCIÓN DE
ALINEAMIENTO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS FÍSICAS

PRESENTA:

FIS. ALEXANDRO HEIBLUM ROBLES

DIRECTOR DE TESIS:

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ

pcf

2011

Agradecimientos

- Al CONACyT por el apoyo otorgado mediante la beca 41447 para realizar mis estudios en la maestría en Ciencias Físicas
- Al posgrado en Ciencias Físicas y al Instituto de Física por permitirme realizar mis estudios
- Al doctor Francisco Javier Sevilla Pérez, por su invaluable apoyo, paciencia y amistad.
- A mis sinodales dr. Rosalío Fernando Rodríguez Zepeda, dr. David P. Sanders y al dr. José Inés Jiménez Aquino quienes con gusto aceptaron revisar y criticar esta tesis.
- A los miembros de mi comité tutorial, dr. Maximino Aldana González y el dr. Denis Pierre Boyer
- De nuevo al doctor David P. Sanders por enseñarme casi todo lo que sé sobre programación y por su amable disposición para resolverme dudas.
- Al doctor Víctor Dossetti por ayudarme con la implementación del algoritmo Verlet.
- A mi familia y seres queridos.

Contenido

1	Movimiento browniano	7
1.1	Movimiento browniano	7
1.1.1	Ecuación de Langevin para el movimiento browniano	8
1.1.2	Ecuación de Fokker-Planck	13
2	Transiciones de fase	21
2.1	Simetría y dimensionalidad en las transiciones de fase	21
2.1.1	Simetría discreta; modelo de Ising	21
2.1.2	Simetría continua	24
2.2	El modelo de Kuramoto	28
2.2.1	Campo medio	29
2.2.2	Campo medio con ruido blanco	30
2.2.3	Estabilidad lineal del estado desordenado	32
2.3	El modelo de Vicsek	35
2.3.1	Autopropulsión	35
2.3.2	El modelo de Vicsek	35
2.3.3	Transición de fase en el modelo de Vicsek	36
2.3.4	Recolección de resultados del modelo de Vicsek	37
3	Nuestro modelo	39
3.1	Nuestro modelo	39
3.1.1	Descripción del modelo	40

3.1.2	Ecuaciones de movimiento	41
3.1.3	Parámetro de orden	42
3.2	Implementación computacional	43
3.2.1	Solución a las ecuaciones	43
3.2.2	Cálculo de la interacción	43
3.2.3	Visualización	45
3.2.4	Parámetros	45
3.2.5	Condiciones iniciales y a la frontera	46
4	Resultados	47
4.0.6	Evidencia visual	47
4.0.7	M vs Γ	48
4.0.8	Fluctuaciones del parámetro de orden	51
4.0.9	Reescalamiento	53
4.0.10	Homogeneidad espacial	53
4.0.11	Distribución de velocidades	54
4.1	Discusión	59
4.1.1	Desarrollo de la ecuación de Fokker-Planck y análisis de la estabilidad lineal de la fase desordenada	59
4.1.2	Parámetros	63
4.1.3	Métodos numéricos para determinar Γ_c	63
4.1.4	Reescalamiento	64
4.1.5	Exponente Crítico β	65
4.1.6	Distribución de velocidades	65
4.1.7	Homogeneidad Espacial	66
4.1.8	Rompimiento de la ergodicidad	67
4.1.9	Kuramoto	68
4.1.10	Sobre el modelo de Vicsek	69

5 Conclusiones	71
5.1 Conclusiones	71
Bibliografía	73

Introducción

Abstract

We consider a model of Brownian agents with velocity-alignment interaction in two spatial dimensions. The model is built using usual Langevin equation for Brownian motion plus a local interaction term, whose range is a free parameter. Varying the magnitude of the interaction observe two states. One disordered whose velocity probability distribution is Maxwellian, and another that presents long range order. This result is novel and important, because the noise is not angular (it comes from a thermal bath) nor the particles are self-propelled, and still the system presents flocking behavior, proving that the alignment interaction is the key factor in the long range order, so the self-propulsion and the angular noise are not essential. In this thesis this system is analyzed as it follows. First we present a brief review of the Langevin's theory for Brownian motion, then we use the Fokker-Planck equation to develop the velocity probability distribution. Second, using ferromagnetic systems as a guide and as an example, we present the Mermin-Wagner's theorem and its consequences for long range order in two-dimensional systems. Third we present our model and its computational implementation. Using the numerical data, and a proper order parameter, we reveal the phase transition. Finally, making a linear stability analysis of the Fokker-Planck equation in the disordered state, we show an analytic result for the critical coupling for the global interaction case.

Resumen

Presentamos un modelo bidimensional de agentes brownianos con interacción de alineamiento. El modelo es construido usando la ecuación de Langevin para movimiento browniano añadiendo un término de interacción local, cuyo alcance es un parámetro libre. Variando la magnitud de la interacción se observan dos estados, uno desordenado, donde las partículas tienen una distribución de probabilidad que corresponde a la distribución de Maxwell-Boltzmann, y otro estado que presenta orden de largo alcance. Este resultado es importante porque muestra que la interacción de alineamiento es la principal responsable del orden de largo alcance, y esto se logra sin usar ruido angular ni autopropulsión, mostrando así que estas últimas dos características no son esenciales para este tipo de fenómenos. En esta tesis el sistema se analiza de la siguiente manera. Primero se presenta una breve revisión de la teoría de Langevin para el movimiento browniano. Usando la ecuación de Fokker-Planck correspondiente se determina la distribución de probabilidad para las velocidades. Después, asistidos de modelos ferromagnéticos, se presentan el teorema de Mermin-Wagner y sus consecuencias para sistemas bidimensionales. Posteriormente se expone el modelo y su implementación computacional. Usando los resultados numéricos y un parámetro de orden apropiado se muestra la transición de fase. Finalmente usando un análisis de estabilidad lineal para el estado desordenado en la ecuación de Fokker-Planck se muestra un resultado analítico para el valor crítico de la interacción para el caso cuando la interacción es global.

Introducción

Un aspecto muy interesante de las transiciones de fase donde aparece un orden de largo alcance, es cómo las interacciones locales pueden desarrollar un comportamiento global. Dentro de este tipo de transiciones, existe el llamado comportamiento de parvada ("flocking behavior"). En este tipo de comportamiento lo que se tiene son agentes móviles, que en base a interacciones locales se ordenan y viajan juntos en una misma dirección, como lo haría una parvada de aves. Al generarse un flujo neto de partículas distinto de cero, este tipo de comportamiento es exclusivo de la física estadística fuera de equilibrio.

En 1966, David Mermin y Herbert Wagner publicaron un resultado [1] que ahora lleva su nombre, y se llama el teorema de Mermin-Wagner. Este teorema (también trabajado de manera independiente por Hohenberg [2]) nos dice que para sistemas de baja dimensionalidad, esto es, para dimensiones menores a tres, interacciones del tipo ferromagnético no pueden romper espontáneamente la simetría rotacional, y posteriormente esto se generaliza a que interacciones de corto alcance no pueden romper espontáneamente una simetría continua en un sistema que se encuentre en equilibrio térmico.

En 1995 apareció publicado en la revista *Physical Review Letters*, un artículo de Vicsek, et al. [3], el cual presenta comportamiento de parvada para un sistema de baja dimensionalidad. Este artículo es sumamente importante no sólo por las posibilidades que tiene el modelo para describir manadas, parvadas, cardúmenes, etc. sino porque presenta orden de largo alcance en un sistema bidimensional con un modelo de interacciones locales. Este modelo es sorprendente, porque construido con una dinámica muy sencilla, rompe una simetría continua, la simetría rotacional. Los autores justifican el hecho de que pueda haber una transición de fase ya que su modelo se encuentra fuera de equilibrio [4]. En el modelo de Vicsek las partículas se mueven a una velocidad constante, lo cual es un caso particular de autopropulsión ("self-propulsion"), ya que las partículas son capaces de determinar su velocidad independientemente a factores externos.

Como era de esperarse, el modelo de Vicsek generó gran revuelo, y ha sido actualmente

citado más de un millar de veces. De este modo, el modelo de Vicsek ha inspirado un gran número de modelos en los que pareciera existir la premisa implícita de que para que se pueda dar el comportamiento de parvada, o simplemente el orden de largo alcance, es necesaria la autopropulsión [5], [6], [7], [8], [9], [10]. El objetivo principal de esta tesis es mostrar que la interacción local de alineamiento entre los agentes móviles es el ingrediente principal para generar orden de largo alcance, sin necesidad de usar autopropulsión ni tampoco fluctuaciones no proporcionadas por un baño térmico (ruido “no térmico”, como el usado en el modelo de Vicsek). Esto se logrará mediante la creación de un modelo que presente una transición orden-desorden usando partículas brownianas (no autopropulsadas) que están sujetas a una interacción local de alineamiento, similar a la de Vicsek pero que resulta, al reescribirla en términos de los ángulo de las direcciones de movimiento, en el modelo de Kuramoto. Las fluctuaciones en el movimiento de las partículas estarán dictaminadas por un baño térmico caracterizado por una temperatura T . De esta manera, se habrá mostrado que la autopropulsión no tiene un carácter esencial en este tipo de comportamiento.

Programa

En el primer capítulo se desarrollan algunos conceptos básicos de la ecuación de Langevin para el movimiento browniano. Se hará un desarrollo explícito que no se encuentra generalmente en la literatura y que podrá ser de ayuda para un lector principiante en el tema. No obstante, para obtener la distribución de probabilidades de la posición y velocidad de la partícula browniana no se sigue con el camino de Langevin, sino que se opta por la ecuación de Fokker-Planck, con la que resulta más fácil el trabajo. De nuevo el desarrollo de la ecuación de Fokker-Planck se hace explícito.

El segundo capítulo está dedicado a las transiciones de fase. Se revisa la transición ferromagnética en el modelo de Ising, con especial énfasis en el efecto que tiene la dimensionalidad sobre éste y se muestra que la transición sólo es posible para dimensiones mayores o iguales a dos. En un breve desarrollo, se analizan los sistemas similares a Ising pero con simetría

continua (e.g. el modelo de Heisenberg), y se muestra que para estos no hay orden de largo alcance a baja dimensionalidad, lo cual constituye el teorema de Mermin-Wagner.

Después de este desarrollo de la teoría se exponen dos modelos muy interesantes y que serán de suma importancia en capítulos posteriores. El primero es el de Kuramoto, que aún cuando no presenta una transición de fase en el sentido habitual de la termodinámica, presenta una transición dinámica de orden-desorden. Se expondrá el modelo, se revisarán resultados básicos de éste y se demostrará teóricamente, mediante un análisis de estabilidad lineal en la ecuación de Fokker-Planck, el punto de transición. El segundo modelo que se expone es el obligado modelo de Vicsek. Se mostrará el modelo y se hará una breve recapitulación de los resultados encontrados.

En el tercer capítulo se expone el modelo construido, el cual presenta una transición de fase sin usar autopropulsión. Primero se hace una descripción del modelo y se exponen sus ecuaciones correspondientes. Se exponen los parámetros interesantes y las variables a medir. Posteriormente se describe la implementación computacional del mismo.

En el cuarto capítulo se recopilan los resultados de las simulaciones realizadas, y con esto se procede a hacer un análisis, tanto teórico como numérico de lo encontrado. Dada la intrínseca complejidad del problema es muy difícil realizar un análisis teórico completo de todos los resultados, pero cabe resaltar que, usando un método de estabilidad lineal similar al usado en Kuramoto, se encuentra una predicción teórica para el punto de la transición para el caso de interacción global.

El quinto capítulo concluye y da término así a esta tesis.

Capítulo 1

Movimiento browniano

1.1 Movimiento browniano

El movimiento browniano es sumamente importante en la física estadística y en otras ramas del conocimiento. A inicios del siglo pasado, tanto A. Einstein como M. Smoluchowski plantearon y resolvieron exitosamente el problema. Con el método de Einstein, el movimiento browniano es descrito a través de la probabilidad $P(\vec{r}, t)$ de encontrar a la partícula en la posición \vec{r} al tiempo t , la cual satisface la ecuación macroscópica de difusión. Unos pocos años más tarde, P. Langevin propuso otro método para resolver el problema, usar ecuaciones diferenciales estocásticas. El método de Langevin resulta más versátil, y dado que está basado en las ecuaciones de movimiento de Newton es fácilmente generalizable a otros sistemas, sobre todo a aquellos que no disponen de una función hamiltoniana, como los sistemas difusivos. Este tipo de comportamiento se ha generalizado tanto que ya se habla de movimiento browniano en situaciones donde ya no es una partícula inmersa en un fluido, donde siente una fuerza estocástica por los golpes proporcionados por las partículas constituyentes del fluido, sino de cualquier sistema en el la dinámica sea análoga al movimiento browniano, por ejemplo cuando un sistema puede ser descrito mediante la ecuación de Langevin. Así se observa en la literatura el término “agente browniano”, que se refiere a cualquier objeto que esté expuesto a una dinámica del tipo browniana [11]. Después del tratamiento de Langevin se verá la ecuación de Fokker-Planck, la cual es la ecuación que rige el comportamiento de

la distribución de la densidad de probabilidad $P(x, v, t)$ de encontrar a la partícula en la posición x , con velocidad v al tiempo t .

1.1.1 Ecuación de Langevin para el movimiento browniano

Como sabemos, el movimiento browniano consiste en una partícula inmersa en un fluido, la cual es considerablemente más grande que las partículas del medio. Langevin postuló que, primero, la partícula sentiría una fuerza de fricción simplemente por estar inmersa en un líquido [12]. De acuerdo a la ley de Stokes para una partícula de radio r en un medio de viscosidad η , el cambio de la velocidad de la partícula en el tiempo satisface:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -6\pi\eta r\vec{v} \equiv -\gamma\vec{v} \quad (1.1.1)$$

Sin embargo, en un nivel de observación mesoscópico, a esto hay que sumarle la fuerza estocástica $\vec{\xi}$ altamente fluctuante debida a los golpes otorgados por las partículas que componen el medio circundante. Con esto Langevin postuló la siguiente ecuación, que lleva su nombre:

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = -\gamma\vec{v} + \vec{\xi} \quad (1.1.2)$$

donde m es la masa de la partícula browniana. Por simplicidad, a la fuerza $\vec{\xi}$ le requerimos que su primer momento sea cero, ya que cualquier otro valor distinto generaría una anisotropía espacial,

$$\langle \vec{\xi} \rangle = \vec{0} \quad (1.1.3)$$

Además, pedimos que $\vec{\xi}$ sea un proceso gaussiano, por lo que sólo es necesario conocer su función de autocorrelación [13]:

$$\langle \xi(\vec{t})\xi(\vec{s}) \rangle = C\delta(t - s) \quad (1.1.4)$$

con C una constante que se relaciona con la intensidad de los golpes impartidos por el medio circundante, la cual posteriormente relacionaremos con la temperatura.

Algunos resultados de interés

Antes de resolver la ecuación pueden obtenerse resultados de interés físico; obtendremos $\langle \vec{v} \rangle$ y $\langle x^2 \rangle$, es decir, el valor promedio de \vec{v} y x^2 respecto a ensambles de trayectorias del proceso estocástico $\vec{\xi}$

Como $\vec{\xi}$ tiene un promedio nulo (1.1.3), podemos ver rápidamente que :

$$\begin{aligned} m \langle \frac{d\vec{v}}{dt} \rangle &= -\gamma \langle \vec{v} \rangle + \vec{0} \\ &\iff \\ \langle \vec{v} \rangle &= \vec{v}(0) e^{-\frac{\gamma t}{m}} \end{aligned} \quad (1.1.5)$$

La velocidad decae exponencialmente para cualquier condición inicial $\vec{v}(0)$, por lo que para tiempos grandes comparados con el tiempo de relajación $\tau \equiv m/\gamma$ cualquier reminiscencia de la velocidad inicial que tuviera la partícula se disipa. Como se borra la condición inicial, se borra cualquier asimetría inicial, por lo que esperamos también que para tiempos grandes $\langle \vec{x} \rangle = 0$

Si en lugar de sólo tomar el promedio sobre ensambles calculamos el producto punto de \vec{x} con \vec{v} obtenemos una expresión para $\langle x^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} \cdot m \frac{d\vec{v}}{dt} \rangle &= \langle -\vec{x} \cdot \gamma \vec{v} \rangle + \langle \vec{x} \cdot \vec{\xi} \rangle \\ &\iff \\ m \langle \vec{x} \cdot \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} \rangle &= -\gamma \langle \vec{x} \cdot \frac{d\vec{x}}{dt} \rangle + \langle \vec{x} \cdot \vec{\xi} \rangle \end{aligned}$$

notando que $\frac{d^2 x^2}{dt^2} = \frac{d^2(\vec{x} \cdot \vec{x})}{dt^2} = 2 \left(\frac{d(\vec{x} \cdot \frac{d\vec{x}}{dt})}{dt} \right) = 2 \left[v^2 + \vec{x} \cdot \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} \right]$, entonces

$$\vec{x} \cdot \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 x^2}{dt^2} \right) - v^2 \quad (1.1.6)$$

$$\vec{x} \cdot \frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{1}{2} \left(\frac{dx^2}{dt} \right) \quad (1.1.7)$$

Como la fuerza $\vec{\xi}$ es de naturaleza estocástica, se espera que no exista una correlación directa entre la trayectoria de la partícula y la fuerza que siente cuando son medidas simultáneamente, es decir:

$$\langle \vec{x} \cdot \vec{\xi} \rangle = 0 \quad (1.1.8)$$

Sustituyendo estas tres identidades nos queda que:

$$\begin{aligned} m \left\langle \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 x^2}{dt^2} \right) - v^2 \right\rangle &= -\gamma \left\langle \frac{1}{2} \left(\frac{dx^2}{dt} \right) \right\rangle + 0 \\ &\iff \\ \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} &= 2 \langle v^2 \rangle \end{aligned}$$

En equilibrio térmico se cumple el teorema de equipartición para la velocidad:

$$\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} d k_B T \quad (1.1.9)$$

donde d es la dimensionalidad del sistema.

Así llegamos a que:

$$\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = 2 d k_B T / m \quad (1.1.10)$$

Integrando una vez y tomando por simplicidad las condiciones iniciales $\langle x^2 \rangle|_{t=0} = 0$, $\frac{d \langle x^2 \rangle}{dt}|_{t=0} = 0$, queda:

$$\frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} + \frac{1}{\tau} \langle x^2 \rangle = (2 d k_B T / m) t, \quad (1.1.11)$$

que es una ecuación del tipo:

$$\frac{df(t)}{dt} + C_1 f(t) = C_2 t, \quad (1.1.12)$$

cuya solución es simplemente la suma de la solución a la ecuación homogénea más una solución particular. La solución homogénea es inmediata

$$f_{\text{hom}} = Ae^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (1.1.13)$$

y la particular la encontramos usando a la primera como un factor integrante.

$$f_{\text{part}} = f_{\text{hom}} * g(t) \quad (1.1.14)$$

con A una constante que depende de las condiciones iniciales. Sustituyendo esto en (1.1.12) tenemos que:

$$\begin{aligned} g(t) &= \left(\frac{2dk_B T}{m} \right) \int \frac{t}{f_{\text{hom}}} dt \\ g(t) &= \left(\frac{2dk_B T}{m} \right) \frac{\tau}{A} e^{\frac{t}{\tau}} (t - \tau) \\ f_{\text{part}} &= \left(\frac{2dk_B T}{m} \right) \tau (t - \tau) \end{aligned}$$

por lo que la solución general es:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2dk_B T \tau^2}{m} \left[\frac{t}{\tau} - \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right) \right]. \quad (1.1.15)$$

Para tiempos grandes comparados con τ , $\langle x^2 \rangle$ crece linealmente con t :

$$\langle x^2 \rangle \sim \frac{2dk_B T \tau}{m} t \quad (1.1.16)$$

Solución a la ecuación de Langevin en una dimensión

La solución formal a la ecuación de Langevin (1.1.2) está dada por:

$$v(t) = v(0)e^{-\frac{t}{\tau}} + e^{-\frac{t}{\tau}} \int_0^t e^{\frac{u}{\tau}} \xi(u) du \quad (1.1.17)$$

Así, para el valor esperado del cuadrado de la velocidad:

$$\begin{aligned} \langle v^2(t) \rangle &= v^2(0)e^{-2\frac{t}{\tau}} + 2e^{-2\frac{t}{\tau}} v(0) \int_0^t e^{\frac{u}{\tau}} \langle \xi(u) \rangle du \\ &+ e^{-2\frac{t}{\tau}} \int_0^t \int_0^t e^{\frac{u_1+u_2}{\tau}} \langle \xi(u_1) \xi(u_2) \rangle du_1 du_2 \end{aligned} \quad (1.1.18)$$

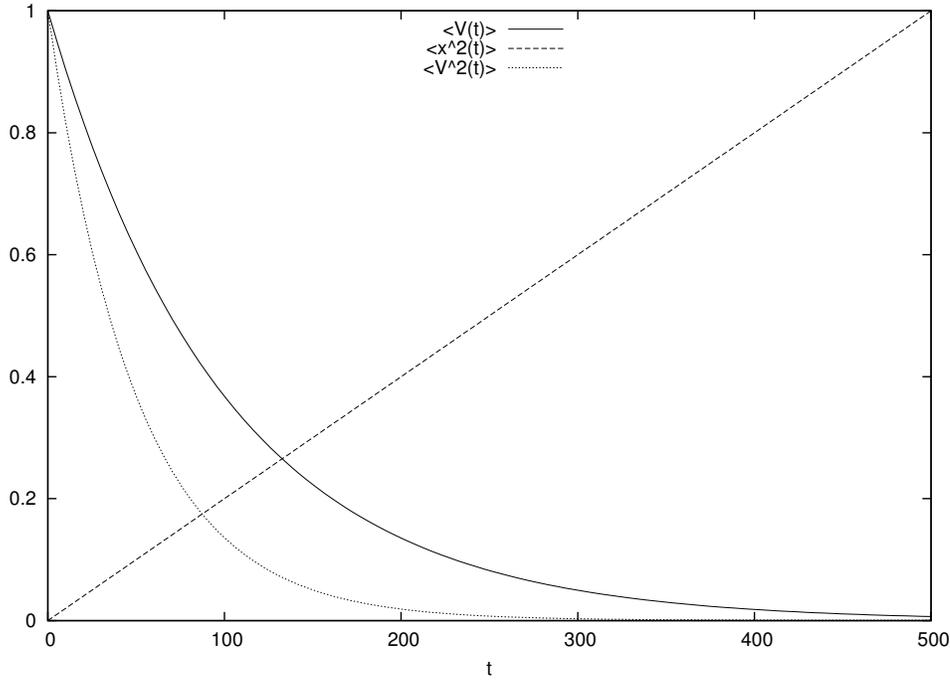


Figura 1.1: Algunos resultados de interés: $\langle v(t) \rangle$ (línea continua), $\langle v^2(t) \rangle$ (línea punteada), $\langle x^2(t) \rangle$ (línea a rayas)

Como $\langle \xi(u) \rangle = 0$ el segundo término se anula, y usando la correlación (1.1.4)

$$\begin{aligned}
 \langle v^2(t) \rangle &= v^2(0)e^{-2\frac{t}{\tau}} + e^{-2\frac{t}{\tau}} \int_0^t \int_0^t e^{\frac{u_1+u_2}{\tau}} C \delta(u_1 - u_2) du_1 du_2 \\
 &= v^2(0)e^{-2\frac{t}{\tau}} + e^{-2\frac{t}{\tau}} \int_0^t e^{2\frac{u_1}{\tau}} C du_1 \\
 &= v^2(0)e^{-2\frac{t}{\tau}} + \frac{C\tau}{2} e^{-2\frac{t}{\tau}} \left(e^{2\frac{t}{\tau}} - 1 \right) \\
 &= v^2(0)e^{-2\frac{t}{\tau}} + \frac{C\tau}{2} \left(1 - e^{-2\frac{t}{\tau}} \right)
 \end{aligned}$$

Es razonable suponer que para un tiempo de relajación suficientemente grande el sistema alcance el equilibrio, por lo que se cumplirá el principio de equipartición de la energía (1.1.9). Así obtenemos la condición que determina a la constante C en d dimensiones¹:

$$C = \frac{2dk_B T}{m\tau} \quad (1.1.19)$$

Finalmente obtenemos:

¹Se incluye el número de dimensiones d para que la generalización de estos resultados a más dimensiones sea inmediata

$$\langle v^2(t) \rangle = v^2(0)e^{-2\frac{t}{\tau}} + \frac{dk_B T}{m} \left(1 - e^{-2\frac{t}{\tau}}\right) \quad (1.1.20)$$

La función de autocorrelación de la velocidad es:

$$\begin{aligned} \langle v(t)v(s) \rangle = \langle v^2(0)e^{-\frac{t+s}{\tau}} + e^{-\frac{t+s}{\tau}} \int_0^t \int_0^s e^{\frac{u+u'}{\tau}} \xi(u)\xi(u') du du' \\ + 2e^{-\frac{t+s}{\tau}} \int_0^t e^{\frac{u}{\tau}} \xi(u) du \rangle \end{aligned} \quad (1.1.21)$$

$$\langle v(t)v(s) \rangle = v^2(0)e^{-\frac{t+s}{\tau}} + e^{-\frac{t+s}{\tau}} \int_0^t \int_0^s e^{\frac{u+u'}{\tau}} C\delta(u-u') du du' \quad (1.1.22)$$

Si $t > s$ se tiene:

$$\langle v(t)v(s) \rangle = v^2(0)e^{-\frac{t+s}{\tau}} + \frac{C\tau}{2} (e^{\frac{s-t}{\tau}} - e^{-\frac{t+s}{\tau}}) \quad (1.1.23)$$

Si ponemos condiciones iniciales de equilibrio, es decir, $v^2(0) = \frac{dk_B T}{m} = C\tau/2$, entonces nos queda:

$$\langle v(t)v(s) \rangle = \frac{dk_B T}{m} e^{\frac{s-t}{\tau}} \quad (1.1.24)$$

Las correlaciones decaen exponencialmente. De igual forma, para calcular las correlaciones de la posición con la velocidad:

$$\langle x(t)v(s) \rangle = \int_0^t \langle v(u)v(s) \rangle du \quad (1.1.25)$$

$$= \frac{dk_B T}{m} \int_0^t e^{\frac{s-u}{\tau}} du \quad (1.1.26)$$

$$= \frac{dk_B T\tau}{m} e^{\frac{s}{\tau}} (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}), \quad (1.1.27)$$

que vemos que no decaen, sino que quedan constantes cuando $t - s \rightarrow \infty$.

1.1.2 Ecuación de Fokker-Planck

La distribución de probabilidad es de suma importancia, ya que con ella se pueden conocer los promedios de las observables físicas. Para obtener la distribución de probabilidades podemos

contar cuántas partículas tienen velocidad v y posición x al tiempo t en un ensamble. El cálculo se hará en 1 dimensión ya que la extensión a otras dimensiones es inmediata.

$$P(x, v, t) = \langle \delta(x - x(t))\delta(v - v(t)) \rangle \quad (1.1.28)$$

Usando la representación de Fourier de las deltas:

$$P(x, v, t) = \int dk \int dq \langle e^{ik(x-x(t))} e^{iq(v-v(t))} \rangle \quad (1.1.29)$$

Entonces la evolución de la distribución de probabilidad está dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x, v, t) &= \left\langle \int dk [-ik\dot{x}(t)] e^{ik[x-x(t)]} \delta(v - v(t)) + \int dq [-iq\dot{v}(t)] e^{iq[v-v(t)]} \delta(x - x(t)) \right\rangle \\ &= - \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \dot{x}(t) \int dk e^{ik[x-x(t)]} \delta(v - v(t)) + \frac{\partial}{\partial v} \dot{v}(t) \int dq e^{iq[v-v(t)]} \delta(x - x(t)) \right\rangle \\ &= - \left\langle \frac{\partial}{\partial x} v(t) \delta(x - x(t)) \delta(v - v(t)) + \frac{\partial}{\partial v} \left(-\frac{\gamma}{m} v(t) + \xi \right) \delta(v - v(t)) \delta(x - x(t)) \right\rangle \\ &= - \frac{\partial}{\partial x} v P(x, v, t) + \frac{\gamma}{m} \frac{\partial}{\partial v} v P(x, v, t) - \frac{\partial}{\partial v} \langle \xi \delta(v - v(t)) \delta(x - x(t)) \rangle \end{aligned}$$

Por el teorema de Novikov [14], se tiene que:

$$\langle \xi(t) F(\xi(t)) \rangle = D' \left\langle \frac{\delta F(\xi(t))}{\delta \xi(t)} \right\rangle \quad (1.1.30)$$

En nuestro caso $F(\xi(t)) = \delta(v - v(t))\delta(x - x(t))$. Notemos que:

$$\begin{aligned} \frac{\delta [\delta(z - z(t))]}{\delta \xi(t)} &= \frac{\delta}{\delta \xi(t)} \int e^{ik(z-z(t))} dk \\ &= \int (-ik) e^{ik(z-z(t))} \frac{\delta z(t)}{\delta \xi(t)} dk \end{aligned}$$

De la ecuación (1.1.17) tenemos que:

$$\frac{\delta v(t)}{\delta \xi(t)} = e^{-\frac{t}{\tau}} \int_0^t e^{\frac{u}{\tau}} \frac{\delta \xi(u)}{\delta \xi(t)} du = e^{-\frac{t}{\tau}} \int_0^t e^{\frac{u}{\tau}} \delta(u - t) du = e^{-\frac{t}{\tau}} e^{\frac{t}{\tau}} = 1, \quad (1.1.31)$$

y:

$$\frac{\delta x(t)}{\delta \xi(t)} = \int_0^t \frac{\delta v(s)}{\delta \xi(t)} ds = 0, \quad (1.1.32)$$

por lo que:

$$\frac{\delta [\delta(v - v(t))]}{\delta \xi(t)} = \int (-ik) e^{ik(v-v(t))} dk = -\frac{\partial (\delta(v - v(t)))}{\partial v} \quad (1.1.33)$$

$$\frac{\delta [\delta(x - x(t))]}{\delta \xi(t)} = 0 \quad (1.1.34)$$

Sustituyendo en la ecuación de Novikov (1.1.30):

$$\begin{aligned} \frac{1}{D'} \langle \xi(t) [\delta(v - v(t)) \delta(x - x(t))] \rangle &= \left\langle \frac{\delta [\delta(v - v(t)) \delta(x - x(t))]}{\delta \xi(t)} \right\rangle \\ &= - \left\langle \delta(x - x(t)) \left(\frac{\partial (\delta(v - v(t)))}{\partial v} \right) \right\rangle \\ &= - \frac{\partial P(x, v, t)}{\partial v} \end{aligned}$$

Usando este resultado en la ecuación anterior a (1.1.30) tenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, v, t) = -\frac{\partial}{\partial x} v P(x, v, t) + \frac{\gamma}{m} \frac{\partial}{\partial v} v P(x, v, t) + D' \frac{\partial^2}{\partial v^2} P(x, v, t) \quad (1.1.35)$$

Que es justo la ecuación de Fokker-Planck asociada a la ecuación de Langevin (1.1.2) en una dimensión ².

Solución

La ecuación (1.1.35) es más sencilla de analizar en el espacio de Fourier, para lo cual usamos la transformada:

$$\hat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} f(t) \quad (1.1.36)$$

De manera que reescribimos (1.1.35) así:

²El valor de la constante D' se obtendrá más adelante en 1.1.59, obteniendo $D' = \frac{\gamma k_B T}{m^2}$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}(q, k, t) &= -(iq)(i \frac{\partial}{\partial k}) \hat{P}(q, k, t) + \frac{\gamma}{m} (ik)(i \frac{\partial}{\partial k}) \hat{P}(q, k, t) + D'(ik)^2 \hat{P}(q, k, t) \\
&= q \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}(q, k, t) - \frac{\gamma k}{m} \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}(q, k, t) - D'k^2 \hat{P}(q, k, t) \\
&= -D'k^2 \hat{P}(q, k, t) + \left(q - \frac{\gamma k}{m} \right) \frac{\partial}{\partial k} \hat{P}(q, k, t)
\end{aligned}$$

Usando el método de las características [13], tenemos una ecuación del tipo:

$$0 = \frac{\partial \hat{P}}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial \hat{P}}{\partial k} \dot{k} + \frac{\partial \hat{P}}{\partial t} + c(q, k, t) \hat{P}, \quad (1.1.37)$$

donde:

$$\dot{q} \equiv 0 \quad (1.1.38)$$

$$\dot{k} = - \left(q - \frac{\gamma k}{m} \right) \quad (1.1.39)$$

$$c(q, k, t) \equiv D'k^2 \quad (1.1.40)$$

Recordando que:

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = \frac{\partial \hat{P}}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial \hat{P}}{\partial k} \dot{k} + \frac{\partial \hat{P}}{\partial t}, \quad (1.1.41)$$

entonces:

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = -D'k^2 \quad (1.1.42)$$

y por lo tanto

$$\hat{P}(t) = \hat{P}(q(0), k(0), 0) e^{-D' \int_0^t k^2(s) ds} \quad (1.1.43)$$

donde $q(0)$ y $k(0)$ son condiciones iniciales. Resolviendo las ecuaciones para \dot{q} y \dot{k} :

$$q(t) = q(0) \quad (1.1.44a)$$

$$k(t) = k(0) e^{-\frac{\gamma}{m} t} - q(0) \int_0^t e^{\frac{\gamma}{m} s} ds = k(0) e^{-\frac{\gamma}{m} t} - \frac{m}{\gamma} q(0) (1 - e^{-\frac{\gamma}{m} t}) \quad (1.1.44b)$$

De las cuales podemos despejar $q(0)$ y $k(0)$ y sustituir en (1.1.43)

$$\hat{P}(t) = \hat{P} \left(q, k e^{-\frac{\gamma}{m} t} + \frac{m}{\gamma} q (e^{-\frac{\gamma}{m} t} - 1), 0 \right) e^{-D' \int_0^t \left(k(0) e^{-\frac{\gamma}{m} s} - \frac{m}{\gamma} q(0) (1 - e^{-\frac{\gamma}{m} s}) \right)^2 ds} \quad (1.1.45)$$

Y podemos determinar $k(0)$ y $q(0)$ a partir de (1.1.44), de modo que la integral en el exponente se puede reescribir como:

$$\begin{aligned} & \int_0^t \left(k(0)e^{\frac{\gamma}{m}s} - \frac{m}{\gamma}q(0)(1 - e^{\frac{\gamma}{m}s}) \right)^2 ds = \\ & \int_0^t \left(ke^{\frac{\gamma}{m}(s-t)} + \frac{m}{\gamma}q(e^{\frac{\gamma}{m}(s-t)} - 1) \right)^2 ds = \\ & (1 - e^{-\frac{2\gamma}{m}(t)}) \frac{m}{2\gamma} \left[k + \left(\frac{m}{\gamma}q \right) \right]^2 - (1 - e^{-\frac{\gamma}{m}(t)}) \frac{2m^2q}{\gamma^2} \left[\frac{m}{\gamma}q + k \right] + \left(\frac{m}{\gamma}q \right)^2 t \end{aligned}$$

Sólo basta invertir la transformada de Fourier para obtener $P(t)$, pero sin hacer esa álgebra podemos obtener resultados físicos de interés. Por ejemplo, si tomamos $q = 0$ obtendremos la distribución de velocidades en el espacio de Fourier³:

$$\hat{P}(q, k, t)|_{q=0} = \hat{P}(0, ke^{-\frac{\gamma}{m}t}, 0)e^{-D' \int_0^t \left(k(0)e^{\frac{\gamma}{m}s} - \frac{m}{\gamma}q(0)(1 - e^{\frac{\gamma}{m}s}) \right)^2 ds} \quad (1.1.46)$$

$$\approx \hat{P}(0, ke^{-\frac{\gamma}{m}t}, 0)e^{-D'(1 - e^{-\frac{2\gamma}{m}(t)}) \frac{m}{2\gamma}k^2} \quad (1.1.47)$$

Si queremos obtener las distribuciones de equilibrio, necesitamos tomar el límite de tiempo largo, es decir, $\frac{\gamma t}{m} \gg 1$, para el cual

$$\hat{P}(k, t) \approx \hat{P}(0, 0, 0)e^{-D' \frac{m}{2\gamma}k^2} \quad (1.1.48)$$

Por un lado $\hat{P}(0, 0, 0) = C$ es una constante, por lo que su transformada inversa da:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{P}(0, 0, 0)e^{ikv} dk = C\delta(v) \quad (1.1.49)$$

Por otro lado, la transformada inversa de una gaussiana es otra gaussiana:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D' \frac{m}{2\gamma}k^2} e^{ikv} dk = \sqrt{\frac{\gamma}{2D'm\pi}} e^{-\gamma v^2 / (2D'm)} \quad (1.1.50)$$

Usando estos dos resultados y el teorema de la convolución en la ecuación (1.1.48) obten-

³ $P(v, t) = \int P(x, v, t) dx = \int \int \int \hat{P}(q, k, t) e^{i(qx + kv)} dx dq dk = \int \int \hat{P}(q, k, t) \delta(q - 0) e^{ikv} dq dk = \int dk \hat{P}(q, k, t)|_{q=0} e^{ikv}$

emos:

$$P(v) = \int_{-\infty}^{\infty} C \sqrt{\frac{\gamma}{2D'm\pi}} e^{-\gamma v^2/(2D'm)} \delta(v - \nu) d\nu \quad (1.1.51)$$

$$P(v) = C \sqrt{\frac{\gamma}{2D'm\pi}} e^{-\gamma v^2/(2D'm)}, \quad (1.1.52)$$

donde por normalización necesariamente $C = 1$, quedando así:

$$P(v) = \sqrt{\frac{\gamma}{2D'm\pi}} e^{-\gamma v^2/(2D'm)} \quad (1.1.53)$$

La cual es una función gaussiana, con media $\mu = 0$ y varianza $\sigma^2 = D'\frac{m}{\gamma}$

De manera análoga, si en lugar de tomar $q = 0$ tomamos $k = 0$ obtendremos la distribución de posiciones

$$\hat{P}(q, k, t)|_{k=0} = \hat{P}(q, \frac{m}{\gamma}q(e^{-\frac{\gamma}{m}t} - 1), 0)e^{-D'[(1-e^{-\frac{2\gamma}{m}t})\frac{m}{2\gamma}(\frac{m}{\gamma}q)^2 - (1-e^{-\frac{\gamma}{m}t})\frac{2m^3q^2}{\gamma^3} + (\frac{m}{\gamma}q)^2t]} \quad (1.1.54)$$

$$= \hat{P}(q, \frac{m}{\gamma}q(e^{-\frac{\gamma}{m}t} - 1), 0)e^{-D'(\frac{qm}{\gamma})^2[(1-e^{-\frac{2\gamma}{m}t})\frac{m}{2\gamma} - (1-e^{-\frac{\gamma}{m}t})\frac{2m}{\gamma} + t]} \quad (1.1.55)$$

De nuevo usando la aproximación de tiempos largos $\frac{\gamma t}{m} \gg 1$, sólo sobrevive el término lineal en t.

$$\hat{P}(q, k, t)|_{k=0} = \hat{P}(q, -\frac{m}{\gamma}q, 0)e^{-D't(qm/\gamma)^2} \quad (1.1.56)$$

Usando el teorema de la convolución para la transformada de Fourier:

$$P(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{P}(q, -\frac{m}{\gamma}q, 0)e^{-D't(qm/\gamma)^2} e^{iqx} dq = \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\gamma^2}{4D'tm^2\pi}} e^{-\gamma^2(x-x')^2/(4D'tm^2)} P(x', \frac{\gamma}{m}x', 0) \quad (1.1.57)$$

Poniendo una condición inicial sencilla, por ejemplo $P(x, \frac{\gamma}{m}x, 0) = \delta(x)$, obtenemos:

$$P(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D't(qm/\gamma)^2} e^{iqx} dq = \sqrt{\frac{\gamma^2}{4D'tm^2\pi}} e^{-\gamma^2 x^2/(4D'tm^2)} \quad (1.1.58)$$

La cual también es una gaussiana, de media $\mu = 0$ y varianza $\sigma^2 = 2D't\frac{m^2}{\gamma^2}$. Es muy importante resaltar que mientras la distribución de velocidades (1.1.53) tiene una varianza

constante, la distribución de posiciones (1.1.58) tiene una varianza que aumenta lineal con el tiempo. Es por esto que este fenómeno es difusivo.

Para determinar la constante D' veamos el promedio de $\langle v^2 \rangle$ para tiempos largos, donde tendremos equilibrio térmico y por lo tanto equipartición de la energía, es decir, $\frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$

$$\begin{aligned} \langle v^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} v^2 P(v) dv \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} v^2 \sqrt{\frac{\gamma}{2D'm\pi}} e^{-\gamma v^2/(2D'm)} dv \\ &= D' \frac{m}{\gamma}, \end{aligned}$$

por lo tanto tenemos

$$D' = \frac{\gamma k_B T}{m^2} \quad (1.1.59)$$

Sustituyendo (1.1.59) en (1.1.53) y (1.1.58) tenemos:

$$P(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-mv^2/(2k_B T)} \quad (1.1.60)$$

$$P(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{4\pi t k_B T}} e^{-\gamma x^2/(4t k_B T)}, \quad (1.1.61)$$

donde ya se observa explícitamente la dependencia de la temperatura T .

Capítulo 2

Transiciones de fase

2.1 Simetría y dimensionalidad en las transiciones de fase

A lo largo de la historia se han estudiado las transiciones de fase, y en el intento por caracterizarlas se ha encontrado que tanto el tipo de simetría que tenga el sistema como su dimensionalidad son factores sumamente importantes. Para dimensionalidades bajas es difícil encontrar sistemas que presenten transiciones de fase, e incluso la comunidad científica cuenta con teoremas que demuestran la imposibilidad de su existencia para cierto tipo de simetrías [1]. A continuación revisamos algunos casos muy representativos.

2.1.1 Simetría discreta; modelo de Ising

El modelo de Ising, propuesto en 1920 por Wilhelm Lenz y resuelto en 1925 por su alumno de doctorado, Ernst Ising, es la base del estudio de las transiciones de fase del tipo orden-desorden. Este modelo es sumamente sencillo y para el caso uni y bidimensional tiene solución analítica, volviéndolo una piedra angular en el estudio de las transiciones de fase.

El modelo consiste de N espines S_i colocados en una red. Cada espín puede estar únicamente en dos estados, $S_i = +1$ o $S_i = -1$. Los espines interactúan sólo con sus primeros vecinos, y lo hacen de acuerdo a la hamiltoniana:

$$H(S) = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (2.1.1)$$

donde la suma es sobre pares de vecinos.

El caso emblemático es el de interacción uniforme y ferromagnética, donde el tensor $J_{ij} \equiv J < 0$ es constante. El sistema está en contacto con un baño térmico, de modo que cada espín cambia su valor de acuerdo a la temperatura T . La probabilidad de cada configuración de espines es fácil de calcular usando el ensamble canónico:

$$P(S) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(S)}, \quad (2.1.2)$$

con $\beta = 1/k_B T$. Así se tiene que la interacción magnética entre los espines tiende a alinearlos entre sí ($J < 0$), pero las fluctuaciones térmicas justo buscan descorrelacionarlos. El que el sistema pueda o no ordenarse depende de la dimensionalidad que tenga, como se muestra a continuación.

Caso unidimensional

Para el caso unidimensional la red es simplemente un arreglo lineal de espines. Consideremos condiciones periódicas por simplicidad. Lo que haremos a continuación es demostrar que la fase ordenada es inestable para $T \neq 0$, y se usaran argumentos similares a los encontrados en [15].

Consideremos que el sistema está en la fase ordenada, esto es, sólo hay un dominio donde todos los espines son $+1$ o -1 . En ambos casos la energía del sistema es

$$E_{1\text{dom}} = -NJ$$

Ahora consideremos cuando el sistema tiene 2 dominios, uno con m espines con valor de $+1$ y los $N - m$ espines restantes con -1 . Notemos que por las condiciones periódicas, para establecer 2 dominios se requiere necesariamente 2 fronteras entre los espines, cada una con un costo energético de $2J$. Entonces la energía está dada por:

$$E_{2\text{dom}} = -NJ + 2(2J) = -NJ + 4J$$

Claramente es desfavorable energéticamente generar fronteras, sin embargo esto no es concluyente. Hay que analizar el cambio en la la energía libre F para ver cuál será la dinámica del sistema.

Notemos que cada uno de estos estados puede especificarse por la ubicación de sus fronteras. De la cadena de N espines hay N lugares donde empezar un dominio y $N - 1$ donde terminarlo, por lo tanto el número de estados con dos dominios es $N(N - 1)$.

Calculando la energía libre obtenemos:

$$F_{2\text{dom}} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{2\text{dom}} = -\frac{1}{\beta} \ln(N(N - 1)e^{-\beta(-NJ+4J)})$$

En cambio para el caso de 1 solo dominio sólo tenemos 2 configuraciones posibles, o todos $+1$ o todos -1 , entonces:

$$F_{1\text{dom}} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{1\text{dom}} = -\frac{1}{\beta} \ln(2e^{-\beta(-NJ)})$$

Así el cambio en la energía libre al dividir el dominio es de:

$$\Delta F = F_{2\text{dom}} - F_{1\text{dom}} = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{N(N - 1)}{2} e^{-\beta(4J)} \right) = 4J - \frac{1}{\beta} \ln \frac{N(N - 1)}{2}$$

Que para N lo suficientemente grande es negativo. Esto implica que al sistema le conviene dividir los dominios grandes en dos, lo cual evita la posibilidad de un orden de largo alcance.

Así concluimos que para el caso unidimensional no hay transición de fase.

Caso bidimensional

El análisis del caso bidimensional es similar al caso unidimensional, pero bastante más complicado por las complicaciones geométricas y combinatorias.

Supongamos que tenemos una fase ordenada con todos los espines apuntando en una dirección, y que en ella hay un subdominio de espines que apuntan en la dirección contraria. El subdominio está delimitado por n enlaces. Así las energías están dadas por:

$$\begin{aligned} E_{1\text{dom}} &= -NJ \\ E_{2\text{dom}} &= -NJ + 2nJ \end{aligned}$$

El problema es considerar el número de configuraciones que pueden existir teniendo un subdominio con n enlaces en la frontera. Una manera de aproximar esta cantidad es ver a la frontera como una caminata aleatoria que regresa a la posición de origen después de n

pasos, donde el caminante nunca recorre el mismo camino dos veces. Si aproximamos así vamos a tener un sobreestimado porque habría que quitar todavía todas las trayectorias que se atraviesan a sí mismas. Si z es el número de coordinación de la red, entonces en cada paso el caminante tiene $z - 1$ opciones. Así el número de trayectorias será del orden de $(z - 1)^n$. Entonces la diferencia de energía libre queda como:

$$\Delta F = F^{2dom} - F^{1dom} \sim -\frac{1}{\beta} \ln \left((z - 1)^n e^{-\beta(2nJ)} \right) = n \left(2J - \frac{1}{\beta} \ln(z - 1) \right)$$

el cual es negativo si y sólo si:

$$\beta > \frac{\ln(z - 1)}{2J} \quad (2.1.3)$$

Y esto fue independiente de n .

Podemos definir una temperatura crítica:

$$T_c \equiv \frac{2J}{k_B \ln(z - 1)} \quad (2.1.4)$$

Donde para temperaturas mayores a esta crear subdominios disminuye la energía libre, por lo que se destruyen los dominios, pero para temperaturas menores a la crítica el cambio en la energía libre es positivo y entonces es poco probable generar fronteras y los dominios grandes se vuelven estables. Es decir, en $T = T_c$ hay una transición de fase entre el estado ordenado (dominios grandes) con el desordenado (sin dominios).

Cabe destacar que como el cálculo que se hizo para contar los números posibles de subdominios fue un sobreestimado entonces la temperatura crítica será aún mayor de la aquí presentada.

Concluimos entonces que en 2 dimensiones sí existe una transición de fase para $T \neq 0$. Por lo tanto la mínima dimensión crítica del modelo de Ising es 2.

2.1.2 Simetría continua

El caso de Ising es accesible debido a que la simetría de su Hamiltoniano es discreta $H(\{S_i\}) = H(\{-S_i\})$; sin embargo, la situación es diferente para los sistemas con simetrías continuas,

como es por ejemplo el caso del modelo XY, definido por la hamiltoniana [16]:

$$H(S) = -K \sum_{i,j} \cos(\theta_i - \theta_j) - h \sum_i \cos(\theta_i) \quad (2.1.5)$$

donde K es la constante de acoplamiento entre los espines, y h el campo externo. Este modelo es similar al modelo de Ising, ya que son espines en una red, pero en lugar de tomar las proyecciones con el eje z , se considera que sólo hay componentes en las direcciones x y y , de ahí el nombre de modelo XY. Esta diferencia es fundamental, ya que los espines en lugar de sólo tener dos direcciones a elegir, ahora tienen un continuo. De este modo el sistema tiene una simetría continua, ya que es invariante ante rotaciones: $H(\{S_i\}) = H(R(\theta)\{S_i\})$, con $R(\theta)$ el operador usual de rotación. En este caso, el análisis que se hizo con el modelo de Ising es incompatible, ya que si se definen dominios tal como se hizo en el caso anterior, basta una fluctuación infinitesimal en la dirección de los espines para romper la frontera [15]. Además, la energía libre, al necesariamente cumplir con las condiciones de simetría del hamiltoniano [17], tiene para $T < T_c$ un mínimo infinitamente degenerado, por lo que para energías arbitrariamente pequeñas existe un modo de Goldstone correspondiente [15]. Estos modos de Goldstone perturban el sistema y pueden destruir el orden de largo alcance. Para saber esto se hace un análisis de la susceptibilidad del sistema a las perturbaciones.

Para sistemas de este estilo d dimensionales, la hamiltoniana efectiva está dada en términos del parámetro de orden con n grados de libertad $S = (S_1, S_2, \dots, S_n)$:

$$-H = \int d^d r \left[\frac{1}{2} (\nabla S)^2 + \frac{1}{2} r_0 S^2 + \frac{1}{4} u_0 S^4 - \mathbf{h} \cdot \mathbf{S} \right], \quad (2.1.6)$$

donde

$$(\nabla S)^2 = \sum_{i=1}^d \sum_{\alpha=1}^n \left(\frac{\partial S_\alpha(r)}{\partial x_i} \right)^2 \quad (2.1.7)$$

$$S^2 = \sum_{\alpha=1}^n S_\alpha(r)^2 \quad (2.1.8)$$

Para un sistema de este estilo la función de correlación de dos puntos en el espacio de Fourier queda definida de la siguiente forma:

$$\hat{G}(k) = \langle S(k) \rangle \quad (2.1.9)$$

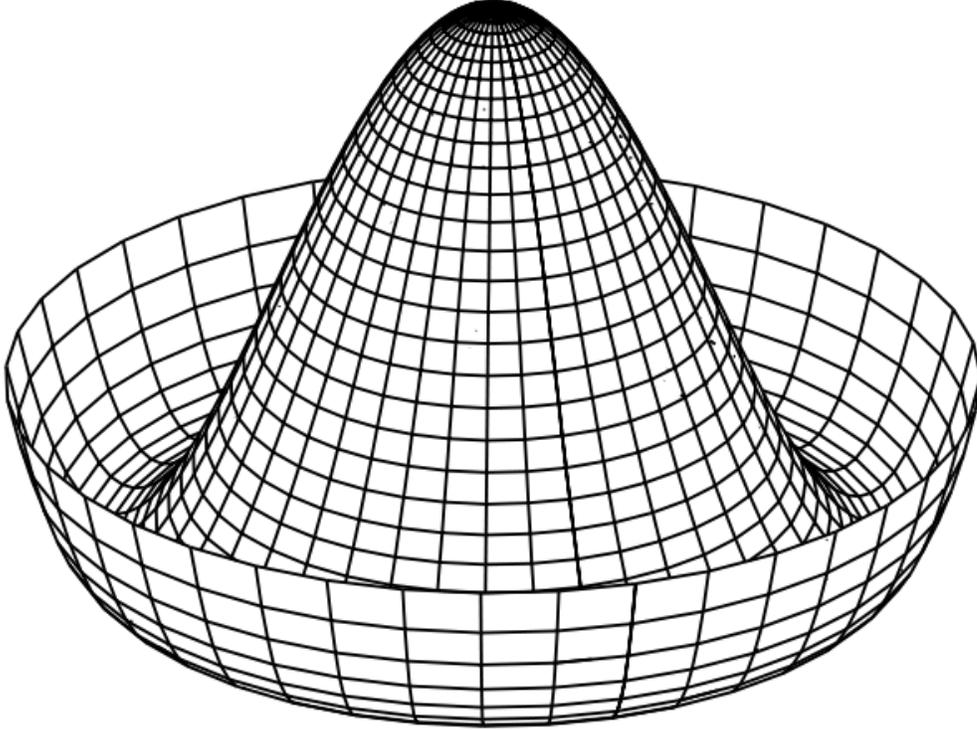


Figura 2.1: Ejemplo de un potencial con un mínimo infinitamente degenerado

Si definimos V como la parte homogénea de la densidad de energía obtenemos:

$$V(S) = \frac{1}{2}r_0S^2 + \frac{1}{4}u_0S^4 = \frac{1}{2}r_0S^2 + \frac{1}{4}u_0(S^2)^2, \quad (2.1.10)$$

cuyos puntos críticos están dados por

$$0 = \frac{\partial V}{\partial S_\alpha} = r_0S_\alpha + u_0S^2S_\alpha = S_\alpha(r_0 + u_0S^2) \quad (2.1.11)$$

y cuyas soluciones son:

$$\langle S_\alpha \rangle = 0 \quad (2.1.12)$$

$$\langle S \rangle^2 = -\frac{r_0}{u_0} \equiv m^2 \quad (r_0 < 0) \quad (2.1.13)$$

Trabajaremos el caso de la fase ordenada $\langle S \rangle^2 = m^2$, renombrando los ejes de acuerdo a la dirección de magnetización:

$$\langle S \rangle = m\mathbf{n} = m(1, 0, 0, \dots, 0) \quad (2.1.14)$$

Ya con esto podemos analizar la influencia de una perturbación $\phi(\mathbf{r})$ en el parámetro de orden. Descomponiendo la perturbación en la dirección paralela a la magnetización $\phi(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} = \phi_{\parallel}(\mathbf{r})$ y en la dirección perpendicular $\phi_{\perp}(\mathbf{r})$ tenemos que a segundo orden (2.1.6) se reescribe como

$$-H_{\phi}\{\phi\} = \frac{m^2}{2} \int d^d r \left[(\nabla \phi_{\parallel})^2 + (\nabla \phi_{\perp})^2 + (2|r_0|) \phi_{\parallel}^2 \right] \quad (2.1.15)$$

De la definición

$$\int d^d r (\nabla \phi_{\perp})^2 = \sum_{i=2}^d \sum_{\alpha=2}^n \int d^d r \left(\frac{\partial \phi_{\alpha}(r)}{\partial x_i} \right)^2 \quad (2.1.16)$$

entonces:

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^d \sum_{\alpha=2}^n \int d^d r \left(\frac{\partial \phi_{\alpha}(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right)^2 &= \sum_{i=2}^d \sum_{\alpha=2}^n \int d^d r \left(\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} (-ik_i \phi_{\alpha}(\mathbf{k})) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right)^2 \\ &= \sum_{i=2}^d \sum_{\alpha=2}^n \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} (-ik_i \phi_{\alpha}(\mathbf{k})) (-ik'_i \phi_{\alpha}(\mathbf{k}')) \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',0} \\ &= \sum_{i=2}^d \sum_{\alpha=2}^n \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} (k_i |\phi_{\alpha}(\mathbf{k})|)^2 = \sum_{i=2}^d \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k_i^2 |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k^2 |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2, \end{aligned}$$

por lo tanto

$$\int d^d r (\nabla \phi_{\perp})^2 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k^2 |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 \quad (2.1.17)$$

y de manera análoga:

$$\int d^d r (\nabla \phi_{\parallel})^2 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k^2 |\phi_{\parallel}(\mathbf{k})|^2 \quad (2.1.18)$$

Reescribiendo (2.1.15) en el espacio de Fourier:

$$-H_{\phi}\{\phi\} = \frac{m^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \left[|\phi_{\parallel}(\mathbf{k})|^2 (k^2 + 2|r_0|) + |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 k^2 \right] \quad (2.1.19)$$

Ahora, para calcular la función de correlación de dos puntos vemos que en equilibrio

térmico:

$$\begin{aligned}
\langle |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 \rangle &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k'} d\phi_{\perp}(\mathbf{k}') |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 e^{-\beta H}}{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k'} d\phi_{\perp}(\mathbf{k}') e^{-\beta H}} \\
&= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d|\phi_{\perp}(\mathbf{k})| |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^3 e^{-\beta \frac{m^2}{2V} [|\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 k^2]} \int_0^{2\pi} d\theta_{\phi_{\perp}}}{\int_{-\infty}^{\infty} d|\phi_{\perp}(\mathbf{k})| |\phi_{\perp}(\mathbf{k})| e^{-\beta \frac{m^2}{2V} [|\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 k^2]} \int_0^{2\pi} d\theta_{\phi_{\perp}}} \\
&= \left(-\beta \frac{m^2}{2V} k^2\right)^{-1}
\end{aligned}$$

por lo tanto

$$G_{\perp}(\mathbf{k}) \propto \langle |S_{\perp}(\mathbf{k})|^2 \rangle = \langle |\phi_{\perp}(\mathbf{k})|^2 \rangle = \left(-\beta \frac{m^2}{2V} k^2\right)^{-1} \quad (2.1.20)$$

$$G_{\perp}(\mathbf{k}) \propto k^{-2} \quad (2.1.21)$$

Usando la transformada inversa de Fourier:

$$G_{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \propto \int_0^{\infty} d^d k \frac{\exp i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{k^2} \quad (2.1.22)$$

sin embargo, $d^d k = k^{d-1} dk d\Omega(d)$, por lo tanto la integral en (2.1.22), para $k \approx 0$ se comporta como:

$$G_{\perp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx \int dk d\Omega(d) k^{d-3} \quad (2.1.23)$$

la cual diverge para $d \leq 2$.

Este resultado constituye el teorema de Mermin-Wagner [1], el cual postula que para sistemas estilo Heissenberg, con interacción local, no existe un orden de largo alcance que rompa una simetría continua si la dimensionalidad del sistema es $d \leq 2$ para $T \neq 0$. Con el análisis aquí realizado podemos ver que la simetría continua de la función Hamiltoniana provoca que la susceptibilidad (2.1.22) a las perturbaciones ortogonales a la magnetización sea infinita, por lo que la mínima variación térmica destruye el orden de largo alcance.

2.2 El modelo de Kuramoto

El modelo de Kuramoto consiste en N osciladores interactuantes θ_i de frecuencia natural ω_i distribuidos con una densidad de probabilidad $g(\omega)$. La dinámica de cada oscilador está

dada por [18]:

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + \sum_{j=1}^N K_{ij} \sin(\theta_j - \theta_i) \quad (2.2.1)$$

donde K_{ij} es una matriz de interacción que regula la intensidad y alcance de la interacción. En este modelo, cada agente intenta oscilar a su frecuencia natural ω_i , pero la interacción con los demás modificará su dinámica. El modelo es interesante porque para ciertas condiciones el sistema puede alcanzar un estado de completa o parcial sincronización. De esta forma, este modelo se volvió un paradigma para las transiciones dinámicas de orden-desorden y sobre todo una referencia obligada para los trabajos de sincronización. Se incluye este modelo en este capítulo porque posteriormente se analizará un sistema con una interacción equivalente a la de este modelo, y el análisis que se hará sobre la estabilidad del estado desordenado probará ser de mucha utilidad.

Para este modelo se puede definir el parámetro de orden vectorial de la siguiente manera:

$$r e^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j} \quad (2.2.2)$$

Por su definición necesariamente $0 \leq r \leq 1$, por lo que es un buen parámetro de orden. Este parámetro mide la coherencia de las fases θ_j . Al mismo tiempo, ψ nos dice cuál es la fase promedio. Para N suficientemente grande podemos tomar el límite continuo:

$$r e^{i\psi} = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta} P(\theta, \omega, t) g(\omega) d\omega d\theta, \quad (2.2.3)$$

donde $P(\theta, \omega, t)$ tiene que cumplir las condiciones de normalización y periodicidad:

$$\int_{-\pi}^{\pi} P(\theta, \omega, t) d\theta = 1 \quad (2.2.4a)$$

$$P(\theta + 2\pi, \omega, t) = P(\theta, \omega, t) \quad (2.2.4b)$$

2.2.1 Campo medio

El caso más sencillo es cuando el tensor K_{ij} es una constante $K_{ij} \equiv K/N$. Este es el caso de campo medio, cuya dinámica está gobernada por la ecuación:

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) \quad (2.2.5)$$

Al sustituir (2.2.2) en (2.2.5) obtenemos :

$$\begin{aligned}\dot{\theta}_i &= \omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) \\ &= \omega_i + Kr \sin(\psi - \theta_i)\end{aligned}$$

donde se usó que como consecuencia inmediata de (2.2.2)

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j) = \sin(\psi)$$

En el caso en que se forma una fase ordenada, la fase $\theta(t) \equiv \Omega$ se vuelve una constante, por lo que cambiando a un marco de referencia $\tilde{\theta}_i = \theta_i + \Omega t$ la interacción se ve de la forma:

$$\dot{\tilde{\theta}}_i = \omega_i - Kr \sin(\tilde{\theta}_i) \quad (2.2.6)$$

por lo cual, cada oscilador alcanza un estado estacionario $\dot{\theta}_j = 0$ si se cumple la condición:

$$|\omega_i| \leq |Kr| \quad (2.2.7)$$

Estos osciladores se van a quedar con una fase fija $\omega_i = Kr \sin(\theta_i)$, lo cual significa que en el marco de referencia original estos osciladores están rotando a velocidad constante. De acuerdo al número de osciladores que cumplan con la condición (2.2.7) será la magnitud del parámetro de orden r , y podremos tener estados de completa $r = 1$ o parcial $0 < r < 1$ sincronización. Dada una distribución $g(\omega)$ simétrica, se puede mostrar [19] que la condición para que se forme la fase parcialmente sincronizada es:

$$K \leq K_c = \frac{2}{\pi g(0)} \quad (2.2.8)$$

2.2.2 Campo medio con ruido blanco

Añadiéndole a la interacción (2.2.1) un término de ruido blanco se obtiene un modelo estocástico de sincronización, el cual nos será de gran utilidad, esto por varios motivos. Primero, la presencia del ruido lo hace más cercano a modelos biológicos, donde hay muchos

factores en juego que pueden modelarse como ruido en la interacción [18]. Segundo, la presencia del ruido le proporciona complejidad al modelo, pero de modo tal que puede analizarse mediante métodos usuales de la física estadística, como lo es la ecuación de Fokker-Planck. Esto nos será útil posteriormente en nuestro modelo.

Definiendo el ruido blanco ξ como se hizo en la sección (1.1) tenemos:

$$\langle \xi \rangle = 0 \quad (2.2.9)$$

$$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = 2D\delta(t-s) \quad (2.2.10)$$

y la dinámica de cada oscilador está dictada por:

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + \sum_{j=1}^N K_{ij} \sin(\theta_j - \theta_i) + \xi \quad (2.2.11)$$

que reescrita usando el parámetro de orden (2.2.2):

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + Kr \sin(\psi - \theta_i) + \xi \quad (2.2.12)$$

Para obtener la ecuación de Fokker-Planck correspondiente primero definimos $\nu(\theta, \omega, t)$:

$$\nu(\theta, \omega, t) \equiv \omega + Kr \sin(\psi - \theta) \quad (2.2.13)$$

Luego seguimos el procedimiento hecho en (1.1.2).

$$P(\theta, \omega, t) = \langle \delta(\theta - \theta(t)) \rangle g(\omega) \quad (2.2.14)$$

Siguiendo el caso anterior donde todos los osciladores tienen la misma frecuencia ω , $g(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$, podemos calcular:

$$P(\theta, t) = \int d\omega P(\theta, \omega, t) = \langle \delta(\theta - \theta(t)) \rangle$$

y así derivar la ecuación de Fokker-Planck:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\theta, t)}{\partial t} &= - \left\langle \frac{\partial}{\partial \theta} \dot{\theta}(t) \int dk e^{ik(\theta - \theta(t))} \right\rangle \\ &= - \left\langle \frac{\partial}{\partial \theta} (\nu + \xi) \delta(\theta - \theta(t)) \right\rangle \\ &= - \frac{\partial}{\partial \theta} P \nu - \frac{\partial}{\partial \theta} \langle \xi \delta(\theta - \theta(t)) \rangle \end{aligned}$$

De aquí es factible pensar que el término de ruido va a aportar una parcial de segundo orden a la ecuación de Fokker-Planck, tal como sucedio en la sección 1.1. Una demostración formal de este hecho se puede encontrar mediante integrales de trayectoria [18]

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial \theta^2} - \frac{\partial}{\partial \theta} (\nu P) \quad (2.2.15)$$

Una solución estacionaria trivial a esta ecuación de Fokker-Planck que cumple con las condiciones (2.2.4) es:

$$P(\theta) = \frac{1}{2\pi}, \quad r = 0, \quad (2.2.16)$$

la cual es simplemente una distribución uniforme que describe la fase ordenada. Como la ecuación de Fokker-Planck (2.2.15) es no lineal, es difícil resolverla analíticamente, sin embargo se puede realizar un análisis de estabilidad de primer orden para ver en qué punto la solución de desorden deja de ser estable, es decir, en qué momento aparecen otro tipo de soluciones, i.e. estados parcial o totalmente ordenados.

2.2.3 Estabilidad lineal del estado desordenado

En esta sección, mediante un análisis de estabilidad lineal de la ecuación de Fokker-Planck, encontraremos en qué punto el estado desordenado deja de ser estable para dar paso a formar una solución ordenada.

Primero perturbamos la solución (2.2.16) con una función de la siguiente forma:

$$P(\theta, \omega, t) = \frac{1}{2\pi} + e^{\lambda t} \mu(\theta, \omega) \quad (2.2.17)$$

Notemos que si $\text{Re}(\lambda) < 0$, con el transcurrir del tiempo la solución regresa al desorden, es decir, hay estabilidad de la solución desordenada. En cambio, si $\text{Re}(\lambda) > 0$ hay inestabilidad. Para saber cómo es λ analizamos la ecuación de Fokker-Planck.

Sustituyendo la nueva probabilidad perturbada en la ecuación de Fokker-Planck (2.2.15) obtenemos

$$\begin{aligned} \lambda\mu(\theta, \omega) = rK \cos(\psi - \theta) \left(\frac{e^{-\lambda t}}{2\pi} + \mu(\theta, \omega) \right) \\ - (rK \sin(\psi - \theta) + \omega) \frac{\partial}{\partial \theta} \mu(\theta, \omega) + D \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mu(\theta, \omega) \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

De la definición del parámetro de orden (2.2.3):

$$r = e^{-i\psi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta} \left(\frac{1}{2\pi} + e^{\lambda t} \mu(\theta, \omega) \right) g(\omega) d\omega d\theta \quad (2.2.19)$$

$$= e^{\lambda t - i\psi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta} \mu(\theta, \omega) g(\omega) d\omega d\theta \quad (2.2.20)$$

y notamos que r depende de $\mu(\theta, \omega)$. De regreso en la ecuación de Fokker-Planck, quedándonos sólo con términos lineales respecto a μ

$$\lambda\mu(\theta, \omega) = rK \cos(\psi - \theta) \frac{e^{-\lambda t}}{2\pi} - \omega \frac{\partial}{\partial \theta} \mu(\theta, \omega) + D \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mu(\theta, \omega) \quad (2.2.21)$$

Sustituyendo $r \cos(\psi - \theta) = \frac{r}{2} (e^{i\psi} e^{-i\theta} + e^{-i\psi} e^{i\theta})$, y el valor ya obtenido de r obtenemos:

$$\lambda\mu(\theta, \omega) = \frac{K}{2\pi} \text{Re} \left[e^{i\theta} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta'} \mu(\theta', \omega') g(\omega') d\omega' d\theta' \right] - \omega \frac{\partial}{\partial \theta} \mu(\theta, \omega) + D \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mu(\theta, \omega) \quad (2.2.22)$$

Exigiendo que μ sea univaluada resulta periódica en θ , por lo que podemos hacer una expansión en series de Fourier:

$$\mu(\theta, \omega) = \sum_{-\infty}^{\infty} A_m(\omega) e^{im\theta} \quad (2.2.23)$$

Notando que:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta'} \mu(\theta', \omega') g(\omega') d\omega' d\theta' = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta'} \sum_{-\infty}^{\infty} A_m(\omega) e^{im\theta} g(\omega') d\omega' d\theta' \quad (2.2.24)$$

$$= 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{-\infty}^{\infty} \delta_{m,-1} A_m(\omega) g(\omega') d\omega' \quad (2.2.25)$$

y sustituyendo en (2.2.22):

$$\begin{aligned} \lambda \sum_{-\infty}^{\infty} A_m(\omega) e^{im\theta} &= \frac{K}{2} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{-\infty}^{\infty} \delta_{m,-1} A_m(\omega) (\omega') g(\omega') d\omega' \\ &\quad - im\omega \sum_{-\infty}^{\infty} A_m(\omega) e^{im\theta} - Dm^2 \sum_{-\infty}^{\infty} A_m(\omega) e^{im\theta} \end{aligned} \quad (2.2.26)$$

Si se usa la ortogonalidad de las exponenciales obtenemos la siguiente condición para los coeficientes:

$$\begin{aligned} \lambda A_m(\omega) &= \frac{K}{2} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) \int_{-\infty}^{\infty} \delta_{m,-1} A_m(\omega') g(\omega') d\omega' \\ &\quad - im\omega A_m(\omega) - Dm^2 A_m(\omega) \end{aligned} \quad (2.2.27)$$

es decir

$$(\lambda + im\omega + Dm^2) A_m(\omega) = \frac{K}{2} \delta_{m,-1} \int_{-\infty}^{\infty} A_m(\omega') g(\omega') d\omega' \quad (2.2.28)$$

que muestra que es necesario conocer la distribución de frecuencias. En el caso sencillo de $g(\omega) = \delta(\omega)$, el cual será relevante en los siguientes capítulos, obtenemos:

$$(\lambda + Dm^2) A_m = \frac{K}{2} \delta_{m,-1} A_m \quad (2.2.29)$$

Resolviendo para λ :

$$\begin{aligned} \lambda &= -Dm^2 < 0 & m \neq -1 \\ \lambda &= \frac{K}{2} - D & m = -1 \end{aligned} \quad (2.2.30)$$

Esto muestra que podemos obtener $\lambda > 0$, y con esto un estado ordenado, si $K > 2D$. De esta manera obtenemos que para el modelo de Kuramoto con ruido blanco hay una transición orden-desorden en:

$$K_c = 2D \quad (2.2.31)$$

2.3 El modelo de Vicsek

2.3.1 Autopropulsión

En la sección (2.1.2) se revisó cómo para sistemas de baja dimensionalidad no hay transiciones de fase que rompan una simetría continua, no obstante, esto ocurre solo bajo ciertas condiciones. Por ejemplo, durante el desarrollo de esta restricción se usó implícitamente que el sistema está en equilibrio termodinámico con un baño térmico¹. Para evitar esta restricción se usan otro tipos de distribuciones, diferentes de la generada por el ensamble canónico. El ejemplo paradigmático de esto es el modelo de Vicsek, et al., publicado en 1995 [3]. Este modelo usa la llamada "autopropulsión", donde las partículas tienen una rapidez propia que está definida *a priori*, ajena a las propiedades del sistema. En esta situación la distribución de velocidades es una delta de Dirac en la componente radial, y una distribución uniforme en la angular, muy diferente a cualquier distribución de equilibrio, como lo sería la distribución de Maxwell-Boltzmann para partículas clásicas. El modelo de Vicsek es sumamente interesante, y al ser de los primeros en su género le ha ganado miles de citas en la literatura. En este modelo ocurre una transición de fase que rompe una simetría continua en un sistema bidimensional.

2.3.2 El modelo de Vicsek

El modelo de Vicsek consiste en un sistema de partículas que se mueven en una caja bidimensional con condiciones periódicas a la frontera. Las partículas están únicamente caracterizadas por su posición \vec{x}_i y su velocidad \vec{v}_i . Las partículas son autopropulsadas de manera que todas comparten una misma rapidez constante $|v_i| = v_0$. El modelo sigue una dinámica de tiempo discreto, donde en cada paso de tiempo las partículas intentan alinearse con todas aquellas que queden dentro de un radio de interacción constante R . Explícitamente, la regla de actualización a cada paso para la dirección de la velocidad de cada partícula es:

$$\theta_i(n+1) = \langle \theta(n) \rangle_r + \xi \quad (2.3.1)$$

¹Esto se usó al calcular los promedios justo debajo de la ecuación (2.1.19)

donde ξ es un número aleatorio elegido con probabilidad uniforme en un rango $[-\eta/2, \eta/2]$ y $\eta \in [0, 2\pi]$ es un parámetro a variar. $\langle \theta(n) \rangle_R$ es el promedio sobre ensambles de los ángulos de todas las partículas que caigan en el radio de interacción R en el paso n . Después la posición de cada partícula se actualiza con la siguiente regla:

$$\vec{x}_i(n+1) = \vec{x}_i(n) + \vec{v}_i(n)\Delta t \quad (2.3.2)$$

En resumen, la dinámica es muy sencilla. La velocidad de la partícula al siguiente paso de tiempo será simplemente la velocidad promedio de los vecinos más un número aleatorio y la posición se evaluará de acuerdo a la regla de Euler.

Como se puede observar, este modelo juega un papel parecido al que juegan los modelos de ferromagnetismo, salvo que no hay interacción entre espines, sino que sólo depende de las coordenadas \vec{x}_i y \vec{v}_i . El intento de alinearse es parecido a la interacción entre espines y el ruido es análogo a las fluctuaciones térmicas.

2.3.3 Transición de fase en el modelo de Vicsek

Variando la intensidad del ruido, es decir, ampliando el rango $[-\eta/2, \eta/2]$ en el cual ξ puede variar, se observan principalmente dos tipos de comportamiento: uno donde las partículas tienden a viajar alineadas (fase ordenada) y otro donde el comportamiento aleatorio prevalece y las partículas viajan en direcciones diferentes (fase desordenada). Para caracterizar estas fases se define un parámetro de orden ϕ como el promedio de las velocidades normalizado respecto a v_0 :

$$\phi = \frac{1}{v_0 N} \sum_i \vec{v}_i$$

De este modo el parámetro de orden varía de cero en la fase desordenada a valores entre cero y uno en la fase ordenada. La transición se da en un valor crítico del rango del ruido η_c que depende de la densidad ρ del sistema, y la transición está caracterizada como sigue [4]:

$$\phi(\eta) \sim \begin{cases} \left(\frac{\eta_c(\rho) - \eta}{\eta_c(\rho)} \right)^\beta & \text{con } \eta < \eta_c(\rho) \\ 0 & \text{con } \eta > \eta_c(\rho) \end{cases} \quad (2.3.3)$$

y se encuentra que $\beta = 0.45$, que es diferente del caso de campo medio $\beta = 0.5$

2.3.4 Recolección de resultados del modelo de Vicsek

Si analizamos el sistema cuando tomamos el límite $v_0 \rightarrow 0$, ocurre que las partículas no se mueven y forman una red irregular. En esta red, las partículas intentan alinear sus ángulos, esto de manera completamente análoga al modelo XY. De esta forma se observan los vórtices característicos de la transición de Kosterlitz-Thouless [4] y el parámetro de orden siempre es cero, salvo para el caso en el que no hay ruido. Cuando la autopropulsión de las partículas no es nula $v_0 \neq 0$, hay una transición de fase continua. En el caso desordenado existe una simetría rotacional dada por la isotropía propia del sistema, la cual se rompe al formarse la fase ordenada. En resumen, este modelo presenta una transición de fase que rompe una simetría continua en una situación de baja dimensionalidad. He aquí el porqué se volvió tan relevante ². En la misma discusión del artículo donde fue publicado este modelo, y en todas las consecuentes, se ha explicado que la autopropulsión es la responsable de que la transición esté permitida, y en base a esto se han generado una gran variedad de modelos donde siempre se incluye la autopropulsión.

²Además, por supuesto, de que el sistema tiene relevancia modelando diversos sistemas biológicos y físicos

Capítulo 3

Nuestro modelo

3.1 Nuestro modelo

Nuestro objetivo es entender la naturaleza de la transición de fase en los sistemas bidimensionales autopropulsados, al estilo del de Vicsek, et al. En estos sistemas, como se puede inferir de los capítulos anteriores, el teorema de Mermin-Wagner juega un rol fundamental. De acuerdo a este teorema, los modelos de interacción local que permanezcan en equilibrio termodinámico no podrán presentar transiciones de fase. Para la gran mayoría de los modelos se ha argumentado que la autopropulsión es clave para poder evitar las restricciones del teorema de Mermin-Wagner. Nuestra propuesta es que la interacción de alineamiento entre las partículas es la responsable del rompimiento de la simetría rotacional, y por ende de la transición de fase, y que la autopropulsión es prescindible para este tipo de fenómenos. Para mostrar esto construiremos un modelo que prescinde de autopropulsión y que considere únicamente interacción de alineamiento. Consideramos partículas brownianas que en ausencia de interacción están en equilibrio térmico, es decir, su distribución de velocidades corresponde a la de Maxwell-Boltzmann (fase desordenada). Al aumentar la magnitud de la interacción hasta un valor crítico se espera una transición de fase que rompa la simetría rotacional. De este modo, la interacción misma es la que lleva al sistema fuera de equilibrio y permite que ocurra la transición.

3.1.1 Descripción del modelo

En una caja bidimensional con condiciones periódicas a la frontera tenemos N partículas brownianas en equilibrio con un baño térmico a temperatura T . Para describir su dinámica usaremos la ecuación de Langevin para movimiento browniano (1.1.2)

$$m\dot{\vec{v}}_i = -\gamma\vec{v}_i + \vec{\xi}_i + \vec{F}_i, \quad (3.1.1)$$

donde \vec{F}_i es la fuerza sobre la i -ésima partícula debido a aquellas que la circundan, y los demás términos tienen la misma interpretación que se les dio en la sección 1.1. De este modo garantizamos que en ausencia de interacción recuperamos todos los resultados anteriores, entre ellos la distribución de Maxwell-Boltzmann. Una ecuación genérica como esta ya ha sido analizada en otros modelos [20].

El término de interacción intenta alinear la dirección de movimiento de una partícula en la dirección promedio de las partículas que la rodean en una vecindad definida por un radio de interacción R . Esta interacción es función únicamente de la posición y velocidad de las partículas que residen en la vecindad, de modo que para caracterizar un estado del sistema sólo bastará conocer la posición \vec{x}_i y velocidad \vec{v}_i de cada partícula. La interacción se construirá de modo que no afecte la rapidez de las partículas (esto con el objetivo de que la distribución de rapidez sea únicamente consecuencia del ruido blanco, es decir, del baño térmico), que dependa de un radio de interacción constante (para que sea local) y que solo dependa de la velocidad de las partículas. Para lograrlo proponemos el siguiente término de interacción:

$$\vec{F}_i = \Gamma \left[\vec{f}_i - \hat{v}_i(\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i) \right] \quad (3.1.2)$$

donde Γ es una constante que permitirá modular la magnitud de la interacción y \vec{f}_i es simplemente la suma de las direcciones de las partículas que están en su vecindad Ω_i definida por el radio de interacción :

$$\vec{f}_i = \frac{1}{N_{\Omega_i}} \sum_{i \in \Omega_i} \hat{v}_i \quad (3.1.3)$$

Esta forma para la interacción resulta de que en tres dimensiones:

$$\vec{F}_i = \Gamma \left[\hat{v}_i \times (\vec{f}_i \times \hat{v}_i) \right] = \Gamma \left[\vec{f}_i - \hat{v}_i (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i) \right] \quad (3.1.4)$$

Lo cual nos asegura que cuando la velocidad es paralela a la dirección de movimiento \vec{f}_i la fuerza de alineamiento se anula ($\vec{f}_i \times \hat{v}_i = 0$). Esto también asegura que la fuerza siempre es ortogonal a la velocidad: por lo que no afecta la rapidez de las partículas:

$$\vec{F}_i \cdot \hat{v}_i = \Gamma \left[\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i - (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i) \right] = 0 \quad (3.1.5)$$

De esta manera la única componente no nula es la que está en dirección ortogonal a la velocidad, que denotaremos por $\hat{\theta}_i$. En notación de coordenadas:

$$\begin{aligned} \vec{F}_i \cdot \hat{\theta}_i &= \Gamma \left[\vec{f}_i \cdot \hat{\theta}_i - \hat{v}_i \cdot \hat{\theta}_i (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i) \right] \\ &= \Gamma \vec{f}_i \cdot \hat{\theta}_i \\ &= \Gamma f_i \sin(\theta_f - \theta_i) \end{aligned}$$

en donde θ_f la dirección del parámetro de orden local f_i . Notemos que esta expresión corresponde con el término de interacción de Kuramoto (2.2.1) con $\omega \equiv 0$.

3.1.2 Ecuaciones de movimiento

Sustituyendo explícitamente la forma de la interacción en la ecuación (3.1.1)

$$m\dot{\vec{v}}_i = -\gamma\vec{v}_i + \vec{\xi}_i + \Gamma \left[\vec{f}_i - \hat{v}_i (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i) \right] \quad (3.1.6)$$

y discretizando las ecuaciones obtenemos:

$$mv_{ix}(t + \Delta t) = mv_{ix}(t) - \gamma v_{ix}(t)\Delta t + \xi_x \Delta t + \Gamma \left[f_{ix} - \frac{v_{ix}(t)}{v(t)} (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i(t)) \right] \Delta t$$

$$mv_{iy}(t + \Delta t) = mv_{iy}(t) - \gamma v_{iy}(t)\Delta t + \xi_y \Delta t + \Gamma \left[f_{iy} - \frac{v_{iy}(t)}{v(t)} (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i(t)) \right] \Delta t$$

Para proseguir, a $\xi_x \Delta t$ lo sustituimos por $\sqrt{2\gamma k_B T \Delta t / m} \Delta W_x$, donde ΔW_x es un proceso de Wiener que tiene una distribución de probabilidad gaussiana con media cero y varianza

unitaria. Como ambas ecuaciones son completamente análogas, analizamos sólo la componente x :

$$mv_{ix}(t + \Delta t) = mv_{ix}(t) - \gamma v_{ix}(t)\Delta t + \sqrt{2\gamma k_B T \Delta t / m} \Delta W_x + \Gamma \left[f_{ix} - \frac{v_{ix}(t)}{v(t)} (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i(t)) \right] \Delta t$$

Usando m/γ como escala de tiempo y $\sqrt{2k_B T/m}$ como escala de velocidad, se obtiene la ecuación adimensional:

$$\tilde{v}_{ix}(t + \Delta t) = \tilde{v}_{ix}(t) - \tilde{v}_{ix}(t)\Delta t + \Delta W_x \sqrt{\Delta t} + \tilde{\Gamma} \left[f_{ix} - \frac{\tilde{v}_{ix}(t)}{\tilde{v}(t)} (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i(t)) \right] \Delta t \quad (3.1.7)$$

y se obtiene un resultado análogo para la coordenada y . La notación de los parámetros adimensionales puede ser incómoda, por lo que de aquí en adelante con Γ nos referiremos al parámetro adimensional. Así se han reducido los parámetros de nuestro sistema a sólo aquellos mínimamente indispensables, a saber:

- El parámetro adimensional Γ que mide qué tan fuerte es la interacción
- El radio de interacción adimensional R ¹
- La densidad de partículas ρ

3.1.3 Parámetro de orden

Lo que se espera del modelo es que presente un comportamiento tipo parvada, y necesitamos tener un parámetro de orden que mida cuando las partículas empiezan a moverse en una misma dirección. Para este fin se propuso el siguiente parámetro:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \hat{v}_i \quad (3.1.8)$$

Así, en la fase desordenada, donde todas las direcciones son igualmente probables la suma se hará cero, y cuando empiece a existir una dirección colectiva de movimiento será positivo y menor igual a uno.

¹Como la escala de velocidad es $\sqrt{2k_B T/m}$ y la de tiempo m/γ , este parámetro fue adimensionalizado con el producto $\sqrt{2k_B T m/\gamma}$

3.2 Implementación computacional

Para analizar nuestro modelo se realizaron simulaciones computacionales. Para lograrlo se implementó una rutina en el lenguaje C++, la cual no sólo mide los promedios de las observables de interés sino que también es capaz de realizar simulaciones visuales.

3.2.1 Solución a las ecuaciones

Debido a que la interacción es local y depende de la velocidad, no se pudo encontrar una solución analítica a la ecuación diferencial que rige la dinámica. Lo que se hizo para realizar la simulación fue plantear las ecuaciones diferenciales adimensionales para cada partícula y resolverlas numéricamente. Esto se hizo principalmente mediante dos métodos, el método de Euler y el método de Verlet. Así las ecuaciones para cada coordenada de cada partícula quedan de la siguiente forma:

- Método de Euler

$$v_{ix}(t + \Delta t) = v_{ix}(t) - a(x_{ix}(t), v_{ix}(t))\Delta t + \Delta W\sqrt{\Delta t} \quad (3.2.1)$$

$$x_{ix}(t + \Delta t) = x_{ix}(t) + x_{ix}(t)\Delta t \quad (3.2.2)$$

- Método de Verlet

$$x_{ix}(t + \Delta t) = x_{ix}(t) + x_{ix}(t)\Delta t + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 a(x_{ix}(t), v_{ix}(t)) \quad (3.2.3)$$

$$v_{iaux}(t + \Delta t) \equiv v_{ix}(t) - \frac{1}{2}a(x_{ix}(t), v_{ix}(t))\Delta t \quad (3.2.4)$$

$$v_{ix}(t + \Delta t) = v_{ix}(t) + \frac{1}{2} [a(x_{ix}(t), v_{ix}(t)) + a(x_{ix}(t + \Delta t), v_{iaux}(t + \Delta t))] \Delta t + \Delta W\sqrt{\Delta t} \quad (3.2.5)$$

Siendo en ambas

$$a(x_{ix}(t), v_{ix}(t)) = -v(t) + \Gamma \left[f_{ix} - \frac{v_i(t)}{v(t)} (\vec{f}_i \cdot \hat{v}_i(t)) \right]$$

3.2.2 Cálculo de la interacción

el revisar cuáles partículas caen dentro del radio de interacción presupone un gran costo computacional, por lo que se decidió hacer una aproximación para evitar realizar el cálculo

directamente. Se discretizó el espacio mediante una cuadrícula. De esta manera la posición \vec{x}_i de cada partícula se vuelve irrelevante y sólo importa en qué celda C_j del espacio se encuentra. Como consecuencia natural el radio de interacción también se discretiza. En lugar de medir distancias, se mide a qué número de celdas vecinas llega la interacción, como se muestra en la figura. De este modo no se realiza el cálculo de la distancia entre partículas, lo que es muy costoso computacionalmente, sino que simplemente se calcula la interacción de la partícula con todas las pertenecientes a las celdas vecinas. Usando un número apropiado de celdas ² se logran obtener resultados prácticamente indistinguibles de aquellos obtenidos calculando el radio de interacción de la manera usual.

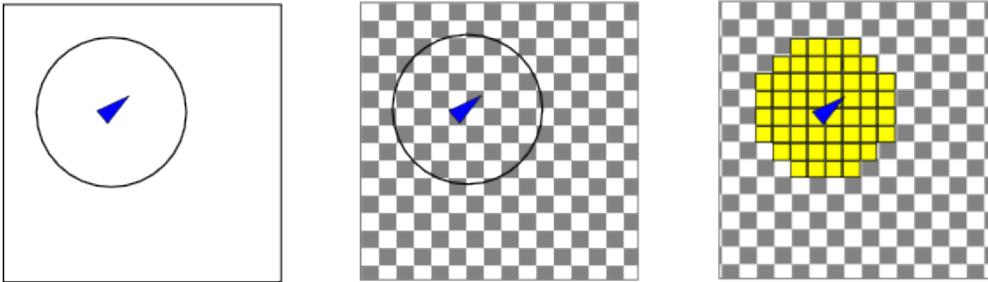


Figura 3.1: Discretización del espacio y radio de interacción

Dado que la interacción es sólo una suma de vectores, el cálculo se puede optimizar aún más asignando a cada celda el valor de la suma de las direcciones de las velocidades de todas sus partículas. De este modo a cada partícula sólo habrá que sumarle el valor global de cada celda:

$$\vec{f}_i = \frac{1}{N_{\Omega_i}} \sum_{i \in \Omega_i} \hat{v}_i = \frac{1}{N_{\Omega_i}} \sum_j \sum_{i \in C_j} \hat{v}_i = \frac{1}{N_{\Omega_i}} \sum_j \vec{f}_j \quad (3.2.6)$$

²el número de celdas se eligió heurísticamente

3.2.3 Visualización

Además de calcular cantidades relevantes, como el parámetro de orden, el programa que se realizó es capaz de mostrar una visualización gráfica en tiempo real.

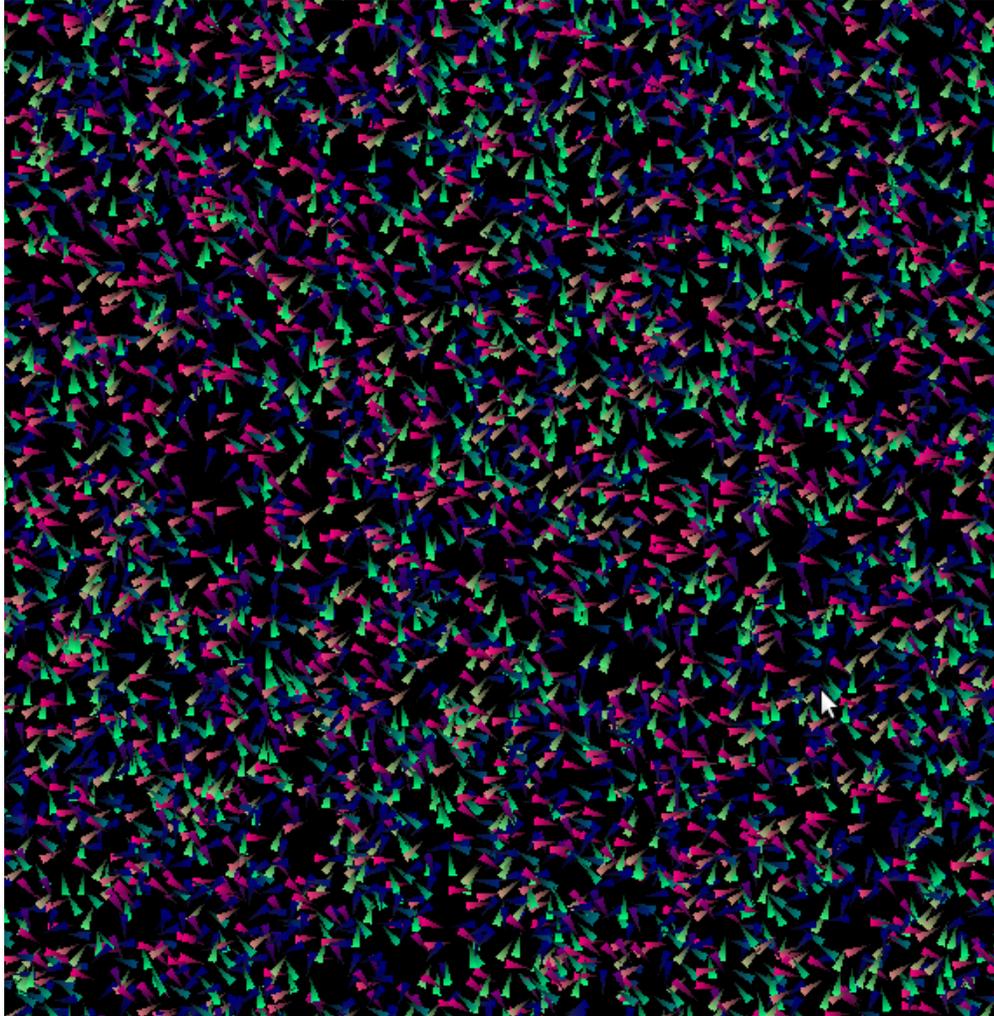


Figura 3.2: Una imagen del programa corriendo en el estado desordenado. No se observa formación de fases

En la imagen cada triángulo es una partícula. Tanto la orientación del triángulo como su color están dados por la dirección de su vector velocidad. El color ayuda a ver claramente la formación de fases.

3.2.4 Parámetros

Los parámetros para cada simulación fueron los siguientes:

- El parámetro adimensional Γ que mide qué tan fuerte es la interacción
- El radio de interacción R
- El número de partículas N
- El tamaño de la caja R_{max}
- El paso de tiempo dt
- El número de celdas N_c

3.2.5 Condiciones iniciales y a la frontera

En todas las simulaciones realizadas se usaron condiciones a la frontera periódicas y condiciones iniciales aleatorias. Para la posición y la velocidad se usaron las distribuciones de equilibrio en ausencia de interacción como condiciones iniciales, lo cual se traduce en una distribución homogénea en el espacio para la posición, y una distribución gaussiana para la velocidad.

Capítulo 4

Resultados

Resultados

A continuación se presentan los resultados obtenidos de implementar la rutina de C++ descrita en el capítulo anterior. Para todas las corridas se usó el método de integración de Euler, con un paso de tiempo de $dt = 0.005$. Aún cuando no se presentan en esta tesis, los resultados fueron cotejados con otros pasos de tiempo y el método de integración de Verlet, sin presentar diferencias de interés físico. Igualmente, se usó una retícula de 100×100 celdas para discretizar el espacio. De nuevo esto se cotejó con otras densidades de celdas. Es así que los parámetros disponibles a variar son sólo las de interés físico:

- El parámetro adimensional Γ que mide qué tan fuerte es la interacción
- El radio de interacción R
- El número de partículas N
- El tamaño de la caja $Rmax$

4.0.6 Evidencia visual

Lo primero que se realizó fue comprobar visualmente la existencia de dos fases.

Así, cualitativamente se comprobó que para un gran rango de los parámetros existía un valor de la interacción Γ tal que el sistema se ordenaba. No se encontraron regiones donde

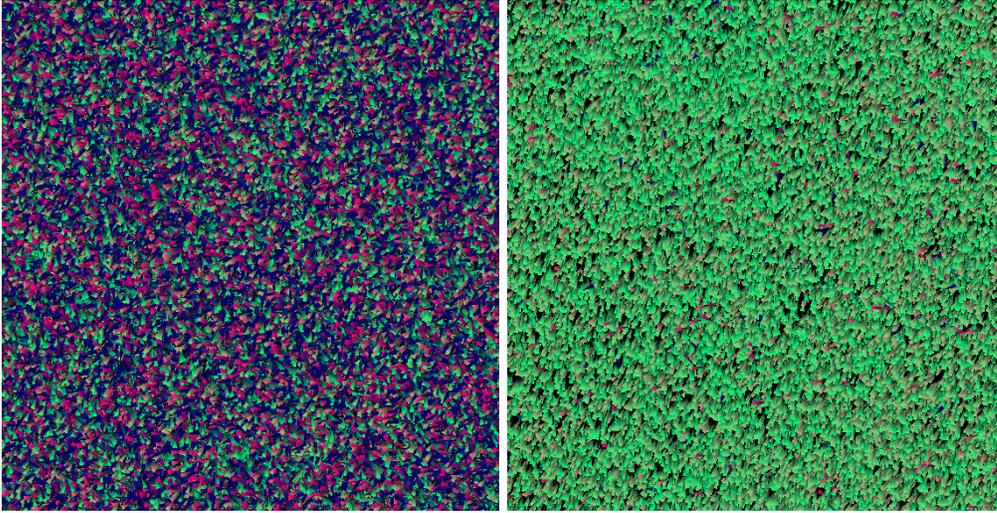


Figura 4.1: Comprobación visual de la existencia de ambas fases.

cualitativamente no se observara la formación de esta fase. Todas las corridas que a continuación se presentan se revisaron visualmente para elegir los parámetros más representativos.

4.0.7 M vs Γ

Se realizaron corridas variando el parámetro Γ y midiendo promedios temporales del parámetro de orden $\langle M \rangle$. A continuación haremos un análisis detallado mostrando cuidadosamente qué ocurre al variar cada resultado por separado.

Radio

Se fijaron valores de tamaño de la caja $R_{max} = 1$ y el número de partículas $N = 50,000$, obteniendo así una densidad constante. Usando un paso de integración de 0.005 se fijó un valor inicial de Γ . Se dejó el sistema evolucionar durante 1000 pasos de tiempo, y luego se midieron promedios durante 10,000 pasos para obtener un valor de $\langle M \rangle$ correspondiente a ese punto de Γ . Posteriormente se aumentó ligeramente el valor de Γ y se repitió el proceso, obteniendo así los valores de $\langle M \rangle$ para un valor del radio R .

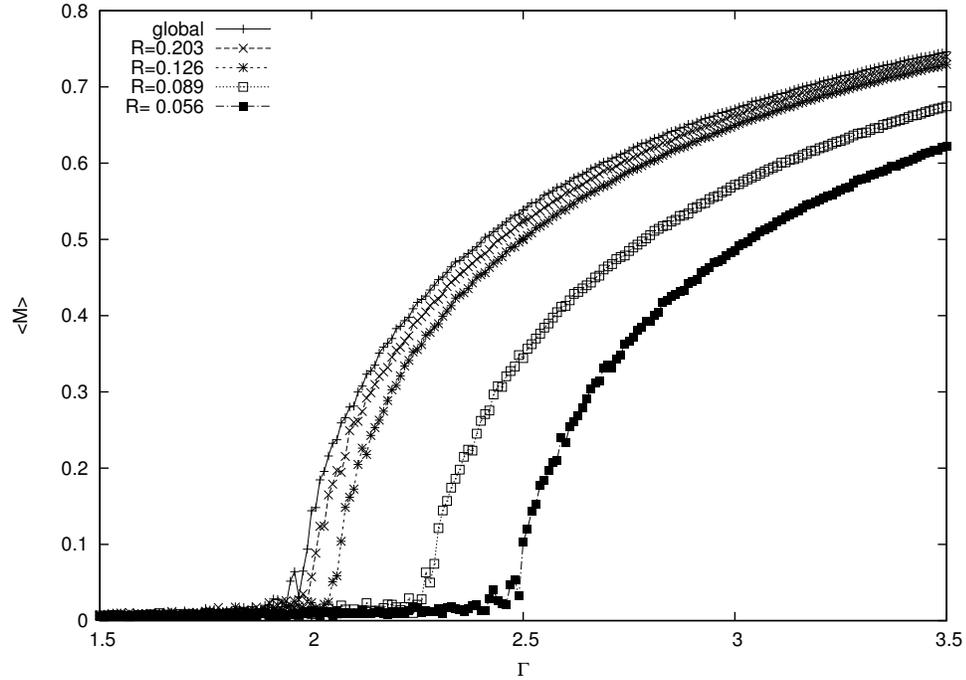


Figura 4.2: Gráfica del parámetro de Orden para diferentes valores del radio de interacción R

Número de partículas

Se presentan ahora los resultados para cuando el radio de interacción está fijo $R = 0.01$ y se varía el número de partículas (figura 4.3).

Densidad

Las siguientes corridas se obtuvieron seleccionando valores de R_{max} , N y R de tal modo que el número de vecinos promedio $N\Omega \equiv \rho\pi R^2$ se mantuviera constante, donde se definió la densidad de partículas $\rho = \frac{N}{R_{max}^2}$. Por economía computacional sólo se muestra el parámetro de orden cerca de la región del cambio de fase Fig. (4.4). Para estos casos los pasos de integración aumentaron a 40000 por punto

Interacción Global

Cuando el radio de interacción R es infinito se tiene el caso de interacción global, donde todas las partículas interactúan con todas. En este caso la transición está dada en $\Gamma_c = 2$ independientemente de los demás parámetros, como se puede comprobar en la gráfica (4.5)

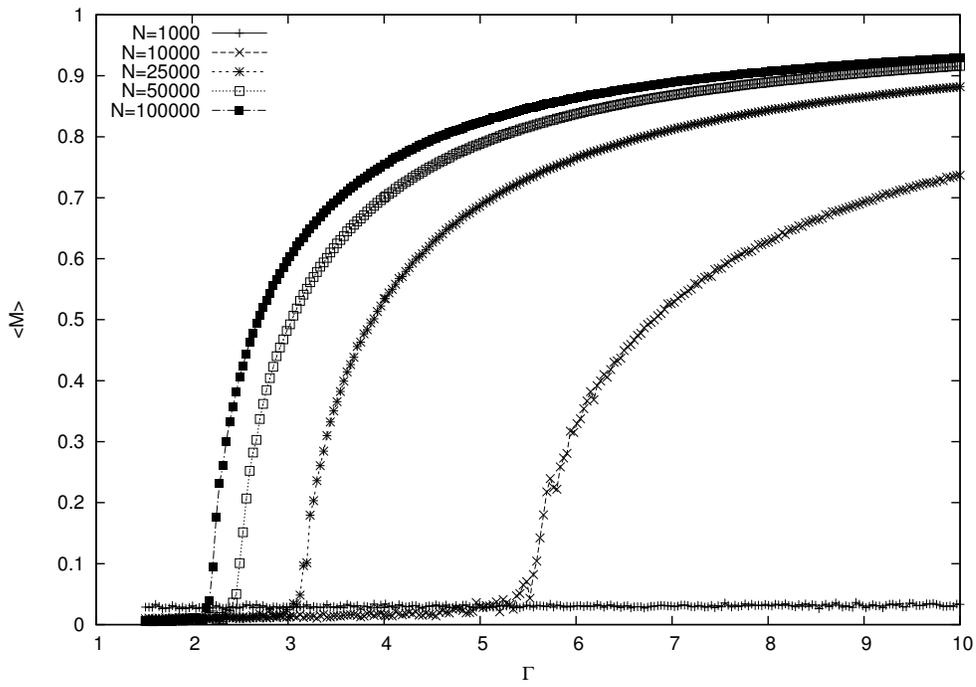


Figura 4.3: Comportamiento del parámetro de orden respecto a diferentes valores de N

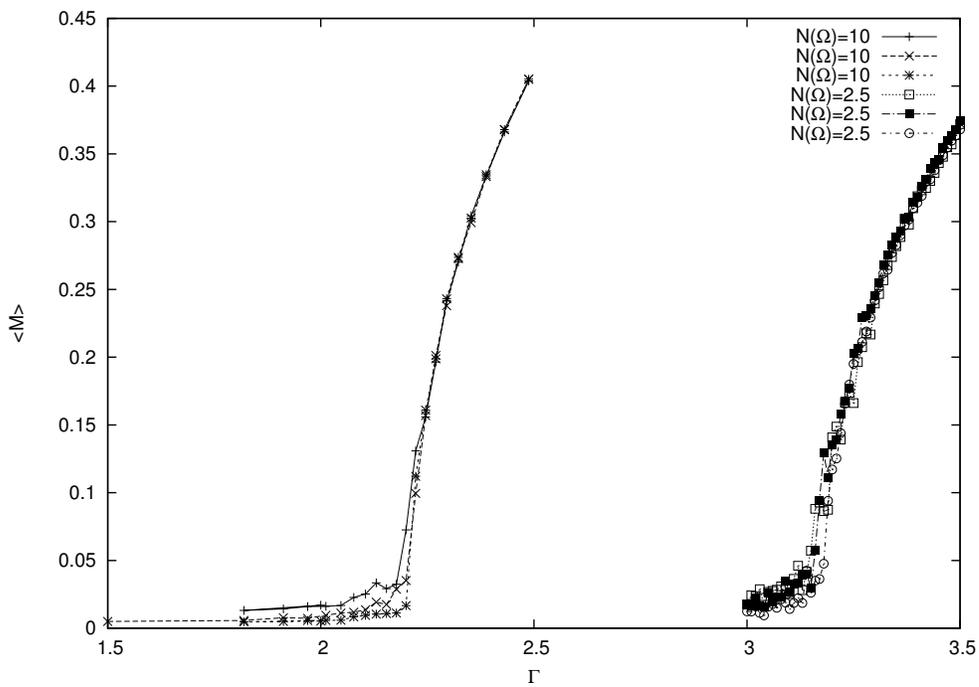


Figura 4.4: Transición para diferentes valores del número de vecinos $N(\Omega)$

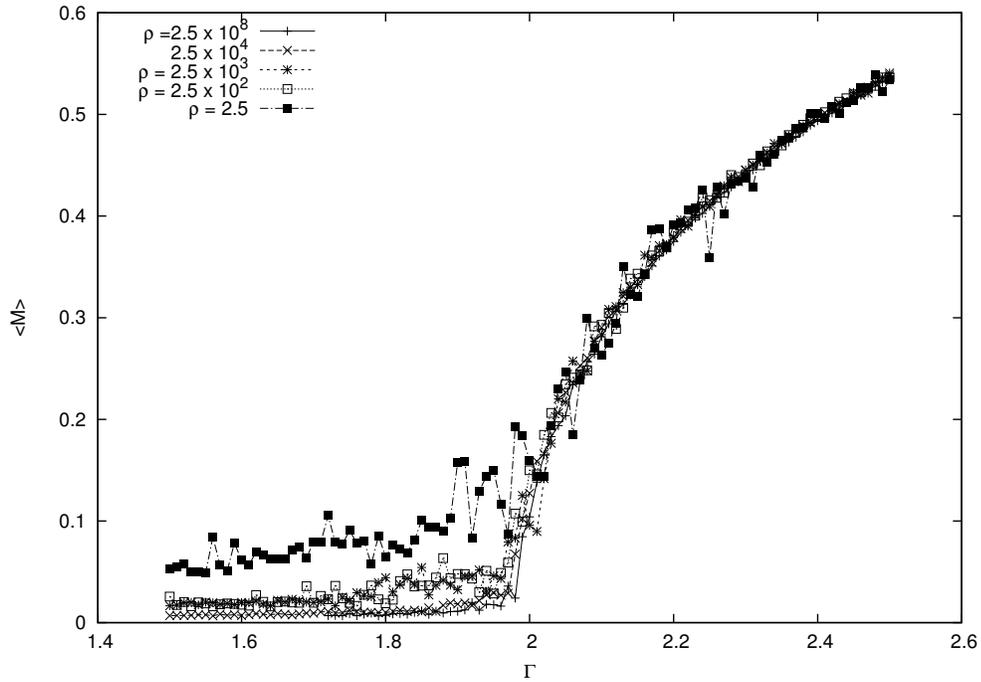


Figura 4.5: Interacción global para diferentes valores de los parámetros

4.0.8 Fluctuaciones del parámetro de orden

La susceptibilidad χ del parámetro de orden, calculada como la varianza de M ,

$$\chi = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2,$$

nos da información importante acerca de la transición y de la localización del punto crítico Γ_c . En la figura (4.6) se muestra la susceptibilidad para el caso de $\rho = 10^5$ para diferentes números de partículas. En la gráfica se muestra el valor promedio de siete corridas, en donde en cada una se integró durante 40000 pasos, y dejando relajar el sistema 4000 pasos entre cada valor de Γ

De igual manera el cumulante de Binder, relacionado con el cuarto momento de M , nos ayuda a localizar el punto de la transición. El cumulante de Binder en este caso está dado por la expresión:

$$M_{\text{Binder}} = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}$$

En la figura (4.7) presentamos de nuevo el caso de $\rho = 10^5$ para diferentes números de partículas.

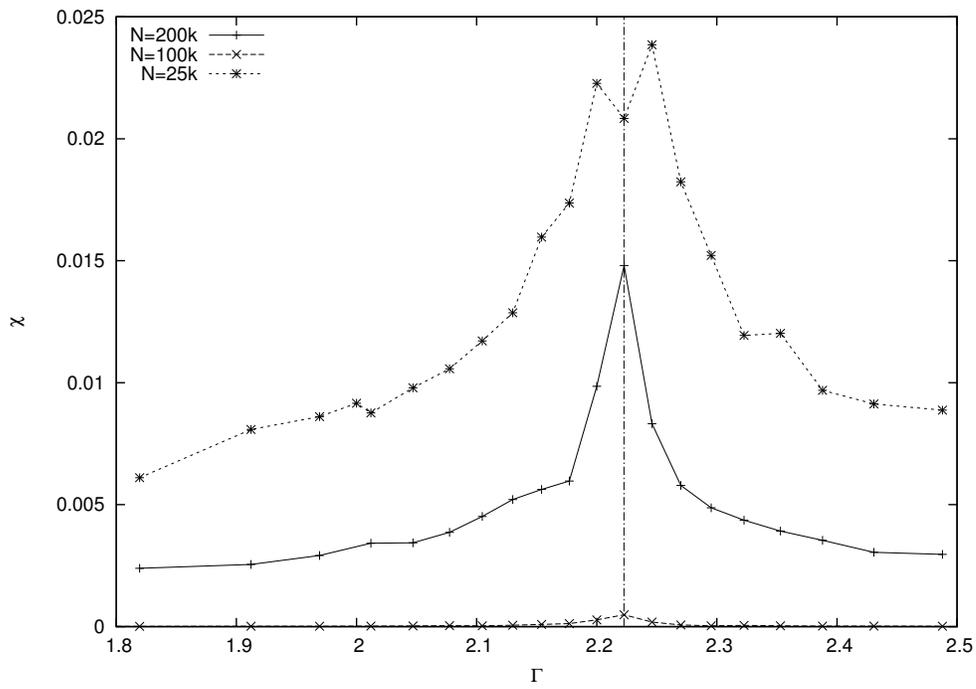


Figura 4.6: Gráfica de la susceptibilidad para densidad constante

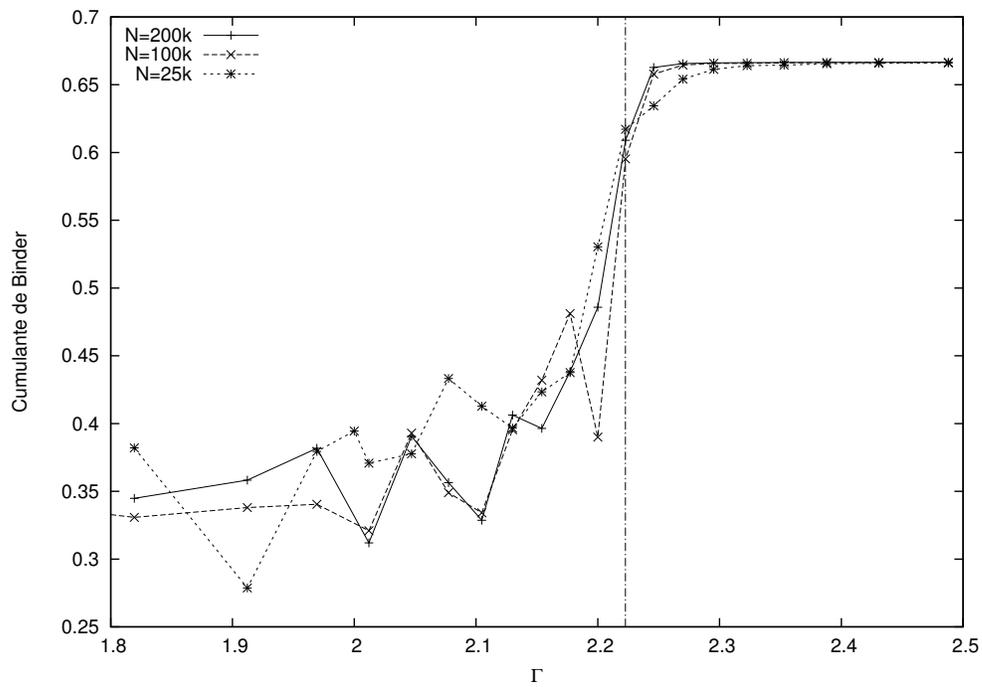


Figura 4.7: Gráfica del cumulante de Binder para densidad constante. Se ha indicado con una línea vertical punteada el punto de intersección

4.0.9 Reescalamiento

Si en lugar de usar el parámetro Γ se usa el nuevo parámetro $\tilde{\Gamma} = \Gamma/\Gamma_c$, todas las simulaciones tienen el mismo comportamiento sin importar los parámetros usados, como se muestra en la figura 4.8

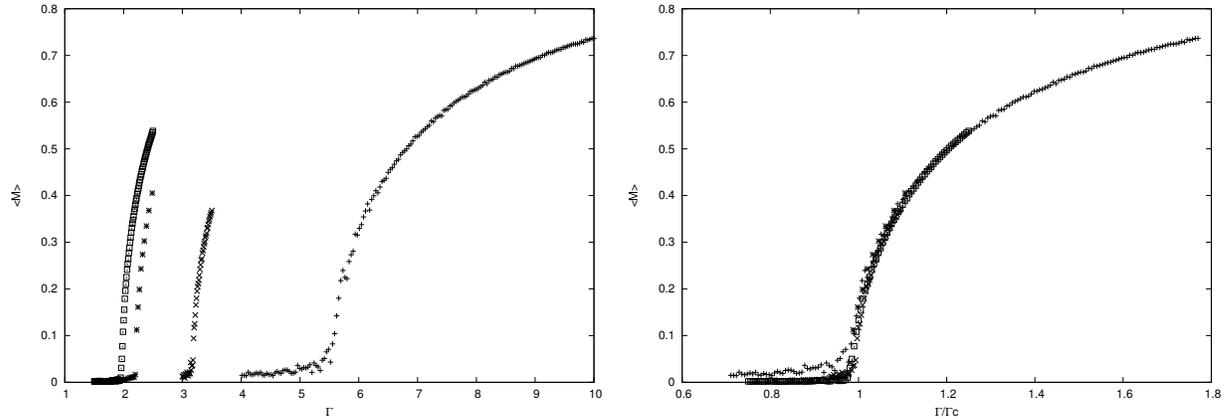


Figura 4.8: Gráfica del parámetro de orden para múltiples parámetros contra Γ (izq.) y contra $\tilde{\Gamma} = \Gamma/\Gamma_c$ (der.)

Con este nuevo parámetro la transición se encuentra siempre en $\tilde{\Gamma} = 1$, y tenemos el caso subcrítico para $0 \leq \tilde{\Gamma} < 1$ y el supercrítico para $\tilde{\Gamma} > 1$.

Exponente crítico

Definiendo $h = \tilde{\Gamma} - 1$, y usando que $\beta = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\ln(M(h))}{\ln(h)}$ obtenemos la gráfica 4.9. Es importante mencionar que la pendiente de la regresión lineal es altamente susceptible a la selección de Γ_c . En la gráfica se presentan los resultados usando $\Gamma_c \equiv 2$ para el caso global, el cual es un resultado que posteriormente podremos justificar.

4.0.10 Homogeneidad espacial

Un resultado de sumo interés es que para densidades altas, el sistema es homogéneo en su distribución espacial tanto para la fase ordenada como para la desordenada. Para construir las siguientes gráficas se dividió el espacio en J cuadrantes L_j , y en cada uno de ellos se calculó tanto el parámetro de orden local $f_j = \frac{1}{N_{L_j}} \sum_{j \in L_j} \hat{v}_j$ como el número de ocupación

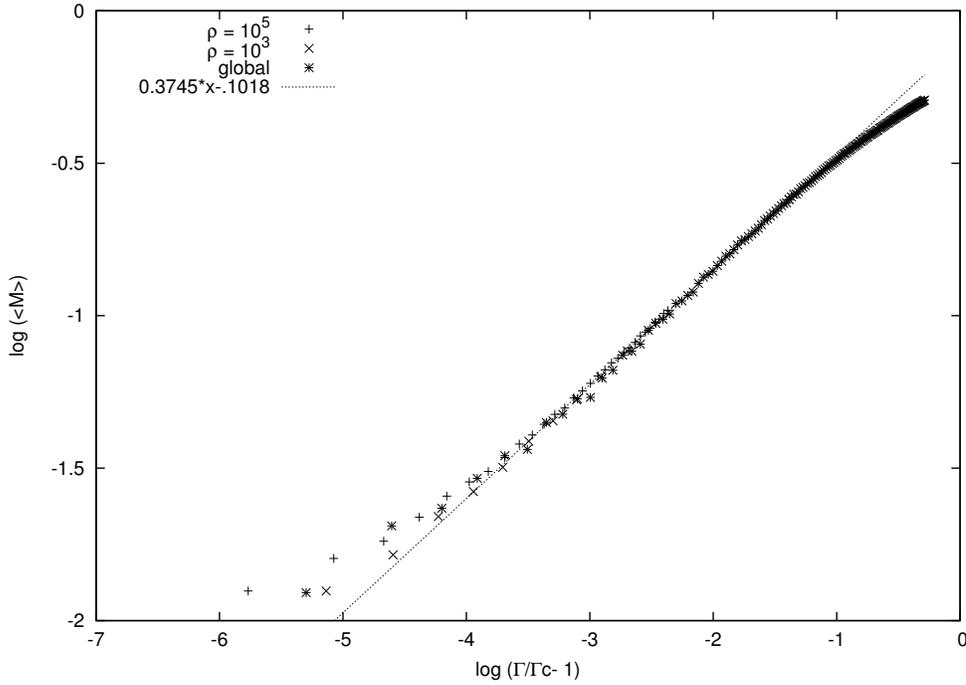


Figura 4.9: Regresión lineal para obtener el exponente crítico $\beta = 0.37$

N_j . Cabe destacar que la división en cuadrantes L_j se hizo de manera independiente a la discretización en celdas C_j del espacio hecha para realizar las simulaciones. Para el número de partículas por celda N_j se comparó con la distribución de Poisson, con media igual al número total de partículas entre el número de cuadrantes $\mu = \frac{N}{J}$. Se muestran los resultados para una densidad de $\rho = 10^5$ (Figura (4.10))

Para el parámetro de orden local no se cuenta todavía con predicción teórica. (Figura (4.11))

4.0.11 Distribución de velocidades

La distribución de velocidades nos sirve para caracterizar el estado del sistema.

Para $\tilde{\Gamma} < 1$ se obtuvo invariablemente la distribución Maxwell-Boltzmann. En la figura (4.12) se muestran los resultados para el caso global con $N = 1 \times 10^6$ partículas. Para obtener la distribución se dejó equilibrar durante 1000 pasos el sistema y se tomó una fotografía del sistema. Se hizo el histograma de las velocidades de todas las partículas.

Para $\tilde{\Gamma} > 1$ el sistema elige una dirección arbitraria de movimiento, por lo que se rompe

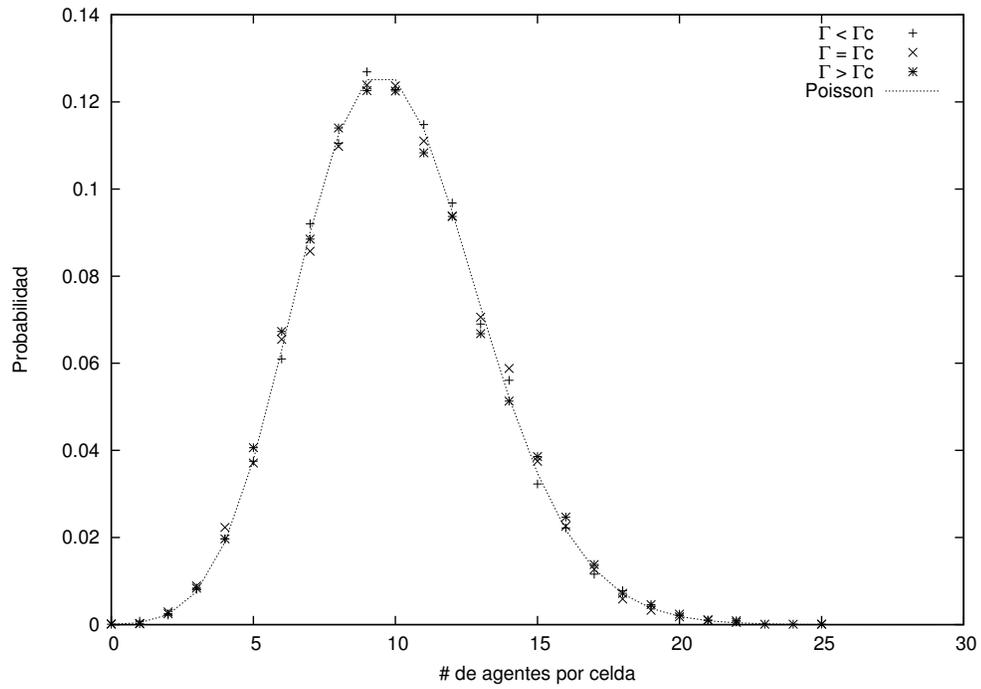


Figura 4.10: Probabilidad de que un cuadrante L_j cualquiera tenga N_j partículas.

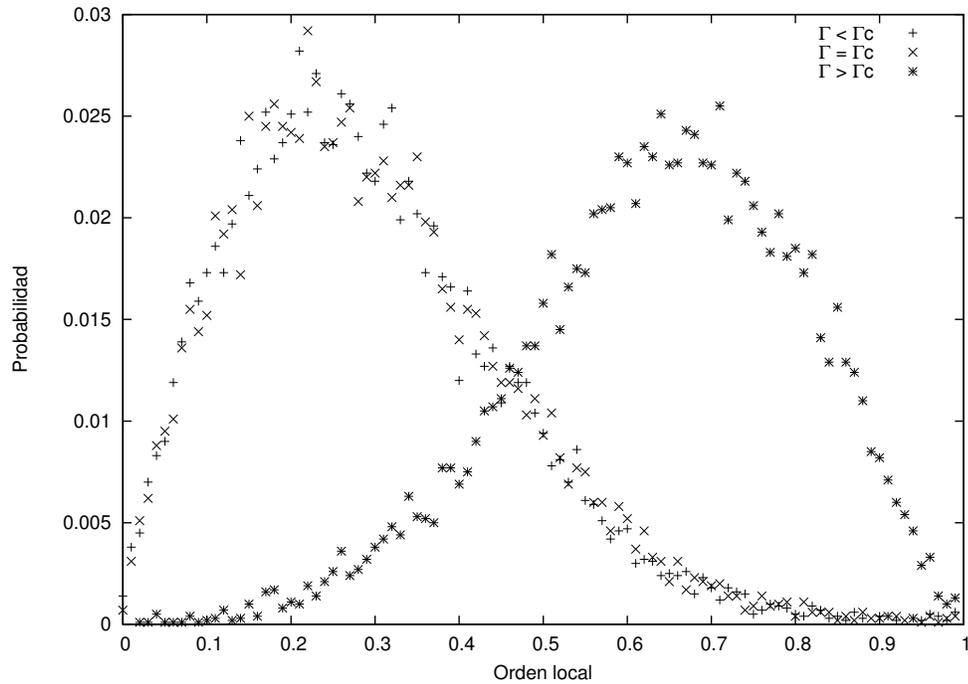


Figura 4.11: Probabilidad de que un cuadrante L_j cualquiera tenga un parámetro de orden f_j para el caso subcrítico +, crítico \times y supercrítico $*$.

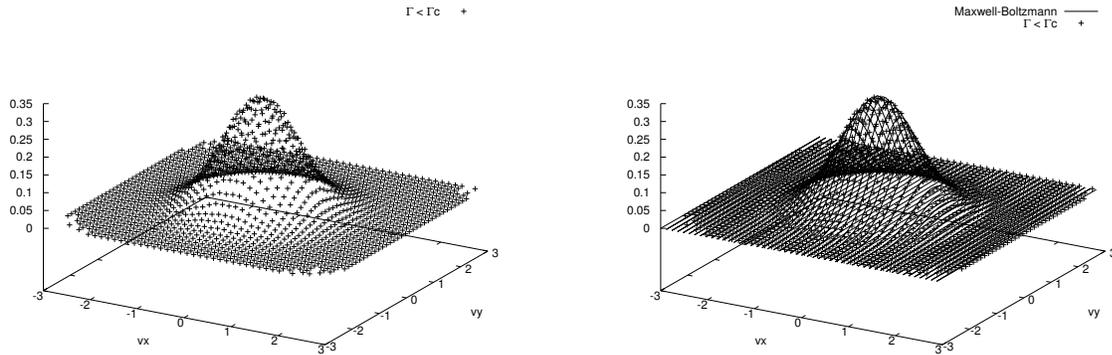


Figura 4.12: Caso subcrítico y de interacción global. A la izquierda los resultados numéricos. A la derecha de nuevo los resultados más la distribución de Maxwell-Boltzmann

la simetría rotacional. Ahora la forma de la distribución depende del valor de Γ . En la figura (4.13) se muestra la distribución de velocidad para el caso de interacción global con $N = 1 \times 10^6$ partículas y $\tilde{\Gamma} = 1.24$

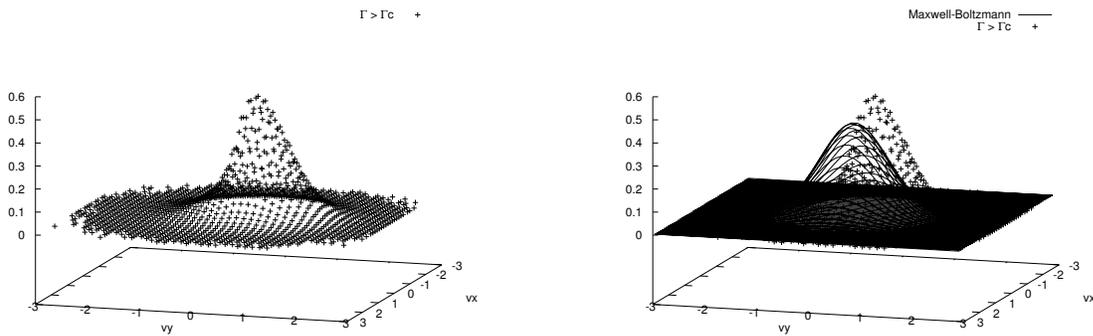


Figura 4.13: Caso supercrítico y de interacción global. A la izquierda los resultados numéricos de la distribución estacionaria de velocidades. A la derecha la comparación con la distribución de Maxwell-Boltzmann correspondiente al caso subcrítico

Para un mejor análisis se descompuso el vector velocidad en su magnitud (componente radial) y su dirección (componente angular)

Distribución radial

La distribución radial de la velocidad, correspondiente a la rapidez, fue invariante sin importar el valor de $\tilde{\Gamma}$. En la figura (4.14) se ve la distribución de velocidades. La discrepancia que hay con la predicción teórica se encontró para toda $\tilde{\Gamma}$. Se sospecha que la causa de esta discrepancia sean efectos numéricos.

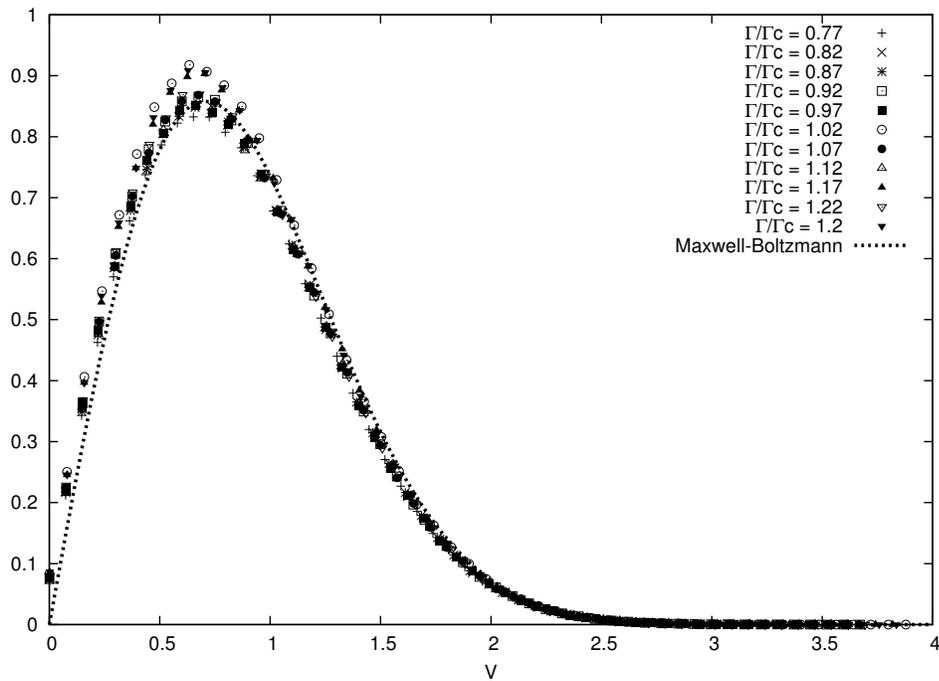


Figura 4.14: Histograma de la rapidez de las partículas

Distribución angular

La distribución angular contiene toda la información de la transición de fase. Para Γ subcrítica tenemos una distribución uniforme en los valores de los ángulos de la velocidad, pero para Γ supercrítica tenemos una distribución muy diferente, cuya forma depende específicamente de cada valor de Γ , como se ve en la figura (4.15)

Se verificó experimentalmente que la dirección angular no cambiase con respecto al tiempo. A continuación (gráfica 4.16) se muestra el ángulo promedio vs pasos de tiempo para un caso supercrítico cualquiera.

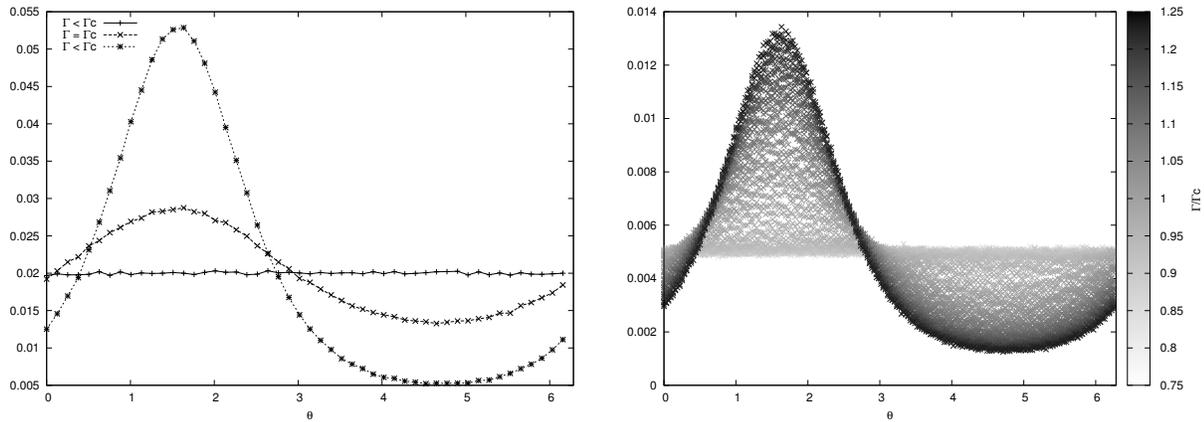


Figura 4.15: Histogramas de la distribución de ángulos

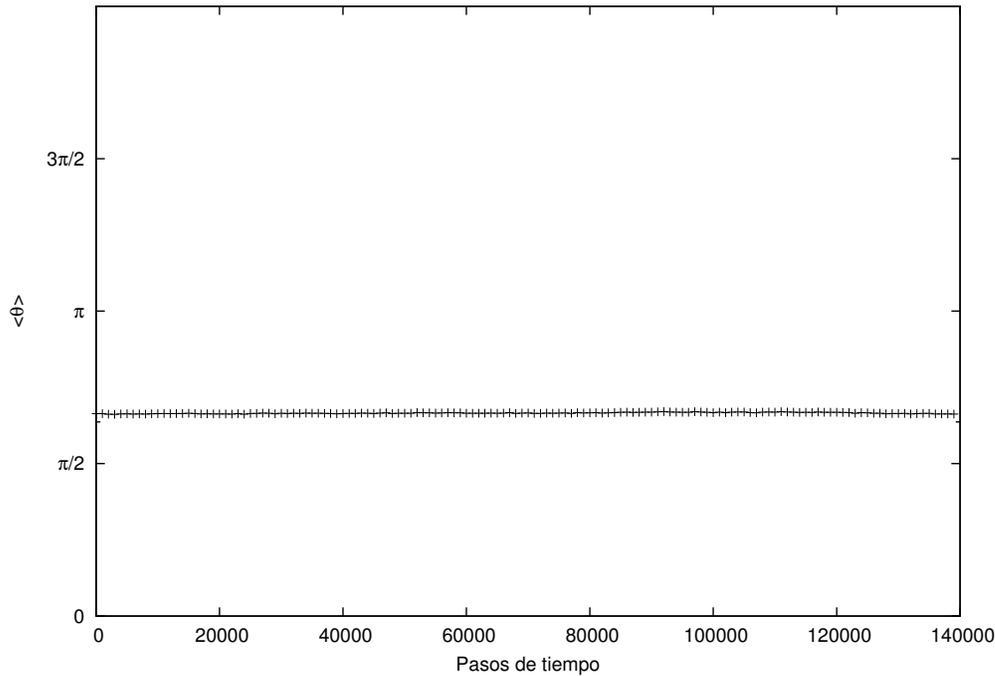


Figura 4.16: Evolución temporal del ángulo promedio para la fase ordenada. Como se observa es constante en el tiempo

Curtosis de la distribución angular

Para caracterizar las gráficas mejor se usó la curtosis de la distribución de ángulos. La curtosis está definida como el cociente del cuarto cumulante entre el cuadrado del segundo cumulante, es decir ¹, $\gamma_2 = \langle M^4 \rangle / \langle M^2 \rangle^2$. De esta manera se esclarece la transición y se

¹Aquí notamos que en este caso el cumulante de Binder es la curtosis del parámetro de orden

aprecian mejor los efectos de tamaño finito. En la gráfica 4.17 se incluye una regresión lineal de la curtosis para el caso supercrítico y se muestra la predicción de Γ_c en la intersección con $y = -1.2$, que es justo el valor de la curtosis para una distribución uniforme.

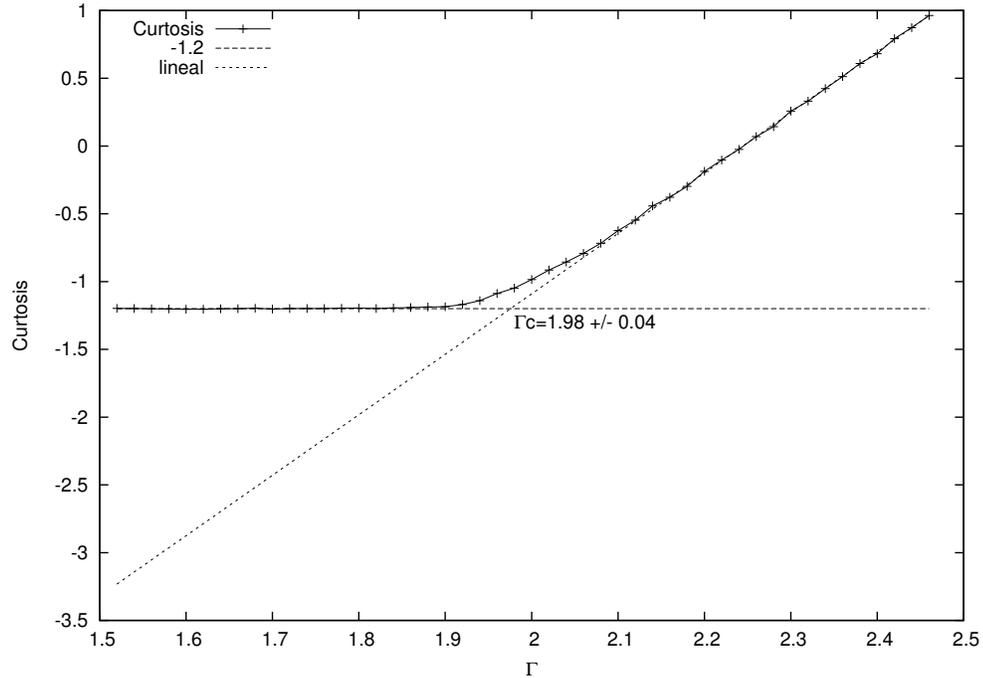


Figura 4.17: Curtosis de la distribución de ángulos para el caso global. Extrapolación lineal de los datos para los casos supercríticos permiten estimar el valor de Γ_c

4.1 Discusión

4.1.1 Desarrollo de la ecuación de Fokker-Planck y análisis de la estabilidad lineal de la fase desordenada

Siguiendo los mismos pasos que en la sección (1.1.2) podemos obtener la ecuación de Fokker-Planck para una partícula en la aproximación de campo medio. La identificación: $\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \nabla_x$ permite escribir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{x}, \vec{v}, t)}{\partial t} = & -\nabla_x \cdot \vec{v}P(\vec{x}, \vec{v}, t) + \frac{\gamma}{m} \nabla_v \cdot \vec{v}P(\vec{x}, \vec{v}, t) - \nabla_v \cdot \langle \vec{\xi} \delta(\vec{v} - \vec{v}(t)) \delta(\vec{x} - \vec{x}(t)) \rangle \\ & - \nabla_v \cdot \langle \vec{F}_{ali} \delta(\vec{v} - \vec{v}(t)) \delta(\vec{x} - \vec{x}(t)) \rangle \quad (4.1.1) \end{aligned}$$

Al escribir esta ecuación, estamos presuponiendo que la fuerza de alineamiento será en general la misma para todas las partículas, es decir, estamos usando la aproximación de campo medio. De este modo, \vec{F}_{ali} , ya es un promedio que puede salir de los corchángulos $\langle \rangle$. En el caso de interacción global, la formulación en campo medio es exacta.

De nuevo es razonable suponer que el término del ruido se comportará como lo hizo en el caso de Langevin (1.1.35), o en el de Kuramoto (2.2.15), dando lugar a un término difusivo.

$$\frac{\partial P(\vec{x}, \vec{v}, t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot \vec{v}P(\vec{x}, \vec{v}, t) + \frac{\gamma}{m} \nabla_v \cdot \vec{v}P(\vec{x}, \vec{v}, t) + D' \nabla_v^2 P(\vec{x}, \vec{v}, t) - \nabla_v \cdot \vec{F}_{ali} P(\vec{x}, \vec{v}, t) \quad (4.1.2)$$

Esta es una ecuación diferencial parcial no lineal que no sabemos cómo resolver analíticamente, sin embargo, sí podremos hacer un análisis de estabilidad lineal para determinar el valor de Γ_c

Sea P_0 la solución al caso subcrítico. Entonces P_0 satisface (4.1.2) para el caso desordenado ($M = 0$), es decir, cuando el último término no contribuye a la dinámica ($\vec{F}_{ali} = 0$). Esta solución es perturbada de la siguiente manera:

$$P(x, v, t) = P_0 + \frac{1}{C} e^{\lambda t} \mu(v, \theta_v) \quad (4.1.3)$$

con C la constante de normalización. La propuesta de esta perturbación tiene su motivación en los resultados observados. La homogeneidad espacial se mantiene sin importar si el sistema se encuentra en la fase ordenada o desordenada, por eso no hay dependencia explícita sobre \vec{x} . Al ángulo que forma \vec{v} con la horizontal, que habíamos llamado θ_v , lo renombraremos θ

por comodidad. Sustituyendo la perturbación en (4.1.2) obtenemos:

$$\begin{aligned}\lambda\mu(v, \theta) &= \frac{\gamma}{m} \nabla_v \cdot \vec{v} \mu(v, \theta) + D' \nabla_v^2 \mu(v, \theta) - \nabla_v \cdot \vec{F}_{ali} (P_0 e^{-\lambda t} + \mu(v, \theta)) \\ &= \frac{\gamma}{m} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} v^2 \mu(v, \theta) \right] + D' \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} \left(v \frac{\partial \mu(v, \theta)}{\partial v} \right) + \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mu(v, \theta) \right] \\ &\quad + \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial \theta} (P_0 e^{-\lambda t} + \mu(v, \theta)) \Gamma f \sin(\theta_f - \theta) \right]\end{aligned}$$

Donde hemos usado la representación polar de ∇_v y \vec{v} . Notemos que en el caso global, $f = M$, el parámetro de orden local es equivalente al global, y éste último, en el límite de muchas partículas, lo podemos calcular como:

$$\begin{aligned}M &\equiv \frac{1}{N} \sum_i \hat{v}_i \\ &= \int \int P(\vec{x}, \vec{v}, t) \hat{v} d\vec{x} d\vec{v} \\ &= \int \int (P_0 + \frac{1}{C} e^{\lambda t} \mu(v, \theta_v)) \hat{v} d\vec{x} d\vec{v} \\ &= \frac{1}{C} e^{\lambda t} \int \int \mu(v, \theta_v) \hat{v} d\vec{x} d\vec{v} \\ &= e^{\lambda t} \int \mu(v, \theta_v) \hat{v} d\vec{v}\end{aligned}$$

Notamos que tiene una dependencia sobre $\mu(v, \theta_v)$. Regresando a la ecuación de Fokker-Planck, y quedándonos sólo con los términos lineales en $\mu(v, \theta_v)$:

$$\begin{aligned}\lambda\mu(v, \theta) &= \frac{\gamma}{m} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} v^2 \mu(v, \theta) \right] + D' \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} \left(v \frac{\partial \mu(v, \theta)}{\partial v} \right) + \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mu(v, \theta) \right] + \\ &\quad \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial \theta} P_0 e^{-\lambda t} \Gamma M \sin(\theta_f - \theta) \right] \quad (4.1.4)\end{aligned}$$

Ahora usemos otro resultado de nuestras simulaciones. Como vimos, la distribución de rapidez es invariante, y siempre coincide con la de equilibrio térmico, está únicamente determinada por el baño térmico. De este modo, proponemos la dependencia explícita:

$$\mu(v, \theta) = \frac{m}{k_B T} e^{-mv^2/(2k_B T)} \Theta(\theta) \equiv P_0 \Theta(\theta) \quad (4.1.5)$$

Notemos que de esta manera :

$$\begin{aligned} \frac{\gamma}{m} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} v^2 \mu(v, \theta) \right] + D' \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} \left(v \frac{\partial P(v)}{\partial v} \right) &= \frac{\gamma}{m} \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} v^2 P(v) \right] - \frac{m}{k_B T} D' \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} (v^2 P(v)) \right] \\ &= \left(\frac{\gamma}{m} - \frac{m}{k_B T} D' \right) \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} (v^2 P(v)) \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

donde se usó el valor de $D' = \frac{\gamma k_B T}{m^2}$ obtenido en (1.1.59). Sustituyendo este resultado en (4.1.4):

$$\lambda \mu(v, \theta) = D' \left[\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mu(v, \theta) \right] + \left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial \theta} P_0 e^{-\lambda t} \Gamma M \sin(\theta_f - \theta) \right] \quad (4.1.6)$$

y multiplicando por v^2 e integrando sobre v nos queda:

$$\lambda \sqrt{\frac{2\pi D' m}{\gamma}} \Theta(\theta) = D' \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi \gamma}{D' m}} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Theta(\theta) + e^{-\lambda t} \Gamma M \cos(\theta_f - \theta) \quad (4.1.7)$$

Reordenando y renombrando términos obtenemos:

$$\lambda \Theta(\theta) = D \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Theta(\theta) + M \Gamma' \cos(\psi - \theta) \frac{e^{-\lambda t}}{2\pi} \quad (4.1.8)$$

donde se renombró $D = \frac{\gamma}{2m}$, $\Gamma' = \Gamma \sqrt{\frac{\gamma 2\pi}{D' m}}$. Notamos que esta ecuación es idéntica a la que obtuvimos en el análisis de Kuramoto(2.2.21), por lo que concluimos de la misma forma que la transición está en:

$$\Gamma'_c = 2D = \frac{\gamma}{m} \quad (4.1.9)$$

Que, en términos de la variable adimensional usada en las simulaciones:

$$\Gamma_c = 2 \quad (4.1.10)$$

4.1.2 Parámetros

Desde el inicio no se planteó realizar un diagrama de fases porque el número de cálculos computacionales necesarios es excesivo².

Los primeros resultados, donde se muestra la variación del parámetro de orden (PO) con respecto a las demás variables, son suficientes para ver que el sistema es monótono respecto a sus variables, por ejemplo, entre más partículas N más pequeño es el valor de Γ_c , no se encontraron "sorpresas"³. Podemos ver que para radios R muy grandes o densidades ρ muy altas, el punto crítico Γ_c alcanza su valor mínimo en $\Gamma_c = 2$. Como también se muestra en la gráfica (4.4), lo único que realmente determina el valor de Γ_c es el número de partículas promedio $N(\Omega)$ que hay en el radio de interacción. Podemos notar que, a pesar de tener una dependencia monótona creciente, para números relativamente pequeños de $N(\Omega)$ el valor de Γ_c alcanza su mínimo. Para el caso global no se pueden mostrar resultados para $N(\Omega)$ pequeñas. Esto es porque en el caso global $R = R_{max}$, por lo que $N(\Omega) = N$, y los resultados con $N = 10$ son ilegibles por los efectos de tamaño finito. Incluso para $N = 1000$, que ya es un número muy grande para $N(\Omega)$, el sistema se mostró altamente fluctuante.

4.1.3 Métodos numéricos para determinar Γ_c

Los efectos de tamaño finito son un gran problema para poder determinar el punto preciso de la transición de fase Γ_c . Para evitar esto se pueden usar varios métodos. Como la transición es de segundo orden la susceptibilidad del parámetro de orden (el "calor específico") tiene una divergencia infinita en Γ_c , pero que los efectos de tamaño finito achatan y la vuelven finita. No obstante, en teoría se puede determinar Γ_c fijándose en el máximo de C_v , pero este es un método con bastantes dificultades, como podemos apreciar en la gráfica 4.6. Otro método comunmente usado en la literatura es el del cumulante de Binder, el cual consiste en realizar varias simulaciones con los mismos parámetros pero con diferentes tamaños del sistema, y ver el punto de intersección de los cumulantes. En nuestro caso esto consistió en dejar la densidad

²Esto no es tan necesario como se verá más adelante, en el análisis del reescalamiento

³Una sorpresa sería que, por ejemplo, Γ_c alcanzara su mínimo para un valor $N = N_c \neq \infty$, es decir, que se rompa la monotonía

constante pero variar el número de partículas y el tamaño de la caja[22]. Este método exigió cálculos extensivos para apenas lograr una razonable aproximación al punto crítico (figura 4.7). Las altas fluctuaciones de este parámetro hicieron imposible reducir la incertidumbre sobre Γ_c . El análisis hecho con la curtosis de la distribución angular mostró que ésta se mantiene constante para $\Gamma < \Gamma_c$ y aumenta de manera lineal para $\Gamma > \Gamma_c$, pero muestra una transición suave cerca del punto crítico (figura 4.17). Si hacemos una extrapolación del comportamiento lineal para el caso supercrítico y nos fijamos en la intersección con el comportamiento del caso subcrítico obtenemos una excelente aproximación de Γ_c . Este método es sumamente sencillo y limpio, y exigió muchos menos ciclos computacionales para llegar a un buen estimado ⁴. Cabe resaltar que este método explota el hecho de que la curtosis de la distribución angular aumenta linealmente, por lo que no sabemos de su aplicabilidad a otros sistemas.

4.1.4 Reescalamiento

Los resultados mostrados en la figura (4.8) son sumamente reveladores. Al usar el parámetro adimensional $\tilde{\Gamma} = \Gamma/\Gamma_c$ el sistema se muestra independiente de los parámetros usados y presenta exactamente el mismo comportamiento. Una implicación de este resultado es que la transición es en esencia la misma si es local (R pequeño) o si es global ($R = \infty$). Este es un resultado sumamente útil, ya que para calcular la distribución de velocidades, o el exponente crítico β se pueden elegir los parámetros más efectivos computacionalmente (por ejemplo un radio pequeño) y tener la seguridad de que el comportamiento será el mismo, pero además es útil en otro ámbito aún más importante: En base a esta evidencia, conjeturamos que para todo rango de parámetros, el comportamiento del sistema será esencialmente el mismo. De este modo no cabe esperar otro tipo de fenómenos, como sería por ejemplo la aparición de una transición Kosterlitz-Thouless para densidades bajas, como bien podría esperarse a priori.

⁴Para el cumulante de binder se realizaban 7 corridas de 40000 pasos de integración por punto, por parámetro. Para la curtosis bastó con 1 corrida de 10000 pasos de integración por punto, y no hubo necesidad de cambiar el tamaño del sistema porque los resultados eran exactamente los mismos, excepto en la región de amortiguamiento que es la que no interesa

4.1.5 Exponente Crítico β

Como se muestra en la gráfica (4.9) obtuvimos un valor de $\beta = 0.37 \pm 0.01$, lo cual está muy lejano al valor de $\beta = 0.5$ para el campo medio o de $\beta = 0.45$ para Vicsek[3]. Para construir este resultado se usó que para el caso global, $\Gamma_c \equiv 2$, y con esto se realizaron los cálculos. Como gracias al resultado analítico no tomamos incertidumbre en Γ_c , la incertidumbre de β es sólo la de la regresión lineal. No obstante, si se toman pequeñas variaciones respecto al valor crítico de Γ , el exponente crítico varía generosamente. Por ejemplo, para $\Gamma = 1.98$, se tiene $\beta = 0.43 \pm 0.01$. De este modo el valor aquí presentado de β carece de sustento. Dada las altas variaciones que presenta este valor, en comparación a los pequeños cambios de Γ_c , creemos computacionalmente inaccesible el poder determinar con precisión β , y se requiere un cálculo de otra naturaleza.

4.1.6 Distribución de velocidades

La fuerza de interacción entre las partículas actúa como una rotación, por lo que se esperaba que la distribución de la rapidez de las partículas se mantuviese invariante, como se ve en la figura (4.14). En cuanto a la distribución de velocidad, podemos observar que para $\tilde{\Gamma} < 1$ tenemos la distribución de Maxwell-Boltzman, pero a partir de la transición de fase esto se pierde y la distribución se vuelve anisotrópica, deformada hacia la dirección elegida de movimiento. Numéricamente este es el mayor argumento para decir que para $\tilde{\Gamma} < 1$ podemos hablar de equilibrio termodinámico y para $\tilde{\Gamma} \geq 1$ ya no, es decir, la transición saca al sistema del equilibrio termodinámico. La temperatura del sistema, dada por la temperatura del baño térmico, la podemos encontrar en el caso subcrítico fácilmente mediante la varianza de la distribución de Maxwell-Boltzmann. Para el caso supercrítico no podemos hablar de una temperatura porque el sistema se sale del equilibrio, pero podemos hablar de un parámetro T' y definirlo de nuevo mediante la distribución de la rapidez de las partículas. Esto es conveniente por varias razones. Primera, de esta manera el parámetro T' se mantiene constante independientemente del valor de $\tilde{\Gamma}$, y segundo, el caso subcrítico coincide con la definición de temperatura, y para el caso supercrítico nos sigue hablando de las correlaciones

del ruido. La distribución de Maxwell-Boltzmann en 2 dimensiones para la rapidez de las partículas tiene la forma:

$$f(v)v dv = \frac{m}{k_B T} e^{-\left[\frac{mv^2}{2k_B T}\right]} v dv \quad (4.1.11)$$

Donde la varianza está dada, en el caso desordenado donde está definida la temperatura, por [13]:

$$\sigma^2 = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = k_B T \left(\frac{2 - \pi/2}{m} \right), \quad (4.1.12)$$

por lo que definimos así el parámetro T' :

$$k_B T' = \frac{\sigma^2 m}{2 - \pi/2} \quad (4.1.13)$$

4.1.7 Homogeneidad Espacial

Para altas densidades, el sistema presenta homogeneidad espacial, y esto se comprobó visualmente usando las simulaciones. Es un resultado importante, que nos ayudó a simplificar el análisis de estabilidad lineal de la ecuación de Fokker-Planck. Además se muestra como la distribución de Poisson describe correctamente el número de ocupación de las celdas. A continuación veremos cómo una distribución Poissoniana es consecuencia de una probabilidad uniforme en el espacio.

Tengamos una probabilidad uniforme en el espacio. Al dividir el espacio en celdas, necesariamente esta probabilidad también es homogénea en las celdas, de modo que el número promedio de partículas por celda N_j sea una constante, dada por:

$$N_j = \frac{N}{\#celdas}, \quad (4.1.14)$$

siendo N el número total de partículas.

Si sólo tenemos $N = 1$ partícula en el sistema, la probabilidad de que esté en cierta celda dada está dado por:

$$P(n = 1, N = 1) = \frac{1}{\#celdas} = \frac{N_j}{N} \equiv P_0 \quad (4.1.15)$$

La probabilidad de tener n partículas en una celda, si hay N partículas totales es:

$$\begin{aligned} P(n, N) &= (P_0)^n (1 - P_0)^{N-n} \binom{N}{n} \\ &= \frac{N_j^n}{n!} \left(1 - \frac{N_j}{N}\right)^{N-n} (1)(1 - 1/N) \dots (1 - (n-1)/N) \end{aligned}$$

Tomando el límite de muchas partículas:

$$\begin{aligned} P(n, N) &= \frac{N_j^n}{n!} \left(1 - \frac{N_j}{N}\right)^{N-n} (1)(1 - 1/N) \dots (1 - (n-1)/N) \\ &\approx \frac{N_j^n}{n!} e^{-N_j} (1)(1) \dots (1) \\ &= \frac{\lambda}{n} e^{-\lambda} \end{aligned}$$

que es la distribución Poissoniana con $\lambda = N_j$. Concluimos así que suponer homogeneidad espacial implica que la probabilidad de que ocupación de las celdas es Poissoniana, como ha sido verificado numéricamente en la figura (4.10)

4.1.8 Rompimiento de la ergodicidad

En cuanto el sistema elige por sí mismo una dirección privilegiada de movimiento, esta se preserva en promedio y el sistema queda atrapado en este estado. Esto lo podemos ver en la gráfica $\langle \theta \rangle$ vs tiempo(figura 4.16), donde el promedio del ángulo de movimiento no cambia a lo largo del tiempo, o en los histogramas del ángulo (figura 4.15), donde vemos que el máximo de la distribución angular se preserva para los diferentes valores de $\tilde{\Gamma}$. Esto tiene como consecuencia inmediata que el sistema no visite todo el espacio fase, por lo que el sistema perdió la ergodicidad. La ergodicidad de un sistema es lo que permite, según el teorema ergódico, igualar los promedios configuracionales con los promedios temporales. Esta es una situación que es similar a la que ocurre en la mayoría de los modelos de ferromagnetismo [15], como en el caso del modelo de Ising, donde al formarse el estado ordenado el espacio fase también se divide en dos regiones, una accesible, y otra inaccesible.

Este rompimiento de la ergodicidad es consecuencia del rompimiento espontáneo de la simetría rotacional. No obstante, el parámetro de orden, y todas las cantidades aquí medidas

(a excepción de la dirección elegida) siguen teniendo la simetría rotacional, y de ahí la validez de tomar los promedios temporales en lugar de promedios sobre ensambles.

4.1.9 Kuramoto

La interacción de nuestro modelo resulta ser análoga a la interacción del modelo de Kuramoto, por lo cual, es de esperarse una gran familiaridad. Para el modelo de Kuramoto con interacción constante $K_{ij} \equiv K$ conocemos la distribución angular [18], la cual está dada por:

$$P(\theta) = Ce^{Kr \cos(\theta - \langle \theta \rangle)} \quad (4.1.16)$$

en donde r es el parámetro de orden, y C una constante de normalización.

Comparando con la distribución angular obtenida (figura 4.18)

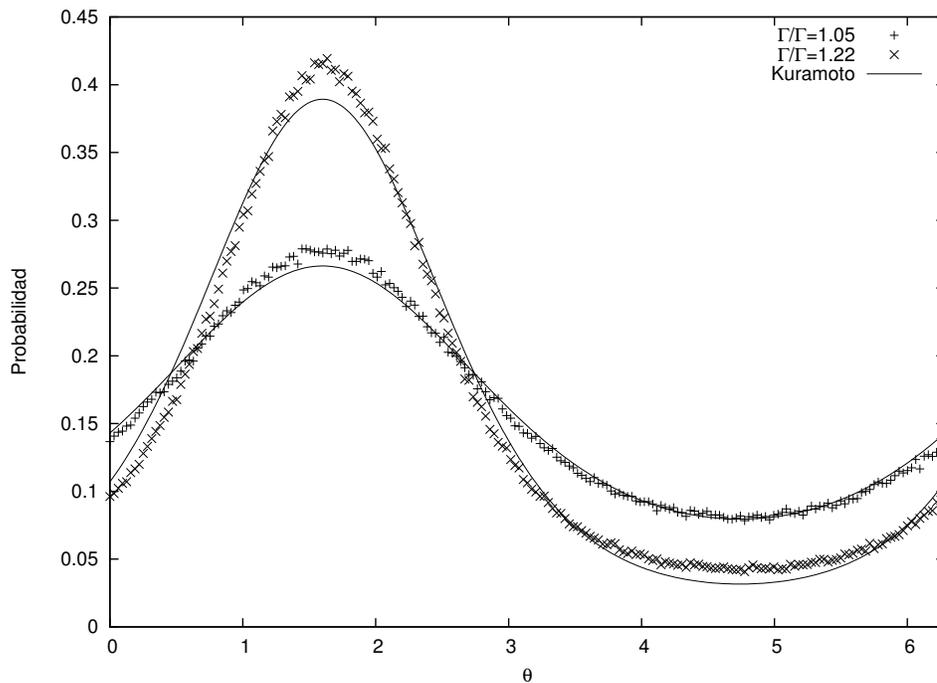


Figura 4.18: Comparación con el modelo de Kuramoto

Como podemos ver son muy similares, sin embargo, estos resultados no son concluyentes. La discrepancia entre las gráficas bien podría deberse a algún efecto del tamaño finito, o bien a alguna diferencia más de fondo. Este hecho ha de ser investigado.

4.1.10 Sobre el modelo de Vicsek

Nuestro modelo, motivado en el de Vicsek, tiene varias diferencias clave. La primera a notar es el exponente crítico β , el cual ya coloca a nuestro modelo en otra clase de universalidad. Segundo, en el caso subcrítico nuestro modelo presenta la distribución de Maxwell-Boltzmann, lo que nos ayuda a definir una Temperatura y plantea la posibilidad de un análisis para sistemas cercanos al equilibrio térmico, como lo es la teoría de respuesta lineal. Pero todo esto no es tan importante como las implicaciones que tiene sobre el concepto actual del comportamiento de parvada. El sistema, en ausencia de interacción, está en movimiento browniano, y es a partir de la interacción que se da la transición de fase. Es la mera interacción, y no otros factores, lo que saca al sistema del equilibrio. Este punto es de vital importancia porque es común encontrar en la literatura [3], [4], [5], [6], [7], [8], [9] que se justifique este hecho partiendo de que el sistema no estaba en equilibrio termodinámico, ya sea por una distribución discreta de la velocidad, como ocurre en el caso de la autopropulsión, o mediante la inclusión de ruido que no cumple con el teorema de fluctuación-disipación [12].

Capítulo 5

Conclusiones

5.1 Conclusiones

En este trabajo de tesis se construyó y analizó un sistema bidimensional de agentes brownianos con interacción de alineamiento, el cual presenta una transición del tipo orden-desorden. Se encontró que a diferencia de los modelos más conocidos que describen una fase con orden de largo alcance, la autopropulsión de las partículas no es una condición necesaria para la existencia de dicha fase; y aunque es comúnmente aceptado que la interacción de alineamiento es la causante del orden de largo alcance, en este trabajo se esclarece y enfatiza su importancia.

Se encontró que para $\Gamma < \Gamma_c$ (interacción pequeña o nula) el sistema está en equilibrio térmico, y su comportamiento está dictado por la temperatura del baño (i.e la varianza del ruido) térmico. La distribución de velocidades coincide perfectamente con la de Maxwell-Boltzmann. Para $\Gamma > \Gamma_c$ el sistema presenta una fase ordenada. Caracterizando al sistema por el parámetro de orden M , encontramos que su comportamiento respecto a variaciones en el parámetro adimensional $\tilde{\Gamma}$ es muy similar al de una transición de segundo orden. Para el caso de interacción global, se realizó un análisis de estabilidad lineal en la ecuación de Fokker-Planck y se determinó que el punto de transición está en $\Gamma_c = 2$. Numéricamente se determinó este resultado de tres maneras distintas: Ubicando el máximo de la susceptibilidad, ubicando el punto de intersección de los cumulantes de Binder para sistemas con diferentes

tamaños, y haciendo una regresión lineal de la curtosis del parámetro de orden. Este último método, no encontrado en la literatura, resultó ser el más efectivo al dar que $\Gamma_c = 1.98 \pm 0.04$.

Se encontró el exponente crítico $\beta = 0.37 \pm 0.01$, diferente al caso de Vicsek y de campo medio. Es interesante encontrar que para el rango de parámetros usado, cuando se usa la variable $\tilde{\Gamma} \equiv \Gamma/\Gamma_c$, el sistema se comporta de una única manera. Ni el parámetro de orden ni los exponentes críticos dependen de los parámetros utilizados, por lo cual conjeturamos que para todo rango finito de parámetros el comportamiento será el mismo. De este modo no esperamos encontrar nada nuevo para los rangos no explorados, como podría ser, por ejemplo, el encontrar una transición Kosterlitz-Thouless para densidades bajas.

Las simulaciones presentadas fueron realizadas con densidades altas de partículas, donde hay homogeneidad espacial del sistema. A densidades bajas se dificultó mucho un análisis debido a que los pasos que necesita el sistema para equilibrarse aumentan notablemente.

Habiendo cumplido los propósitos de esta tesis, el sistema aún posee propiedades interesantes por estudiar. Queda por explorar las propiedades del sistema a densidades bajas, donde no se espera encontrar homogeneidad espacial. También queda abierto el tema de los estados transitorios, de los cuales un análisis preliminar muestran altas fluctuaciones en la densidad de las partículas.

Bibliografía

- [1] Mermin, N. D., and Wagner, H. (1966). Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Physical Review Letters* 17, 1133-1136. Available at: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.1133>.
- [2] Hohenberg, P. C. (1967). Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions. *Physical Review* 158, 383-386. Available at: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.158.383>.
- [3] Vicsek, T., Czirók, A., Ben-Jacob, E., Cohen, I., & Shochet, O. (1995). Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Physical Review Letters*, 75(6), 1226-1229.
- [4] Czirok, A., Stanley, H. E., & Vicsek, T. (2006). Spontaneously ordered motion of self-propelled particles. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 30(5), 1375-1385.
- [5] Mishra, S., Baskaran, A., and Marchetti, M. C. (2010). Fluctuations and Pattern Formation in Self-Propelled Particles. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics* 81, 061916. Available at: <http://arxiv.org/abs/1001.3334>.
- [6] Peruani, F., Klauss, T., Deutsch, A., and Voss-Boehme, A. (2011). Traffic jams, gliders, and bands in the quest for collective motion of self-propelled particles. *Physical Review Letters* 106, 128101. Available at: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.128101>.

- [7] Vanni, F., Luković, M., and Grigolini, P. (2011). Criticality and transmission of information in a swarm of cooperative units. *Physical Review Letters* 107, 078103. Available at: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.078103>.
- [8] Kudrolli, A. (2010). Concentration dependent diffusion of self-propelled rods. *Physical Review Letters* 104, 088001. Available at: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.088001>.
- [9] Ginelli, F., and Chaté, H. (2010). Relevance of Metric-Free Interactions in Flocking Phenomena. *Physical Review Letters* 105, 168103. Available at: <http://arxiv.org/abs/1007.1783>.
- [10] Grossman, R., Schimansky-Geier, L. and Romanczuk, P. (2012) Active Brownian particles with velocity-alignment and active fluctuations arXiv:1204.4304v1
- [11] Schweitzer, F. (2003). *Brownian Agents and Active Particles*. (S. Kawata, Ed.) *Nonlinear Dynamics* (p. 420). Springer. Retrieved from <http://www.springer.com/computer/ai/book/978-3-540-73844-2>
- [12] Marconi, U. M. B., Puglisi, A., Rondoni, L., and Vulpiani, A. (2008). Fluctuation-Dissipation: Response Theory in Statistical Physics. *Physics Reports* 461, 162. Available at: <http://arxiv.org/abs/0803.0719>.
- [13] Gardiner, C. W. (1983). *Handbook of Stochastic Methods*. The American Naturalist (Vol. 38, p. 898). Springer-Verlag. Available at: <http://www.gbv.de/dms/goettingen/214637425.pdf>
- [14] Masoliver, J. and Wang, K. (1995), Free inertial processes driven by Gaussian noise: Probability distributions, anomalous diffusion, and fractal behavior, *Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics* 51, 2987. Available at: <http://diposit.ub.edu/dspace/bitstream/2445/18836/1/89652.pdf>
- [15] Goldenfeld, N. (1992). *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* (Perseus Books) Available at: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/10032634>.

- [16] Sachdev, S. (1999). *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press)
- [17] Goldenfeld, N. (1992). *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* (Perseus Books) Available at: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/10032634>.
- [18] Acebrón, J., Bonilla, L., Pérez Vicente, C., Ritort, F., and Spigler, R. (2005). The Kuramoto model: A simple paradigm for synchronization phenomena. *Reviews of Modern Physics* 77, 137-185. Available at: <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.77.137>
- [19] Daniels, B. C. (2005). Synchronization of Globally Coupled Nonlinear Oscillators : the Rich Behavior of the Kuramoto Model. Analysis. Available at: http://www.stanford.edu/group/brainsinsilicon/documents/kuramoto_paper_lab6.pdf
- [20] Romanczuk, P., Couzin, I. D., and Schimansky-Geier, L. (2009). Collective motion due to individual escape and pursuit response. *Physical Review Letters* 102, 010602. Available at: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.010602>.
- [21] Kuramoto, Y. (1975). Self-entrainment of a population of coupled nonlinear oscillators. In *International symposium on mathematical problems in theoretical physics*, H. Araki, ed. (Springer), p. 420–422. Available at: <http://www.springerlink.com/index/71073361941277h8.pdf>.
- [22] Binder, K. (1981). Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 43, 119-140. Available at: <http://www.springerlink.com/index/10.1007/BF01293604>.