



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Extensión del Método de Histograma Ancho a Teorías Gauge en el Lattice

Julio César León Luquez

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2012

Extensión del Método de Histograma Ancho a Teorías Gauge en el Lattice

Julio César León Luquez

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ciencias - Física

Director:

Doctor John Morales Aponte

Codirector:

Doctor Rer. Nat. José Daniel Muñoz Castaño

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2012

A mis padres por la comprensión, su voz de aliento y por nunca dejar de creer en mí.

A Angélica Bohorquez por todo su cariño y compañía.

Al profesor Plinio Teherán por impulsar mi carrera profesional.

Agradecimientos

Agradezco a los profesores John Morales Aponte y José Daniel Muñoz Castaño por su apoyo y paciencia en este largo tiempo como directores del trabajo. También al Grupo de Campos y Partículas y a la División de Investigación Bogotá (DIB) por el apoyo económico otorgado a través del proyecto COL0007847. Finalmente, al Grupo de Simulación de Sistemas Físicos por permitirme usar sus oficinas y equipos de cómputo. Sin ellos esta tesis no hubiera sido posible.

Resumen

La formulación de teorías gauge en el *lattice* es la herramienta no perturbativa más exitosa disponible en teoría de campos. Sus cálculos se realizan principalmente utilizando el método Monte Carlo con muestreo de Metropolis. Sin embargo, sus posibilidades se ven fuertemente limitadas por el tiempo de cómputo que requiere este método. Como alternativa, se ha intentado extender los llamados Métodos de Histograma, que han sido exitosos en la Mecánica Estadística Clásica, pero los resultados hasta el momento no han sido los esperados. Este trabajo extiende el método de histograma BHM a teorías gauge y lo aplica exitosamente para el cálculo del modelo Z_2 . Nuestra propuesta combina los métodos de muestreo de Wang-Landau y Multicanónico con el método de análisis BHM en un solo esquema, que hemos llamado Método de Histograma Ancho Markoviano (*Markovian Broad Histogram Method*, MBHM). El método calcula los valores del loop de Wilson para sistemas $2D$ y $3D$ con barras de error que son entre 10 y 100 veces más pequeñas que las obtenidas por el método de Metropolis, utilizando aproximadamente el mismo tiempo de cómputo. Este resultado es, hasta donde sabemos, el primer intento de extensión de métodos de histograma plano a teorías gauge en el *lattice* que ha resultado exitoso, y por lo tanto abre inmensas posibilidades de aplicación en el área.

Palabras clave: Monte Carlo, Métodos de Histograma, Modelo de Ising, Teorías Gauge en el Lattice, Modelo Z_2 , Método de Histograma Plano Markoviano.

Abstract

The formulation of gauge theories on the lattice is the most successful non-perturbative tool available in field theory. Calculations on the lattice are usually performed by means of Monte Carlo methods via Metropolis sampling. However, its applicability is strongly limited by its computational cost. As an alternative, attempts have been made to extend the so-called Histogram Methods. Histogram methods, although successful in classic statistical mechanics have not yielded the expected results for gauge theories. In this thesis we extend the histogram method BHM to gauge theories and successfully apply it to the calculation of the Z_2 model. Our approach combines the Wang-Landau and multicanonical sampling methods together with the BHM analysis method on a single scheme that we propose to call the Markovian Broad Histogram Method (MBHM). With the same computational cost as Metropolis, our method is able to calculate the Wilson loop for systems in $2D$ and $3D$ with error bars 10 and 100 times smaller, respectively. This result, as far as we know, constitutes the first successful attempt to extend flat histogram methods to gauge theories on the lattice, therefore there exists a great potential for its applicability to the entire field.

Keywords: Monte Carlo, Histogram Methods, Ising Model, Gauge Theories on the Lattice, Z_2 Model, Markovian Flat Histogram Method.

Índice general

Agradecimientos	vii
Resumen	ix
1. Introducción	2
2. Monte Carlo con muestreo ponderado	6
2.1. Modelo de Ising $2D$	6
2.2. Procesos de Markov y convergencia al equilibrio	7
2.3. Muestreo ponderado	9
2.4. El algoritmo de Metropolis	10
2.5. Tiempos de equilibrio y correlación	11
3. Monte Carlo basado en la densidad de estados	14
3.1. La densidad de estados	14
3.1.1. $g(I)$ a partir de muestreo simple	15
3.1.2. $g(I)$ a partir de muestro ponderado	16
3.2. Métodos de muestreo	16
3.2.1. Método Multicanónico	16
3.2.2. Método de Wang-Landau	17
3.3. Principio básico de los métodos de histograma	18
3.4. Método de Histograma Canónico o SHM	18
3.5. Método de Histograma Ancho o BHM	20
3.5.1. Implementación	22
3.5.2. BHM para el modelo de Ising $2D$	22
4. Método de Histograma Ancho Markoviano	24
4.1. Principio básico del Método de Histograma Ancho Markoviano	24
4.1.1. Implementación	25
4.2. Método de Histograma Ancho Markoviano para el modelo de Ising $2D$	26
5. Teorías Gauge Abelianas en el Lattice	29
5.1. Teorías Gauge	29
5.2. El <i>Lattice</i>	30

5.3. Modelo Z_2	31
5.4. El loop de Wilson	32
6. Método de Histograma Ancho Markoviano para Teorías Gauge en el Lattice	34
6.1. Extensión del Método de Histograma Ancho a Teorías Gauge en el <i>Lattice</i> .	34
6.1.1. Implementación	35
6.2. Método de Histograma Ancho Markoviano para el Modelo Z_2	36
7. Conclusiones	40
Bibliografía	42

Índice de figuras

2-1. Arreglo de espines para el modelo de Ising $2D$	7
2-2. Energía promedio por enlace y capacidad calorífica teóricos para el modelo de Ising $2D$	8
2-3. Energía promedio por enlace y capacidad calorífica con el algoritmo de Metropolis para el modelo de Ising $2D$	11
2-4. Magnetización vs. tiempo de simulación para Ising $2D$	12
3-1. Histograma de visitas con SHM para el modelo de Ising $2D$	19
3-2. Capacidad calorífica para Ising $2D$ con SHM	20
3-3. Capacidad calorífica y derivada de la densidad de estados para Ising $2D$ con BHM.	23
4-1. Histograma de visitas y densidad de estados con Wang-Landau para Ising $2D$	26
4-2. Histograma de visitas y densidad de estados con Histograma Ancho Markoviano para Ising $2D$	27
4-3. Energía y capacidad calorífica para Ising $2D$ con Histograma Plano.	28
5-1. Energía interna para Z_2 en $2D$ y $3D$ con Metropolis.	33
6-1. Densidad de estados con el MBHM para Z_2 en $2D$	37
6-2. Energía en función de la constante de acoplamiento a partir del MBHM para Z_2 en $2D$	37
6-3. Densidad de estados con el MBHM para Z_2 en $3D$	38
6-4. Energía en función de la constante de acoplamiento a partir del MBHM para Z_2 en $3D$	38
6-5. Energía con Metropolis e Histograma Ancho Markoviano para Z_2 en $4D$	39

1 Introducción

El concepto de simetría juega un papel fundamental en la Física: todas las leyes de conservación conocidas resultan de simetrías espacio-temporales e internas. Esto sugiere que las fuerzas fundamentales de la naturaleza pueden ser explicadas a partir de simetrías matemáticas y, por lo tanto, que existe una teoría consistente que unifica y describe estas interacciones. El Modelo Estándar de partículas (ME) [1] constituye el mayor avance logrado hasta el momento en este sentido: unifica todo lo que sabemos sobre la fuerza electromagnética y las interacciones fuerte y débil, y ha sido probado con éxito en gran detalle hasta energías del orden de los cientos de GeV [2]. El ME es una teoría gauge no abeliana [3, 4] cuyo grupo de simetría es el $SU(3)_c \otimes SU(2)_L \otimes U(1)_Y$ que incluye el modelo de Glashow-Salam-Weinberg del electromagnetismo y de la interacción débil, basado en la simetría $SU(2)_L \otimes U(1)_Y$, y la Cromodinámica Cuántica o QCD por su nombre en inglés (*Quantum ChromoDynamics*), teoría de las interacciones fuertes basada en la simetría $SU(3)_c$.

La teoría de perturbaciones [4] es la herramienta de cálculo más exitosa en teoría de campos. A grandes rasgos, consiste en expandir la integral de camino en potencias de la constante de acoplamiento propia de cada teoría. Los diagramas de Feynman resultantes son regularizados orden por orden en el acoplamiento. La validez de teorías como la Electrodinámica Cuántica, o QED por su nombre en inglés (*Quantum ElectroDynamics*), ha sido verificada gracias al tratamiento perturbativo: el momento anómalo del electrón, por ejemplo, es la cantidad física calculada con mayor exactitud en la actualidad [4, 5]. A pesar de esto, dicho tratamiento no es completamente satisfactorio debido a que la expansión es asintótica, es decir, la suma de todos los órdenes en la serie es divergente. Además, para teorías fuertemente interactuantes, como la QCD a bajas energías (menores que 1 GeV), la constante de acoplamiento se incrementa al punto de impedir realizar la expansión.

En el régimen en que la teoría de perturbaciones falla se requieren técnicas de cálculo distintas o reformular completamente la teoría. En 1974, K. G. Wilson, en su artículo titulado *Confinement of quarks* [6] (Confinamiento de quarks), propuso una manera de combinar estos dos requerimientos: formuló la QCD en un espacio-tiempo euclídeo discreto 4-dimensional (el lattice) lo cual permite simularla en un computador con los mismos métodos usados en mecánica estadística. A esta formulación de la QCD se le conoce como *LatticeQCD* o QCD en el retículo, aunque con el tiempo el término *Lattice Field Theory* (Teoría de Campo en el Retículo) ha tomado mucha fuerza debido a que la técnica de discretización se aplicó con muy buenos resultados a toda clase de teorías de campo. Esto ha convertido al lattice en la

herramienta no perturbativa más exitosa disponible, tanto que tiene su propia conferencia anual [7] y su propio archivo electrónico [8].

La simulación de teorías gauge en el *lattice* se realizan principalmente con el método de Monte Carlo [9, 10, 11], utilizando muestreos a constante de acoplamiento fija (que es el equivalente al inverso de la temperatura, para estos casos), como Metropolis [12] o *heat bath*. Estos métodos de simulación exigen el uso de supercomputadores, por lo que gran parte de las investigaciones que se realizan actualmente en el área están orientadas hacia el mejoramiento y la creación de algoritmos que permitan disminuir los tiempos de cómputo. De lograrlo, se facilitarían, entre muchas otras aplicaciones, los cálculos de las masas de los seis quarks, de los espectros hadrónico y de *glueballs*, de las constantes de decaimiento para mesones y el estudio de las propiedades de la QCD a temperatura y potencial químico finitos, que son fundamentales para la comprensión del universo temprano. Si no se tiene acceso a un gran poder de cómputo, es posible trabajar en el mejoramiento de los métodos usados para simular teorías puramente gauge, como los modelos Z_2 y $U(1)$, en las cuales la ausencia de fermiones disminuye notablemente los requerimientos de hardware, o modelos que incluyen fermiones pero cuyo grupo de simetría contiene un número reducido de elementos, como el modelo de Potts [13].

En mecánica estadística clásica la evolución del método de Monte Carlo ha dado lugar a los Métodos de Histograma. Estos permiten obtener el valor promedio de cantidades termodinámicas para un rango de temperaturas amplio a partir de los datos obtenidos con unas pocas simulaciones, ahorrando muchísimo tiempo en comparación con la técnica tradicional, en la cual, es necesario realizar una simulación por cada temperatura. Dada la similitud entre las teorías gauge formuladas en el *lattice* y algunos modelos clásicos de mecánica estadística, estos métodos constituyen una buena opción para optimizar su simulación.

Existen dos tipos de métodos de histograma: los métodos de análisis y los métodos de simulación. Entre los primeros, el más antiguo es el *Single Histogram Method*, propuesto primeramente por Salzburg [14] y popularizado por Ferrenberg y Swendsen [15, 16]. Este método permite tomar las muestras a temperatura fija (p. ej., utilizando el muestreo de Metropolis) y calcular valores promedio a temperaturas cercanas a la de muestreo. Aunque se ha utilizado con éxito en los más diversos campos de aplicación, su uso se ve limitado por el hecho de que los muestreos tienen que ser a temperatura fija, lo que limita el ancho del muestreo en el eje de las energías. Aunque es posible sumar varios muestreos en uno solo (lo que se conoce como *Multiple Histogram Method*), la forma de hacerlo no es sencilla. Otro método de análisis es el método de histograma ancho, o BHM por su nombre en inglés (*Broad Histogram Method*), que es conocido a veces como *Flat Histogram Method*. Este método, formulado inicialmente para sistemas clásicos discretos por P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna y H. J. Herrmann [17, 18], fue extendido posteriormente a sistemas continuos por J. D. Muñoz y H. J. Herrmann [19, 20]. Es una herramienta de análisis que permite determinar la densidad de estados del sistema, independientemente de la dinámica de muestreo usada dentro de la simulación. El método sólo depende de promedios microcanónicos de observables perfectamente

definidos para cada configuración y no de conceptos como el equilibrio termodinámico, por lo cual la temperatura –parámetro fundamental cuando se realizan simulaciones basadas en muestreo ponderado– deja de ser relevante. Como cada estado muestreado aporta mucha más información que su sola energía, el cálculo es mucho más preciso y las barras de error disminuyen aproximadamente en un factor proporcional a \sqrt{N} , con N el número de elementos que componen el sistema. La independencia del tipo de muestreo hace que el BHM sea más exitoso que los métodos tradicionales y otros basados en histogramas, y permite además juntar directamente en un único histograma los resultados de muestreos independientes, lo que lo convierte en una herramienta extraordinariamente flexible. El método ha sido empleado para simular modelos discretos como el modelo de Ising [17, 21, 22] y el modelo de Potts [23], y continuos como los modelos XY [19, 20] y Heisenberg [24]. En su tesis doctoral, J. D. Muñoz [24] sugiere una forma de aplicar este método a cálculos de *LatticeQCD*, pero tal sugerencia no ha sido implementada aún.

En cuanto al proceso de muestreo, los métodos de Monte Carlo en sistemas clásicos presentan dos métodos de histograma que no funcionan a temperatura fija. El primero es el método multicanónico, propuesto por B. Berg en 1992 [25] (también conocido como *Entropic Sampling* [26]). Este método consiste en proponer una densidad de estados $g(E)$ (el número de estados con energía E) para el sistema y generar muestras con una probabilidad inversamente proporcional a $g(E)$ a través de un proceso de Markov. Si la densidad de estados fuese correcta, el histograma de muestras en función de la energía sería plano. Si el histograma no resulta ser plano, se puede utilizar para mejorar la suposición inicial. El proceso se itera hasta lograr un histograma plano. Una vez conocida la densidad de estados, es posible calcular valores promedio a cualquier temperatura. A pesar de ser un método markoviano –que garantiza obtener muestras con la probabilidad deseada– converge muy lentamente, lo que ha limitado su uso. Otro de los métodos más exitosos de la última década es el llamado muestreo de Wang-Landau [25, 27, 28], que permite obtener muy rápidamente muestras para casi todos los valores de energía. La idea es partir de una entropía microcanónica $S(E) = \ln g(E)$ plana (igual para todas las energías), e incrementarla en un valor fijo cada vez que se visita un estado con energía E . Las visitas se hacen con las mismas ratas de aceptación del método multicanónico, pero el proceso no es markoviano, porque las probabilidades de transición cambian constantemente a lo largo de la simulación. Una vez se obtiene un histograma de muestras aproximadamente plano, se reduce el incremento de entropía a la mitad, y se continua el proceso, iterando varias veces hasta lograr el nivel de precisión deseado. Aunque el método no es markoviano, permite muestrear rangos amplios de energía en muy poco tiempo.

Hasta el momento solo se han hecho dos intentos para extender los métodos de histograma a teorías gauge en el *lattice*. En el 2002 Z. Fodor y S. D. Katz propusieron el método conocido como *Overlap Improving Multi-parameter Reweighting Technique* [29], cuya base es la misma del *Single Histogram Method*. Este método permite aliviar el problema de la acción compleja, que aparece en *LatticeQCD* cuando el potencial químico μ es diferente de

cero [30, 31], el cual convierte la acción en un número complejo e impide el uso de técnicas de Monte Carlo basadas en el muestreo ponderado con el peso de Boltzmann [32, 33]. A pesar de no solucionar el problema por completo, el método de Fodor y Katz ha permitido obtener algunos resultados relacionados con el diagrama de fase de la QCD con T y μ finitos [34, 35, 36], teoría de fundamental importancia ya que describe características relevantes de la física de partículas en el universo temprano, en estrellas de neutrones y en colisiones de iones pesados [37, 38]. La principal desventaja del método es que el rango de valores de la constante de acoplamiento de la teoría para los cuales funciona es muy limitado. En el 2006, B. A. Berg y A. Bazavov calcularon los exponentes críticos del modelo $U(1)$ usando el método multicanónico [25] combinado con el método de Wang-Landau [28] e implementando el algoritmo *biased Metropolis-Heatbath* [39] para la dinámica de muestreo. Reportaron un incremento en la velocidad de simulación en un factor de aproximadamente tres. A pesar de esta pequeña mejora, sus resultados no coinciden con lo esperado, por lo cual sugieren usar supercomputadores para simular el modelo en retículos más grandes [40, 41]. Aunque el tema ha sido poco explorado, los resultados obtenidos con los primeros intentos de extender métodos de histograma a teorías gauge en el *lattice* son parcialmente buenos.

El objetivo de este trabajo es utilizar los métodos de histograma para el cálculo de teorías gauge en el *lattice* con base en la analogía existente entre la acción y la constante de acoplamiento en la integral de camino de Feynman, y la energía y el inverso de la temperatura en la función de partición [42]. Para el análisis se seguirá la sugerencia de Muñoz, implementando el método BHM para el modelo Z_2 . Para el muestreo se propone una manera original de unir los métodos de Wang-Landau y Multicanónico con el análisis BHM, que hemos dado en llamar Método de Histograma Ancho Markoviano (MBHM). Este método integra los pasos de muestreo y análisis en un solo proceso, que combina las ventajas de cada uno de los métodos por separado que lo integran. El MBHM se pone primero a prueba con el modelo de Ising $2D$, para luego aplicarlo en el modelo Z_2 . Los resultados son en verdad impresionantes. Las técnicas combinadas permiten calcular el loop de Wilson para el modelo Z_2 en $2D$ y en $3D$ con una precisión tal que la histéresis, siempre presente en las simulaciones de Metropolis [12], desaparece. Además, la técnica combinada de muestreo de Wang-Landau con BHM y Multicanónico que se propone permite obtener un mejor desempeño que las combinaciones propuestas anteriormente, también para el modelo de Ising $2D$. Estos resultados sugieren que la técnica MBHM representa una herramienta poderosa para la simulación de teorías gauge en el *lattice*.

En los capítulos 2 y 3 se presentan los fundamentos teóricos del método de Monte Carlo y los métodos de histograma. Luego, en el capítulo 4 se introduce el Método de Histograma Plano Markoviano, usando como sistema de prueba el modelo de Ising $2D$. Posteriormente, en el capítulo 5 se revisa el *lattice* como herramienta de cálculo no perturbativa, y se discute el modelo gauge discretizado más sencillo: Z_2 . En el capítulo 6, se expone la manera general de extender el nuevo método a teorías gauge en el *lattice* y se prueba en el modelo Z_2 . Finalmente, se discuten las principales conclusiones del trabajo en el capítulo 7.

2 Monte Carlo con muestreo ponderado

Con la aparición del método de Monte Carlo y su aplicación en Mecánica Estadística, han surgido numerosos algoritmos que permiten simular sistemas con un gran número de elementos, como por ejemplo, sistemas de espines como los modelos de Ising, Potts, XY y Heisenberg. Estas simulaciones constan de dos partes: un muestreo sobre el espacio de fase del sistema y el análisis de los datos obtenidos para calcular observables físicos. En este capítulo presentamos los conceptos básicos que fundamentan el muestreo ponderado, tomando como base el modelo de Ising $2D$.

2.1. Modelo de Ising $2D$

El modelo de Ising es uno de los modelos de espín más estudiados en Mecánica Estadística. Su utilidad radica en que tiene solución analítica en $1D$ y $2D$, puede ser simulado en un computador personal sin grandes dificultades y exhibe una transición de fase de segundo orden en $2D$. Por lo tanto, es ideal para probar nuevos algoritmos.

Fue propuesto por W. Lenz en 1920 para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos [43] y solucionado en $1D$ por E. Ising en 1925 [44], estudiante de doctorado del profesor Lenz y a quien debe su nombre. En 1944 Onsager resolvió el modelo para $2D$ y campo magnético externo nulo, demostrando que presenta una transición de fase de segundo orden [45]. Zamalodchikov encontró la solución exacta para $2D$ y campo magnético externo no nulo en 1988 [46], y en 1995 P. D. Beale calculó la densidad de estados exacta para el modelo de Ising $2D$ con tamaño discreto [47]. El modelo $3D$ se encuentra sin resolver aún para el caso de campo magnético nulo.

El modelo de Ising $2D$ se representa mediante un arreglo infinito de espines similar al mostrado en la figura **2-1**. El hamiltoniano del sistema es

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (2-1)$$

donde J representa la constante de acoplamiento entre los espines σ_i asignados a cada punto i de la red y cuyos valores pueden ser solo $+1$ o -1 , la primera suma corre sobre los primeros vecinos y H es el campo magnético externo que actúa sobre el sistema.

En $2D$, para $H = 0$, el modelo exhibe una transición de fase de segundo orden cuyo parámetro

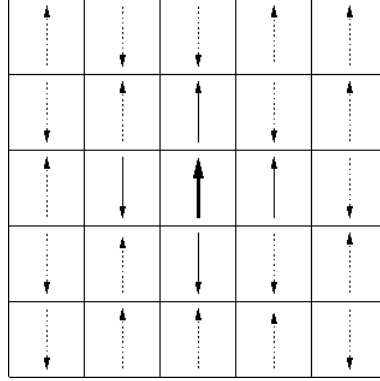


Figura 2-1: Arreglo de espines para el modelo de Ising 2D. El espín central y sus primeros vecinos se muestran en trazos continuos, los demás, con los cuales no interactúa el central, en trazo punteado.

de orden es la magnetización definida como

$$M = \left| \sum_i \sigma_i \right|. \quad (2-2)$$

De acuerdo a la solución de Onsager [45] la temperatura crítica de la transición satisface la relación

$$\sinh \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right) = 1, \quad (2-3)$$

con k_B la constante de Boltzmann. Por lo tanto, $T_c \simeq 2,27J/k_B$.

En adelante, J y k_B se tomarán como 1 a no ser que se establezca lo contrario.

Las simulaciones del modelo deben realizarse para tamaños finitos debido a las limitaciones en hardware. A pesar de esto, es posible obtener resultados bastante cercanos a los teóricos e incluso calcular cantidades como los exponentes críticos de la transición de fase con base en técnicas como el análisis de escalamiento finito [48]. En la figura 2-2 se muestran la energía promedio por enlace y la capacidad calorífica del modelo en función de la temperatura. La forma funcional de ambas proporciona evidencia de una transición de fase de segundo orden cerca a la temperatura crítica calculada por Onsager: la energía tiende a cero a medida que la temperatura aumenta y la capacidad calorífica se hace muy grande alrededor de la región de criticalidad. Ambos efectos son cada vez más marcados a medida que se incrementa el tamaño del sistema.

2.2. Procesos de Markov y convergencia al equilibrio

Un proceso de Markov es un proceso aleatorio donde la probabilidad de obtener un nuevo estado x' depende solo del estado previo x . Está completamente descrito por la matriz

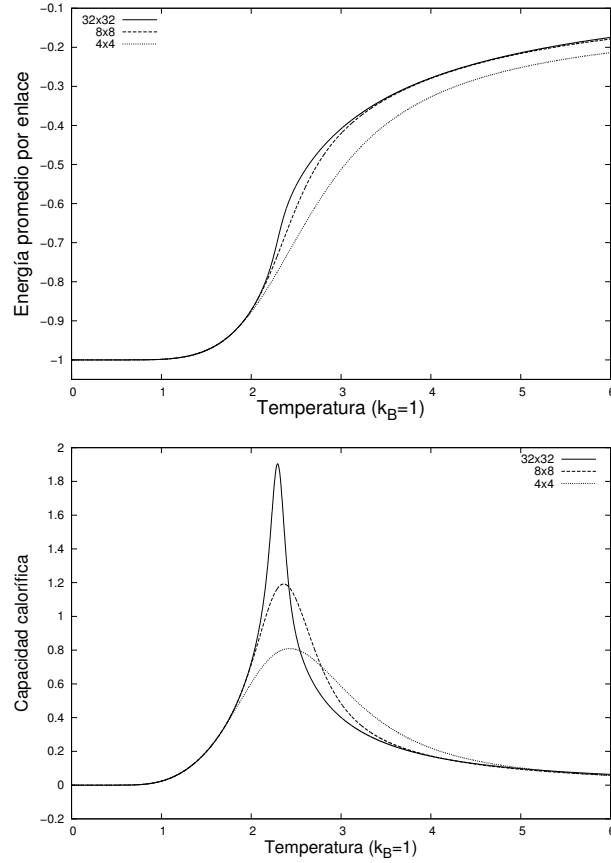


Figura 2-2: Energía promedio por enlace y capacidad calorífica para distintos tamaños del modelo de Ising $2D$. Los resultados fueron obtenidos con base en la densidad de estados calculada por P. D. Beale [47].

de probabilidad de transición $\mathbf{W} = \{W(x'|x)\}$, donde $W(x'|x)$ es la probabilidad de realizar el movimiento $(x'|x)$ de x a x' , y por la distribución de probabilidad $\mathbf{P}_0 = \{P_0(x)\}$ del estado inicial. La distribución del estado x' luego de un paso de Markov es $P_1(x') = \sum_x W(x'|x)P_0(x)$, i.e., $\mathbf{P}_1 = \mathbf{W} \cdot \mathbf{P}_0$ en notación matricial. La distribución de probabilidad luego de n pasos es, entonces, $\mathbf{P}_n = \mathbf{W}^n \mathbf{P}_0$.

Si algunas condiciones se satisfacen, \mathbf{P}_n converge a una distribución de probabilidad única para $n \rightarrow \infty$ independiente del estado inicial. Estas condiciones son [49, 50]:

1. W es irreducible, esto es, existe un $k \geq 0$ tal que $\mathbf{W}_{x',x}^k > 0$ para cada par x, x' . Significa que cualquier estado final puede ser alcanzado desde cualquier estado inicial en un número finito k de pasos de Markov. Esta propiedad se conoce como ergodicidad.
2. W es no periódica, esto es, existe un k_{min} tal que $\mathbf{W}_{x',x}^k > 0$ para todo x y para todo $k > k_{min}$. En otras palabras, la probabilidad de regresar al estado inicial es diferente de cero después de cualquier número de pasos k mayor que un valor umbral k_{min} . Esto

garantiza la unicidad de la distribución de probabilidad límite, que de lo contrario, podría oscilar por siempre entre dos o más distribuciones.

Bajo estas circunstancias, las muestras tomadas después de algunos pasos de transiente tienen aproximadamente la misma distribución de probabilidad, esto es, la distribución límite \mathbf{P} , y pueden ser usadas como el conjunto de muestra.

La distribución límite es un punto fijo de la matriz de probabilidad de transición, esto es,

$$\mathbf{W} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P}. \quad (2-4)$$

Esta relación se conoce como la condición de balance. Dado que $\sum_{x'} W(x'|x) = 1$, puede reescribirse como

$$\sum_x W(x'|x)P(x) = \sum_{x'} W(x'|x)P(x'). \quad (2-5)$$

2.3. Muestreo ponderado

El muestreo ponderado fuerza al proceso de Markov a alcanzar la distribución deseada $P(x)$ en el límite de un número infinito de pasos a partir de la condición de balance detallado:

$$W(x'|x)P(x) = W(x|x')P(x'). \quad (2-6)$$

Ésta es una condición suficiente pero no necesaria para un proceso de Markov. No obstante, es más fácil de mostrar dado que solo depende de los estados x y x' .

Para obtener la condición de balance detallado, el muestreo ponderado divide cada paso de Markov en dos partes. Primero, se escoge un movimiento del estado x al estado $x' \neq x$ con probabilidad $T(x'|x)$; luego, se acepta o descarta con una tasa de aceptación $A(x'|x)$. Por tanto,

$$W(x'|x) = \begin{cases} T(x'|x)A(x'|x) & \text{si } x' \neq x, \\ 1 - \sum_{x' \neq x} T(x'|x)A(x'|x) & \text{si } x' = x. \end{cases} \quad (2-7)$$

Típicamente, $T(x'|x)$ se escoge simétrica, esto es, $T(x'|x) = T(x|x')$, y $A(x'|x)$ se calibra para obtener balance detallado. Tres opciones ampliamente usadas para $A(x'|x)$ son

$$\text{Metropolis:} \quad A(x'|x) = \min\{1, P(x')/P(x)\}, \quad (2-8)$$

$$\text{Glauber:} \quad A(x'|x) = \frac{P(x')}{P(x') + P(x)} \text{ y} \quad (2-9)$$

$$\text{Heat Bath:} \quad A(x'|x) = \frac{1}{Z'} P(x'), \quad (2-10)$$

donde $Z' = \sum_S P(x')$ es la suma de probabilidades $P(x')$ restringida a algún subconjunto S de estados permitidos.

2.4. El algoritmo de Metropolis

El método de Monte Carlo se introdujo con el algoritmo de Metropolis [12] y se popularizó rápidamente en Mecánica Estadística debido a la relativa facilidad en su implementación. Cuando se toman muestras con la distribución de probabilidad canónica a temperatura T , esto es,

$$P_T(x) = \frac{1}{Z(T)} \exp[-E(x)/k_B T], \quad (2-11)$$

con $Z(T) = \sum_x \exp(-E(x)/k_B T)$ la función de partición, $A(x'|x)$ para Metropolis se convierte en

$$A(x'|x) = \min\{1, \exp[-\Delta E(x)/k_B T]\}, \quad (2-12)$$

con $\Delta E(x) = E(x') - E(x)$. La implementación del algoritmo de Metropolis en su versión más simple para pasar de configuración a configuración en el modelo de Ising consiste en:

1. Se propone cambiar el espín de uno de los elementos de la red escogido de manera aleatoria. Esto corresponde a seleccionar una nueva configuración x' a partir de una configuración x .
2. Si el cambio en la energía del sistema $\Delta E = E(x') - E(x)$ es menor que cero, x' se acepta. De lo contrario, se acepta el cambio con probabilidad $p = \exp(-\beta \Delta E)$, es decir, se genera un número aleatorio r uniformemente distribuido en el intervalo $[0, 1]$ y se acepta el cambio si $r < \exp(-\beta \Delta E)$.
3. Se repite el paso 2 hasta obtener el número deseado de configuraciones.

El valor medio de un observable físico Q , a la temperatura T , $\langle Q_T \rangle$, en el ensemble canónico se define como

$$\langle Q \rangle_T = \sum_x Q(x) P_T(x), \quad (2-13)$$

con $P_T(x)$ dada por 2-11. La suma corre sobre todos los estados x del sistema. En la simulación, como el conjunto de muestra tiene la misma distribución que los estados del sistema dado que $P_T(x)$ representa la probabilidad de que un estado x con energía $E(x)$ aparezca, el valor medio puede ser estimado directamente como el valor medio de Q sobre todos los estados en la muestra, esto es

$$\langle Q \rangle_T \simeq \sum_{x \in \text{muestra}} Q(x); \quad (2-14)$$

la igualdad funciona en el límite de un número infinito de muestras \mathcal{N} . Si estamos interesados en la dependencia de $\langle Q \rangle_T$ con T , se requiere un nuevo conjunto de muestra (una nueva corrida de Monte Carlo), en principio, para cada valor de temperatura.

La figura **2-3** muestra la energía media por enlace $\langle E \rangle_T$ y la capacidad calorífica $C_v := (1/k_B T^2)[\langle E^2 \rangle_T - \langle E \rangle_T^2]$ para el modelo de Ising $2D$ de tamaño 8×8 , obtenidas a partir de corridas usando Metropolis y la distribución canónica. Las barras de error se calcularon

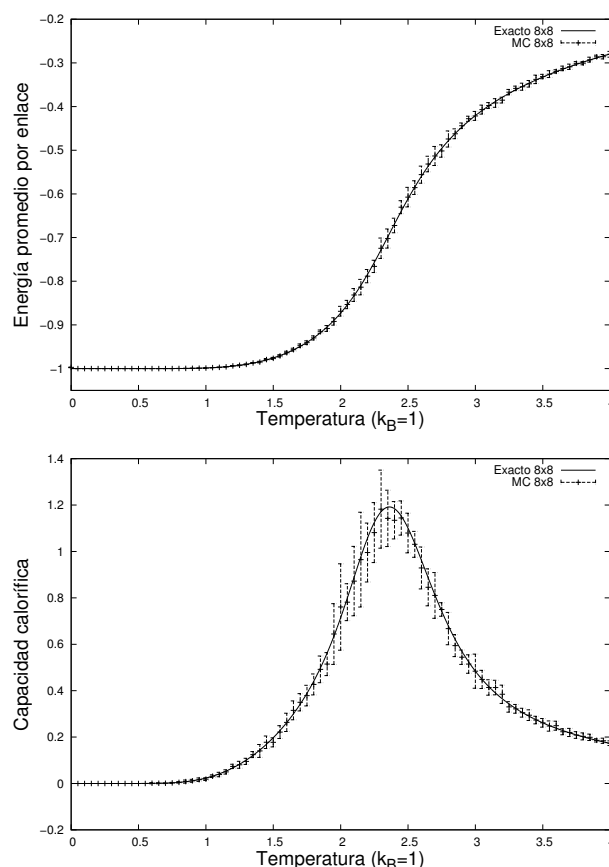


Figura 2-3: Energía promedio por enlace y capacidad calorífica del modelo de ising $2D$ tamaño 8×8 . Los resultados fueron obtenidos usando el algoritmo de Metropolis.

usando *jackknife* con factor t de student para 99% de confiabilidad. En adelante se usarán las mismas condiciones para todas las simulaciones a no ser que se establezca lo contrario.

2.5. Tiempos de equilibrio y correlación

Antes de iniciar la toma de muestras es necesario esperar un transiente para asegurar que el sistema ha alcanzado la distribución de equilibrio. A este tiempo se le denomina tiempo de estabilización o de equilibrio (t_{eq}). De igual forma, durante el proceso de muestreo es necesario esperar un transiente para disminuir la correlación entre muestra y muestra. A este tiempo se le conoce como tiempo de correlación.

Para medir los tiempos de equilibrio y de correlación es necesario definir una unidad de medida. En el algoritmo de Metropolis, el paso de una configuración a otra se realiza proponiendo el cambio de uno solo de los espines de la red. Con base en esto se define el MCSS (*Monte Carlo step per spin*) que corresponde a proponer un cambio para un número igual al total de espines en la red escogidos aleatoriamente.

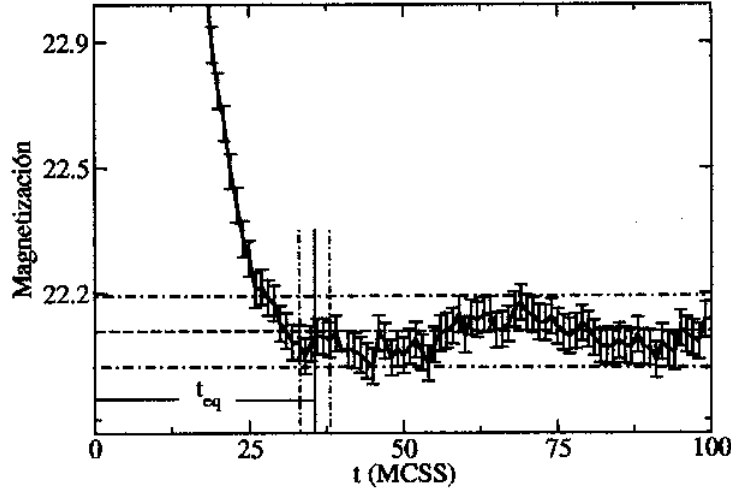


Figura 2-4: Magnetización en función del tiempo de simulación, para un modelo de Ising $L \times L$ con $T = 3,0$ y $L = 8$, muestreado con el algoritmo de Metropolis. La figura fue tomada de [52].

Uno de los criterios más sencillos para realizar un estimado de t_{eq} en el caso de muestreo con la distribución de Boltzmann, consiste en graficar una propiedad del sistema con distribución normal como función del tiempo de simulación, por ejemplo, para el modelo de Ising, la magnetización M . Al alcanzar el equilibrio, los valores numéricos oscilan simétricamente alrededor de un valor medio. Otro método un poco más general, pero al igual que el anterior sin rigor estadístico, consiste en graficar la evolución de algún observable para el que se espere una distribución aproximadamente normal y que dependa de todo el rango de energía explorado, usando datos obtenidos de dos simulaciones del mismo sistema con estados iniciales distintos. Cuando el observable converge al mismo valor en ambas simulaciones se estima que el equilibrio ha sido alcanzado.

Un criterio más elaborado y con fundamentación estadística se basa en medir el tiempo de correlación no lineal definido como

$$\tau_Q^0 := \int_{t=0}^{\infty} C_Q^0(t) \text{ donde } C_Q^0(t) := \frac{\{Q(0)Q(t)\} - \{Q(0)Q(\infty)\}}{\{Q(0)^2\} - \{Q(0)Q(\infty)\}} \quad (2-15)$$

es la función de correlación no lineal [51, 24] y las llaves $\{\}$ simbolizan promedios sobre todas las posibles simulaciones realizadas partiendo de un estado inicial con distribución fija. Esta función inicia en uno y termina en cero, semejando una exponencial decreciente. El tiempo de estabilización se toma generalmente como de tres a cinco veces este tiempo de correlación ya que a $\tau = 5$ una exponencial alcanza el 0.5% de su valor inicial. En la figura 2-4 se muestra la magnetización en función del tiempo de simulación para el modelo de Ising 2D 8×8 a una temperatura $T = 3,0$. Como estado inicial se tomó el estado de mínima energía y el tiempo de equilibrio obtenido fue de $t_{eq} = 35(3)$.

Como cada nueva muestra en el muestreo ponderado es construída a partir de la anterior, las muestras sucesivas están fuertemente correlacionadas, y las barras de error de los promedios calculados con estas muestras dependen de dichas correlaciones. Considere un proceso de muestreo ponderado para estimar el valor medio $\langle Q \rangle$ de alguna cantidad Q . Tomemos n muestras, cada una luego de δt pasos, para obtener una secuencia de valores $Q(0), Q(1), \dots, Q(n-1)$. El valor esperado del cuadrado del error estadístico está dado por [51]

$$\langle (\delta Q)^2 \rangle = \frac{1}{n} [\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2] \left(1 + 2 \frac{\tau_Q}{\delta t} \right), \quad (2-16)$$

donde

$$\tau_Q := \int_{t=0}^{\infty} \phi_Q(t) dt, \quad \phi(t) := \frac{\langle Q(0)Q(t) \rangle - \langle Q \rangle^2}{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2} \quad (2-17)$$

son el tiempo de correlación y la función de autocorrelación, respectivamente. Los promedios $\langle \rangle$ se realizan sobre todas las posibles secuencias del proceso de Markov usado para tomar las muestras. Si $\delta t \gg \tau_Q$, el paréntesis en 2-16 es casi uno y se obtiene la expresión usual para calcular errores estadísticos (las muestras están casi no correlacionadas). Si $\delta t \ll \tau_Q$, el término entre paréntesis puede ser ignorado y obtenemos

$$\langle (\delta Q)^2 \rangle = 2 \frac{\tau_Q}{t_{\text{obs}}} [\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2], \quad (2-18)$$

donde $t_{\text{obs}} = n\delta t$ es el número total de pasos en la simulación. El error estadístico es, entonces, independiente del número de pasos entre muestras. La exactitud de $\langle Q \rangle$ está limitada por el tiempo de correlación τ_Q .

3 Monte Carlo basado en la densidad de estados

Con el aumento en la complejidad de los sistemas estudiados mediante métodos de Monte Carlo, también aumenta la dificultad al calcular observables físicos. En la mayoría de los casos la solución no está en usar más recursos computacionales, sino en mejorar los algoritmos de cálculo. En el grupo de algoritmos de Monte Carlo surgidos para disminuir los tiempos de cómputo están los que tienen como base a la densidad de estados, también denominados métodos de histograma. A continuación, se presenta su fundamento teórico y se introducen los métodos Multicanónico y de Wang-Landau usados para acelerar el proceso de muestreo, y los Métodos de Histograma Canónico, o *SHM*, y de Histograma Ancho, o *BHM*, que permiten obtener promedios en un rango continuo de temperaturas a partir de simulaciones realizadas a una sola o varias temperaturas.

3.1. La densidad de estados

Considere un sistema físico con espacio de fase Γ y alguna propiedad I del sistema, como por ejemplo, la energía E o la magnetización M . La densidad de estados $g(I)$ es el número de estados con el mismo valor de I . Si se define Γ_I como el subespacio de todos los estados con el mismo valor I ,

$$g(I) := \text{número de estados en } \Gamma_I. \quad (3-1)$$

Como se verá a continuación, conocer la densidad de estados de un sistema facilita su estudio. Por ejemplo, consideremos un sistema con hamiltoniano \mathcal{H} en equilibrio a una temperatura T . En el ensemble canónico (Maxwell-Boltzmann) el valor esperado de Q a la temperatura T está dado por 2-13, es decir

$$\langle Q \rangle_T = \frac{1}{Z(T)} \sum_x Q(x) \exp(-E(x)/k_B T); \quad (3-2)$$

En términos de la densidad de estados $g(E)$, esta expresión puede reescribirse como

$$\langle Q \rangle_T = \frac{1}{Z(T)} \sum_E \langle Q(E) \rangle g(E) \exp[-E/k_B T], \quad (3-3)$$

$$Z(T) = \sum_E g(E) \exp[-E/k_B T], \quad (3-4)$$

donde $\langle Q(E) \rangle$ es el promedio de Q sobre todos los estados con energía E , esto es, el promedio microcanónico. Es claro que dados $g(E)$ y $\langle Q(E) \rangle$ se puede calcular $\langle Q \rangle_T$ a cualquier temperatura deseada. Como veremos mas adelante, esta es la base de los métodos de Monte Carlo conocidos como métodos de histograma.

Si el sistema tiene grados de libertad continuos, Γ es también continuo y el número de estados dentro de Γ_I se hace no contable. Si Γ_I es un espacio métrico e I una variable discreta, la densidad de estados puede definirse como la fracción de volumen de Γ_I

$$g(I) := \frac{\int_{\Gamma_I} d\Gamma}{\int_{\Gamma} d\Gamma}. \quad (3-5)$$

Si I es una variable continua, $g(I)$ puede ser definida como la fracción de volumen de todos los estados con un valor I entre I e $I + dI$, esto es, una función de densidad:

$$\int_I g(I) dI =: \int_{\Gamma} d\Gamma. \quad (3-6)$$

Si se normaliza $g(I)$ puede interpretarse en términos de probabilidades. Supongamos que todos los estados en el espacio de fase son igualmente probables. Si I es una variable continua, $g(I)$ es la probabilidad de obtener un valor de I entre I e $I + dI$, i.e., la función de densidad de probabilidad (p.d.f.) de la variable aleatoria I .

Para algunos sistemas la densidad de estados puede ser calculada analíticamente. Puede ser extraída, por ejemplo, a partir de los coeficientes de una expansión en serie de la función de partición como en el caso del modelo de Ising [47]. Sin embargo, la mayoría de los sistemas no tiene solución analítica y $g(I)$ debe ser estimado usando métodos de Monte Carlo.

3.1.1. $g(I)$ a partir de muestreo simple

La densidad de estados puede ser calculada a partir de muestreo simple [24] que consiste en generar una muestra de estados escogidos aleatoriamente, uniformemente distribuidos en todo el espacio de fase del sistema y contar cuantos estados en la muestra tienen el valor I . Debido a la ley de los grandes números

$$g(I) \simeq \frac{V(I)}{\mathcal{N}}, \quad (3-7)$$

donde $V(I)$ es el histograma de visitas, esto es, el número de muestras en cada valor I y \mathcal{N} es el número total de muestras. La igualdad se logra para un número infinito de muestras. Este método solo es útil cuando la densidad de estados es del mismo orden de magnitud para todos los valores de I . En la mayoría de sistemas esto no sucede, por lo tanto es necesario utilizar otra estrategia, por ejemplo, muestro ponderado.

3.1.2. $g(I)$ a partir de muestro ponderado

Para esto es necesario realizar muestro ponderado con una distribución límite que dependa solo de I , i.e. $P(x) = f[I(x)]$ con $I(x)$ el valor de I en el estado x . Definamos $P(I)$ como la probabilidad de obtener el valor I de esta distribución. Como $P(x)$ toma el mismo valor $P(x|I(x) = I)$ para todos los estados x con $I(x) = I$, $P(I)$ iguala a $P(x|I(x) = I)$ por el número $g(I)$ de estos estados, esto es,

$$P(I) = g(I)P(x|I(x) = I), \quad y \quad g(I) = \frac{P(I)}{P(x|I(x) = I)}. \quad (3-8)$$

Debido a la ley de los grandes números, el histograma de visitas normalizado $V(I)/\mathcal{N}$ iguala a $P(I)$ en el límite de un número \mathcal{N} infinito de muestras, y puede ser usado como un estimado de $P(I)$ para \mathcal{N} finito, esto es

$$\lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{V(I)}{\mathcal{N}} = P(I), \quad P(I) \simeq \frac{V(I)}{\mathcal{N}}. \quad (3-9)$$

Entonces, $g(I)$ puede ser estimado, también para \mathcal{N} finito, como:

$$g(I) \simeq \frac{V(I)}{\mathcal{N}} \frac{1}{P(x|I(x) = I)}. \quad (3-10)$$

A continuación se presentan dos métodos útiles para ilustrar este punto: el Método Multicanónico y el Método de Wang-Landau.

3.2. Métodos de muestreo

3.2.1. Método Multicanónico

El Método Multicanónico propuesto por Berg [25, 53, 54, 55], consiste en muestrear todas las energías E en algún intervalo de energía (E_L, E_H) con la misma probabilidad, esto es, $P(E) = \text{constante}$. Con esto, $V(E)$ será casi uniforme en el intervalo.

De acuerdo a la ecuación (3-8), muestrear con $P(E) = \text{constante}$ implica muestrear con $P(x)$ dada por

$$P(x) \propto 1/g[E(x)]. \quad (3-11)$$

Entonces, se requiere suponer una densidad de estados de entrada. El método inicia suponiendo *ad hoc* $g_0(E)$ muestreando con $P(x) \propto 1/g_0[E(x)]$. El histograma $V_0(E)$ obtenido de esta manera se usa para mejorar la suposición realizada a partir de la ecuación (3-10), i.e.

$$V(E) \simeq \mathcal{N} \frac{g(E)}{g_0(E)}; \quad g_1(E) = \frac{V(E)}{\mathcal{N}} g_0(E). \quad (3-12)$$

El método itera este procedimiento hasta que el valor deseado para el error sea obtenido. Este método también ha sido introducido por J. Lee en términos de la entropía microcanónica $S(E) := \ln[g(E)]$ de una manera muy intuitiva [26].

En general, difícilmente se puede encontrar un observable físico que tenga distribución normal y dispersión baja en un rango de energías (E_L, E_F) , por lo que no se pueden realizar estudios para el tiempo de estabilización del método multicanónico usando las técnicas tradicionales. En el 2002, Guerra y Muñoz [52] propusieron una técnica para estimar t_{eq} basado en el criterio de control estadístico de la desviación χ^2 entre el histograma de visitas acumulado en un tiempo t y las frecuencias esperadas por la probabilidad de incluir en la muestra un estado cualquiera con energía E , $P(E)$, i.e.

$$\chi^2 = n \sum_E \frac{[V_t(E) - P(E)]^2}{P(E)}, \quad (3-13)$$

donde n es el número de veces que se repite el proceso y $P(E) = 1/k_E$ con k_E el número de energías muestreadas. Se obtuvo que:

- $t_{eq} = 0,27(15)L^{2,80(13)}$, con L el tamaño del sistema.
- $t_{eq} = 0,70(13)k_E^{1,40(11)}$, donde k_E es el número de energías en el rango muestreado cuando el muestreo se realiza por ventanas de energía, manteniendo el límite inferior en el valor de energía mínima del sistema y el límite superior se cambia en pasos uniformes hasta alcanzar el máximo.

3.2.2. Método de Wang-Landau

Este método fue propuesto por F. Wang y D. P. Landau en el 2001[28]. Al igual que el método Multicanónico, muestrea con $P(x) \propto 1/g[E(x)]$ a partir de distribuciones de probabilidad *a priori* desconocidas, pero difiere en que el estimado de $g(E)$ se afina a cada paso de la simulación en lugar de entre corridas. Por lo anterior, no satisface la condición de balance detallado y hasta el momento no existe prueba de que lleve al equilibrio.

Inicialmente puede suponerse por ejemplo $g_0(E) = 1$. Cada vez que un nivel de energía E es visitado, se actualiza la correspondiente densidad de estados multiplicando el valor actual por un factor $f > 1$, esto es, $g(E) \rightarrow fg(E)$. El factor de modificación inicial puede ser tan grande como $f = f_0 = e^1 \simeq 2,71828$, lo cual permite alcanzar todos los posibles niveles de energía rápidamente aun para sistemas grandes. El proceso se realiza hasta que el histograma de visitas $V(E)$ sea plano¹. En este punto, la densidad de estados converge al valor real con una exactitud proporcional a $\ln(f)$. Luego se reduce el factor de modificación a uno mas fino de acuerdo a una relación como $f_1 = \sqrt{f_0}$ (cualquier función que decrezca monótonamente a 1 servirá) y se reinicia el histograma $V(E)$. El proceso se repite hasta que algún valor predefinido para f se alcance.

¹Es imposible obtener un histograma de visitas plano. El término significa que el histograma $V(E)$ para todos los valores de E no es menos que un porcentaje establecido del histograma promedio $\langle V(E) \rangle$, por ejemplo, el 80 %.

3.3. Principio básico de los métodos de histograma

En mecánica estadística clásica el promedio canónico de una cantidad física macroscópica Q a una temperatura T está dado por

$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_x Q(x) \exp(-E(x)/k_B T)}{\sum_x \exp(-E(x)/k_B T)}, \quad (3-14)$$

donde la suma corre sobre todas las posibles configuraciones del sistema, $E(x)$ y $Q(x)$ representan los valores de la energía y de la cantidad Q en la configuración x , respectivamente, y k_B es la constante de Boltzmann. Esta relación puede ser reescrita como

$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_E \langle Q(E) \rangle g(E) \exp(-E/k_B T)}{\sum_E g(E) \exp(-E/k_B T)}, \quad (3-15)$$

con

$$\langle Q(E) \rangle = \frac{\sum_{x[E]} Q(x)}{g(E)} \quad \text{y} \quad \sum_x = \sum_E \sum_{x[E]}. \quad (3-16)$$

El índice $x[E]$ representa todas las configuraciones con igual energía E , $\langle Q(E) \rangle$ corresponde al promedio microcanónico de la cantidad Q a la energía E y $g(E)$ a la densidad de estados (el número de configuraciones con energía E). Ambas son propiedades exclusivas del sistema y son independientes del concepto de temperatura. La dependencia con la temperatura en el promedio canónico se encuentra solamente en el factor de Boltzmann, lo cual sugiere que si se pueden estimar $g(E)$ y $\langle Q(E) \rangle$ en una sola simulación, se puede calcular $\langle Q \rangle_T$ para cualquier temperatura T evitando así la necesidad de múltiples corridas. Luego, el problema de *sumar* por la ec. (3-14) sobre todas las configuraciones x se ha transformado en el problema de *contar* cuantas configuraciones tienen la misma energía E . Esta constituye la base de todos los métodos de histograma que difieren, principalmente, en la manera de estimar $g(E)$ y que deben su nombre al hecho de que requieren -como se verá en particular para el BHM- de los histogramas de distintas cantidades, entre estas, el número de visitas realizadas a cada nivel de energía E , $V(E)$, conocido como histograma de visitas.

3.4. Método de Histograma Canónico o SHM

El método de histograma canónico fue introducido por Salsburg [14] y Verlet [56] y popularizado por Ferrenberg y Swendsen [15]. Es una técnica de re-ponderación que permite reusar el conjunto de muestra obtenido a partir de muestreo ponderado con la distribución canónica a temperatura T , para calcular promedios $\langle Q \rangle_{T'}$ a temperaturas $T' \neq T$.

Tomamos muestras con la distribución canónica a una temperatura T usando cualquier dinámica de muestreo como las descritas en el capítulo anterior. Acumulamos $V(E)$, el

histograma de visitas, y $Q(E)$, i.e., la suma de $Q(x)$ en cada estado de la muestra con $E(x) = E$. A partir de la ecuación (3-10) obtenemos

$$g(E) \simeq CV(E) \exp[E/k_B T], \quad (3-17)$$

con $C = Z(T)/\mathcal{N}$ una constante. Adicionalmente,

$$\langle Q \rangle_E \simeq \frac{Q(E)}{V(E)}. \quad (3-18)$$

Con $g(E)$ y $\langle Q(E) \rangle$ es posible estimar $\langle Q \rangle_{T'}$ a partir de la ecuación (3-3), en teoría, para cualquier otra temperatura T' . Definiendo $\beta_T := 1/k_B T$, obtenemos

$$\langle Q \rangle'_T \simeq \frac{\sum_E \langle Q(E) \rangle V(E) \exp[E(\beta_T - \beta_{T'})]}{\sum_E V(E) \exp[E(\beta_T - \beta_{T'})]}. \quad (3-19)$$

Este método es especialmente útil para determinar, por ejemplo, la temperatura y el alto de los picos de cantidades termodinámicas como el calor específico C_v o la susceptibilidad magnética χ_s cerca a una transición de fase, y ha sido ampliamente usado para determinar la temperatura crítica de muchos sistemas. Sin embargo, como la precisión y exactitud de $g(E)$ dependen del número de visitas $V(E)$, el cual se distribuye en el eje de energía aproximadamente como una Gaussiana con centro en $\langle E \rangle_T$ y ancho $\sigma_E = T \sqrt{k_B C_v(T)}$, en las colas de la distribución hay tan pocas muestras que la estadística no es suficiente para realizar un buen estimado de $g(E)$ (ver figura **3-1**).

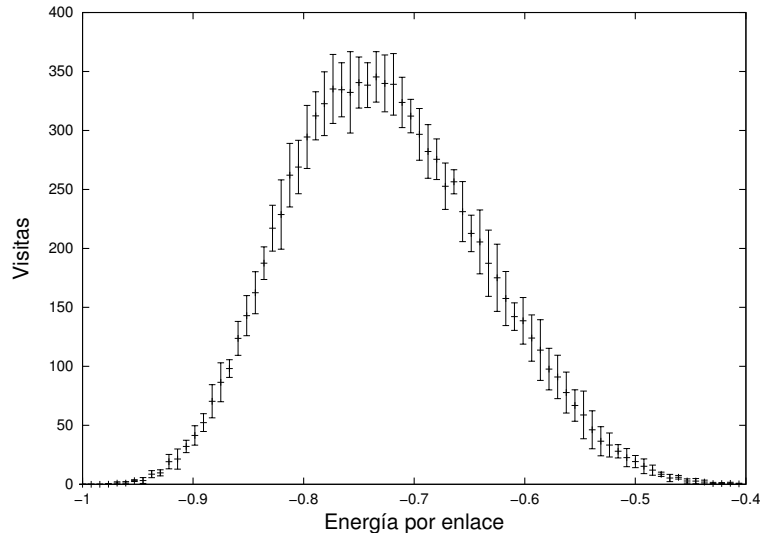


Figura **3-1**: Histograma de visitas $V(E)$ para para el modelo de Ising $2D$ 16×16 a $T = 2,269$ con 10000 muestras.

El criterio usual para determinar el rango de temperaturas de validez del método es que el valor medio $\langle E \rangle_{T'}$ no difiera de $\langle E \rangle_T$ por mas de $1 - \sigma_E$, con $\sigma_E = T \sqrt{k_B C_v(T)}$. Esta

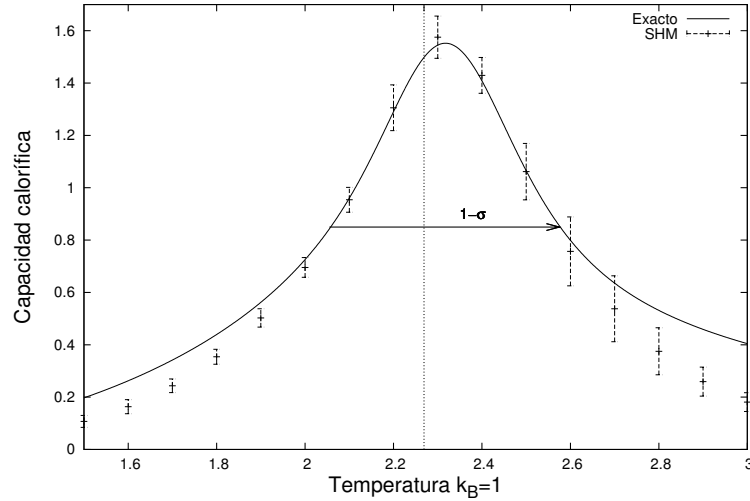


Figura 3-2: Capacidad calorífica para el modelo de Ising $2D$ 16×16 con el método SHM muestreando a $T = 2,269$.

condición se convierte en

$$\frac{\Delta T}{T} < \sqrt{\frac{k_B}{C_v(T)}}. \quad (3-20)$$

En la figura 3-2 se muestra la capacidad calorífica para el modelo de Ising $2D$ calculada dentro de este rango con el método SHM.

3.5. Método de Histograma Ancho o BHM

El método de Histograma Ancho o *BHM* fue introducido por de Oliveira, Penna y Hermann [17] en 1996. Es una técnica de análisis que permite determinar la densidad de estados $g(I)$ a partir de los promedios microcanónicos $\langle N_{up} \rangle$ y $\langle N_{dn} \rangle$ de las cantidades macroscópicas $N_{up}(x)$ y $N_{dn}(x)$ definidas como el número de transiciones que incrementan o disminuyen la energía $I(x)$ del estado x en una cantidad fija ΔI_{fix} , respectivamente. Con esto se logra una mayor exactitud en el cálculo de la densidad de estados con menos muestras que en el *SHM* de manera que aumenta la rapidez de la simulación no solo tomando muestras de manera mejorada si no extrayendo mayor información de éstas.

Imaginemos un protocolo de movimientos permitidos en el espacio de estados de un sistema con grados de libertad discretos que satisfaga la condición de microrreversibilidad: el cambio de una configuración x a una x' es permitido si y sólo si el cambio de regreso también lo es. Este puede ser definido mediante una matriz de transición

$$P(x|x') = \begin{cases} 1, & \text{si } x \rightarrow x' \text{ es permitido,} \\ 0, & \text{en caso contrario,} \end{cases} \quad (3-21)$$

con

$$P(x|x') = P(x'|x). \quad (3-22)$$

Estos movimientos son **potenciales** o **virtuales** en el sentido de que no son realizados pero permiten calcular la densidad de estados $g(E)$, como veremos más adelante.

Ahora definamos la cantidad macroscópica $N_{up}(x)$ ($N_{dn}(x)$) como el número de movimientos permitidos que aumentan (disminuyen) la energía de la configuración x en una cantidad fija $\Delta E_{fijo} > 0$.

Un protocolo de movimientos para el modelo de Ising consiste, por ejemplo, en voltear un espín. De esta forma, $N_{up}(x)$ es el número de espines de la configuración x que, si se llegaran a voltear, incrementarían la energía de la configuración en ΔE_{fijo} , y $N_{dn}(x)$ es el número de espines que reducirían dicha energía en el mismo valor.

Sean x y x' configuraciones con energía E y $E + \Delta E_{fijo}$, respectivamente. Como consecuencia de la microrreversibilidad, se tiene que

$$\sum_{x[E]} N_{up}(x) = \sum_{x'[E+\Delta E_{fijo}]} N_{dn}(x'), \quad (3-23)$$

o de igual forma,

$$g(E)\langle N_{up}(E) \rangle = g(E + \Delta E_{fijo})\langle N_{dn}(E + \Delta E_{fijo}) \rangle. \quad (3-24)$$

con $\langle N_{up}(E) \rangle$ y $\langle N_{dn}(E + \Delta E_{fijo}) \rangle$ los promedios microcanónicos de las cantidades $N_{up}(x)$ y $N_{dn}(x')$, respectivamente.

Esta relación se conoce como **ecuación BHM**. Es exacta para cualquier modelo estadístico [57] y puede ser expresada como

$$\ln g(E + \Delta E_{fijo}) - \ln g(E) = \ln \frac{\langle N_{up}(E) \rangle}{\langle N_{dn}(E + \Delta E_{fijo}) \rangle}. \quad (3-25)$$

Luego, una vez se hayan estimado $\langle N_{up}(E) \rangle$ y $\langle N_{dn}(E) \rangle$, se puede calcular de manera recursiva $g(E)/g(E_0)$ para todos los valores de E a partir de un punto inicial $(E_0, \ln g(E_0))$.

Los promedios microcanónicos $\langle N_{up}(E) \rangle$ y $\langle N_{dn}(E) \rangle$ se pueden estimar de la manera usual, construyendo histogramas que acumulen los valores de N_{up} y N_{dn} para cada energía E :

$$N_{up}(E) = \sum_{x \in \Omega} N_{up}(x) \delta_{E_x, E} \quad \text{y} \quad N_{dn}(E) = \sum_{x \in \Omega} N_{dn}(x) \delta_{E_x, E}, \quad (3-26)$$

donde la suma se extiende sobre todas las configuraciones x en la muestra Ω . Estos histogramas, divididos por el histograma de visitas

$$V(E) = \sum_{x \in \Omega} \delta_{E_x, E}, \quad (3-27)$$

dan estimaciones aproximadas de los promedios microcanónicos,

$$\langle N_{up}(E) \rangle \approx \frac{N_{up}(E)}{V(E)}, \quad \langle N_{dn}(E) \rangle \approx \frac{N_{dn}(E)}{V(E)}, \quad (3-28)$$

siempre y cuando el proceso de muestreo sea tal que configuraciones con igual energía tengan igual probabilidad de ser incluídas en la muestra. A partir de la ecuación (3-25) se define la cantidad $\beta(E)$ de la cual es posible obtener $g(E)/g(E_0)$ mediante integración numérica, de nuevo, a partir de un punto inicial $(E_0, \ln g(E_0))$:

$$\beta(E) \equiv \frac{d \ln g(E)}{dE} \approx \frac{1}{\Delta E} \ln \frac{\langle N_{up}(E) \rangle}{\langle N_{dn}(E + \Delta E) \rangle}. \quad (3-29)$$

Dos hechos importantes han de notarse. Primero, que el promedio $\langle Q \rangle_T$ es independiente del valor $g(E_0)$ lo cual puede verse de la ecuación (3-15). Luego, el punto inicial $(E_0, \ln g(E_0))$ es irrelevante. Segundo, el método es independiente de la dinámica de muestreo empleada dentro del proceso de Monte Carlo y además muestras obtenidas por métodos diferentes pueden acumularse en un único conjunto de histogramas. En todos los casos, las correlaciones entre muestras tienen que ser lo suficientemente pequeñas para evitar problemas en los estimados de los promedios microcanónicos [58, 57].

3.5.1. Implementación

Los pasos necesarios para implementar el método BHM son:

1. Medir la energía E para la configuración actual del sistema.
2. Acumular en los cuatro histogramas $V(E)$, $Q(E)$, $N_{up}(E)$ y $N_{dn}(E)$ para un ΔE fijo.
3. Repetir N veces los pasos 1 y 2 para completar el número de muestras deseadas.

4. Usar las ecuaciones

$$\langle Q(E) \rangle = \frac{\sum_{x[E]} Q(x)}{V(E)} \quad (3-30)$$

y (3-28) para estimar los promedios microcanónicos.

5. Obtener $g(E)$ a partir de la ecuación BHM (3-24).
6. Calcular el promedio canónico para cualquier temperatura T del observable Q a partir de

$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_E \langle Q(E) \rangle g(E) \exp(-E/k_B T)}{\sum_E g(E) \exp(-E/k_B T)}. \quad (3-31)$$

3.5.2. BHM para el modelo de Ising $2D$

Como ejemplo del funcionamiento del *BHM* presentamos resultados para el modelo de Ising $2D$. Como se dijo anteriormente, una de las ventajas del método es que permite unir, en un solo análisis, muestras obtenidas a diferentes temperaturas. Con esto, se aumenta el rango de energías muestreadas y por lo tanto el rango de validez en la densidad de estados. El criterio

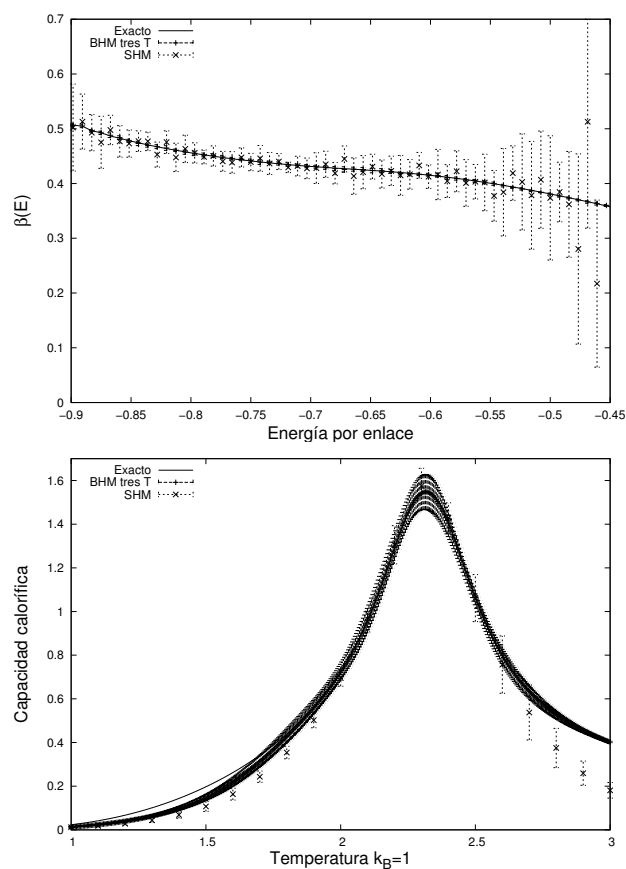


Figura **3-3**: Capacidad calorífica y $\beta(E)$ para el modelo de Ising $2D$ tamaño 16×16 . Los resultados fueron obtenidos usando el algoritmo de Metropolis como dinámica de muestreo y analizando datos con el *SHM* a $T = 2,269$ y el *BHM* a varias temperaturas.

usual para establecer la separación entre las temperaturas es el mismo usado en el caso del *SHM* (ver ec. (3-20)). Los resultados obtenidos para la capacidad calorífica específica C_v y la función $\beta(E)$ se muestran en la gráfica **3-3**.

Se observa como el *BHM* funciona en un rango de temperaturas mucho mayor que el *SHM* con un menor error estadístico.

4 Método de Histograma Ancho Markoviano

En el capítulo anterior se presentaron los métodos de Wang-Landau y Multicanónico como dinámicas de muestreo. Ambos permiten estimar la densidad de estados del sistema en menor tiempo y con mejores resultados en comparación con dinámicas de muestreo simple y ponderado, pero solo el Método Multicanónico satisface la condición de balance detallado debido a que la densidad de estados se actualiza entre corridas y no de configuración a configuración como en Wang-Landau. También se presentó el Método BHM como técnica de análisis. Este permite calcular la densidad de estados a partir del número de transiciones que incrementan o disminuyen la energía del sistema en una cantidad fija, con lo cual se logra extraer mayor información de las muestras tomadas y calcular promedios de observables en un rango más amplio de temperatura. En este capítulo se combinan los Métodos de Wang-Landau, Multicanónico e Histograma Ancho para lograr un nuevo Método de Histograma que denominamos Método de Histograma Plano Markoviano, y se prueba para el modelo de Ising $2D$.

4.1. Principio básico del Método de Histograma Ancho Markoviano

El Método de Histograma Ancho Markoviano, MBHM, consta de dos partes. Una primera en la cual se realiza un ciclo de muestreo con el Método de Wang-Landau y el análisis de los datos acumulados con BHM para estimar la densidad de estados del sistema. En la segunda parte se usa el Método Multicanónico como dinámica de muestreo tomando como dato de entrada para la densidad de estados el estimado realizado en la parte uno, para posteriormente analizar los datos tomados de nuevo con BHM. De esta manera, el método satisface la condición de balance detallado, por lo cual se garantiza que las configuraciones muestreadas constituyen una cadena de Markov. Como criterio para finalizar la toma de datos en ambas partes, se exige que el histograma acumulado de visitas a cada nivel de energía del sistema sea plano.

4.1.1. Implementación

De manera general, la implementación del Método de Histograma Plano requiere los siguientes pasos:

- Realizar un ciclo de muestreo con el Método de Wang-Landau.
- Calcular la densidad de estados usando el BHM como técnica de análisis.
- Usar el Método Multicanónico tomando como densidad de estados la calculada en el paso anterior.
- Analizar de nuevo los datos con usando el Método de Histograma Ancho.

O, de manera más específica,

1. Suponer una densidad de estados inicial $g_0(E)$.
2. Medir la energía E para la configuración actual del sistema.
3. Acumular en los cuatro histogramas $g_0(E)$, $V(E)$, $N_{up}(E)$ y $N_{dn}(E)$ para un ΔE fijo.
4. Repetir los dos pasos anteriores hasta que el histograma $V(E)$ sea plano.
5. Obtener $g(E)$ a partir de la ecuación BHM (3-24).
6. Tomar $g_0(E) = g(E)$ para la toma de muestras.
7. Medir la energía E para la configuración actual del sistema.
8. Acumular en los cuatro histogramas $V(E)$, $Q(E)$, $N_{up}(E)$ y $N_{dn}(E)$ para un ΔE fijo.
9. Repetir los dos pasos anteriores hasta que el histograma $V(E)$ sea plano.
10. Obtener $g(E)$ a partir de la ecuación BHM (3-24).
11. Usar las ecuaciones

$$\langle Q(E) \rangle = \frac{\sum_{x[E]} Q(x)}{V(E)} \quad (4-1)$$

y (3-28) para estimar los promedios microcanónicos.

12. Calcular el promedio canónico para cualquier temperatura T del observable Q a partir de

$$\langle Q \rangle_T = \frac{\sum_E \langle Q(E) \rangle g(E) \exp(-E/k_B T)}{\sum_E g(E) \exp(-E/k_B T)}. \quad (4-2)$$

4.2. Método de Histograma Ancho Markoviano para el modelo de Ising $2D$

Cuando se requiere probar un nuevo algoritmo es conveniente hacerlo en una teoría pequeña, que tarde poco tiempo en ser simulada sin grandes requerimientos computacionales y para la cual exista solución teórica. El ejemplo clásico en mecánica estadística es el modelo de Ising: como se estableció en el capítulo 2 es solucionable teóricamente en $1D$ [44] y $2D$ [45], y su simulación toma sólo unos pocos minutos en un computador personal ordinario. Por esta razón, el modelo en $2D$ se usó como terreno de prueba para el Método de Histograma Ancho Markoviano. Se realizaron simulaciones de una red tamaño 8×8 con condiciones de frontera periódicas, $H = 0$, 10 corridas. Las barras de error se calcularon usando *jackknife*, con factor t de Student correspondiente a 99% de confiabilidad.

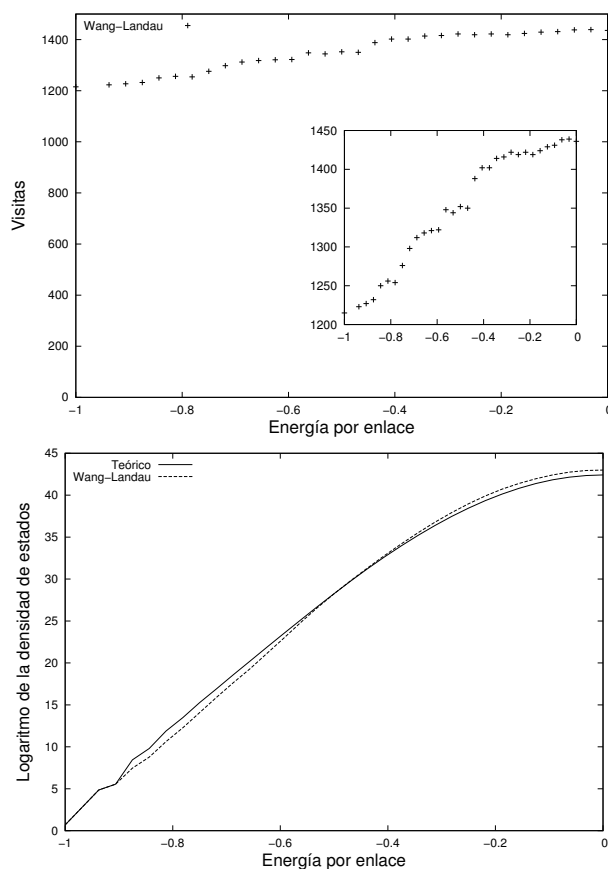


Figura 4-1: Histograma de visitas y logaritmo natural de la densidad de estados para cada nivel de energía por espín del modelo de Ising $2D$, usando Wang-Landau como dinámica de muestreo, BHM como técnica de análisis y la densidad de estados teórica calculada por P.D. Beale.

En la figura 4-1 se muestran el histograma de visitas para cada nivel de energía por espín

obtenido en el ciclo de Wang-Landau, y el estimado de la densidad de estados del sistema realizado aplicando la ecuación BHM (3-24). Se observa claramente que $V(E)$ tiende a ser plano, de acuerdo al criterio escogido, desviación menor al 10 % respecto al número promedio de visitas a cada nivel de energía, y que $g(E)$ es bastante cercano al teórico, por lo cual es mejor suposición de entrada para el Método Multicanónico en comparación a $g_0(E) = \text{constante}$, como normalmente se escoge.

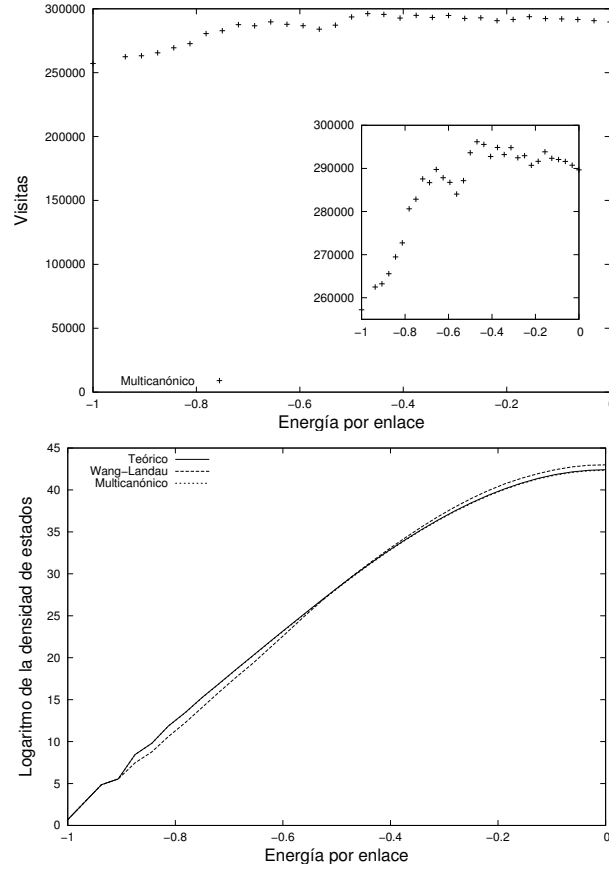


Figura 4-2: Histograma de visitas y logaritmo natural de la densidad de estados para cada nivel de energía por espín del modelo de Ising $2D$, usando el Método Multicanónico como dinámica de muestreo, BHM como técnica de análisis y la densidad de estados teórica calculada por P.D. Beale.

En la segunda parte del nuevo Método se mantuvo el criterio para finalizar el ciclo de muestreo, lograr una dispersión menor al 10 % respecto al promedio de visitas en cada nivel de energía por enlace. El cálculo de la densidad de estados en cambio mejora considerablemente: en la gráfica 4-2 se observa que $g(E)$ coincide con el valor teórico.

Finalmente, se calculan la energía y la capacidad calorífica para el modelo, y se compara con las obtenidas usando la densidad de estados teórica y simulaciones con el algoritmo de Metropolis. Claramente se observa en ambas figuras una mejora considerable con el Método

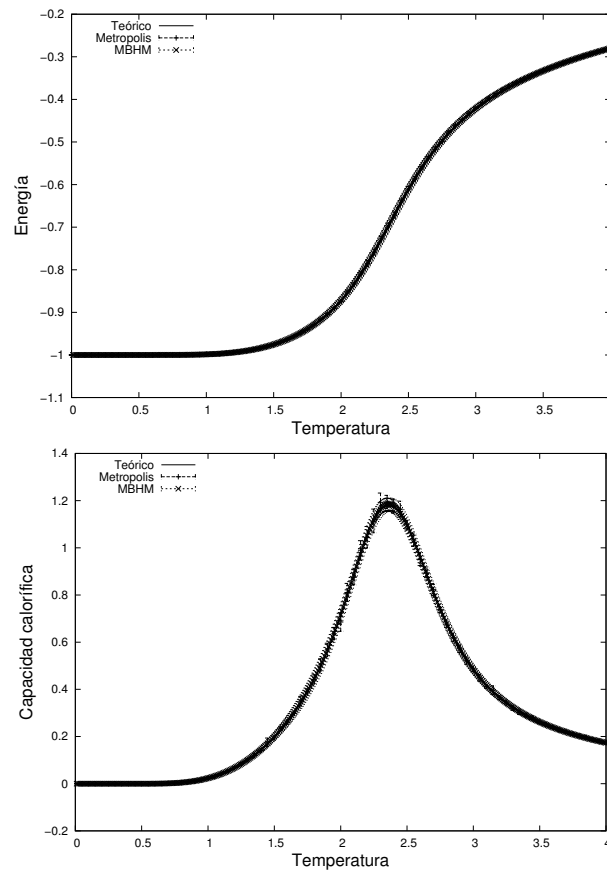


Figura 4-3: Energía y capacidad calorífica para el modelo de Ising usando la densidad de estados teórica calculada por P.D. Beale, el algoritmo de Metropolis y el Método de Histograma Ancho Markoviano.

de Histograma Ancho Markoviano reflejada en que se pueden calcular valores promedio del observable en todo el rango de temperatura deseado, con barras de error más pequeñas.

5 Teorías Gauge Abelianas en el Lattice

En 1974 K. G. Wilson presentó la formulación general de una teoría gauge no abeliana en el *lattice* [6]. Desde entonces, el *lattice* se ha convertido en la herramienta no perturbativa mas popular para estudiar teorías gauge ya que ofrece ventajas que no se tienen en el continuo: permite considerar teorías formuladas en un espacio tiempo discretizado de tamaño finito e incluso introducir de manera directa variables que sean elementos de algún grupo de simetría finito.

En este capítulo se presentan los fundamentos teóricos de la formulación propuesta por Wilson y se introduce el modelo gauge abeliano discreto en el lattice mas sencillo: el modelo Z_2 .

5.1. Teorías Gauge

Una teoría gauge [3, 4] es un tipo especial de teoría de campo que se construye exigiendo que el lagrangiano sea invariante bajo un cierto grupo continuo de transformaciones locales: la simetría gauge es el principio fundamental que determina la forma del lagrangiano.

Las transformaciones bajo las cuales el lagrangiano es invariante, denominadas transformaciones gauge, forman un grupo de Lie [59] el cual es conocido como el grupo gauge de la teoría. Asociado a un grupo de Lie está el álgebra de Lie de los generadores del grupo. Para cada generador hay un correspondiente campo vectorial llamado campo gauge. Los campos gauge son introducidos en el lagrangiano para asegurar su invariancia bajo las transformaciones del grupo: invariancia gauge. Cuando la teoría es cuantizada, aparecen los cuantos de los campos gauge, los bosones gauge.

En física, si el grupo de simetría es conmutativo la teoría gauge se denomina abeliana y si es no conmutativo se denomina no abeliana o de Yang-Mills. Ejemplos de estas teorías son la Electrodinámica Cuántica o QED cuyo grupo de simetría es el $U(1)$, y la Cronodinámica Cuántica o QCD, cuyo grupo de simetría es el $SU(3)$.

La importancia de las teorías gauge radica en su éxito para explicar las interacciones entre partículas elementales. El mayor avance logrado en este sentido hasta el momento lo constituye el Modelo Estándar de Partículas [1]. Éste es una teoría gauge no abeliana con grupo de simetría $SU(3)_c \otimes SU(2)_L \otimes U(1)_Y$ que incluye la fuerza electromagnética y las interacciones fuerte y débil. Tiene un total de 12 bosones gauge: el fotón, tres bosones débiles, Z_0 , $W+$ y $W-$; y 8 gluones.

Como se mencionó en la introducción, la teoría de perturbaciones, herramienta de cálculo mas exitosa en teoría de campos, falla para teorías fuertemente interactuantes como la QCD. Entre las alternativas está la simulación computacional basada en la formulación de teorías de campo en el retículo o lattice.

5.2. El Lattice

La formulación de una teoría gauge en el *lattice* busca proveer la posibilidad de calcular numéricamente la integral de camino. Requiere de los siguientes pasos:

1. *Discretización del espacio tiempo:* Aunque hay muchas maneras de hacerlo la topología mas usada es la de una grilla hipercúbica cuatrodimensional isotrópica. Otro tipo de redes han sido poco estudiadas debido a que la complejidad en la implementación computacional aumenta considerablemente y no hay evidencia de que mejoren los resultados físicos obtenidos.
2. *Transcripción de los grados de libertad gauge y fermiónicos:* Los campos de materia pueden ser representados de manera directa como variables de Grassmann. La transcripción de los campos gauge es menos intuitiva. Cuando un fermión se mueve de x a y en presencia de un campo gauge $A_\mu(x)$, adquiere un factor de fase dado por el producto ordenado $\psi(y) = \mathcal{P}e^{\int_x^y igA_\mu(x)dx} \psi(x)$. La versión discretizada de este producto es $U(x, x + \hat{\mu}) \equiv U_\mu(x) = e^{iagA_\mu(x+\frac{\hat{\mu}}{2})}$, donde el campo A_μ se define en el punto medio del enlace y U representa un elemento del grupo de simetría gauge de la teoría.
3. *Construcción de la acción:* La construcción de la acción se realiza discretizando la acción de la teoría en el continuo y adicionando los terminos necesarios para que se recobre la teoría original al tomar el límite $a \rightarrow 0$, con a el espaciamiento de la red. El procedimiento no es directo debido a que para la parte fermiónica se presenta el problema de doblamiento de especies.
4. *Definición de la medida de integración en la integral de camino:* Debido a que los campos A_μ en el lattice son reemplazados por los elementos del grupo, se usa la medida invariante de grupo de Haar. Esta medida se define de manera que para cualesquiera elementos U y V de un grupo compacto satisfaga las relaciones

$$\int dU f(U) = \int dU f(UV) = \int dU f(WU), \quad \int dU = 1, \quad (5-1)$$

donde $f(U)$ es una función arbitraria sobre el grupo. Tiene la ventaja adicional de que en tratamientos no perturbativos evita el problema de fijar el gauge en la integral de camino para algunos cálculos

5. *Transcripción de los operadores usados para estudiar la física:* Se construyen con base en la nueva geometría y las nuevas variables de campo.

5.3. Modelo Z_2

Este modelo fue introducido por Wegner en 1971 como un ejemplo de una estructura de fases no trivial pero sin un parámetro de orden local [60], y representa una generalización a una interacción invariante gauge del modelo de Ising. Al igual que en la formulación usual de teorías gauge en el lattice [61, 62], el modelo se define en una red hipercúbica cuatro-dimensional en la que a cada enlace entre un par de vecinos más cercanos i y j se le asocia un elemento U_{ij} del grupo abeliano bajo la multiplicación ordinaria $Z_2 = \{1, -1\}$.

Los elementos U_{ij} tienen orientación, i.e.,

$$U_{ji} = U_{ij}^*. \quad (5-2)$$

La interacción invariante gauge entre los espines está descrita mediante la acción

$$S(U) = \sum_{\square} S_{\square}(U_{\square}). \quad (5-3)$$

La suma corre sobre todas las *plaquetas*, \square , o cuadrados fundamentales en el lattice y

$$\begin{aligned} S_{\square}(U_{\square}) &= 1 - U_{\square}, \\ &= 1 - \text{Re}(U_{ij}U_{jk}U_{kl}U_{li}), \end{aligned} \quad (5-4)$$

con i, j, k, l los vértices del cuadrado en cuestión, tomados en orden circular. De la ecuación (5-4) se ve que la acción está definida como una cantidad real.

La ecuación (5-3) puede escribirse de una manera más explícita como

$$S(U) = \frac{1}{2D} \sum_{i,j,k,l} P_{ijkl} \left(1 - U_{ij}U_{jk}U_{kl}U_{li} \right), \quad (5-5)$$

donde D representa la dimensión del sistema y

$$P_{ijkl} = \begin{cases} 1, & \text{si } i, j, k, l \text{ representan vertices circulando} \\ & \text{alrededor de un cuadrado fundamental o} \\ & \text{plaqueta del lattice,} \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

El factor $1/2D$ en la ecuación (5-5) se introduce debido a que cada plaqueta se cuenta $2D$ veces en la suma: D veces en cada una de las dos orientaciones.

Por último, la función de partición del sistema se define como

$$Z = \sum_{\{U_{ij}\}} e^{-\beta S(U)}, \quad (5-6)$$

donde la suma corre sobre todo los posibles valores de las variables U_{ij} y β representa la constante de acoplamiento del sistema.

5.4. El loop de Wilson

El observable que determina la estructura de fases de una teoría gauge en el lattice es el loop de Wilson [6], que se define como

$$W(C) = \text{Re}(\text{Tr}(U(C))), \quad (5-7)$$

donde C es un contorno cerrado en el lattice y la traza corresponde a multiplicar de manera orientada los elementos del grupo asignados a los enlaces que conforman este contorno. Esta operación es independiente del punto de partida por lo cual el loop de Wilson es invariante gauge. El contorno cerrado C más simple corresponde a una *plaqueta*, en este caso

$$W(\square) = \text{Re}(U_{ij}U_{jk}U_{kl}U_{li}) = U_{\square} \quad (5-8)$$

y se denomina loop de Wilson 1×1 .

Con base en la analogía existente entre la energía en mecánica estadística y la acción en teoría de campos, se define la *energía* E de una *plaqueta* como

$$E = 1 - W(\square). \quad (5-9)$$

Ésta ha sido calculada para el modelos Z_2 usando métodos tradicionales y su forma se muestra en la figura 5-1.

Los datos se obtuvieron promediando valores de E obtenidos primero aumentando y luego disminuyendo β . El ciclo de histéresis presente alrededor de $\beta = 0,5$ sugiere que el sistema presenta una transición de fase de primer orden.

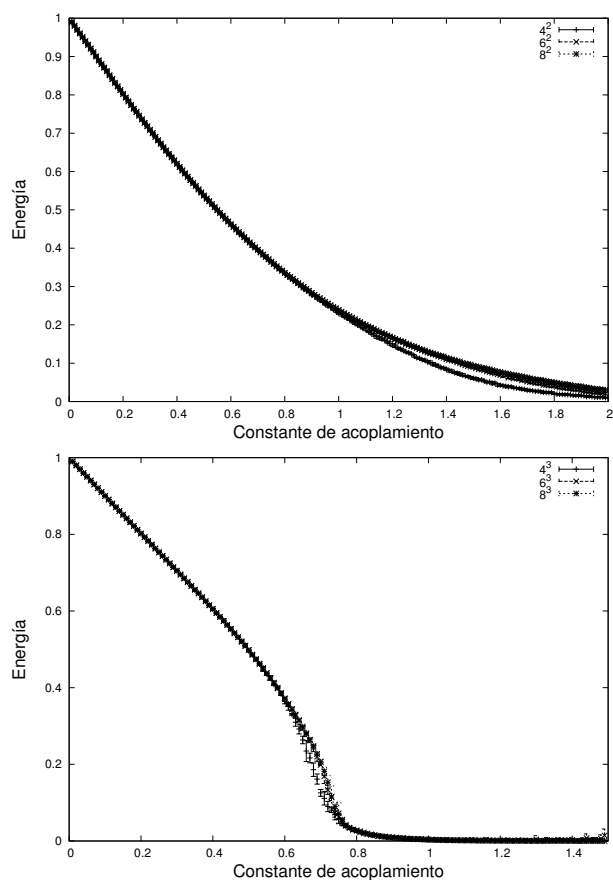


Figura 5-1: Energía interna para el modelo Z_2 en $2D$ y $3D$, a distintos tamaños, con el algoritmo de Metropolis.

6 Método de Histograma Ancho Markoviano para Teorías Gauge en el Lattice

Estudiar teorías como la QCD en el *lattice* requiere de un gran poder de cómputo. Además, los tiempos de simulación para algunos cálculos aun son muy grandes por lo cual en la mayoría de los casos es necesario usar supercomputadores. Por otro lado, problemas como el de la acción compleja [31, 30] y el del signo [63] han frenado el avance en esta área, y forzado a los investigadores a centrar gran parte de sus esfuerzos en la generación de nuevos algoritmos.

En el lattice el modelo más sencillo que se puede construir con variables discretas es el Z_2 . Es abeliano y a pesar de que no se le conoce solución teórica, existen simulaciones realizadas con los métodos tradicionales de Monte Carlo. Por esta razón es ideal como terreno de prueba.

6.1. Extensión del Método de Histograma Ancho a Teorías Gauge en el Lattice

Como sugiere J.D. Muñoz en su tesis doctoral [24], el método BHM puede ser extendido a teorías gauge en el *lattice*. Consideremos por ejemplo un modelo de Ising con simetría gauge d -dimensional [60], con una dimensión temporal y $d-1$ dimensiones espaciales. Luego, considere vectores unitarios μ en cada dirección y asigne un espín $\sigma(i, \mu)$ en cada enlace entre puntos $i, i + \mu$. La acción se define sumando las contribuciones $S[P(i, \mu\nu)]$ de todos los cuadrados primitivos, o plaquetas, $P(i, \mu\nu)$ en el sistema, con $P(i, \mu\nu)$ la plaqueta entre los lugares $i, i + \mu, i + \mu + \nu$ e $i + \nu$. La función de partición, como es usual, está dada por

$$S = -J \sum_{(i, \mu\nu)} S[P(i, \mu\nu)], \quad Z = \sum_x \exp[-\beta S_x] \quad (6-1)$$

donde S_x es la acción para la configuración x . Para el modelo de Ising con simetría gauge, la contribución de cada plaqueta es el producto de todos los cuatro espines en ella, esto es, $S[P(i, \mu\nu)] = \sigma(i, \mu)\sigma(i + \mu, \nu)\sigma(i + \mu + \nu, -\mu)\sigma(i, \nu)$. La densidad de estados $g(E)$ puede tomarse, como es usual, con $E_x = S_x$, y el Método BHM puede ser aplicado usando el mismo procedimiento que para el modelo de Ising clásico presentado en el capítulo 3.

Para teorías gauge mas generales como la QCD en el lattice, los elementos asignados a los enlaces dejan de ser espines y se convierten en matrices pertenecientes al grupo de simetría gauge. Los campos fermiónicos, en cambio, se asignan a los puntos de la red. En general, la acción tendrá tres contribuciones: una correspondiente al producto de los cuatro elementos asignados a las plaquetas, relacionada con la contribución de los campos gauge, otra correspondiente a la contribución de los campos fermiónicos y el término de interacción entre los dos tipos de campos. Manteniendo la analogía entre E_x y S_x , el Método BHM puede ser extendido de manera general a teorías gauge en el *lattice*.

6.1.1. Implementación

De acuerdo a lo anterior, la implementación del Método de Histograma Plano Markoviano para teorías gauge en el lattice requiere los siguientes pasos:

- Realizar un ciclo de muestreo con el Método de Wang-Landau.
- Calculara la densidad de estados usando el BHM como técnica de análisis.
- Usar el Método Multicanónico tomando como densidad de estados la calculada en el paso anterior.
- Analizar de nuevo los datos con usando el Método de Histograma Ancho.

O, de manera más específica,

1. Suponer una densidad de estados inicial $g_0(S)$.
2. Medir la acción S para la configuración actual del sistema.
3. Acumular en los cuatro histogramas $g_0(S)$, $V(S)$, $N_{up}(S)$ y $N_{dn}(S)$ para un ΔS fijo.
4. Repetir los dos pasos anteriores hasta que el histograma $V(S)$ sea plano.
5. Obtener $g(S)$ a partir de la ecuación BHM (3-24).
6. Tomar $g_0(S) = g(S)$ para realizar el muestreo.
7. Medir la acción S para la configuración actual del sistema.
8. Acumular en los cuatro histogramas $V(S)$, $Q(S)$, $N_{up}(S)$ y $N_{dn}(S)$ para un ΔS fijo.
9. Repetir los dos pasos anteriores hasta que el histograma $V(S)$ sea plano.
10. Obtener $g(S)$ a partir de la ecuación BHM (3-24) reemplazando la energía por la acción del sistema.

11. Usar las ecuaciones

$$\langle Q(S) \rangle = \frac{\sum_{x[S]} Q(x)}{V(S)} \quad (6-2)$$

y (3-28) para estimar los promedios microcanónicos.

12. Calcular el promedio canónico del observable Q para cualquier valor de la constante de acoplamiento β a partir de

$$\langle Q \rangle_\beta = \frac{\sum_S \langle Q(S) \rangle g(S) \exp(-\beta S)}{\sum_S g(S) \exp(-\beta S)}. \quad (6-3)$$

6.2. Método de Histograma Ancho Markoviano para el Modelo Z_2

Siguiendo los pasos de implementación descritos anteriormente, aplicamos el MBHM para estudiar el modelo Z_2 . Las simulaciones se realizaron para el modelo en $2D$ y $3D$, ambos sin solución teórica, por lo que a diferencia del capítulo 4, solo comparamos los resultados con los obtenidos a partir del algoritmo de Metropolis.

En la figura **6-1** se muestra la densidad de estados obtenida durante los ciclos de Wang-Landau y Multicanónico en $2D$ a partir de los histogramas de visitas.

Como criterio para finalizar la toma de muestras tanto en el ciclo de Wang-Landau como en el ciclo de Multicanónico, se estableció que cada nivel de energía hubiera sido visitado al menos una vez. En ambos casos se observa una forma funcional para la densidad de estados simétrica, con mínimos en los extremos del eje de energía y un máximo en el centro. Esta forma es acorde a lo que se espera para el modelo Z_2 dada su topología y el hecho de que la energía depende del producto de los elementos asignados a los lados de una plaqueta fundamental en el *lattice*: la conmutatividad en la multiplicación causa la degeneración observada. La coincidencia de la densidad de estados estimada con Wang-Landau y con MBHM es notable a pesar de las pocas visitas que se realizan a algunos niveles de energía.

En la figura **6-2** se observa la energía en función de la constante de acoplamiento a partir de MBHM y Metropolis. La forma funcional no sugiere la existencia de una transición de fase, pero claramente se observa que los datos obtenidos con ambos métodos coinciden, confirmando la aplicación exitosa, por primera vez, de un método de histograma para una teoría gauge en el *lattice*.

En la figura **6-3** se muestra la densidad de estados obtenida durante los ciclos de Wang-Landau y Multicanónico en $3D$ a partir de los histogramas de visitas.

Al igual que en $2D$, se usó como criterio para detener ambos ciclos que cada nivel de energía del sistema hubiera sido visitado al menos una vez. De nuevo, tanto la forma funcional de la densidad de estados como la coincidencia entre los estimados realizados en ambos ciclos del MBHM es notable.

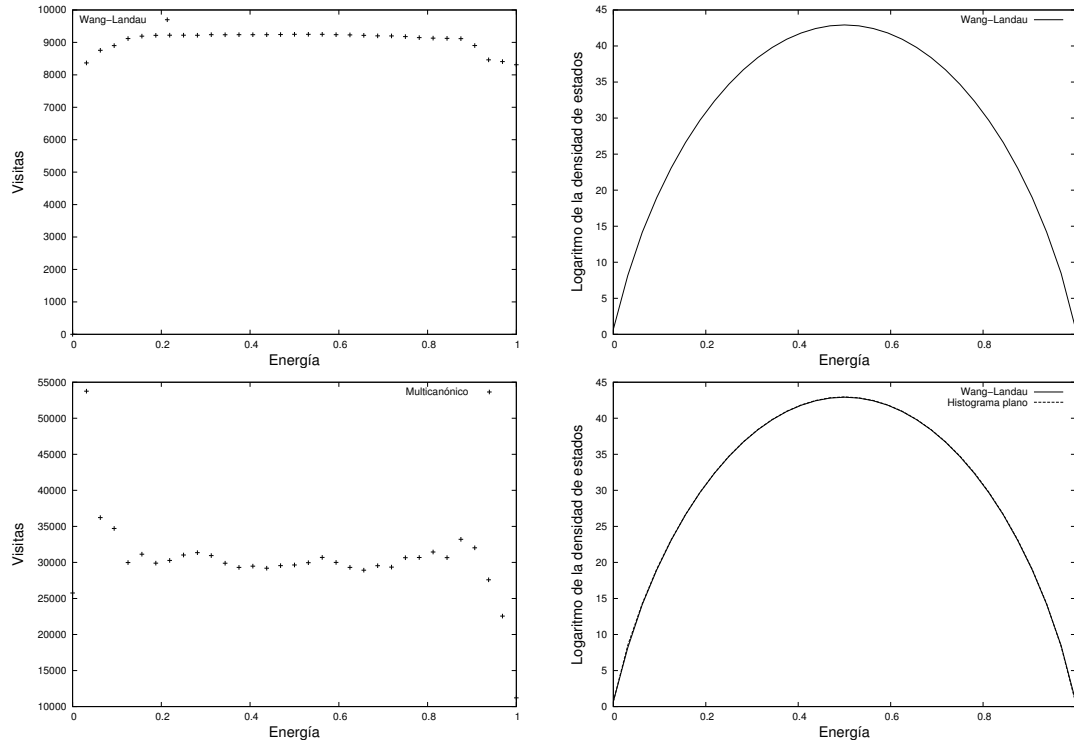


Figura 6-1: Histograma de visitas y logaritmo natural de la densidad de estados para el modelo Z_2 en $2D$ 8×8 . El error se calculó con *jackknife*, a partir de 10 corridas, con un factor t de student para 99% de confiabilidad.

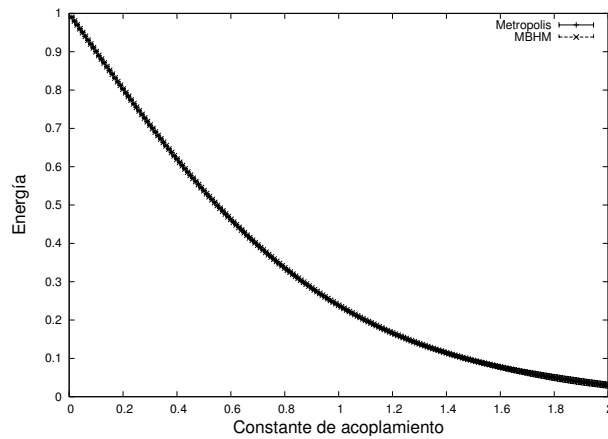


Figura 6-2: Energía en función de la constante de acoplamiento para el modelo Z_2 en $2D$ 8×8 . El error se calculó con *jackknife*, a partir de 10 corridas, con un factor t de student para 99% de confiabilidad.

En la figura 6-4 se observa la energía en función de la constante de acoplamiento para Z_2 en $3D$ a partir del MBHM y Metropolis. Esta vez, la forma funcional sugiere la existencia de

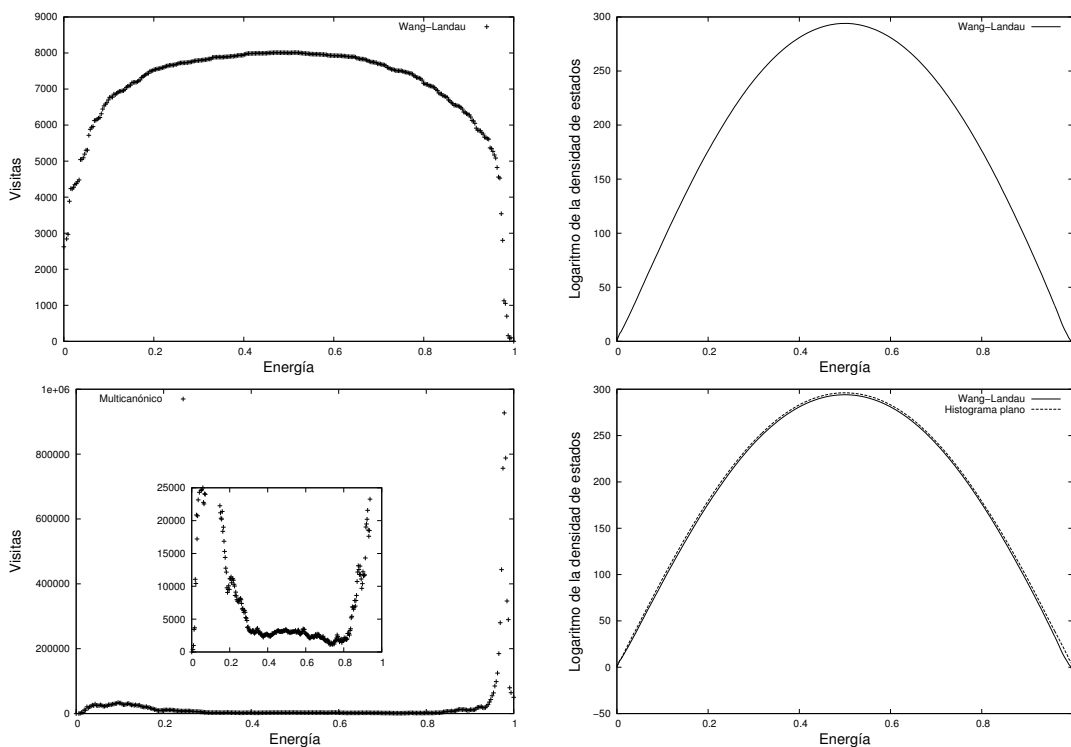


Figura 6-3: Histograma de visitas y logaritmo natural de la densidad de estados para el modelo Z_2 en $3D$ tamaño 6^3 . El error se calculó con *jackknife*, a partir de 5 corridas, con un factor t de student para 99% de confiabilidad

una transición de fase alrededor de $\beta = 0,7$. Además, los datos obtenidos con ambos métodos de nuevo coinciden, confirmando la validez del MBHM.

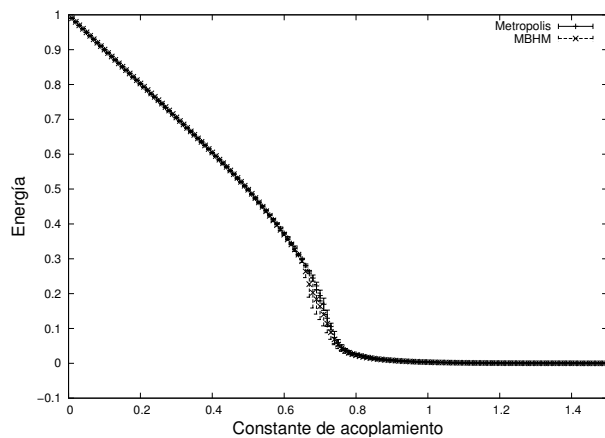


Figura 6-4: Energía en función de la constante de acoplamiento para el modelo Z_2 en $3D$ tamaño 6^3 . El error se calculó con *jackknife*, a partir de 5 corridas, con un factor t de student para 99% de confiabilidad

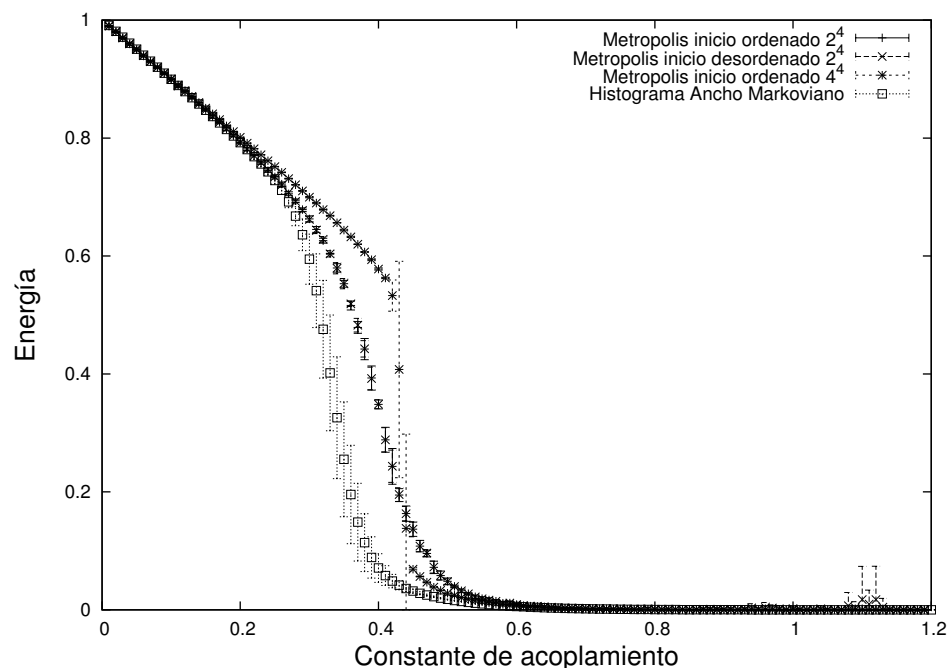


Figura 6-5: Energía con Metropolis e Histograma Ancho Markoviano para Z_2 en $4D$, tamaño 2^4 .

El Método de Histograma Ancho Markoviano también se probó para el modelo Z_2 en $4D$ (ver fig. 6-5), pero solo para el tamaño de red mas pequeño posible, 2^4 , se pudo calcular con la plataforma de cómputo disponible (portatil DELL 1420 con procesador intel core 2 duo 2.2GHz). Para sistemas un poco más grandes es necesario realizar algunos optimizaciones al código, o usar nuevas arquitecturas de cómputo, por ejemplo basadas en CUDA, que son una excelente opción para modelos de red cuya topología favorece la paralelización. A pesar de los pocos resultados obtenidos en $4D$, se logra vislumbrar una ventaja enorme del nuevo método: mientras con Metropolis se detecta un ciclo de histéresis en el cálculo de la energía del sistema, al iniciar con configuraciones ordenadas y desordenadas, y las barras de error alrededor de este punto divergen, con nuestro método se puede calcular de manera continua y la divergencia en el error desaparecen. Es decir, el Método de Histograma Ancho Markoviano permitirá calcular los exponentes críticos del modelo Z_2 en $4D$, los cuales se desconocen hasta el momento.

7 Conclusiones

Los métodos de Wang-Landau y Multicanónico han probado ser dinámicas de muestreo efectivas para estudiar sistemas clásicos como el modelo de Ising $2D$. Ambos permiten estimar la densidad de estados del sistema, Wang-Landau con mayor rapidez, pero solo Multicanónico cumple con la condición de balance detallado, lo cual garantiza que la toma de datos se realiza en configuraciones de equilibrio del sistema. Por otro lado, el método BHM ha probado ser exitoso como técnica de análisis: permite obtener mayor información a partir de los datos tomados en una sola corrida. En este trabajo proponemos una manera de combinar los tres métodos para construir uno nuevo que denominamos Método de Histograma Ancho Markoviano y consiste en:

- Realizar un ciclo de muestreo con el Método de Wang-Landau.
- Calcular la densidad de estados usando el BHM como técnica de análisis.
- Usar el Método Multicanónico tomando como densidad de estados la calculada en el paso anterior.
- Analizar de nuevo los datos con usando el Método de Histograma Ancho.

El nuevo método fue probado con éxito para el modelo de Ising $2D$, y no solo reproduce los resultados teóricos, si no que aumenta la rapidez y precisión en el estimado de la densidad de estados del sistema, además de permitir calcular el valor promedio de observables en todo el rango de temperaturas con datos obtenidos de una sola corrida, en comparación a algoritmos tradicionales como el de Metropolis.

Luego, proponemos una manera general de extender el Método de Histograma Ancho como técnica de análisis a Teorías Gauge en el Lattice. Esto se logró usando la analogía existente entre la energía y la temperatura en la función de partición clásica, y la acción y la constante de acoplamiento en la integral de camino de una teoría gauge. Como terreno de prueba, usamos el modelo Z_2 en $2D$ y $3D$, que corresponde al modelo gauge abeliano en el *lattice* más sencillo que puede simularse. Aquí, aunque no se conoce solución teórica, de nuevo el Método de Histograma Plano Markoviano mejora los estimados de la densidad de estados del sistema, disminuye el error en el cálculo de observables y permite obtener mayor información con los datos de una sola corrida, en relación con el algoritmo de Metropolis. Este resultado es el primer intento de extensión de un método de histograma a teorías gauge en el *lattice* que ha resultado exitoso. Anteriormente Fodor y Katz [29] obtuvieron resultados para un

rango limitado de valores de la constante de acoplamiento usando un método basado en el SHM, y Berg y Bazavov [25] fracasaron en su intento de extender el Método Multicanónico al modelo $U(1)$.

El Método de Histograma Ancho Markoviano también se probó para el modelo Z_2 en $4D$, pero solo para el tamaño de red mas pequeño posible, 2^4 , se pudo calcular con la plataforma de cómputo disponible (portatil DELL 1420 con procesador intel core 2 duo 2.2GHz). Para sistemas un poco más grandes es necesario realizar algunas optimizaciones al código, o usar nuevas arquitecturas de cómputo, por ejemplo basadas en CUDA, que son una excelente opción para modelos de red cuya topología favorece la paralelización. A pesar de los pocos resultados obtenidos en $4D$, se logra vislumbrar una ventaja enorme del nuevo método: mientras con Metropolis se detecta un ciclo de histéresis en el cálculo de la energía del sistema, al iniciar con configuraciones ordenadas y desordenadas, y las barras de error alrededor de este punto divergen, con nuestro método se puede calcular de manera continua y la divergencia en el error desaparece. Es decir, el Método de Histograma Ancho Markoviano permitirá calcular los exponentes críticos del modelo Z_2 en $4D$, los cuales se desconocen hasta el momento.

Además de continuar con los cálculos para modelos discretos como el Z_2 en distintas dimensiones, el siguiente paso en nuestro trabajo, será aplicarlo a sistemas continuos, como el modelo $U(1)$, basados en la propuesta de J.D. Muñoz en su tesis doctoral [24]. Inicialmente se consideró llegar hasta este punto, pero falta de tiempo para ahondar en optimizaciones del código y mejores recursos computacionales impidieron su realización.

Este trabajo abre la posibilidad de seguir extendiendo Métodos de Histograma como técnicas de muestreo y análisis a Teorías Gauge en el Lattice. Los Métodos de Histograma han probado ser exitosos en la optimización de simulaciones para sistemas clásicos y podrían contribuir enormemente en el mejoramiento de los algoritmos actualmente usados en *LatticeQCD*, donde problemas como el de la acción compleja [30, 31] han estancado el área en las últimas décadas.

Bibliografía

- [1] S. F. Novaes. Standard model: An introduction. In *Particle and Fields, Proceedings of the X J. A. Swieca Summer School*, Singapore, 2000. World Scientific.
- [2] M. W. Grünewald. Precision tests of the standard model. In *Proceedings of the International Europhysics Conference on High Energy Physics*, Lisboa, Portugal, Julio 2005. Proceedings of Science. Disponible: http://pos.sissa.it//archive/conferences/021/306/HEP2005_306.pdf.
- [3] Paul. H. Frampton. *Gauge Field Theories*. Wiley-Interscience, 2da edition, Agosto 2000.
- [4] M. E. Peskin and D. V. Schroeder. *An Introduction To Quantum Field Theory*. Westview Press, Massachusetts, Octubre 1995.
- [5] Julian Schwinger. On Quantum-Electrodynamics and the Magnetic Moment of the Electron. *Phys. Rev.*, 73(4):416–417, Febrero 1948.
- [6] Kenneth G. Wilson. Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, 10(8):2445–2459, Octubre 1974.
- [7] The XXVII International Symposium on Lattice Field Theory, Jul 25-31 2009. <http://rchip.pku.edu.cn/workshop/lattice09/index.xml>.
- [8] High energy physics - lattice. <http://arxiv.org/archive/hep-lat>, 1992.
- [9] M. Creutz. *Quarks, gluons and lattices*. Cambridge monographs on mathematical physics. Cambridge University Press, Cambridge, 1st edition, 1983. ISBN: 0521244056.
- [10] Di Piero. An algorithmic approach to quantum field theory. arXiv:hep-lat/0509013v2, Septiembre 2005. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/0509013>.
- [11] G. P. Lepage. Lattice qcd for novices. In *Proceedings of HUGS 98*. Edited by J. L. Goity, World Scientific, 2000. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/0506036>.
- [12] M.N. Rosenbluth A.H. Teller N. Metropolis, A.W. Rosenbluth and E. Teller. Equation of state calculation by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21:1087–1092, 1953.

- [13] J. Cox U. J. Wiese M. Alford, S. Chandrasekharan. Solution of the complex action problem in the potts model for dense qcd. *Nucl. Phys.*, B(602):61–86, Mayo 2001. Disponible: [http://dx.doi.org/10.1016/S0550-3213\(01\)00068-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0550-3213(01)00068-2).
- [14] Z. W. Salsburg, J. D. Jacobson, W. Fickett, and W. W. Wood. Application of the monte carlo method to the lattice-gas model. i. two-dimensional triangular lattice. *The Journal of Chemical Physics*, 30(1):65–72, 1959.
- [15] Alan M. Ferrenberg and Robert H. Swendsen. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 61(23):2635–2638, Diciembre 1988.
- [16] Alan M. Ferrenberg and Robert H. Swendsen. Optimized monte carlo data analysis. *Phys. Rev. Lett.*, 63(12):1195–1198, Septiembre 1989.
- [17] T. J. P. Penna P. M. C. de Oliveira and H. Herrmann. Broad histogram method. *Brazilian Journal of Physics*, 26(4):677–683, Diciembre 1996. Disponible: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/9610041>.
- [18] P. M. C. de Oliveira. Broad histogram: An overview. *Brazilian Journal of Physics*, 30(1):195–211, Marzo 2000. Disponible: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0003300>.
- [19] H.J. Herrmann J.D. Muñoz. Broad histogram method for cotinuous systems: the XY model. *Int. J. Mod. Phys. C*, 10:95–113, 1999.
- [20] H.J. Herrmann J.D. Muñoz. Extending the broad histogram method for continuous systems. *Compt. Phys. Comm.*, 13:121–122, 1999.
- [21] H.J. Herrmann P.M.C. de Oliveira, T.J.P. Penna. Broad histogram Monte Carlo. *Eur. Phys. J.*, B1:205–208, 1998.
- [22] P. M. C. de Oliveira. Broad Histogram Simulation: Microcanonical Ising Simulation. *Int. J. Mod. Phys. C*, 9:497–503, 1998.
- [23] M. Reuhl. Heat bath und broad histogram monte carlo untersuchungen des kurzreichweitigen 3d-3zustands-pottsglases. Master’s thesis, Rheinischen Friederich-Wilhelms-Universität Bonn, 1997.
- [24] J. D. Muñoz. *The Broad Histogram Method, an extension to continuous systems*. PhD thesis, Universidad de Stuttgart, Abril 2000. Publicada por Logos Verlag, ISBN 3-89722-669-3.
- [25] Bernd A. Berg and Thomas Neuhaus. Multicanonical ensemble: A new approach to simulate first-order phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 68(1):9, Enero 1992.
- [26] J. Lee. New Monte Carlo algorithm: Entropic sampling. *Phys. Rev. Lett.*, 71:211–214, 1993.

-
- [27] Lik Wee Lee Jian-Sheng Wang. Monte carlo algorithms based on the number of potential moves. *Comp. Phys. Commu.*, 127:131, 2000. Disponible: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/9903224v1>.
- [28] Fugao Wang and D. P. Landau. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States. *Phys. Rev. Lett.*, 86(10):2050–2053, Marzo 2001.
- [29] Z. Fodor and S. D. Katz. A new method to study lattice QCD at finite temperature and chemical potential. *Physics Letters B*, 534(1-4):87–92, 2002. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/0104001>.
- [30] P. Hasenfratz and F. Karsch. Chemical potential on the lattice. *Physics Letters B*, 125(4):308 – 310, 1983.
- [31] J. Kogut, H. Matsuoka, M. Stone, H. W. Wyld, S. Shenker, J. Shigemitsu, and D. K. Sinclair. Chiral symmetry restoration in baryon rich environments. *Nuclear Physics B*, 225(1):93 – 122, 1983.
- [32] Ian M. Barbour, Susan E. Morrison, Elyakum G. Klepfish, John B. Kogut, and Maria-Paola Lombardo. Results on finite density QCD. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 60A:220–234, 1998. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/9705042>.
- [33] Mark Alford, Anton Kapustin, and Frank Wilczek. Imaginary chemical potential and finite fermion density on the lattice. *Phys. Rev. D*, 59(5):054502, Enero 1999.
- [34] Z. Fodor and S. D. Katz. Finite T/μ lattice QCD and the critical point. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 153:86–92, 2004. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/0401023>.
- [35] F. Csikor et al. The QCD equation of state at finite T/μ on the lattice. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 153:93–105, 2004. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/0401022>.
- [36] Christian Schmidt, Zoltan Fodor, and Sandor D. Katz. The QCD phase diagram at finite density. volume LAT2005, page 163, 2006. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/0510087>.
- [37] D. E. Kharzeev and J. Raufeisen. High energy nuclear interactions and QCD: An introduction, 2002. Disponible: <http://arxiv.org/abs/nuc1-th/0206073v1>.
- [38] Andrei Smilga. *Lectures on Quantum Chromodynamics*. World Scientific, Noviembre 2001.
- [39] Alexei Bazavov and Bernd A. Berg. Heat bath efficiency with a metropolis-type updating. *Phys. Rev. D*, 71(11):114506, Junio 2005.

-
- [40] Bernd A. Berg and Alexei Bazavov. Non-Perturbative U(1) Gauge Theory at Finite Temperature. *Phys. Rev.*, D74:094502, 2006. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/0605019v3>.
- [41] Bernd A. Berg and Alexei Bazavov. Critical exponents for U(1) lattice gauge theory at finite temperature. *PoS*, LAT2006:061, 2006. Disponible: <http://arxiv.org/abs/hep-lat/0609006v1>.
- [42] U. J. Wiese. An introduction to lattice field theory. Material de lectura para el DTP del ECT*, Mayo 2006.
- [43] W. Lenz. Beiträge zum Verständnis der magnetischen Eigenschaften in festen Körpern. *Physik. Z.*, 21:613–615, 1920.
- [44] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z. Phys.*, 31:253–258, 1925.
- [45] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65(3-4):117–149, Febrero 1944.
- [46] Zamalodchikov. Integrals of the motion and the S-matrix of the (scaled) $T = T_c$ Ising model with a magnetic field. *Int. J. Mod. Phys. A*, 4:4235, 1989.
- [47] Paul D. Beale. Exact Distribution of Energies in the Two-Dimensional Ising Model. *Phys. Rev. Lett.*, 76(1):78–81, Enero 1996.
- [48] John Cardy. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Number No. 5 in Cambridge Lecture Notes in Physics. Cambridge Lecture Notes on Physics, 1996.
- [49] J. R. Norris. *Markov Chains*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [50] J. S. Wang. Is the broad histogram random walk dynamics correct. *Eur. Phys. J. B*, 8:287–291, 1999.
- [51] K. Binder and D. W. Heermann. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction*. Springer, 3ra edición, 1997.
- [52] M. Guerra. Estudio de la Convergencia del Método Multicanónico para el Modelo de Ising en dos Dimensiones, 2002. Tesis para optar al título de Físico.
- [53] B. A. Berg. The Multicanonical Ensemble: A New Approach to Computer Simulation. *Int. J. Mod. Phys. C*, 3:1083–1098, 1992.
- [54] T. Celik B. A. Berg. New approach to spin-glass simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2292–2295, 1992.

-
- [55] B. A. Berg. Introduction to Multicanonical Monte Carlo simulations. *Fields Inst. Commun.*, 26:1–24, 2000.
- [56] Jean-Pierre Hansen and Loup Verlet. Phase transitions of the lennard-jones system. *Phys. Rev.*, 184(1):151–161, Agosto 1969.
- [57] P. M. C. de Oliveira. Broad histogram relation is exact. *Eur. Phys. J. B*, 6:11, 1998. Disponible: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/9807354>.
- [58] Ulrich H.E. Hansmann Bernd A. Berg. Configuration space for random walk dynamics. Technical Report MTU-PHY-H1, 1998. Disponible: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/9805165>.
- [59] S. Sternberg. *Group Theory and Physics*. Cambridge University Press, 1995.
- [60] F.J. Wegner. Duality in Generalized Ising Models and Phase Transitions without Local Order Parameters. *J. Math. Phys.*, 12:2259–2273, 1971.
- [61] G. Münster I. Montvay. *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, 1ra edition, 1994.
- [62] J. B. Kogut. The lattice gauge theory approach to quantum chromodynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 55:775–836, 1983.
- [63] Julia Danzer, Christof Gattringer, Ludovit Liptak, and Marina Marinkovic. A study of the sign problem for lattice qcd with chemical potential. *Physics Letters B*, 682(2):240–245, 2009.