



Universidad de San Carlos de Guatemala  
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas  
Departamento de Física

# SOLUCIONES SOLITÓNICAS EN EL MODELO DE BABY SKYRME A TRAVÉS DE UN ALGORITMO DE RECOCIDO SIMULADO

**Emilio José Estrada González**

Asesorado por Dr. Juan Adolfo Ponciano Castellanos

Guatemala, Mayo de 2018

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



ESCUELA DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS

**SOLUCIONES SOLITÓNICAS EN EL MODELO DE  
BABY SKYRME A TRAVÉS DE UN ALGORITMO  
DE RECOCIDO SIMULADO**

TRABAJO DE GRADUACIÓN  
PRESENTADO A LA JEFATURA DEL  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
POR

**EMILIO JOSÉ ESTRADA GONZÁLEZ**  
ASESORADO POR DR. JUAN ADOLFO PONCIANO CASTELLANOS

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE  
**LICENCIADO EN FÍSICA APLICADA**

GUATEMALA, MAYO DE 2018

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA  
ESCUELA DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS



**CONSEJO DIRECTIVO**

DIRECTOR M.Sc. Edgar Anibal Cifuentes Anléu  
SECRETARIO ACADÉMICO Ing. José Rodolfo Samayoa Dardón

**TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO**

EXAMINADOR Lic. Hector Eduardo Pérez Figeroa  
EXAMINADOR Dra. María Eugenia Cabrera Catalán  
EXAMINADOR Dr. José Rodrigo Sacahuí Reyes



Universidad de San Carlos de Guatemala  
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas



Ref. D.DTG. 005-2018  
Guatemala 23 de mayo de 2018

El Director de la Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Coordinador de la Licenciatura en Física Aplicada, al trabajo de graduación Titulado: **SOLUCIONES SOLITÓNICAS EN EL MODELO DE BABY SKYRME A TRAVÉS DE UN ALGORITMO DE RECOCIDO SIMULADO** presentado por el estudiante universitario **Emilio José Estrada González**, autoriza la impresión del mismo.

IMPRIMASE.

MsC. Edgar Aníbal Cifuentes Anleu  
Director

Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas



# AGRADECIMIENTOS

**Mi Familia:** por estar incondicionalmente para apoyarme.

**Dr. Juan Ponciano:** por su guía, paciencia y confianza a lo largo de este trabajo.

**Dr. Juan Ponciano (nuevamente):** por haberme permitido formar parte de una investigación de alto nivel.

**M.Sc Juan Diego Chang:** por enseñarme a implementar el algoritmo de recocido simulado.

**Instituto de investigación de ciencias Físicas y Matemáticas:** por apoyarme, aconsejarme, resolverme dudas y permitirme habitar entre ustedes.

**Ing. Walter Álvarez, Lic. Héctor Pérez y DIGI:** por ayudarme a realizar un trabajo más eficiente utilizando sus servidores y herramientas.

**Badwolf y Beremiz:** por haber trabajado la misma cantidad de tiempo que yo en esta tesis.

**Personal administrativo de la ECFM:** por la presión y la paciencia.

**Mis amigos universitarios:** por hacerme ganas en todo, por ser odiosos, por los desvelos de estudio, por los desvelos de juegos, por los viajes, por las aventuras, por su amistad, por su lealtad y por haber hecho de mi experiencia universitaria algo insuperable.

**P.R.:** por todo el amor y el cariño.

**Todos mis catedráticos universitarios:** por haberme guiado y enseñado durante todos estos años.

**Mis preparadores de olimpiadas iberoamericanas:** por haberme enseñado que hay mucho más allá de lo que sabía.

**Beny, Cano y el departamento de ciencias del Colegio Liceo Javier:** por haberme enseñado el camino de la ciencia.

*Para Munno, Tita, Don Salva y Seño Conchi.*

# ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE FIGURAS	VII
ÍNDICE DE TABLAS	IX
LISTA DE SÍMBOLOS	XI
OBJETIVOS	XIII
INTRODUCCIÓN	XV
<b>1. Optimización en física</b>	<b>1</b>
1.1. Importancia de la optimización en física . . . . .	1
1.2. Algoritmo de Recocido Simulado . . . . .	3
1.2.1. Configuración de mínima energía . . . . .	3
1.2.1.1. Mínimos locales y mínimos globales . . . . .	4
1.2.2. Algoritmo de metrópolis . . . . .	4
1.2.3. Del algoritmo de metrópolis al recocido simulado . . . . .	5
1.2.3.1. Descripción del método . . . . .	6
1.2.4. Ventajas y desventajas del algoritmo de recocido simulado . . . . .	7
<b>2. Calibración del algoritmo en 1D y 2D</b>	<b>9</b>
2.1. Solitones topológicos . . . . .	10
2.2. Problemas en 1D . . . . .	11
2.2.1. Solitón kink Z2 . . . . .	11
2.2.1.1. Condiciones del problema . . . . .	11
2.2.1.2. Resultados obtenidos . . . . .	12
2.2.2. Solitón kink de Sine-Gordon . . . . .	14
2.2.2.1. Condiciones del problema . . . . .	14
2.2.2.2. Resultados obtenidos . . . . .	15
2.3. Problemas en 2D . . . . .	17

2.3.1.	Modelo de Thompson . . . . .	18
2.3.1.1.	Condiciones del problema . . . . .	18
2.3.1.2.	Resultados obtenidos . . . . .	18
2.3.2.	Distribución de partículas con potencial de Lennard-Jones . . . . .	21
2.3.2.1.	Condiciones del problema . . . . .	21
2.3.2.2.	Resultados obtenidos . . . . .	22
2.3.3.	Simulación de un Coloide . . . . .	24
2.3.3.1.	Objetivos de la simulación del coloide . . . . .	24
2.3.3.2.	¿Qué es un coloide? . . . . .	24
2.3.3.3.	Redes Cristalinas . . . . .	24
2.3.3.4.	Condiciones de la Simulación . . . . .	25
2.3.3.5.	Configuraciones de mínima energía para distintas densidades . . . . .	25
<b>3.</b>	<b>Conceptos relevantes de simetrías y topología en el modelo de Skyrme</b>	<b>29</b>
3.1.	Simetrías y cantidades conservadas . . . . .	29
3.1.1.	Teoría de grupos . . . . .	29
3.1.1.1.	Definición de grupo . . . . .	29
3.1.1.2.	Conmutatividad . . . . .	30
3.1.1.3.	Subgrupos . . . . .	30
3.1.1.4.	Isomorfismo . . . . .	30
3.1.2.	Simetrías . . . . .	30
3.1.3.	Simetrías continuas . . . . .	32
3.1.4.	Simetrías discretas . . . . .	32
3.1.4.1.	Simetrías diedrales . . . . .	32
3.1.4.2.	Simetría especular . . . . .	33
3.1.5.	Rompimiento espontáneo de simetría . . . . .	33
3.2.	Vacíos de una teoría física . . . . .	33
3.3.	Topología . . . . .	34
3.3.1.	Variedad . . . . .	34
3.3.2.	Espacios topológicos y grupos de homotopía . . . . .	34
3.3.3.	Topología $\pi_0$ . . . . .	34
<b>4.</b>	<b>Modelo de baby Skyrme</b>	<b>37</b>
4.1.	El modelo . . . . .	38
4.2.	Skyrmiones . . . . .	38
4.3.	Baby Skyrmiones . . . . .	39



4.3.1.	Hamiltoniano del modelo . . . . .	41
4.3.2.	Carga topológica del modelo . . . . .	42
<b>5.</b>	<b>Implementación del algoritmo de recocido simulado al modelo de baby Skyrme en C++</b>	<b>43</b>
5.1.	Parámetros . . . . .	43
5.2.	Discretización del espacio y condiciones iniciales . . . . .	45
5.3.	Densidades de energía, integrales, derivadas y carga topológica . . . . .	45
5.3.1.	Densidad de energía . . . . .	45
5.3.2.	Integral de Energía . . . . .	47
5.3.3.	Carga Topológica . . . . .	48
5.4.	Algoritmo de Recocido Simulado . . . . .	48
5.4.0.1.	Perturbaciones en los campos . . . . .	48
5.4.0.2.	Comparación de energías . . . . .	49
5.4.0.3.	Aceptando las perturbaciones hechas al sistema . . . . .	50
5.4.0.4.	Equilibrio térmico y soluciones de mínima energía . . . . .	50
5.5.	Archivos de salida . . . . .	51
5.6.	Conmutatividad en la optimización de $F[r, \varphi]$ y $\Theta[r, \varphi]$ . . . . .	51
<b>6.</b>	<b>Estados fundamentales en el modelo de baby Skyrme</b>	<b>53</b>
6.1.	Distintos potenciales . . . . .	53
6.2.	Modelo de 1 vacío. . . . .	54
6.2.1.	Rompimiento de simetrías en el modelo de 1 vacío . . . . .	58
6.3.	Modelo de 2 vacíos. . . . .	59
6.3.1.	Rompimiento de simetrías en el modelo de 2 vacíos . . . . .	63
6.4.	Modelo de vacío antisimétrico . . . . .	64
6.4.1.	Rompimiento de simetrías en el modelo de vacío antisimétrico . . . . .	68
6.5.	Comparación cuantitativa de $E_0$ entre modelos . . . . .	69
	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>71</b>
	<b>RECOMENDACIONES</b>	<b>73</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>75</b>
	<b>A. ANEXOS</b>	<b>77</b>
A.	Código utilizado para implementar el SA . . . . .	77



## ÍNDICE DE FIGURAS

1.1. Principio de mínima acción. . . . .	2
1.2. Métodos de Monte Carlo. . . . .	2
1.3. Función con mínimos locales y mínimos globales. . . . .	4
1.4. Diagrama de Flujo del Algoritmo de Metrópolis. . . . .	5
2.1. Banda de Möbius. . . . .	9
2.2. La gelatina es uno de los coloides más comunes en la vida cotidiana. . . . .	10
2.3. Condiciones iniciales del kink Z2. . . . .	12
2.4. Configuración del kink Z2. . . . .	13
2.5. Evolución de la energía en función de los descensos de temperatura (tiempo). . . . .	13
2.6. Condiciones iniciales del kink de Sine-Gordon. . . . .	15
2.7. Configuración del kink de Sine-Gordon para $N = 1$ . . . . .	16
2.8. Configuración del kink de Sine-Gordon para $N = 2$ . . . . .	16
2.9. Calibración de la temperatura del recocido. . . . .	16
2.10. La distribución de 2 $e^-$ en el modelo de Thompson tiene la estructura de una línea recta. . . . .	19
2.11. La distribución de 3 $e^-$ en el modelo de Thompson tiene la estructura de un triángulo. . . . .	19
2.12. La distribución de 4 $e^-$ en el modelo de Thompson tiene la estructura de un tetraedro. . . . .	19
2.13. La distribución de 6 $e^-$ en el modelo de Thompson tiene la estructura de un octaedro. . . . .	20
2.14. La distribución de 12 $e^-$ en el modelo de Thompson tiene la estructura de una doble pirámide pentagonal elongada. . . . .	20
2.15. La distribución de 20 $e^-$ en el modelo de Thompson tiene la estructura de un rombododecaedro. . . . .	20
2.16. Icosaedro de Mackay . . . . .	22

2.17. Distribución de 2 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones. . . . .	22
2.18. Distribución de 4 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones. . . . .	22
2.19. Distribución de 5 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones. . . . .	23
2.20. Distribución de 6 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones. . . . .	23
2.21. Distribución de 7 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones. . . . .	23
2.22. Distribución de 8 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones. . . . .	23
2.23. Coloide con $\rho_{rel} = 0.01$ . . . . .	26
2.24. Coloide con $\rho_{rel} = 0.05$ . . . . .	26
2.25. Coloide con $\rho_{rel} = 0.10$ . . . . .	26
2.26. Coloide con $\rho_{rel} = 0.15$ . . . . .	26
2.27. Coloide con $\rho_{rel} = 0.20$ . . . . .	27
2.28. Coloide con $\rho_{rel} = 0.28$ . . . . .	27
2.29. Coloide con $\rho_{rel} = 0.36$ . . . . .	27
2.30. Coloide con $\rho_{rel} = 0.48$ . . . . .	27
2.31. Coloide con $\rho_{rel} = 0.56$ . . . . .	27
2.32. Coloide con $\rho_{rel} = 0.64$ . . . . .	27
3.1. Función par. . . . .	30
3.2. Un copo de nieve con simetría diedral hexagonal . . . . .	32
4.1. Representación de Skyrmiones con distinta carga topológica con distintas simetrías [18]. . . . .	37
6.1. Superficies y líneas de contorno de $\delta E$ sobre el plano para $N=1,2,3$ con los valores de $\mu_I = 0.00, 0.90$ para el modelo de 1 vacío. . . . .	54
6.2. Superficies y líneas de contorno de $\delta E$ sobre el plano para $N=4,5,6,7,8$ con los valores de $\mu_I = 0.00, 0.90$ para el modelo de 1 vacío. . . . .	55
6.3. Líneas de contorno para $N = 1, 2, 3, 4$ para valores de $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.60, 0.90$ en el modelo de 1 vacío. . . . .	56
6.4. Líneas de contorno para $N = 5, 6, 7, 8$ para valores de $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.60, 0.90$ en el modelo de 1 vacío. . . . .	57

6.5. Rompimiento de simetría rotacional de $F[r, \varphi]$ en el modelo de 1 vacío con presencia de $\mu_I$ para $B = 1$ . . . . .	58
6.6. Rompimiento de simetría radial de $\Theta[r, \varphi]$ en el modelo de 1 vacío con presencia de $\mu_I$ para $B = 1$ . . . . .	58
6.7. Superficies y líneas de contorno de $\delta E$ sobre el plano para $N=1,2,3$ con los valores de $\mu_I = 0.00, 0.80$ para el modelo de 2 vacíos. . . . .	59
6.8. Superficies y líneas de contorno de $\delta E$ sobre el plano para $N=4,5,6,7,8$ con los valores de $\mu_I = 0.00, 0.80$ para el modelo de dos vacíos . . . .	60
6.9. Líneas de contorno para $N = 1, 2, 3, 4$ para valores de $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$ en el modelo de 2 vacíos. . . . .	61
6.10. Líneas de contorno para $N = 5, 6, 7, 8$ para valores de $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$ en el modelo de 2 vacíos. . . . .	62
6.11. Rompimiento de simetría rotacional de $F[r, \varphi]$ en el modelo de 2 vacíos con presencia de $\mu_I$ para $B = 1$ . . . . .	63
6.12. Rompimiento de simetría radial de $\Theta[r, \varphi]$ en el modelo de 2 vacíos con presencia de $\mu_I$ para $B = 1$ . . . . .	63
6.13. Superficies y líneas de contorno de $\delta E$ sobre el plano para $N=1,2,3$ con los valores de $\mu_I = 0.00, 0.80$ para el modelo de vacío antisimétrico. 64	
6.14. Superficies y líneas de contorno de $\delta E$ sobre el plano para $N=4,5,6,7,8$ con los valores de $\mu_I = 0.00, 0.80$ para el modelo de vacío antisimétrico 65	
6.15. Líneas de contorno para $N = 1, 2, 3, 4$ para valores de $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$ en el modelo de vacío antisimétrico. . . . .	66
6.16. Líneas de contorno para $N = 5, 6, 7, 8$ para valores de $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$ en el modelo de vacío antisimétrico. . . . .	67
6.17. Rompimiento de simetría rotacional de $F[r, \varphi]$ en el modelo de vacío antisimétrico con presencia de $\mu_I$ para $B = 1$ . . . . .	68
6.18. Rompimiento de simetría radial de $\Theta[r, \varphi]$ en el modelo de vacío antisimétrico con presencia de $\mu_I$ para $B = 1$ . . . . .	69



# ÍNDICE DE TABLAS

2.1. Comparación de energías para el Kink $Z_2$ . . . . .	14
2.2. Comparación de energías para distintos valores de $n$ en el modelo de Sine-Gordon. . . . .	17
2.3. Grupo de simetría $G$ para cada distribución de $n e^-$ en el modelo de Thompson. . . . .	21
3.1. Simetrías y leyes de conservación. . . . .	31
5.1. Formato del archivo de salida. . . . .	51
6.1. Valores adimensionales de energía para el modelo de 1 vacío, 2 vacíos, vacío antisimétrico y los modelos de 1 y 2 vacíos en [10]. . . . .	70





## LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
$\mathcal{F}$	Función a optimizar
$E[C]$	Energía de un sistema en una configuración $C$ .
$P(C_1 C_2)$	Probabilidad de transición de un estado $C_1$ a un estado $C_2$ .
$\beta$	Factor de Boltzman.
$k_B$	Constante de Boltzman.
$T$	Temperatura.
$T_0$	Temperatura inicial del sistema.
$T_i$	Temperatura en un momento $i$
$E_0$	Energía inicial del sistema.
$L$	Tamaño del arreglo.
$Z_2$	Grupo de simetría especular.
$N$	Número topológico de un solitón.
$B$	Número topológico de un solitón.
$\lim_{t \rightarrow \infty} E(x)$	Límite de la energía en $x$ cuando el tiempo tiende a infinito.
$\frac{\partial \phi}{\partial x}$	Derivada parcial de un campo $\phi$ respecto a $x$ .
$\lambda, \eta$	Parámetros del solitón kink $Z_2$ .
$\beta, \alpha$	Parámetros del solitón de sine-Gordon.
$\pi$	Número irracional Pi.
$\sum_{i=1}^N F_i$	Sumatoria sobre los valores de una función $F_i$ desde 1 hasta $N$ .
$D_{Nh}$	Grupo de simetría diedral de $N$ lados.
$T_d$	Grupo de simetría trigonal.
$O_h$	Grupo de simetría rotacional.
$V$	Energía potencial.
$\rho_{rel}$	Densidad Relativa.
$\mathcal{G}$	Grupo.
$a \circ b$	Multiplicación entre dos elementos de $\mathcal{G}$ .
$\mathcal{H}$	Hamiltoniano.

Símbolo	Significado
$U(t, \mathbf{x})$	Campo escalar
$\mathcal{L}$	Lagrangiano
$\Phi$	Campo escalar vectorial.
$\varphi$	Ángulo polar.
$r$	Distancia radial de un punto.
$F[r, \varphi]$	Campo escalar dependiente de $r$ y $\varphi$ .
$\Theta[r, \varphi]$	Campo escalar dependiente de $r$ y $\varphi$ .
$\tau_i$	Matrices de Pauli.
$L_\alpha$	Operador de Maurier-Cartan.
$\langle E \rangle$	Valor esperado de $E$ .
$\mu_I$	Potencial químico de isospín.
$\delta E$	Densidad de energía

# OBJETIVOS

## General

Obtener la configuración de los estados fundamentales en presencia de un potencial químico de Isospín con distintos potenciales para el modelo de baby Skyrme con distintas cargas topológicas.

## Específicos

1. Desarrollar un algoritmo de recocido simulado en C++ para optimizar funcionales de energía en física.
2. Calibrar el algoritmo en problemas de optimización resolviendo problemas con soluciones analíticas.
3. Implementar el algoritmo para optimizar los funcionales de energía del modelo de baby Skyrme, un modelo de teoría clásica de campos, con soluciones solitónicas aplicables a modelos de la materia.
4. Caracterizar el rompimiento de las simetrías en las soluciones del modelo de baby Skyrme en presencia de un potencial químico de isospín.



# INTRODUCCIÓN

Los solitones en el contexto de hidrodinámica fueron descritos por primera vez por el ingeniero escocés J. Scott Russell, en 1834. Él cabalgaba a orillas de un canal cuando un barco se detuvo súbitamente. Una joroba de agua se desplazó a lo largo del canal por varias millas, preservando su forma y velocidad. Fue sorprendente porque la joroba no aumentó ni disminuyó su altura respecto al nivel del agua, tampoco se dispersó o desvaneció como las ondas que usualmente viajan a través del agua. En física y matemática un solitón se refiere a un paquete de ondas solitarias que mantiene su forma y se propaga a velocidad constante sin dispersarse.

Además de hidrodinámica, existen más sistemas físicos con soluciones solitónicas. Entre ellas se pueden mencionar: óptica, comunicación de alta velocidad de datos, física de partículas y cosmología [28].

Los solitones topológicos aparecen en muchas teorías clásicas de campos con dinámica no lineal. Tienen propiedades que les permiten ser elegidos como candidatos para representar partículas:

- Existen en espacios finitos con energía finita.
- Luego de la colisión entre dos solitones, ambos emergen con sus propiedades originales.
- Son soluciones no disipativas.

Esto abre una brecha importante para una descripción alternativa de la materia [16, 24].

En física de partículas, los solitones empezaron a cobrar importancia cuando apareció en la escena T.H.R. Skyrme, con su célebre publicación *A non-linear field theory* en la que planteaba la existencia de solitones topológicos en el modelo sigma

no lineal. La idea de Skyrme al introducir su modelo fue describir partículas elementales a partir de sus propiedades topológicas. El modelo garantizó la existencia de soluciones estables al incluir un término al Lagrangiano del modelo *sigma no lineal*. El término agregado es llamado *término de Skyrme*, el modelo de *Skyrme*, y las partículas que describen estas soluciones estables se llaman *Skyrmiones*. Es suficiente esta información para entender lo valioso del aporte de Skyrme a la física de partículas y a la teoría de campos no lineales.

Posteriormente hubo un tiempo de oscuridad para los Skyrmiones, hasta que en 1983, entre los físicos nucleares, surgió la idea de utilizar la estructura matemática de estas soluciones como una nueva forma de describir a las partículas, específicamente a los nucleones. Fue una idea innovadora, el modelo fue ganando renombre y se empezó a considerar en otras ramas de la física como la *materia condensada*. Los estudios llevaron al modelo de baby Skyrme, un modelo reducido de 3-D a 2-D cuyas soluciones, estructuras matemáticas y comportamientos se asemejan. El modelo bidimensional tiene la ventaja de tener un menor costo computacional, además de tener sendas aplicaciones en física de materia condensada. De allí surgen muchas variantes al modelo dada la necesidad de agregarle un potencial para asegurar la estabilidad de los solitones. Los distintos potenciales del modelo, representan diversos fenómenos físicos como los defectos topológicos en materiales ferromagnéticos y antiferromagnéticos [21].

En este trabajo se abordan tres potenciales distintos del modelo de baby Skyrme en presencia de un potencial químico de isospín, obteniendo soluciones distintas cualitativa y cuantitativamente. Estudiando las simetrías presentes en el modelo con un vacío perturbativo y las simetrías remanentes luego de encender el potencial químico. Trabajos similares han sido realizados y pueden encontrarse en [1, 4, 6, 10, 14, 19, 20, 21, 28]. Los resultados obtenidos en este trabajo son las soluciones numéricas del modelo propuesto en [22], donde se estudia el rompimiento espontáneo de la simetría de los estados fundamentales en el modelo de baby Skyrme al agregarle un potencial químico de isospín al sistema.

Las soluciones de mínima energía o estados fundamentales de los sistemas, pueden encontrarse como soluciones analíticas de las ecuaciones de movimiento del mismo. Sin embargo, existen problemas no integrables cuyas soluciones analíticas no existen. En estos casos, surge la necesidad de un método alterno. Una alternativa

es recurrir a los algoritmos de optimización numérica. En este trabajo se desarrolló e implementó un *algoritmo de recocido simulado* en distintos problemas de física. Este es un algoritmo estocástico que forma parte de los *métodos de Monte Carlo* [11, 13].

Previo a trabajar con el modelo de baby Skyrme para los cuales existen soluciones analíticas o problemas resueltos previamente. Estos problemas incluyen las ramas de geometría, electrostática, solitones en una dimensión y materia condensada [2, 3, 10, 28]. Esto con el fin de verificar el correcto funcionamiento del código y calibrar sus parámetros. El código fue escrito en lenguaje C++.





# 1. Optimización en física

Los problemas de optimización son muy comunes en la vida cotidiana. Se busca el trayecto de menor tiempo, el trayecto más corto, minimizar costos de producción, entre otros ejemplos. También es un problema común en física, y en muchas ocasiones, un problema medular.

## 1.1. Importancia de la optimización en física

En física la optimización es un problema que se trata en diversas ramas y que se resuelve de distintas formas.

La optimización consiste en encontrar el estado de mínima energía de los sistemas físicos. El estado de mínima energía es, convenientemente, el estado fundamental de un sistema físico. Esto quiere decir que es la configuración en la cual el sistema es estable y se encuentra con mayor probabilidad [25].

Algunos de los problemas donde es necesario optimizar en física son [11]:

- En termodinámica, un sistema acoplado a un reservorio siempre se encuentra en el estado que minimiza la energía libre [5].
- En mecánica clásica, la ecuación diferencial de Euler-Lagrange es obtenida a partir del principio de mínima acción a través de un proceso de optimización [27].
- En física experimental, al ajustar datos a una función con determinados parámetros, la curva de mejor ajuste es la que minimiza las distancias al cuadrado de la función al punto.

De estos ejemplos, cabe resaltar que existen dos métodos principales para encontrar la solución de mínima energía de un sistema físico, en el caso de la mecánica clásica,

resolver las ecuaciones de movimiento o realizar una optimización numérica.

El primero es un método analítico, que consiste en plantear las ecuaciones de movimiento de todo el sistema a partir del principio de mínima acción y luego resolverlas analíticamente o con métodos numéricos como *Diferencias finitas* [23].

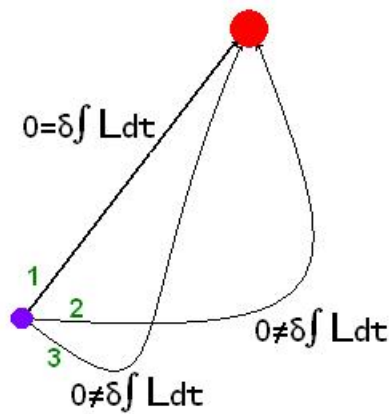


Figura 1.1. Principio de mínima acción.

El segundo método es el enfoque de este capítulo, los algoritmos de optimización numérica. Estos algoritmos pertenecen a los *métodos de Monte Carlo*. Estos son métodos no deterministas o estadísticos numéricos que basan su funcionamiento en base a la generación de números aleatorios, de allí se deriva su nombre, justo como la ciudad de juegos de azar. El uso de estos métodos puede ir desde realizar integraciones numéricas hasta los algoritmos de optimización [13].

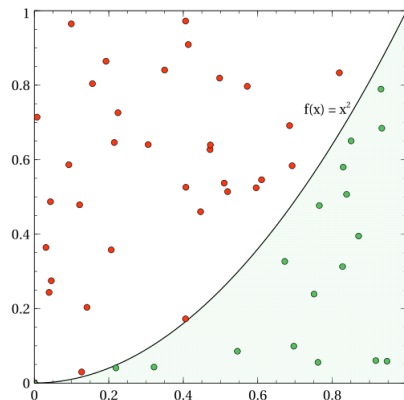


Figura 1.2. Métodos de Monte Carlo.

Algunos ejemplos de algoritmos de optimización numérica son: recocido simulado, enfriamiento simulado, templado paralelo y el método de podado-enriquecido de Rosenbluth [11].

Estos algoritmos de optimización son de mucha importancia al buscar los estados fundamentales de sistemas en los cuales las ecuaciones de Euler-Lagrange no tienen solución analítica, lo cual obliga a utilizar un método de optimización numérico.

## 1.2. Algoritmo de Recocido Simulado

El algoritmo de recocido simulado es una herramienta estocástica de optimización mejor conocida como *Simulated Annealing* o *SA*. La razón principal para escoger este algoritmo como herramienta para encontrar las soluciones del modelo de Baby Skyrme es la garantía de encontrar una solución óptima. Sin embargo es computacionalmente costosa, por lo cual algunos autores prefieren utilizar otros métodos.

### 1.2.1. Configuración de mínima energía

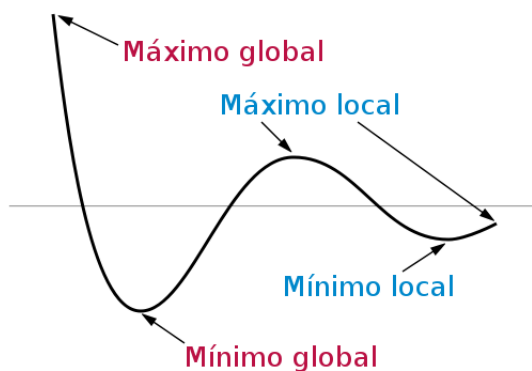
Los funcionales de energía son fundamentales en la descripción de un fenómeno físico. Los funcionales pueden describir un sistema de partículas o la interacción entre campos.

Al definir el funcional de energía de un sistema o campo, permite optimizarlo. La optimización puede realizarse por métodos analíticos al resolver las ecuaciones de movimiento o por métodos numéricos utilizando métodos de Montecarlo. En este caso se utilizó el método numérico llamado: algoritmo de recocido simulado.

Cuando se trabajan problemas de optimización numérica, es necesario tener en cuenta los conceptos de mínimos locales y mínimos globales ya sea en una configuración de partículas o en la configuración de un campo. Como se discutió en la sección anterior, la configuración de mínima energía es el estado fundamental de un sistema, por lo cual a partir de encontrar dichas configuraciones, se pueden estudiar las propiedades del sistema.

### 1.2.1.1. Mínimos locales y mínimos globales

En problemas de optimización con funcionales de energía no lineales, es común la existencia de más de una configuración con valor de energía mínima localmente. Sin embargo, sólo una de esas configuraciones posee valor mínimo absoluto, denominado mínimo global.



**Figura 1.3.** Función con mínimos locales y mínimos globales.

En la mayoría de problemas de optimización, la obtención de mínimos locales en lugar del mínimo global es un problema medular debido a que si no se trata con cuidado, el método de búsqueda del estado de mínima energía puede quedarse estancado en un mínimo local y no existe garantía de encontrar el estado fundamental del sistema.

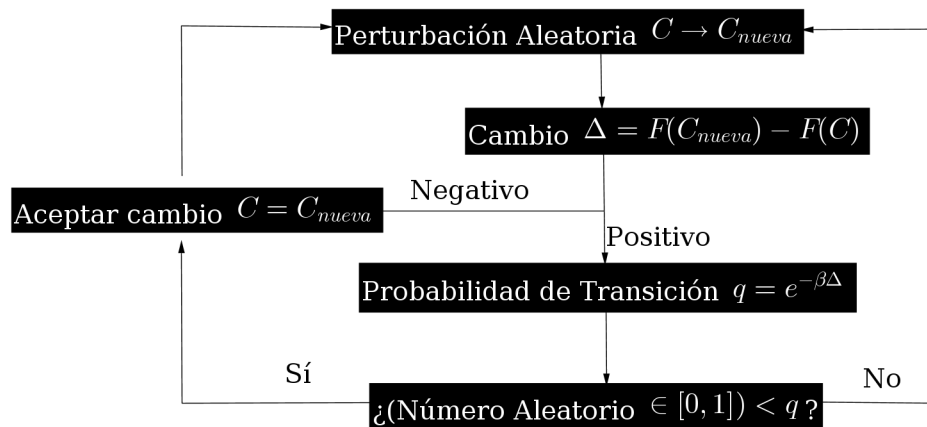
### 1.2.2. Algoritmo de metrópolis

Como se mencionó antes, el proyecto consiste en la implementación de un SA. Este se basa en un algoritmo de metrópolis, en analogía con el recocido de metales [12]. El algoritmo de metrópolis es un método estocástico de optimización que se utiliza para llevar un sistema estático al equilibrio térmico. Para ello realiza perturbaciones aleatorias en un sistema con determinadas condiciones iniciales y evalúa una propiedad del sistema que depende de la configuración del mismo  $\mathcal{F}(C)$  (en este caso se evaluará el funcional de energía del sistema  $E(C)$ ). A partir de esta evaluación, se aceptan las nuevas configuraciones donde la propiedad a evaluar disminuye. Si la propiedad a evaluar aumenta, existe una probabilidad de transición. La probabilidad de transición de la configuración  $C_1$  a la configuración  $C_2$  está

definida de la forma:

$$P(C_1|C_2) = e^{-\beta\Delta\mathcal{F}(C)}$$

Esto implica que las perturbaciones donde  $\mathcal{F}(C)$  aumente son menos probables mientras más altas sean. Donde  $\beta = k_B T$ ,  $k_B$  puede escogerse para normalizar las perturbaciones al sistema. El valor  $T$  define la probabilidad de transición de un estado al otro de mayor energía [10].



**Figura 1.4.** Diagrama de Flujo del Algoritmo de Metrópolis.

### 1.2.3. Del algoritmo de metrópolis al recocido simulado

El recocido de metales, es un proceso industrial para obtener estructuras metálicas que no pueden alcanzarse utilizando otros procesos.

El recocido de un metal consiste en llevarlo a temperaturas muy altas en donde se liberan tensiones internas debido al flujo libre de las moléculas. Luego se deja enfriar lentamente en el ambiente o en el horno apagado. Algunas técnicas análogas requieren más de un recocido para alcanzar la configuración deseada.

### 1.2.3.1. Descripción del método

Al hacer la relación entre el algoritmo de Metrópolis y el recocido de metales, nace el **SA**.

La simulación del recocido implica en el caso de un campo, discretizar el espacio en  $N_i$  nodos en cada dimensión  $i$  espaciadas a cierta distancia. Luego para ambos casos, se deben definir las condiciones iniciales en un arreglo inicial definido por alguna función (lineal, cuadrática, exponencial, etc.) o en un arreglo aleatorio.

Luego se define una temperatura inicial del sistema normalizado para que:

$$k_B T_0 \approx E_0$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $E_0$  es la energía inicial del arreglo.

Se escogen partículas o nodos de forma aleatoria en el sistema y se perturban aleatoriamente en el rango  $[-L : L]$  donde  $L$  es el tamaño del arreglo. La magnitud de las perturbaciones es directamente proporcional a la temperatura del sistema.

Se deja que el sistema evolucione a la misma temperatura hasta que alcanza un equilibrio térmico [23]. La evolución del sistema consiste en aceptar cualquier perturbación en la cual  $E_f \leq E_0$ , y la probabilidad que se acepten cambios donde  $E_f > E_0$  viene dada por una distribución de Boltzmann [5]:

$$p(E_f; E_0) = e^{-\frac{(E_f - E_0)}{k_b T}}$$

Entonces, grandes aumentos de energía son permitidos a temperaturas altas, y al bajar la temperatura los aumentos de energía permitidos son menores, lo cual permite que el sistema salga de mínimos locales a altas temperaturas.

Luego se debe bajar la temperatura del sistema y repetir el proceso. El descenso de la temperatura puede escogerse de distintas formas, sin embargo, el descenso de la temperatura de un sistema que se encuentra inmerso en otro sistema a menor temperatura obedece a la ley de enfriamiento de Newton [29], por lo cual se escoge una función exponencial para descender la temperatura. Se puede resumir lo anteriormente mencionado en esta serie de pasos:

1. Definir la configuración inicial y las dimensiones del sistema o campo.
2. Establecer  $T = T_0$ ,  $i = 0$ .
3. Calcular  $T(i)$ .
4. Seleccionar una partícula o un nodo aleatorio.
5. Realizar una perturbación de la forma  $\Delta x = rand[-1, 1] \times L \left( \frac{T}{T_0} \right)$ .
6. Realizar el algoritmo de metrópolis evaluando  $\Delta E$  utilizando la temperatura actual del sistema para calcular la probabilidad de transición.
7. Realizar los pasos del 4 al 6 hasta que el sistema alcance el equilibrio en la temperatura actual.
8. Realizar los pasos del 3 al 7 hasta que  $T = 0$ .

Ésta es la descripción general de un recocido, sin embargo, hay procesos en los cuales es necesario realizar más de uno para garantizar la obtención de un mínimo global [10].

La necesidad que la evolución del proceso sea estocástica, hace que la producción de números aleatorios necesite ser distinta en cada ciclo de enfriamiento. Por ello, se utiliza un generador de números pseudo-aleatorios que posee el lenguaje C++. La generación de números mediante esta función tiene un período de  $n = 1 \times 10^{32}$ , esto será suficiente para todos los problemas realizados en este trabajo.

Para cada problema distinto es necesario calibrar el código a distintas temperaturas puesto que el obtener un mínimo global o un mínimo local requiere un rango específico de temperatura. El costo computacional de las simulaciones depende de la granularidad de cada problema (el número de partículas o de puntos). Para algunos problemas en los cuales se utilizan campos continuos es necesaria granularidad media. En casos donde los detalles en regiones más pequeñas son importantes, se requiere alta precisión.

#### **1.2.4. Ventajas y desventajas del algoritmo de recocido simulado**

Además de garantizar la obtención de una solución de mínima energía el algoritmo de recocido simulado posee otras ventajas principales como las siguientes

[12]:

- Optimiza funcionales que poseen un número arbitrario de discontinuidades, condiciones de frontera y restricciones impuestas sobre estos funcionales.
- Optimiza funcionales no lineales.
- Es un código de fácil implementación comparado con otros algoritmos de optimización para sistemas no lineales.

Son ventajas útiles al momento de implementarlo en un problema específico. Sin embargo, también existen desventajas en el método, estas son:

- Es muy costosa temporalmente y computacionalmente.
- Le cuesta mucho afinar las soluciones de problemas específicos.
- Si es mal utilizado, se obtienen distintos resultados en distintas ejecuciones sobre el mismo sistema.

Sin embargo si se hace una correcta implementación y se cuenta con el tiempo y la disponibilidad computacional requerida, su uso es muy viable.

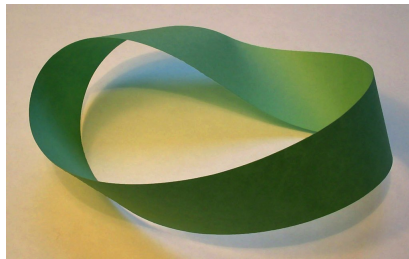


## 2. Calibración del algoritmo en 1D y 2D

La calibración del algoritmo es necesaria antes de empezar a resolver problemas cuya solución numérica no es conocida aún. Si no se realiza la calibración previa a ello, los resultados que se obtengan y posteriormente se presenten serán erróneos. El presentar nuevos resultados sin cuidado implicaría desinformar.

Por ello, el algoritmo de recocido simulado fue calibrado en problemas más simples antes de trabajar con las soluciones solitónicas en el modelo de Baby Skyrme. Los trabajos más simples fueron los realizados en 1D, puesto que eran soluciones estacionarias con energías calculadas previamente, resultaron ser problemas ideales para comprobar el correcto funcionamiento del algoritmo. Se trabajaron 5 problemas de calibración, dos en 1-D y tres en 2-D.

Los problemas trabajados en 1-D son solitones topológicos, estos fueron el kink  $Z_2$  y el kink de Sine-Gordon. La interpretación de ambos es matemática. El kink  $Z_2$  es un modelo con un Lagrangiano invariante ante la transformación  $\phi \rightarrow -\phi$ , por lo cual posee una simetría  $Z_2$ . El kink de Sine-Gordon, es invariante ante las transformaciones  $\phi \rightarrow \phi + 2N\pi$  por lo cual posee una simetría  $Z_n$ , este modelo representa las rotaciones realizadas en una banda elástica. Los valores de  $N$  representan el número de vueltas hechas dentro de la misma banda cortada para luego ser unidas, como en una banda de Möbius [28].



**Figura 2.1.** Banda de Möbius.

Los problemas en 2-D abordados fueron acerca de interacciones electromagnéticas entre partículas. Los primeros dos fueron partículas cargadas en la superficie de una esfera conductora, considerando los casos donde existe únicamente repulsión y el caso donde existe tanto atracción como repulsión [2].

El último problema de calibración en 2-D fue acerca del comportamiento de moléculas dentro de una caja cuadrada a distintas densidades para observar fases dispersas y fases continuas como en un coloide; gelatina, por ejemplo [3].



**Figura 2.2.** La gelatina es uno de los coloides más comunes en la vida cotidiana.

## 2.1. Solitones topológicos

Los solitones fueron descubiertos inicialmente por un ingeniero escocés llamado J. Scott Russell, en 1844, al observar una onda propagándose en un canal debido a un bote deteniéndose. Él observó y siguió a caballo la onda a lo largo del canal y se percató que la onda no cambió de forma ni de velocidad durante varias millas. 150 años después, los solitones se han encontrado en diversas teorías físicas más allá de la hidrodinámica. Los solitones se distinguen por dos características principales: viajan a velocidades uniformes manteniendo sus formas originales como pulsos de energía, y pueden colisionar entre sí, emergiendo luego de la colisión con sus formas originales. Lo que los convierte en candidatos ideales para describir partículas elementales.

En física de partículas, se ha encontrado que los solitones pueden existir en los modelos no lineales de partículas elementales y las propiedades cuánticas de las partículas pueden encontrarse en las propiedades topológicas de los solitones. Esto presenta una descripción dual de las partículas elementales [28].

Los solitones en física de partículas tienen un rasgo característico, la estructura topológica. De aquí nacen los llamados *Solitones topológicos*. El carácter topológico de las deformaciones del campo respecto al vacío, se representa con un simple entero  $N$  denominado como carga topológica. La carga topológica separa los distintos tipos de partículas, por lo cual un solitón con determinada carga topológica no puede deformarse en otro de distinta carga topológica.

Los distintos modelos poseen distintas formas de calcular la carga topológica, definida a partir del Lagrangiano y ecuaciones de campo del propio del modelo. Así como se mencionó previamente, los Lagrangianos son invariantes ante ciertas transformaciones, estas invarianzas llevan hacia las simetrías en los modelos [16].

## 2.2. Problemas en 1D

Los kinks son casos especiales de soluciones no disipativas en teorías físicas, eso los ubica en la categoría de solitones. Una solución no disipativa es aquella cuya densidad de energía en un punto determinado no se desvanece en el tiempo, esto quiere decir que cumple con:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} dE[x] \neq 0$$

Los kinks posteriormente descritos, las soluciones analíticas y los cálculos de energía de los solitones se pueden encontrar en [28] y [10].

### 2.2.1. Solitón kink $Z_2$

#### 2.2.1.1. Condiciones del problema

El solitón kink  $Z_2$ , es un modelo clásico de campos en 1+1 dimensión que permite soluciones estacionarias por lo que puede ser reducido a 1 dimensión espacial.

El funcional de energía del modelo es:

$$E = \int \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\lambda}{4} (\phi^2 - \eta^2)^2 \right) dx \quad (2.1)$$

Las soluciones triviales o *vacíos* de este modelo son  $\phi_k = \pm \eta$ .

Las soluciones solitónicas (no triviales) se producen cuando se colocan las con-

diciones de frontera en distintos vacíos, forzando a  $\phi(x)$  saltar de un vacío a otro.

La solución analítica se puede obtener a partir de resolver las ecuaciones de Euler-Lagrange para el funcional de energía descrito en la ecuación (2.1). La solución analítica para el problema con condiciones iniciales  $\phi(-\infty) = -\eta$  y  $\phi(\infty) = \eta$  es:

$$\phi_k(x) = \eta \tanh\left(\sqrt{\frac{\lambda}{2}} \eta x\right) \quad (2.2)$$

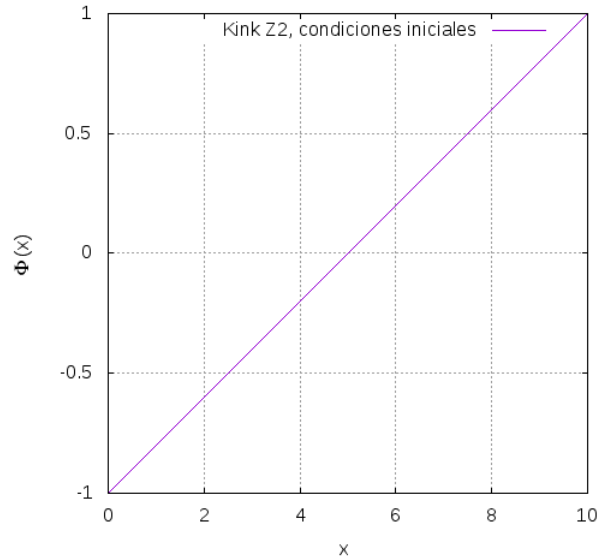
Al fijar los valores  $\lambda = \eta = 1$ , la energía total del sistema es:

$$E_k = \frac{2\sqrt{2}}{3}$$

La ventaja de tener una solución analítica, es que el valor de la energía total del solitón es conocida, por lo que los resultados de la simulación pueden ser comparados con el valor teórico.

### 2.2.1.2. Resultados obtenidos

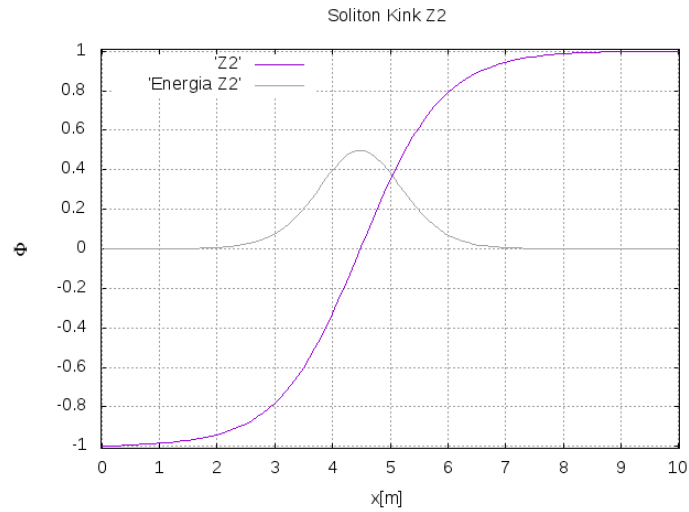
A partir de la ecuación (2.1) se puede optimizar el funcional de energía mediante un algoritmo de recocido simulado y comparar la configuración encontrada con la ecuación (2.2).



**Figura 2.3.** Condiciones iniciales del kink Z2.

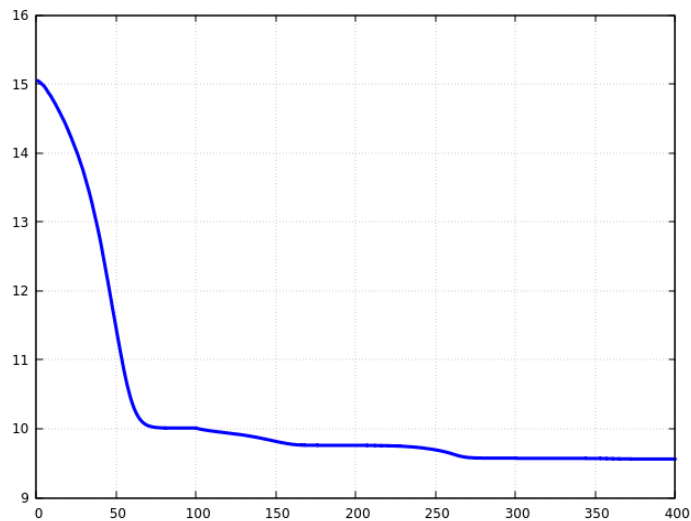
La configuración inicial del campo es una recta que va desde  $(0, -1)$  hasta

(10, 1), discretizada en 100 puntos, a partir de ello se obtiene la solución numérica y la energía de esa configuración como se muestra en la figura 2.4.



**Figura 2.4.** Configuración del kink Z2.

Las soluciones fueron encontradas a partir de varios recocidos, al dejar el sistema enfriarse y luego calentarse, se obtienen los valores de energía en función del tiempo. Esta evolución se muestra en la figura 2.5.



**Figura 2.5.** Evolución de la energía en función de los descensos de temperatura (tiempo).

Se observa como al disminuir la temperatura en el tiempo, la energía baja exponencialmente hasta llegar a una cota inferior. Luego se vuelve a elevar la temperatura y se deja enfriar nuevamente. Esto permite que la temperatura alcance un nuevo mínimo hasta que finalmente alcance el mínimo global.

Energía Teórica	Energía con SA
0.9428	0.9432

**Tabla 2.1.** Comparación de energías para el Kink  $Z_2$ .

La obtención de energías con 0.04 % de error permite afirmar que el algoritmo obtiene soluciones de mínima energía.

## 2.2.2. Solitón kink de Sine-Gordon

### 2.2.2.1. Condiciones del problema

El solitón kink de Sine-Gordon, es un modelo clásico en 1+1 dimensión que permite soluciones estacionarias por lo que puede ser reducido a 1 dimensión espacial.

El funcional de energía del modelo es:

$$E = \int \left( \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\alpha}{\beta^2} (1 - \cos(\beta \phi)) \right) dx \quad (2.3)$$

Las soluciones triviales o *vacíos* de este modelo son  $\phi_k = \pm \frac{2\pi N}{\beta}$ , para  $N = 1, 2, 3, \dots$ . Cada solución trivial pertenece a un sector topológico diferente, esto implica que una solución trivial no puede ser deformada en una solución que vaya de  $N = 1$  hasta  $N = 2$ , debido a esto,  $N$  se define como número topológico, o carga topológica y separa configuraciones que no pueden ser deformadas continuamente una en la otra.

Las soluciones solitónicas se producen cuando se colocan las condiciones de frontera en distintos vacíos, forzando a  $\phi(x)$  saltar de un vacío a otro. A diferencia del solitón kink  $Z_2$ , este modelo tiene infinitos vacíos, por lo cual los saltos pueden realizarse desde cualquier vacío hacia otro pasando por todos los vacíos intermedios.

La solución analítica se puede obtener a partir de resolver las ecuaciones de Euler-Lagrange para el funcional de energía descrito en la ecuación (2.3) La solución analítica para el problema con condiciones iniciales  $\phi(-\infty) = 0$  y  $\phi(\infty) = \frac{2\pi}{\beta}$  es:

$$\phi_k(x) = \frac{4}{\beta} \tan^{-1} \left( e^{\sqrt{\alpha} x} \right) \quad (2.4)$$

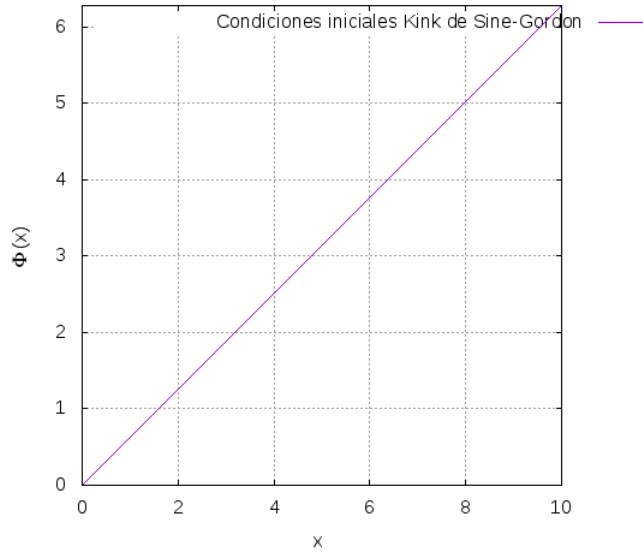
Al fijar los valores  $\alpha = \beta = 1$ , la energía total del sistema es:

$$E_k = 8N$$

De igual manera que el modelo anterior, esta energía se compara con el valor obtenido del optimizador para verificar su funcionamiento.

### 2.2.2.2. Resultados obtenidos

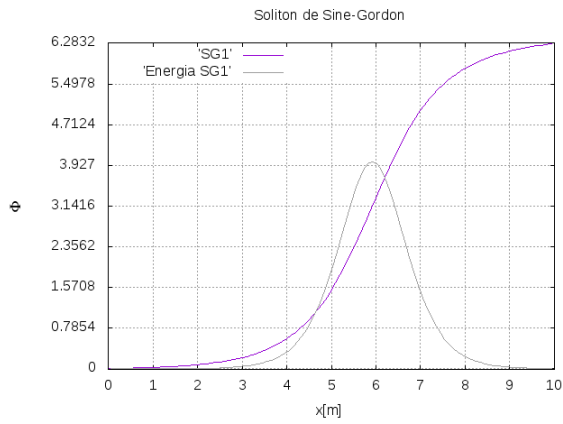
La solución obtenida por la optimización de (2.3) se puede comparar con (2.4)



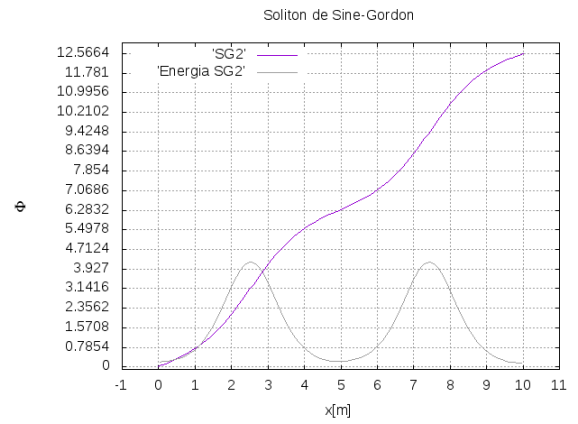
**Figura 2.6.** Condiciones iniciales del kink de Sine-Gordon.

La configuración inicial es una recta que va desde  $(0, 0)$  hasta  $(10, 2N\pi)$ , discretizada en 100 puntos como se muestra en la figura 2.6. A partir de estas condiciones iniciales, se encuentra la solución numérica y la energía de esa configuración. La configuración se observa en la figura 2.7, 2.8 y las energías obtenidas en la tabla 2.2

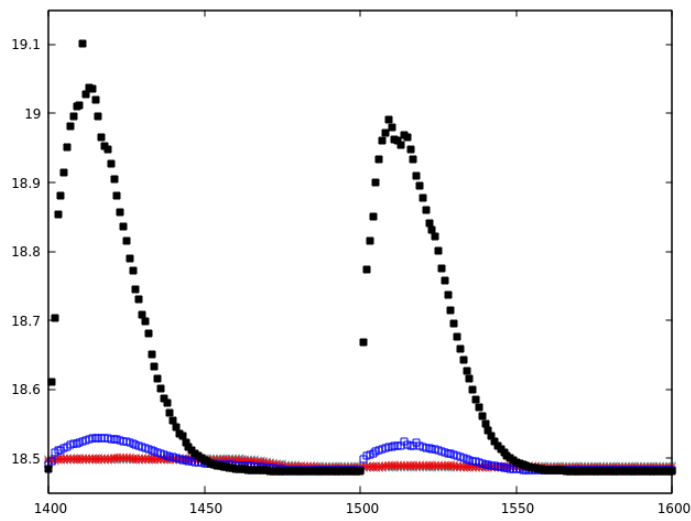
La evolución de la energía en función del tiempo para el kink de Sine-Gordon es similar a la del kink  $Z_2$ . Cabe resaltar que a temperaturas lo suficientemente altas, el sistema sale del equilibrio en que se encuentra y alcanza nuevos valores mínimos, por ello es necesario calibrar también la temperatura a la cual el sistema se someterá en el recocido. Esto se evidencia en la figura 2.5.



**Figura 2.7.** Configuración del kink de Sine-Gordon para  $N = 1$ .



**Figura 2.8.** Configuración del kink de Sine-Gordon para  $N = 2$ .



**Figura 2.9.** Calibración de la temperatura del recocido.



Se observa como la temperatura es un parámetro fundamental a calibrar al realizar un recocido simulado y como una mala calibración de este parámetro obtendrá mínimos locales en lugar de mínimos globales.

Número Topológico	Energía Teórica	Energía con <b>SA</b>
1	8	8.00692
2	16	16.4186

**Tabla 2.2.** Comparación de energías para distintos valores de  $n$  en el modelo de Sine-Gordon.

A partir de las soluciones de este modelo, se puede afirmar que cuando el número topológico es mayor, la eficiencia del modelo disminuye, esto implica que se deben realizar más iteraciones o más de un recocido conforme aumenta la carga topológica.

### 2.3. Problemas en 2D

Al resolver problemas en 2D (estacionarios) las densidades de energía se encuentran definidas por más de una variable. En configuraciones planas estas variables son sus posiciones cartesianas  $(x, y)$ , sin embargo, hay configuraciones de interés en las cuales la simetría es polar, por lo que conviene definir la posición de las partículas en coordenadas polares.

El paso de 1D a 2D no implica mayor complicación al tener un funcional de energía que depende explícitamente de las posiciones de las partículas. Por ejemplo, el funcional de energía de dos partículas interactuando de forma electromagnética depende de la distancia entre ambas partículas, esta distancia puede definirse en función de las posiciones de las partículas.

Por lo tanto, ahora se realizarán perturbaciones en 2 coordenadas. Esto no genera mayor complicación en el código previamente escrito para una dimensión, la evaluación del funcional de energía se hace una vez por cada par de perturbaciones entonces la complejidad del algoritmo resulta afectada considerablemente.

Para la calibración del algoritmo en dos dimensiones basta con encontrar configuraciones de partículas, no es necesario trabajar con funcionales de energía com-

puestos por varios campos donde la optimización de ellos se realiza por separado. Esto se verá más adelante en el modelo de baby Skyrme.

### 2.3.1. Modelo de Thompson

El modelo de Thompson representa la distribución de electrones en la superficie de una esfera. Este fue uno de los primeros modelos del átomo en la historia de la física, en donde únicamente existían interacciones electromagnéticas entre las partículas. Aunque el modelo se presenta en 3D, todas los electrones se ubican en la superficie de la esfera, por lo que el problema se reduce a un problema de 2D, donde la configuración es definida por el ángulo polar ( $\phi$ ) y el ángulo azimutal ( $\theta$ ) [2].

#### 2.3.1.1. Condiciones del problema

Las estructuras simétricas de la materia se observan al analizar las distribuciones de las partículas a pequeña escala, por eso, se estudió la distribución de  $N$  electrones en una esfera metálica.

Al estar dentro de una esfera metálica, el grupo de electrones se puede mover libremente. Al alcanzar el equilibrio, los electrones deberían colocarse en las esquinas de un poliedro inscrito en la esfera.

El funcional de energía que describe al sistema completo es:

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad \forall i \neq j \quad (2.5)$$

Para este problema, lo importante es observar las estructuras simétricas, por lo que no hay un valor de energía por comparar.

#### 2.3.1.2. Resultados obtenidos

Las distribuciones, como era esperado, presentaron estructuras simétricas. Los resultados se muestran en las figuras 2.10 hasta 2.15.



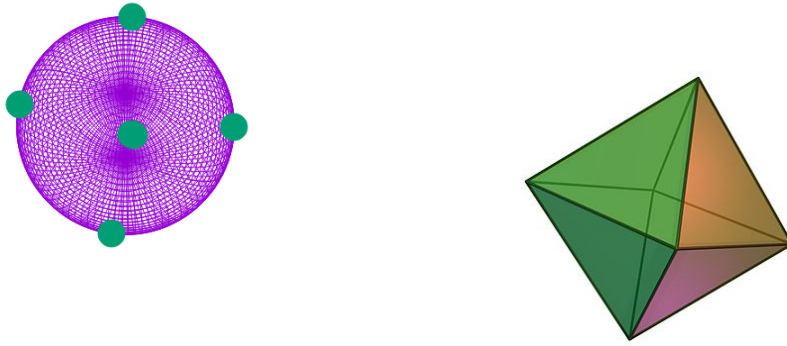
**Figura 2.10.** La distribución de  $2 e^-$  en el modelo de Thompson tiene la estructura de una línea recta.



**Figura 2.11.** La distribución de  $3 e^-$  en el modelo de Thompson tiene la estructura de un triángulo.



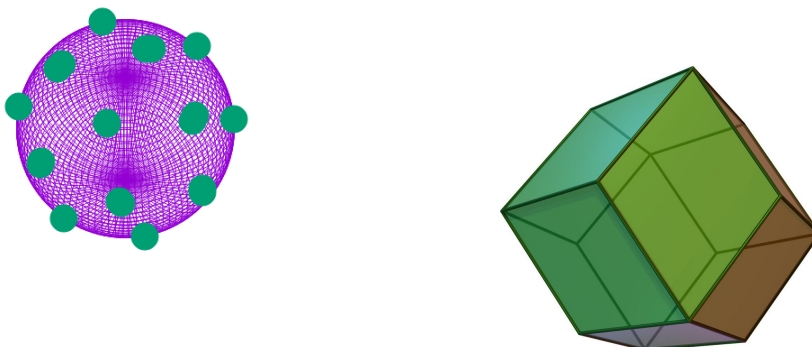
**Figura 2.12.** La distribución de  $4 e^-$  en el modelo de Thompson tiene la estructura de un tetraedro.



**Figura 2.13.** La distribución de 6  $e^-$  en el modelo de Thompson tiene la estructura de un octaedro.



**Figura 2.14.** La distribución de 12  $e^-$  en el modelo de Thompson tiene la estructura de una doble pirámide pentagonal elongada.



**Figura 2.15.** La distribución de 20  $e^-$  en el modelo de Thompson tiene la estructura de un rombododecaedro.

Debido a que son fuerzas repulsivas, los electrones están alejados a la mayor distancia posible, formando distintos poliedros. Los grupos de simetrías que se presentan en cada distribución son:

$n$	G
2	$D_{\infty h}$
3	$D_{3h}$
4	$T_d$
6	$O_h$
12	$Y_h$
20	$D_{3h}$

**Tabla 2.3.** Grupo de simetría G para cada distribución de  $n e^-$  en el modelo de Thompson.

## 2.3.2. Distribución de partículas con potencial de Lennard-Jones

### 2.3.2.1. Condiciones del problema

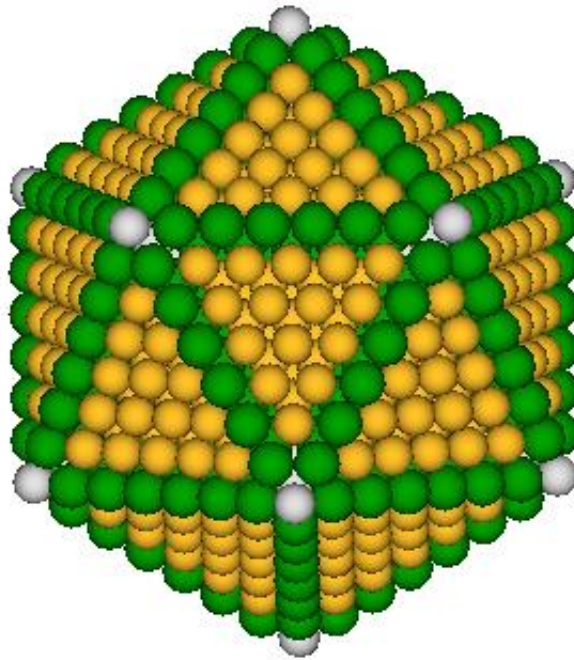
Cuando se tiene un potencial atractivo, los electrones se distribuyen en estructuras simétricas, ocupando la totalidad de una esfera, distribuidas en su superficie. Sin embargo, al agregarle una fuerza atractiva al potencial para modelar moléculas y forzarlas a ocupar la superficie, se presentan estructuras asimétricas.

El funcional de energía que describe al sistema completo es:

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \frac{1}{r_{ij}^{12}} - \frac{2}{r_{ij}^6} \right) \quad \forall i \neq j \quad (2.6)$$

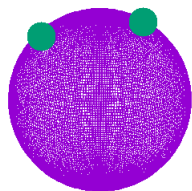
El problema del potencial de Lennard-Jones experimenta un problema en particular, la existencia de un potencial atractivo, genera mínimos locales. ¡Muchos mínimos locales! Para  $N = 13$  partículas, existen 1467 mínimos locales [2]. Por lo cual los métodos de optimización deben utilizarse con debido cuidado.

### 2.3.2.2. Resultados obtenidos

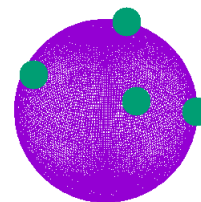


**Figura 2.16.** Icosaedro de Mackay

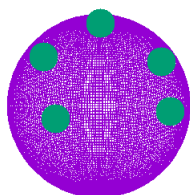
Para este potencial las distribuciones encontradas coinciden con lo que se describe en [2], un icosaedro de Mackay con llenado parcial de los vértices. Esta falta de los vértices presenta una ruptura de las simetrías que aparecían en el modelo de Thompson en simetrías remanentes.



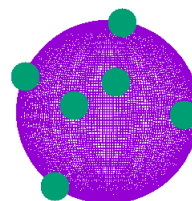
**Figura 2.17.** Distribución de 2 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones.



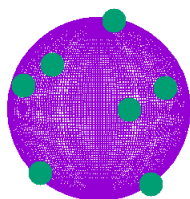
**Figura 2.18.** Distribución de 4 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones.



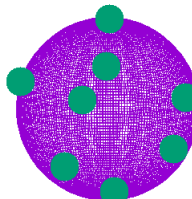
**Figura 2.19.** Distribución de 5 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones.



**Figura 2.20.** Distribución de 6 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones.



**Figura 2.21.** Distribución de 7 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones.



**Figura 2.22.** Distribución de 8 partículas que interactúan con un potencial de Lennard-Jones.

### 2.3.3. Simulación de un Coloide

#### 2.3.3.1. Objetivos de la simulación del coloide

La simulación de un coloide se realizó a partir de un *Random Walk* adaptado con procesos de un **SA**. Este es un problema similar al modelo de Thompson, sin embargo este problema sí se encuentra en 2D sin necesidad de reducirlo. Los objetivos de esta simulación fueron:

- Simular un sistema coloidal en 2D sujeto a un potencial de London.
- Obtener la configuración de mínima energía del sistema coloidal a distintas densidades.
- Determinar el tipo de red cristalina que se forma en el coloide.
- Evaluar los recursos computacionales necesarios para una optimización en 2D.

#### 2.3.3.2. ¿Qué es un coloide?

En la materia condensada, los coloides forman parte de la materia blanda, y su análisis es distinto al que se hace sobre estructuras cristalinas. Junto a las suspensiones, presentan dos fases: una fase continua y una fase dispersa.

La diferencia entre una suspensión y un coloide es el tamaño de las partículas. Las partículas en la fase dispersa dentro de un coloide son visibles microscópicamente, mientras las partículas en la fase dispersa dentro de una suspensión son visibles macroscópicamente. El tamaño de las partículas de un coloide es  $10^{-9}m \leq r \leq 10^{-5}$ .

Las fases dispersas de los coloides pueden ser un líquido o un gas, mientras las fases continuas pueden ser un líquido o un sólido. La diferencia entre una fase continua y una fase dispersa es que la primera presenta estructuras uniformes y la segunda no. Esto lleva a que la fase continua pueda analizarse como una estructura cristalina [3].

#### 2.3.3.3. Redes Cristalinas

Las redes cristalinas son estructuras que se presentan en un material condensado, presentando un ordenamiento particular. Se encuentran en 1, 2 y 3 dimensiones. En este caso particular, las redes cristalinas pueden ser de dos tipos, hexagonal o



cuadrada.

La forma de determinar el tipo de red en que se ordenan las partículas en el coloide, es estudiando el número de coordinación (cantidad de vecinos más próximos) para la partícula central.

#### 2.3.3.4. Condiciones de la Simulación

La simulación fue realizada utilizando el código en C++ que se encuentra en el anexo B. Las condiciones establecidas para la simulación fueron las siguientes:

- Las partículas son esferas rígidas de radio  $r = 5 \times 10^{-7}m$
- Están contenidas en una caja cuadrada de lado  $L = 40r$
- Las partículas no se pueden traslapar.
- La interacción entre dos partículas está sujeta a un potencial de London ( $V(r_{ij}) = \frac{A}{r_{ij}}$ ).
- la constante  $A = r$ .
- La evolución del sistema es estocástica.
- La configuración inicial del coloide es aleatoria.

El definir la configuración del sistema como aleatoria se escogió para simular un sistema de partículas que son liberadas en una caja. Luego alcanzan el equilibrio en la solución de mínima energía.

Sin embargo, esto supone una complicación, al estar desordenados inicialmente, existe área suficiente para colocar más partículas, pero está dispersa entre las moléculas del coloide y no existe un espacio donde quepa otra sin traslaparse con las ya ubicadas en la caja. Para esta caja con capacidad de 400 partículas, únicamente se logró colocar 273. Sobre este valor, el tiempo de ubicación de un nuevo elemento dentro de la caja tiende a infinito debido a que no existe espacio libre para ella.

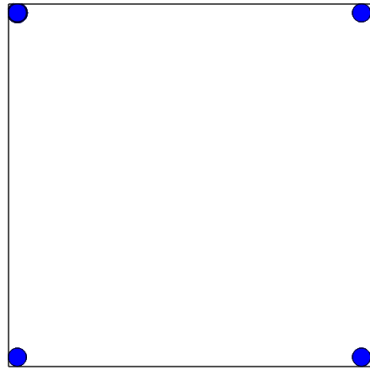
#### 2.3.3.5. Configuraciones de mínima energía para distintas densidades

Se calcularon las configuraciones de mínima energía a partir del funcional de energía que obedece a un potencial de London para densidades relativas ( $\rho_{rel} = \frac{n}{400}$ )

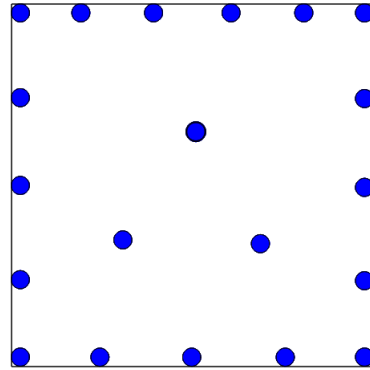
$$0.01 \leq \rho_{rel} \leq 0.64.$$

Las distribuciones presentan distintos comportamientos a distintas densidades en las figuras de la 2.23 a la 2.32, a partir del cual se puede concluir:

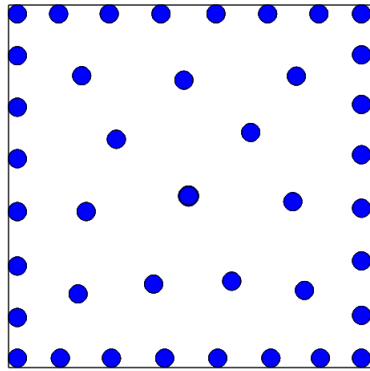
- Las partículas en las fases continuas forman una red hexagonal.
- Se observa un coloide a partir de  $\rho_{rel} = 0.15$ .



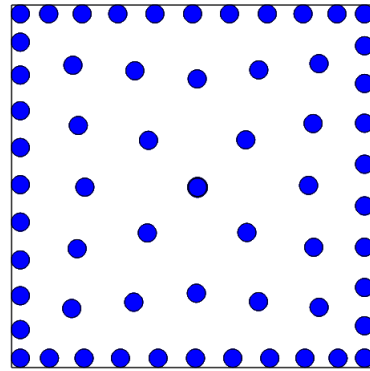
**Figura 2.23.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.01$ .



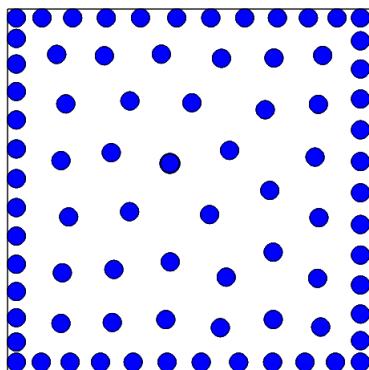
**Figura 2.24.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.05$ .



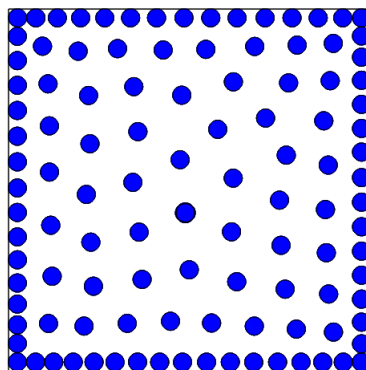
**Figura 2.25.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.10$ .



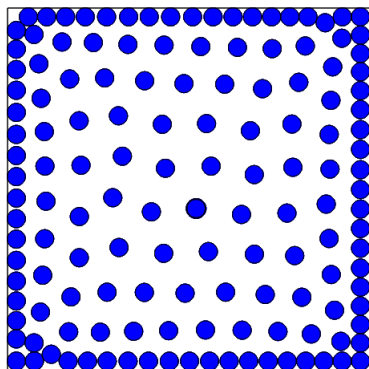
**Figura 2.26.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.15$ .



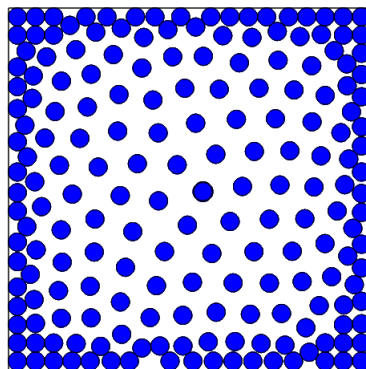
**Figura 2.27.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.20$ .



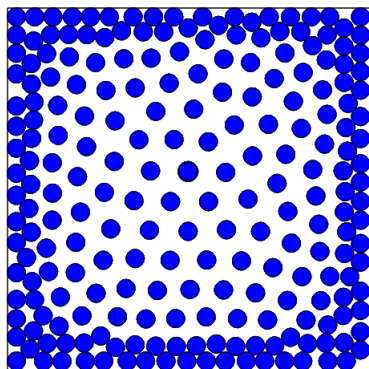
**Figura 2.28.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.28$ .



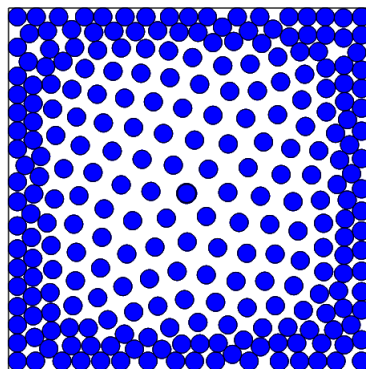
**Figura 2.29.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.36$ .



**Figura 2.30.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.48$ .



**Figura 2.31.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.56$ .



**Figura 2.32.** Coloide con  $\rho_{rel} = 0.64$ .



## 3. Conceptos relevantes de simetrías y topología en el modelo de Skyrme

Antes de desarrollar el modelo de Skyrme y el modelo de Baby Skyrme, es necesario empezar describiendo conceptos de matemática y física relevantes. Entre ellos se encuentra la teoría de grupos, las simetrías, las configuraciones de mínima energía (nuevamente) y una breve introducción a topología.

### 3.1. Simetrías y cantidades conservadas

Las simetrías están relacionadas directamente con la teoría de grupos, así que antes de empezar con simetrías es importante tener en cuenta algunos conceptos relevantes en teoría de grupos

#### 3.1.1. Teoría de grupos

La teoría de grupos es relevante en este trabajo debido a su relación con las simetrías y con la topología.

##### 3.1.1.1. Definición de grupo

Un conjunto  $\mathcal{G}$  de elementos  $a, b, c, \dots$  es un grupo si se cumplen los siguientes cuatro axiomas [7]:

- Existe una composición denominada *multiplicación*, que asocia un par de elementos  $a$  y  $b$  de  $\mathcal{G}$  con otro elemento  $c$  de  $\mathcal{G}$ . Esta operación se escribe:  $a \circ b = c$
- La multiplicación es asociativa, esto implica que para tres elementos  $a, b$ , y  $c$  de  $\mathcal{G}$ , se cumple:  $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$
- El conjunto contiene un elemento  $e$  denominado identidad, tal que, para cada elemento  $a$  de  $\mathcal{G}$  se cumple:  $a \circ e = e \circ a = a$

- Para cada elemento  $a$  de  $\mathcal{G}$ , existe un elemento  $a'$  contenido en  $\mathcal{G}$  tal que:  $a \circ a' = a' \circ a = e$ . El elemento  $a'$  es el inverso de  $a$  y se denota como  $a^{-1}$

### 3.1.1.2. Conmutatividad

Dos elementos  $a$  y  $b$  pertenecientes a  $\mathcal{G}$  son conmutativos si:

$$a \circ b = b \circ a$$

Además, si todos los elementos de un grupo son conmutativos entre si, se le denomina *Grupo Abelian* [7].

### 3.1.1.3. Subgrupos

Un subgrupo  $\mathcal{H}$  de  $\mathcal{G}$  de elementos  $a', b', \dots$  es un grupo que utiliza la misma ley de composición que  $\mathcal{G}$ .

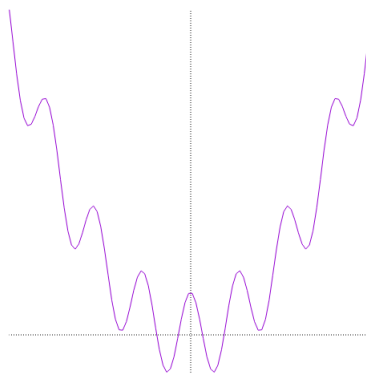
Existen dos subgrupos triviales para cada grupo: un grupo que contiene únicamente la identidad y el grupo mismo [7].

### 3.1.1.4. Isomorfismo

El mapeo de un grupo  $\mathcal{G}$  en un grupo  $\mathcal{G}'$  es isomórfico si los elementos de ambos grupos tienen una relación de correspondencia uno a uno [7].

$$g \iff g'$$

## 3.1.2. Simetrías



**Figura 3.1.** Función par.

Si se analiza la gráfica presentada en la figura (3.1), no se puede afirmar con certeza la forma explícita que tiene  $f(x)$ , sin embargo, pueden mencionarse ciertas propiedades de la gráfica, por ejemplo:  $f(x) = f(-x)$ , por lo cual la función es par. Esta función se denomina simétrica respecto al eje vertical en el origen.

En física, las simetrías aparecen frecuentemente en diversos problemas. Y a pesar de saber la forma funcional de los fenómenos físicos, es el análisis de las simetrías en las teorías lo que presenta los resultados más relevantes.

Hasta 1917, las implicaciones dinámicas de las simetrías no habían sido completamente descubiertas, fue hasta que Emmy Noether publicó su famoso teorema que relacionaba las simetrías con las leyes de conservación.

Las implicaciones de este teorema son impresionantes. Cada simetría de la naturaleza está asociada con una ley de conservación. Por ejemplo: las leyes de la física que son simétricas respecto a traslaciones en el tiempo, están ligadas a la conservación de la energía. Así, existen otras simetrías relacionadas con leyes de conservación importantes, algunas de ellas se muestran en la tabla 3.1.

Simetría		Ley de Conservación
Traslación en el tiempo	$\leftrightarrow$	Energía
Traslación en el espacio	$\leftrightarrow$	Momentum
Rotación en el espacio	$\leftrightarrow$	Momentum Angular
Transformación de Gauge	$\leftrightarrow$	Carga

**Tabla 3.1.** Simetrías y leyes de conservación.

Matemáticamente, una simetría es una operación que se puede realizar sobre un sistema mientras este permanece invariante. Esto implica que la nueva configuración del sistema es indistinguible de la original. Un ejemplo de una simetría es una esfera, que permanece invariante ante rotaciones. Un conjunto de simetrías debe cumplir los mismos axiomas que un grupo, por lo cual las simetrías están asociadas con un grupo de transformaciones (rotaciones, traslaciones, reflexiones) [9].

### 3.1.3. Simetrías continuas

Una simetría continua es una simetría que está representada por un grupo continuo. Un ejemplo de ello son las rotaciones previamente mencionadas sobre una esfera. La esfera puede ser rotada permaneciendo invariante, además estas rotaciones pueden ser en ángulos continuos.

Estas son precisamente las dos simetrías continuas más importantes, las rotaciones y las traslaciones [8].

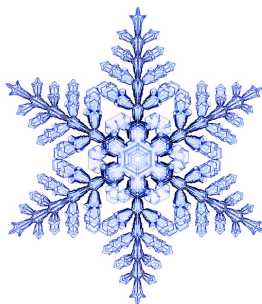
### 3.1.4. Simetrías discretas

Una simetría discreta está asociada al grupo de transformaciones que mantienen invariante un sistema, con la peculiaridad que esas invarianzas sólo existen para ciertos valores de rotaciones, traslaciones, etc. Por lo cual se dice que estas transformaciones son discretas.

Las simetrías discretas más relevantes para este trabajo son las simetrías diedrales, de reflexión y especulares [8].

#### 3.1.4.1. Simetrías diedrales

Las simetrías diedrales son aquellas relacionadas con los polígonos regulares, incluyendo tanto las rotaciones y reflexiones. Un ejemplo de estas simetrías es un copo de nieve.



**Figura 3.2.** Un copo de nieve con simetría diedral hexagonal

El copo de nieve permanece invariante ante rotaciones discretas ( $R_n : n\pi/3$ ) y reflexiones, las cuales no existen como una transformación continua.



Las simetrías diedrales para un polígono de  $n$  lados se denominan  $D_{2n}$  debido a las 2 simetrías que se incluyen en ella, las rotacionales y las reflexivas. También existen simetrías diedrales de orden superior (en 3 o más dimensiones), pero para el modelo de baby Skyrme solo será relevante considerar el caso de 2-D [8].

#### 3.1.4.2. Simetría especular

Las simetrías especulares son un caso especial de las rotaciones discretas, donde la única transformación simétrica es una reflexión respecto a un plano de simetría. Este es el caso de una función par como la que se presentaba al inicio de la sección. Una función que es simétrica respecto al plano de simetría del eje vertical [8].

#### 3.1.5. Rompimiento espontáneo de simetría

El rompimiento de simetrías no solo se presenta geoméricamente, también se presenta funcionalmente en el Lagrangiano de un sistema.

Un ejemplo de esto es el modelo de Goldstone [15] de rompimiento espontáneo de simetría, el cual presenta una simetría rotacional en un modelo con un Lagrangiano que posee un estado fundamental no degenerado. Pero si al Lagrangiano se le agrega un término a partir del cual se obtiene un estado fundamental degenerado, el seleccionar uno de ellos aleatoriamente como un estado fundamental ocasiona un rompimiento espontáneo de las simetrías a partir de agregarle un término extra al Lagrangiano del sistema.

En el modelo de baby Skyrme se requiere agregar un potencial al Lagrangiano para asegurar la estabilidad del solitón, esto presenta un rompimiento espontáneo de simetrías al añadirle un potencial químico de isospín [10].

### 3.2. Vacíos de una teoría física

Los vacíos de una teoría física son muy importantes debido a que son los estados de mínima energía de un sistema físico. El estado de mínima energía de un sistema es su estado fundamental, esto implica que es el estado más estable y el más probable.

Estas configuraciones de mínima energía pueden ser simétricos respecto a transformaciones discretas o continuas. Al agregarle un potencial al Lagrangiano del sis-

tema, el estado fundamental puede sufrir un rompimiento espontáneo de simetría en la cual ya no se conserva la simetría original. En su lugar se encuentran simetrías residuales.

### 3.3. Topología

Los solitones (kink  $Z_2$ , kink de sine-Gordon, Skyrmiones y baby Skyrmiones) pueden ser analizados como fenómenos que nacen a partir de razones topológicas. Una de las ventajas del punto de vista topológico es que es generalizable a una amplia variedad de modelos un puede ser utilizada para clasificar conjuntos grandes de soluciones.

Cuando es aplicada para teorías de campos en 2 o 3 dimensiones espaciales, las consideraciones topológicas son convenientes para demostrar la existencia de soluciones como cuerdas y monopolos [28].

#### 3.3.1. Variedad

Una variedad es un conjunto de secciones de un plano n-dimensional en los cuales la geometría local se comporta como la geometría euclidiana, un ejemplo de ello son los humanos caminando sobre la tierra, en su pequeña porción, pueden hacer mediciones y considerar que habitan sobre un plano [17].

#### 3.3.2. Espacios topológicos y grupos de homotopía

Los espacios topológicos están separados por grupos de homotopía. La topología de una variedad está clasificada por grupos de homotopía. Estos espacios topológicos son distintos de un grupo de homotopía hacia el otro, haciendo que sea imposible deformar continuamente un elemento de un grupo de homotopía  $\pi_n$  en otro elemento de otro grupo de homotopía  $\pi_m$  si  $m \neq n$  [28].

#### 3.3.3. Topología $\pi_0$

Considerando una teoría de campos con un conjunto de campos denotados por  $\Phi$  que son invariantes bajo transformaciones pertenecientes a  $\mathcal{G}$ , esto significa que

su Hamiltoniano es invariante ante  $g \in \mathcal{G}$ :

$$\mathcal{H}[\Phi] = \mathcal{H}[\Phi^g]$$

Ahora, se encuentran las soluciones de mínima energía de  $\mathcal{H}$  en una configuración  $\Phi_0$  la cual es invariante ante las mismas transformaciones que  $\mathcal{H}$ . A partir de estas transformaciones se obtiene una variedad de estados fundamentales [28].

Estas variedades de estados fundamentales, pertenecen a distintos grupos de homotopía, por lo cual pueden ser clasificados como soluciones que no pueden ser deformadas continuamente una en otra, esto clasifica a los distintos solitones a partir de sus distintas cargas topológicas [16].



## 4. Modelo de baby Skyrme

En el año 1961, el físico británico Tony Hilton Royle Skyrme publicó un artículo llamado “A non-linear field Theory”, en donde planteó una teoría de campos unificada para mesones y sus fuentes de partículas considerada desde el punto de vista clásico. Las soluciones poseían soluciones estáticas concentradas en una región finita del espacio con energía finita [26]. Posteriormente el modelo fue denominado *Modelo de Skyrme* y las soluciones del modelo fueron llamadas *Skyrmiones*.



**Figura 4.1.** Representación de Skyrmiones con distinta carga topológica con distintas simetrías [18].

Los estudios de Skyrme fueron retomados en 1983 en la rama de física nuclear debido a su idea de la estructura de los bariones. La idea revolucionaria del modelo fue como los bariones fermiónicos podrían emerger como solitones topológicos a

partir de una nube de piones. Esto fue confirmado en el contexto de la cromodinámica cuántica (QCD). También confirmó a través de la estructura solitónica de los bariones, en particular, los nucleones, la reconciliación de la física nuclear con QCD, la teoría fundamental de las interacciones fuertes [6].

A partir de ese momento, muchas aplicaciones y variantes del modelo de Skyrme han surgido, incluyendo uno en 2-D denominado modelo de baby Skyrme. Éste último se asemeja al de Skyrme, pero es más sencillo desde el punto de vista matemático y computacional manteniendo algunas características importantes del modelo original, con aplicaciones en el efecto Hall cuántico, materiales ferromagnéticos y materiales antiferromagnéticos. Además de ello, los baby Skyrmiones también dan pistas de cómo tratar a los Skyrmiones computacionalmente [19, 20, 21].

## 4.1. El modelo

La *cromodinámica cuántica (QCD)* es la teoría de las interacciones fuertes. Desde el punto de vista matemático, la estructura del a QCD es elegante. Sus bases se asientan en el formalismo de la *teoría cuántica de campos (QFT)* en donde las partículas surgen como fluctuaciones de campos cuánticos. La QCD es un pilar fundamental en el *modelo estándar de partículas*. Sin embargo a escalas de energías del orden de 1 GeV, la constante de acoplamiento fuerte crece y los métodos perturbativos dejan de ser confiables. Acá no existen modelos analíticos que conduzcan a la descripción del régimen no perturbativo, de dónde surge la necesidad de teorías efectivas, el modelo de Skyrme es una de ellas.

El modelo de Skyrme es una teoría no lineal del campo escalar  $U(t, \mathbf{x})$  en (3+1)D (tres dimensiones espaciales y una temporal) que admite soluciones topológicamente estables, también llamados solitones topológicos o Skyrmiones. En su modelo original, el campo escalar  $U(t, \mathbf{x})$  toma valores en el grupo de rotaciones tridimensionales  $SU(3)$  [21].

## 4.2. Skyrmiones

El modelo de Skyrme estándar consiste en dos términos, un término cuadrático en sus primeras derivadas (el término del modelo sigma no lineal), y un término cuártico en sus primeras derivadas, denominado término de Skyrme. Ambos términos

son necesarios para la estabilidad de las soluciones. Sin embargo, el modelo se puede generalizar añadiendo un potencial, así que el lagrangiano generalizado del modelo está dado por:

$$\mathcal{L}_{Sk} = \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_4 + \mathcal{L}_0 \quad (4.1)$$

con:

$$\mathcal{L}_2 = -\frac{F^2}{4} \text{Tr}\{L_\alpha, L^\alpha\}, \quad \mathcal{L}_4 = \frac{K^2}{16} \text{Tr}\{[L_\alpha, L_\beta]^2\} \quad \text{and} \quad \mathcal{L}_0 = -m^2 V(U(t, \mathbf{x})) \quad (4.2)$$

donde  $L_\alpha$  es el operador de Maurier-Cartan definido por:  $L_\alpha = U^\dagger \partial_\alpha U$  [1].

Las soluciones planteadas en este trabajo son estáticas, por lo que  $U_{(t,\mathbf{x})} = U_{(\mathbf{x})}$ . Estas configuraciones de mínima energía son los denominados Skyrmiones.

### 4.3. Baby Skyrmiones

Los baby Skyrmiones son soluciones al modelo de Skyrme reducidos a 2-D con propiedades remanentes del modelo en 3-D. Sin embargo sus aplicaciones caen en otra rama de la física. Los baby Skyrmiones se utilizan para estudiar algunos aspectos del efecto Hall cuántico [10]. Su implementación y gasto computacional es mucho más bajo que el utilizado por el modelo de Skyrme por lo que puede utilizarse para entender comportamientos del modelo original.

En la ecuación (4.2) se requiere conocer la forma explícita de  $U(\mathbf{x})$ . Bajo la suposición de máxima simetría, Skyrme propuso el denominado *hedgehog ansatz* para describir la forma de  $U(\mathbf{x})$  [14]:

$$U(\mathbf{x}) = \cos \Phi + i\tau \cdot \hat{\Phi} \sin \Phi \quad (4.3)$$

donde  $\tau$  son las matrices de Pauli y  $\Phi = (\phi_1, \phi_2, \phi_3)$  es un vector de campos escalares reales que describe el sistema. Estos campos escalares  $\phi_1, \phi_2$  y  $\phi_3$  pueden escribirse en términos de otros campos que están en términos de las coordenadas polares  $(r, \varphi)$ . Las configuraciones de este campo son las que optimizan el Hamiltoniano o funcional de energía derivado de (4.1) y (4.2) [14, 1].

La densidad Lagrangiana generalizado para el modelo de baby Skyrme, susti-

tuyendo  $U(\mathbf{x})$  en términos de  $\Phi$  es el siguiente:

$$\mathcal{L} = \frac{F^2}{2}(\partial_\alpha \Phi \cdot \partial^\alpha \Phi) - \frac{K^2}{2}((\partial_\alpha \Phi \cdot \partial^\alpha \Phi)^2 - (\partial_\alpha \Phi \cdot \partial_\beta \Phi)(\partial^\alpha \Phi \cdot \partial^\beta \Phi)) - m^2 V(\Phi) \quad (4.4)$$

La parametrización de  $\Phi$  en términos de los campos reales descritos por las coordenadas espaciales a partir del *hedgehog ansatz* [14] es:

$$\Phi(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \sin F(r, \varphi) \cos \Theta(r, \varphi) \\ \sin F(r, \varphi) \sin \Theta(r, \varphi) \\ \cos F(r, \varphi) \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

Esta parametrización a un tiempo fijo puede considerarse como una aplicación desde el espacio de Minkowski  $\mathbb{R}^2$  hacia  $S^2$ , la 2-esfera de radio unitario, una variedad de llegada (*target manifold*).

El modelo de baby Skyrme presenta estados fundamentales con simetría axial, sin embargo al agregarle un potencial químico de Isospín( $\mu_I$ ), se obtienen vacíos degenerados por lo cual ocurre un rompimiento de simetría espontáneo, así como fue descrito en el capítulo previo. Por ello es interesante el estudio de los solitones con simetría rota en el modelo de baby Skyrme.

Para ello se realiza la siguiente sustitución en  $U(\mathbf{x})$  [22]:

$$\partial_\alpha \rightarrow \partial_\alpha - i \frac{\mu_I}{2} [\tau_3, U] g_{\alpha 0} \quad (4.6)$$

A partir de esta sustitución se incluye un término cuadrático y un término cuártico con  $\mu_I$ , además de eso, lo que permite estudiar la rotación del potencial debido a la presencia de  $\mu_I \neq 0$ . A (4.1), se le agregan 4 nuevos términos nuevos y queda expresada en términos de  $U$  de la siguiente forma:

$$\mathcal{L} = -\frac{F^2}{4} Tr\{L_\alpha L^\alpha\} + \frac{K^2}{16} Tr\{[L_\alpha L_\beta]^2\} + i \frac{m^2}{2} Tr\{\tau_3 U\} + \frac{i\mu_I F^2}{4} Tr\{w L_0\} - \frac{i\mu_I K^2}{4} Tr\{w L_\alpha [L_0 L^\alpha]\} + \frac{\mu_I^2 F^2}{16} Tr\{w^2\} - \frac{\mu_I^2 K^2}{32} Tr\{[w, L_i]^2\} \quad (4.7)$$

donde  $w = U^\dagger \tau_3 U - \tau_3$ .



### 4.3.1. Hamiltoniano del modelo

Luego de hacer las sustituciones (4.5) y (4.6) en (4.4), se obtiene el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int \left( E_2 + E_4 - \frac{\mu_I^2}{16} (E_{4\mu_I} + \frac{E_{4\mu_I}}{4}) + m^2 V(F[r, \varphi], \Theta[r, \varphi], \alpha) \right) r d\varphi dr \quad (4.8)$$

Donde:

$$E_2 = \frac{1}{2r^2} \left( \left( \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial \varphi} \right)^2 + N^2 \sin^2(F[r, \varphi]) \left( \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial \varphi} \right) + r^2 \left( \left( \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial r} \right)^2 + N^2 \sin^2(F[r, \varphi]) \left( \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial r} \right) \right) \right) \quad (4.9a)$$

$$E_4 = \frac{1}{2r^2} N^2 \sin^2 F[r, \varphi] \left( \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial \varphi} \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial r} - \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial \varphi} \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial r} \right)^2 \quad (4.9b)$$

$$E_{2\mu_I} = (2 + 6 \cos(2\alpha) - 4 \cos(2N\Theta[r, \varphi]) \sin^2 \alpha) \sin^2 F[r, \varphi] - 4 \cos(N\Theta[r, \varphi]) \sin(2\alpha) \sin(2F[r, \varphi]) \quad (4.9c)$$

$$\begin{aligned} E_{4\mu_I} = & 32 \left( \cos F[r, \varphi] \cos(N\Theta[r, \varphi]) \sin \alpha - \cos \alpha \sin F[r, \varphi] \right)^2 \times \\ & \left( \left( \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial \varphi} \right)^2 \right) + \\ & 32 N^2 \sin^2 \alpha \sin^2 F[r, \varphi] \sin^2(N\Theta[r, \varphi]) \left( \left( \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial \varphi} \right)^2 \right) + \\ & 16 N \sin \alpha \left( -\sin \alpha \sin(2F[r, \varphi]) \sin(2N\Theta[r, \varphi]) + 4 \cos \alpha \sin^2 F[r, \varphi] \sin(N\Theta[r, \varphi]) \right) \times \\ & \left( \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial r} \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial r} + \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial \varphi} \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial \varphi} \right) \end{aligned} \quad (4.9d)$$

Y  $\alpha$  está definido como la siguiente función por partes:

$$\alpha = \begin{cases} 0 & \mu_I < m \\ \cos^{-1}\left(\frac{m^2}{\mu_I^2}\right) & \mu_I \geq m \end{cases} \quad (4.10)$$

El Hamiltoniano del sistema representa la energía total del mismo, por lo cual es necesario encontrar las configuraciones de  $F[r, \varphi]$  y  $\Theta[r, \varphi]$  que minimicen el valor de (4.7). Para ello se implementará el algoritmo de recocido simulado para esa integral.

### 4.3.2. Carga topológica del modelo

Una cantidad conservada aún en soluciones dinámicas es  $N$ , la carga topológica. Por ello es necesario definirla numéricamente:

$$B = \frac{1}{4\pi} \int \left( N \sin F[r, \varphi] \left( \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial \varphi} \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial r} - \frac{\partial \Theta[r, \varphi]}{\partial \varphi} \frac{\partial F[r, \varphi]}{\partial r} \right) \right) dr d\varphi \quad (4.11)$$

Además es un parámetro útil en modelos para los cuales no hay referencias en sus valores de energía, puesto que:

$$\langle B \rangle = N$$

Así que si el valor de  $B$  se aleja del valor de la carga topológica establecida, hay que revisar la implementación del código.

Todas estas ecuaciones serán utilizadas en la implementación del código en el capítulo siguiente con tres distintos potenciales en (4.7) y se estudiará el efecto de la presencia de  $\mu_I$  sobre las simetrías en el modelo de baby Skyrme.

## 5. Implementación del algoritmo de recocido simulado al modelo de baby Skyrme en C++

Al obtener resultados a partir de un algoritmo con implementación propia, es necesario incluir una discusión acerca de cómo se escribió y con qué fundamentos para permitir que quienes investiguen en un futuro el tema o quienes quieran reproducir los resultados puedan entender el funcionamiento del mismo y evaluar si cumple con las condiciones que ellos desean imponer para sus trabajos.

Existen valores de referencia para las energías en el modelo no perturbativo [10], y también valores de referencia para modelos con rompimiento de fase a partir de la rotación de las soluciones del modelo de baby Skyrme [4]. Estas últimas soluciones pueden ser comparadas cualitativamente con algunos estados fundamentales en presencia de  $\mu_I \neq 0$  que fueron trabajados en este proyecto.

Ahora se desarrollará una discusión de cada proceso del código, su implementación y su funcionamiento.

### 5.1. Parámetros

Los parámetros de la simulación definen el tamaño del arreglo, el número de puntos en el arreglo, la temperatura inicial, constantes de normalización, el número de iteraciones por cada valor de temperatura, el número de pasos de enfriamiento, la masa del solitón, el número de recocidos, la carga topológica y  $\mu_I$ . Además en la sección de parámetros se calcula el valor de  $\alpha$ .

```
double posr = 100;      //Numero de nodos radiales
double posa = 100;     //Numero de nodos angulares
double To = 5e0;       //Temperatura inicial
double Kb = 1e-6;      //Constante de Boltzman
double fact= 1/(To*Kb); //Factor de normalizacion
int nit = 2e5;         //Perturbaciones aleatorias por ciclo
```

```

int pasos = 100;           //Numero de ciclos de enfriamiento
double r = 10;            //radio del arreglo
double m =sqrt(0.1) ;     //masa del soliton
int ntop= 1;              //numero topologico
int rep= 8;               //numero de recocidos
double mu=sqrt(0.00);    //Potencial Quimico

//                Si mu**2>m**2 es 1, sino, es 2

//double alpha=acos(m*m/(mu*mu)); //parametro 1
double alpha=0.0;        //parametro 2

```

El número de puntos y el tamaño del arreglo definen la precisión de la solución y la granularidad del mismo. En este caso se trabajó un arreglo de  $100 \times 100$ , debido a que se encontraba en la región asintótica de la energía, donde el costo computacional de aumentar la granularidad ya no compensaba el aumento de precisión obtenida.

La temperatura debe calibrarse previamente para encontrar el valor ideal para obtener un mínimo global, si la temperatura es muy baja, el sistema se estanca en un mínimo local, si la temperatura es muy alta, las condiciones iniciales se pierden al dispersar la configuración.

El número de iteraciones se calibra para definir el valor del número de iteraciones que se requieren para alcanzar el equilibrio térmico [11]. Este valor depende de la cantidad de puntos en el arreglo, por lo cual es práctico determinar el comportamiento de  $n_{iteraciones}(n_{puntos})$  para poder conocer el valor ideal de iteraciones si se trabaja con una granularidad distinta.

La masa y el número topológico definen los valores de energía del solitón, se escogieron como en [10] y [4] para comparar los valores de energía del estado fundamental.

El potencial químico de Isospín afecta las simetrías del sistema, por eso fue probado dentro del rango  $0m^2 \leq \mu_I^2 \leq 10m^2$ , para estudiar el comportamiento previo y posterior al rompimiento de la simetría axial.

## 5.2. Discretización del espacio y condiciones iniciales

El espacio no se puede trabajar de forma continua en este algoritmo, por lo cual es necesario discretizar los campos en arreglos de puntos. Esto implica que las derivadas serán diferencias finitas y las integrales se trabajarán como sumatorias de Riemman [23].

```
for (int i=0; i<posr; i++)
{
    for (int j=0; j<posa; j++)
    {
        Phi[i][j]=2*M_PI*j/(posa-1);
        F[i][j]=M_PI*exp(-(r*i)/(posr-1));
    }
}
```

Para  $F[r, \varphi]$  se definieron condiciones iniciales que decaían exponencialmente en  $r$  dado que ese era el comportamiento observado en [1, 4, 10, 14, 16, 19, 20, 21] para modelos similares.

Para  $\Theta[r, \varphi]$  se definió como condición inicial  $\Theta[r, \varphi] = \varphi$  porque fue lo observado en las mismas referencias de  $F[r, \varphi]$ .

Las condiciones de frontera para  $F[r, \varphi]$  y  $\Theta[r, \varphi]$  fueron:

$$\begin{aligned} F[0, \varphi] &= \pi, & F[\infty, \varphi] &= 0 \\ \Theta[r, 0] &= 0, & \Theta[r, 2\pi] &= 2\pi \end{aligned} \tag{5.1}$$

## 5.3. Densidades de energía, integrales, derivadas y carga topológica

### 5.3.1. Densidad de energía

Para definir la densidad de energía ( $\delta E[i][j]$ ) en un punto en  $\mathbb{R}^2$ , se debe evaluar el integrando de (4.7). Lo importante de esta parte del código es definir adecuadamente las derivadas. Las derivadas se calculan a partir de cuatro puntos y se ubican en el centro de los 4 puntos. Pueden ser calculadas hacia adelante o hacia atrás. En

este trabajo se calcularon hacia adelante de la siguiente forma.

$$\frac{\partial A(i + 0.5, j + 0.5)}{\partial r} = \frac{\left( \frac{A[i+1][j]+A[i+1][j+1]}{2} - \frac{A[i][j]+A[i][j+1]}{2} \right)}{\delta r} \quad (5.2)$$

donde  $\delta r$  es la granularidad en  $r$  y los índices  $i$  representan la posición de los puntos en  $r$  y los índices  $j$  representan la posición de los puntos en  $\varphi$ .

```

double energia(double **Phi,int i,int j, double **F)
{
    double energia;
    double Fp,dFdr,dFdth,dPhidr,dPhidth,Ra,Phip;
    double E2,E4,Em,Emu2,Emu4;

    Ra=r*(i+0.5)/(posr-1);

    if ( i>=posr-1 || i<0 || j>=posa-1 || j<0 )
    {
        energia=0;
    }
    else
    {
        Fp=(F[i][j]+F[i+1][j]+F[i][j+1]+F[i+1][j+1])/4.0;
        Phip=(Phi[i][j]+Phi[i+1][j]+Phi[i][j+1]+Phi[i+1][j+1])/4.0;
        dFdr=((F[i+1][j]+F[i+1][j+1])/2.0-(F[i][j]+F[i][j+1])/2.0)/(r/(posr-1));
        dFdth=((F[i][j+1]+F[i+1][j+1])/2.0-(F[i][j]+F[i+1][j])/2.0)/(2*M_PI/(posa-1))
            ;
        dPhidr=((Phi[i+1][j]+Phi[i+1][j+1])/2.0-(Phi[i][j]+Phi[i][j+1])/2.0)/(r/(posr-1));
        dPhidth=((Phi[i][j+1]+Phi[i+1][j+1])/2.0-(Phi[i][j]+Phi[i+1][j])/2.0)/(2*M_PI/(posa-1));

        E2=(1/(2.0*Ra*Ra))*(pow(dFdth,2)+pow(ntop*sin(Fp)*dPhidth,2)+Ra*Ra*(pow(dFdr,2)+pow(ntop*sin(Fp)*dPhidr,2)));

        E4=(1/2.0)*pow(ntop*sin(Fp)*(dPhidth*dFdr-dFdth*dPhidr)/Ra,2);

        //      Em=m*m*(1.0-cos(Fp));
        //      Em=m*m*(1.0-cos(Fp)*cos(Phip))
        Em=m*m*(cos(alpha)-cos(alpha)*cos(Fp)-sin(alpha)*sin(Fp)*cos(Phip));

        Emu2=(2+6*cos(2*alpha)-4*cos(2*ntop*Phip)*sin(alpha)*sin(alpha))*sin(Fp)*sin(Fp)-4*cos(ntop*Phip)*sin(2*alpha)*sin(2*Fp);
    }
}

```

```

    Emu4=32*pow(cos(Fp)*cos(ntop*Phip)*sin(alpha)-cos(alpha)*sin(Fp),2)*(dFdr*
        dFdr+dFdth*dFdth/(Ra*Ra))
    +32*pow(ntop*sin(alpha)*sin(Fp)*sin(ntop*Phip),2)*(dPhidr*dPhidr+dPhidth*
        dPhidth/(Ra*Ra))
    +16*ntop*sin(alpha)*(-sin(alpha)*sin(2*Fp)*sin(2*ntop*Phip)+4*cos(alpha)*sin(
        Fp)*sin(Fp)*sin(ntop*Phip))*(dFdr*dPhidr+dFdth*dPhidth/(Ra*Ra));

    energia=Em+E4+E2-mu*mu*(Emu2+Emu4/4.0)/16.0;
}

return energia*Ra;
}

```

### 5.3.2. Integral de Energía

La integral de energía es una sumatoria de Riemman en coordenadas polares, por lo cual se calcula de la siguiente forma:

$$E = \sum_i^{n_{radial}-1} \sum_j^{n_{angular}-1} \delta E[i + 0.5][j + 0.5] r_i \delta \varphi \delta r \quad (5.3)$$

donde  $\delta E$  es la densidad de energía evaluada al medio de los 4 puntos necesarios para calcularse.  $r_i$  es la distancia radial del centro del solitón al punto en el cual se está calculando la densidad de energía.  $\delta \varphi$  y  $\delta r$  son las granularidades del arreglo en cada eje.

```

double Energy(double **Phi, double **F)
{
    double Energy = 0;
    double dr, dth;
    dr=r/(posr-1);
    dth=2*M_PI/(posa-1);
    for (int i=0; i<posr-1; i+=1)
    {
        for (int j=0; j<posa-1; j+=1)
        {
            Energy=Energy+(1/2.0)*energia(Phi, i, j, F)*dr*dth;
        }
    }
    return Energy;
}

```

### 5.3.3. Carga Topológica

El procedimiento para calcular la carga topológica es el mismo que el necesario para calcular la energía, calcular densidades de carga topológica e integrarlas en una sumatoria de Riemman.

```
double B(double **Phi, double **F)
{
    double Fp, dFdr, dFdth, dPhidr, dPhidth;
    double B = 0;

    for (int i=0; i<posr-1; i+=1)
    {
        for (int j=0; j<posa-1; j+=1)
        {
            dFdr=((F[i+1][j]+F[i+1][j+1])/(2.0)-(F[i][j]+F[i][j+1])/2.0)/(r/(posr-1))
                ;
            dFdth=((F[i][j+1]+F[i+1][j+1])/(2.0)-(F[i][j]+F[i+1][j])/2.0)/(2*M_PI/(
                posa-1));
            dPhidr=((Phi[i+1][j]+Phi[i+1][j+1])/2.0-(Phi[i][j]+Phi[i][j+1])/2.0)/(r/(
                posr-1));
            dPhidth=((Phi[i][j+1]+Phi[i+1][j+1])/2.0-(Phi[i][j]+Phi[i+1][j])/2.0)/(2*
                M_PI/(posa-1));
            Fp=(F[i][j]+F[i+1][j]+F[i][j+1]+F[i+1][j+1])/4.0;

            B=B-ntop*sin(Fp)*(dPhidth*dFdr-dFdth*dPhidr)*(r/(posr-1))*(2*M_PI/(posa
                -1));
        }
    }
    return B/(4*M_PI);
}
```

## 5.4. Algoritmo de Recocido Simulado

### 5.4.0.1. Perturbaciones en los campos

Para realizar las perturbaciones, primero se seleccionaba un punto aleatorio del arreglo, luego se variaba el valor del campo en ese punto.

Las perturbaciones hechas a los campos eran proporcionales a la temperatura en el momento en que eran calculadas (al enfriarse las perturbaciones eran más pequeñas) y proporcionales al tamaño de la imagen del campo ( $F[0, \varphi] - F[\infty, \varphi]$  y  $\Theta[r, 2\pi] - \Theta[r, 0]$  respectivamente). Luego se creaba un campo temporal en la localidad del punto (los puntos que son vecinos inmediatos del punto en cuestión),



en caso que el punto estuviera fuera del arreglo, su densidad de energía se definía como cero y el valor del campo no se asignaba para evitar un error de segmentación.

```

delta2 = (M_PI)*fact*Kb*T*(-1+2*randC(5));
posrandi=1+rand() % (int(posr)-2); //pos rand radial
posrandj=rand() % (int(posa)); //pos rand angular

for (int k=posrandi-1;k<posrandi+3;k++)
{
  for (int l=posrandj-1;l<posrandj+3;l++)
  {
    if ( k<posr && k>=0 && l<posa && l>=0 )
    {
      Fn[k][l]=F[k][l];
    }
  }
}
Fn[posrandi][posrandj]=F[posrandi][posrandj]+delta2;

```

#### 5.4.0.2. Comparación de energías

Para evitar un gasto computacional enorme, no se realizó la integral cada vez para comparar la energía del sistema. En su lugar sólo se sumaban los términos de la sumatoria que se vieran afectados por la perturbación. Esto quiere decir, los vecinos inmediatos del punto seleccionado aleatoriamente. Luego, para determinar si la energía en la nueva configuración ( $C_f$ ) era menor que en la antigua configuración ( $C_0$ ) se realizaba la siguiente operación:

$$\Delta E = \sum_{localidad} (r\delta E(C_f)) - \sum_{localidad} (r\delta E(C_0)) \quad (5.4)$$

Es muy importante el término  $r$ , puesto que este valor no es constante en todo el arreglo. Si este no se incluye, el cálculo del cambio de energía local, no representa el cambio de energía global.

```

Eo=energia (Phi , posrandi -1, posrandj -1,F)+energia (Phi , posrandi -1, posrandj ,F)+energia (
Phi , posrandi -1, posrandj +1,F)+energia (Phi , posrandi , posrandj -1,F)+energia (Phi ,
posrandi , posrandj ,F)+energia (Phi , posrandi , posrandj +1,F)+energia (Phi , posrandi +1,
posrandj -1,F)+energia (Phi , posrandi +1, posrandj ,F)+energia (Phi , posrandi +1,
posrandj +1,F);

```

```

Ef=energia (Phi , posrandi -1, posrandj -1,Fn)+energia (Phi , posrandi -1, posrandj ,Fn)+
energia (Phi , posrandi -1, posrandj +1,Fn)+energia (Phi , posrandi , posrandj -1,Fn)+
energia (Phi , posrandi , posrandj ,Fn)+energia (Phi , posrandi , posrandj +1,Fn)+energia (
Phi , posrandi +1, posrandj -1,Fn)+energia (Phi , posrandi +1, posrandj ,Fn)+energia (Phi ,
posrandi +1, posrandj +1,Fn);

```

### 5.4.0.3. Aceptando las perturbaciones hechas al sistema

El objetivo de la optimización es encontrar el estado de mínima energía del sistema ( $E_0$ ), entonces todas las perturbaciones que produzcan un descenso de energía serán aceptadas. Las que produzcan un incremento de la energía se interpretarán como fluctuaciones térmicas que pueden ser aceptadas con la siguiente función de probabilidad:

$$P(C_f : C_0) = \exp\left(-\frac{(E(C_f) - E(C_0))}{k_B T}\right) \quad (5.5)$$

El valor de la temperatura juega un papel importante en este aspecto de la simulación, mientras mayor sea la temperatura comparada con  $k_B T$ , mayor serán las fluctuaciones térmicas permitidas. Es por esto que si la temperatura inicial del sistema es muy alta, las condiciones iniciales se pierden, la configuración inicial se *derrite*.

```
if (dE<=1e-15)
{
    F[posrandi][posrandj]=Fn[posrandi][posrandj];
}

if (dE>1e-15)
{
    random=randC(5);
    double q = exp(-dE/(Kb*T));
    if (random < q)
    {
        F[posrandi][posrandj]=Fn[posrandi][posrandj];
    }
}
```

### 5.4.0.4. Equilibrio térmico y soluciones de mínima energía

Como se mencionó al inicio de la sección, es necesario encontrar el número ideal de iteraciones que permitan alcanzar el equilibrio térmico. El equilibrio térmico en este caso, será indicado por una tolerancia, dependiendo de cuánta precisión se requiera en el cálculo, así será el número de iteraciones.

Al haber calibrado el número de iteraciones, la solución alcanza un mínimo global, así como se observa en la figura (2.5).

## 5.5. Archivos de salida

Los archivos de salida del algoritmo se presentan de la siguiente forma:

$$\begin{array}{l} \#B = \\ \#E_0 = \end{array}$$

$r$	$\varphi$	$F[r, \varphi]$	$\Theta[r, \varphi]$	$\delta E$
$r_1$	$\varphi_1$	$F_1[r, \varphi]$	$\Theta_1[r, \varphi]$	$\delta E_1$
$r_2$	$\varphi_2$	$F_2[r, \varphi]$	$\Theta_2[r, \varphi]$	$\delta E_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$r_n$	$\varphi_n$	$F_n[r, \varphi]$	$\Theta_n[r, \varphi]$	$\delta E_n$

**Tabla 5.1.** Formato del archivo de salida.

Con estos archivos de salida se pueden graficar las soluciones y observar las simetrías en los distintos modelos.

## 5.6. Conmutatividad en la optimización de $F[r, \varphi]$ y $\Theta[r, \varphi]$

La optimización de los campos se puede realizar de tres formas diferentes, optimizando primero el campo  $F[r, \varphi]$ , optimizando  $\Theta[r, \varphi]$  y optimizándolos simultáneamente. La última de las opciones es la menos viable, debido a que las magnitudes de  $\delta E$  son considerablemente distintas, la temperatura inicial ideal es distinta para ambos casos.

Quedando los dos campos para optimizarse por separado surge la pregunta, ¿Conmutan los procesos de optimización? La respuesta es sí, se puede realizar primero cualquiera de ambas, obteniendo siempre el mismo valor de  $E_0$ .



## 6. Estados fundamentales en el modelo de baby Skyrme

Finalmente, se encuentran los estados fundamentales en el modelo de baby Skyrme para 3 potenciales distintos a través del algoritmo de recocido simulado. Las soluciones son de tipo solitónicas, esto quiere decir que son defectos topológicos estables concentrados en una región finita del espacio con energía finita.

### 6.1. Distintos potenciales

El término del potencial en el modelo de baby Skyrme (4.7) está generalizado, por lo que se puede utilizar potenciales con formas variadas para modelar fenómenos físicos distintos. Los potenciales más utilizados son los de la forma  $V = 1 - \Phi_3^n$ , donde  $\Phi_3$  es la tercera componente en (4.5).

En este trabajo se utilizaron 3 potenciales distintos. Un potencial lineal en  $\cos(F[r, \varphi])$ , un potencial cuadrático en  $\cos(F[r, \varphi])$  y un potencial rotado en términos de  $\cos(F[r, \varphi])$ ,  $\cos(F[r, \varphi])$  con parámetro de rotación  $\alpha$  [10, 22].

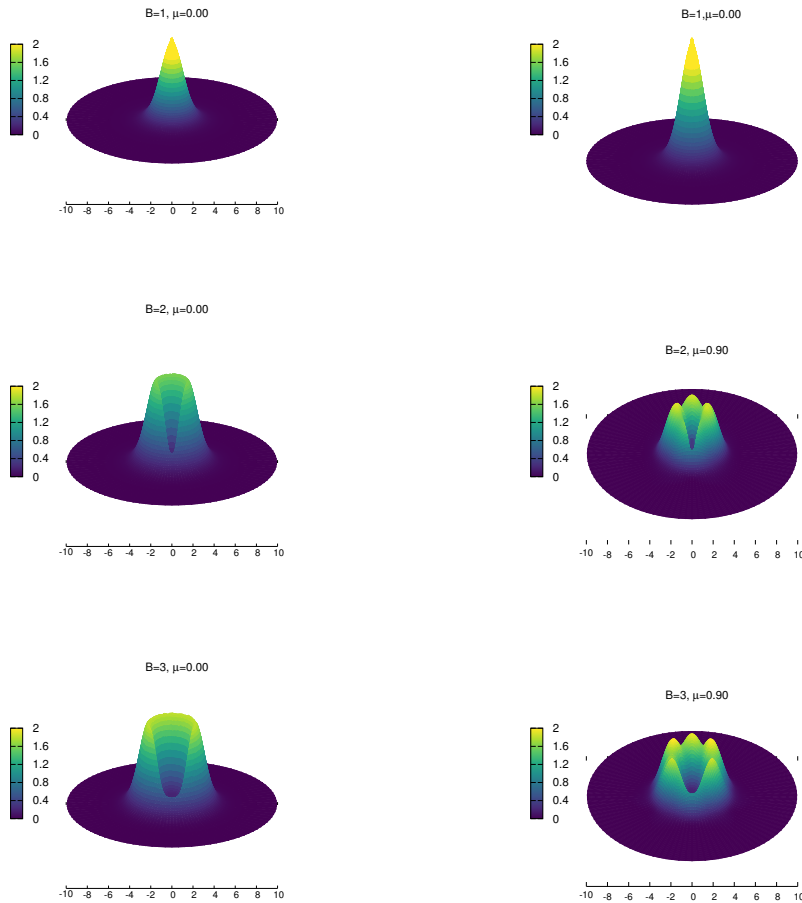
En [10], se denomina al potencial lineal como modelo de *1 vacío*, puesto que el valor mínimo del potencial se alcanza cuando  $\cos(F[r, \varphi]) = 1$ . Bajo el mismo principio, denomina al modelo cuadrático como modelo de *2 vacíos*, ya que el valor mínimo del potencial se alcanza cuando  $\cos(F[r, \varphi]) = 1$  y  $\cos(F[r, \varphi]) = -1$ . En [22] se menciona el potencial rotado y denomina el modelo como un modelo de *vacío antisimétrico*. Estos modelos rompen la simetría axial en simetrías discretas pertenecientes a  $D_{2N}$ . Sin embargo en un modelo con un potencial rotado por la presencia de  $\mu_I$ , los estados fundamentales presentan un rompimiento espontáneo de simetría de  $SO(2)$  (grupo de rotaciones sobre el plano) a una simetría especular  $Z_2$ . Estos resultados se presentan y discuten a continuación.

## 6.2. Modelo de 1 vacío.

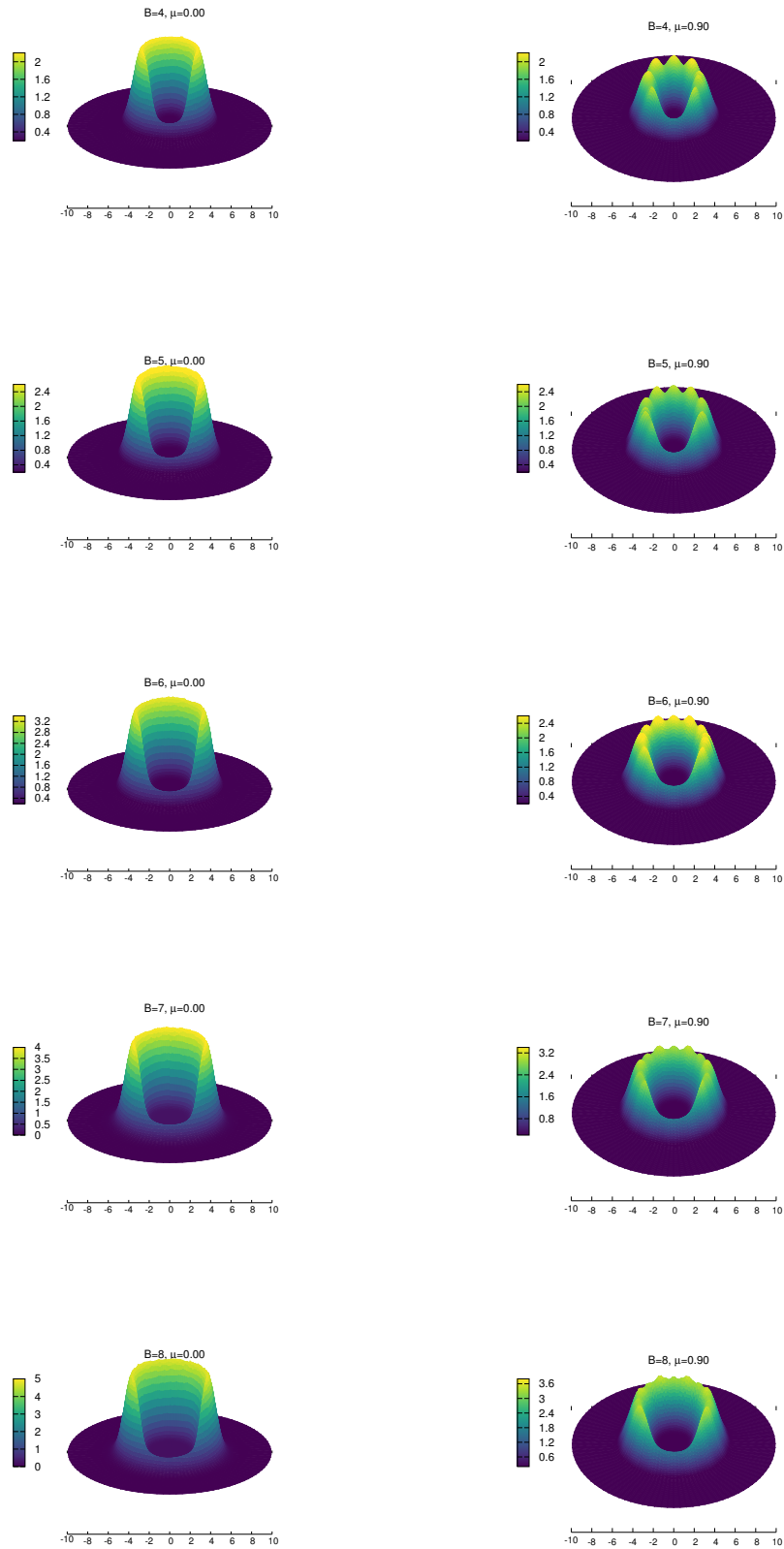
El potencial que describe este modelo es:

$$V(F[r, \varphi]) = (1 - \cos(F[r, \varphi])) \quad (6.1)$$

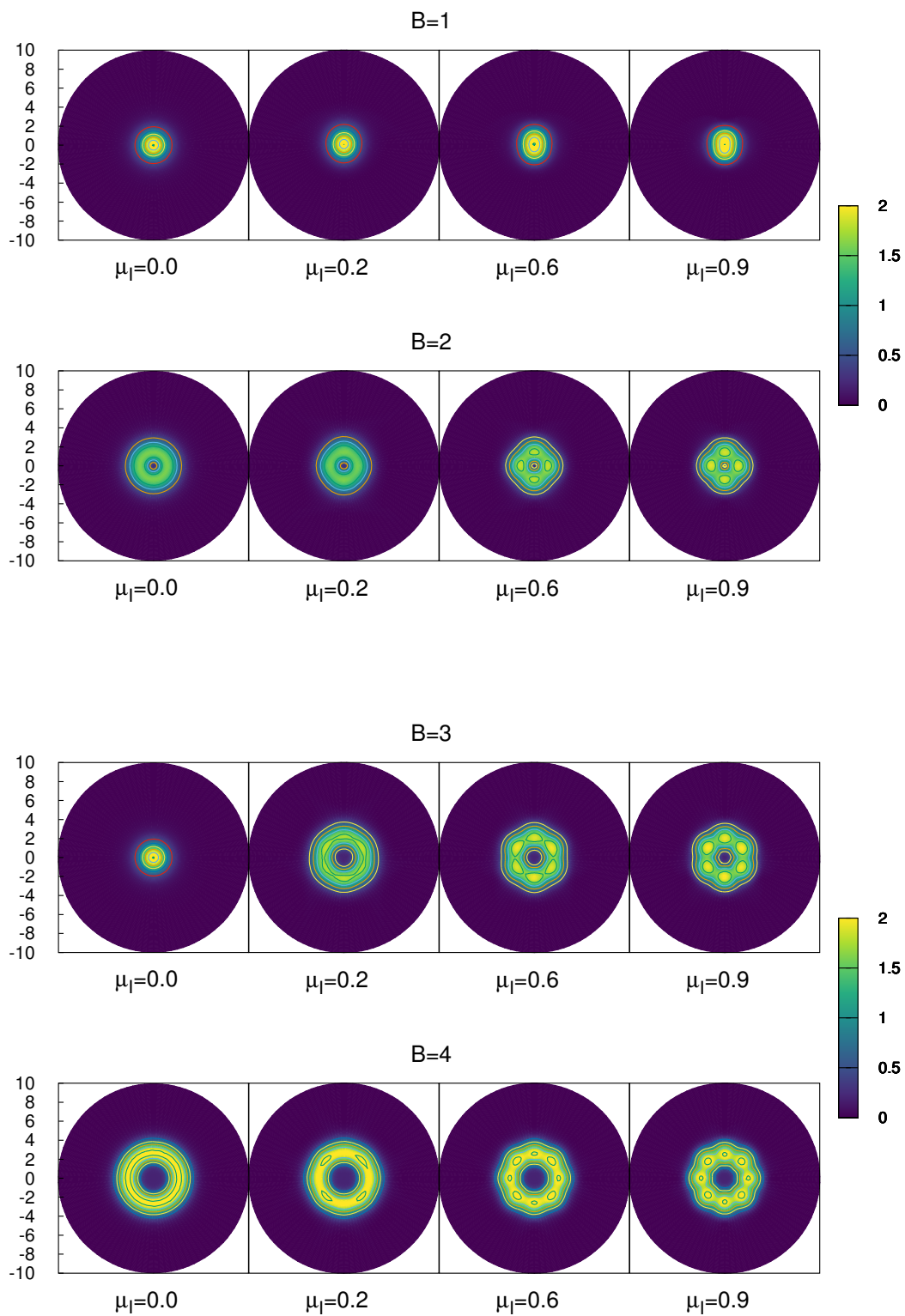
Los resultados se presentan como líneas de contorno de  $\delta E[r, \varphi]$  sobre el espacio, se encontraron los estados fundamentales para  $N = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$  para los valores de  $mu_I = 0.00, 0.20, 0.60, 0.90$ . Estas líneas de contorno o curvas de nivel, se muestran en vista superior y en vista lateral en la figura 6.1, 6.2, 6.3 y 6.4.



**Figura 6.1.** Superficies y líneas de contorno de  $\delta E$  sobre el plano para  $N=1,2,3$  con los valores de  $\mu_I = 0.00, 0.90$  para el modelo de 1 vacío.

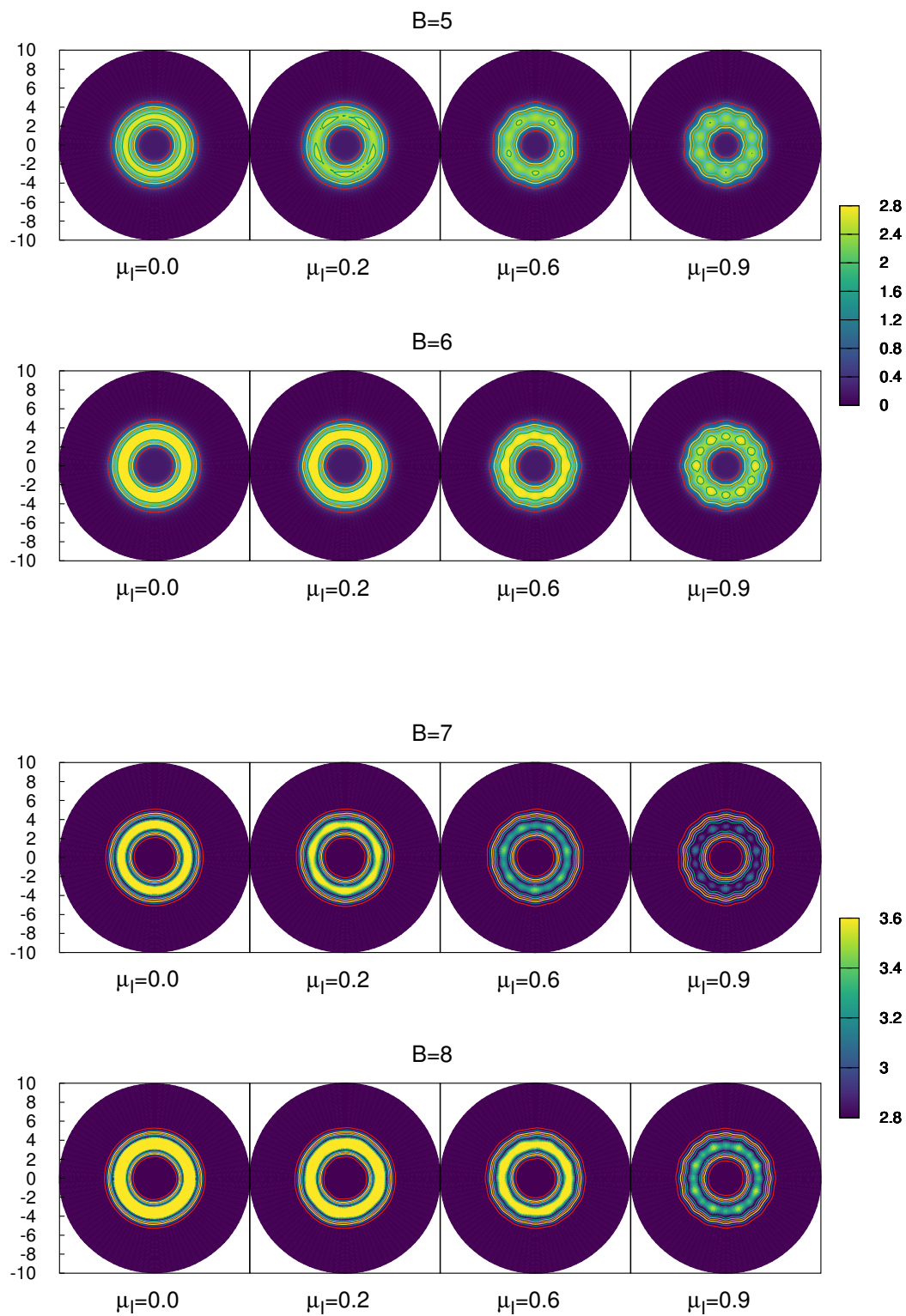


**Figura 6.2.** Superficies y líneas de contorno de  $\delta E$  sobre el plano para  $N=4,5,6,7,8$  con los valores de  $\mu_I = 0.00, 0.90$  para el modelo de 1 vacío.



**Figura 6.3.** Líneas de contorno para  $N = 1, 2, 3, 4$  para valores de  $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.60, 0.90$  en el modelo de 1 vacío.



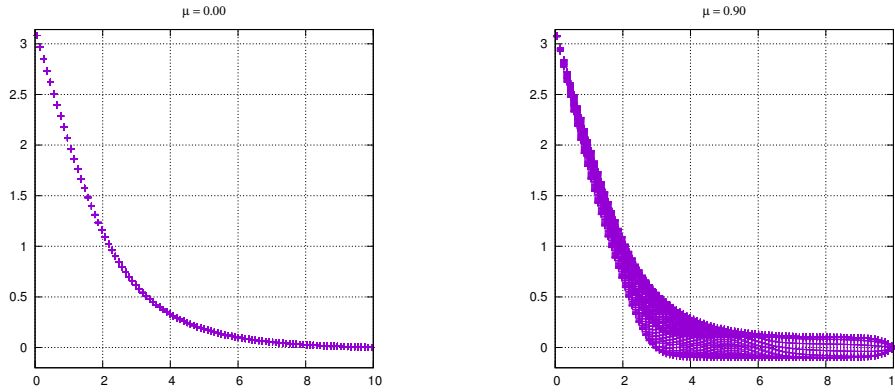


**Figura 6.4.** Líneas de contorno para  $N = 5, 6, 7, 8$  para valores de  $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.60, 0.90$  en el modelo de 1 vacío.

### 6.2.1. Rompimiento de simetrías en el modelo de 1 vacío

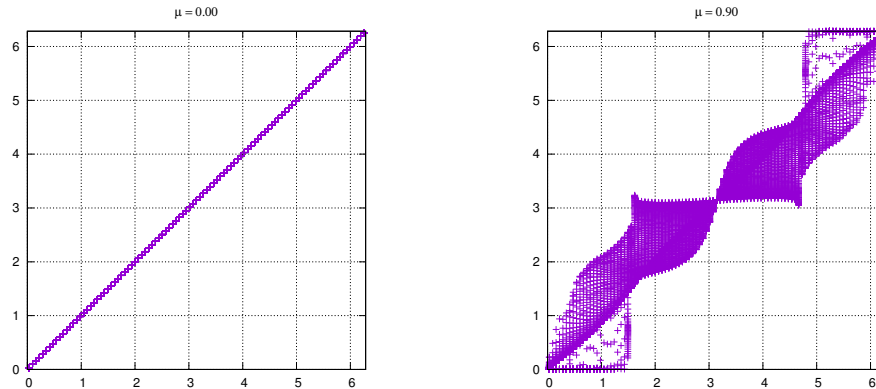
En el modelo de 1 vacío al agregar un potencial químico de Isospín, se observa como la  $\delta E[r, \varphi]$  rompe su simetría axial. La simetría remanente es discreta y pertenece al grupo diedral  $D_{2N}$  donde  $N$  es justamente la carga topológica del solitón.

La simetría rotacional de  $F[r, \varphi]$  se rompe como se observa en la figura 6.5 de  $F[r, \varphi]$  vs  $r$ .



**Figura 6.5.** Rompimiento de simetría rotacional de  $F[r, \varphi]$  en el modelo de 1 vacío con presencia de  $\mu_I$  para  $B = 1$ .

La simetría radial de  $\Theta[r, \varphi]$  se rompe como se observa en la figura 6.6 de  $\Theta[r, \varphi]$  vs  $\varphi$ .



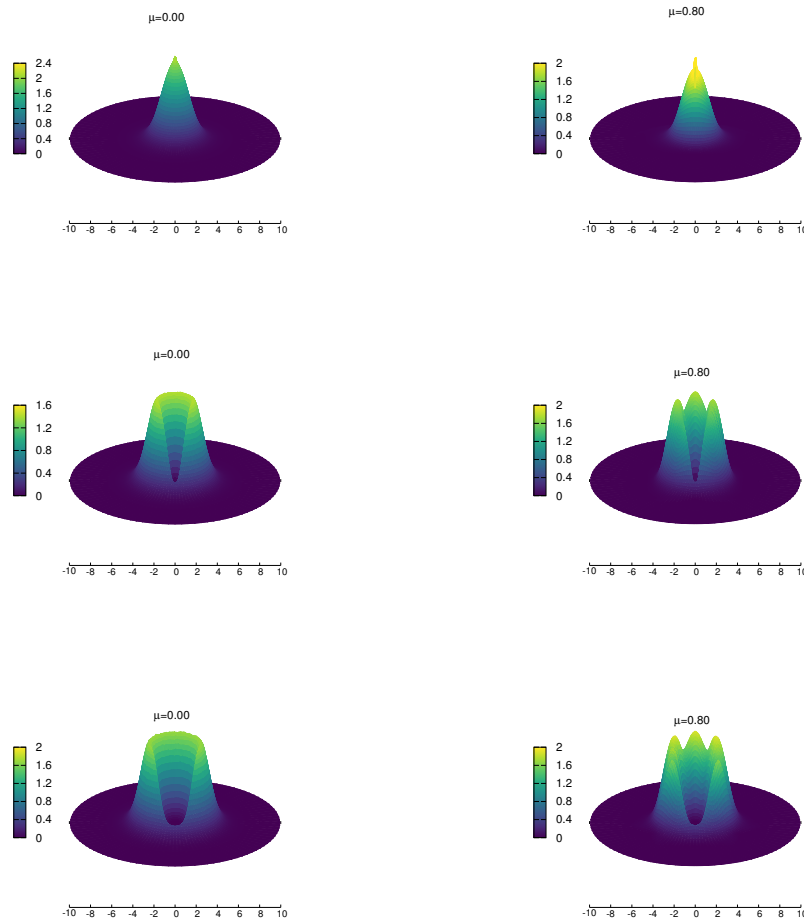
**Figura 6.6.** Rompimiento de simetría radial de  $\Theta[r, \varphi]$  en el modelo de 1 vacío con presencia de  $\mu_I$  para  $B = 1$ .

### 6.3. Modelo de 2 vacíos.

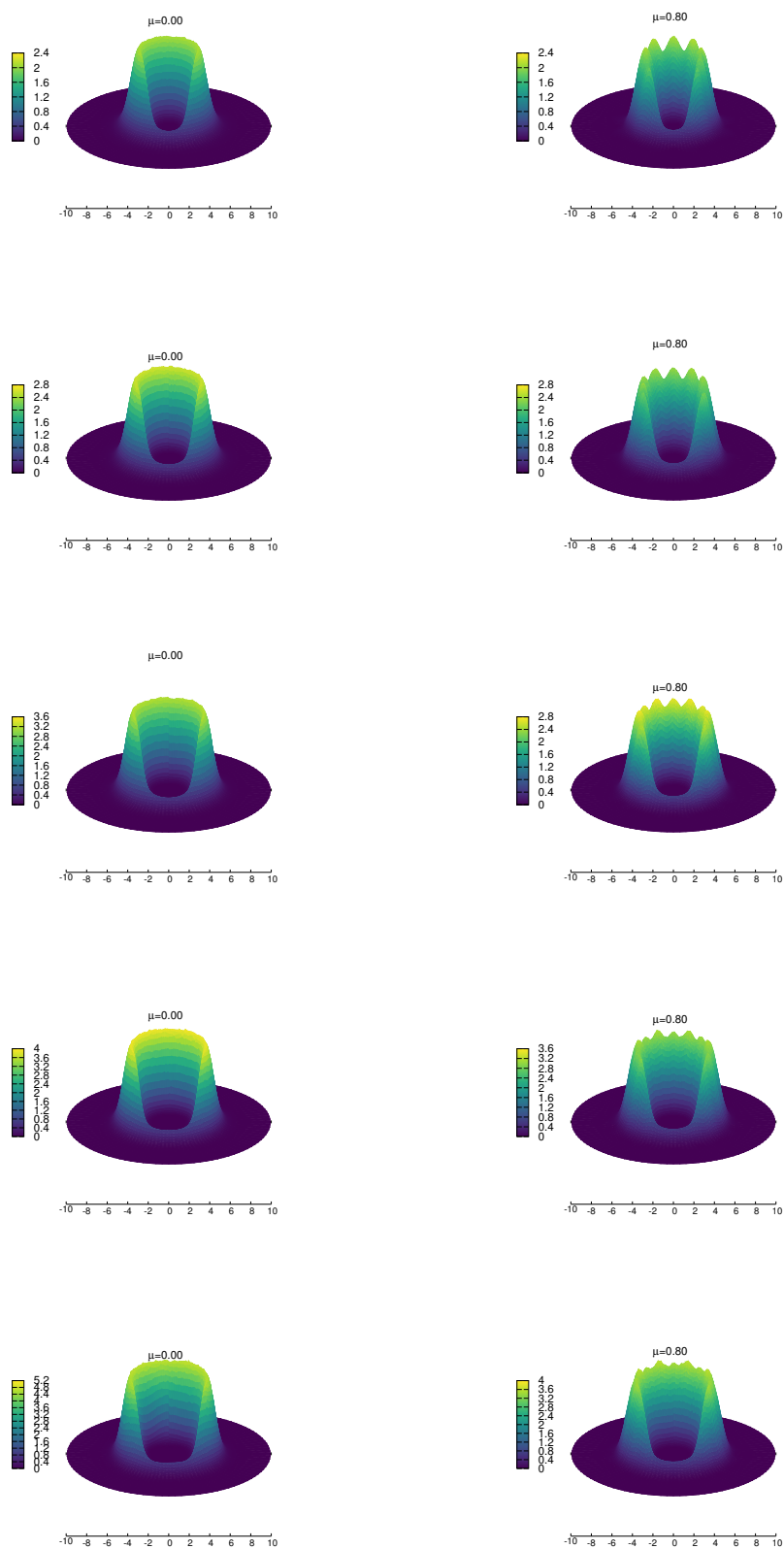
El potencial que describe este modelo es:

$$V(F[r, \varphi]) = (1 - \cos^2(F[r, \varphi])) \quad (6.2)$$

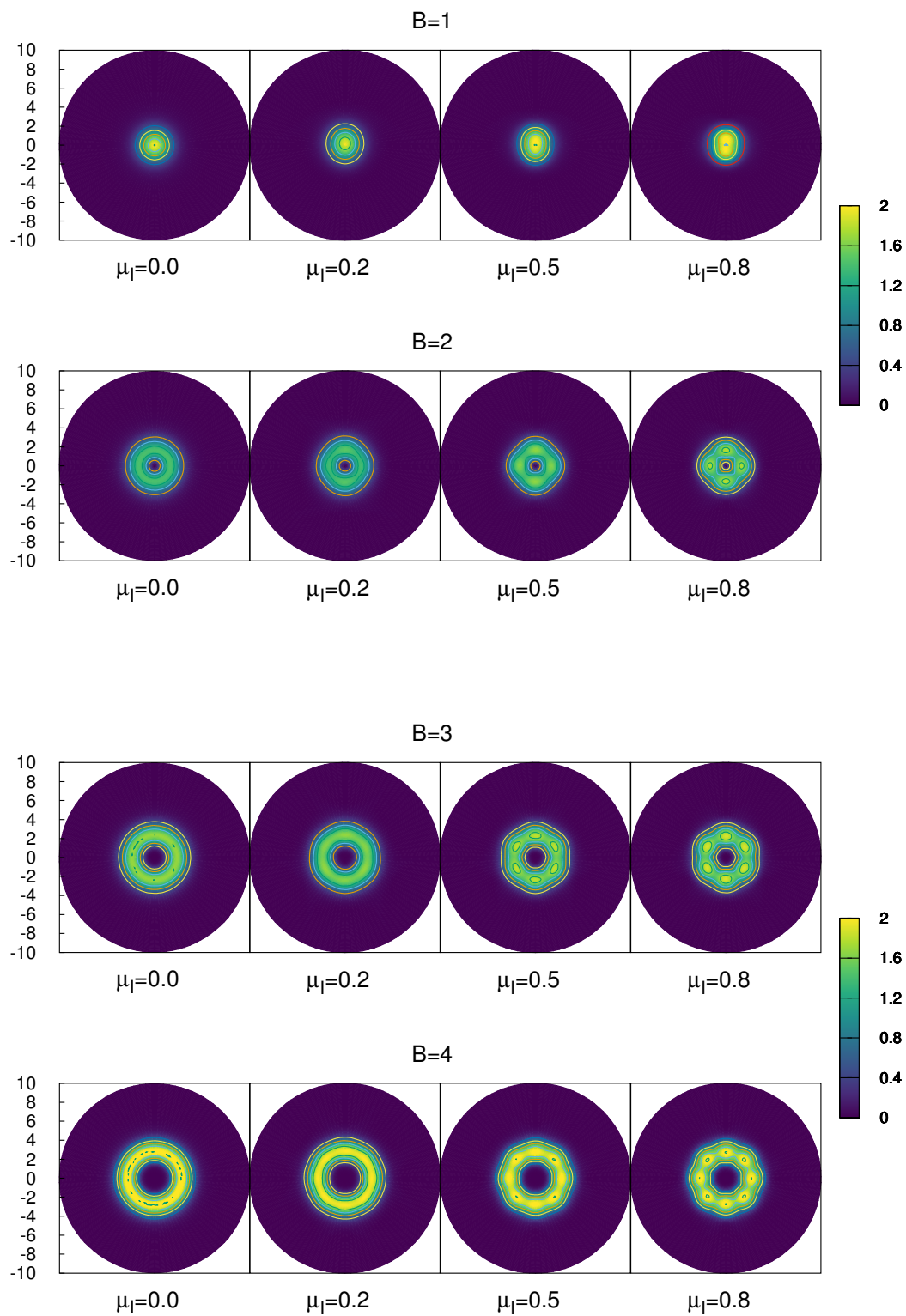
Los resultados se presentan como líneas de contorno de  $\delta E[r, \varphi]$  sobre el espacio, se encontraron los estados fundamentales para  $N = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$  para los valores de  $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$ . Estas líneas de contorno o curvas de nivel, se muestran en vista superior y en vista lateral como se muestra en la figura 6.7, 6.8, 6.9 y 6.10.



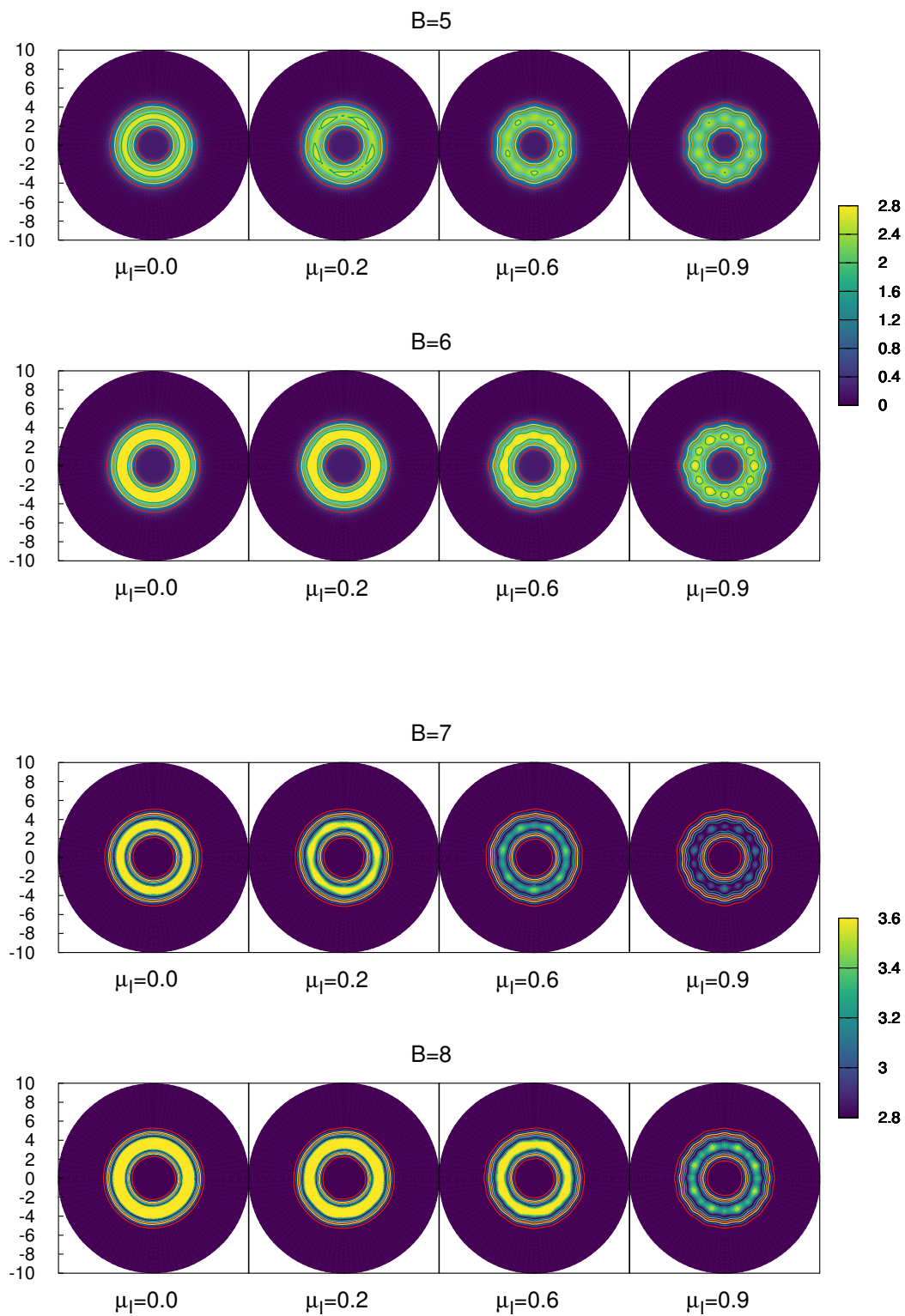
**Figura 6.7.** Superficies y líneas de contorno de  $\delta E$  sobre el plano para  $N=1,2,3$  con los valores de  $\mu_I = 0.00, 0.80$  para el modelo de 2 vacíos.



**Figura 6.8.** Superficies y líneas de contorno de  $\delta E$  sobre el plano para  $N=4,5,6,7,8$  con los valores de  $\mu_I = 0.00, 0.80$  para el modelo de dos vacíos



**Figura 6.9.** Líneas de contorno para  $N = 1, 2, 3, 4$  para valores de  $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$  en el modelo de 2 vacíos.

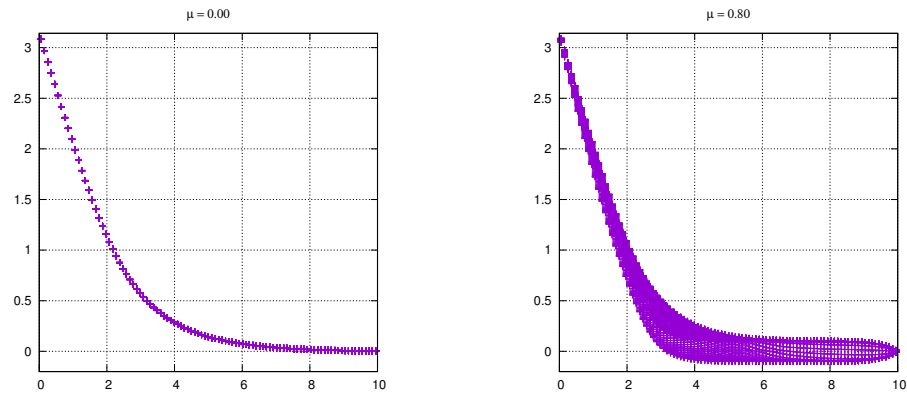


**Figura 6.10.** Líneas de contorno para  $N = 5, 6, 7, 8$  para valores de  $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$  en el modelo de 2 vacíos.

### 6.3.1. Rompimiento de simetrías en el modelo de 2 vacíos

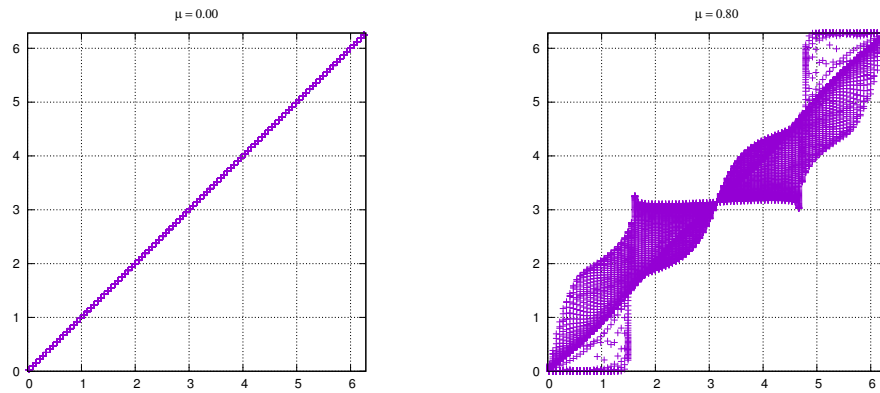
El comportamiento de las simetrías en el modelo de dos vacíos es el mismo que en el modelo de 1 vacío. Al agregar un potencial químico de Isospín, se observa como la  $\delta E[r, \varphi]$  rompe su simetría axial. La simetría remanente es discreta y pertenece al grupo diedral  $D_{2N}$  donde  $N$  es justamente la carga topológica del solitón.

La simetría rotacional de  $F[r, \varphi]$  se rompe como se observa en la figura 6.11 de  $F[r, \varphi]$  vs  $r$ .



**Figura 6.11.** Rompimiento de simetría rotacional de  $F[r, \varphi]$  en el modelo de 2 vacíos con presencia de  $\mu_I$  para  $B = 1$ .

La simetría radial de  $\Theta[r, \varphi]$  se rompe como se observa en la figura 6.12 de  $\Theta[r, \varphi]$  vs  $\varphi$ .



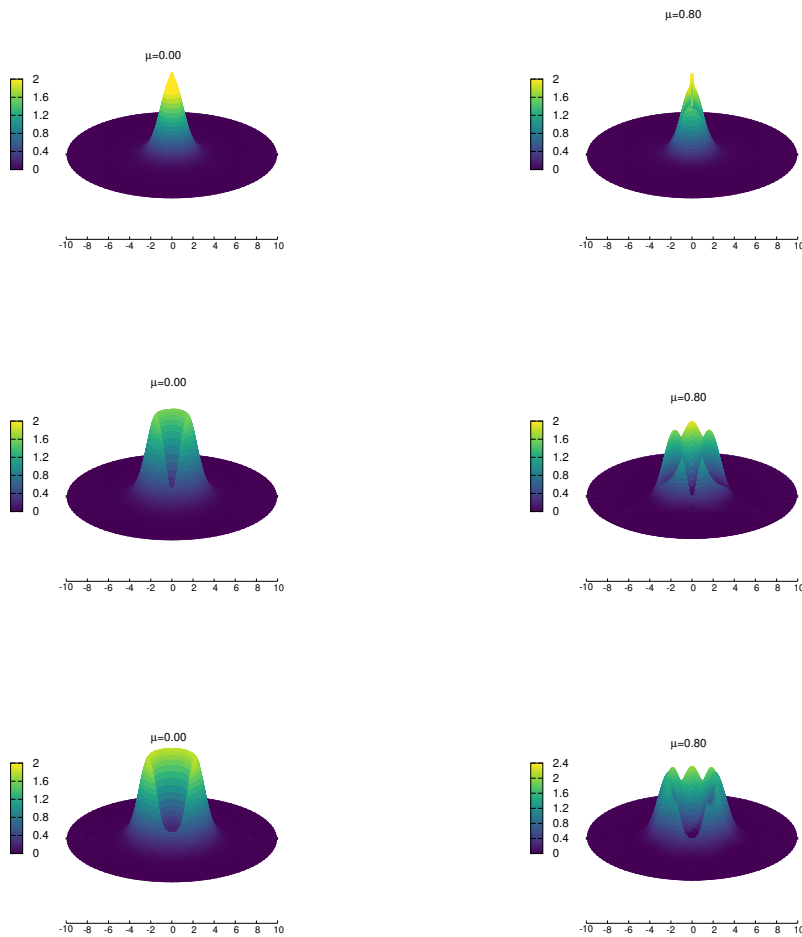
**Figura 6.12.** Rompimiento de simetría radial de  $\Theta[r, \varphi]$  en el modelo de 2 vacíos con presencia de  $\mu_I$  para  $B = 1$ .

## 6.4. Modelo de vacío antisimétrico

El potencial que describe este modelo es:

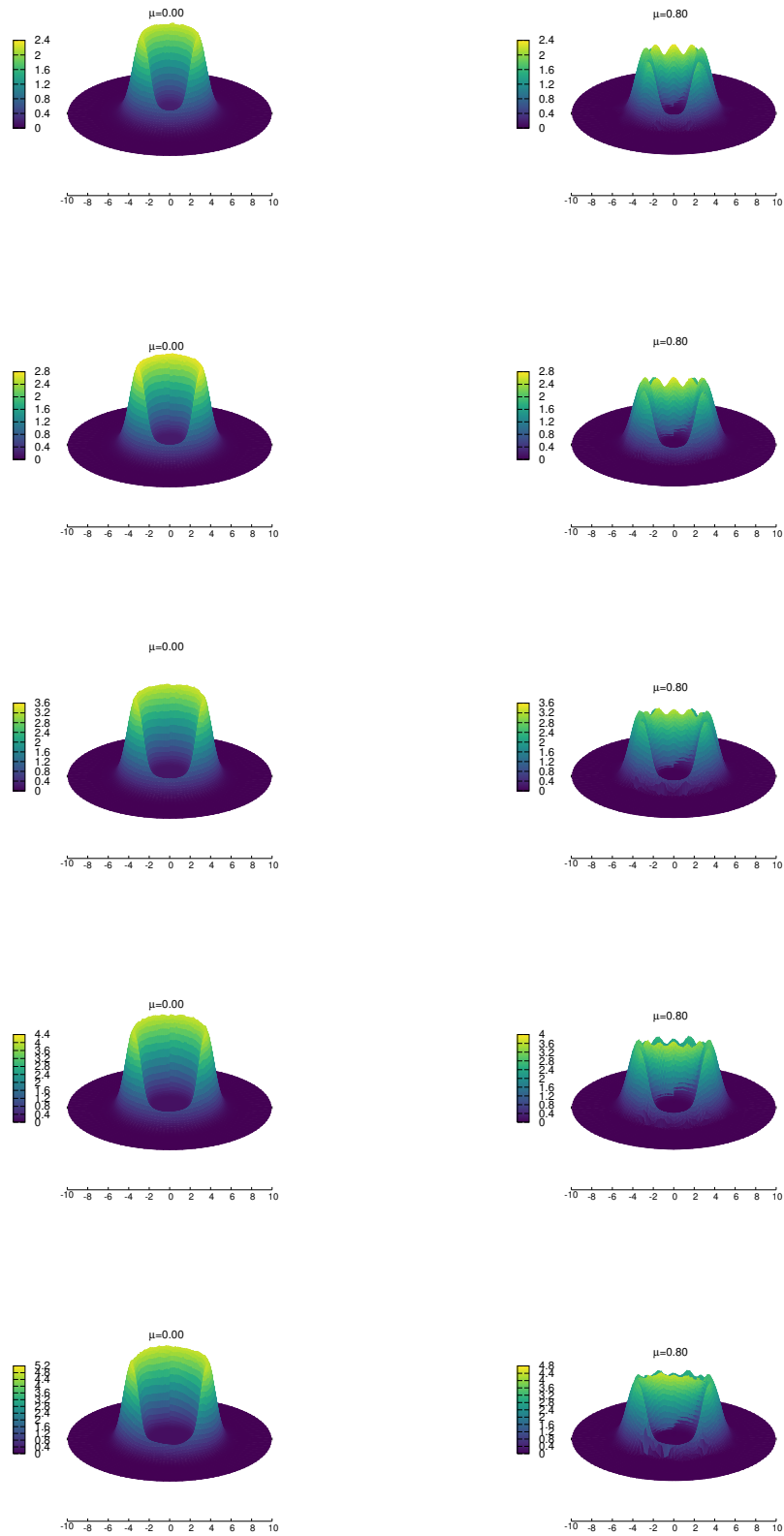
$$V(F[r, \varphi], \Theta[r, \varphi], \alpha) = m^2(\cos(\alpha) - \cos(\alpha)\cos(F[r, \varphi]) - \sin(\alpha)\sin(F[r, \varphi])\cos(\Theta[r, \varphi])) \quad (6.3)$$

Los resultados se presentan como líneas de contorno de  $\delta E[r, \varphi]$  sobre el espacio, se encontraron los estados fundamentales para  $N = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$  para los valores de  $mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$ . Estas líneas de contorno o curvas de nivel, se muestran en vista superior y en vista lateral como se muestra en la figura 6.13, 6.14, 6.15 y 6.16.

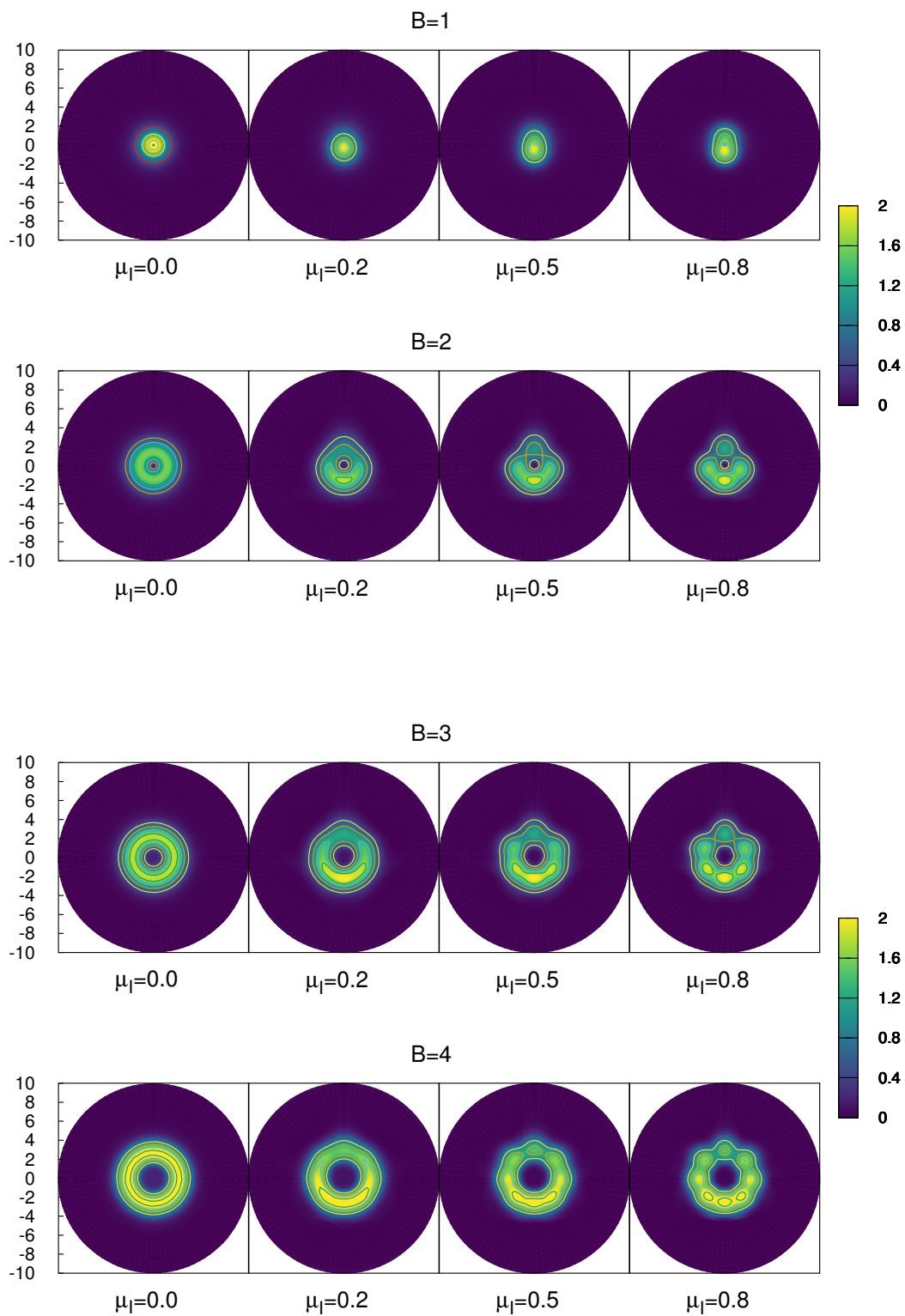


**Figura 6.13.** Superficies y líneas de contorno de  $\delta E$  sobre el plano para  $N=1,2,3$  con los valores de  $\mu_I = 0.00, 0.80$  para el modelo de vacío antisimétrico.

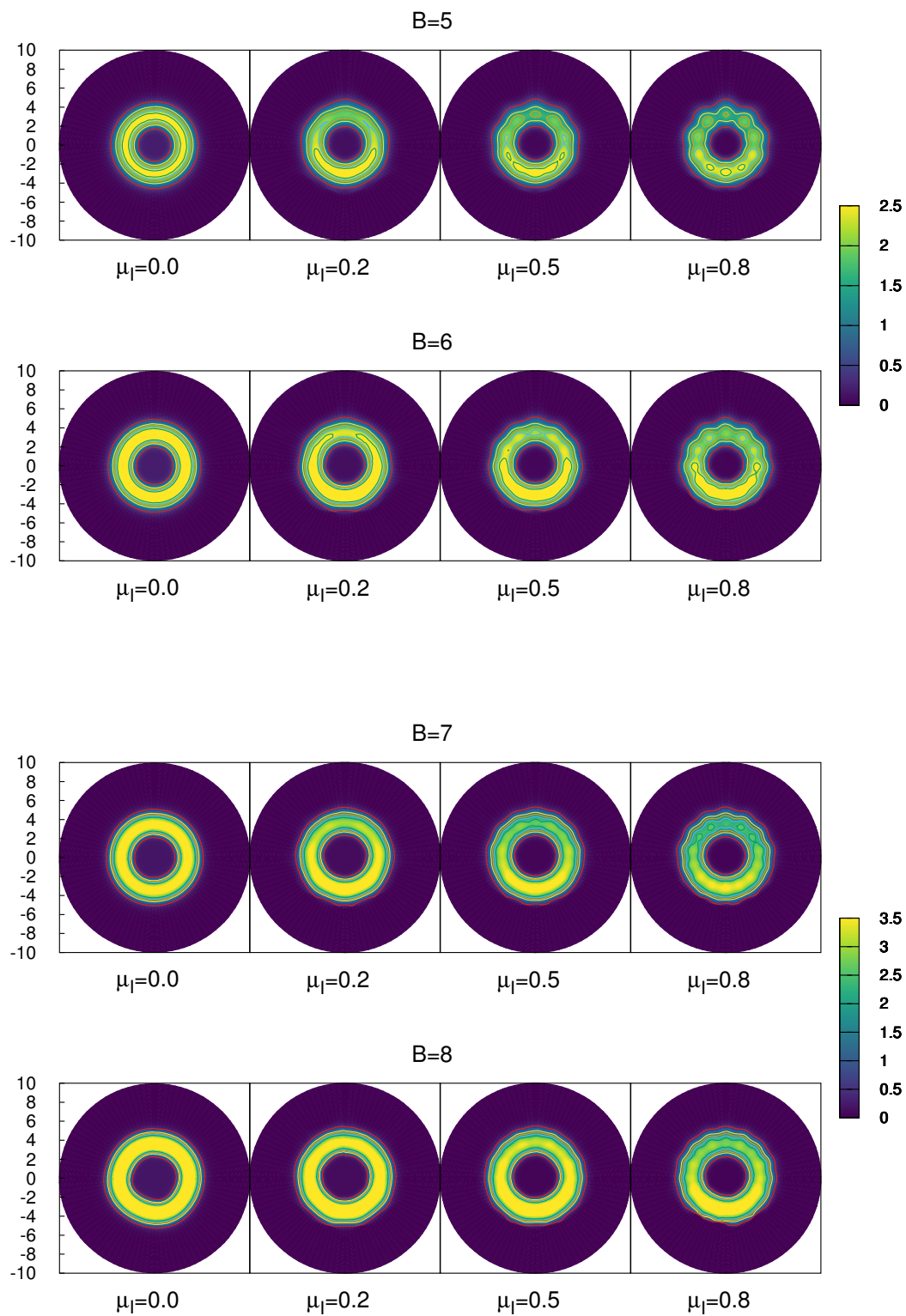




**Figura 6.14.** Superficies y líneas de contorno de  $\delta E$  sobre el plano para  $N=4,5,6,7,8$  con los valores de  $\mu_I = 0.00, 0.80$  para el modelo de vacío antisimétrico



**Figura 6.15.** Líneas de contorno para  $N = 1, 2, 3, 4$  para valores de  $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$  en el modelo de vacío antisimétrico.



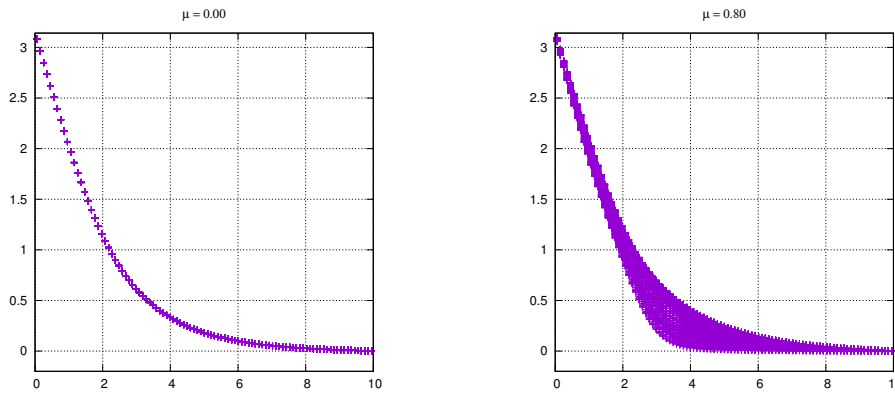
**Figura 6.16.** Líneas de contorno para  $N = 5, 6, 7, 8$  para valores de  $\mu_I = 0.00, 0.20, 0.50, 0.80$  en el modelo de vacío antisimétrico.

### 6.4.1. Rompimiento de simetrías en el modelo de vacío antisimétrico

El comportamiento de las simetrías en el modelo de vacío antisimétrico es distinto al presentado por los dos modelos previos dado que la forma del potencial presenta una rotación dependiente de  $\mu_I$  respecto al vacío de las teorías anteriores.

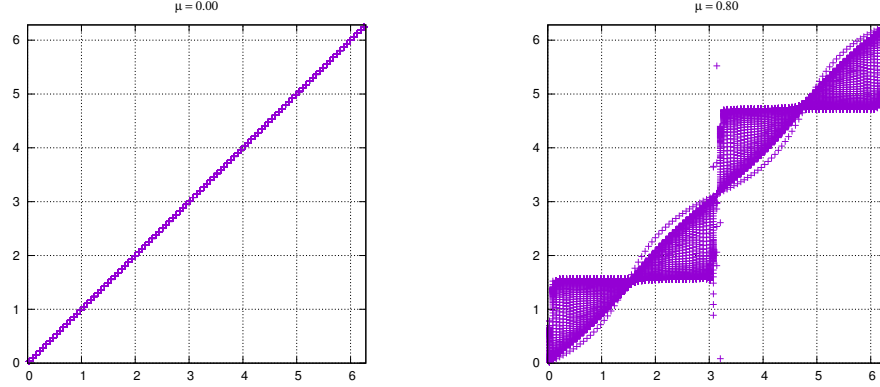
En el modelo de vacío antisimétrico al agregar un potencial químico de isospín, se observa como la  $\delta E[r, \varphi]$  rompe su simetría axial. La simetría remanente es una simetría especular respecto a un plano vertical que atraviesa su centro.

La simetría rotacional de  $F[r, \varphi]$  se rompe de manera similar a los modelos previos como se observa en la figura 6.17 de  $F[r, \varphi]$  vs  $r$ .



**Figura 6.17.** Rompimiento de simetría rotacional de  $F[r, \varphi]$  en el modelo de vacío antisimétrico con presencia de  $\mu_I$  para  $B = 1$ .

La simetría radial de  $\Theta[r, \varphi]$  también se rompe de manera similar a los modelos previos como se observa en la figura 6.18 de  $\Theta[r, \varphi]$  vs  $\varphi$ .



**Figura 6.18.** Rompimiento de simetría radial de  $\Theta[r, \varphi]$  en el modelo de vacío antisimétrico con presencia de  $\mu_I$  para  $B = 1$ .

## 6.5. Comparación cuantitativa de $E_0$ entre modelos

Los modelos difieren únicamente en el potencial, por lo que se esperaba que los valores de energía fueran cercanos. Una comparación cuantitativa entre el doble los valores de energía de los tres modelos y los valores obtenidos para el modelo de 1 vacío y 2 vacíos en [10] se muestran en la tabla 6.1. La razón de utilizar el doble de  $E_0$  para la comparación es el factor  $\frac{1}{2}$  en (4.8).

Se puede afirmar que los valores de energía obtenidos para el modelo de 1 vacío a partir del algoritmo de recocido simulado coinciden con los valores obtenidos en [10], Además para el estado fundamental en los 3 modelos, el valor de  $E_0$  disminuye al aumentar  $\mu_I$ .

$N$	$\mu_I$	1 vacío	2 vacíos	v. antisimétrico	1-v Ref. [10]	2-v Ref. [10]
1	0.00	19.70	20.22	19.92	19.47	19.65
	0.20	17.28	17.98	17.80	–	–
	0.50	18.73	19.06	18.24	–	–
	0.80	18.40	19.22	18.22	–	–
2	0.00	36.98	36.96	37.64	36.54	35.30
	0.20	34.32	34.38	29.66	–	–
	0.50	35.40	35.14	28.88	–	–
	0.80	35.01	34.70	28.46	–	–
3	0.00	56.38	56.10	58.16	55.02	51.66
	0.20	53.16	52.84	49.26	–	–
	0.50	53.66	52.80	47.10	–	–
	0.80	52.42	51.42	45.48	–	–
4	0.00	77.44	77.90	81.38	72.88	68.28
	0.20	73.49	73.66	70.88	–	–
	0.50	73.16	72.32	66.82	–	–
	0.80	70.88	69.62	63.92	–	–
5	0.00	100.10	102.72	106.52	–	–
	0.20	95.26	97.34	95.86	–	–
	0.50	93.80	94.16	89.34	–	–
	0.80	90.26	89.64	84.38	–	–
6	0.00	124.40	130.88	136.76	–	–
	0.20	118.60	124.10	123.80	–	–
	0.50	115.68	118.68	114.66	–	–
	0.80	110.62	111.82	106.62	–	–
7	0.00	150.46	162.62	169.50	–	–
	0.20	143.64	154.32	155.38	–	–
	0.50	138.96	146.14	142.90	–	–
	0.80	132.06	136.50	132.56	–	–
8	0.00	178.42	197.92	205.60	–	–
	0.20	170.29	188.06	189.74	–	–
	0.50	163.76	176.66	174.34	–	–
	0.80	154.68	163.64	161.68	–	–

**Tabla 6.1.** Valores adimensionales de energía para el modelo de 1 vacío, 2 vacíos, vacío antisimétrico y los modelos de 1 y 2 vacíos en [10].

## CONCLUSIONES

1. La temperatura inicial junto con el número de iteraciones necesarias para alcanzar el equilibrio térmico fueron los parámetros calibrados para garantizar obtener un mínimo global en el algoritmo de recocido simulado.
2. Los estados fundamentales del modelo de baby Skyrme presentan un aumento de energía conforme aumenta el número topológico y una disminución de energía conforme aumenta el potencial químico de isoespín.
3. Los valores de energía de los estados fundamentales para el modelo de baby Skyrme con 1 vacío a través del algoritmo de recocido simulado concuerdan con los resultados obtenidos por [10], la implementación fue exitosa.
4. Los valores de energía de los estados fundamentales para distintas cargas topológicas en los modelos de 1 vacío, 2 vacíos y vacío antisimétrico al aumentar el potencial químico de isospín tienen el mismo comportamiento.
5. En el modelo de baby Skyrme con potencial de 1 vacío en presencia de un potencial químico de isospín presenta el rompimiento de simetría axial de la densidad de energía en una simetría perteneciente al grupo diedral.
6. En el modelo de baby Skyrme con potencial de 2 vacíos en presencia de un potencial químico de isospín presenta el rompimiento de simetría axial de la densidad de energía en una simetría perteneciente al grupo diedral.
7. En el modelo de baby Skyrme con potencial de vacío antisimétrico en presencia de un potencial químico de isospín presenta el rompimiento de simetría axial de la densidad de energía en una simetría especular.





## RECOMENDACIONES

1. Realizar la calibración de parámetros para cada problema distinto puesto que las magnitudes de cambios de energía dependen de cada sistema.
2. Realizar más de un recocido sobre el mismo sistema para evaluar si se alcanzó un mínimo global.
3. Si el problema que se está trabajando con el algoritmo de recocido simulado no ha sido trabajado antes, utilizar modelos similares para comparar el comportamiento del sistema.
4. En el algoritmo, al momento de comparar la energía luego de una perturbación en el sistema, evaluar el cambio de energía localmente (en la vecindad de la perturbación) para reducir costos computacionales.



## BIBLIOGRAFÍA

- [1] C. Adam, C. Naya, J. Sanchez-Guillen, A. Wereszczynski, *Non linear field theory with topological solitons: Skyrme Model*, arXiv:1301.5326 [hep-th] (2013).
- [2] M. Atiyah, P. Sutcliffe, *Polyhedra in physics, chemistry and geometry*, arXiv: math-ph/0303071 (2003).
- [3] J. L. Barrat, J.P. Hansen, *Basic Concepts for Simple and Complex Liquids*, Cambridge University Press (2003).
- [4] R. A. Battye, M. Haberichter, *Isospining baby Skyrme solutions*, arXiv: 1309.3907v2 [hep-th] (2014)
- [5] S. J Blundell, K. M. Blundell, *Concepts in Thermal Physics*, Oxford University Press (2006).
- [6] G. E. Brown, M. Rho *The Multifaceted Skyrmion*, World Scientific (2010).
- [7] G. Costa, G. Fogli, *Symmetries and Group Theory in Particle Physics* Springer (2012).
- [8] D. S. Dummit, R.S Foote, *Abstract Algebra*, Prentice-Hall Inc. (1991)
- [9] D. Griffiths, *Introduction to Elementary Particles*, Wiley & sons (1987).
- [10] M. Hale, O. Schwindt, T. Weidig, *Simulated Annealing on Topological Solitons*, arXiv:0002058v2 [hep-th] (2000).
- [11] A. K. Hartman, H. Rieger, *Optimization algorithms in physics*, WILEY-VCH (2002).
- [12] L. Ingber, *Simulated Annealing: Practice vs Theory* J. Math. Comp. Model, **18**, 29 (1993).
- [13] M. H Kalos, P. A. Whitlock, *Monte Carlo methods* J. Wiley & Sons (1986).

- [14] Y.L. Ma, M. Harada, *Lecture notes on the Skyrme model*, arXiv:2604.04850v1 [hep-ph] (2016).
- [15] F. Mandl, G. Shaw, *Quantum Field Theory*, Wiley & sons (1984).
- [16] N. Manton, P. Sutcliffe, *Topological Solitons*, Cambridge University Press (2004).
- [17] W.S. Massey, *Algebraic Topology: An Introduction*, Harcourt, Brace & World (1967).
- [18] C. Naya, P. Sutcliffe, *Skyrmions in models with pions and rho mesons*, arXiv:1803.06098v2 [hep-ph] (2018).
- [19] B.M.A.G. Piette , B.J. Schroers, W.J. Zakrzewski, *Dynamics of baby Skyrmions* Nucl. Phys. (1995).
- [20] B.M.A.G. Piette , B.J. Schroers, W.J. Zakrzewski, *Multi-solitons in a two-dimensional Skyrme model* Z.Phys. (1995).
- [21] J. A. Ponciano, *Estudio de Solitones topológicos en teoría de campos* ,DIGI-USAC, INF-2011-37 (2012).
- [22] J.A. Ponciano, E.J. Estrada, J.D. Chang, *Broken phase solitons on the baby Skyrme model*, Phys. Rev. D (2018).
- [23] W. H. Press, S.A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes in C* Cambridge University Press (1997).
- [24] R. Rajaraman, *Solitons and Instantons*, Elsevier Science Publishers (1989).
- [25] J.J. Sakurai, J.J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics* Pearson Education (2011).
- [26] T.H.R. Skyrme *A non-linear field theory* Proc. Roy. Soc. A (1961).
- [27] D. Tong, *Classical Dynamics*, Cambridge University Press (2004)
- [28] T. Vachaspati, *Kinks and Domain Walls: An introduction to Classical and Quantum Solitons*, Cambridge University Press (2006).
- [29] D. G. Zill, W. S. Wright, *Ecuaciones diferenciales con problemas con valores en la frontera*, CENGAGE Learning (2015).

## A. ANEXOS

### A. Código utilizado para implementar el SA

El código utilizado para optimizar el modelo de baby Skyrme con 3 distintos términos másicos, correspondiente a los modelos trabajados en el tercer capítulo de la tesis. Este código fue escrito durante el primer semestre del año 2018, basado en trabajos realizados desde septiembre de 2016 en colaboración con Dr. Juan Adolfo Ponciano Castellanos y M.Sc. Juan Diego Chang. A continuación se presenta la implementación del algoritmo de recocido simulado al modelo de baby Skyrme en el lenguaje C++.

```
#include <iostream>
#include <fstream>
#include <math.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>
using namespace std;

int ntop= 1; //numero
             topologico
int rep= 8; //numero de
            recocidos
double mu=sqrt(0.00); //Potencial
                    Quimico

// Si mu**2>m**2 es 1, sino,
// es 2

double posr = 100; //Numero de //double alpha=acos(m*m/(mu*mu)); //
                    nodos radiales // parametro 1
double posa = 100; //Numero de //double alpha=0.0; //
                    nodos angulares // parametro 2
double To = 5e0; //Temperatura
                inicial
double Kb = 1e-6; //Constante de
                Boltzman
double fact= 1/(To*Kb); //Factor de
                normalizacion
int nit = 2e5; //
                Perturbaciones aleatorias por ciclo
int pasos = 100; //Numero de
                ciclos de enfriamiento
double r = 10; //radio del
                arreglo
double m =sqrt(0.1) ; //masa del
                soliton

double Energy(double **Phi, double **F);
double energia(double **Phi,int i,int j,
               double **F);
double B(double **Phi, double **F);
double randC(double n);

double randC(double n)
{
// esta funcion genera un numero
// aleatorio entre 0 y 1 con n
// decimales
int temp;
temp = rand() %(int)(pow(10,n)+1);
```

```

double res;
res = temp/(pow(10.0,n));
return res;
}

double energia(double **Phi,int i,int j,
double **F)
{
double energia;
double Fp,dFdr,dFdth,dPhidr,dPhidth,Ra,
,Phip;
double E2,E4,Em,Emu2,Emu4;

Ra=r*(i+0.5)/(posr-1);

if ( i>=posr-1 || i<0 || j>=posa-1 ||
j<0 )
{
energia=0;
}
else
{
Fp=(F[i][j]+F[i+1][j]+F[i][j+1]+F[
i+1][j+1])/4.0;
Phip=(Phi[i][j]+Phi[i+1][j]+Phi[i
][j+1]+Phi[i+1][j+1])/4.0;
dFdr=((F[i+1][j]+F[i+1][j+1])
/2.0-(F[i][j]+F[i][j+1])/2.0)
/(r/(posr-1));
dFdth=((F[i][j+1]+F[i+1][j+1])
/2.0-(F[i][j]+F[i+1][j])/2.0)
/(2*M_PI/(posa-1));
dPhidr=((Phi[i+1][j]+Phi[i+1][j
+1])/2.0-(Phi[i][j]+Phi[i][j
+1])/2.0)/(r/(posr-1));
dPhidth=((Phi[i][j+1]+Phi[i+1][j
+1])/2.0-(Phi[i][j]+Phi[i+1][j
])/2.0)/(2*M_PI/(posa-1));

E2=(1/(2.0*Ra*Ra))*(pow(dFdth,2)+
pow(ntop*sin(Fp)*dPhidth,2)+Ra
*Ra*(pow(dFdr,2)+pow(ntop*sin(
Fp)*dPhidr,2)));

E4=(1/2.0)*pow(ntop*sin(Fp)*(
dPhidth*dFdr-dFdth*dPhidr)/Ra
,2);

// Em=m*m*(1.0-cos(Fp));

Em=m*m*(1.0-cos(Fp)*cos(Fp
))
Em=m*m*(cos(alpha)-cos(alpha)*cos(
Fp)-sin(alpha)*sin(Fp)*cos(
Phip));

Emu2=(2+6*cos(2*alpha)-4*cos(2*
ntop*Phip))*sin(alpha)*sin(
alpha))*sin(Fp)*sin(Fp)-4*cos(
ntop*Phip))*sin(2*alpha)*sin(2*
Fp);

Emu4=32*pow(cos(Fp)*cos(ntop*Phip)
*sin(alpha)-cos(alpha)*sin(Fp)
,2)*(dFdr*dFdr+dFdth*dFdth/(Ra
*Ra))
+32*pow(ntop*sin(alpha)*sin(Fp)*
sin(ntop*Phip),2)*(dPhidr*
dPhidr+dPhidth*dPhidth/(Ra*Ra)
)
+16*ntop*sin(alpha)*(-sin(alpha)*
sin(2*Fp)*sin(2*ntop*Phip)+4*
cos(alpha)*sin(Fp)*sin(Fp)*sin
(ntop*Phip))*(dFdr*dPhidr+
dFdth*dPhidth/(Ra*Ra));

energia=Em+E4+E2-mu*mu*(Emu2+Emu4
/4.0)/16.0;
}

return energia*Ra;
}

double Energy(double **Phi,double **F)
{
double Energy = 0;
double dr,dth;
dr=r/(posr-1);
dth=2*M_PI/(posa-1);
for (int i=0; i<posr-1; i+=1)
{
for (int j=0; j<posa-1; j+=1)
{
Energy=Energy+(1/2.0)*energia(
Phi,i,j,F)*dr*dth;
}
}
return Energy;
}

// Em=m*m*(1.0-cos(Fp));
double B(double **Phi,double **F)

```

```

{
  double Fp,dFdr,dFdth,dPhidr,dPhidth;
  double B = 0;

  for (int i=0; i<posr-1; i+=1)
  {
    for (int j=0; j<posa-1; j+=1)
    {
      dFdr=((F[i+1][j]+F[i+1][j+1])
        /(2.0)-(F[i][j]+F[i][j+1])
        /2.0)/(r/(posr-1));
      dFdth=((F[i][j+1]+F[i+1][j+1])
        /(2.0)-(F[i][j]+F[i+1][j])
        /2.0)/(2*M_PI/(posa-1));
      dPhidr=((Phi[i+1][j]+Phi[i+1][j+1])/2.0-(Phi[i][j]+Phi[i][j+1])/2.0)/(r/(posr-1));
      dPhidth=((Phi[i][j+1]+Phi[i+1][j+1])/2.0-(Phi[i][j]+Phi[i+1][j])/2.0)/(2*M_PI/(posa-1));
      Fp=(F[i][j]+F[i+1][j]+F[i][j+1]+F[i+1][j+1])/4.0;

      B=B-ntop*sin(Fp)*(dPhidth*dFdr-dFdth*dPhidr)*(r/(posr-1))*(2*M_PI/(posa-1));
    }
  }
  return B/(4*M_PI);
}

int main()
{
  double **Phi, **Phin, **F, **Fn, *DE,*E;
  double T,dE,random,dEmax,dEmin;
  double Etot, Eo, Ef;
  double delta1, delta2,A;
  int posrandi,posrandj;
  ofstream salida;

  // Inicializacion del campo Phi y
  // vectores necesarios
  time_t nanoseconds;
  time(&nanoseconds);
  srand((unsigned int) nanoseconds);

  DE = (double*) malloc((rep*pasos*2)*
    sizeof(double));
  E = (double*) malloc((rep*pasos*2)*
    sizeof(double));
  Phi = (double**) malloc((posr)*sizeof(
    double));

  Phin = (double**) malloc((posr)*sizeof(
    double));
  for (int i=0; i<posr; i+=1)
  {
    Phin[i] = (double*) malloc((posa)*
      sizeof(double));
    Phi[i] = (double*) malloc((posa)*
      sizeof(double));
  }
  F = (double**) malloc((posr)*sizeof(
    double));
  Fn = (double**) malloc((posr)*sizeof(
    double));
  for (int i=0; i<posr; i+=1)
  {
    Fn[i] = (double*) malloc((posa)*
      sizeof(double));
    F[i] = (double*) malloc((posa)*
      sizeof(double));
  }

  //condiciones iniciales y de frontera
  for (int i=0; i<posr; i++)
  {
    for (int j=0; j<posa; j++)
    {
      Phi[i][j]=2*M_PI*j/(posa-1);
      F[i][j]=M_PI*exp(-(r*i)/(posr-1));
    }
  }

  for (int y=0; y<rep;y+=1)
  {
    cout<<" paso "<<y+1<<" / "<<rep<<endl;
    T=To;
    //Recocidos de F[r,theta]
    for (int j=0; j<pasos; j+=1)
    {
      dEmax=0;
      dEmin=0;
      A=Energy(Phi,F);
      T = T*(300-j)/300.0;
      for (int n=0; n<nperfil*nit;n++)
      {
        delta2 = (M_PI)*fact*Kb*T
          *(-1+2*randC(5));
        posrandi=1+rand() % (int (
          posr)-2); //pos rand
          radial

```

```

posrandj=rand() %(int(
    posa)); //pos rand
    angular

for (int k=posrandi-1;k<
    posrandi+3;k++)
{
    for (int l=posrandj-1;
        l<posrandj+3;l++)
        {
            if ( k<posr && k
                >=0 && l<posa
                && l>=0 )
                {
                    Fn[k][l]=F[k][
                        l];
                }
        }
    }
Fn[posrandi][posrandj]=F[
    posrandi][posrandj]+
    delta2;

Eo=energia (Phi , posrandi-1,
    posrandj-1,F)+energia (
    Phi , posrandi-1,
    posrandj ,F)+energia (
    Phi , posrandi-1,
    posrandj+1,F)+energia (
    Phi , posrandi , posrandj
    -1,F)+energia (Phi ,
    posrandi , posrandj ,F)+
    energia (Phi , posrandi ,
    posrandj+1,F)+energia (
    Phi , posrandi+1,
    posrandj-1,F)+energia (
    Phi , posrandi+1,
    posrandj ,F)+energia (
    Phi , posrandi+1,
    posrandj+1,F);

Ef=energia (Phi , posrandi-1,
    posrandj-1,Fn)+energia
    (Phi , posrandi-1,
    posrandj ,Fn)+energia (
    Phi , posrandi-1,
    posrandj+1,Fn)+energia
    (Phi , posrandi , posrandj
    -1,Fn)+energia (Phi ,
    posrandi , posrandj ,Fn)+
    energia (Phi , posrandi ,
    posrandj+1,Fn)+energia
    (Phi , posrandi+1,
    posrandj-1,Fn)+energia
    (Phi , posrandi+1,
    posrandj ,Fn)+energia
    (Phi , posrandi+1,
    posrandj+1,Fn);

    (Phi , posrandi+1,
    posrandj-1,Fn)+energia
    (Phi , posrandi+1,
    posrandj ,Fn)+energia (
    Phi , posrandi+1,
    posrandj+1,Fn);

dE=Ef-Eo;
if (dE>dEmax)
{
    dEmax=dE;
}
if (dE<dEmin)
{
    dEmin=dE;
}

if (dE<=1e-15)
{
    F[posrandi][posrandj]=
        Fn[posrandi][
            posrandj];
}

if (dE>1e-15)
{
    random=randC(5);
    double q = exp(-dE/(Kb
        *T));
    if (random < q)
        {
            F[posrandi][
                posrandj]=Fn[
                    posrandi][
                        posrandj];
        }
}

    }
    Etot=Energy (Phi ,F);
    DE[j]=Etot-A;
    E[j+100*2*y]=Etot;
}

T=To;
// Recocidos de Phi[r,theta]

for (int j=0; j<pasos; j+=1)
{
    dEmax=0;
    dEmin=0;
    A=Energy (Phi , F);
    T = T*(300-j)/300.0;
}

```



```

for (int n=0; n<nangular*nit;n
++)
{
    delta1 = (2*M_PI)*fact*Kb*
        T*(-1+2*randC(5));
    posrandj=1+ rand() %(int(
        posa)-2); //pos rand
        ang
    posrandi=rand() %(int(
        posr)); //pos rand
        radial

    for(int k=posrandi-1;k<
        posrandi+3;k++)
    {
        for (int l=posrandj-1;
            l<posrandj+3;l++)
        {
            if ( k<posr && k
                >=0 && l<posa
                && l>=0 )
            {
                Phin[k][l]=Phi
                    [k][l];
            }
        }
    }
    Phin[posrandi][posrandj]=
        Phi[posrandi][posrandj
        ]+delta1;

    Eo=energia(Phi, posrandi-1,
        posrandj-1,F)+energia(
        Phi, posrandi-1,
        posrandj, F)+energia(
        Phi, posrandi-1,
        posrandj+1,F)+energia(
        Phi, posrandi, posrandj
        -1,F)+energia(Phi,
        posrandi, posrandj, F)+
        energia(Phi, posrandi,
        posrandj+1,F)+energia(
        Phi, posrandi+1,
        posrandj-1,F)+energia(
        Phi, posrandi+1,
        posrandj, F)+energia(
        Phi, posrandi+1,
        posrandj+1,F);

    Ef=energia(Phin, posrandi
        -1, posrandj-1,F)+
        energia(Phin, posrandi
        -1, posrandj, F)+energia
        (Phin, posrandi-1,
        posrandj+1,F)+energia
        (Phin, posrandi-1,
        posrandj, F)+energia
        (Phin, posrandi-1,
        posrandj-1,F)+energia
        (Phin, posrandi,
        posrandj+1,F)+energia
        (Phin, posrandi,
        posrandj, F)+energia
        (Phin, posrandi,
        posrandj-1,F)+energia
        (Phin, posrandi,
        posrandj-1,F);

    dE=Ef-Eo;
    if (dE>dEmax)
    {
        dEmax=dE;
    }
    if(dE<dEmin)
    {
        dEmin=dE;
    }

    if (dE <=1e-15)
    {
        Phi[posrandi][posrandj
        ]=Phin[posrandi][
        posrandj];
    }

    if(dE>1e-15)
    {
        random=randC(5);
        double q=exp(-dE/(Kb*T
        ));
        if (random<q)
        {
            Phi[posrandi][
                posrandj]=Phin
                [posrandi][
                posrandj];
        }
    }

    Etot=Energy(Phi, F);
    DE[j+100*(1+2*y)]=Etot-A;
    E[j+100*(1+2*y)]=Etot;
}

// Impresion de posiciones finales y
valores del campo

```

```

salida.open("RA000");

salida<<"#B="<<"\t"<<B(Phi,F)<<endl;
salida<<"#E="<<"\t"<<Energy(Phi,F)<<
    endl;
salida<<"#r="<<"\t"<<"theta"<<"\t"<<
    "F"<<"\t"<<"Phi"<<"\t"<<"
    e"<<endl;

for(int i=0; i<posr-1; i+=1)
{
    for(int j=0; j<posa-1; j+=1)
    {
        salida<<r*(i+0.5)/(posr-1)<<"\
            t"<<2*M_PI*(j+0.5)/(posa
            -1)<<"\t"<<(F[i][j]+F[i
            +1][j]+F[i][j+1]+F[i+1][j
            +1])/4.0<<"\t"<<(Phi[i][j
            ]+Phi[i+1][j]+Phi[i][j+1]+
            Phi[i+1][j+1])/4.0<<"\t"
            <<energia(Phi,i,j,F)<<endl
            ;
        }
    }
}
salida.close();

salida.open("ERA000");
salida<<"#Paso"<<"\t"<<"DE"<<"\t"<<"E"
    <<"\t"<<"E(2xpi)"<<endl;
for(int i=0; i<2*pasos*rep; i+=1)
{
    salida<<i+1<<"\t"<<DE[i]<<"\t"<<E[
        i]<<"\t"<<E[i]/(2*M_PI)<<"
        x2pi"<<endl;
    }
salida.close();
cout<<"B="<<B(Phi,F)<<endl;
for(int i=0; i<posr; i+=1)
{
    free(Phi[i]);
    free(Phin[i]);
    free(F[i]);
    free(Fn[i]);
}
free(F);
free(Fn);
free(Phi);
free(Phin);

free(DE);
free(E);
}

```