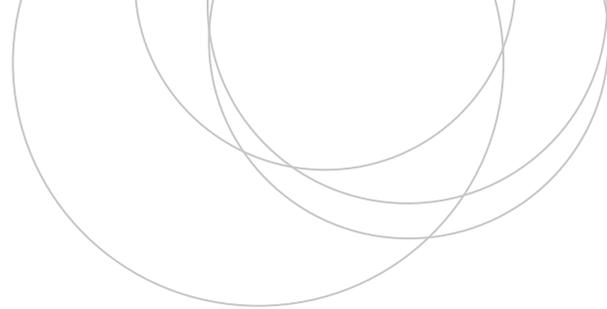




Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

ZIENTZIA
ETA TEKNOLOGIA
FAKULTATEA
FACULTAD
DE CIENCIA
Y TECNOLOGÍA



Trabajo Fin de Grado
Grado en Física

Una revisión del modelo de Ising y su aplicación en sociología a través del modelo de Sznajd

Autor:

Asier García Berdote

Director:

Hegoi Manzano Moro

Codirector:

Iñigo Etxebarria Alzaga

© 2018, Asier García Berdote

Leioa, 18 de Julio de 2018

Índice general

1. Introducción y objetivos	2
2. Aspectos teóricos del modelo de Ising	3
2.1. Introducción	3
2.2. Algunos resultados de la física estadística	4
2.2.1. Propiedades macroscópicas de un sistema	4
2.2.2. Transiciones de fase	6
2.3. El modelo de Ising	8
2.3.1. Modelo de Ising en 1D	9
2.3.2. Modelo de Ising en 2D	12
3. Estadística computacional	14
3.1. Cadenas de Markov	14
3.2. Ergodicidad y balance detallado	15
3.3. Algoritmo de Metrópolis	16
3.4. Promedios para el cálculo de las funciones termodinámicas	17
4. Resultados para una red de tamaño 100×100	18
4.1. Simulación	18
4.2. Consideraciones varias	19
4.3. Resultados y comparación con la predicción teórica	21
5. Aplicaciones: Modelo de Sznajd en sociología	23
5.1. Introducción	24
5.2. Modelo de Sznajd y simulación en red cuadrada	24
5.3. Sznajd en grafos aleatorios	28
5.4. Masa crítica de las minorías	32
6. Conclusiones y futuros trabajos	35

Capítulo 1

Introducción y objetivos

En la actualidad, con el desarrollo de las nuevas tecnologías y ordenadores cada vez más potentes, la computación ha adquirido una inmensa importancia, debido a que nos permite resolver y simular complejos problemas que de otra forma nos resultarían completamente imposibles de describir analíticamente. Uno de los campos que más se ha beneficiado de estos avances es la mecánica estadística, ya que en muchas ocasiones no es factible la resolución exacta de los sistemas con los que trata.

En la física estadística, uno de los modelos más ampliamente estudiados debido a sus extensas aplicaciones y su relación con las transiciones de fase es el modelo de Ising. En este trabajo se pretende realizar un estudio teórico del modelo de Ising en 1D y 2D (retícula cuadrada), y a continuación se implementará el algoritmo de Metrópolis para obtener mediante una simulación las propiedades termodinámicas relevantes en el modelo y compararlas con los resultados teóricos.

Por último, se analizará un modelo análogo empleado en el campo de la sociología, el modelo de Sznajd [1], que está orientado a modelizar la forma en la que se propagan las opiniones en una red cuadrada. Extenderemos después el modelo a grafos de estructura aleatoria, para comprobar el efecto que tiene en el comportamiento de la opinión de una sociedad la estructura de la red.

Además, a raíz de un estudio recientemente realizado por las universidades de Pensilvania y Londres [2], se intentará averiguar si existe, como dice el estudio, una masa crítica del 25 % para la cual una minoría de la sociedad puede convencer al resto, realizándolo nosotros para una versión del algoritmo de Sznajd.

Capítulo 2

Aspectos teóricos del modelo de Ising

En este capítulo se presenta el modelo de Ising y algunas definiciones y herramientas necesarias para la posterior resolución analítica del modelo unidimensional y la solución para el modelo bidimensional en ausencia de campo magnético B , obtenida por primera vez por L. Onsager en 1944 [3].

2.1. Introducción

El modelo de Ising, propuesto por Wilhelm Lenz como tesis para su alumno Ernst Ising en 1920, fue diseñado con el objetivo de modelizar materiales ferromagnéticos, para estudiar así sus propiedades y las transiciones de fase que puede presentar un sistema de tales características. Sin embargo, no es lo único para lo que sirve este modelo, ya que además se ha empleado en el estudio de las transiciones líquido-gas y de la adsorción de gases, entre otros.

Asimismo, el modelo ha resultado ser aplicable en muchos otros campos más allá de la física de materiales como, por ejemplo, la neurología. Existen modelos en este ámbito en los que se propone que las redes neuronales del cerebro podrían seguir una estructura equivalente a la que observamos en el modelo de Ising (que veremos en la siguiente sección): una neurona puede estar “activada” o “desactivada”, y se conecta a muchas otras mediante sinapsis, lo cual se interpretaría como la interacción [4].

Otro ejemplo es el modelo propuesto por Thomas Schelling en 1971 [5] para intentar entender el fenómeno de la segregación observado en muchas ciudades americanas, refiriéndose al hecho de que barrios donde inicialmente había población de diferentes razas, con el paso del tiempo acababan siendo sólo de una de ellas. Para ello planteó un modelo análogo al de Ising: los valores +1 y -1 de los “espines” se corresponden con dos razas distintas y la interacción es la misma aunque, en vez de considerar espines estáticos, éstos pueden cambiar de lugar cada cierto tiempo si a su alrededor el número de vecinos de valor opuesto supera una cierta cantidad.

2.2. Algunos resultados de la física estadística

El estudio de la física estadística es muy extenso y el espacio es limitado, por lo que aquí únicamente se exponen los resultados que usaremos a lo largo del texto. Para una profundización en el tema acudir a [6] y [7].

2.2.1. Propiedades macroscópicas de un sistema

La idea central de la física estadística es describir un sistema macroscópico mediante propiedades termodinámicas, que se derivan de promedios estadísticos sobre las configuraciones del sistema, es decir, sobre cada uno de sus posibles estados microscópicos. Puesto que trataremos con un sistema con un número de partículas N fijo y una temperatura T fija también, consideramos el colectivo canónico. En este colectivo, la probabilidad de que el sistema a una T dada esté en una configuración determinada de energía E es proporcional al factor de Boltzmann:

$$P_E = \frac{e^{-\beta E}}{\sum_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}}} = \frac{e^{-\beta E}}{\mathcal{Z}} \quad (2.1)$$

donde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, con k_B la constante de Boltzmann, y $\mathcal{Z} = \sum_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}}$ se define como la función de partición, que es simplemente el factor de normalización de la probabilidad (el índice ν recorre todas las posibles configuraciones del sistema).

Se puede demostrar que a partir de la función de partición se pueden obtener todas las funciones termodinámicas, lo que implica que, conociendo

\mathcal{Z} , tenemos una descripción completa del sistema. La relación entre la termodinámica y la física estadística viene determinada por la energía libre de Helmholtz \mathcal{F} en el colectivo canónico, que se deriva de \mathcal{Z} mediante:

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln \mathcal{Z} \quad (2.2)$$

Veamos algunas de las funciones que podemos obtener de la \mathcal{F} (las que nos van a interesar). Primero tenemos la energía del sistema U y el calor específico a volumen constante C_v . La energía (macroscópica) se calcula como

$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_{\nu} E_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}}}{\mathcal{Z}} = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta} = \frac{\partial \beta \mathcal{F}}{\partial \beta} \quad (2.3)$$

Por otro lado, el calor específico a volumen constante viene definido por:

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v = \left(\frac{\partial U}{\partial \beta} \right)_v \frac{dT}{d\beta} \quad (2.4)$$

Si introducimos la ecuación (2.3), obtenemos:

$$C_v = -\frac{1}{k_B \beta^2} \left(\frac{\partial^2 \beta \mathcal{F}}{\partial \beta^2} \right)_v \quad (2.5)$$

Sin embargo, a nosotros nos interesa más una forma que podamos calcular numéricamente más adelante, por lo que, si partimos de la expresión para el promedio de la energía:

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{\sum_{\nu} E_{\nu} e^{-\frac{E_{\nu}}{k_B T}}}{\mathcal{Z}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\nu} E_{\nu} e^{-\frac{E_{\nu}}{k_B T}} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{\mathcal{Z}} \right) \sum_{\nu} E_{\nu} e^{-\frac{E_{\nu}}{k_B T}} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\sum_{\nu} E_{\nu}^2 e^{-\frac{E_{\nu}}{k_B T}}}{\mathcal{Z}} - \\ &- \frac{1}{k_B T^2} \left(\frac{\sum_{\nu} E_{\nu} e^{-\frac{E_{\nu}}{k_B T}}}{\mathcal{Z}} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

Ahora bien, estas expresiones se corresponden con $\langle E^2 \rangle$ y $\langle E \rangle^2$, por lo que el calor específico queda en la forma más útil:

$$C_v = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (2.7)$$

En lo que respecta a las funciones relativas al magnetismo, las más significativas son la magnetización M , que es la suma de todos los momentos de las partículas, y la susceptibilidad magnética χ . Siendo B el campo magnético aplicado, entonces:

$$M (= \langle M \rangle) = \frac{\sum_{\nu} M_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}}}{\mathcal{Z}} = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \right)_T \quad (2.8)$$

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_T \quad (2.9)$$

Llevando a cabo un desarrollo similar al realizado con el calor específico, llegamos a la siguiente expresión para la susceptibilidad magnética:

$$\chi = \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2) \quad (2.10)$$

2.2.2. Transiciones de fase

Físicamente, una transición de fase se corresponde con un cambio drástico (es decir, un comportamiento no suave) en alguna propiedad del sistema al variar uno de sus parámetros, como la temperatura. Un caso bien conocido son los cambios entre estados de agregación de la materia: sólido, líquido y gas. Por ejemplo, el agua se encuentra en forma de hielo por debajo de $T=0^{\circ}\text{C}$, y en forma de vapor para temperaturas superiores a 100°C , estando en una fase líquida en el rango intermedio. Otro ejemplo muy estudiado en la física es el de la magnetización. Algunos metales, en principio sin ningún tipo de ordenamiento magnético, pueden presentar una magnetización no nula por debajo de una cierta temperatura crítica, también conocida como temperatura de Curie, incluso en ausencia de campo magnético externo. El origen reside en un efecto cuántico conocido por “interacción de intercambio”, que está relacionado con el solapamiento de la función de onda de los electrones. Este efecto compite con las fluctuaciones térmicas que tienden a destruir el orden. Básicamente, a una T suficientemente baja el efecto cuántico se impone frente al desorden térmico, mientras que, si vamos aumentando

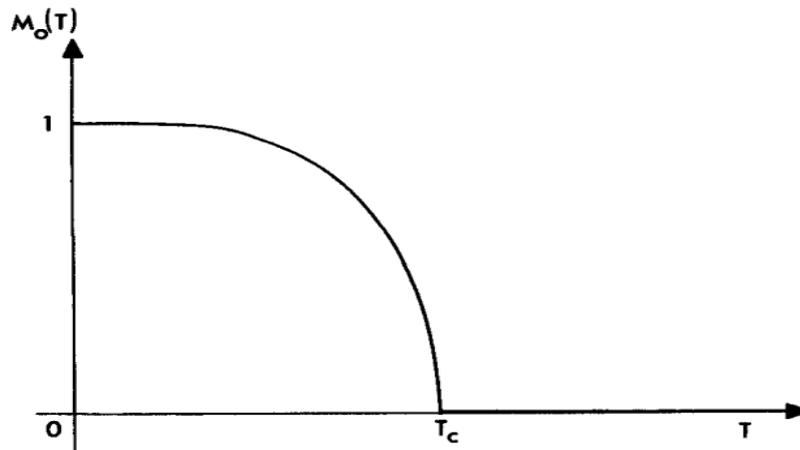


Figura 2.1: Magnetización espontánea por espín, con un campo magnético externo nulo, en función de la temperatura

la temperatura, llega un momento en el que las fluctuaciones térmicas son tan fuertes que anulan el efecto, desapareciendo la magnetización. Una curva típica de la magnetización en este caso se puede observar en la Figura 2.1.

Hay dos clases de transiciones de fase:

- De primer orden (discontinua): se observa un salto en la primera derivada del potencial termodinámico, que en el colectivo canónico es la energía de Helmholtz \mathcal{F} , para un determinado valor del parámetro.
- De segundo orden (continua): aunque todas las funciones termodinámicas son continuas, se observa un salto o una divergencia en la derivada segunda de \mathcal{F} para un valor del parámetro. Este es el caso de la transición entre ferromagnetismo y paramagnetismo, como se puede apreciar en la Figura 2.1.

Estos cambios repentinos en la escala macroscópica se pueden observar también en otros sistemas complejos. En el área de la biología, por ejemplo, cuando suceden extinciones masivas de una especie; en las finanzas, con las burbujas especulativas o las quiebras; o en el área social, cuando aparecen súbitamente depresiones sociales.

Existen infinidad de modelos que tratan de averiguar cómo se producen estos cambios bruscos, pero el primer modelo en lograr un avance al respecto, en el ámbito de la física, fue el de Ising, el cual se expone a continuación.

2.3. El modelo de Ising

El modelo supone un sistema de N partículas, que cuentan con un momento magnético intrínseco no nulo, dispuestas en los nodos de una red de estructura regular, considerando en este trabajo una cadena para el caso unidimensional y una red cuadrada en el bidimensional. En principio, dichos momentos pueden apuntar en cualquier dirección, pero el modelo lo simplifica considerando que únicamente pueden orientarse según el eje Z , estando con una orientación positiva o negativa, esto es, apuntando hacia “arriba” o hacia “abajo”, respectivamente. A esta propiedad de la orientación de una partícula la llamaremos, en clara analogía con la propiedad cuántica, “espín”, y puede tomar como valores $\sigma = \pm 1$ (el momento es $\mu_z = g_L \mu_B s$ con $g_L = 2$ y $s = \pm \frac{1}{2}$, lo que podemos expresar como $\mu_z = \mu_B \sigma$, con $\sigma = \pm 1$). Así, a lo largo del trabajo llamaremos espines a las partículas, teniendo en cuenta que nos referimos a esta propiedad.

Los espines pueden estar orientados de forma aleatoria dando lugar a una magnetización nula (paramagnetismo), pero también pueden estar orientados de forma que tengan un cierto orden, dando lugar a una magnetización neta (ferromagnetismo), incluso en la ausencia de campo magnético, como ya se ha visto en la Figura 2.1. Esto es debido a la forma que tiene el Hamiltoniano, en el cual se supone una interacción entre los espines que implica una preferencia de los mismos a estar alineados, es decir, el alineamiento de los espines vecinos se ve favorecido energéticamente. El Hamiltoniano que describe esta situación es el siguiente:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{B} \quad (2.11)$$

donde J , que se considera positiva para emular la interacción ferromagnética de la que ya se ha hablado (si $J < 0$, nos encontraríamos ante un sistema antiferromagnético, donde se favorece la alineación opuesta entre espines), es la constante de interacción entre espines, y el símbolo $\langle i, j \rangle$ indica que la suma se realiza a los próximos vecinos únicamente y contando cada pareja una sola vez. El segundo término es la contribución energética del campo magnético externo aplicado, siendo la energía de una partícula con momento magnético $\vec{\mu}$ igual a $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Dado que consideramos los momentos magnéticos en la dirección del eje Z , al igual que el campo magnético uniforme, si tomamos como unidad básica de magnetización el magnetón de Bohr μ_B obtenemos la siguiente forma del Hamiltoniano:



Figura 2.2: Cadena de espines en 1D.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \quad (2.12)$$

Debemos, como ya vimos en la anterior sección, calcular la función de partición a partir de \mathcal{H} para resolver el sistema. En los siguientes apartados veremos las soluciones para el caso unidimensional y el bidimensional, y analizaremos las propiedades que se derivan de ellas.

2.3.1. Modelo de Ising en 1D

Mostramos la resolución por simple interés histórico, y además porque la técnica de matriz de transferencia que vamos a introducir es la que luego se emplea en la resolución del modelo 2D.

Consideremos una cadena de N partículas (Figura 2.2). El Hamiltoniano será, teniendo en cuenta que debido a las condiciones de contorno periódicas $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ (como veremos más adelante):

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_{i=1}^N \sigma_i = - \sum_{i=1}^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (2.13)$$

La función de partición vendrá dada entonces por la expresión:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta \sum_{i=1}^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]} \quad (2.14)$$

La exponencial en este caso se puede factorizar, de la forma:

$$e^{\beta \sum_{i=1}^N [J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{B}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})]} = \prod_{i=1}^N e^{\beta [J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{B}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})]} \quad (2.15)$$

Llegados a este punto, conviene definir la matriz de transferencia

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-B)} \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

que viene a representar cada una de las 4 situaciones que puede tomar la exponencial que aparece en el productorio en la base $\{|1\rangle, |-1\rangle\}$ (empleando la notación de Dirac). Los elementos serán $P_{11} = \langle 1 | \mathbf{P} | 1 \rangle$, $P_{21} = \langle -1 | \mathbf{P} | 1 \rangle$, $P_{12} = \langle 1 | \mathbf{P} | -1 \rangle$ y $P_{22} = \langle -1 | \mathbf{P} | -1 \rangle$. Obtenemos así:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle \sigma_1 | \mathbf{P} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \mathbf{P} | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_{N-1} | \mathbf{P} | \sigma_N \rangle \langle \sigma_N | \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle \quad (2.17)$$

La notación de Dirac nos es muy útil porque podemos hacer uso de la relación de clausura $\sum_{\sigma} |\sigma\rangle \langle \sigma| = \mathbf{I}$, donde la suma se realiza a todos los vectores de la base, es decir, $|1\rangle$ y $|-1\rangle$. Esto nos permite hacer el siguiente paso:

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \cdots \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1 | \mathbf{P} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \mathbf{P} | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_{N-1} | \mathbf{P} | \sigma_N \rangle \langle \sigma_N | \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle = \\ & = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_3} \cdots \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1 | \mathbf{P}^2 | \sigma_3 \rangle \langle \sigma_3 | \mathbf{P} | \sigma_4 \rangle \cdots \langle \sigma_{N-1} | \mathbf{P} | \sigma_N \rangle \langle \sigma_N | \mathbf{P} | \sigma_1 \rangle \end{aligned} \quad (2.18)$$

Entonces, realizando este paso N veces, llegamos a:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1 | \mathbf{P}^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr}(\mathbf{P}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (2.19)$$

con λ_1 y λ_2 los autovalores de la matriz de transferencia. Encontramos pues que únicamente tenemos que diagonalizar \mathbf{P} para resolver el problema:

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(J+B)} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-B)} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (2.20)$$

$$\lambda^2 - 2\lambda e^{\beta J} \cosh(\beta B) + 2 \sinh(2\lambda J) = 0 \quad (2.21)$$

Tras unas pocas operaciones se obtiene la solución para esta ecuación:

$$\lambda = e^{\beta J} \cosh(\beta B) \pm \sqrt{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J} \sinh^2(\beta B)} \quad (2.22)$$

Tomando λ_1 como el autovalor con el signo positivo, tendremos que $\lambda_1 > \lambda_2$, lo que implica que $\lambda_2/\lambda_1 < 1$. Así, la energía libre de Helmholtz queda:

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln(\lambda_1^N + \lambda_2^N) = -k_B T \left\{ N \ln \lambda_1 + \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \right\} \quad (2.23)$$

En el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, por lo que $\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N \rightarrow 0$, obteniendo:

$$\mathcal{F} = -N k_B T \ln \left[e^{\beta J} \cosh(\beta B) + \sqrt{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J} \sinh^2(\beta B)} \right] \quad (2.24)$$

La propiedad que más nos interesa para comprobar la existencia de una transición de fase es la magnetización, que podemos calcular ahora que tenemos la expresión para \mathcal{F} :

$$M = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \right)_T = N \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta B)}{\sqrt{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J} \sinh^2(\beta B)}} \quad (2.25)$$

Según la expresión (2.25), concluimos que, para β finita y $B = 0$, la magnetización por espín m es 0, por lo que no se da ninguna magnetización espontánea y, por tanto, no hay transición de fase para ninguna $T \neq 0$. Sin embargo, a $T = 0$ la m vale para cualquier B su valor de saturación, $m = \pm 1$. Es decir, en realidad existe una transición de fase, pero la T_c se corresponde con el cero absoluto.

2.3.2. Modelo de Ising en 2D

El modelo bidimensional fue resuelto por primera vez usando la técnica de matriz de transferencia por L. Onsager [3] con campo magnético nulo y por C. Yang [8] en presencia de éste. Posteriormente fue resuelto por diferentes autores usando distintas técnicas de cálculo. En cualquiera de ellas, la resolución es muchísimo más complicada que en el caso unidimensional, y se queda fuera del alcance de este trabajo. Puesto que nos centraremos en el caso de ausencia de campo, presentaremos sólo los resultados correspondientes [6].

Se obtiene la siguiente expresión para la magnetización:

$$m = \begin{cases} [1 - \{\sinh(2\beta J)\}^{-4}]^{1/8} & \text{si } T \leq T_c \\ 0 & \text{si } T \geq T_c \end{cases} \quad (2.26)$$

Para encontrar la temperatura crítica debemos ver dónde se hace 0 la magnetización, es decir:

$$\sinh\left(2\frac{J}{k_B T_c}\right) = 1 \Rightarrow \frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1) \quad (2.27)$$

Empleando unidades tales que $J = 1$ y $k_B = 1$, obtenemos:

$$T_c = 2 \ln^{-1}(1 + \sqrt{2}) \simeq 2.269 \quad (2.28)$$

Las expresiones para el calor y la susceptibilidad son considerablemente más complejas, de forma que nos centraremos en la forma que tienen las funciones en las proximidades de la temperatura crítica, que son con las que luego ajustaremos los datos obtenidos en las simulaciones:

$$m \approx \left\{ \frac{8\sqrt{2}}{T_c} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) \right\}^{1/8} \simeq 1.2224 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1/8} \quad (2.29)$$

$$c \approx -0.4945 \ln \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right| + cte \quad (2.30)$$

$$\frac{\chi}{N} \approx \frac{1}{T_c} \begin{cases} C_+ \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-7/4} & \text{si } T \geq T_c \\ C_- \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-7/4} & \text{si } T \leq T_c \end{cases} \quad (2.31)$$

con $C_+ = 0.96258$ y $C_- = 0.02554$.

Se puede demostrar que cerca de la temperatura crítica una función termodinámica $G(T)$ se comporta como una ley de potencias, mediante la siguiente forma:

$$G(T) \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^d \quad (2.32)$$

donde el exponente d recibe el nombre de “exponente crítico” y es distinto para cada función. Éstos son de gran importancia, ya que se cree que tienen la propiedad de la universalidad: se ha comprobado que numerosos sistemas físicos, muy diferentes entre sí en principio, se comportan cerca del punto crítico como leyes de potencias con exponentes críticos iguales. Estos exponentes dependen de unos pocos factores, tales como la dimensionalidad del problema o el rango de interacción entre las partículas. Por eso es tan interesante estudiar el modelo de Ising en 2D: si conocemos sus exponentes críticos podremos saber el comportamiento de cualquier otro sistema bidimensional análogo cerca del punto crítico.

En vista de las formulas anteriores, los exponentes teóricos son:

Función	Magnetización	Calor	Susceptibilidad
Exponente crítico	$\beta = 1/8$	$\alpha = 0$	$\gamma = -7/4$

donde el exponente correspondiente al calor específico es 0 debido a que presenta una divergencia de tipo logarítmica.

Capítulo 3

Estadística computacional

Antes de pasar a los resultados obtenidos, es conveniente explicar ciertos aspectos computacionales en relación al modo en que debemos estudiar un sistema estadístico mediante un ordenador.

3.1. Cadenas de Markov

Una cadena de Markov es una sucesión de configuraciones en la cual, en cada paso, el sistema puede saltar de su configuración actual a una nueva con una cierta probabilidad de transición, que sólo depende de la configuración actual (es decir, no influye la historia del proceso). Si se escogen dichas probabilidades de una manera apropiada, entonces cada configuración aparecerá, después de un tiempo de equilibración, con la frecuencia deseada, que en nuestro caso viene dada por el factor de Boltzmann ya que queremos un sistema en equilibrio termodinámico. Conviene aclarar que aquí “tiempo” se refiere a los pasos de la simulación, y no a tiempo real.

La probabilidad de estar en la configuración μ en el tiempo t la denotamos por $P(\mu, t)$. Nuestra intención es tener un sistema en equilibrio, por lo que $P(\mu, t)$ debe ser invariante frente al tiempo. Sea $W(\mu \rightarrow \nu)$ la probabilidad de transición por unidad de tiempo de ir de μ a ν , entonces la probabilidad de estar en μ en un instante $t + 1$ será igual a la probabilidad de estar en μ en el instante anterior t más el ritmo al que entra menos el ritmo al que sale de la configuración μ :

$$P(\mu, t + 1) = P(\mu, t) + \sum_{\nu} [W(\nu \rightarrow \mu)P(\nu, t) - W(\mu \rightarrow \nu)P(\mu, t)] \quad (3.1)$$

Para obtener la probabilidad de equilibrio $\lim_{t \rightarrow \infty} P(\mu, t) = p(\mu)$ debemos igualar a 0 el término que aparece dentro del sumatorio en la ecuación (3.1), condición que recibe el nombre de “balance detallado”.

3.2. Ergodicidad y balance detallado

El sistema tiene que satisfacer dos condiciones para que la cadena de Markov converja al equilibrio termodinámico. La primera es conocida como ergodicidad, que implica que cualquier estado del sistema debe poder ser accesible desde otro cualquiera. En realidad, hay casos en los que la probabilidad de transición entre dos estados μ y ν es 0, pero el principio de ergodicidad requiere que exista un camino a través de diferentes estados con ratios de transición no nulos que conecte estos dos considerados, como, por ejemplo:

$$\mu \rightarrow \gamma \rightarrow \delta \rightarrow \dots \rightarrow \nu \quad (3.2)$$

La otra condición necesaria es la del balance detallado, de la que ya hemos hablado con anterioridad. Para obtener la distribución de Boltzmann $p(\mu) = \frac{e^{-\beta E_{\mu}}}{Z}$, que es la que en nuestro caso buscamos, la condición se transforma en:

$$\frac{W(\mu \rightarrow \nu)}{W(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p(\nu)}{p(\mu)} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} = e^{-\beta \Delta E} \quad (3.3)$$

donde $\Delta E = E_{\nu} - E_{\mu}$ es la diferencia de energía entre las configuraciones final e inicial.

Esto sólo da cuenta del ratio de las W , teniendo cierta libertad a la hora de especificar las probabilidades de transición.

3.3. Algoritmo de Metrópolis

Podemos separar las probabilidades de transición como:

$$W(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) \quad (3.4)$$

donde $g(\mu \rightarrow \nu)$ es la probabilidad de selección y $A(\mu \rightarrow \nu)$ el ratio de aceptación. La primera nos dice qué estados pueden generarse por el algoritmo a partir de un estado inicial dado. En nuestro caso, elegimos un espín de los N totales aleatoriamente, por lo que $g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}$ si los estados difieren en un sólo espín, mientras que $g(\mu \rightarrow \nu) = 0$ de otro modo. La segunda es la fracción de ocasiones en las que la transición sucede, y en el algoritmo de Metrópolis se elige:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{si } E_\nu > E_\mu \\ 1 & \text{de otra manera} \end{cases} \quad (3.5)$$

Entonces, si el cambio de orientación del espín conduce a una configuración de menor energía se acepta siempre. De otra forma, se acepta con una probabilidad proporcional al factor de Boltzmann con una energía igual a la diferencia ΔE entre los estados.

Así, el algoritmo completo de Metrópolis para simular un sistema a temperatura T constante es el siguiente. Lo primero es escoger una configuración inicial del sistema, por ejemplo asignando a cada espín un valor al azar, lo que corresponde a una configuración con una temperatura infinita. Luego, en cada iteración se elige al azar un espín en la red e intentamos voltearlo, convirtiendo la configuración actual σ en una nueva, τ . A continuación comprobamos si aceptamos el cambio, según las reglas de Metrópolis. Para ello calculamos la diferencia de energía ΔE de las configuraciones.

Si $\Delta E \leq 0$ el cambio se acepta siempre. Sin embargo, si $\Delta E > 0$ el cambio se acepta con probabilidad $e^{-\beta\Delta E}$. Esto se puede hacer con un generador de números aleatorios que genera de manera uniforme un número r tal que $0 \leq r < 1$. Si $r < e^{-\beta\Delta E}$, entonces se acepta el volteo del espín. En caso contrario se rechaza el cambio, dejando al sistema en la configuración actual σ . Este proceso se repite millones de veces, de forma que garantizamos que las configuraciones se generan con la probabilidad deseada, correspondiente al equilibrio termodinámico.

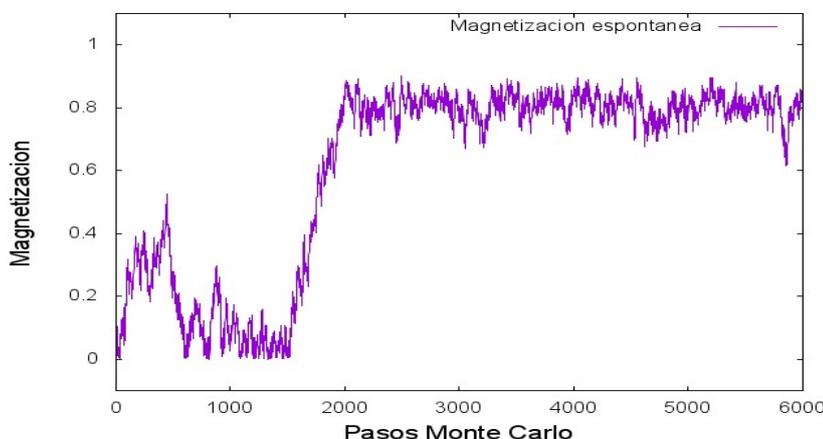


Figura 3.1: Proceso de termalización a una T cercana a T_c . La función oscila finalmente en torno a un valor de equilibrio.

3.4. Promedios para el cálculo de las funciones termodinámicas

Como ya hemos visto en el capítulo 2, las funciones termodinámicas se calculan a través de un promedio sobre las distintas configuraciones posibles del sistema, pesadas con una probabilidad proporcional al factor de Boltzmann. Teniendo en cuenta que, en el caso del modelo de Ising, el número de microestados posibles es 2^N , siendo N el número de partículas, resulta totalmente ridículo intentar calcular esto de forma computacional. Por eso se realiza el proceso de la cadena de Markov con el algoritmo de Metrópolis: sea Q_i una propiedad calculada en cada uno de los M estados generados en la simulación, calculamos una media de la propiedad

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_i \quad (3.6)$$

Con las condiciones que hemos impuesto, tras un tiempo de equilibración (ver Figura 3.1) las configuraciones se generan con las probabilidades correspondientes al factor de Boltzmann, por lo que $Q_M \rightarrow \langle Q \rangle$ cuando $M \rightarrow \infty$. Entonces, después de ese tiempo de termalización, debemos realizar el promedio de la función con las configuraciones que vayamos obteniendo, cuyos valores estarán fluctuando alrededor de cierto valor, y tomamos ese promedio como un estimado de la función termodinámica macroscópica en equilibrio.

Capítulo 4

Resultados para una red de tamaño 100×100

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos para una red 100×100 , así como una pequeña explicación de las partes que puedan parecer más oscuras del código de los programas empleados, escritos en *Fortran* y compilados con el compilador g95. Comparamos además los resultados con los teóricos, comprobando la validez del modelo.

4.1. Simulación

Antes de nada, es necesario aclarar que hemos empleado unidades tales que $J = 1$ y $k_B = 1$, ya que tenerlas en cuenta únicamente complicaría los cálculos sin mayor relevancia. Así, el Hamiltoniano a considerar es el siguiente:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \sigma_{i,j} (\sigma_{i,j+1} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j}) \quad (4.1)$$

Además, es conveniente en este punto explicar algunos de los procesos implicados en el código:

- Debido a que en la aplicación social a un grafo aleatorio no vamos a tener una estructura de red definida, nos es muy útil trabajar con

una lista de N (número total de espines, L^2) elementos, cada uno de los cuales puede tomar el valor 1 o -1 , en vez de con una matriz cuadrada. Además, se ha definido una función *prox_vecinos* que nos da como resultado un vector de cuatro elementos, que corresponden a los 4 próximos vecinos de un espín dado teniendo en cuenta las condiciones de contorno periódicas que veremos más adelante.

Para mejorar la eficiencia del programa, se ha definido una matriz *lista_vecinos* de tamaño $N \times 4$, en la que guardamos para cada espín la posición de sus vecinos dada por la función anterior. Así evitamos llamar a esta función en cada paso del algoritmo, haciéndolo una única vez al principio.

- Se ha tenido en cuenta que la variación de energía en la red cuadrada será, considerando el posible volteo del espín $\sigma_{i,j}$ y que $J = 1$:

$$\Delta E = 2\sigma_{i,j} [\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j+1} + \sigma_{i,j-1}] = 0, \pm 2, \pm 4, \pm 6, \pm 8 \quad (4.2)$$

- El programa *ising* parte de una configuración inicial ordenada en una temperatura baja, y recorre un cierto rango de temperaturas llevando a cabo para cada una de ellas un primer proceso de termalización del sistema, seguido de un proceso de medias para obtener las funciones termodinámicas. Es importante destacar que no hemos partido de una configuración inicial aleatoria para cada T , sino que, para que la equilibración sea mucho más rápida, se toma como configuración inicial la final de la temperatura anterior.

4.2. Consideraciones varias

Hay algunos puntos que debemos tener en cuenta con las simulaciones:

- El tamaño finito del sistema implica que no vamos a poder observar de forma exacta el comportamiento descrito por la teoría, ya que en ella los resultados se obtienen tras imponer el límite termodinámico, es decir, el número N de partículas del sistema tiende a ∞ . Es por eso que la magnetización se suaviza (“rounding effects”), lo que hace que la identificación de la temperatura crítica no sea clara (Figura 4.1). Se ve

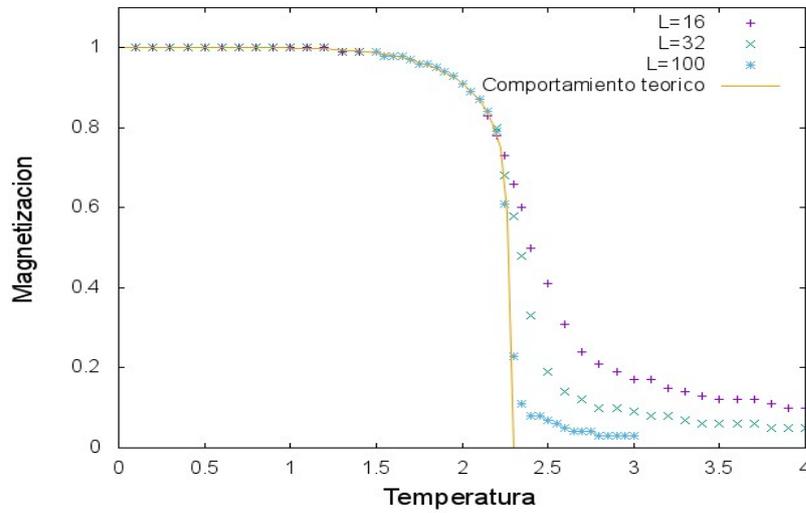


Figura 4.1: Efectos de tamaño finito.

que cuando uno toma un sistema cada vez más grande, las cantidades convergen al resultado exacto.

- Para hacer buenas estadísticas y controlar las simulaciones, la unidad de “tiempo” que se toma es la de “Paso de Monte Carlo” (MCS, por sus siglas en inglés, *Monte Carlo Step*). Queremos dar la oportunidad de cambiar a cada espín de la red una vez en promedio. De esta forma, se define 1 *MCS* como el número de iteraciones necesarias para que cada espín tenga dicha oportunidad. Es decir, si nuestro sistema consta de N espines, 1 *MCS* equivale a realizar N intentos de actualizar la configuración de espines.
- Para evitar efectos de borde debidos a la finitud del sistema consideramos condiciones de contorno periódicas (ver Figura 4.2). En 1D, esto se consigue imponiendo que $\sigma_{N+1} = \sigma_1$, es decir, es como si uniésemos los extremos de la cadena de N espines. En 2D, concretamente en la red cuadrada que consideraremos, el siguiente espín a uno de la frontera se corresponderá con el que se encuentra en la posición opuesta de la red.

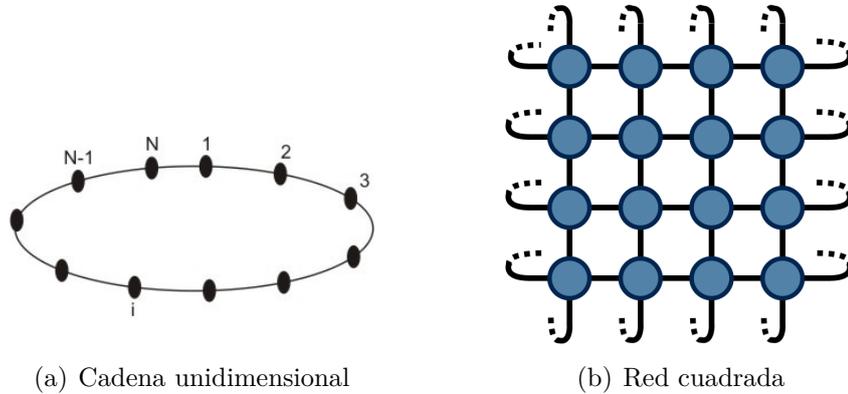


Figura 4.2: Condiciones de contorno periódicas en 1D y 2D.

4.3. Resultados y comparación con la predicción teórica

Como podemos ver en la Figura 4.3, las gráficas se asemejan a lo que habíamos obtenido teóricamente, comprobando que, efectivamente, hay una transición de fase en la zona $2.2 < T < 2.4$. Además, en la zona crítica hemos cogido saltos en la temperatura más cortos para obtener un mayor densidad de puntos.

La magnetización simulada (en valor absoluto) se ajusta perfectamente a la curva teórica por debajo de la T_c , mientras que por encima de ella, como ya se ha comentado antes, influye el efecto del tamaño finito de la red. Se ve además el cambio brusco relacionado con la transición de fase, provocando la aparición de la divergencia en la susceptibilidad en esa zona.

El calor específico también se ajusta considerablemente bien a la curva teórica, y se observa la divergencia correspondiente al cambio brusco de la energía.

Función	Magnetización	Susceptibilidad	Calor
T crítica	2.275 ± 0.001	2.27 ± 0.01	2.268 ± 0.004
Exp crítico calculado	$\beta = 0.126 \pm 0.007$	$\gamma = -1.1 \pm 0.5$	$\alpha = 0$
Exp crítico teórico	$\beta = 0.125$	$\gamma = -1.75$	$\alpha = 0$

Además en la figura y en la tabla superior se aprecian los ajustes de los datos obtenidos en la zona crítica a través de la forma

22CAPÍTULO 4. RESULTADOS PARA UNA RED DE TAMAÑO 100×100

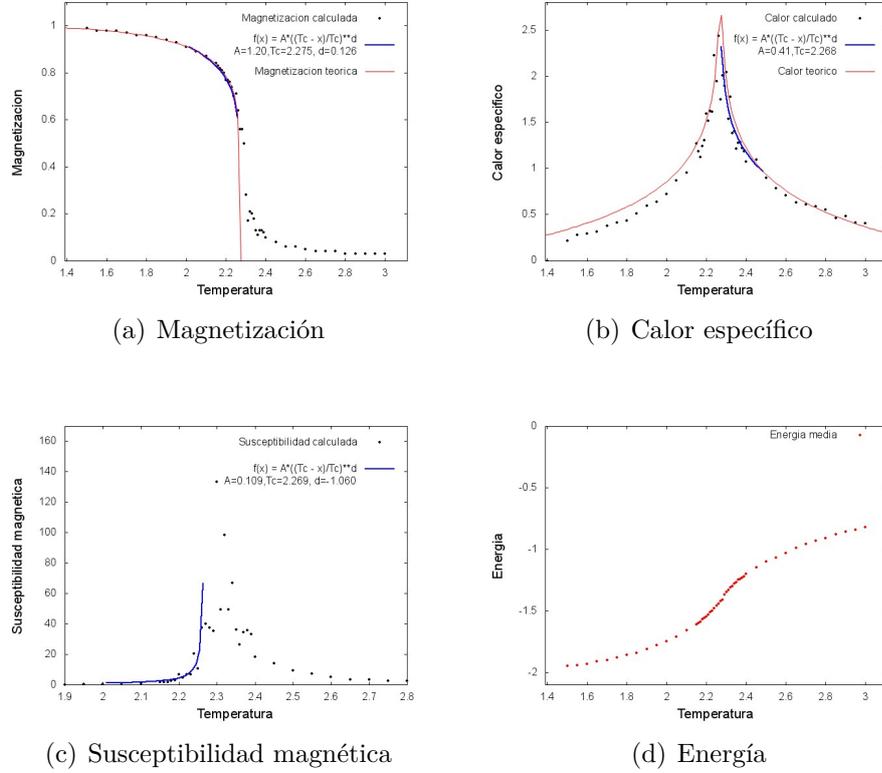


Figura 4.3: Funciones termodinámicas por espín, en unidades arbitrarias, obtenidas por simulación. Se muestra además el ajuste con la función (4.3).

$$G(T) = A \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^d \quad (4.3)$$

para comprobar si se corresponden los exponentes críticos con los predichos por la teoría.

La temperatura crítica obtenida en el caso de la magnetización no se solapa con el valor teórico $T_c \simeq 2.269$, mientras que para la susceptibilidad y el calor sí se solapan, teniendo un error mayor en el primer caso.

Respecto a los exponentes críticos, se puede observar que el de la magnetización coincide perfectamente con el valor teórico. Sin embargo, el exponente correspondiente a la susceptibilidad no se solapa con el valor predicho por la teoría y tiene un error muy alto. Probablemente sea necesario calcular una mayor densidad de puntos en la zona crítica para obtener mejores resultados y realizar un mayor número de iteraciones para reducir las fluctuaciones, pero son unos valores aceptables.

Capítulo 5

Aplicaciones: Modelo de Sznajd en sociología

El campo de la simulación y de los correspondientes modelos que permiten describir los comportamientos y evolución de las comunidades sociales es algo relativamente nuevo, dándose la mayoría de trabajos sobre el tema en los últimos años. Este repentino interés viene motivado en su mayor parte por la evolución de Internet y la transición que esto conlleva hacia la llamada “aldea global”, es decir, el hecho de que todo el mundo esté “conectado”. A raíz de este cambio han surgido las redes sociales, una herramienta que nos permite compartir nuestros pensamientos y opiniones libremente con el resto del mundo y que ha despertado una enorme fascinación en el mundo científico, dando lugar a diferentes ramas de estudio de las cuales nos centraremos en la dinámica de opiniones.

A continuación estudiaremos uno de los primeros modelos en este campo, el modelo de Sznajd [1], en una red cuadrada de “agentes” (así llamaremos a los “espines”: ya no son partículas sino individuos que interactúan entre sí), y luego intentaremos extender su estudio a una red con estructura pseudoaleatoria proporcionada por la función *RandomGraph* del programa *Mathematica*.

5.1. Introducción

La dinámica de opiniones se encarga de estudiar cómo se propaga una opinión en un grupo como una red social, y se plantea como un gran reto debido a la gran cantidad de variables que pueden llegar a intervenir (la impredecibilidad es algo inherente al ser humano, fruto de un conjunto de numerosos y complejos procesos psicológicos, todavía desconocidos en su gran mayoría). Por eso, lo único que se puede hacer es proponer modelos que tengan en cuenta sólo ciertos aspectos y luego en base a ellos desarrollar otros mejores con determinadas modificaciones.

El primer modelo de dinámica de opiniones, diseñado por un físico, fue el propuesto por W. Weidlich [9] en 1971. En ese mismo artículo contempló también una aplicación del modelo de Ising en este campo: el acoplamiento entre espines representa el grado de inclinación de cada individuo a adoptar la postura de los demás, el campo magnético era el equivalente a la mayoría cultural o la propaganda y la temperatura se identificaba con el grado de presión social ejercida sobre el individuo (una T grande viene a representar una “sociedad liberal”, mientras que una T pequeña representa una “sociedad totalitaria”). Además, en modelos posteriores se toman campos individuales para representar la orientación o preferencia de cada agente respecto al tema sobre el que tomar una decisión. Dependiendo de la intensidad de estos campos, el sistema puede llegar a una situación final en la que se alcanza un consenso total hacia una de las dos posiciones, o incluso una situación en la que ambas opiniones coexisten.

A partir de aquel momento empezaron a darse numerosos modelos que tenían diferentes aspectos en cuenta, pero en este trabajo nos enfocamos en el modelo de Sznajd, del cual hablaremos a continuación.

5.2. Modelo de Sznajd y simulación en red cuadrada

En el artículo [1], publicado en 2000, K. Sznajd-Weron y J. Sznajd propusieron un modelo muy simple, que luego sería conocido como Modelo de Sznajd, cuyo objetivo era investigar cómo se expanden las opiniones en una sociedad. Consideraban una cadena de agentes interaccionantes descritos por una variable de espín como en Ising, que representa una situación binaria (1



Figura 5.1: Configuración de los espines en las dos situaciones finales posibles.

para sí, -1 para no, por ejemplo). La diferencia más importante con el modelo de Ising es el sentido en el que la información fluye. En Ising, un espín cambiaba influenciado por sus vecinos. En Sznajd, al contrario, un grupo de dos espines es el que influye sobre sus vecinos. Además, cabe destacar que en este modelo no tenemos una temperatura ni es posible definir una energía global del sistema, al contrario que en el de Ising.

Motivados por la premisa “Unidos vencemos, divididos fracasamos”, dichos autores propusieron las siguientes reglas de interacción para una cadena:

1. En cada paso de tiempo se escogen dos espines vecinos S_i y S_{i+1} , que cambiarán las opiniones de sus próximos vecinos S_{i-1} y S_{i+2} .
2. Si $S_i = S_{i+1}$, entonces $S_{i-1} = S_{i+2} = S_i$.
3. Si $S_i = -S_{i+1}$, entonces $S_{i-1} = S_{i+1}$ y $S_{i+2} = S_i$.

Con estas reglas, el sistema siempre termina en una de dos situaciones finales (ver Figura 5.1): un consenso, análogo al estado ferromagnético en física, o un estancamiento, análogo al estado antiferromagnético.

La segunda regla describe un fenómeno que se conoce como validación social, que ilustra la tendencia por parte del ser humano a verse influenciado por lo que hacen los demás a su alrededor. Existen muchos experimentos sociales que han confirmado esta tendencia hacia la idea de “lo que haga la mayoría”, como por ejemplo uno en el que una persona se ponía en medio de la calle a mirar hacia lo alto de un edificio y casi nadie le hacía caso, mientras que si eran varias las personas que miraban entonces mucha gente se les unía [10]. Por lo tanto, no resulta descabellado intentar modelizar este comportamiento de forma sencilla como se hace en el modelo de Sznajd: un grupo de dos espines con una misma opinión la difunden a sus vecinos.

En lo que respecta a las variables de espín binarias, podríamos pensar que un modelo como este es muy poco realista, ya que en muchos casos algo no es blanco o negro, sino que existen muchas posiciones intermedias. Sin embargo, lo cierto es que hay muchos ejemplos del primer tipo, desde la postura del

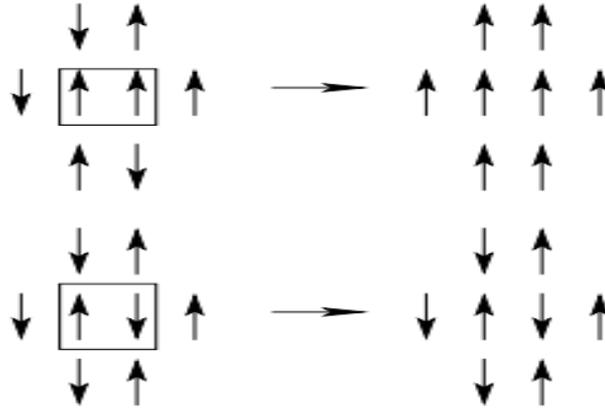


Figura 5.2: Modelo de Sznajd A en una red cuadrada. Una pareja de espines que coinciden convencen a sus vecinos (arriba), mientras que si no coinciden no influyen de ninguna manera (abajo). [12]

sí/no frente a una nueva ley hasta la situación más cotidiana como puede ser elegir con tus amigos entre ir a la playa o a la montaña. Este tipos de opiniones inundan nuestras vidas, por lo que el análisis de tal modelo está plenamente justificado.

Las reglas originales implican ese posible estado final antiferromagnético que hemos comentado, lo cual es un comportamiento poco realista para describir una comunidad. Es por eso que en este trabajo consideraremos una versión del modelo [11], el llamado Sznajd A (ver Figura 5.2), en el que se consideran, en una red cuadrada, interacciones ferromagnéticas únicamente, de forma que no se puede llegar a la situación final correspondiente al antiferromagnetismo. Las reglas a seguir son:

1. En cada paso de tiempo se escogen dos espines vecinos, S_i y S_{i+1} por ejemplo, que cambiarán las opiniones de sus 6 próximos vecinos.
2. Si $S_i = S_{i+1}$, entonces sus próximos vecinos adoptan el valor S_i .
3. Si $S_i = -S_{i+1}$, no se cambia nada.

Con estas reglas siempre se llega a un consenso completo, observándose una suerte de transición de fase, en el sentido de que si comenzamos en una configuración en la cual hay mayoría con un valor $S = 1$ la configuración final será un consenso con una magnetización $m = 1$, mientras que si inicialmente

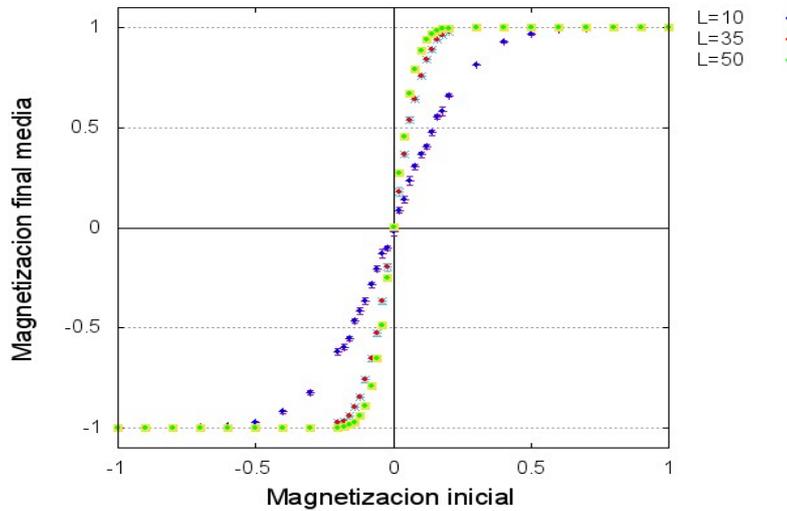


Figura 5.3: Resultado con errores en Y para redes cuadradas de distintos tamaños.

hay una mayoría con el valor $S = -1$ la situación final tendrá el valor $m = -1$.

Es interesante notar que en este modelo no tenemos una T que estudiar como parámetro, por lo que elegimos describir el modelo en función de otros, como la estructura de la red y su tamaño. Por ello hemos definido además un parámetro representativo del sistema, la magnetización inicial por espín, que se calcula como $m_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i$ para la configuración de partida de los espines.

Respecto al código, el programa *sznajd* realiza el siguiente proceso general (subrutina *algoritmo*) para un rango de magnetizaciones iniciales, es decir, las magnetizaciones que tendrán las configuraciones aleatorias iniciales:

1. Obtenemos con la subrutina *conf_inicial* una configuración inicial aleatoria, teniendo en cuenta la magnetización que queremos que tenga (es decir, teniendo en cuenta el número de espines con valor 1 por un lado y -1 por otro). La almacenamos en la variable *s_copia*.
2. Realizamos 1000 simulaciones partiendo en cada una de ellas de la configuración inicial almacenada en *s_copia* y, tras realizar el algoritmo de Sznajd en cada simulación hasta llegar a una magnetización final $m_f = \pm 1$, hacemos una media de la magnetización final contando las veces que ha llegado a un consenso u otro.

3. Realizamos 10 veces el ciclo 1-2 y obtenemos la media y el error para la magnetización final con esos 10 valores.

Los resultados se muestran en la Figura 5.3. El efecto del tamaño finito del sistema se nota también en este modelo, en el sentido que la transición no es brusca. Se ve que cuando la magnetización inicial tiende a 0, hay un 50% de posibilidades de alcanzar cada una de las dos situaciones finales, por lo que, en promedio, la magnetización final se hace 0. Además, se comprueba claramente que a mayor tamaño de la red el resultado tiende a una transición de fase cada vez más abrupta.

Se puede observar igualmente la buena convergencia que posee el algoritmo de Sznajd, ya que los errores obtenidos en la magnetización media son muy pequeños.

Como conclusión, podemos afirmar que, según este modelo, cuanto mayor es la red menos relevancia tiene la magnetización de partida m_0 , es decir, menos tendrá que desviarse de $m_0 = 0$ para llegar a un consenso total.

5.3. Sznajd en grafos aleatorios

Hemos hecho un análisis del modelo de Sznajd en una red cuadrada, pero, si nos fijamos en la Figura 5.4, un grafo aleatorio parece representar de una forma mucho más realista una red social. Es por eso que pasamos ahora a estudiar dicho tipo de redes, analizando lo que ocurre en tres grafos que cuentan con un tamaño diferente y que clasificaremos mediante la distribución de vecinos, es decir, contabilizando el número de nodos que están en contacto con un número determinado de vecinos.

A continuación describimos algunos detalles del código y modificaciones respecto al caso de la red cuadrada, para el grafo de 500 nodos:

- Para obtener el grafo se han empleado las funciones *RandomGraph* y *AdjacencyList* de *Mathematica*, dándole un formato que pueda leer nuestro programa posteriormente.
- Como el número de vecinos es variable para cada espín, definimos una matriz $N \times (N - 1)$ para guardar los vecinos de cada nodo. El programa lee los vecinos de cada espín de forma que asigna en cada fila de la matriz las posiciones correspondientes a los vecinos del espín representado por esa fila, asignando 0 en caso de no haber más vecinos.

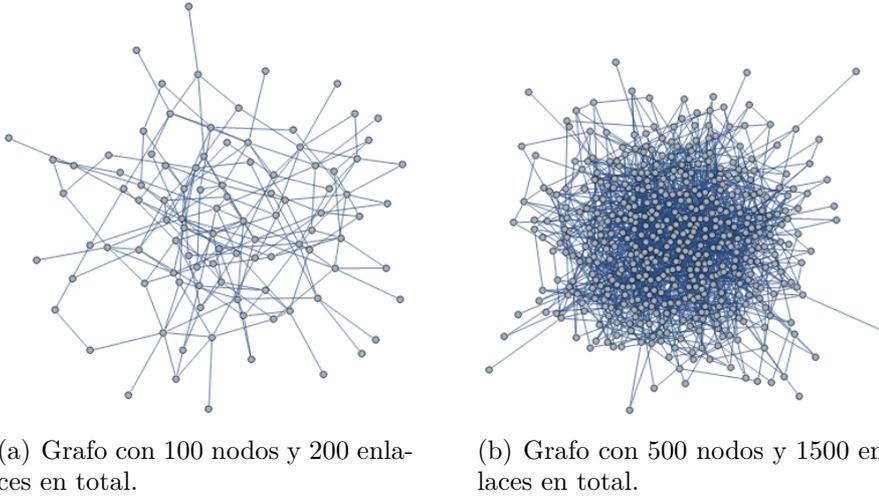


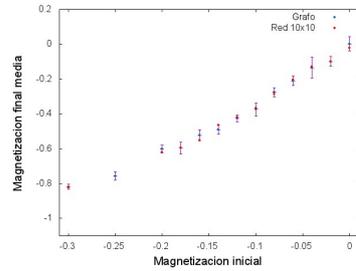
Figura 5.4: Estructura de dos de los grafos a estudiar.

- Otra modificación es la forma de elegir al azar uno de los vecinos del espín considerado. En la red cuadrada se hace cogiendo un número aleatorio aux del 1 al 4, y así se elige el vecino número aux del espín. En el grafo aleatorio tenemos que contar el número de vecinos que tiene un espín para saber qué rango puede tener la variable aux .

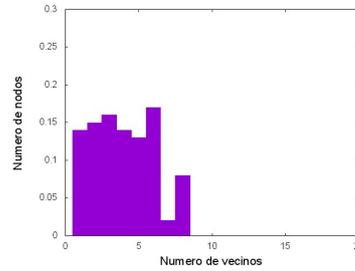
Para estas simulaciones realizaremos un procedimiento análogo al seguido en el apartado anterior. Llevamos a cabo 1000 simulaciones partiendo en cada una de una configuración inicial dada, usando el algoritmo de Sznajd hasta llegar a una magnetización final $m_f = \pm 1$, y hacemos una media de la magnetización final contando las veces que ha llegado a un consenso u otro. Esto lo hacemos 10 veces, para obtener así una media y error para la magnetización final.

Para estudiar el efecto del tamaño y de la distribución de vecinos, haremos el proceso en dos casos distintos. El primero (Figura 5.5) consiste en ir cambiando el número de enlaces en el grafo de 100 nodos y comparar las curvas con las de la red cuadrada de $L=100$. Se observa que a mayor cantidad de vecinos la transición de “suaviza” más, es decir, es menos brusca.

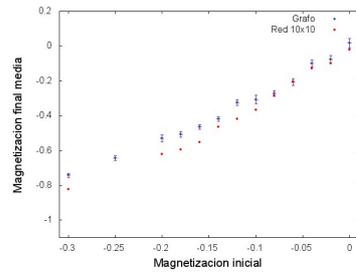
El segundo (Figura 5.6) consiste en estudiar cómo afecta el tamaño del grafo a la transición, observando que a mayor tamaño más se acerca la curva a la transición exacta a pesar de estar considerando unas distribuciones de



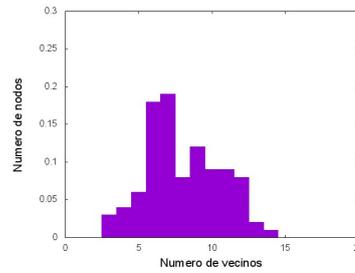
(a) Comparación entre la red cuadrada con $L=10$ y 200 enlaces y el grafo con 200 enlaces.



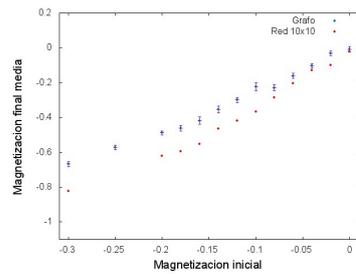
(b) Distribución de vecinos del grafo.



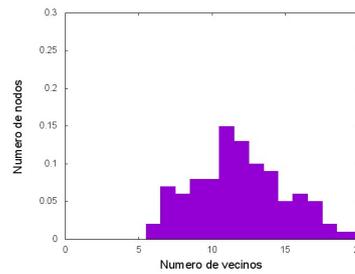
(c) Comparación entre la red cuadrada con $L=10$ y 200 enlaces y el grafo con 400 enlaces.



(d) Distribución de vecinos del grafo.

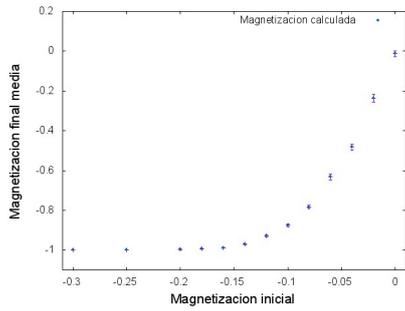


(e) Comparación entre la red cuadrada con $L=10$ y 200 enlaces y el grafo con 600 enlaces.

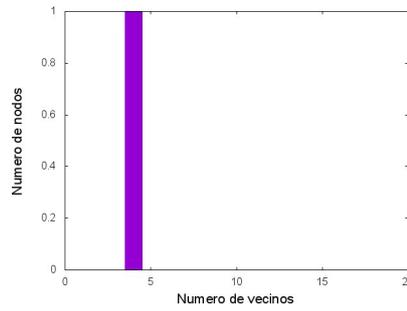


(f) Distribución de vecinos del grafo.

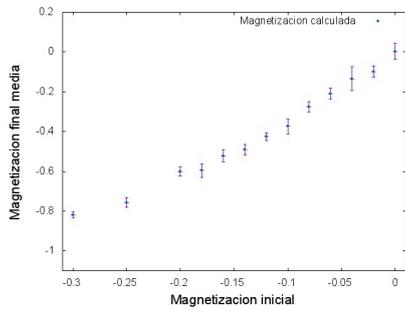
Figura 5.5: Resultados en función de la cantidad de enlaces y, por tanto, la distribución de vecinos, del grafo con 100 nodos.



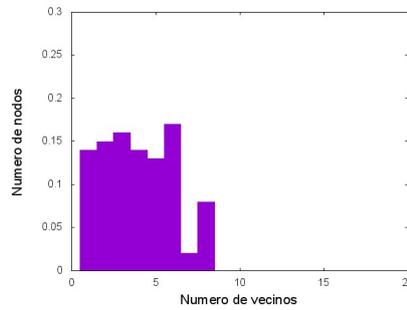
(a) Resultado para la red cuadrada con $L=50$ y 5000 enlaces.



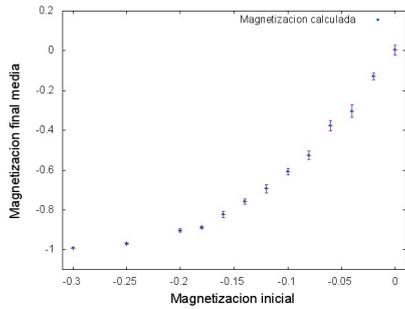
(b) Distribución de vecinos en la red cuadrada.



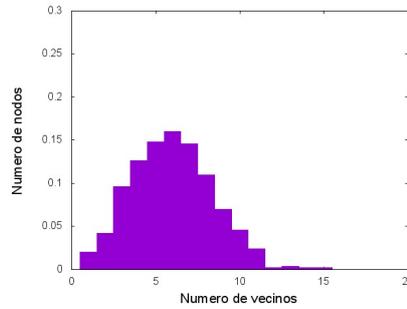
(c) Resultado para el grafo 1: 100 nodos y 200 enlaces.



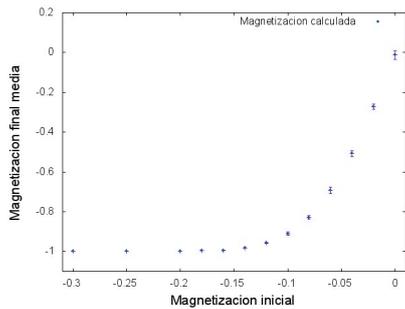
(d) Distribución de vecinos en el grafo 1.



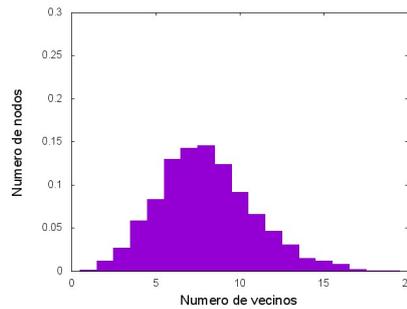
(e) Resultado para el grafo 2: 500 nodos y 1500 enlaces.



(f) Distribución de vecinos en el grafo 2.



(g) Resultado para el grafo 3: 2500 nodos y 10000 enlaces.



(h) Distribución de vecinos en el grafo 3.

Figura 5.6: Resultados en función del tamaño del grafo.

vecinos cada vez más desplazadas hacia la derecha. De este hecho podemos extraer como conclusión que el aspecto que más influye en lo abrupta que es la transición es el tamaño de la red, dándose este comportamiento tanto para una red cuadrada como para un grafo aleatorio.

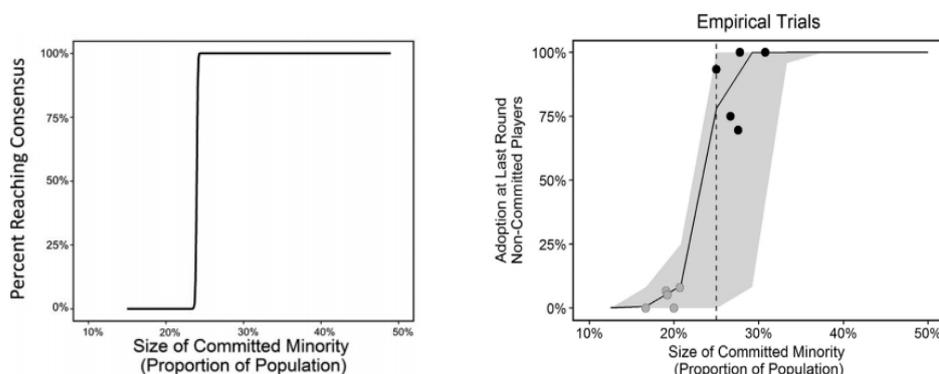
5.4. Masa crítica de las minorías

Un tema que ha sido abordado en los últimos años por los científicos sociales es el del cambio social impulsado por las minorías. Hay numerosos estudios que tratan de poner en evidencia la existencia de lo que denominan “puntos de inflexión”, esto es, pretenden demostrar que si un grupo de personas con una opinión minoritaria alcanza cierto porcentaje umbral del total de la población (“masa crítica”) entonces pueden convencer al resto de la sociedad si están comprometidos con la causa, es decir, si mantienen fijas sus convicciones.

Nosotros nos centraremos en uno publicado muy recientemente ([2]), en el que D. Centola y su equipo realizan una serie de experimentos para intentar entender este papel que pueden jugar las minorías comprometidas a la hora de cambiar las convenciones sociales. Para ello construyeron 10 comunidades con proporciones de activistas comprometidos diferentes (entre un 15 % y un 35 % de la población total), y los resultados se ven en la Figura 5.7.

Se observa que efectivamente existe una masa crítica, con un valor del 25 %. A continuación un fragmento del *abstract* del artículo: “*The findings provide direct empirical demonstration of the existence of a tipping point in the dynamics of changing social conventions. When minority groups reached the critical mass—that is, the critical group size for initiating social change—they were consistently able to overturn the established behavior.*”. Es importante notar además, tal y como destacan los autores, que estos resultados son fruto de una configuración de las reglas sociales determinada y que el valor del 25 % no es en absoluto un valor universal. No podemos olvidarnos de que la realidad es más compleja, habiendo factores como por ejemplo el hecho de que intervenga un gobierno, que es más influyente. Por eso los propios autores mencionan que son necesarios más experimentos teniendo en cuenta diversos ajustes en la forma específica en que interaccionan los agentes.

Por otra parte, hay muchos ejemplos en los que resultaría útil entender este tipo de comportamientos, como el escándalo que se reveló a principios de año sobre la introducción de *bots* en *Twitter* por parte de Rusia para influir en



(a) Predicción teórica del porcentaje de individuos convencidos con éxito frente al porcentaje inicial de la minoría comprometida en una población de 1000 agentes.

(b) Resultados empíricos con proporciones iniciales entre 15% y 30%. La línea sólida representa el punto de masa crítica predicho por el modelo teórico

Figura 5.7: Análisis del punto de inflexión en el cambio de las convenciones sociales. [2]

las elecciones de Estados Unidos de 2016, o los destinados a influir en los votos sobre el *Brexit*. Los autores citan también el caso de China, ya que trabajos recientes han argumentado que el gobierno ha infiltrado a individuos en redes sociales con el objetivo de centrar los diálogos de los ciudadanos en temas que celebran el orgullo nacional, desviando así su atención de los problemas de diferentes colectivos.

Con este estudio en mente, en este apartado se ha pretendido realizar una pequeña simulación para comprobar si el modelo de Sznajd predice este tipo de comportamiento. Para ello tomaremos el grafo con 500 nodos de la Figura 5.4 y haremos un procedimiento análogo al realizado en las simulaciones anteriores: realizamos 500 simulaciones para calcular la magnetización final media, y hacemos esto 5 veces para obtener un valor medio con sus errores. Seguiremos de nuevo el algoritmo de Sznajd, pero con la sutileza de que en esta ocasión consideraremos que la minoría inicial mantiene fija su opinión. Es decir, al calcular una configuración inicial para una m_0 dada, guardamos los agentes cuyo valor sea 1 (la opinión minoritaria comprometida) para que éstos no puedan cambiar de valor bajo ninguna circunstancia. Esto implica que, a no ser que la minoría logre convencer al resto de la sociedad, no se llegará nunca a un consenso.

Entonces, variando el porcentaje inicial de la población que conforma el grupo minoritario, obtenemos el gráfico de la Figura 5.8, que representa la

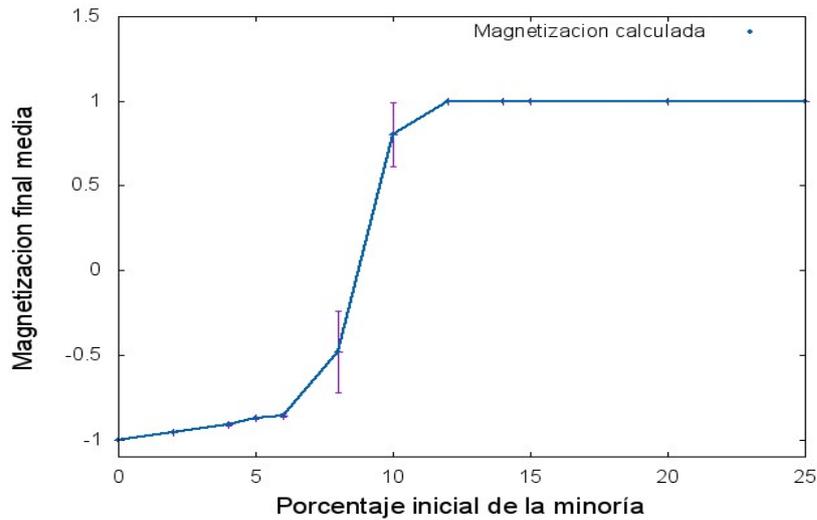


Figura 5.8: Estudio de la masa crítica según el modelo de Sznajd en un grafo aleatorio de 500 nodos.

magnetización final alcanzada y, por tanto, un indicativo de la gente a la que se ha logrado convencer.

Los resultados muestran una masa crítica en torno al 10%. Así, para un porcentaje menor que dicho valor la magnetización final alcanzada es la correspondiente a la población dividida en dos grupos: por un lado la minoría, con valor 1 de la variable de espín, y por otro los individuos partidarios de la convención social, con valor -1. Por otro lado, para valores mayores la magnetización se hace 1 porque la minoría ha conseguido que el resto de individuos cambien de parecer.

En comparación, el valor que hemos obtenido no coincide con el valor que da el artículo, pero esto no debe extrañarnos, ya que es un modelo muy simple que para nada describe con exactitud una sociedad real. Sin embargo, es interesante ver que, a pesar de ser tan básico, el modelo predice efectivamente la existencia de este comportamiento, lo cual incita a seguir desarrollando modelos más complejos tomando como motivación estos resultados.

Capítulo 6

Conclusiones y futuros trabajos

Hemos obtenido las características correspondientes al modelo de Ising en 2D y comprobado que los resultados hallados mediante simulación coinciden relativamente bien con los que predice la teoría.

Nos hemos familiarizado con los problemas que pueden surgir en la programación, como la rapidez de convergencia en función de los criterios que adoptamos o la ganancia de eficiencia del propio código en función de la estructura con la que lo elaboramos.

Además, se ha hecho un pequeño estudio del modelo de Sznajd referente a la dinámica de opiniones en una sociedad como aplicación particular del modelo de Ising, comprobando que, a pesar de ser un modelo muy simple, se obtienen comportamientos interesantes como las transiciones de fase. Se ha mostrado por otra parte la tendencia hacia esta propiedad independientemente de que la red sea cuadrada o que sea un grafo con estructura aleatoria.

Asimismo, se ha conseguido reproducir el experimento de [2] de forma sencilla, obteniendo una masa crítica del 10% que, aunque no coincida con el valor proporcionado por el artículo, despierta el interés de una teoría que explique este fenómeno en unas condiciones más realistas, ya que podría usarse para predecir comportamientos y cambios en la forma de pensar de un país.

En cuanto a formas de extender el trabajo, son muchas las vías que se pueden seguir. Algunas de ellas son:

- En Ising se podría tratar de considerar que la interacción J , en vez de ser constante, dependa de alguna propiedad, como por ejemplo de la

distancia entre los dos espines considerados. Además, se podría tratar de implementar otros algoritmos en vez del de Metrópolis, como el algoritmo de Wolff basado en el volteo de clústeres.

- Tanto en el ámbito de la física como en el de la sociología, sería interesante realizar un estudio de cualquier otro modelo posterior que tenga en cuenta una mayor cantidad de factores (modelo de Potts, modelo de Hegselmann y Krause...)
- Comprobar si se sigue dando la transición de fase en Sznajd considerando otras condiciones, estudiando por ejemplo redes neuronales, cuya estructura va evolucionando (modelizando así el hecho de que continuamente están entrando nuevos usuarios a las redes sociales y formándose nuevos enlaces entre individuos).
- Respecto al estudio de la masa crítica, podría analizarse desde un enfoque un poco más complejo. Un ejemplo sería suponer algunos de los agentes más conservadores, es decir, con mayor tendencia a mantener la opinión mayoritaria de la sociedad, lo cual podría implementarse considerando una cierta probabilidad de que les impongan sus opiniones (por ejemplo, cambiar su opinión con una probabilidad del 75 % en vez del 100 % estando en las condiciones especificadas para que se dé el cambio). Se podría además tratar de introducir factores como el grado de influencia (para simular un gobierno o un individuo muy popular), que podemos obtener con la función *BetweennessCentrality* de *Mathematica*.

Todos los códigos empleados a lo largo del trabajo se encuentran accesibles en la plataforma *ADDI*, junto a la memoria del proyecto.

Bibliografía

- [1] K. Sznajd-Weron y J. Sznajd. *Opinion evolution in closed community*. International Journal of Modern Physics C, **Vol. 11** págs. 1157–1165 (2000).
- [2] D. Centola, J. Becker, D. Brackbill y A. Baronchelli. *Experimental evidence for tipping points in social convention*. Science, **Vol 360** págs. 1116–1119 (2018).
- [3] L. Onsager. *Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition*. Phys. Rev., **Vol 65** págs. 117–149 (1944).
- [4] I. Recio y J. Torres. *Emergence of low noise frustrated states in e/i balanced neural networks*. Neural Networks, **Vol 84** págs. 91–101 (2016).
- [5] T. C. Schelling. *Dynamic models of segregation*. J. Math. Sociol., **Vol 1** págs. 143–186 (1971).
- [6] R. Pathria y P. D. Beale. *Statistical Mechanics, 3ª Ed.* Academic Press (2011).
- [7] C. Kittel y H. Kroemer. *Thermal Physics, 2ª Ed.* W. H. Freeman (1980).
- [8] C. N. Yang. *The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model*. Physical Review, **Vol 85** pág. 808 (1952).
- [9] W. Weidlich. *The statistical description of polarization phenomena in society*. British Journal of Mathematical and Statistical Psychology, **Vol 24** págs. 251–266 (1971).
- [10] S. Milgram, L. Bickman y L. Berkowitz. *Note on the drawing power of crowds of different size*. Journal of Personality and Social Psychology, **Vol 13** págs. 79–82 (1969).

- [11] J. R. Sánchez. *A modified one-dimensional sznajd model*. arXiv preprint cond-mat/0408518 (2004).
- [12] C. Castellano, S. Fortunato y V. Loreto. *Statistical physics of social dynamics*. Rev. Mod. Phys., **Vol 81** págs. 591–646 (2009).
- [13] J. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Clarendon Press (1992).
- [14] H. Gould y J. Tobochnik. *Statistical and Thermal Physics: With Computer Applications*. Princeton University Press (2010).
- [15] J. Sethna. *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters, and Complexity*. Oxford Master Series in Physics. OUP Oxford (2006).
- [16] M. Plischke y B. Bergersen. *Equilibrium Statistical Physics*. World Scientific (2006).
- [17] R. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Dover books on physics. Dover Publications (2007).
- [18] P. Scherer. *Computational Physics: Simulation of Classical and Quantum Systems*. Graduate Texts in Physics. Springer International Publishing (2013).
- [19] M. Jensen. *Computational Physics*. CreateSpace Independent Publishing Platform (2015).
- [20] K. Sznajd-Weron. *Sznajd model and its applications*. arXiv preprint physics/0503239 (2005).