



Calculo teórico de diagramas de fase magnéticos mediante el método de los grupos de renormalización en campo medio (GRCM), realizando ajustes con redes neuronales e implementaciones numéricas

Juan Esteban Bedoya Rodriguez

Universidad del Valle
Ciencias naturales y exactas, Departamento de física
Santiago de Cali, Colombia
2024

Calculo teórico de diagramas de fase magnéticos mediante el método de los grupos de renormalización en campo medio (GRCM), realizando ajustes con redes neuronales e implementaciones numéricas

Juan Esteban Bedoya Rodriguez

Tesis o trabajo de grado presentada(o) como requisito parcial para optar al título de:
magíster en ciencias física

Director(a):

Ph.D. Juan Sebastian Trujillo Hernandez

Ph.D Leon Dario Escobar Diaz

Línea de Investigación:

Transiciones de fase magnéticas

Grupo de Investigación:

Metalurgia Física y Teoría de Transiciones de Fase

Universidad del Valle

Ciencias naturales y exactas, Departamento de física

Santiago de Cali, Colombia

2024

Dedicado a todas aquellas personas que, lloramos cumpliendo ese sueño que creían imposible

Agradecimientos

Quisiera agradecer, primeramente, a Dios y a mi familia, a mi madre y a mi padre, quienes me lo dieron todo y apostaron por mí desde el comienzo. Gracias a ellos por nunca perder la fe en mí. A mi hermana, que sé que, a su manera, me quiere (y yo la amo, pero no le cuenten). A mis tíos, especialmente a mi tío David, por ser una parte fundamental de lo que soy, junto con mi primo Jorge (mi primer amigo).

Además, quiero expresar mi gratitud a todos mis profesores. En particular, al profe León, quien desde el primer momento que vio mi trabajo nunca dejó de apoyarme y vio algo en mí que yo aún no logro entender. Al profe JuanSe, por “adoptarme” y siempre estar dispuesto a ayudarme. Al profe Germán, que fue el primer profesor en creer en mi futuro académico, algo por lo que estoy profundamente agradecido. Al profe Richard y al profe Madroñero, por ser de los mejores profesores que he conocido y por inspirarme a tener grandes aspiraciones.

Por último, quiero agradecer a todas esas personas que estuvieron conmigo en este camino. A mis panas de C: GP, Nicolle, Santiago, Jeuson y Peche. Puede que ya no estemos tan juntos, pero siempre serán una parte importante de mi vida. A Laura, que, incluso desde lejos, siempre me apoya y nunca me ha negado su ayuda. A Aura, quien es lo más cercano que tengo a una mejor amiga. A Batman, con quien siempre pude encontrar una sonrisa y un mal consejo. También quiero agradecer a Paulo, Larga, Román y Pérez, mis amigos más viejos y más cercanos. Sé que estarán ahí para mí, pase lo que pase.

A Todas las personas que mencioné y a las que no, quiero decirles que: ¡YO NO SERIA NADA SIN USTEDES, SINO QUE TODA LA GENTE QUE ESTUVO A MI ALREDEDOR DESDE EL COMIENZO, ALGUNOS SIGUEN HASTA HOY, GRACIAS.... TOTALES!

Resumen

El núcleo de este trabajo se centró en el estudio de los fenómenos magnéticos de los sistemas Fe_pAl_{1-p} y $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$. En ambos casos, se analizó su diagrama de fase magnético, obteniendo un diagrama teórico mediante el método de los grupos de renormalización en campo medio (GRCM). Además, se implementó un ajuste utilizando redes neuronales, marcando la primera aproximación de esta herramienta en este tipo de estudios, con resultados prometedores. En el mejor de los casos, se obtuvieron funciones de costo del orden de 10^{-3} , siendo esta una medida del error entre los datos experimentales y el ajuste obtenido, junto con el comportamiento de la energía de enlace, que concuerda con la realidad física de estos sistemas.

Para el primer sistema estudiado, se implementó un modelo con segundos vecinos que arrojó resultados alentadores tanto en el ajuste como en el comportamiento de la energía de enlace. Finalmente, en este mismo sistema, también se realizó una simulación tipo Monte Carlo basada en los datos obtenidos en este trabajo, lo que permitió corroborar los resultados de manera satisfactoria, ofreciendo una perspectiva prometedora para investigaciones futuras.

Palabras clave: Magnetismo, espines, diagrama de fase, magnetización, renormalización, algoritmo Montecarlo .

Abstract

The core of this work focused on the study of the magnetic phenomena in the Fe_pAl_{1-p} and $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$ systems. In both cases, their magnetic phase diagrams were analyzed, obtaining a theoretical phase diagram through the mean-field renormalization group (MFRG) method. Additionally, a fit using neural networks was implemented, marking the first approximation of this tool in this type of study, yielding promising results. In the best case, cost functions on the order of 10^{-3} were achieved, serving as a measure of the error between the experimental data and the obtained fit, along with the behavior of the bond energy, which aligns with the physical reality of these systems.

For the first system studied, a second-nearest-neighbor model was implemented, yielding encouraging results both in the fit and in the bond energy behavior. Finally, for this same system, a Monte Carlo simulation was also carried out based on the data obtained in this work, which allowed the results to be satisfactorily corroborated, offering a promising outlook for future research.

Keywords: Magnetism, spines, phase diagram, magnetization, renormalization, Montecarlo algorithm

Índice general

Agradecimientos	IV
Resumen	v
1. Introducción	1
1.1. Objetivo	3
1.1.1. Objetivo principal	3
1.1.2. Objetivos específicos	3
2. Marco Teórico	4
2.1. Orígenes y modelos del magnetismo	4
2.1.1. Tipos de magnetismo	9
2.2. Grupos de renormalización en campo medio	14
2.2.1. Grupos de renormalización	15
2.2.2. Método del campo medio	18
2.2.3. Grupos de renormalización en campo medio	20
2.3. Redes neuronales	21
2.4. Simulaciones estocásticas y el algoritmo de Metropolis	24
2.4.1. La simulación de Monte Carlo de sistemas térmicos	24
3. Desarrollo teórico	30
3.1. Implementaciones del método de GRCM	32
3.1.1. Sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$	33
3.1.2. Sistema Fe_pAl_{1-p} en primeros vecinos	36
3.1.3. Sistema Fe_pAl_{1-p} en segundos vecinos	37
3.2. Implementación del algoritmo de Metropolis	41
4. Resultados y discusión	46
4.1. Implementación de la red neuronal	47
4.2. Estudio del sistema Fe_pAl_{1-p} para primeros vecinos	51
4.2.1. Ajuste de ciclo único	51
4.2.2. Ajuste con múltiples iteraciones	53
4.3. Estudio del sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$	55

4.4. Estudio del sistema Fe_pAl_{1-p} para segundos vecinos	59
4.5. Implementación de la simulación Monte Carlo del sistema Fe_pAl_{1-p}	61
5. Conclusiones y recomendaciones	65
5.1. Conclusiones	65
5.2. Perspectivas	66
Appendices	67
A. Ajuste simple del sistema Fe_pAl_{1-p} para primeros vecinos	68
B. Ajuste múltiple del sistema Fe_pAl_{1-p} para primeros vecinos	72
C. Ajuste simple del sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$	78
D. Ajuste múltiple del sistema Fe_pAl_{1-p} para segundos vecinos	81
Referencias	86

Capítulo 1

Introducción

El estudio del magnetismo y sus aplicaciones ha sido, desde hace siglos, una de las principales ramas del conocimiento humano. Desde el primer registro, hace más de 2500 años, cuando se descubrió el comportamiento magnético de la magnetita [1], hasta las interpretaciones cuánticas más modernas, el magnetismo ha dado lugar a múltiples subramas de estudio, que abarcan desde los aspectos teóricos de sus orígenes hasta investigaciones experimentales sobre sus aplicaciones. En esta tesis, nos centraremos en el análisis de ciertas aleaciones magnéticas que destacan por sus características intrínsecas determinadas por su composición, abordando tanto aspectos experimentales como teóricos y de simulación. Específicamente, se trabajará con las aleaciones $Fe_xMn_{0.6-x}Al_{0.4}$ y Fe_xAl_{1-x} .

El estudio de las aleaciones, en general, se considera un gran reto a nivel teórico. Esto se debe a que, al aumentar la cantidad de tipos de átomos en el sistema, también se incrementa el número de posibles interacciones dentro del mismo. Si a esto se le suma que, en general, las dimensiones de los sistemas son muy grandes, surge la necesidad de encontrar métodos que simplifiquen el problema. En respuesta a esto, se desarrollan diversos métodos, tanto computacionales como de mecánica estadística. En esta tesis, en particular, se trabajará con el método de los grupos de renormalización en la aproximación de campo medio (GRCM).

La idea del método de los grupos de renormalización que se utilizará en este proyecto retoma la propuesta de L. P. Kadanoff en 1966 [2], la cual fue posteriormente modificada por J. O. Indekeu, A. Maritan y A. L. Stella en 1982 [3]. Este método consiste en considerar un grupo grande de espines y seleccionar dos subgrupos de ellos, de tamaños N y N' . A partir de sus funciones de estado, es posible obtener una expresión válida en el límite cercano a la transición de fase. Dicha expresión, conocida como relación de recurrencia, establece una condición que debe cumplirse en todos los puntos del sistema. Esta relación se presenta en la ecuación 1.1 y será abordada en detalle en secciones posteriores, donde se explicará con mayor profundidad su derivación y sus implicaciones.

$$\left. \frac{\partial f_N}{\partial b} \right|_{b=0} = \left. \frac{\partial f_{N'}}{\partial b} \right|_{b'=0}, \quad (1.1)$$

Siguiendo con el método y con el objetivo de incorporar el carácter de enlace aleatorio y diluido a la ecuación anterior, se realiza un promedio configuracional. Este se lleva a cabo

mediante una densidad de probabilidad de enlace, la cual, de manera general, describe los tipos de enlace presentes en el sistema, su intensidad y la probabilidad asociada a cada uno. De forma general, esta densidad de probabilidad se expresa como se muestra en la ecuación 1.2, donde m representa el número de interacciones dentro del sistema, p_l es la concentración, y K_l es la energía reescalada del l -ésimo enlace. Esta expresión y sus derivadas se estudiarán con mayor profundidad en el transcurso de este trabajo.

$$P(K_{i,j}) = \sum_l^m p_l \delta(K_{i,j} - K_l), \quad (1.2)$$

Finalmente, al realizar el promedio configuracional mencionado en la ecuación 1.1, se obtiene una expresión válida en el punto fijo de la transición de fase. Esta expresión relaciona las energías de enlace, las concentraciones y la temperatura del sistema, proporcionando una condición que, en teoría, el sistema debe cumplir en sus puntos de transición de fase. Partiendo de esta base, típicamente se busca despejar la temperatura, de modo que se obtenga una ecuación de la forma $T(x_i, J_i(x))$, donde $J_i(x_i)$ representa las energías de enlace y x_i las concentraciones que conforman el sistema. Sin embargo, por lo general, las relaciones resultantes del método GRCM suelen ser irresolubles de forma analítica. Esto obliga a implementar ajustes imponiendo comportamientos arbitrarios al sistema, con el fin de simplificarlo al máximo.

No obstante, en esta tesis se evitarán dichas imposiciones y se propondrá un ajuste libre mediante redes neuronales, lo cual simplifica la resolución de las expresiones mencionadas sin imponer restricciones adicionales al sistema. Las implicaciones de este enfoque, así como los detalles del método, serán discutidos en secciones posteriores.

Además, este trabajo busca expandir lo previamente estudiado en artículos e investigaciones previas [4, 5], incorporando la interacción de segundos vecinos en las aleaciones Fe_xAl_{1-x} . Este enfoque es innovador dentro de este tipo de métodos y, a su vez, coherente con la realidad física del sistema, ya que la existencia de este tipo de interacciones ha sido demostrada en dichos materiales. Estas interacciones son causadas por la presencia de superintercambio indirecto entre átomos, de la forma $Fe-X-Fe$, donde X puede ser un átomo de cobre o de aluminio [6, 7].

Como ya se mencionó, otro concepto importante a tener en cuenta para la realización de este trabajo es el de las implementaciones de redes neuronales. A modo de introducción, podemos entender las redes neuronales, como su nombre lo indica, como la unión de elementos llamados neuronas. Estas neuronas, de manera sencilla, se pueden entender como objetos que reciben datos de entrada a los que se les aplica una función determinada, retornando valores de salida [8]. Este tipo de redes son un ejemplo de lo que se denomina aprendizaje autónomo supervisado, ya que, mediante algoritmos de minimización, se busca obtener los mejores valores en las funciones de cada neurona, dependiendo del propósito que se persiga. En este caso particular, se busca que la red ajuste los datos a partir de una modificación de la norma de mínimos cuadrados, utilizando como función dentro de esta norma la relación de recurrencia suministrada por el método GRCM, con el fin de obtener el mejor comportamiento posible para la energía de enlace de cada sistema. Este concepto se explicará con más detalle en el desarrollo teórico de la presente tesis.

Como ya se mencionó en esta sección, una forma alternativa de abordar el problema de trabajar con aleaciones es mediante simulaciones computacionales. Por ello, en este trabajo, además de realizar aproximaciones teóricas al sistema, se buscará también realizar una aproximación al problema mediante una simulación de tipo estocástica. En concreto, se llevará a cabo una simulación implementando el algoritmo de Metrópolis, tomando como base la energía previamente calculada. La construcción de la red utilizada y la implementación de la simulación se detallarán posteriormente en la sección de desarrollo teórico.

Sintetizando lo ya mencionado, esta tesis busca implementar el método de los Grupos de Renormalización en Campo Medio (GRCM) en los sistemas FeMnAl, FeAl y FeCu, aplicando aproximaciones a primeros vecinos en todos y a segundos vecinos en los dos últimos sistemas. Esto se realizará mediante un ajuste con redes neuronales. Finalmente, se llevará a cabo una simulación únicamente del sistema FeAl, utilizando como base el algoritmo de Metrópolis y la energía de enlace obtenida del ajuste.

1.1. Objetivo

1.1.1. Objetivo principal

- Construcción numérica de diagramas de fase de aleaciones magnéticas usando el método de renormalización mediante un ajuste de datos experimentales con la implementación de redes neuronales, para luego, simular el sistema con la energía obtenida del ajuste.

1.1.2. Objetivos específicos

1. Extender el método GRCM a segundos vecinos realizado en el trabajo previamente publicado [4] y determinar su conveniencia.
2. Implementar el método de redes neuronales para ajustar datos que permitan encontrar la función de energía.
3. Realizar simulación de distribución de espines en aleaciones usando el algoritmo metrópolis y encontrar formas de optimizarlas para un sistemas de muchos espines
4. Contrastar los resultados obtenidos con medidas experimentales
5. Realizar cálculos numéricos de otras cantidades físicas propias de los sistemas magnéticos como gráficas de magnetización, etc.

Capítulo 2

Marco Teórico

El estudio del magnetismo en todas sus ramas ha sido una de las áreas más importantes de la física, tanto clásica como moderna. Su comprensión ha evolucionado desde los conceptos clásicos hasta su unificación con el fenómeno eléctrico y las interpretaciones modernas proporcionadas por la mecánica cuántica. Esto sin mencionar su fuerte rama de aplicaciones, con impacto en cada aspecto de nuestras vidas, desde objetos tan simples como los imanes de nevera hasta ser una parte vital de dispositivos tan importantes como los motores. Para entender a profundidad las dimensiones de este fenómeno, es indispensable hacer un pequeño repaso de su origen y de los diferentes modelos que lo explican.

2.1. Orígenes y modelos del magnetismo

El origen más simple del magnetismo se basa en los modelos atómicos propuestos por Rutherford y Bohr, que explican el átomo mediante el conocido modelo de sistema solar (como se ilustra en la Figura 2.1). Partiendo de esta base y considerando que, en este modelo, los electrones (partículas cargadas) giran alrededor del núcleo, es evidente que debe existir un campo magnético generado por este fenómeno, de acuerdo con la ley de Ampère-Maxwell. Además, si pensamos que esto ocurre en cada átomo del material, es fácil intuir que la magnetización o no magnetización de estos espines depende únicamente de qué tan alineados estén los momentos magnéticos dentro del material.

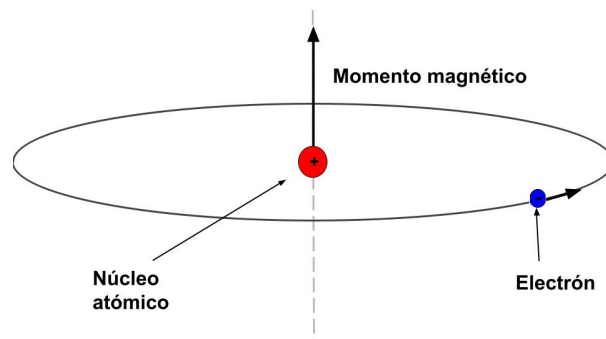


Figura 2.1: Ilustración del átomo en el modelo de Bohr.

De esta explicación surgen conceptos que, posteriormente, fueron refinados hasta llegar a la actualidad, tales como el momento dipolar magnético del electrón y el magnetón de Bohr. Estos conceptos se derivan del cálculo simple de una carga puntual en una espira, siendo este momento el que se muestra a continuación:

$$\mu = -\mu_B m,$$

donde m es el número cuántico asociado al momento angular del electrón l en el eje z , y μ_B es el magnetón de Bohr, que tiene la forma $\mu_B = e/2m_e$. Esta interpretación semi-clásica del origen del magnetismo es muy útil a la hora de explicar fenómenos como el paramagnético y el diamagnético, no obstante, falla a la hora de explicar sistemas donde existe una tendencia de magnetización espontánea puesto que para esto se necesita tener una interacción que alinee estos momentos magnéticos, a este tipo de interacción Weiss la llamo campo molecular [1], siendo esta imposible de encontrar si se considera únicamente al momento angular del electrón como la única causa del magnetismo.

Con la llegada de la mecánica cuántica y el descubrimiento del momento angular intrínseco de las partículas, conocido como espín, se pudo explicar el origen del magnetismo a partir de este momento angular. Esto se debe a que existen energías de enlace entre espines, lo que permitió desarrollar una versión cuántica del campo molecular propuesto por Weiss. Para modelar este tipo de sistemas, se considera un sistema de dos electrones, de modo que el hamiltoniano que describe este sistema toma la forma:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^2 \frac{p_i^2}{2m_e} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2),$$

donde $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ es el potencial de interacción entre los electrones, así como con fuerzas externas. Considerando esto, es válido afirmar que existen dos tipos de soluciones para este sistema: las simétricas con respecto a la posición ($\varphi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$) y las antisimétricas con respecto a la posición ($\varphi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$). Simplificando aún más el sistema, al considerar una interacción nula entre partículas, podemos separar el sistema y concluir que las soluciones toman la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \varphi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) + \varphi_a(\vec{r}_2)\varphi_b(\vec{r}_1)] \\ \varphi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) - \varphi_a(\vec{r}_2)\varphi_b(\vec{r}_1)], \end{aligned}$$

las cuales tienen sus respectivas energías de la forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}|\varphi_-\rangle &= E_-|\varphi_+\rangle \\ \mathcal{H}|\varphi_+\rangle &= E_+|\varphi_+\rangle. \end{aligned}$$

No obstante, estas soluciones son incompletas, ya que no consideran el espín de las partículas. Por lo tanto, es válido agregar un término χ que dependa de las orientaciones de los espines de cada electrón en cada solución. Siguiendo esta idea, sabemos que, al ser el electrón

una partícula de tipo fermiónico, su espín es $\sigma = \frac{1}{2}$, lo que nos deja con dos posibles estados de espín total: $S = 0$ y $S = 1$. Las posibles soluciones para estos estados son:

$$\begin{aligned} \text{si } S=0 &\rightarrow |\chi_S\rangle = |0,0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \text{ singlete antisimétrico} \\ \text{si } S=1 &\rightarrow |\chi_T\rangle = \begin{cases} |1,1\rangle = |\uparrow,\uparrow\rangle \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow,\uparrow\rangle + |\uparrow,\downarrow\rangle) \text{ triplete simétrico.} \\ |1,-1\rangle = |\downarrow,\downarrow\rangle \end{cases} \end{aligned}$$

Siguiendo esta línea de pensamiento e imponiendo la antisimetría dada por el principio de exclusión de Pauli, que rige los sistemas de electrones, llegamos a las siguientes soluciones:

$$\begin{aligned} \varphi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) + \varphi_a(\vec{r}_2)\varphi_b(\vec{r}_1)] \chi_S \\ \varphi_t(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) - \varphi_a(\vec{r}_2)\varphi_b(\vec{r}_1)] \chi_T, \end{aligned}$$

donde, siguiendo lo mencionado anteriormente, a los estados $|\chi_S\rangle$ y $|\chi_T\rangle$ les corresponden las energías E_+ y E_- , respectivamente. Debido a esto, es razonable suponer que existe una relación entre las energías dadas por el hamiltoniano descrito por las posiciones y los momentos y los estados de espín, lo que sugiere la necesidad de un hamiltoniano efectivo que incluya el espín y lo relacione con las energías ya mencionadas.

Dado lo anterior, es necesario encontrar una forma de parametrizar los estados simétricos y antisimétricos del espín. Para ello, consideremos la operación $s_1 \cdot s_2$, partiendo de la definición de adición del momento angular, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} S^2 &= (s_1 + s_2)^2 \\ S^2 &= s_1^2 + s_2^2 + 2s_1 \cdot s_2 \\ s_1 \cdot s_2 &= \frac{1}{2}(S^2 - s_1^2 - s_2^2), \end{aligned}$$

aplicando la base acoplada de la adición del momento angular se obtiene que:

$$s_1 \cdot s_2 = \begin{cases} \hbar^2 \frac{1}{4} & \text{Si } S = 1 \\ -\hbar^2 \frac{3}{4} & \text{Si } S = 0. \end{cases}$$

De este modo, se encuentra una forma de parametrizar los estados simétricos y antisimétricos del espín. A partir de esto, se obtiene un hamiltoniano efectivo que cumple con las condiciones de la energía previamente mencionada y tiene la siguiente forma [9]:

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{4}(E_+ + 3E_-) - (E_+ - 3E_-)s_1 \cdot s_2, \quad (2.1)$$

siendo la primera parte del hamiltoniano 2.1 correspondiente a una constante energética que puede eliminarse mediante un reescalado, mientras que la segunda parte se refiere a la interacción entre los espines. Al simplificar esta segunda parte, se obtiene:

$$\mathcal{H}' = -J_{1,2} s_1 \cdot s_2,$$

donde, dentro de $J_{1,2}$ se almacena la información sobre las energías de los electrones, que depende de sus posiciones y momentos. La generalización de este modelo para N espines es conocida como el modelo de Heisenberg, y se presenta a continuación:

$$\mathcal{H}' = - \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} s_i \cdot s_j, \quad (2.2)$$

donde la sumas sobre i y j representan las sumas sobre todos los espines del sistema, siendo N es el número total de los mismos. Este modelo puede simplificarse mas usando, considerando sistemas donde únicamente es relevante el eje z del espín, a este tipo de modelo se le conoce como modelo de Ising (ecua 2.3) y es el que será usado en el presente trabajo.

$$\mathcal{H}' = - \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j. \quad (2.3)$$

Además de lo mencionado anteriormente, es importante destacar que las energías de intercambio entre espines ($J_{i,j}$) no son, en general, constantes. Esto se debe a los diversos tipos de interacciones que influyen en ellas. Esta idea se refleja en la conocida curva de Bethe-Slater (Figura 2.2), la cual muestra cómo las energías $J_{i,j}$ pueden variar con la distancia interatómica [1, 10].

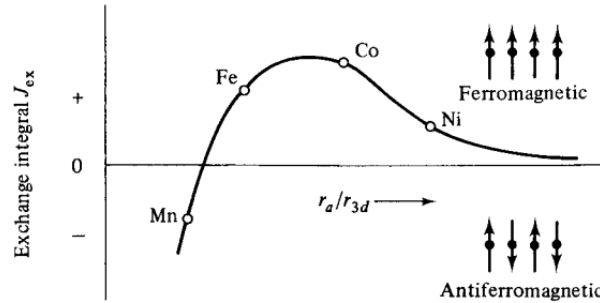


Figura 2.2: Curva de Bethe-Slater que muestra la variación de la energía de interacción con respecto a la distancia interatómica, imagen tomada de [1].

Por otro lado, si pensamos en términos puramente cuantitativos, podemos imaginar que en un sistema donde todos los espines están alineados de manera paralela, la acción del principio de exclusión de Pauli provocará una repulsión entre ellos, minimizando así la energía de tipo coulombiana. De ser así, podríamos afirmar que el estado paralelo sería siempre el más óptimo, ya que minimiza la energía. Sin embargo, es importante considerar que al hacer esto, se produce un movimiento y posterior ocupación de electrones en capas superiores,

lo que implica un aumento energético considerable. Por lo tanto, es necesario un criterio que determine la existencia o no de alineación espontánea en un material, conocido como el Criterio de Stoner.

Para explicar el criterio de Stoner, imaginemos que, en ausencia de un campo magnético externo, tomamos una cantidad de espines en la superficie de Fermi orientados hacia abajo y los cambiamos a una orientación hacia arriba. Más específicamente, consideramos los espines con energía entre E_f y $E - \delta E$. Este cambio se refleja en la densidad de estados $g(E)$, como se muestra en la Figura 2.3. De esta manera, el número total de espines cambiados es igual a $g(E_f)\delta E/2$, siendo la energía cinética total de este cambio igual al número de espines cambiados multiplicado por el incremento en la energía de estos, tal como se muestra en la ecuación 2.4,

$$\Delta E_k = \frac{1}{2}g(E_f)(\delta E)^2, \quad (2.4)$$

reflejando esta expresión un aumento en la energía, lo que hace que este movimiento sea desfavorable.

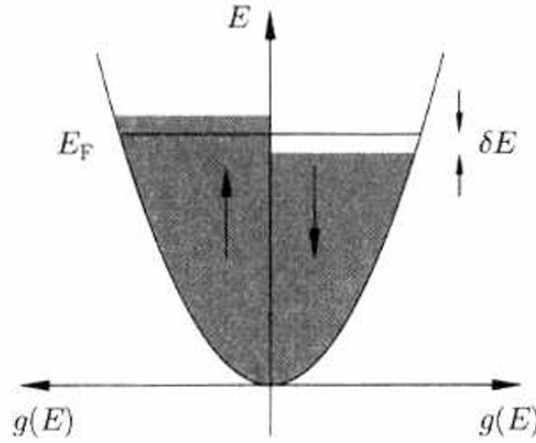


Figura 2.3: Ilustración de la densidad de estados al cambiar de orientación un espín, imagen sacada de [9].

Por otro lado, para considerar la energía de interacción entre espines, partimos del modelo clásico del campo molecular, que depende de la magnetización según la forma λM , donde λ es una constante y la magnetización se expresa como $M = n\mu_B$, siendo n la diferencia entre el número de espines orientados hacia arriba y hacia abajo. Si consideramos que, antes del cambio, ambas cantidades de espines eran iguales, entonces la diferencia de espines es igual al doble del número de espines cambiados, lo que da como resultado una magnetización de

$M = g(E_f)\delta E\mu_B$. Calculando la energía de este campo, obtenemos que:

$$\begin{aligned}\Delta E_p &= - \int_0^M \lambda \mu_0 M' dM' \\ &= -\frac{1}{2} \mu_0 \lambda M^2 \\ &= -\frac{1}{2} \mu_0 \lambda [g(E_f)\delta E\mu_B]^2 \\ \Delta E_p &= -\frac{1}{2} I [g(E_f)\delta E]^2,\end{aligned}\tag{2.5}$$

donde I es la constante de intercambio de Stoner, que es análoga a la constante J para los electrones deslocalizados. A continuación, usando las expresiones 2.4 y 2.5, se calcula el cambio total en la energía con respecto al cambio en la orientación de los espines, obteniendo la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\Delta E &= \frac{1}{2} g(E_f)(\delta E)^2 - \frac{1}{2} I [g(E_f)\delta E]^2 \\ &= \frac{1}{2} g(E_f)(\delta E)^2 [1 - Ig(E_f)].\end{aligned}\tag{2.6}$$

Finalmente, si queremos que el cambio en la energía sea negativo, obtenemos la siguiente condición:

$$\begin{aligned}\Delta E &< 0 \\ \frac{1}{2} g(E_f)(\delta E)^2 [1 - Ig(E_f)] &< 0 \\ Ig(E_f) &> 1,\end{aligned}\tag{2.7}$$

la expresión 2.7 es conocida como el criterio de Stoner, y se utiliza para determinar la existencia de magnetización espontánea en los materiales[9].

2.1.1. Tipos de magnetismo

Retomando la idea de la energía de enlace ($J_{i,j}$) planteada en el modelo de Heisenberg 2.2 y examinando su obtención, se puede concluir que no existen restricciones en el signo de esta energía, lo que le permite ser positiva, negativa o incluso nula. Esta propiedad es fundamental, ya que en la realidad es responsable de conferir a cada tipo de material sus propiedades intrínsecas. Los casos más evidentes son los ferromagnéticos ($J_{i,j} > 0$), los antiferromagnéticos ($J_{i,j} < 0$) y los paramagnéticos ($J_{i,j} = 0$), esto se ilustra mas siguiendo el modelo de Heisenberg 2.2, donde la forma más simple de minimizar la energía en estos materiales es acorde a su respectivo tipo de magnetismo.

En esta tesis, se trabajó con cuatro tipos diferentes de materiales magnéticos, los cuales se explicarán brevemente a continuación:

- **Paramagnetismo:** Este tipo de magnetismo se logra cuando **no hay** interacción entre espines ($J_{i,j} = 0$), lo que, según el modelo 2.2, implica que el sistema no tiene una

orientación preferencial para sus espines. Como resultado, los espines se orientan de manera aleatoria, dando lugar a cambios constantes debido a las interacciones térmicas. Macroscópicamente, esto produce una magnetización casi nula, permitiendo al sistema alinearse fácilmente a campos magnéticos externos, implicando así una susceptibilidad mayor que cero ($\chi > 0$) [11]. Este comportamiento se ilustra en la Figura 2.4. Esta condición fue estudiada por Pierre Curie en 1895, cuando introdujo la llamada ley de Curie. Dicha ley, que fue descubierta de manera puramente experimental, explica el comportamiento de la susceptibilidad y su dependencia con la temperatura, como se muestra en la ecuación 2.8.

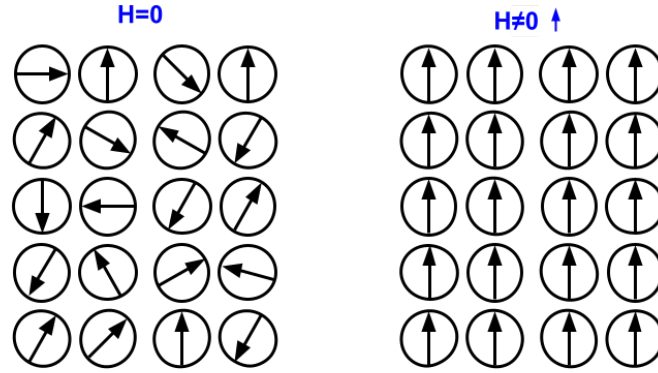


Figura 2.4: Ilustración de un sistema paramagnético en presencia de un campo magnético externo en dirección positiva y vertical.

$$\chi_m = \frac{C}{T}. \quad (2.8)$$

Donde C es la constante de Curie del material y T la temperatura del mismo. Por otro lado, así como este material es fácilmente magnetizable, también es fácilmente desmagnetizable, ya que basta con retirar el campo externo para que pierda su magnetización y sus espines regresen a un estado aleatorio y cambiante.

Finalmente, dado que este tipo de sistemas se caracteriza por espines orientados de manera aleatoria y cambiante, representa el estado final de todos los materiales a altas temperaturas, cuando las energías de enlace se hace pequeñas en comparación de la energía térmica. Esto se destacará en los siguientes tipos de magnetismo.

- **Ferromagnetismo:** Este tipo de magnetismo se logra cuando si hay interacciones entre espines y estas son de índole positiva ($J_{i,j} > 0$). Según el modelo 2.2, esto implica que el estado de mínima energía del sistema se alcanza cuando todos los espines están alineados. No obstante, este alineamiento puede romperse con el aumento de la temperatura, específicamente en el punto donde la energía térmica supera a la energía de interacción entre espines. A esta temperatura crítica se le conoce como la temperatura de Curie; al superarla, el sistema cambia de fase magnética y se convierte en paramagnético. Como consecuencia, estos sistemas tienden a mostrar magnetización espontánea, lo que conduce a una magnetización macroscópica diferente de cero [1],

como se ilustra en la Figura 2.5. Estos materiales son los responsables del magnetismo macroscópico observado en los imanes.

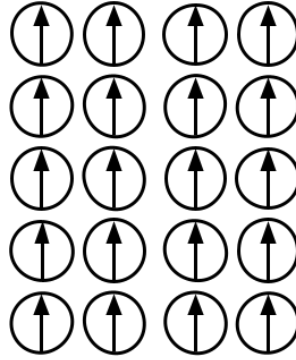


Figura 2.5: Ilustración de un sistema ferromagnético.

No obstante, en la naturaleza no todos los materiales que presentan este tipo de fase magnética muestran magnetización espontánea. Esto se debe a la formación de lo que se conoce como dominios magnéticos. Este fenómeno ocurre cuando se crean grupos de átomos con espines alineados en una misma dirección dentro de cada dominio, donde la magnetización es diferente de cero. Sin embargo, no todos los dominios están alineados en la misma dirección, lo que a nivel macroscópico resulta en una magnetización neta igual a cero. La separación entre estos dominios suele darse por paredes que cambian suavemente la orientación de los espines; estas paredes pueden ser del tipo Néel o Bloch. Esta idea de paredes de dominio se ilustra mejor en la Figura 2.6.

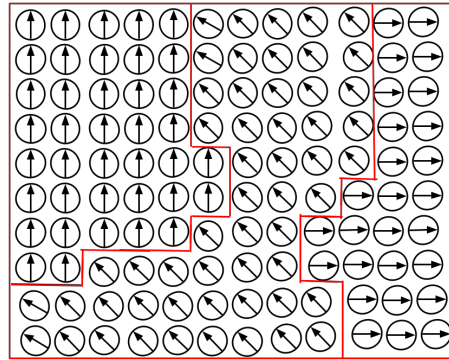


Figura 2.6: Ilustración de los dominios magnéticos según la teoría de Weiss.

En este modelo, la magnetización de un material ferromagnético se describe como la simple alineación de sus dominios magnéticos en respuesta a un campo magnético externo. Además, dado que estos materiales responden positivamente a un campo magnético, se puede asumir que su susceptibilidad magnética es mayor que cero ($\chi > 0$). Este proceso se ilustra en la Figura 2.7. Asimismo, estos materiales se destacan por su

capacidad de retener la magnetización incluso después de retirar el campo externo, lo que se debe a la interacción existente entre los espines.

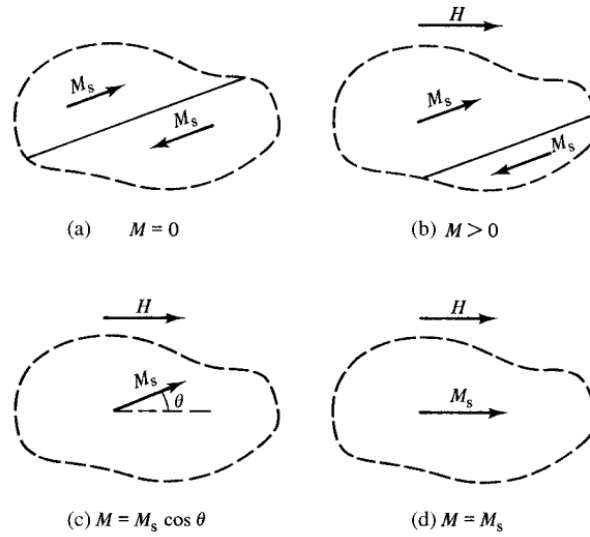


Figura 2.7: Ilustración de la magnetización vista como la alineación de los dominios magnéticos, imagen obtenida de [1].

- **Antierromagnetismo:** A diferencia del ferromagnetismo, estos materiales se caracterizan por tener interacción entre espines y, al mismo tiempo, una magnetización total igual a cero. Esto se debe a que la interacción entre espines es de tipo negativo ($J_{i,j} < 0$), lo que, según la ecuación 2.2, hace que los espines tiendan a alinearse de forma antiparalela entre sí. Este fenómeno ocurre a nivel de subredes; es decir, estos sistemas suelen dividirse en subredes, donde los espines de cada una se alinean en direcciones opuestas. Esto se ilustra en la Figura 2.8, donde además se muestra que la magnetización de cada subred tiende a ser similar. Si no fuera así, el sistema se comportaría como ferrimagnético.

Este tipo de magnetismo fue estudiado por primera vez por el físico francés Louis Néel en 1932, quien aplicó el método de campo molecular de Weiss [12]. Entre otros descubrimientos, identificó el análogo de la temperatura de Curie para estos materiales, conocida como la temperatura de Néel en su honor. Esta temperatura es crucial, ya que marca el punto de transición de fase en el que la energía térmica supera la energía de enlace entre espines, lo que provoca que el sistema tienda hacia una orientación aleatoria, resultando en una transición de fase hacia el estado paramagnético.

Por otro lado, si se aplica un campo externo a este tipo de sistemas, en principio no debería cambiar su orientación, a menos que la energía del campo sea lo suficientemente grande como para superar la energía de interacción entre espines. En ese caso, los espines de cada subred se reorientarían de manera similar a la alineación observada en los dominios ferromagnéticos. Esto implica que estos sistemas tienen una susceptibilidad magnética mayor que cero, pero no muy alta, ya que la respuesta al campo es positiva pero moderada.

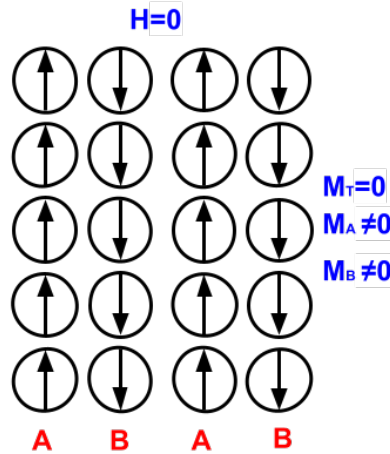


Figura 2.8: Ilustración de un sistema antiferromagnético con respecto a las subredes A y B.

- **Vidrio de espín:** Imaginar fases magnéticas como las mencionadas anteriormente es sencillo al considerar sistemas en los que todos los elementos interactúan de la misma manera. Sin embargo, en la vida real, este tipo de materiales son raros y de poca utilidad. La alternativa más práctica es considerar aleaciones, aunque esto conlleva la necesidad de analizar las interacciones entre espines diferentes y cómo estas afectan al sistema en su conjunto.

Un caso específico de cómo la mezcla de diversos elementos da lugar a fases exóticas se encuentra en las fases de vidrio de espín. Esta fase surge al mezclar espines que interactúan de manera inversa, lo que provoca el fenómeno de frustración de espín debido a interacciones competitivas. En este escenario, cada espín, al experimentar múltiples interacciones opuestas, tiende a quedar "atrapado". Si a esto se le suman bajas temperaturas, se obtiene un sistema en el que los espines no se alinean o antialinean entre sí y permanecen estáticos en el tiempo.

Este fenómeno globalmente se presenta en aleaciones con interacciones competitivas y proporciones similares de sus componentes. En cambio, si los elementos de la aleación están en proporciones desiguales, el efecto de competencia se ve reducido, y la mayoría dominante determina el comportamiento magnético [13]. Esto diferencia a la fase de vidrio de espín de la fase paramagnética, ya que aquí existen interacciones entre espines y la permanencia en el tiempo de este estado. La idea de esta permanencia se ilustra en la Figura 2.9.



Figura 2.9: Ilustración de un espín frustrado. El espín frustrado se muestra en color negro, los momentos magnéticos que interactúan de forma ferromagnética en azul y los antiferromagnéticos en rojo.

Por otro lado, si este estado es sometido a altas temperaturas (al igual que en los casos mencionados previamente), tiende a transicionar a la fase paramagnética. Esto ocurre principalmente porque la energía térmica supera las energías de enlace entre los espines, rompiendo así el fenómeno de frustración. El punto de temperatura en el que se produce esta transición se conoce como la temperatura de congelamiento (T_F) [13].

Otra fase importante relacionada con el vidrio de espín es la conocida como vidrio de espín reentrante. Esta fase puede ser tanto ferromagnética como antiferromagnética y ocurre generalmente a bajas temperaturas en sistemas diluidos con interacciones competitivas. En otras palabras, esta fase aparece en puntos de alta concentración de elementos con fases dominantes en ese punto.

Esta fase fue descubierta al medir la magnetización a bajas temperaturas en sistemas ferromagnéticos, donde se observó una magnetización máxima antes de disminuir, a pesar de tratarse de un sistema mayoritariamente ferromagnético. Este comportamiento se explica por la creación de pequeñas fases de vidrio de espín incrustadas dentro de la fase ferromagnética global, debido a la persistencia de espines competitivos. Esto da lugar a la fase de vidrio de espín reentrante ferromagnética. De manera análoga, ocurre lo mismo en la fase de vidrio de espín reentrante antiferromagnética.

Como se mencionó previamente, la existencia de las fases magnéticas está estrechamente vinculada a las energías de interacción entre espines. En principio, bastaría con considerar solo las interacciones entre los vecinos más próximos para describir cada fase en casi su totalidad. Sin embargo, en la naturaleza esto no es del todo cierto, ya que se han observado interacciones de superintercambio (lo que implica interacción con segundos vecinos) en diversos sistemas, como en el caso del sistema $FeAl$ [5, 6]. Esta interacción se descubrió debido a la presencia de una fase de vidrio de espín en el sistema $FeAl$, lo cual es anómalo, dado que el aluminio es un elemento paramagnético y el hierro es ferromagnético. Esto debería dar lugar únicamente a fases ferromagnéticas o paramagnéticas. La existencia de esta fase anómala de vidrio de espín se explica mediante interacciones de superintercambio entre átomos de hierro, mediadas por átomos de aluminio en configuraciones del tipo $Fe - Al - Fe$ [7].

2.2. Grupos de renormalización en campo medio

Una parte fundamental de este trabajo se basa en la idea de los grupos de renormalización, propuesta por primera vez por Leo P. Kadanoff en 1966 [2]. Kadanoff estableció una relación de recurrencia para calcular los valores de transición en los puntos críticos de un sistema magnético, utilizando como base el modelo de Ising para obtener de manera aproximada los exponentes críticos de la transición. Posteriormente, esta idea se aplicó comparando sistemas de distintos tamaños, buscando llegar a una relación de recurrencia para la transición [14]. Finalmente, se implementó el concepto de campo medio en este método, siendo esta última modificación la que se utilizará como base en el presente trabajo [3].

2.2.1. Grupos de renormalización

Para explicar en detalle la idea de renormalización propuesta por Kadanoff, es necesario primero entender que el modelo de Ising en una dimensión ya ha sido completamente resuelto, obteniendo una función de partición que se presenta a continuación:

$$Z = [2 \cosh (J/k_B T)]^N. \quad (2.9)$$

De manera similar, este sistema en dos dimensiones también tiene una solución exacta, la cual fue calculada por Onsager [15]. A continuación, se presenta la forma simplificada de esta solución:

$$Z = [2 \cosh (J/k_B T) e^I]^N, \quad (2.10)$$

donde

$$I = \frac{1}{2 * \pi} \int_0^\pi d\phi \ln \left\{ \left(\frac{1}{2} \right) [1 + (1 - \kappa \sin(\phi))^{\frac{1}{2}}] \right\},$$

y

$$\kappa = 2 \sinh(2J/k_B T) \cosh^2(2J/k_B T),$$

encontrando de forma natural en este modelo los puntos de transición de fase característicos de los sistemas magnéticos.

Por otro lado, para el caso de tres dimensiones aún no se ha encontrado una solución exacta, lo que ha impulsado la búsqueda de soluciones aproximadas o mediante simulaciones. Este hecho es, en parte, una motivación del presente trabajo.

Retomando la idea de Kadanoff, consideremos un sistema unidimensional de espines, cuya función de partición toma la forma:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\mathcal{H}/(k_B T)) \\ Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp[K(\dots + \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5 + \dots)], \end{aligned} \quad (2.11)$$

donde K es la energía de enlace reescalada tal que $K = J/K_B T$ y la sumatoria se realiza sobre todas las configuraciones posibles de los espines. Luego, al agrupar los términos exponentes correspondientes a los espines pares y sus vecinos, y posteriormente separar los exponentes, se obtiene una versión modificada de la función de partición para los espines pares, como se muestra a continuación:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \dots e^{K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3)} e^{K(\sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5)} e^{K(\sigma_5 \sigma_6 + \sigma_6 \sigma_7)} \dots$$

Si ahora consideramos que los valores de cada σ_i pueden ser 1 o -1 , obtenemos que:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}'} \dots (e^{K(\sigma_1 + \sigma_3)} + e^{-K(\sigma_1 + \sigma_3)}) (e^{K(\sigma_3 + \sigma_5)} + e^{-K(\sigma_3 + \sigma_5)}) (e^{K(\sigma_5 + \sigma_7)} + e^{-K(\sigma_5 + \sigma_7)}) \dots, \quad (2.12)$$

donde la suma sobre σ_i' incluye solo los espines impares. Luego, considerando el primer término, se puede obtener una expresión de la forma:

$$e^{K(\sigma_1+\sigma_3)} + e^{-K(\sigma_1+\sigma_3)} = f(K)e^{K'\sigma_1\sigma_3}, \quad (2.13)$$

en la que

$$f(K) = 2 \cosh^{1/2}(2K), \quad (2.14)$$

y

$$K' = \frac{1}{2} \ln[\cosh(2K)], \quad (2.15)$$

esto se obtiene evaluando todos los valores posibles para σ_1 y σ_3 en la expresión 2.13, donde estas expresiones se cumplen para todas las sumas dentro de la ecuación 2.12, obteniendo así:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma_i\}'} \dots (f(K)e^{K'\sigma_1\sigma_3}) (f(K)e^{K'\sigma_3\sigma_5}) (f(K)e^{K'\sigma_5\sigma_7}) \dots \\ Z &= f(K)^{N/2} \sum_{\{\sigma_i\}'} \dots e^{K'\sigma_1\sigma_3} e^{K'\sigma_3\sigma_5} e^{K'\sigma_5\sigma_7} \dots, \end{aligned} \quad (2.16)$$

siendo N el número total de espines, se obtiene el exponente $N/2$ debido a que la suma sobre σ_i' abarca solo los espines pares (la mitad del total). Por otro lado, al analizar el término de la sumatoria en la ecuación 2.16, se observa que corresponde a una función de partición estándar para $N/2$ espines con energía reescalada K' , de modo que:

$$Z(N, K) = f(K)^{N/2} Z(N/2, K'), \quad (2.17)$$

asimismo, considerando que la energía libre es una función homogénea, esta es proporcional al tamaño del sistema, de modo que:

$$N\zeta = \ln(Z),$$

aplicando esto a a nuestra función partición se llega a que:

$$\begin{aligned} \ln[(N, K)] &= \ln[f(K)^{N/2}] + \ln[(N/2, K')] \\ \zeta(N, K)N &= \frac{N}{2} \ln[f(K)] + \frac{N}{2} \zeta(N/2, K') \\ \zeta(N, K) &= \frac{1}{2} \ln[f(K)] + \frac{1}{2} \zeta(N/2, K') \\ \zeta(N/2, K') &= 2\zeta(N, K) - \ln[2 \cosh^{1/2}(2K)], \end{aligned} \quad (2.18)$$

así, se obtiene una relación de recurrencia descendente para los valores de $K = J/Tk_B$. De la misma manera, al despejar las expresiones 2.18 y 2.15 se puede obtener una relación de recurrencia ascendente para los valores de $K = J/Tk_B$, la cual ha sido probada con la solución exacta unidimensional, mostrando resultados similares a dicha solución.

Considerando ahora una red en dos dimensiones, como se ilustra en la Figura 2.10, se puede realizar un proceso análogo teniendo en cuenta la nueva configuración, obteniendo una función de partición como se muestra en la ecuación 2.19

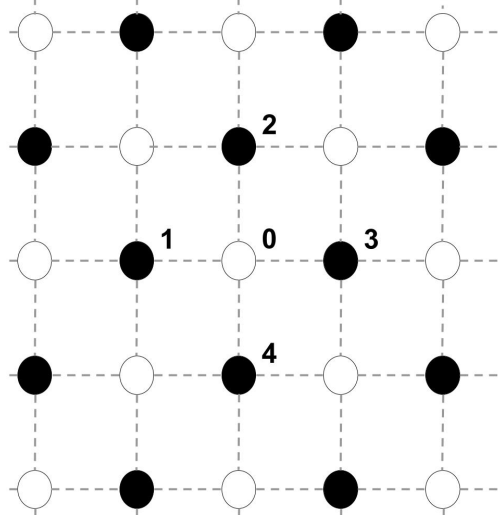


Figura 2.10: Ilustración de una red simple en 2 dimensiones.

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \dots \exp[K(\sigma_0\sigma_1 + \sigma_0\sigma_2 + \sigma_0\sigma_3 + \sigma_0\sigma_4)] \dots, \quad (2.19)$$

de manera análoga al sistema unidimensional, se expande la expresión anterior sobre todos los valores posibles de σ_0 , obteniendo la ecuación que se muestra a continuación:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}'} \dots \left(e^{K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} + e^{-K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} \right) \dots, \quad (2.20)$$

donde σ_i' suma sobre todos los valores excepto σ_0 . Por otro lado, si consideramos que el término de σ_0 se puede formular de manera similar al caso unidimensional, se puede obtener que:

$$e^{K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} + e^{-K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} = f(K) \exp \left[K'_1(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1) + K'_2(\sigma_1\sigma_3 + \sigma_2\sigma_4) + K'_3(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4) \right], \quad (2.21)$$

con

$$f(K) = 2 \cosh^{1/2}(2K) \cosh^{1/8}(4K), \quad K'_1 = \frac{1}{4} \ln[\cosh(4K)], \quad (2.22)$$

$$K'_2 = \frac{1}{8} \ln[\cosh(4K)] \quad \text{y} \quad K'_3 = \frac{1}{8} \ln[\cosh(4K)] - \frac{1}{2} \ln[\cosh(2K)], \quad (2.23)$$

en general, este cambio puede realizarse para todos los espinos blancos, como se ilustra en la Figura 2.10, tomando la forma:

$$e^{K(\sigma_i+\sigma_j+\sigma_k+\sigma_l)} + e^{-K(\sigma_i+\sigma_j+\sigma_k+\sigma_l)} = f(K) \exp \left[K'_1 \sum_{nn} \sigma_p \sigma_q + K'_2 \sum_{nnn} \sigma_p \sigma_q + K'_3 \sum_{all} \sigma_p \sigma_q \sigma_r \sigma_s \right], \quad (2.24)$$

donde la primera suma corresponde a los primeros vecinos entre espinos negros, la segunda a los vecinos siguientes, y la tercera corresponde al producto de todos los espinos en cuestión.

Aplicando esto a todos los espines blancos dentro de la función de partición 2.20, se obtiene que:

$$Z = f(K)^{N/2} \sum_{\{\sigma'_i\}} \exp \left[K'_1 \sum_{nn} \sigma_p \sigma_q + K'_2 \sum_{nnn} \sigma_p \sigma_q + K'_2 \sum_{all} \sigma_p \sigma_q \sigma_r \sigma_s \right], \quad (2.25)$$

en esta expresión surge el problema de no devolver una función de partición para los espines negros, como sí ocurría en el caso unidimensional.

Para resolver este problema, se proponen varias soluciones. La más simple es considerar solo el caso de primeros vecinos y eliminar las interacciones externas entre los espines negros. Sin embargo, esto dejaría la expresión 2.25 idéntica al caso unidimensional, en el que no se encuentran puntos fijos o de transición de fase. Una alternativa más razonable (aunque igualmente limitada) es considerar para la relación de recurrencia que:

$$\begin{aligned} K' &= K'_1 + K_2 \\ K' &= \frac{3}{8} \ln[\cosh(4K)], \end{aligned} \quad (2.26)$$

esta aproximación genera una relación de recurrencia que converge a un punto fijo de $K_c = 0.44069$, muy cercano al valor de $K_c = 0.50698$ obtenido por Onsager en su solución exacta. Este es un excelente resultado si se considera la simplicidad de esta aproximación.

2.2.2. Método del campo medio

La idea de campo medio fue propuesta por el físico francés Pierre Weiss con el objetivo de dar una primera explicación a la interacción y al surgimiento de la fase ferromagnética [16]. Esta idea parte de considerar los electrones como momentos magnéticos sin interacción entre sí, que sienten un campo externo producido por ellos mismos, tal que [1]:

$$H_m = \gamma M, \quad (2.27)$$

donde γ es una constante que depende del material y M es la magnetización total del sistema. Esta idea surge en un contexto en el que aún se desconocía el espín y su inherente energía de interacción, siendo el campo medio una herramienta para justificar la existencia de un campo que alinea los espines y que depende de los propios espines. Esta aproximación mostró resultados muy buenos en su momento, derivando en la conocida ley de Curie-Weiss. No obstante, estas ideas fueron eventualmente reemplazadas por los modelos actuales de interacción entre espines.

Actualmente, esta aproximación sigue utilizándose en los modelos de interacción entre espines debido a la simplicidad que aporta a los sistemas. El caso más sencillo de esta implementación es el modelo de Ising 2.3, en el cual el campo medio reemplaza las interacciones entre espines. Esto resulta en una aproximación en la que cada espín, en lugar de sentir la interacción propuesta por todos sus vecinos, percibe únicamente una interacción en forma de campo medio, como se muestra a continuación:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N J \sigma_i b_i \quad \text{con} \quad b_i = z \langle \sigma_1 \rangle, \quad (2.28)$$

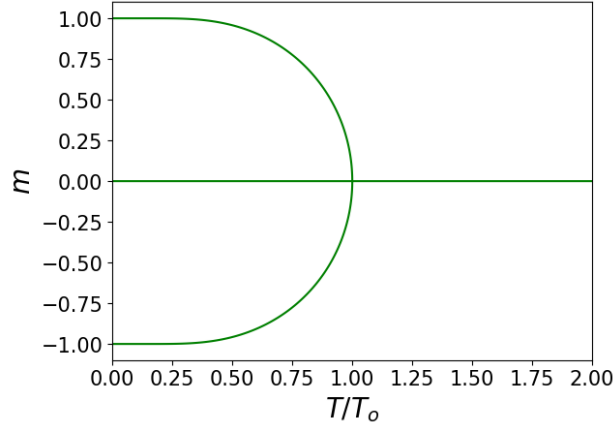


Figura 2.11: Magnetización propuesta por el método de campo medio.

donde z representa el número de coordinación o cantidad de primeros vecinos, y $\langle \sigma \rangle$ es la magnetización por espín del sistema. En este modelo, se conserva la interacción de cada espín y la forma en la que esta se lleva a cabo, lo cual se refleja en la ecuación anterior mediante la energía de enlace J .

Al resolver este sistema de la forma usual, considerando su función partición se obtiene una expresión para la magnetización por espín de la forma:

$$m = \tanh \left(-\frac{1}{k_B T} (Jm + h) \right), \quad (2.29)$$

donde, si se hace una gráfica de la magnetización en función de la temperatura se llega a la gráfica que se muestra en la Figura 2.11:

descartando así la existencia de la temperatura crítica del sistema, la cual depende de la energía de interacción entre espines y la constante del Boltzman, la cual va de la forma:

$$T_c = J/k_B,$$

esta aproximación muestra buenos resultados físicos a pesar de su relativa simplicidad. De manera similar, al aplicar este modelo junto con la ecuación de Brillouin para el paramagnetismo, es posible obtener la forma básica de la ecuación de Curie-Weiss [1], la cual se expresa de la siguiente manera:

$$\chi_F = \frac{C}{T - T_c},$$

donde C es una constante y T_c es la temperatura crítica de transición.

Además, este modelo fue utilizado posteriormente por el físico Louis Néel en su estudio del antiferromagnetismo, aplicando la idea de campo medio a las dos subredes de este tipo de materiales, cada una con su respectivo campo medio en sentido opuesto. Esto condujo a una versión propia de la ecuación de Curie-Weiss, expresada como:

$$\chi_{AF} = \frac{\mathcal{C}}{T + \theta},$$

donde $\mathcal{C}$ y θ son constantes que dependen del material y de la interacción entre las subredes, respectivamente.

2.2.3. Grupos de renormalización en campo medio

Como se mencionó previamente, la idea principal de Kadanoff es simplificar el conteo de espines mediante la división del sistema en grupos, estudiando primero su interacción interna y luego la interacción entre los grupos. Basándose en esta idea y en la simplificación del método de campo medio, J.O. Indekeu, A. Maritan y A.L. Stella formularon en 1982 el método de los grupos de renormalización en campo medio [3]

Este método consiste en considerar un sistema grande de espines. A partir de este sistema, se seleccionan dos grupos de tamaño N y N' respectivamente. Luego, dado que las funciones de estado son homogéneas, estas pueden escalarse entre sí de la siguiente manera:

$$f_N(J, b) = \alpha f_{N'}(J', b'), \quad (2.30)$$

donde α es una constante que relaciona el tamaño de los grupos con la dimensión del sistema, y f_N y $f_{N'}$ representan las funciones de estado de los sistemas de tamaño N y N' , respectivamente. Estas funciones de estado se utilizarán posteriormente como parámetros de orden para las transiciones de fase analizadas a lo largo de esta tesis, específicamente la magnetización media por espín y el parámetro de Edwards-Anderson.

Si se implementa el método del campo medio, es posible establecer una relación entre la magnetización y el campo medio del sistema, que toma la forma $b = \beta \langle \sigma \rangle$, donde β es una constante que depende del número de primeros vecinos del sistema. Por otro lado, también se sabe que la magnetización es una función de estado del sistema, por lo que debe cumplir con la condición 2.30. Considerando lo anterior, se deduce que el campo medio también satisface una condición similar a 2.30, de manera que:

$$b = \alpha b', \quad (2.31)$$

siendo b y b' representan el campo medio que experimentan los grupos de tamaño N y N' , respectivamente. Por otro lado, al estudiar el sistema en los puntos de transición de fase hacia el estado paramagnético, se observa que, en dichos puntos, la magnetización del sistema se vuelve pequeña. Considerando la aproximación de campo medio previamente descrita, esto implica que el campo medio tiende a cero, es decir, $b, b' \rightarrow 0$. Basándose en esta observación y aplicando una expansión en series alrededor de estos puntos en la expresión 2.30, se obtiene una ecuación que relaciona las funciones de estado en los puntos de transición de fase, como se muestra a continuación:

$$\Gamma(K, b, N) = \alpha \Gamma'(K', b', N'), \quad (2.32)$$

con

$$\Gamma(K, b, N) = f_N(K, b) \Big|_{b \rightarrow 0} + \frac{\partial f_N(K, b)}{\partial b} \Big|_{b \rightarrow 0} b + \dots,$$

cumpliendo de manera análoga esta expresión para $\Gamma(K', b', N')$, donde K representa la energía de enlace reescalada, definida como $K = J/(k_B T)$ donde, k_B es la constante de Boltzmann [17]. A continuación, aplicando las condiciones de campo medio 2.31 y de escalado en las funciones de estado 2.30, se deriva la siguiente expresión

$$\frac{\partial f_N(K, b)}{\partial b} \Big|_{b \rightarrow 0} = \frac{\partial f_{N'}(K', b')}{\partial b'} \Big|_{b' \rightarrow 0}, \quad (2.33)$$

esta relación de recurrencia será implementada posteriormente en los puntos fijos (más específicamente, en los puntos de transición de fase) del sistema, con el fin de determinar las temperaturas de transición.

Por otro lado, al observar la expresión 2.33, es evidente que no se hace distinción entre los diferentes tipos de espines dentro del sistema. Esto implica que el modelo anterior es válido únicamente para sistemas con espines idénticos y de interacción uniforme. Debido a esto, M. Droz y su equipo propusieron una forma de introducir diferentes tipos de espines dentro del modelo, utilizando un promedio configuracional de enlace [18]. En otras palabras, lo que busca este modelo es tomar la expresión 2.33 y considerar todos los tipos de enlace posibles, promediándolos en términos de su probabilidad de existencia. Este promedio se realiza sobre las funciones de estado del sistema $f_N(K_{i,j}, b)$ y $f_{N'}(K'_{i,j}, b')$, como se muestra a continuación:

$$\overline{f_N} = \int f_N(K_{i,j}, b) \prod_{i,j}^N P(K_{i,j}) dK_{i,j}. \quad (2.34)$$

Donde $K_{i,j}$ representa la energía de enlace entre los espines ubicados en los sitios i -ésimo y j -ésimo, respectivamente, ambos pertenecientes al grupo de N espines. Por otro lado, el término $P(K_{i,j})$ representa la densidad de probabilidad de enlace entre espines, siendo, en general, una expresión de la forma:

$$P(K_{i,j}) = \sum_l^n p_l \delta(K_{i,j} - \hat{K}_l),$$

siendo p_l la probabilidad de existencia del enlace l -ésimo y K_l su respectiva energía de enlace, reescalada de la forma mencionada previamente. Cada término de la sumatoria representa un tipo de enlace presente en el sistema, y n es el número de tipos de enlace presentes en él.

Para el caso de este trabajo en particular, se calculará la probabilidad de existencia de un enlace partiendo de la concentración de los elementos del sistema. Esto se debe a que la existencia de cada enlace depende de la probabilidad de encontrar los elementos que lo componen. De manera más explícita, para calcular la probabilidad de existencia de un enlace, consideraremos que esta depende de la presencia de los elementos que lo componen. Así, la probabilidad de tener un enlace p_{xy} se reduce a la probabilidad de encontrar un espín de elemento (p_x) y uno de elemento (p_y) combinados, como se muestra a continuación: $p_{xy} = p_x p_y$.

2.3. Redes neuronales

El avance de la ciencia en general ha traído consigo tanto nuevas tecnologías como desafíos que requieren el uso de estas innovaciones. Entre las tecnologías más destacadas se encuentran las relacionadas con las redes neuronales y el aprendizaje autónomo no supervisado. Este tipo de sistemas se utiliza ampliamente en diversas áreas que demandan soluciones numéricas altamente complejas o procesos que implican múltiples variables de entrada. Además, estas herramientas han demostrado avances significativos en la resolución de ecuaciones no lineales complejas, facilitando la identificación de relaciones intrincadas entre diferentes variables.

Según la definición propuesta por [8], una red neuronal se caracteriza como un modelo computacional compuesto por nodos interconectados, comúnmente denominados neuronas o neuronas artificiales, organizados en capas. A cada neurona de esta red se le asigna una acción específica o, en el caso particular de este trabajo, una función particular.

Para comprender más a fondo la idea de una neurona, retomemos la definición formal propuesta por [8], que define una neurona como: “Una cuádrupla (x, ω, ϕ, y) , donde $x^T = (x_0, x_1, \dots, x_n)$ es el vector de entrada, $\omega^T = (\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_n)$ es el vector de pesos, con $x_0 = 1$ y $\omega_0 = b$ como el sesgo (bias), y ϕ es una función de activación que define el resultado como $y = \phi(x^T \omega) = \phi(\sum_{i=0}^n \omega_i x_i)$ ”.

En otras palabras, una neurona puede describirse como un objeto que toma un vector de entrada (x_i) , en el que cada uno de sus elementos se asocia con un peso correspondiente (ω_i) . Estos pesos se combinan mediante una suma, que incluye un término de ajuste b (sesgo). Finalmente, la suma resultante se somete a una función de activación ϕ , obteniendo así la salida y , cuya expresión se muestra a continuación:

$$y = \phi(x^T \omega) = \phi\left(\sum_{i=1}^n \omega_i x_i + b\right), \quad (2.35)$$

esta idea se ilustra en la Figura 2.12, donde se esquematiza la estructura de una neurona y se establece una comparación entre una neurona artificial y una neurona biológica.

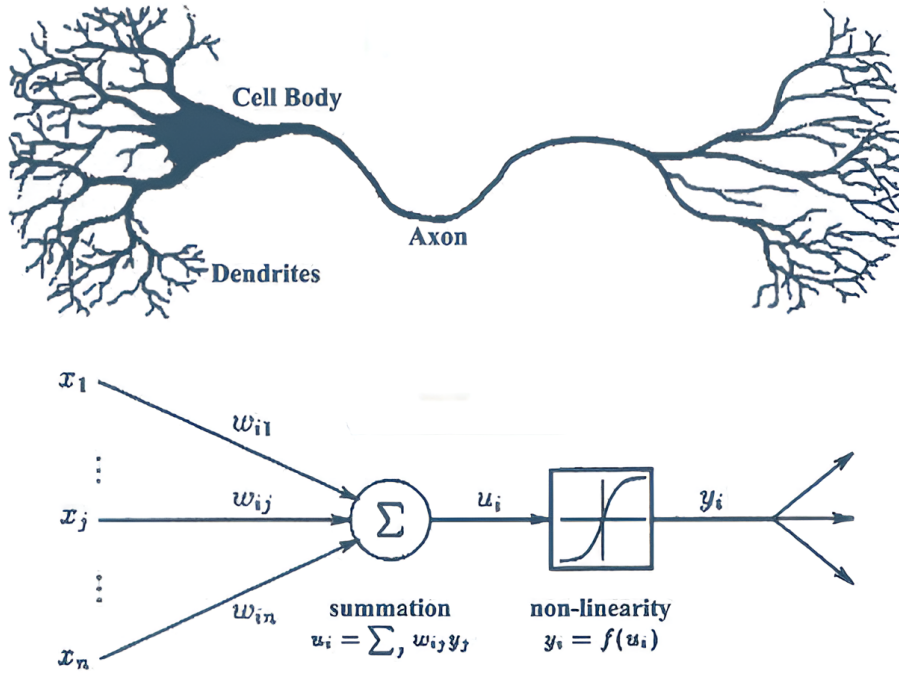


Figura 2.12: Esquema de una neurona y comparación con una neurona del cerebro, imagen tomada de [19].

Por otro lado, para completar la idea de las redes neuronales, es necesario definir las capas que las componen, las cuales se dividen principalmente en tres tipos:

- capa de entrada
- capas ocultas
- capa de salida

siendo, La capa de entrada contiene los datos iniciales con los que la red neuronal va a trabajar. Cada nodo de esta capa representa una característica o atributo de la entrada. Por otro lado, las capas ocultas son las encargadas de llevar a cabo el proceso de aprendizaje de la red. En cada nodo de estas capas se encuentra una neurona que posee pesos y una función de activación propios, generalmente independientes entre sí. Finalmente, la capa de salida proporciona la predicción o salida de la red. En esta capa se pueden encontrar los modelos ajustados, si ese es el objetivo, así como los valores correspondientes a los pesos respectivos. Todo esto se ilustra en la Figura 2.13.

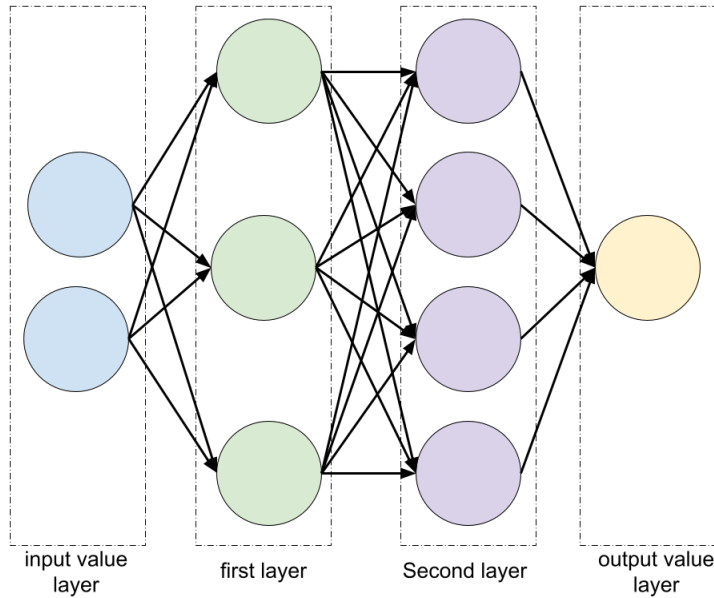


Figura 2.13: Esquema de una red neuronal multicapa de dos capas ocultas.

Uniando todos los conceptos previos, se puede definir una función de aprendizaje ($\mathcal{F}$) como una función compuesta por las neuronas dentro de la red. Esta función depende del conjunto de parámetros de peso ω_i y del sesgo b , junto con sus respectivas funciones de activación. Para el caso concreto de nuestro trabajo, definimos la función de aprendizaje como:

$$\mathcal{F} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad (p, T_c) \mapsto (J_0, \dots, J_n), \quad (2.36)$$

donde, la capa de entrada de nuestra función contiene los datos de concentración (p) y temperatura crítica del sistema (T_c), mientras que en la capa de salida encontramos las funciones de energía entre espines J_i . Cada una de estas funciones es una composición de las diferentes funciones de activación, las cuales dependen del conjunto de valores de peso y de las concentraciones de los valores de entrada, de tal forma que $J_i = J_i(p, \omega_i)$.

Por otro lado, de manera general, definimos el proceso de aprendizaje como el ajuste de los parámetros de peso con el objetivo de minimizar una función denominada función de costo. Esta función se selecciona dependiendo de la utilidad que se le quiera dar a la red, variando desde un ajuste simple de datos hasta clasificaciones binarias y multiclase, entre muchas otras posibilidades. Para el caso particular de nuestro trabajo, al requerir un ajuste de datos de una función desconocida, seguiremos la forma propuesta por J. Blechschmidt y O. G. Ernst [20], como se muestra en la ecuación 2.37.

$$C(\mathcal{F}) = \frac{1}{N} \sum_i^N \|\mathcal{E}(\mathcal{F})|_i\|, \quad (2.37)$$

donde, $\mathcal{E}(\mathcal{F})|_i$ representa el lado derecho de las expresiones de recurrencia que se obtienen utilizando el método GRCM para cada caso en consideración, estas expresiones se encontraran en secciones subsiguientes, evaluadas en los puntos experimentales (p^i, T_c^i) para $i = 1, 2, \dots, N$, donde N es el número total de datos experimentales.

Finalmente, el objetivo de este proceso es encontrar el conjunto de parámetros de peso los cuales minimicen la función de costo $C(\mathcal{F})$ tal que $C(\mathcal{F}) \approx 0$. Para lograr esto, tratamos la función de costo $C(\mathcal{F})$ como una función de los parámetros dentro de la función de aprendizaje $\mathcal{F}$. Posteriormente, podemos emplear un algoritmo de optimización estándar, como el método de descenso de gradiente [21], para buscar el mínimo.

2.4. Simulaciones estocásticas y el algoritmo de Metropolis

Como se ha mencionado previamente, una de las herramientas más eficientes para resolver problemas físicos son las simulaciones. Estas adquieren especial valor y utilidad cuando se trata de sistemas muy grandes o de muchos cuerpos, donde la física convencional se vuelve intratable de manera teórica, dejando únicamente el camino hacia un tratamiento estadístico o de simulación.

De la misma manera, las simulaciones pueden clasificarse en dos tipos: simulaciones estocásticas y simulaciones deterministas. Las simulaciones deterministas se refieren a aquellas en las que, mediante ecuaciones, conocemos la forma en que el sistema debe comportarse en cada punto. Un ejemplo simple de esto es simular una caja con esferas y colisiones elásticas. Por otro lado, las simulaciones estocásticas se refieren a aquellas que involucran procesos aleatorios. Un ejemplo de este tipo de simulaciones es el método de Monte Carlo, que se basa en la generación de números aleatorios para simular procesos con resultados aleatorios, como el cambio de orientación de un espín debido a causas térmicas. Este es el tipo de simulaciones que exploraremos en esta tesis.

2.4.1. La simulación de Monte Carlo de sistemas térmicos

Tomando el enfoque de las simulaciones de tipo Monte Carlo, estas pueden aplicarse a diversos sistemas, entre los que se destacan las aplicaciones en movimiento browniano, el caminante aleatorio en diversas dimensiones y sistemas con influencias térmicas, entre otros.

Este último es el enfoque elegido para este proyecto. En general, el objetivo de un estudio en sistemas térmicos, y por ende del estudio de las simulaciones de este tipo, es encontrar el valor esperado de las cantidades estudiadas, las cuales se representan como $\langle Q \rangle$. Usando la mecánica estadística de Boltzmann, estos valores se calculan de la siguiente manera:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{\beta E_{\mu}}}, \quad (2.38)$$

donde $\beta = \frac{1}{K_B T}$. No obstante, a pesar de ser el camino típico, este solo es aplicable a sistemas de tamaño limitado, ya que se vuelve inviable para sistemas grandes. En estos casos, es necesario promediar sobre subconjuntos específicos, lo que introduce inexactitudes al momento de resolver estos problemas. Para el caso particular de las simulaciones de tipo Monte Carlo, típicamente se elige un subconjunto de estados aleatorios de una distribución de probabilidad p_{μ} específica. Suponiendo que este subconjunto posee M estados, denotados como $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_M$, el cálculo del valor esperado tomaría la forma [22]:

$$Q_M = \frac{\sum_i Q_{\mu i} p_{\mu i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu i}}}{\sum_j p_{\mu j}^{-1} e^{\beta E_{\mu j}}}, \quad (2.39)$$

esta expresión se conoce como el estimador y se relaciona con el valor esperado, tal que si $M \rightarrow \infty$, entonces $Q_M \rightarrow \langle Q \rangle$, donde el término $p_{\mu j}^{-1} e^{\beta E_{\mu j}}$ corresponde a la probabilidad de encontrar dicho estado en relación con la distribución elegida.

Planteando ahora el problema de la elección de una distribución de probabilidad tal que Q_M sea una estimación precisa de $\langle Q \rangle$, la respuesta más simple a este problema es elegir una distribución en la que todos los M estados tengan la misma probabilidad entre sí, de modo que $p_{\mu i}$ sea una constante en la suma de la ecuación 2.39. Así, esta expresión tomaría la forma:

$$Q_M = \frac{\sum_i Q_{\mu i} e^{-\beta E_{\mu i}}}{\sum_j e^{\beta E_{\mu j}}}. \quad (2.40)$$

No obstante, a pesar de su forma simplificada, esta elección no es del todo acertada, pues limita al sistema a considerar únicamente estados cuya probabilidad sea similar, dejando de lado todos los demás y sesgando al sistema a solo una pequeña fracción del total. Por otro lado, si pensamos en sistemas específicos, como los de baja temperatura, es claro que el sistema no tomará todos los estados accesibles, sino que oscilará entre los estados más bajos. De manera similar, en los sistemas de altas temperaturas, el sistema explorará los estados más altos. Así, en los sistemas térmicos, los estados en los que se encuentra están limitados por la condición de temperatura, lo que deja un rango estrecho de energías en el que el sistema se mueve realmente y no toda la gama de estados accesible. Aprovechando esto en nuestras simulaciones, podemos asumir que la distribución de probabilidad que cumplan los estados que vamos a tomar debe ser proporcional a su distribución de Boltzmann, tal que:

$$p_{\mu} = Z^{-1} e^{-\beta E_{\mu}}, \quad (2.41)$$

aplicando esto en la expresión 2.39, tenemos que:

$$Q_M = \frac{\sum_i Q_{\mu i} (Z^{-1} e^{-\beta E_{\mu i}})^{-1} e^{-\beta E_{\mu i}}}{\sum_j (Z^{-1} e^{-\beta E_{\mu j}})^{-1} e^{-\beta E_{\mu j}}}$$

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu i}, \quad (2.42)$$

esta forma es la más óptima para sistemas que pasan una gran cantidad de tiempo en estados específicos. La única duda restante es cómo seleccionar los estados de manera que su distribución de probabilidad sea proporcional a la distribución de Boltzmann. La respuesta a esta pregunta es la implementación de procesos de Markov.

Procesos y cadenas de Markov

Definimos los sistemas markovianos como aquellos que transitan de un estado μ a un estado ν , con una probabilidad de transición $P(\mu \rightarrow \nu)$ que cumpla con las siguientes condiciones:

1. $P(\mu \rightarrow \nu)$ no cambia en el tiempo
2. $P(\mu \rightarrow \nu)$ únicamente depende de los estados μ y ν sin tener en cuenta estados previos, a este condición se le conoce comúnmente como sistemas sin memoria.

Siendo todos los procesos que cumplen con estas condiciones procesos de Markov, y las sucesiones de estos procesos son conocidas como cadenas de Markov. De esta forma, en este tipo de procesos se garantiza que, siempre que se esté en el estado μ , la probabilidad de transitar al estado ν será la misma, independientemente de lo que haya sucedido previamente en el sistema. Además, este tipo de procesos cumple con la siguiente condición:

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1, \quad (2.43)$$

esto se debe a que esta expresión sugiere sumar sobre todas las transiciones posibles de estados estando en el estado μ , lo que constituye la probabilidad de transición completa.

Por otro lado, aunque este tipo de procesos nos proporciona una cadena de transiciones que podemos usar como subconjunto de estados, los cuales sirven como base para el cálculo del estimador en la ecuación 2.39, aún no garantizamos que, al seguir estos procesos, obtenamos estados cuya densidad de probabilidad cumpla con la condición de Boltzmann. Por esta razón, además de buscar sistemas que cumplan con las condiciones previamente mencionadas, también se debe imponer a los sistemas estudiados las condiciones de ergodicidad y balance detallado, con el fin de encontrar un subconjunto de estados que cumpla con la condición de Boltzmann o, dicho de otra manera, que sean estados de equilibrio.

Condiciones de ergodicidad y balance detallado

Definimos la condición de ergodicidad como la capacidad de un sistema para estar en un estado ν y poder llegar a cualquier estado λ , ya sea de forma directa ($P(\mu \rightarrow \lambda)$) o a través

de una cadena de estados finitos ν_i diferentes ($P(\mu \rightarrow \nu_1) \dots P(\nu_n \rightarrow \lambda)$) [22]. Esta condición es fundamental para nuestro propósito de llegar a estados que cumplan con la distribución de Boltzmann, ya que inicialmente no se asegura que partimos de un estado que cumpla dicha condición en su probabilidad. Sin embargo, si tenemos acceso a todos los estados, se abre la opción de llegar eventualmente a estos, usando el criterio de transición adecuado, siendo este criterio la condición de balance detallado.

Para entender la condición de balance detallado, primero debemos analizar qué sucede si un estado μ se encuentra en equilibrio (lo que, en última instancia, buscamos para nuestros subconjuntos de estados). Para que esto ocurra, debe cumplirse que las transiciones hacia ese estado y desde ese estado sean iguales. Esto se ilustra en la siguiente expresión:

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu), \quad (2.44)$$

luego, siguiendo con lo planteado en la expresión de los procesos de Markov 2.43, se obtiene que:

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (2.45)$$

Esta expresión garantiza que un estado con probabilidad p_{μ} esté en equilibrio y, por ende, cumpla con la condición de Boltzmann. No obstante, satisfacer esta condición no es suficiente para garantizar que el sistema alcanzará el estado p_{μ} desde cualquier estado del sistema, ya que podría entrar en una situación de equilibrio dinámico, donde rota entre dos estados. Para resolver este problema, se plantea la expresión de balance detallado, la cual se muestra a continuación:

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu), \quad (2.46)$$

donde la expresión $p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu)$ representa la tasa de transiciones del estado ν al estado μ y viceversa. Además, esta expresión cumple con la condición de llegar al equilibrio, ya que es claro que satisface la expresión 2.44; basta con sumar ambos lados por ν . De manera similar, también se garantiza que no se caerá en una situación de equilibrio dinámico, en la que el sistema fluctúe entre dos o más estados, pues al igualar las tasas se asegura que el sistema pase igual del estado ν al estado μ , evitando que la probabilidad de ocupación de algunos estados cambie de manera cíclica.

Posteriormente, al tomar la condición de balance detallado 2.46 y teniendo en cuenta que buscamos estados de equilibrio, se puede concluir que la condición para las probabilidades de transición debe tomar la forma:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}. \quad (2.47)$$

Finalmente, una vez conocido el comportamiento de las probabilidades de transición, es conveniente separarlas en dos, con el fin de simplificar su implementación en el algoritmo deseado. Esto se logra considerando que la probabilidad se descompone de la siguiente manera:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu), \quad (2.48)$$

donde, $g(\mu \rightarrow \nu)$ es la probabilidad de elegir este cambio, y generalmente es en este aspecto donde se busca cumplir con la ergodicidad. Por otro lado, $A(\mu \rightarrow \nu)$ es la tasa de aceptación, que indica qué tan aceptado es el cambio. Este último elemento será el que se utilice principalmente en el algoritmo implementado en la presente tesis.

Algoritmo de Metropolis

El algoritmo de Metropolis fue propuesto por primera vez por Metropolis y su equipo con la intención de simular esferas sólidas en gases [23]. Para explicar este algoritmo, retomamos las ideas de las condiciones de ergodicidad y de balance detallado mostradas en la ecuación 2.47, y, tomando la expresión de la separación de probabilidades mostrada en la ecuación 2.48, obtenemos una condición para la elección de las tasas de transición en nuestro sistema de Monte Carlo, la cual se muestra a continuación:

$$\frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (2.49)$$

siendo esta la base para la elección de la tasa de aceptación en el algoritmo que se usará en esta tesis.

Partiendo de lo anterior, es necesario caracterizar el criterio de selección del cambio. Para esto, es importante recordar que el sistema, en su mayoría, permanecerá en un número limitado de estados accesibles, y no en todo el rango disponible. Debido a esto, es necesario que el cambio energético entre el sistema antes y después del cambio sea lo más bajo posible. La opción más sencilla es tomar un espín aleatorio del sistema y evaluar su cambio. De esta manera, es fácil verificar la ergodicidad del sistema, puesto que es evidente que se puede llegar a cualquier estado accesible del sistema solo considerando cambios de uno en uno. Siguiendo esta misma línea, el criterio de selección de cambio se puede generar como se muestra a continuación:

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N},$$

usando esta probabilidad de selección constante en la expresión 2.49 se obtiene la ecuación final que condiciona la tasa de aceptación, siendo esta la que se muestra en la expresión 2.50

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (2.50)$$

Siendo así, una manera intuitiva de obtener estas tasas de aceptación es considerar que toman la forma

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\beta \frac{1}{2}(E_\nu - E_\mu)}, \quad (2.51)$$

donde A_0 podemos tomarlo como el valor máximo posible de $e^{-\beta \frac{1}{2}(E_\nu - E_\mu)}$, el cual, considerando el modelo de Ising típico, es $e^{\beta z J}$, dejando la tasa de transición como:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{\beta \frac{1}{2}(E_\nu - E_\mu + z J)}. \quad (2.52)$$

No obstante, se ha demostrado que esta tasa decae rápidamente con la diferencia de energía [22]. Debido a esto, en este trabajo nos ceñiremos al algoritmo de Metropolis, donde

se considera una tasa de transición condicional, que se muestra a continuación:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{si } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{si otro caso.} \end{cases} \quad (2.53)$$

Esta forma de elegir la tasa de transición se justifica fácilmente teniendo en cuenta la física del problema, o dicho de otra manera, si se considera la energía de transición, se pueden plantear tres escenarios para la transición del estado μ al estado ν . El primero de estos se da cuando $E_\nu - E_\mu < 0$, lo que implica que el cambio minimiza la energía y, por lo tanto, es una transición natural del sistema. En este caso, su tasa de aceptación debe ser igual a uno. El segundo caso corresponde a cuando $E_\nu - E_\mu = 0$, lo que indica que el cambio no altera la energía del sistema, por lo que es indiferente realizarlo. Finalmente, el último caso se presenta cuando $E_\nu - E_\mu > 0$, lo que implica que, por minimización de energía, esta transición no es accesible, dejando como única opción las fluctuaciones térmicas. Esto explica por qué su tasa de aceptación toma la forma $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$.

Tomando esto como base, consideraremos para esta tesis el algoritmo que se muestra a continuación:

1. Se elige aleatoriamente un espín σ_i del sistema
2. Se calcula $\Delta E = 2\sigma_i \sum_j J_{i,j} \sigma_j$, siendo σ_j el j -ésimo primer vecino de σ_i .
3. Se evalúa ΔE , si $\Delta E < 0$ el sistema minimiza energía y se acepta el cambio tomando $\sigma_i = -\sigma_i$ y se vuelve al punto 1, si no es así se pasa al punto 4.
4. Se calcula el valor de $A = e^{-\beta \Delta E}$, siendo $\beta = \frac{1}{K_B T}$.
5. Si $A > 1$ se elige $A = 1$.
6. Se genera un número aleatorio r tal que $r \in [0, 1]$.
7. Se evalúa si $A > r$, entonces se acepta el cambio en el sistema y se toma que $\sigma_i = -\sigma_i$.
8. Se vuelve al paso 1.

Finalmente, se tiene que la magnetización y la susceptibilidad para este tipo de sistemas se calculan de la siguiente manera:

$$M = \sum_i^N \sigma_i, \quad (2.54)$$

$$\chi_m = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{K_B T}. \quad (2.55)$$

Capítulo 3

Desarrollo teórico

Una parte fundamental y la base de este trabajo es la implementación del método GRCM en diversos sistemas. Este modelo ha sido previamente aplicado, arrojando resultados mixtos [24–29]. A lo largo de su evolución, el modelo ha sufrido varias modificaciones: comenzó con el análisis de enlaces simples en el modelo de Ising, avanzó hacia implementaciones en el modelo de Blume-Capel, donde se incorporaron imperfecciones en la red [27, 30, 31], y finalmente se transformó en un modelo de enlaces aleatorios con un enfoque más probabilístico, en el que el comportamiento de los enlaces depende de la distancia interatómica entre los espines.

En esta tesis se trabajará con el modelo más reciente estudiado [4], considerando un ajuste mediante redes neuronales y ampliando el modelo para incluir interacciones con segundos vecinos en los sistemas donde sea necesario.

Antes de realizar las implementaciones al modelo, es fundamental caracterizarlo con mayor detalle en función de las necesidades de los sistemas que se van a estudiar. Para ello, consideremos la expresión 2.33, en la cual analizaremos más a fondo el parámetro de orden $\overline{f_N}$. En este caso, dicho parámetro representará la magnetización promedio por espín al abordar transiciones de ferromagnético a paramagnético o de antiferromagnético a paramagnético, así como el parámetro de Edwards-Anderson para las transiciones de vidrio de espín.

Siguiendo lo planteado en los artículos previamente mencionados [18] y, por simplicidad, se considerarán los grupos de $N = 1$ y $N = 2$ espines. Estos grupos se representan en las Figuras 3.1(b) y 3.1(a).

Tomando como base el modelo de Ising reescalado 2.3 y aplicándolo a los grupos de uno y dos espines, se obtienen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_1 &= - \sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1, \\ \mathcal{H}_2 &= - \sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} \sigma_1 - K_{1,2} \sigma_1 \sigma_2 - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \sigma_2,\end{aligned}$$

donde z es el número de coordinación o primeros vecinos, y $K_{i,j}$ es la energía de enlace con el reescalado mencionado en secciones previas. A partir de las expresiones anteriores y considerando el ensamble canónico propuesto por Boltzmann, se puede calcular la función

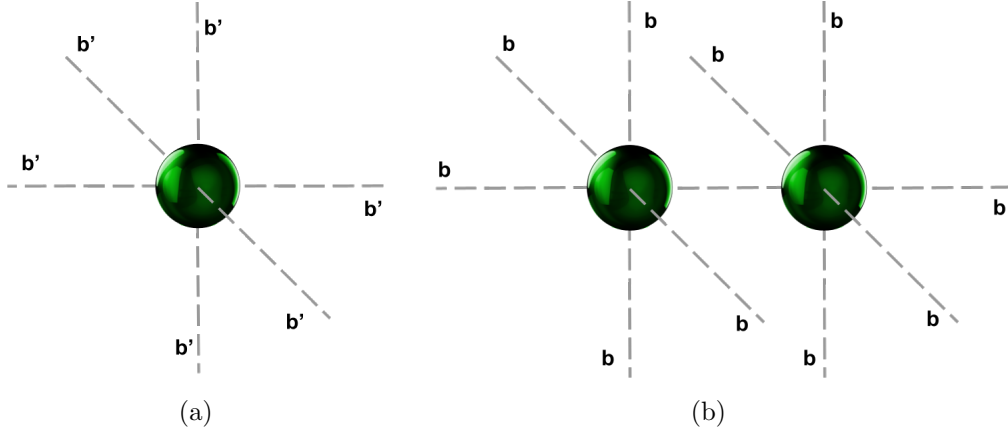


Figura 3.1: (a) Ilustración de un clusters de un espín en una red cubica simple. (b) Ilustración de un clouster de dos espines en una red cubica simple.

de partición para el sistema de un espín, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
 Z_1 &= \sum_{\{\sigma_1\}} e^{\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1} \\
 &= e^{\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i}} + e^{-\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i}} \\
 Z_1 &= \frac{1}{2} \cosh \left(\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} \right),
 \end{aligned}$$

donde la suma sobre σ_1 representa la suma de todos los valores posibles de σ_1 , que, al considerar espines semi-enteros, toma los valores 1 o -1 . De manera análoga, para el grupo de dos espines, se tiene:

$$\begin{aligned}
 Z_2 &= \sum_{\{\sigma_1\}, \{\sigma_2\}} e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} \sigma_1 + K_{1,2} \sigma_1 \sigma_2 + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \sigma_2} \\
 &= e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + K_{1,2} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i}} + e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - K_{1,2} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i}} \\
 &\quad + e^{-\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - K_{1,2} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i}} + e^{-\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + K_{1,2} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i}} \\
 Z_2 &= e^{K_{1,2}} \cosh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \right) + e^{-K_{1,2}} \cosh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \right).
 \end{aligned}$$

De manera similar, se calcula la magnetización por espín para el grupo de un espín, obteniendo:

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_1 \rangle_1 &= \frac{1}{Z_1} \sum_{\{\sigma_1\}} \sigma_1 e^{\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1} \\
 &= \frac{1}{Z_1} \left(e^{\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i}} - e^{-\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i}} \right) \\
 \langle \sigma_1 \rangle_1 &= \tanh \left(\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} \right),
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

de forma análoga, para el sistema con 2 espines se llega a que:

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_1 \rangle_2 &= \frac{1}{Z_2} \sum_{\{\sigma_1\}, \{\sigma_2\}} \sigma_1 e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} \sigma_1 + K_{1,2} \sigma_1 \sigma_2 + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \sigma_2} \\
 &= \frac{1}{Z_2} \left(e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + K_{1,2} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i}} - e^{-\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - K_{1,2} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i}} \right. \\
 &\quad \left. + e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - K_{1,2} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i}} - e^{-\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + K_{1,2} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i}} \right) \\
 \langle \sigma_1 \rangle_2 &= \frac{e^{K_{1,2}} \sinh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \right) + e^{-K_{1,2}} \sinh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \right)}{e^{K_{1,2}} \cosh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \right) + e^{-K_{1,2}} \cosh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \right)}. \quad (3.2)
 \end{aligned}$$

Siguiendo lo mencionado en la sección anterior, se busca obtener el parámetro de orden cerca del punto de transición de fase, lo cual implica considerar el caso $b \rightarrow 0$ tanto en la ecuación 3.1 como en la ecuación 3.2. De esta manera, se obtienen las siguientes expresiones:

$$\langle \sigma_1 \rangle_1 = \sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} + \mathcal{O}(b^3) \quad (3.3)$$

$$\langle \sigma_1 \rangle_2 = \sum_i^{z-1} K_{i,1} b_{1,i} + \tanh(K_{1,2}) \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \mathcal{O}(b^3). \quad (3.4)$$

Luego, partiendo de lo anterior, se puede obtener el parámetro de Edwards-Anderson, calculado como $q = \langle \sigma \rangle^2$. Este parámetro se utiliza para modelar las transiciones de fase de tipo vidrio de espín, ya que actúa como un símil de la correlación de un espín consigo mismo en el tiempo. Esto se debe a que una característica del estado de vidrio de espín es su invariabilidad temporal. Siguiendo esta idea, se obtienen las expresiones que se muestran a continuación:

$$q_1 = \sum_{i,j}^z K'_{1,i} b'_{1,i} K'_{1,j} b'_{1,j} + \mathcal{O}(b^3) \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned}
 q_2 &= \sum_{i,j}^{z-1} K_{i,1} b_{1,i} K_{j,1} b_{1,j} + \tanh(K_{1,2}) \sum_{i,j}^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} K_{j,1} b_{1,j} \\
 &\quad + \tanh(K_{1,2}) \sum_{i,j}^{z-1} K_{i,1} b_{1,i} K_{j,2} b_{2,j} + \tanh^2(K_{1,2}) \sum_{i,j}^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} K_{j,2} b_{2,j} + \mathcal{O}(b^3). \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

3.1. Implementaciones del método de GRM

Finalmente, partiendo de las expresiones anteriores, se calcula el promedio configuracional, despreciando los términos de orden superior. Esto conduce a las expresiones generales

del método, las cuales se presentan a continuación:

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle_1} = z \overline{K'_{1,i}} b \quad (3.7)$$

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle_2} = (z - 1) b (\overline{K_{1,i}} \pm \tanh(\overline{K_{1,2}}) \overline{K_{2,i}}) \quad (3.8)$$

$$\overline{q_1} = z h \overline{K_{1,i}^2} \quad (3.9)$$

$$\overline{q_2} = (z - 1) h (\overline{K_{1,i}^2} + \tanh^2(\overline{K_{1,2}}) \overline{K_{2,i}^2}), \quad (3.10)$$

donde $\overline{b_{i,l} b_{j,k}} = \delta_{i,j} \delta_{l,k} h$, con h representando el cuadrado del campo medio. Esta condición surge debido a la configuración aleatoria del estado de vidrio de espín, que provoca que el promedio del campo medio sea igual a cero. Sin embargo, el promedio cuadrado de los términos, por razones intuitivas, no es nulo. Esto implica que la única posibilidad de que el promedio del campo medio no sea cero ocurre cuando se considera el cuadrado del mismo, lo que simplifica las dobles sumas [18]. Esta es también la razón por la cual los términos intermedios de q_2 en la ecuación 3.6 se eliminan en la expresión 3.10, y los $K_{i,j}$ se agrupan en los términos de las esquinas.

De manera similar, dentro del promedio consideramos que $\overline{b_{1,j}} = b$ y $\overline{b_{2,j}} = \pm b$, donde el campo medio positivo corresponde a un sistema en estado ferromagnético, es decir, cuando ambos espines sienten un campo medio en la misma dirección. De igual forma, asumimos que el campo medio del segundo espín es negativo en el caso de un estado antiferromagnético, o dicho de otra manera, cuando ambos espines reciben un campo medio opuesto que los alinea de forma antiparalela.

Por otro lado, también es importante destacar que en las ecuaciones anteriores los promedios de $K_{i,j}$, $\tanh(K_{1,2})$ y $b_{i,j}$ se separan, ya que son variables independientes. En cuanto a $K_{i,j}$ y $b_{i,j}$, es evidente por sus definiciones que no están relacionadas. Por otro lado, $\tanh(K_{1,2})$ y $K_{i,j}$ son independientes, ya que en este último caso no se considera el término $i = 1, j = 2$ dentro de la suma, de ahí que el número de coordinación sea $(z - 1)$.

No obstante, las expresiones previas son las más generales del método, sin haber sido aún igualadas, como se muestra en la relación 2.33, lo cual constituye la base de este trabajo. De esta manera, para poder implementarlo en cada sistema de manera individual, es necesario encontrar una forma de diferenciar cada uno de estos, considerando sus composiciones, estequiometría y las relaciones únicas entre espines. Para ello, se utiliza el promedio configuracional que se muestra en la expresión 2.34, realizado a través de la densidad de probabilidad de enlace de cada sistema.

3.1.1. Sistema $Fe_p Mn_{0.6-p} Al_{0.4}$

Para el sistema $Fe_p Mn_{0.6-p} Al_{0.4}$, se parte de la densidad de probabilidad de enlace ya estudiada en artículos previos [4], la cual adopta la forma que se muestra a continuación:

$$P(K_{i,j}) = p^2 \delta(K_{i,j} - K_1(p)) + x^2 \delta(K_{i,j} - K_2(x)) + 2px \delta(K_{i,j} - K_3(p)) + q(2 - q) \delta(K_{i,j}), \quad (3.11)$$

el primer término de la suma corresponde a los enlaces de tipo $Fe - Fe$, con una probabilidad de ocurrencia p^2 y una energía de enlace reescalada que depende de su respectiva concentración, donde p representa la concentración de hierro en la aleación. En este caso,

se considera la concentración como un símil de la probabilidad de encontrar un elemento de este tipo. Esto se debe a la similitud en sus cálculos y conceptos, ya que la concentración se calcula como:

$$\frac{\text{cantidad deseada}}{\text{total}},$$

mientras que la probabilidad, en su forma más simple, se determina como :

$$\frac{\text{eventos favorables}}{\text{eventos posibles}}.$$

De esta manera, la concentración puede interpretarse como la probabilidad de encontrar un determinado elemento dentro del conjunto total de átomos de la aleación.

De manera análoga, el segundo término corresponde a los enlaces de tipo $Mn - Mn$, cuya probabilidad de ocurrencia es x^2 , donde x representa la concentración de manganeso y se relaciona con la concentración de hierro mediante $x = 0.4 - p$. Este tipo de enlace tiene una energía reescalada negativa, ya que típicamente corresponde a enlaces antiferromagnéticos; sin embargo, para mantener la generalidad, se dejará con signo positivo.

El tercer término corresponde a los enlaces de tipo $Fe - Mn$, con una probabilidad de ocurrencia $2px$, donde el factor 2 surge de las dos configuraciones posibles: $Fe - Mn$ y $Mn - Fe$. Estos enlaces tienen una energía de enlace negativa, que depende de la concentración de hierro; no obstante, también se dejará con signo positivo para conservar la generalidad.

Finalmente, el último término de la suma corresponde a los enlaces con aluminio, los cuales se agrupan dentro de un único tipo debido a que este elemento interactúa de manera paramagnética con todos los demás. Por esta razón, su probabilidad de ocurrencia es la suma de todos los enlaces posibles, los cuales son:

$$\text{probabilidad} = \overbrace{2xq}^{Mn-Al} + \overbrace{2pq}^{Fe-Al} + \overbrace{q^2}^{Al-Al} = q[2(x + p + q) - q] = q(2 - q), \quad (3.12)$$

donde q representa la concentración de aluminio, la cual es constante e igual a 0.6. Además, se cumple que $x + p + q = 1$. De manera similar, al ser todos estos enlaces de tipo paramagnético, su energía de enlace es igual a cero.

Siguiendo con los argumentos anteriores, una pregunta natural que puede surgir es: ¿por qué consideramos que las energías de enlace dependen de la concentración? Esto se responde reflexionando sobre la naturaleza de este tipo de energías. Al ser resultado de la interacción entre dos espines, estas energías dependen de la distancia entre ellos, o dicho de otro modo, de la distancia interatómica entre los átomos que los componen. Esta energía es una función de dicha distancia, lo cual ha sido ampliamente estudiado durante años y se ilustra de manera más clara en la gráfica de Bethe-Slater [10]. Dicha gráfica, mostrada en la Figura 2.2, ilustra cómo no solo la magnitud de la energía varía con la distancia, sino también la naturaleza de esta, llegando incluso a cambiar de signo con la distancia interatómica.

Por otro lado, para los tipos de sistemas en los que se centrará nuestro estudio, se ha demostrado que el parámetro de red depende fuertemente de la concentración de hierro dentro de la aleación. Por lo tanto, por transitividad, se puede afirmar que la distancia interatómica también dependerá significativamente de esta concentración [32, 33]. Esto justifica por qué, en nuestro sistema, la energía depende de dicha concentración

Si revisamos las expresiones 3.7, 3.8, 3.9 y 3.10, es evidente que faltan los promedios de las variables $\overline{K_{i,j}}$, $\overline{K_{i,j}^2}$, $\overline{\tanh(K_{i,j})}$ y $\overline{\tanh^2(K_{i,j})}$. Para obtener el valor de $\overline{K_{i,j}}$, basta con tomar la densidad de probabilidad de enlace previamente planteada en 3.11 y aplicarla en la ecuación 2.34, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}\overline{K_{i,j}} &= \int K_{i,j} P(K_{i,j}) dK_{i,j} \\ &= \int K_{i,j} [p^2 \delta(K_{i,j} - K_1(p)) + x^2 \delta(K_{i,j} - K_2(x)) + 2px \delta(K_{i,j} - K_3(p)) + q(2 - q) \delta(K_{i,j})] dK_{i,j} \\ &= p^2 K_1(p) + x^2 K_2(x) + 2px K_3(p),\end{aligned}\tag{3.13}$$

de manera análoga se realizan los demás promedios como se muestra a continuación:

$$\overline{K_{i,j}^2} = p^2 K_1^2(p) + x^2 K_2^2(x) + 2px K_3^2(p)\tag{3.14}$$

$$\overline{\tanh(K_{i,j})} = p^2 \tanh(K_1(p)) + x^2 \tanh(K_2(x)) + 2px \tanh(K_3(p))\tag{3.15}$$

$$\overline{\tanh^2(K_{i,j})} = p^2 \tanh^2(K_1(p)) + x^2 \tanh^2(K_2(x)) + 2px \tanh^2(K_3(p)),\tag{3.16}$$

agregando esto a las expresiones 3.7, 3.8, 3.9 y 3.10 se obtiene que:

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle}_1 = z[p^2 K_1'(p) + x^2 K_2'(x) + 2px K_3'(p)]b\tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}\overline{\langle \sigma_1 \rangle}_2 &= (z - 1)b[p^2 K_1(p) + x^2 K_2(x) + 2px K_3(p)][1 \pm p^2 \tanh(K_1(p)) \pm x^2 \tanh(K_2(x)) \\ &\quad \pm 2px \tanh(K_3(p))]\end{aligned}\tag{3.18}$$

$$\overline{q_1} = z[p^2 K_1'^2(p) + x^2 K_2'^2(x) + 2px K_3'^2(p)]h\tag{3.19}$$

$$\begin{aligned}\overline{q_2} &= (z - 1)h[p^2 K_1^2(p) + x^2 K_2^2(x) + 2px K_3^2(p)][1 + p^2 \tanh^2(K_1(p)) + x^2 \tanh^2(K_2(x)) \\ &\quad + 2px \tanh^2(K_3(p))].\end{aligned}\tag{3.20}$$

Posteriormente, siguiendo con lo visto en la expresión 2.33 es necesario derivar las expresiones anteriores con respecto al campo medio b obteniendo lo siguiente:

$$\frac{\partial \overline{\langle \sigma_1 \rangle}_1}{\partial b} = z[p^2 K_1'(p) + x^2 K_2'(x) + 2px K_3'(p)]\tag{3.21}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{\langle \sigma_1 \rangle}_2}{\partial b} &= (z - 1)[p^2 K_1(p) + x^2 K_2(x) + 2px K_3(p)][1^2 \tanh(K_1(p)) \pm x^2 \tanh(K_2(x)) \\ &\quad \pm 2px \tanh(K_3(p))]\end{aligned}\tag{3.22}$$

$$\frac{\partial \overline{q_1}}{\partial b} = z2b[p^2 K_1'^2(p) + x^2 K_2'^2(x) + 2px K_3'^2(p)]\tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{q_2}}{\partial b} &= (z - 1)2b[p^2 K_1^2(p) + x^2 K_2^2(x) + 2px K_3^2(p)][1 + p^2 \tanh^2(K_1(p)) + x^2 \tanh^2(K_2(x)) \\ &\quad + 2px \tanh^2(K_3(p))],\end{aligned}\tag{3.24}$$

donde se consideró lo ya mencionado $h = b^2$.

Después, igualando las magnetizaciones y los parámetros q , como se indica en la ecuación 2.33, y aplicando ambas expresiones en los puntos fijos del sistema, se obtienen las expresiones

finales que modelan el sistema. Estas se presentan a continuación:

$$z[p^2 K_1(p) + x^2 K_2(x) + 2px K_3(p)] = (z - 1)[p^2 K_1(p) + x^2 K_2(x) + 2px K_3(p)] [1 \pm p^2 \tanh(K_1(p)) \pm x^2 \tanh(K_2(x)) \pm 2px \tanh(K_3(p))] \quad (3.25)$$

$$z2b[p^2 K_1^2(p) + x^2 K_2^2(x) + 2px K_3^2(p)] = (z - 1)2b[p^2 K_1(p) + x^2 K_2(x) + 2px K_3(p)] [1 + p^2 \tanh^2(K_1(p)) + x^2 \tanh^2(K_2(x)) + 2px \tanh^2(K_3(p))]. \quad (3.26)$$

Finalmente, al simplificar las expresiones anteriores, se obtienen las relaciones de recurrencia que serán utilizadas para el ajuste de los datos experimentales. Estas relaciones, a su vez, mediante el uso de redes neuronales, proporcionarán una aproximación al comportamiento de la energía de enlace. Dichas relaciones se presentan en las ecuaciones 3.27 y 3.28.

$$0 = z - (z - 1) \left[1 \pm p^2 \tanh(K_1(p)) \pm x^2 \tanh(K_2(x)) \pm 2px \tanh(K_3(p)) \right] \quad (3.27)$$

$$0 = z - (z - 1) \left[1 + p^2 \tanh^2(K_1(p)) + x^2 \tanh^2(K_2(x)) + 2px \tanh^2(K_3(p)) \right]. \quad (3.28)$$

La expresión 3.27 se encarga de ajustar las transiciones de tipo ferromagnético-paramagnético, asumiendo el lado de las sumas, y de tipo antiferromagnético-paramagnético, considerando el lado de las restas. De manera similar, la expresión 3.28 será utilizada para todas las transiciones que involucren estados de tipo vidrio de espín.

3.1.2. Sistema $Fe_p Al_{1-p}$ en primeros vecinos

De manera similar al caso anterior, para analizar el sistema $Fe_p Al_{1-p}$ es necesario implementar una densidad de probabilidad de enlace específica para este sistema. A partir de esta, se pueden utilizar las expresiones generales previamente conocidas (3.7 y 3.8) para derivar la relación de recurrencia única correspondiente. En este caso, se empleará únicamente el lado positivo de la segunda ecuación, dado que este sistema solo presenta transiciones de tipo ferromagnético-paramagnético. Esto es coherente con la naturaleza de sus componentes, ya que el hierro es típicamente ferromagnético, mientras que el aluminio, al ser paramagnético, actúa únicamente como un elemento diluyente. Sin embargo, esta idea será discutida en mayor detalle en secciones posteriores.

De esta manera, siguiendo con lo ya estudiado previamente [34], dando buenos resultados en general, se tomará la densidad de probabilidad que se muestra a continuación:

$$P(K_{i,j}) = p^2 \delta(K_{i,j} - K_0(p)) + (1 - p^2) \delta(K_{i,j}), \quad (3.29)$$

de manera análoga al sistema previo, el primer término de la suma corresponde a los enlaces de tipo $Fe - Fe$, con una probabilidad de ocurrencia de p^2 y una energía de enlace que depende de la concentración de hierro. De forma similar, el segundo término de la suma representa los enlaces de tipo paramagnético, que abarcan todos los enlaces que involucran al aluminio, siguiendo un enfoque similar al del sistema estudiado previamente.

Por otro lado, siguiendo los pasos planteados en el sistema previo y utilizando la densidad de probabilidad 3.29 junto con la ecuación 2.34, se calculan los promedios configuracionales de las expresiones $\overline{K_{i,j}}$ y $\overline{\tanh(K_{1,j})}$, obteniendo las siguientes expresiones:

$$\overline{K_{i,j}} = p^2 K_1(p) \quad (3.30)$$

$$\overline{\tanh(K_{i,j})} = p^2 \tanh(K_1(p)), \quad (3.31)$$

$$(3.32)$$

implementando las expresiones anteriores en las ecuaciones correspondientes a las transiciones de tipo ferromagnético-paramagnético 3.7 y 3.8, se obtiene lo siguiente:

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle}_1 = z p^2 K'_0(p) b \quad (3.33)$$

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle}_2 = (z - 1) b p^2 K_0(p) [1 + p^2 \tanh(K_0(p))]. \quad (3.34)$$

Posteriormente, al derivar las expresiones anteriores, igualarlas según la ecuación 2.33 y aplicarlas en los puntos fijos de la relación de recurrencia, se obtienen las relaciones de recurrencia del método GRM, como se muestra a continuación:

$$\left. \frac{\partial \overline{\langle \sigma_1 \rangle}_1}{\partial b} \right|_{b \rightarrow 0} = \left. \frac{\partial \overline{\langle \sigma_1 \rangle}_2}{\partial b} \right|_{b \rightarrow 0} \quad (3.35)$$

$$z p^2 K_0(p) = (z - 1) p^2 K_0(p) [1 + p^2 \tanh(K_0(p))], \quad (3.36)$$

finalmente, simplificando y despejando la expresión anterior se obtiene que:

$$0 = -1 + \frac{(z - 1)}{z} [1 + p^2 \tanh(K_0(p))], \quad (3.37)$$

siendo esta expresión la que se ajustará por medio de redes neuronales, cuyos resultados se observarán en secciones posteriores.

3.1.3. Sistema $Fe_p Al_{1-p}$ en segundos vecinos

Retomando la idea del sistema estudiado en la sección anterior, ($Fe_p Al_{1-p}$), tenemos, en teoría, una aleación que consta de un elemento antiferromagnético y uno paramagnético, el cual actúa como diluyente. Este sistema se utiliza comúnmente como material para imanes, incorporando un elemento diluyente que no altera significativamente la magnetización de saturación ni la remanencia magnética de la aleación, conservando sus propiedades ferromagnéticas.

No obstante, en la realidad esto no ocurre, o al menos no en todas las concentraciones. Esto se debe a que, en diversas ocasiones, se ha observado la existencia de fases inusuales, tales como la fase de vidrio de espín y el vidrio de espín reentrante, dentro de este tipo de aleaciones [5–7], lo que deja en el aire la pregunta: *¿por qué se encuentran y cómo surgen este tipo de fases exóticas en una aleación que, a priori, es simple?*

Para responder a esta pregunta, basta con reflexionar sobre cómo se generan, por lo general, este tipo de fases. Estas se deben al fenómeno de frustración de espín y a las bajas temperaturas, donde la última condición se puede cumplir independientemente del sistema. Esto nos lleva a la necesidad de explicar por qué un sistema que, a priori, solo tiene interacciones ferromagnéticas puede presentar frustración de espines. La razón de esto es que, en este sistema en particular, aparecen interacciones de segundos vecinos entre los átomos de hierro, con los átomos de aluminio actuando como intermediarios, generando lo que se conoce como interacción de superintercambio [5–7].

Ahora que tenemos una interacción adicional, se hace evidente que el modelo previamente utilizado, que solo considera primeros vecinos, es insuficiente. Por lo tanto, es necesario expandirlo para incluir interacciones de segundos vecinos, como lo requiere el sistema. Para ello, debemos cambiar nuestra formulación desde el hamiltoniano usado para nuestros sistemas de uno y dos espines, considerando ahora los que se muestran a continuación:

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1 - \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1, \quad (3.38)$$

$$\mathcal{H}_2 = - \sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} \sigma_1 - K_{1,2} \sigma_1 \sigma_2 - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \sigma_2 - \sum_i^{z'} K^*_{1,i} b_{1,i} \sigma_1 - \sum_i^{z'} K^*_{2,i} b_{2,i} \sigma_2, \quad (3.39)$$

donde las sumas adicionales representan las interacciones con los segundos vecinos, z' es el número de estos vecinos y $K^*_{i,j}$ es la interacción entre ellos. Luego, siguiendo lo visto en la sección anterior para primeros vecinos, realizamos el cálculo de la función de partición para el hamiltoniano 3.38, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} Z_1 &= \sum_{\{\sigma_1\}} e^{\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1 + \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1} \\ &= e^{\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} + \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i}} + e^{-\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} - \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i}} \\ Z_1 &= \frac{1}{2} \cosh \left(\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} + \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i} \right), \end{aligned}$$

análogamente, para el sistema de dos espines se calcula su función partición de la siguiente

manera:

$$\begin{aligned}
 Z_2 &= \sum_{\{\sigma_1\}, \{\sigma_2\}} e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} \sigma_1 + K_{1,2} \sigma_1 \sigma_2 + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \sigma_2 + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} \sigma_1 + \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i} \sigma_2} \\
 &= e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + K_{1,2} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} + \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i}} \\
 &\quad + e^{-\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - K_{1,2} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} - \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} + \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i}} \\
 &\quad + e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - K_{1,2} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} - \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i}} \\
 &\quad + e^{-\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + K_{1,2} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} - \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} - \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i}} \\
 Z_2 &= e^{K_{1,2}} \cosh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} + \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i} \right) \\
 &\quad + e^{-K_{1,2}} \cosh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} - \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i} \right).
 \end{aligned}$$

Posteriormente, y de manera similar al sistema anterior, se calcula la magnetización promedio por espín de ambos grupos de espines, comenzando con el de un espín, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_1 \rangle_1 &= \frac{1}{Z_1} \sum_{\{\sigma_1\}} \sigma_1 e^{\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1 + \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i} \sigma_1} \\
 &= \frac{1}{Z_1} \left(e^{\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} - \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i}} + e^{-\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} - \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i}} \right) \\
 \langle \sigma_1 \rangle_1 &= \tanh \left(\sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} - \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b'_{1,i} \right), \tag{3.40}
 \end{aligned}$$

así mismo se hace para el grupo de dos espines, llegando a que:

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_1 \rangle_2 &= \frac{1}{Z_2} \sum_{\{\sigma_1\}, \{\sigma_2\}} \sigma_1 e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} \sigma_1 + K_{1,2} \sigma_1 \sigma_2 + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} \sigma_2 + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} \sigma_1 + \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i} \sigma_2} \\
 &= \frac{1}{Z_2} \left[e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + K_{1,2} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} + \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i}} \right. \\
 &\quad - e^{-\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - K_{1,2} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} - \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} + \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i}} \\
 &\quad + e^{\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - K_{1,2} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} - \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i}} \\
 &\quad \left. - e^{-\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + K_{1,2} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} - \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} - \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i}} \right] \\
 \langle \sigma_1 \rangle_2 &= \frac{1}{Z_2} \left[e^{K_{1,2}} \sinh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} + \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i} \right) \right. \\
 &\quad \left. + e^{-K_{1,2}} \sinh \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} - \sum_i^{z-1} K_{i,2} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K_{1,i}^* b_{1,i} - \sum_i^{z'} K_{2,i}^* b_{2,i} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Después, al evaluar estas magnetizaciones en los puntos de campo medio bajo (transición de fase), se obtienen las expresiones que se muestran a continuación:

$$\langle \sigma_1 \rangle_1 = \sum_i^z K'_{1,i} b'_{1,i} + \sum_i^{z'} K'^*_{1,i} b_{1,i} + \mathcal{O}(b^3) \quad (3.41)$$

$$\langle \sigma_1 \rangle_2 = \left(\sum_i^{z-1} K_{1,i} b_{1,i} + \sum_i^{z'} K^*_{1,i} b_{1,i} \right) + \tanh(K_{1,2}) \left(\sum_i^{z-1} K_{2,i} b_{2,i} + \sum_i^{z'} K^*_{2,i} b_{1,i} \right) \mathcal{O}(b^3). \quad (3.42)$$

Luego, al aplicar el promedio configuracional y eliminar los términos pequeños de orden superior, llegamos a dos expresiones generales para un sistema de segundos vecinos, las cuales se muestran en las ecuaciones 3.43 y 3.44.

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle}_1 = b(z \overline{K'_{1,i}} + z' \overline{K'^*_{1,i}}) \quad (3.43)$$

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle}_2 = b \left((z-1) \overline{K_{1,i}} + z' \overline{K^*_{1,i}} \right) + \tanh(K_{1,2}) b \left((z-1) \overline{K_{2,i}} + z' \overline{K^*_{2,i}} \right). \quad (3.44)$$

Repitiendo el problema presentado anteriormente con respecto a los promedios configuracionales, surge la duda sobre la elección de la densidad de probabilidad de enlace utilizada en este sistema. Para esta tesis, se propone utilizar la densidad de probabilidad que se muestra a continuación:

$$P(K_{i,j}) = \overbrace{p^2 \delta(K_{i,j} - K_3(p)) + (1-p^2) \delta(K_{i,j})}^{\text{primeros vecinos}} + \overbrace{p^2(1-p) \delta(K^*_{i,j} - K_4(p)) + (p^3 - p^2 + 1) \delta(K^*_{i,j})}^{\text{segundos vecinos}}, \quad (3.45)$$

donde, como se delimita en la ecuación, los primeros dos términos corresponden a las interacciones de primeros vecinos, siendo estas iguales a las consideradas en la sección anterior. Estas tienen su componente de enlaces ferromagnéticos con energía de enlace $K_3(p)$, representado por el primer término de la suma, y su contraparte paramagnética representada en el segundo término de la suma. Por otro lado, el tercer y cuarto término de la suma representan las interacciones de segundos vecinos. El tercer término corresponde a los enlaces de segundos vecinos previamente mencionados, a los cuales se les asigna una energía de enlace $K_4(p)$, la cual típicamente debe arrojar un comportamiento antiferromagnético. Sin embargo, para no perder la generalidad, se toma como positivo, siendo el signo determinado por el ajuste. Estos enlaces tienen una probabilidad de ocurrencia de $p(1-p)p$, lo que representa encontrar un enlace de la forma $Fe - Al - Fe$. Finalmente, el último término de la suma representa todos los demás tipos de enlaces de segundos vecinos que no generan interacción, cuya probabilidad de ocurrencia es la suma de las mismas, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} P_{ocu} &= \overbrace{p^3}^{Fe-Fe-Fe} + \overbrace{2p^2(1-p)}^{Fe-Fe-Al} + \overbrace{3(1-p)^2p}^{Al-Fe-Al} + \overbrace{(1-p)^3}^{Al-Al-Fe} \\ &= p^3 + 2p^2 - 2p^3 + 1 - 3p + 3p^2 - p^3 + 3p - 6p^2 + 3p^3 \\ &= p^3 - p^2 + 1, \end{aligned}$$

siendo todas estas configuraciones enlaces que no presentan interacción con segundos vecinos y, por consiguiente, su energía de interacción es igual a cero.

Aplicando la densidad de probabilidad 3.29 a las expresiones de $\overline{K_{i,j}}$, $\overline{K_{i,j}^*}$ y $\overline{\tanh(K_{i,j})}$, que se encuentran dentro de las ecuaciones 3.43 y 3.44, se obtiene que:

$$\overline{K_{i,j}} = p^2 K_3(p) \quad (3.46)$$

$$\overline{K_{i,j}^*} = p^2 (1-p) K_4(p) \quad (3.47)$$

$$\overline{\tanh(K_{i,j})} = p^2 \tanh(K_1(p)), \quad (3.48)$$

introduciendo estas expresiones en las ecuaciones 3.43 y 3.44, obtenemos las ecuaciones finales del promedio configuracional de la magnetización por espín, como se muestran a continuación:

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle}_1 = b(z p^2 K_3(p) + z' p^2 (1-p) K_4(p)) \quad (3.49)$$

$$\overline{\langle \sigma_1 \rangle}_2 = b \left((z-1) p^2 K_3(p) + z' p^2 (1-p) K_4(p) \right) \quad (3.50)$$

$$+ b p^2 \tanh(K_3(p)) \left((z-1) p^2 K_3(p) + z' p^2 (1-p) K_4(p) \right). \quad (3.51)$$

Luego, derivando estas expresiones con respecto al campo medio e igualándolas, según lo visto en la ecuación 2.33, se obtiene la expresión base del método de GRCM para el sistema $Fe_p Al_{1-p}$, implementando interacciones a segundos vecinos. Esta expresión se muestra en la ecuación 3.53.

$$(z p^2 K_3(p) + z' p^2 (1-p) K_4(p)) = \left((z-1) p^2 K_3(p) + z' p^2 (1-p) K_4(p) \right) \quad (3.52)$$

$$+ p^2 \tanh(K_3(p)) \left((z-1) p^2 K_3(p) + z' p^2 (1-p) K_4(p) \right), \quad (3.53)$$

finalmente, simplificando dicha expresión se obtiene que:

$$0 = -1 + \frac{p^2 \tanh(K_3(p))}{J_3(p)} [(z-1) J_3(p) + z' ((1-p) J_4(p))], \quad (3.54)$$

donde J_i es la energía de enlace sin el reescalado. Así, la expresión 3.37 será la que se utilizará para ajustar los datos a segundos vecinos, obteniéndose en este caso las energías para ambos tipos de enlaces.

3.2. Implementación del algoritmo de Metropolis

Una vez obtenida la energía de enlace por espín mediante la implementación del método de GRCM y las redes neuronales, es posible realizar simulaciones de todos estos sistemas

de espines utilizando el algoritmo de Metropolis, explicado en secciones previas. La implementación más sencilla de este modelo corresponde al sistema Fe_pAl_{1-p} , debido a que está compuesto únicamente por dos elementos.

Para simular de manera precisa este sistema en particular, es necesario determinar la estructura de la aleación. Esto permitirá obtener el número correcto de primeros vecinos. Afortunadamente, este sistema ha sido estudiado previamente y se sabe que su estructura es BCC (cúbica centrada en el cuerpo), por lo que su número de primeros vecinos es 8.

Para implementar este tipo de redes en una simulación, en este proyecto se partió de un arreglo de matrices con valores 1 y -1 , los cuales representan los espines con orientación hacia arriba o hacia abajo, respectivamente. Al superponerse, estas matrices constituyen la red del sistema, a la que llamaremos **S**.

No obstante, si llenamos todos los espacios de la matriz de forma uniforme, obtenemos una red de tipo cúbico simple, mientras que nuestro sistema es de tipo cúbico centrado en el cuerpo (BCC). Para resolver este problema, se proponen dos tipos de matrices: pares e impares. En las matrices pares, se llenan únicamente los espacios pares de la red, mientras que en las matrices impares, se llenan únicamente los espacios impares. Los espacios restantes en cada matriz se llenan con ceros. Este procedimiento se ilustra en la Figura 3.2, y es fácil ver que, al superponer estas matrices, se obtiene una red BCC.

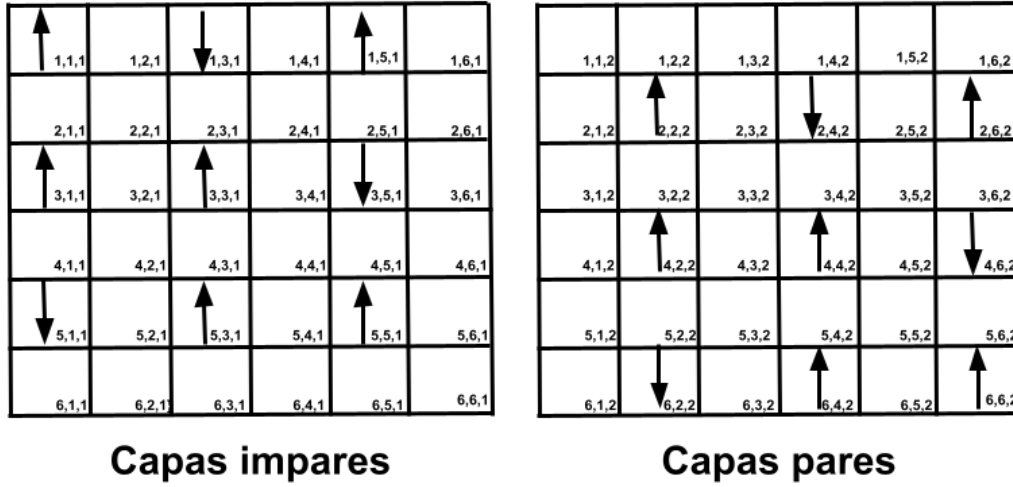


Figura 3.2: Ilustración de la construcción de las matrices que generan la red BCC de la simulación.

Además de esto, cabe destacar que, debido a la gran cantidad de espines considerados en este sistema, la simulación de este trabajo se realizó en paralelo. Esto significa que se ejecutaron múltiples procesos de Monte Carlo simultáneamente. Para llevarlo a cabo, se empleó el método conocido como modelo de damero o tablero de ajedrez.

Este método consiste en dividir el sistema en varias subredes de tamaños iguales, asignando a cada una una característica denominada 'color', que podía ser blanco o negro, como se observa en la ilustración 3.3. Luego, utilizando un computador con múltiples procesadores, se ejecutaron en paralelo los pasos de Monte Carlo para todas las subredes de un mismo color

y, posteriormente, se hizo lo mismo para las subredes del color opuesto. Estos procesos se realizaron de manera independiente entre sí, actualizando la red después de cada iteración. La única dificultad surgió en las fronteras entre subredes, ya que los espines en estos límites tenían como vecinos espines pertenecientes a una subred de color opuesto.

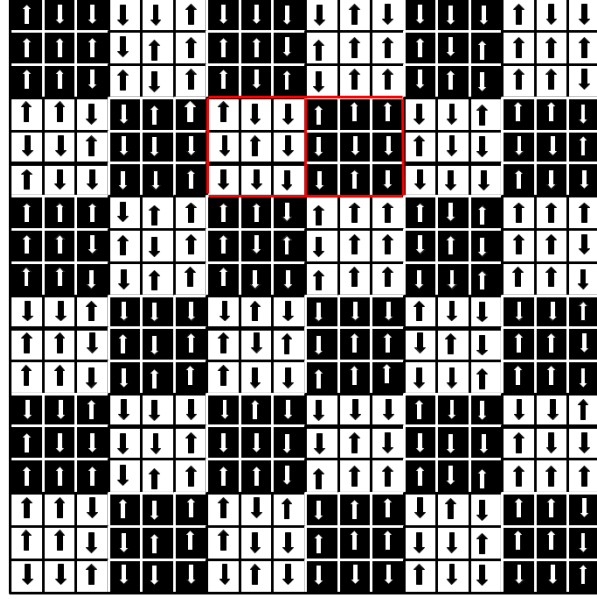


Figura 3.3: Ilustración del modelo de damero en nuestra simulación.

Este problema de las fronteras entre subredes se resuelve de manera sencilla. Para ilustrarlo, consideremos las dos subredes señaladas en rojo en la ilustración 3.3. Imaginemos que primero simulamos la subred blanca. En este caso, nuestro algoritmo no solo toma en cuenta la subred blanca, sino también su contorno de primeros vecinos, considerando únicamente las secciones de las vecinas subredes negras. Aprovechamos que, durante este paso, las subredes vecinas permanecen constantes, como se ilustra en la Figura 3.4. Una vez realizados los pasos de Monte Carlo para las subredes blancas, estas se actualizarán en la red total, y luego se procederá de la misma manera con la subred negra, ahora tomando en cuenta los valores actualizados de la subred blanca.

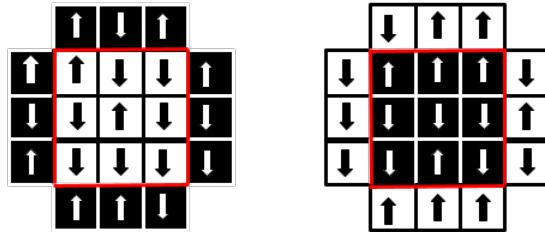


Figura 3.4: ilustración de una subred blanca y negra, junto con el contorno que se toma para la implementación de pasos Montecarlo.

Una vez obtenida la red y conociendo la forma de paralelizar el problema, se procede a realizar distinciones entre los tipos de concentración con los que se va a trabajar, ya que esto está directamente relacionado con el tipo de interacción que tendrá cada espín. Para resolver este problema, se generó una red análoga a la red $\mathbf{S}$, que se denominó $\mathbf{K}$. Esta red recíproca de la red $\mathbf{S}$ contiene la información sobre el tipo de elemento de los espines de la red original, teniendo una relación única entre ambas. Para la elección del tipo del j -ésimo espín, el cual se consigna en el espacio $\mathbf{K}_j$, se toma el valor de la concentración del hierro, que llamaremos p , y se genera un número aleatorio q entre cero y cien, realizando la siguiente operación:

$$\mathbf{K}_j = \begin{cases} 2 & \text{si } p * 100 \geq q \\ 3 & \text{si } p * 100 < q. \end{cases}$$

Siendo 2 la característica de los átomos ferromagnéticos dentro de la matriz $\mathbf{K}$ y, análogamente, 3 la característica de los átomos paramagnéticos dentro de la misma matriz, esta caracterización fue utilizada en el algoritmo de Metropolis para discernir el tipo de interacción entre los átomos y sus vecinos. En cada paso de Monte Carlo, se observaba y evaluaba la energía calculada en el método de GRCM. Si se encontraban dos átomos con la característica $\mathbf{K}$ igual a 2, se asignaba la energía calculada; en caso contrario, se asignaba cero.

Teniendo ya la caracterización completa de la red, se procede a realizar la simulación, comenzando desde un estado desordenado de manera aleatoria y a una temperatura alta. Esto tiene como objetivo simular un punto de partida en un estado paramagnético, lo cual es consistente con la realidad física del sistema. Este estado se logra mediante la generación de números aleatorios en Python, donde la elección de la orientación de cada espín se determina al realizar la operación $(-1)^x$, con $x = 1, 2$, generado aleatoriamente mediante la semilla Mersenne Twister. El algoritmo de Metropolis se ejecuta en este estado un total de nueve veces la cantidad de espines de cada subred, con el fin de intentar garantizar que el sistema pase al menos una vez por todos los espacios. Durante este proceso, se realizan las mediciones correspondientes en cada paso de Monte Carlo para cada temperatura.

Luego, se disminuye de manera progresiva la temperatura en pasos inferiores al 5 % de su valor, con el fin de evitar cambios bruscos en el sistema que puedan afectar la precisión de la simulación y se vuelve a realizar los respectivos pasos Monte Carlo para dicho valor de temperatura. Este proceso se puede replicar de manera sencilla para todas las concentraciones, cambiando únicamente la concentración con la que se calcula la configuración de la red recíproca $\mathbf{K}$.

Adicionalmente a todo lo anterior, antes de tomar las mediciones a cada temperatura, también se realiza un proceso de termalización, lo que significa que se ejecutan un total de pasos de Monte Carlo, similares al tamaño de cada subred, con el fin de evitar que las mediciones de esa temperatura se vean afectadas por la temperatura anterior.

Finalmente, como forma de verificar que el algoritmo de Monte Carlo desarrollado en la base de esta simulación produce resultados físicamente aceptables, se comprobó que se cumple el criterio de Onsager. Esto se realizó generando una red 2D cuadrada simple con concentración de hierro $p = 1$ y energía de interacción reescalada $J/k_B = 1$ para todos los espines. Los resultados obtenidos se muestran en las Figuras 4.22 y 4.23, donde se observa que la temperatura de transición dada por el sistema se encuentra en $T = 2.35$ K. Esto está en concordancia con lo planteado por Onsager en su solución exacta, la cual, bajo estas

condiciones, predice que el valor de esta transición es de $T_C = 2.269185$ K [15], lo que nos da un error porcentual de 3.56 %.

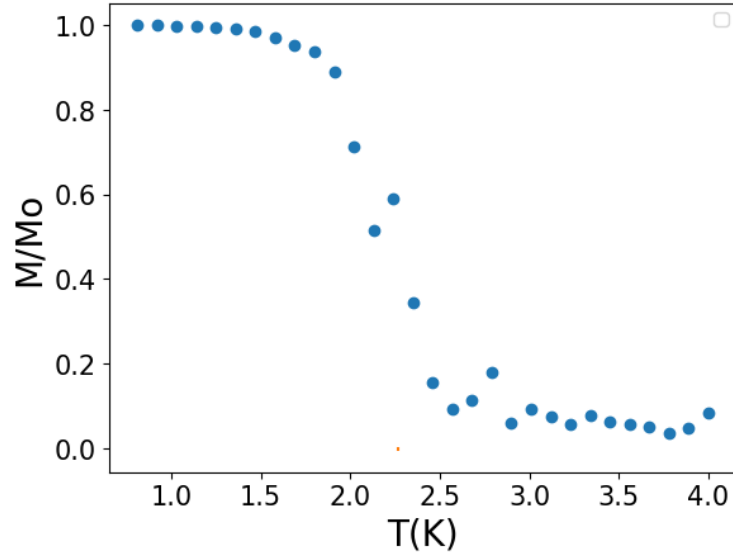


Figura 3.5: Gráfico de magnetización reescalada del algoritmo de prueba.

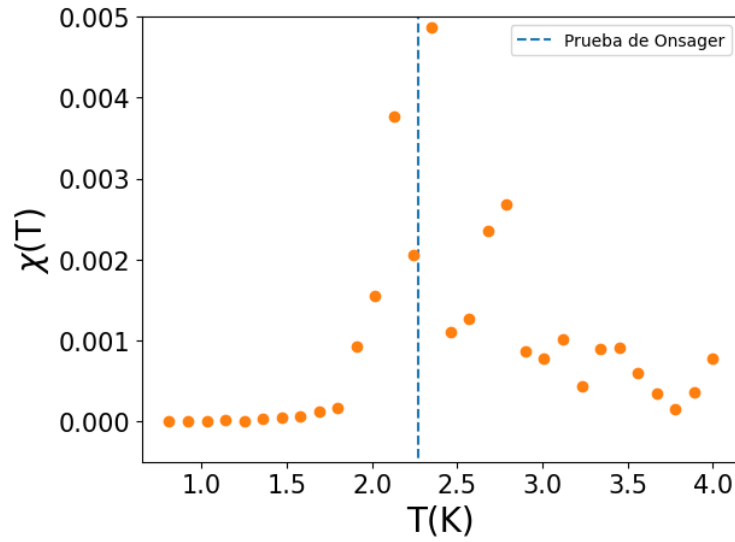


Figura 3.6: Gráfico de susceptibilidad reescalada del algoritmo de prueba mostrando la temperatura de Onsager y nuestro valor de temperatura crítica.

Capítulo 4

Resultados y discusión

Una vez presentados todos los cálculos que servirán como base para el ajuste, las especificaciones de la red utilizada en este trabajo e ilustrada la metodología de la simulación propuesta, se procederá a presentar los resultados obtenidos en esta investigación. Sin embargo, antes de esto, es necesario exponer los datos experimentales de los sistemas que se tomarán como referencia para dichos resultados.

El primer sistema estudiado corresponde a la aleación Fe_pAl_{1-p} , en la cual se parte del análisis de un diagrama de fases magnético dependiente de la temperatura. En este caso, únicamente se observan transiciones de tipo ferromagnético-paramagnético, como se muestra en los datos consignados en la Figura 4.1.

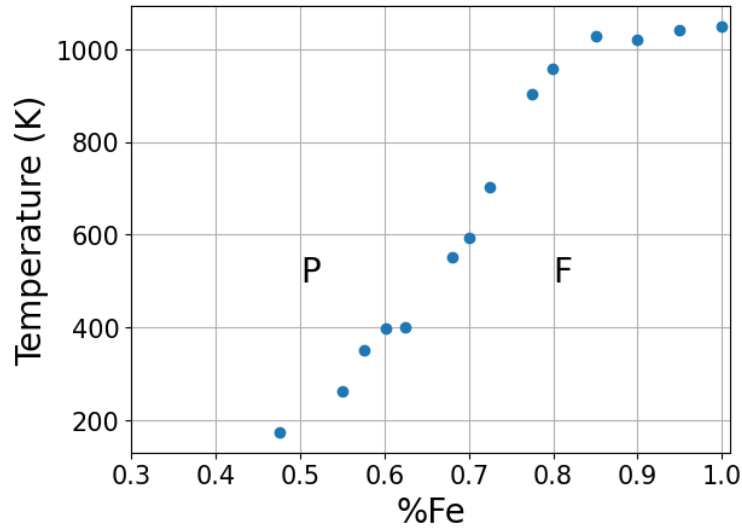


Figura 4.1: Diagrama de fase magnético experimental del sistema Fe_pAl_{1-p} , datos obtenidos de [35–38].

De manera análoga, para el segundo sistema se considerará la aleación $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$. Este sistema es especial debido a la variedad de enlaces presentes, resultado de los diferentes elementos que lo componen. Esto lo conduce a presentar diversos tipos de fases en función de la concentración de sus elementos. Dicho comportamiento se observa claramente en los

datos experimentales que servirán como base para este estudio, los cuales consisten en un diagrama de fases magnético del sistema dependiente de la concentración de hierro. Estos datos se encuentran consignados en la Figura 4.2.

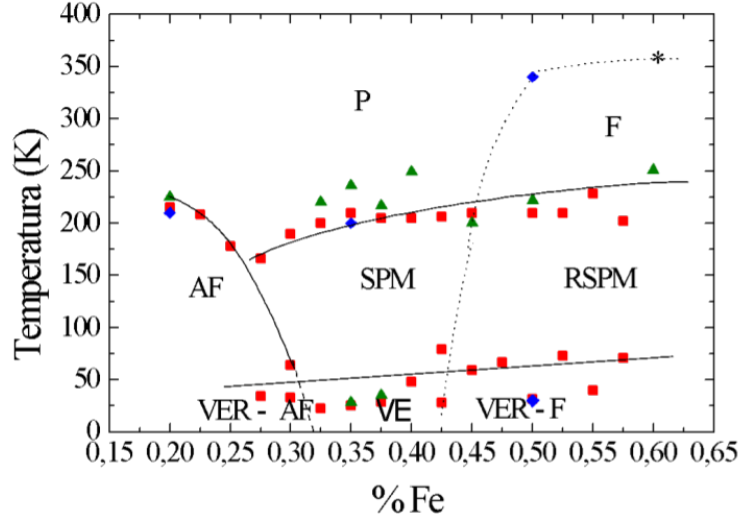


Figura 4.2: Diagrama de fase magnético experimental del sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$, datos obtenidos de [39].

Donde, las fases de vidrio de espín se observan a bajas temperaturas, mientras que la fase antiferromagnética aparece en bajas concentraciones de hierro. Por otro lado, la fase ferromagnética predomina en altas concentraciones de hierro, y la fase paramagnética se encuentra a temperaturas elevadas. Las demás fases corresponden a estados superparamagnéticos, los cuales no se considerarán en este trabajo, ya que este fenómeno se produce principalmente en sistemas de nanopartículas y la intención de este estudio es abordar las interacciones desde un enfoque centrado en las interacciones interatómicas.

4.1. Implementación de la red neuronal

Retomando lo ya mencionado en la sección de marco teórico, en esta tesis se buscará implementar un sistema de redes neuronales para obtener el comportamiento de las energías de enlace para los diferentes sistemas, esto teniendo en cuenta la expresión de la función de costo planteada en la ecuación 2.37, donde $\mathcal{E}(\mathcal{F})$ ahora sabemos que hace referencia al lado derecho del igual en las expresiones 3.37, 3.37, 3.28 y 3.27. Esta función de costo será la que se buscará minimizar mediante el método de Adam, el cual es un método de descenso de gradiente que busca minimizar la función de costo modificando los parámetros de ajuste de cada función de activación.

Siguiendo con la idea de las funciones de activación, para este trabajo se utilizarán las funciones de activación que se muestran a continuación.

1. *Función lineal*: Esta es la función de activación más simple que existe y consta de una función lineal de la forma $f = kx$, con $k > 0$. Esta función se ilustra en la Figura 4.3

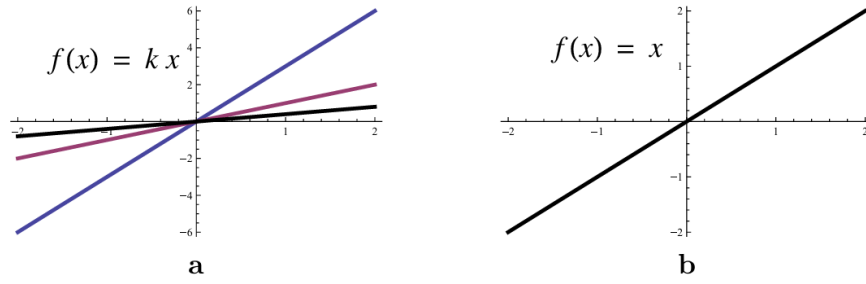


Figura 4.3: Ejemplo de función lineal con: **a)** argumentos diferentes de uno, **b)** argumento igual a uno, imagen obtenida de [8].

2. *Función tangente hiperbólica*: Esta función de activación es simplemente la función tangente hiperbólica de la forma:

$$\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}},$$

la cual se ilustra a continuación:

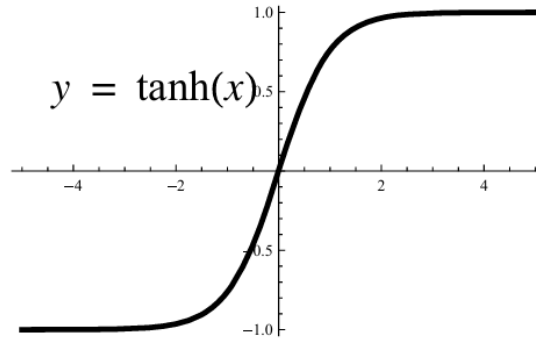


Figura 4.4: Ilustración de la función de activación tangente hiperbólica, imagen tomada de [8].

3. *Función softmax* : Esta función es una normalización de la exponencial de un vector de tamaño k la cual toma la forma:

$$\sigma(z)_j = \frac{e^{z_j}}{\sum_{i=1}^K e^{z_i}},$$

esta función se considera una generalización de la función logística y se ilustra en la figura 4.5.

4. *Función SELU* : Esta función fue propuesta por primera vez por Günter Klambauer y su equipo en el año 2017 [41], en el contexto del estudio de redes neuronales auto-normalizadas durante el proceso de aprendizaje. Debido a esto, su nombre proviene de

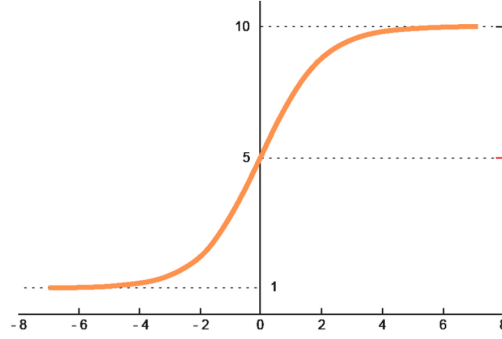


Figura 4.5: Ilustración de la función softmax, imagen tomada de [40].

las siglas “Self-Normalizing Neural Networks”. La forma de esta función es la que se muestra a continuación:

$$\text{SELU}(x) = \begin{cases} \lambda x & x > 0 \\ \lambda \alpha (e^x - 1) & x \leq 0, \end{cases}$$

donde λ es una constante de escala la cual típicamente se toma como $\lambda \approx 1.0507$ y α es el factor de ajuste de la pare exponencial la cual toma típicamente el valor de $\alpha \approx 1.6733$, siendo la forma de esta función la que se muestra a continuación:

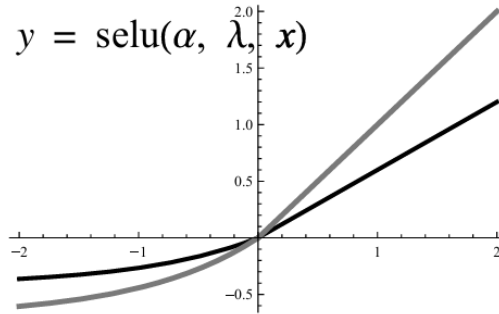


Figura 4.6: Ilustración de la función SELU, imagen tomada de [8].

5. *Función ReLU*: El nombre de esta función viene del frase “rectified linear unit”, la cual describe su función que no es mas que eliminar todo dato negativo dejando pasar unicamente los positivos, esta función se define tal que:

$$\text{ReLU}(x) = \frac{x + |x|}{2},$$

la forma de esta función se muestra en la Figura 4.7

6. *Función GeLU*: La función “Gaussian Error Linear Unit” es una función en utilidad similar a la ReLU ya estudiada, esto debido que su objetivo es eliminar los inputs negativos, con la diferencia de que esta función no los borra de manera brusca sino

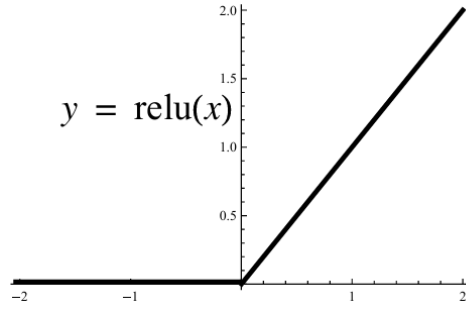


Figura 4.7: Ilustración de la función ReLU, imagen tomada de [8].

que lo hace de manera suave, siendo la forma de esta función la que se muestra a continuación:

$$\text{GeLU}(x) = x \frac{1}{2} [1 + \text{erf}(x/\sqrt{2})], \quad (4.1)$$

donde $\text{erf}(x)$ se refiere a la función de error, esta función también se puede aproximar de la forma:

$$\text{GeLU}(x) \approx \frac{1}{2}x \left(1 + \tanh \left[(x + 0.044715x^2)\sqrt{2/\pi} \right] \right),$$

siendo la forma de esta función la que se muestra a continuación:

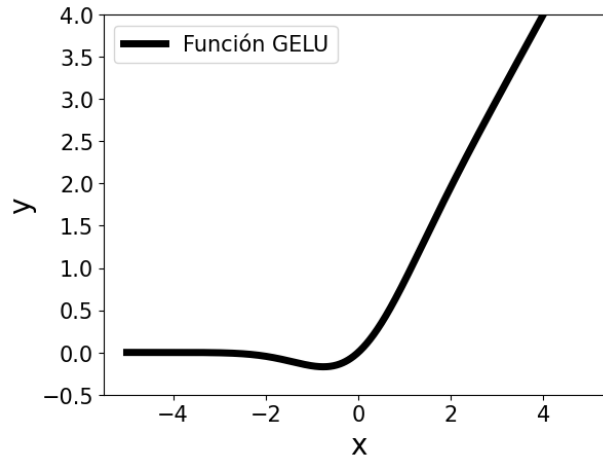


Figura 4.8: Ilustración de la función GeLU, para consultar implementaciones de esta función buscar en [42].

Finalmente, para este trabajo se combinaron todos estos tipos de funciones dentro de una red de más de 500 neuronas, realizando más de 2000 iteraciones de aprendizaje y obteniendo los resultados que serán mostrados en secciones posteriores.

4.2. Estudio del sistema Fe_pAl_{1-p} para primeros vecinos

4.2.1. Ajuste de ciclo único

Como se mencionó previamente en esta tesis, para estudiar el sistema Fe_pAl_{1-p} se abordaron dos enfoques diferentes. El primero se centra exclusivamente en el estudio de los primeros vecinos. Para ello, se utilizaron los datos consignados en la Figura 4.1 y se partió de la expresión teórica para la relación de recurrencia en este tipo de sistemas, dada en la ecuación 3.37. Además, se aplicó el ajuste utilizando redes neuronales implementando un algoritmo de aprendizaje supervisado de deeplearning, tal como se detalló en secciones anteriores (Cabe resaltar que este tipo de algoritmos no solo son útiles para ajustes sino también para solucionar cualquier tipo de ecuaciones) ¹. En este caso, para obtener la función de costo se partió de la expresión 3.37, de la cual se deriva la relación 4.2.1. Esta relación se introduce posteriormente en la expresión 2.37 para calcular la función de costo correspondiente a este sistema.

$$\mathcal{E}(\mathcal{F})|_i = -1 + \frac{(z-1)}{z} \left[1 + p_i^2 \tanh \left(\frac{J_0(p_i)}{k_B T_i} \right) \right].$$

De este modo, se obtuvo el comportamiento de la función de la energía de enlace que mostró el mejor ajuste con respecto a los datos experimentales. La gráfica que ilustra el comportamiento de la reducción de esta función se presenta en la Figura 4.9, evidenciando un marcado decrecimiento después de aproximadamente 200 iteraciones. Esto confirma la adecuada implementación del método Adam para minimizar dicha función. Posteriormente, la función oscila en torno a un mismo mínimo durante el resto de las iteraciones, lo que brinda una buena indicación del número necesario de iteraciones para lograr una minimización eficiente y, por ende, un mejor ajuste. Finalmente, se obtuvo un valor para la función de costo del orden de 10^{-2} .

En cuanto a la energía de enlace obtenida a partir de este ajuste, a diferencia de los estudios previos realizados con este mismo método, en los que se asumía un comportamiento lineal de la energía y se ajustaba en función de ello [4, 34], en esta tesis se avanzó un paso más implementando redes neuronales. Estas permiten obtener una función para la energía que se ajusta a los datos experimentales sin imponer restricciones previas. A partir de este enfoque, se generó la gráfica de la energía que se presenta a continuación:

Al observar la Figura 4.10, es evidente que el comportamiento de la energía de enlace es completamente positivo, lo cual concuerda plenamente con lo esperado para enlaces de primeros vecinos de hierro. Asimismo, se puede notar claramente que esta aproximación a la energía difiere significativamente del comportamiento lineal propuesto en estudios previos, representando un gran avance al otorgar mayor versatilidad al modelo.

Asimismo, al observar la gráfica de la energía previamente presentada, en el punto de máxima concentración de hierro, se puede obtener una aproximación del valor de la energía de enlace para el hierro puro. Al extraer este dato, se determina que se encuentra alrededor de 13 eV, valor que está dentro del rango experimentalmente aceptado, el cual oscila entre 10 eV y 50 eV [26, 43], demostrando consistencia con lo ya verificado. Además, al analizar el

¹Las especificaciones de la red utilizada y el proceso de ajuste se describen en el Apéndice A.

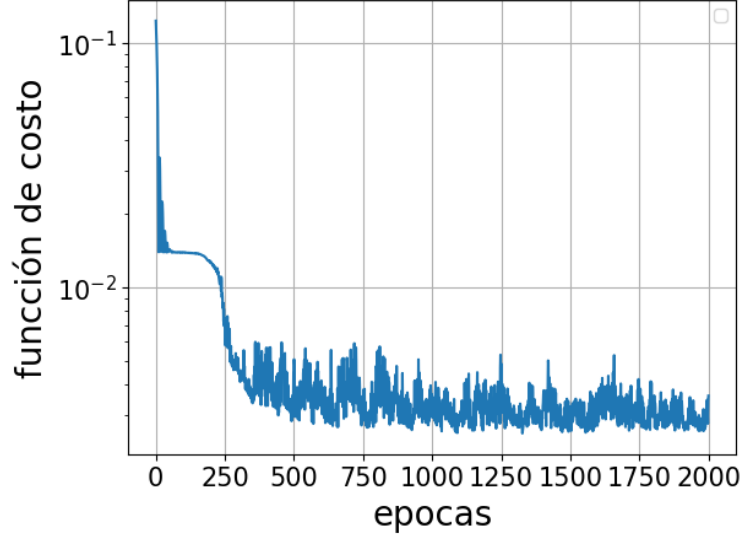


Figura 4.9: Gráfica del comportamiento de la función de costo del sistema Fe_pAl_{1-p} en cada iteración considerando únicamente primeros vecinos.

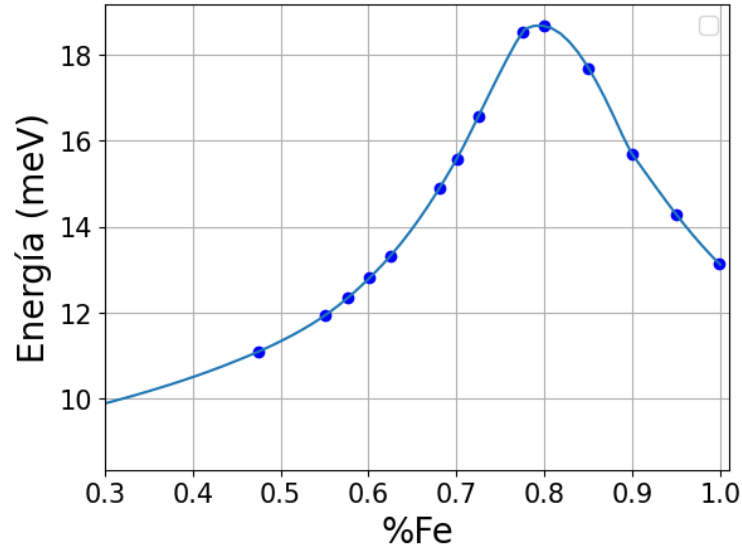


Figura 4.10: Gráfico de energía de enlace entre átomos de hierro contra concentración, para el sistema Fe_pAl_{1-p} para primeros vecinos, obtenida a través de la implementación en redes neuronales.

comportamiento de dicha energía y considerar la concentración como un símil de la distancia interatómica, se observa una clara similitud con la curva de Bethe-Slater [10], evidenciando mínimos en puntos de concentraciones muy bajas y muy altas (análogamente distancias interatómicas muy cercanas o muy lejanas) y máximos en valores intermedios.

Finalmente, para completar lo referente al estudio de este sistema bajo esta vertiente, se presenta la gráfica del ajuste obtenido, la cual se muestra en la Figura 4.11.

Si se observa la Figura 4.11, se puede notar que el ajuste de los datos es preciso en compa-

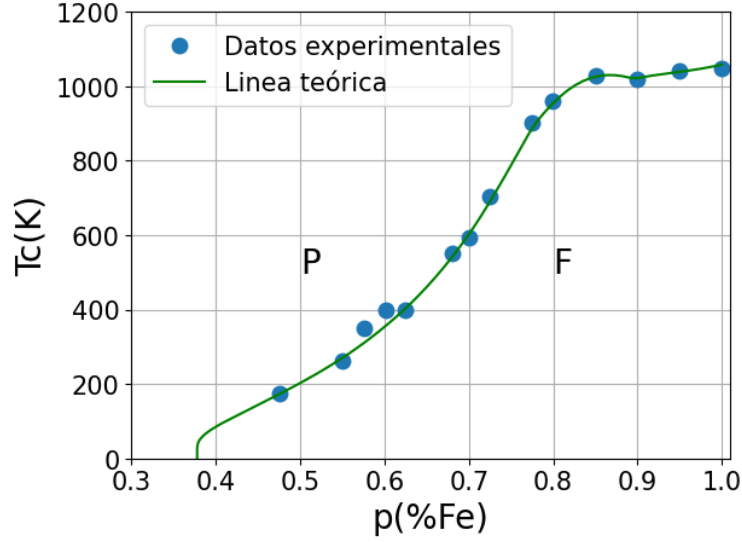


Figura 4.11: Diagrama de fase teórico obtenido del ajuste de los datos del sistema Fe_pAl_{1-p} , implementando redes neuronales en primeros vecinos.

ración con los datos experimentales, presentando el típico estancamiento en la temperatura crítica que exhiben este tipo de sistemas en puntos de alta concentración ferromagnética. Esto se debe al efecto de apantallamiento de estos elementos sobre los átomos diluyentes. Además, cabe resaltar que este modelo conserva las virtudes del utilizado en artículos previos, entre las que destacan el rango energético previamente mencionado y la existencia de los puntos de percolación en el diagrama. Estos puntos corresponden a la desaparición de puentes entre átomos de hierro, los cuales se observan a bajas concentraciones de dicho elemento. Una comparación más detallada entre el modelo actual y el previo se presenta en la Figura 4.12, donde se destacan las ventajas y la mayor precisión del ajuste mediante redes neuronales en relación con la versión empleada en trabajos anteriores.

4.2.2. Ajuste con múltiples iteraciones

Por otro lado, una de las características principales del aprendizaje con redes neuronales es el inicio aleatorio de los parámetros iniciales. Esto significa que el aprendizaje de la red comienza desde puntos aleatorios, lo cual, en cierta medida, es beneficioso para algoritmos que requieren encontrar diversas soluciones a un mismo problema. No obstante, existe el riesgo de que los algoritmos de ajuste caigan en mínimos locales de los parámetros de la red. Este problema podría parecer menor, pero en nuestro caso particular, implicaría no obtener los valores mínimos posibles de los parámetros, lo que llevaría a que la energía obtenida no sea la verdadera, aunque pudiera tener sentido físico.

Para resolver este problema y determinar si el comportamiento encontrado corresponde al mínimo real o a un mínimo local, en esta tesis se optó por realizar múltiples iteraciones del mismo ajuste². Posteriormente, se utilizaron las herramientas de la biblioteca *Pandas* de Python para graficar los resultados de cada ajuste. Como resultado, se obtuvo la gráfica de la

²Los detalles de la red utilizada y los ajustes se encuentran en el Apéndice B.

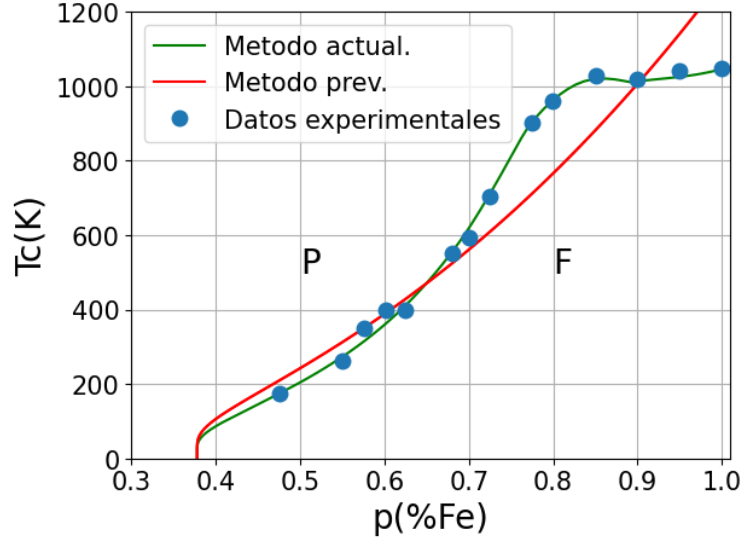


Figura 4.12: Gráfica que muestra la comparación entre el ajuste del modelo previo y el ajuste con el modelo actual de redes neuronales.

función de costo que se muestra en la Figura 4.13, donde se observa que el comportamiento de todas las iteraciones (líneas sombreadas) no difiere significativamente entre sí, mostrando en general el mismo decaimiento alrededor de los 200 ciclos. Este comportamiento coincide con el observado en el primer intento, con solo un ciclo (Figura 4.9), oscilando además todas las iteraciones cerca de un comportamiento promedio (línea oscura).

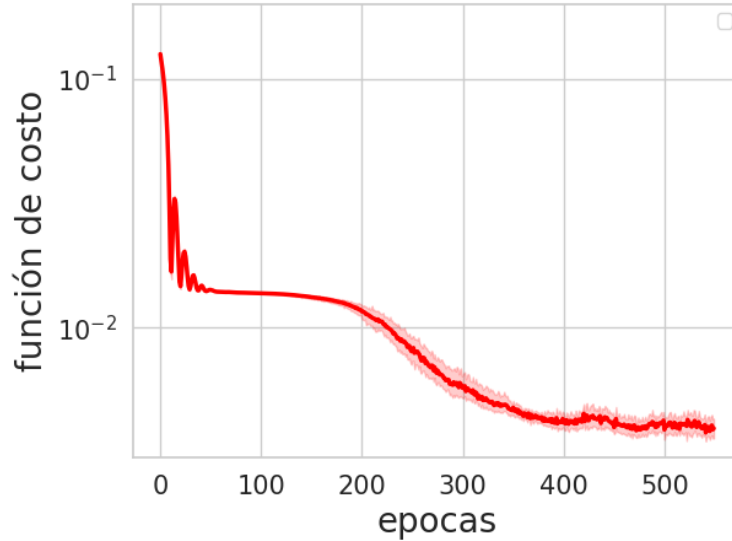


Figura 4.13: Gráfica de las funciones de costo del sistema Fe_pAl_{1-p} , implementado redes neuronales tomando múltiples ciclos, siendo la línea sombreada todos los caminos tomados en cada iteración de aprendizaje de la red y la línea oscura el promedio de los mismos.

De manera análoga a lo presentado en la sección anterior, para este ajuste con múltiples

iteraciones también se obtuvo la correspondiente gráfica de la energía en función de la concentración, la cual se muestra en la Figura 4.14. Al analizar esta figura, se evidencia cómo la energía de enlace en cada iteración converge de forma muy cercana en los puntos experimentales correspondientes, lo cual es de esperarse, ya que ese es el objetivo de un ajuste. Posteriormente, las curvas comienzan a separarse fuera de dichos puntos, pero esta separación es inferior a ± 1 meV, lo que indica una buena extrapolación del modelo hacia regiones fuera de los datos experimentales. Esto confirma la validez del tipo de ajuste utilizado.

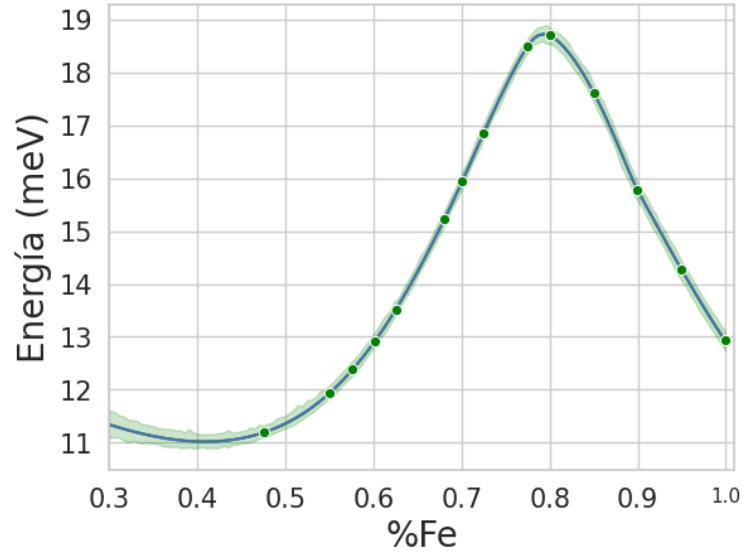


Figura 4.14: Gráfico de la energía de enlace del ajuste del sistema Fe_pAl_{1-p} implementando redes neuronales con múltiples de iteraciones, siendo la línea sombreada todos los caminos tomados en cada iteración de aprendizaje de la red y la línea oscura el promedio de estos.

Finalmente, con base en las energías presentadas en la gráfica anterior y tomando la relación de recurrencia 3.37, se obtienen todas las gráficas de ajuste correspondientes a las diferentes iteraciones, las cuales se muestran en la Figura 4.15. En esta figura se observa cómo todos los ajustes convergen de manera adecuada, a pesar de haber iniciado en puntos aleatorios. Esto confirma que el ajuste realizado corresponde efectivamente al mínimo global de la función de costo y no a un mínimo local del sistema, lo que otorga mayor validez al modelo implementado..

4.3. Estudio del sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$

Por otro lado, al abordar el segundo sistema objeto de estudio de esta tesis (la aleación $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$), se identifican tres tipos de transiciones, lo que da lugar a tres diferentes relaciones de recurrencia para realizar el ajuste. A partir de la expresión general para la función de costo (2.37), junto con las expresiones 3.27 y 3.28, se obtienen las funciones cuya suma de sus normas da como resultado las funciones de costo correspondientes a cada uno

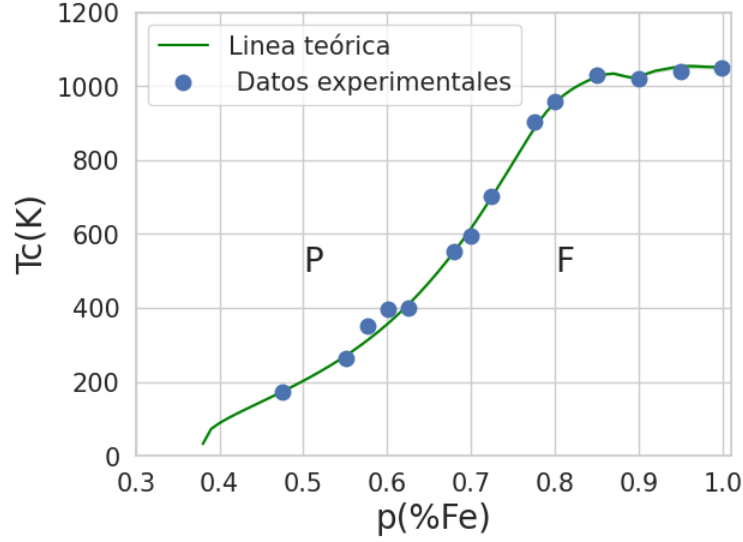


Figura 4.15: Gráfico del ajuste del sistema Fe_pAl_{1-p} implementando redes neuronales con múltiples de iteraciones.

de los ajustes, las cuales se presentan a continuación:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{\text{F-P}}(\mathcal{F})|_i &= 1 - \frac{(z-1)}{z} \left[1 + p_i^2 \tanh\left(\frac{J_1(p_i)}{k_B T_i}\right) + x_i^2 \tanh\left(\frac{J_2(x_i)}{k_B T_i}\right) + 2p_i x_i \tanh\left(\frac{J_3(p_i)}{k_B T_i}\right) \right] \\ \mathcal{E}^{\text{AF-P}}(\mathcal{F})|_i &= 1 - \frac{(z-1)}{z} \left[1 - p_i^2 \tanh\left(\frac{J_1(p_i)}{k_B T_i}\right) - x_i^2 \tanh\left(\frac{J_2(x_i)}{k_B T_i}\right) - 2p_i x_i \tanh\left(\frac{J_3(p_i)}{k_B T_i}\right) \right] \\ \mathcal{E}^{\text{SG}}(\mathcal{F})|_i &= 1 - \frac{(z-1)}{z} \left[1 + p_i^2 \tanh^2\left(\frac{K_1(p_i)}{k_B T_i}\right) + x_i^2 \tanh^2\left(\frac{J_2(x_i)}{k_B T_i}\right) + 2p_i x_i \tanh^2\left(\frac{J_3(p_i)}{k_B T_i}\right) \right], \end{aligned}$$

Siendo estas las encargadas de ajustar las transiciones de tipo ferromagnética-paramagnética, antiferromagnética-paramagnética y de vidrio de espín, respectivamente. Tomando estas funciones de costo y aplicándoles un ajuste mediante redes neuronales análogas al sistema anterior³, y utilizando como base los datos de la Figura 4.2, se obtiene una gráfica que muestra la minimización de estas funciones con respecto a las épocas de entrenamiento. Dicha gráfica se presenta en la Figura 4.16, donde se observa, como regla general para este tipo de gráficos, una disminución de la función de costo después de las cien iteraciones de entrenamiento. Los valores finales, obtenidos tras diez mil ciclos, son del orden de 10^{-2} en el peor de los casos y 10^{-3} en el mejor ajuste. Esto evidencia una buena calidad del ajuste, demostrando que las diferencias entre el valor esperado y el valor obtenido son significativamente pequeñas. Este resultado cobra aún más relevancia si se tiene en cuenta que se trabaja con ajustes del orden de las centenas, logrando diferencias del orden de 10^{-5} entre los valores esperados y las distancias obtenidas.

Dicho lo anterior, al observar el estudio realizado con este mismo sistema utilizando el modelo de energía lineal implementado en investigaciones previas [4], se puede notar que su análogo a la función de costo solo logra reducirse hasta el orden de 10^{-2} . En contraste, con

³Las especificaciones de las redes utilizadas y los ajustes se encuentran en el Apéndice C.

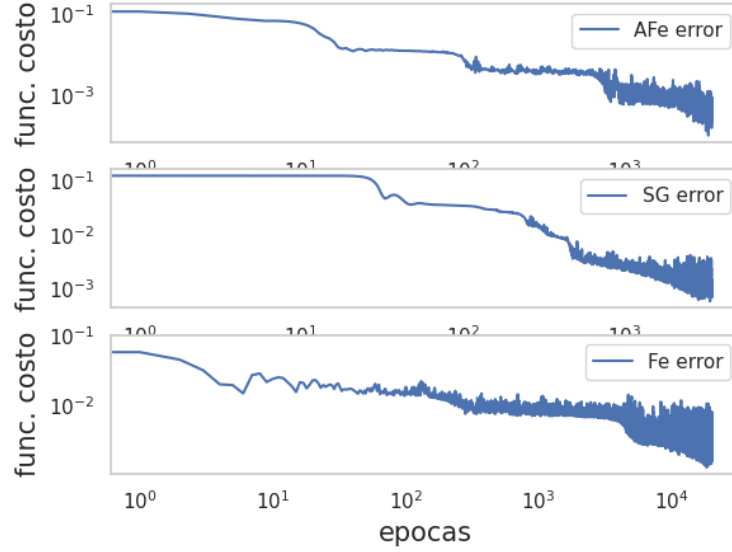


Figura 4.16: Gráfica de las funciones de costo de los ajustes del sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$ contrastado contra el número de iteraciones.

el modelo presentado en este trabajo, se logra disminuir la función de costo un orden de magnitud adicional, evidenciando así una mejora notable en la precisión del ajuste.

Retomando el aspecto más físico del problema, para este sistema también se obtuvo la función correspondiente a la energía de enlace para cada una de las transiciones de fase. Estas funciones se presentan en la Figura 4.17.

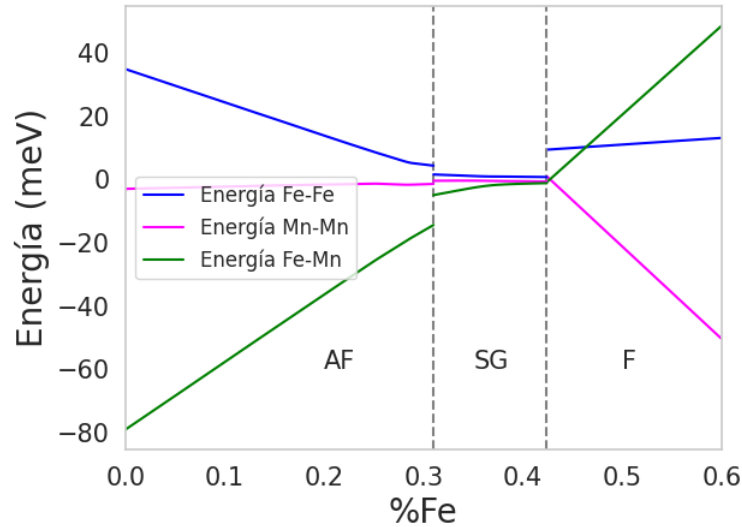


Figura 4.17: Gráfica de la función de energía de enlace del sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$ obtenido por medio de redes neuronales.

Al observar la gráfica de la energía del sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$ (Figura 4.17), se puede notar que, a pesar de no haber impuesto ningún tipo de restricción en el signo de las inter-

acciones y permitir al modelo asignar libremente el tipo de interacción, estas se encuentran, en su mayoría, dentro del rango esperado. Esto se evidencia en la forma en que la energía del enlace $Fe - Fe$ es siempre positiva, indicando una interacción de tipo ferromagnético. De manera similar, para los enlaces $Mn - Mn$, se observa que se cumple con su interacción antiferromagnética en todo momento. Sin embargo, queda cierta incertidumbre respecto a la última parte de los enlaces $Fe - Mn$.

Por otro lado, aunque todos estos ajustes se realizaron de forma individual e independiente entre sí, cabe resaltar que todas las energías se encuentran dentro del mismo rango, es decir, dentro del orden de los mili-electrón-voltios, lo que aporta mayor veracidad al modelo.

Además de lo anterior, al analizar la Figura 4.17, resulta especialmente destacable la reducción de los saltos energéticos entre los ajustes generados por los tipos de transición en comparación con los encontrados en investigaciones previas [4, 34]. Mientras que en estudios anteriores dichos saltos eran de aproximadamente 60 eV, en el presente trabajo se reducen a alrededor de 30 eV, evidenciando una disminución a la mitad del valor previamente obtenido. Finalmente, al tomar la función de energía previa y aplicarla a las relaciones ajustadas, se obtiene la gráfica que se muestra a continuación:

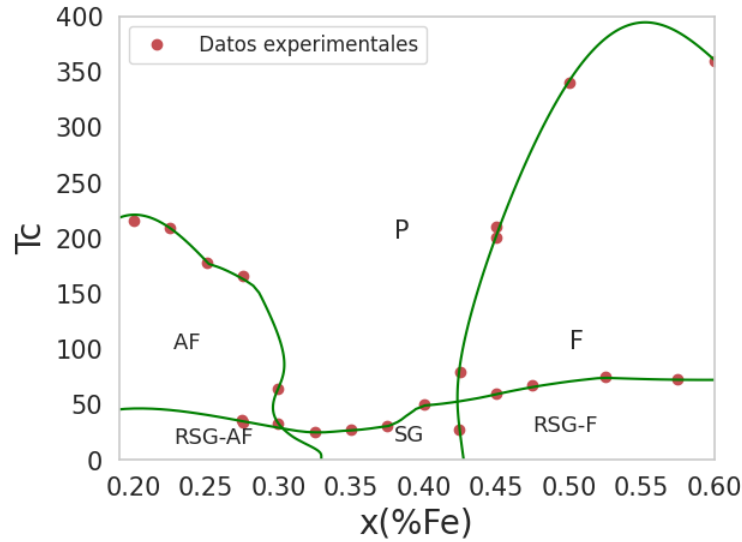


Figura 4.18: Gráfica del ajuste del sistema $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$ obtenido por medio de redes neuronales.

Al analizar la Figura 4.17, se puede observar el buen ajuste de los datos, destacando la conservación de los puntos de percolación en la transición ferromagnética, cuya causa ya se mencionó en el sistema anterior, así como la conservación de las magnitudes en las transiciones de vidrio de espín, presentando una línea continua en todas estas. Otro aspecto relevante de este ajuste es que los datos utilizados son experimentales y cuentan con su respectivo error asociado, lo cual puede influir en los valores de la energía ajustada.

4.4. Estudio del sistema Fe_pAl_{1-p} para segundos vecinos

Retomando las características de segundos vecinos presentes en el sistema Fe_pAl_{1-p} , estas también fueron exploradas mediante el ajuste con redes neuronales, de manera similar al caso de la aleación $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}Si$ bien este ajuste corresponde al mismo sistema utilizado en secciones previas, presenta la complejidad adicional de incluir las energías de enlace de segundos vecinos. No obstante, al implementar redes neuronales, esta complejidad en el ajuste se simplifica ⁴. En cada ajuste se obtuvieron dos funciones de energía: una para primeros vecinos y otra para segundos vecinos. De manera análoga a los sistemas estudiados previamente, en este caso particular se parte de la relación de recurrencia para segundos vecinos consignada en la ecuación 3.54, tomando además la ecuación general para la función de costo expresada en 2.37, obteniendo la relación que se presenta a continuación:

$$\mathcal{E}(\mathcal{F})|_i = -1 + \frac{p^2 \tanh(K_3(p))}{J_3(p)} [(z-1)J_3(p) + z'((1-p)J_4(p))].$$

Siguiendo con lo planteado en los sistemas anteriores y realizando el proceso de múltiples iteraciones, se obtienen, en primera instancia, las gráficas del comportamiento de la función de costo para todas las iteraciones de este sistema, la energía de enlace correspondiente y su respectivo ajuste. Estas se presentan en las Figuras 4.19, 4.14 y 4.21. En ellas se observa que, en general, todas las iteraciones del sistema convergen hacia un promedio similar; dicho de otra manera, las desviaciones del muestreo de la función de costo respecto a las iteraciones son muy pequeñas. Además, en la gráfica mencionada se aprecia cómo la función de costo mantiene un decaimiento constante, alcanzando un punto de estabilización cercano a los 800 ciclos.

Analizando la gráfica de energía presentada en la Figura 4.20, es posible dilucidar varios aspectos con sentido físico. En primer lugar, al observar el comportamiento de la energía para primeros vecinos, se aprecia que esta mantiene su característica forma curva, con un máximo en puntos de concentración intermedia, estableciendo así un símil con la gráfica de Beth-Slater. Además, es importante destacar que este tipo de interacción es siempre de carácter ferromagnético, lo cual se conserva dentro de este ajuste, ya que dicha energía es positiva en todo su recorrido.

Por otro lado, al analizar la gráfica de la energía de segundos vecinos, se observa que esta es negativa en aproximadamente el 80 % de su trayectoria, alcanzando un máximo cerca de los puntos de máxima coexistencia de átomos de hierro y aluminio. Este comportamiento concuerda con la teoría, ya que son estos átomos los que median dicha interacción. Finalmente, también resulta relevante señalar que, para la energía de primeros vecinos de los átomos de hierro, a pesar de las fluctuaciones observadas, esta siempre se mantiene dentro del rango de energías previamente descrito.

Finalmente, tomando la energía previamente calculada y aplicándola a la relación teórica de la ecuación 3.54, se obtiene el ajuste presentado en la expresión 4.21. En este ajuste se observa que, a pesar de la dispersión relativamente alta en la energía de enlace, todos los

⁴Las especificaciones de la red utilizada y el ajuste se encuentran en el Apéndice D.

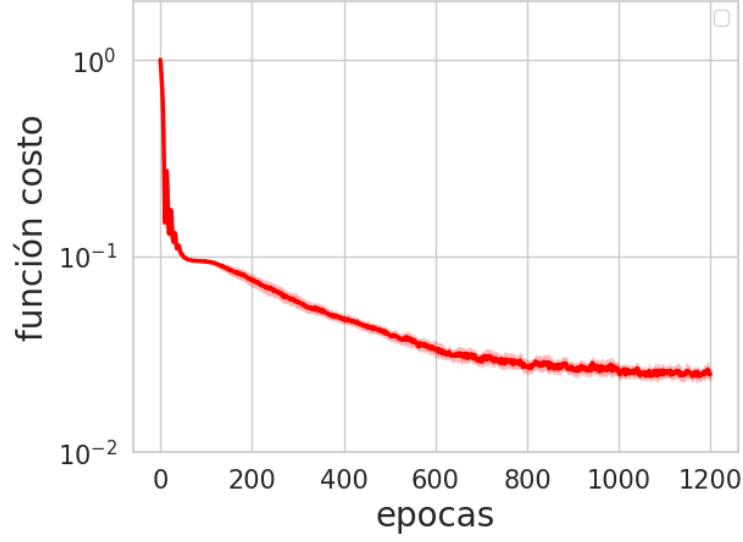


Figura 4.19: Gráfica de la función de costo del ajuste del sistema Fe_pAl_{1-p} en el modelo de segundos vecinos para múltiples iteraciones del ajuste, siendo la línea sombreada todos los caminos tomados en cada iteración de aprendizaje de la red y la línea oscura el promedio de estos.

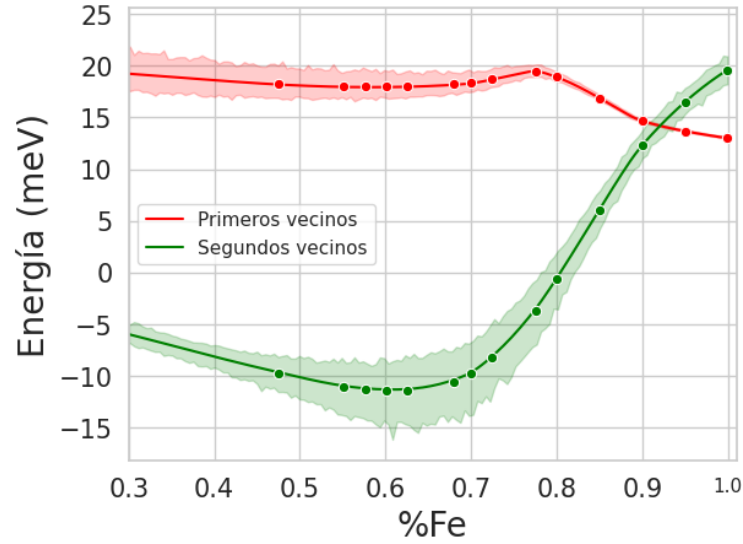


Figura 4.20: Gráfica de la energía del ajuste del sistema Fe_pAl_{1-p} en el modelo de segundos vecinos para múltiples iteraciones, donde la línea roja y verde representan la energía para primeros y segundos vecinos respectivamente, siendo la línea sombreada todos los caminos tomados en cada iteración de aprendizaje de la red y la línea oscura el promedio de estos.

ajustes convergen hacia un promedio que coincide adecuadamente con lo planteado por los datos experimentales.

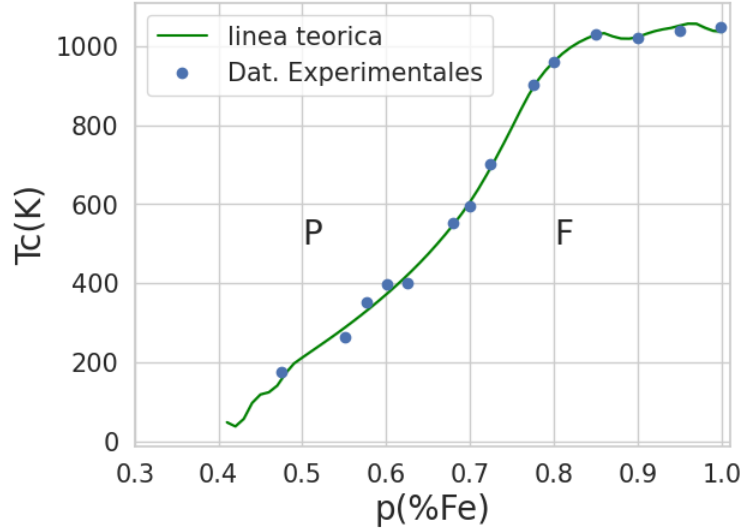


Figura 4.21: Gráfico del diagrama de fase del sistema Fe_pAl_{1-p} , implementando múltiples iteraciones en la función de aprendizaje. aplicando el modelo de segundos vecinos.

4.5. Implementación de la simulación Monte Carlo del sistema Fe_pAl_{1-p}

Como ya se mencionó previamente para el sistemas Fe_pAl_{1-p} también se realizó una simulación de tipo Monte Carlo, esto con el fin de validar el comportamiento de la energía obtenido y además compararlo con el ya presentado en investigaciones previas. Una vez mencionado esto y ya conociendo los métodos implementados el primer resultado obtenido es el concerniente a la magnetización promedio reducida del sistema para diferentes temperaturas, siendo un ejemplo de esta la presentada en la Figura 4.22, donde esta se realizó considerando una concentración de hierro del 89.9% considerando en este caso una energía de enlace $J_{Fe-Fe} \approx 15.7358$ meV siguiendo así con el modelo planteado en la Figura 4.10, mostrando esta gráfica un comportamiento de la magnetización coherente con lo esperado debido teniendo estados de baja magnetización (paramagnético) a altas temperaturas, siendo diferente de cero debido a fluctuaciones térmicas inherentes del sistema, magnetizándose cada vez más al disminuir la temperatura, cosa esperada para el sistema, llegando tener un punto de transición crítica cercano a los 100K, siendo este punto el objeto de estudio de la siguiente Figura.

Así mismo, considerando los valores de la magnetización anteriores y aplicando la expresión para la susceptibilidad magnética (ecuación 2.55) se obtiene la gráfica del comportamiento de esta en función de la temperatura la cual se muestra en la Figura 4.23, obteniendo de esta manera el valor aproximado de la temperatura crítica de transición de fase para este sistema, esto debido a que esta se encuentra en el máximo de la susceptibilidad magnética del sistema, siendo en este caso de $T_c \approx 1060.0$ K, siendo este valor relativamente cercanos al esperado.

Repitiendo el mismo proceso anterior para las concentraciones sugeridas por los datos experimentales se obtienen los datos que se muestran en la Figura 4.24, mostrando además

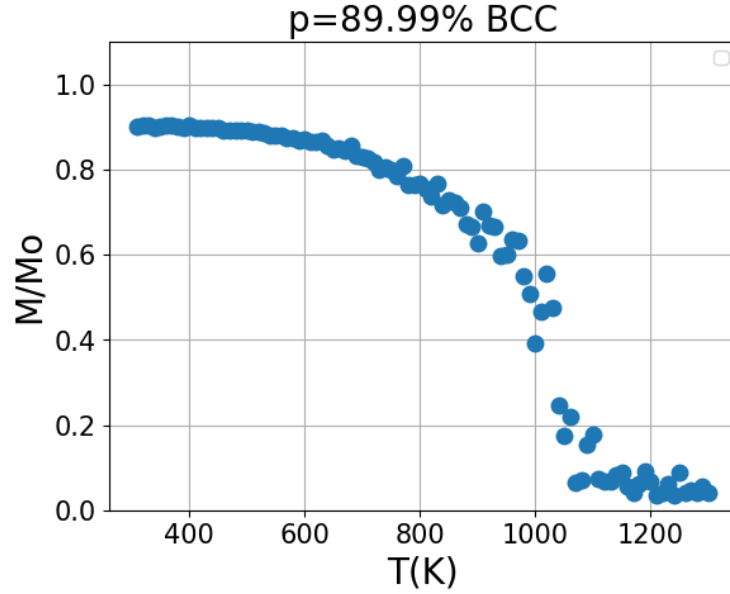


Figura 4.22: Gráfica de Magnetización promedio reducida contra temperatura para el sistema $Fe_{0.899}Al_{0.101}$.

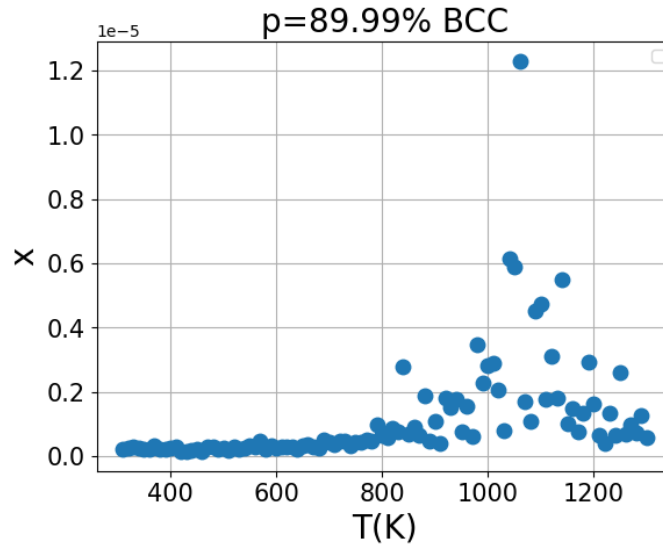


Figura 4.23: Gráfico de la susceptibilidad magnética contra la temperatura para el sistema $Fe_{0.899}Al_{0.101}$.

los resultados obtenidos con el método anterior obtenido en investigaciones previas [34].

Observando la comparación de modelos dada en la Figura 4.24, podemos destacar como al igual que con el método dado por el ajuste en la Figura 4.12, el modelo de energía lineal de energía tiende a distar fuertemente de los datos experimentales a altas concentraciones, esto se puede deber a diverso factores, entre los que se encuentra que este modelo al ser lineal no deja de aumentar la energía con respecto a la concentración lo que deriva en una mayor dificultad térmica para romper sus enlaces, esto de la mano de inherente necesidad de mayor

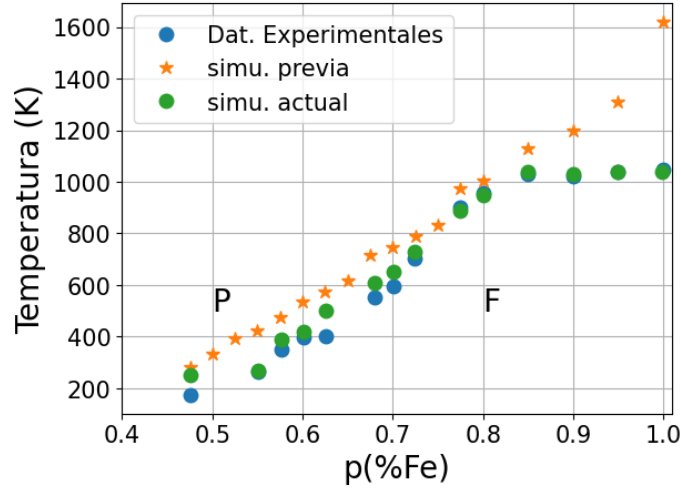


Figura 4.24: Gráfico del diagrama de fases obtenido a partir de las simulaciones realizadas con diferentes concentraciones. En este, los puntos experimentales se representan en azul, los simulados con el modelo previo como estrellas naranjas, y los simulados con el modelo actual como puntos verdes.

temperatura al existir mayor cantidad de enlaces de hierro lo cual aumenta la probabilidad de alineación de los espines dentro del calculo de la tasa de aceptación.

En contraposición a lo anterior, si observamos el modelo simulado este brilla especialmente en los puntos de alta concentración donde los datos teóricos y los simulados se solapan llegando a obtener distancias mínimas de $\Delta T_c \approx 0.32$ K o lo que es igual un error porcentual de hasta el 0.029 %, mostrando solides en el modelo energético utilizado en este trabajo.

Por otro lado, de la misma Figura 4.24 también podemos extraer la relación del modelo dado en la simulación actual con los valores de la temperatura esperada, siendo esta relación relativamente cercana teniendo una distancia máxima en la temperatura concerniente a la concentración de $p \approx 0.6252$, siendo esta diferencia de temperatura de $\Delta T_c \approx 100$ K lo que conlleva a un error porcentual del 25 %, este error se puede explicar debido a la naturaleza experimental de los datos tomados mostrando este punto particular una ruptura con el comportamiento de los demás puntos teóricos como se observa en la Figura 4.1, en contraposición con lo que se muestra con los puntos simulados los cuales siguen un patrón bien definido.

Pese a lo anterior si se promedian las distancias totales entre los puntos experimentales y simulados se obtiene una diferencia de temperatura promedio de aproximadamente $\overline{\Delta T_c} \approx 31.38$ K, el cual si se compara los datos experimentales en casi todos los datos (menos el de menor concentración) no es ni el 10 % de las temperaturas usadas siendo en el mejor de los casos inferior al 4 % y del 18 % en el pero de los mismos. Además de esto, si se promedia el valor de los errores porcentuales, se obtiene un error promedio del 8.40 %, el cual es un error muy bueno y habla muy bien de la simulación implementada.

Finalmente, tomando los valores de la magnetización máxima de cada concentración y utilizando sus valores experimentales [32] se obtiene la gráfica que se muestra en la Figura 4.25.

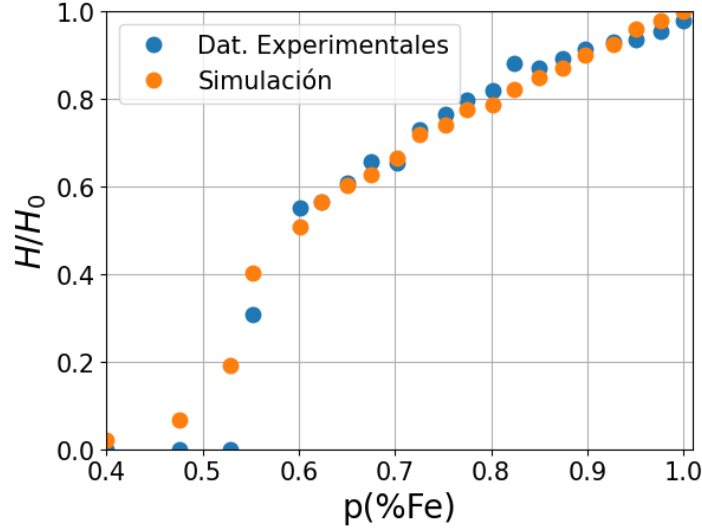


Figura 4.25: Gráfico de campos reescalados experimentales (puntos azules) y simulados (puntos verdes) a temperatura ambiente (300 K aproximadamente).

Para obtener el gráfico anterior cabe aclarar que para realizar los puntos simulados se contó con que el generado es proporcional a la magnetización del sistema de tal forma que su cociente contra el valor máximo y el cociente de la magnetización se hacen completamente análogos, así cabe resaltar que la diferencia entre los valores experimentales y teóricos es sumamente baja para concentraciones de inferiores o iguales a el 0.6 llegando a un error porcentual máximos del 7.8 %, ahora pasando a concentraciones bajas es claro notar como el error aumenta en la mitad de que el campo hiperfino no desciende a cero rápidamente, esto es debido a que para la simulación en este punto hay efectos de aleatoriedad y ruido del mismo sistema, dando como resultado la formación de pequeñas estructuras magnéticas, esto se refleja en aun estando lejos del cero real para puntos bajos el valor se mantiene con una diferencia de 0.1.

Capítulo 5

Conclusiones y recomendaciones

5.1. Conclusiones

A través del estudio realizado en este trabajo, se pudieron concluir los siguientes puntos:

- El método de los GRCM y su implementación con redes neuronales presentan gran validez para ajustar diagramas de fase magnéticos, arrojando resultados coherentes con la teoría conocida. Este método proporciona información relevante acerca de las interacciones de intercambio entre átomos con diferentes tipos de interacción y puede aplicarse no solo a sistemas simples con dos fases magnéticas, sino también a sistemas con múltiples fases.
- El método de los GRCM puede expandirse para incluir interacciones de segundos vecinos, conservando las ventajas de su versión original y obteniendo más información valiosa desde el punto de vista físico sobre las interacciones entre espines.
- El ajuste mediante redes neuronales constituye una herramienta novedosa y altamente relevante para abordar este tipo de problemas. Esto se debe a la flexibilidad que ofrece, al permitir que los datos y el modelo guíen el ajuste sin imponer suposiciones previas. La implementación, por primera vez, de este tipo de ajuste en este método representa un avance significativo en la comprensión de la realidad física del sistema. Esta afirmación se respalda con los resultados obtenidos, los cuales fueron validados al compararlos con datos experimentales disponibles en la literatura. Además, este método tiene la ventaja de permitir la extrapolación del modelo a puntos fuera del rango experimental. Cabe destacar que este estudio marca la primera aplicación de esta herramienta en este tipo de problemas, brindando por primera vez herramientas de extrapolación altamente confiables.
- La implementación de simulaciones Monte Carlo en sistemas de espines, basadas en las energías obtenidas mediante los métodos previamente descritos, constituye una alternativa válida para abordar el problema. Esta metodología permite explorar características que, por otros medios teóricos, resultan difíciles de obtener, gracias a la amplia gama de opciones que ofrece la simulación de sistemas. En particular, brinda la posibilidad de medir variables como el campo hiperfino. Además, estas simulaciones

contribuyen a validar los métodos utilizados anteriormente, al comparar los resultados obtenidos con los valores experimentales reportados en la literatura.

5.2. Perspectivas

Una vez expuesto lo anterior, para quienes deseen continuar con esta línea de investigación, se sugiere lo siguiente:

- Dado que se ha demostrado la validez de los métodos utilizados en la implementación de segundos vecinos, se recomienda explorar sistemas con más tipos de interacción, ya sea el mismo $Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$ u otros sistemas similares, e implementar estas interacciones en ellos.
- En cuanto a las simulaciones, se sugiere investigar sistemas con interacciones más débiles para llevar a cabo otro tipo de simulaciones, como ciclos de histéresis u otros comportamientos magnéticos interesantes. Esto quedó pendiente en este trabajo, ya que el hierro puro tiende a alinearse sin necesidad de un campo externo debido a su fuerte energía de interacción.

Appendices

Apéndice A

Ajuste simple del sistema $FepAl_{1-p}$ para primeros vecinos

Para simplificar la explicación de los algoritmos utilizados para el ajuste y la reproducción de los resultados, estos se dividirán en tres partes, las cuales se describen a continuación:

```
1
2 import numpy as np #Libreria de calculo cientifico
3 import tensorflow as tf #Libreria para aprendizaje autonomo
4 from tensorflow import keras #herramienta de creacion y
   aprendeizaje de redes neuronales
5 import matplotlib.pyplot as plt #Libreria basica para graficar
6 from tqdm.notebook import tqdm #Libreria para observar el avance de
   procesos
7 #creacion de la red
8 modelo = keras.Sequential()
9 modelo.add(keras.layers.Dense(units = 1, input_shape=[1])) #Primera
   capa: inputs (Datos expreimentales)
10 modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'tanh'))
   #capa de 100 mueronas con funcion de activacion tangente
11 modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'tanh'))
   #capa de 100 mueronas con funcion de activacion tangente
12 modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'softmax'))
   #capa de 100 mueronas con funcion de activacion softmax
13 modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'selu'))
   #capa de 100 mueronas con funcion de activacion selu
14 modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'gelu'))
   #capa de 100 mueronas con funcion de activacion gelu
15 modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'selu'))
   #capa de 100 mueronas con funcion de activacion selu
16 modelo.add(keras.layers.Dense(units = 1 )) #Ultima capa: outputs
17
18 #Establecemos el paso de cambio de parametros de 1e-3
19 Adam = tf.keras.optimizers.Adam(1e-3)
```

Listing A.1: Algoritmo de construcción de la red

```

1  #Cabe destacar que los datos estas escalados por un factor de
   148.8, este reescalado se toma para minimuzar el impacto de
   gradiente y facilitar el aprendizaje
2  x_t[:,0] = X_datos #Guardamos los datos de concentracion p
3  y_t[:,0] = Y_datos #Guardamos los datos de temperatura T_c
4
5  #Convertimos los datos en tensores constantes para trabajar con
   ellos#
6  x      = tf.constant( x_t , dtype=float )
7  y      = tf.constant( y_t , dtype=float )
8
9  losses  = [] #lista que guarda la fun. de costo en cada iteracion
10 ApproF1 = [] #=lista que guarda el modelo (energia) en cada iteracion
11
12 trainable_vars = modelo.trainable_variables #asignamos las
   variables que vamos a entrenar
13
14 epochs =2000 #Numero de ciclos de aprendizaje
15
16 #===== ENTRENAMIENTO =====#
17 for _ in tqdm(range(epochs)):
18
19     ***** CONSTRUIMOS LA FUNCION DE COSTO *****#
20     with tf.GradientTape(persistent=True) as tape:
21
22         Func = modelo(x,training=True) #modelo aplicado en los
           puntos experimentales
23
24         #recordemos que este modelo es la energia de enlace J(p)
25
26         #===== Funcion de aprendizaje =====
27         f1 = Func[:,0]
28         #=====
29
30
31         #===== Ecuacion algebraica=====
32         K1= f1/y[:,0] #K(p)/Tc
33
34         #recordemos que K(p)=J(p)/k_B, luego de entrenar estraemos
           el valor de J(p), reescalandola
35
36         #tomamos la relacion de recurrencia
37         rela = = (1 - (7/8)*(1+ (x[:,0])*(x[:,0])* tf.tanh(K1)) )
38
39         #===Con base a la relacion tomamos la funcion de costo===#
40         L2 = tf.reduce_mean( tf.abs( rela ) )
41

```

```

42
43
44 *****REALIZAMOS EL APRENDIZAJE*****#
45
46 #Aplicando el gradiente
47 gradients = tape.gradient(L2, trainable_vars)
48
49
50 #Usando el metodo de adams
51 Adam.apply_gradients(zip(gradients, trainable_vars))
52
53
54 #Guardando la funcion de costo y las funciones aprendidas
55 losses.append( L2.numpy() )
56 ApproF1.append( f1 )

```

Listing A.2: Algoritmo de aprendizaje de la red

```

1 #=====GRAFICO DE LA ENERGIA=====#
2 kb=8.617333262*10**(-2) #Constante de Boltzman en meV
3 punt=modelo.predict(X_datos)#Energias en los puntos de los datos
4 plt.plot(X_datos, punt*148.8*kb,"bo",markersize=6)#Graficamos la
   energias en los puntos de los datos desescalados con la constante
   de boltzman y el escalado del ajuste
5 plt.xlabel("x(%Fe)")
6 plt.ylabel("J(x)")
7 x1 = np.linspace( 0 ,1 , 100) #rango de concentraciones
8 J= modelo.predict(x1)*148.8*kb #desescalamos la energia con la
   constante de boltzman y el escalado del ajuste
9 plt.plot(x1, J) #Graficamos la energia en concentraciones en el
   rango [0, 1]
10 plt.grid()
11 plt.xlim(0, 1.05)
12 plt.xlabel("%Fe", fontsize=20)
13 plt.ylabel("Energia(meV)", fontsize=20)
14 plt.xticks(fontsize = 15)
15 plt.yticks(fontsize = 15)
16 plt.xlim(0.3,1.01)
17 plt.legend(loc='center_left')
18 plt.legend(fontsize=13)
19 plt.show()
20
21 #=====GRAFICO DE LA FUNCION DE COSTO=====#
22 plt.plot( losses ) #Graficamos los valores de la funcion de costo
23 plt.yscale('log')
24 plt.grid()
25 print(min(losses))
26 plt.xticks(fontsize = 15)

```

```

27 plt.yticks(fontsize = 15)
28 plt.ylabel("funcion de costo", fontsize=20)
29 plt.xlabel("epocas", fontsize=20)
30 plt.legend()
31 plt.show()
32
33 #=====GRAFICO DEL AJUSTE=====#
34 #Generamos la grilla de concentracion y temperatura de las graficas
35 xrange = np.linspace( 0.1 ,1 , 100)
36 yrange = np.linspace(0, 1200, 1200)
37 x, y = np.meshgrid(xrange, yrange)
38 x1 = np.linspace( 0.1 ,1 , 100)
39
40
41 J= modelo.predict(x1)*148.8 #Generamos la energia con la constante
    de Boltzman y reescalada
42 equation = (7/8)*1+(7/8)*((x)**2)*np.tanh(J[:,0]/(y)) #generamos la
    relacion de recurrencia
43
44 teo=plt.contour(x, y, equation, [1], colors='green') #Graficamos la
    relacion como un contorno o superficie de nivel
45
46 # Extraer los puntos p y Tc del contorno
47 for path in teo.get_paths():
48     vertices = path.vertices
49 plt.close()# No mostrar el grafico del contorno
50
51 #Graficamos los puntos extraidos
52 fig3, g3 = plt.subplots()
53 g3.plot(D[:,0],D[:,1]*148.8,'o',markersize=9, label='Datos
    experimentales')
54 plt.plot(vertices[:, 0],vertices[:, 1],"green",markersize=9,
    label='Linea teorica')
55 g3.grid()
56 plt.xlabel("%Fe", fontsize=20)
57 plt.ylabel("Temperatura (K)", fontsize=20)
58 plt.text(0.8, 500, 'F', fontsize=20)
59 plt.text(0.5, 500, 'P', fontsize=20)
60 plt.xticks(fontsize = 15)
61 plt.yticks(fontsize = 15)
62 plt.xlim(0.3,1.01)
63 plt.ylim(0,1200)
64 plt.legend(loc='upper left')
65 plt.legend(fontsize=15)
66 plt.xlabel("p(%Fe)")
67 plt.ylabel("Tc(K)")

```

Listing A.3: Algoritmo para graficar los resultados

Apéndice B

Ajuste múltiple del sistema Fe_pAl_{1-p} para primeros vecinos

De manera similar al caso anterior, el estudio del algoritmo implementado para este tipo de sistema también se dividirá en partes. Sin embargo, en este caso, la generación de la red y su aprendizaje se llevan a cabo dentro de un ciclo, con el propósito de reiniciar el modelo en cada iteración, como se detalla a continuación:

```
1 import numpy as np
2 import tensorflow as tf
3 from tensorflow import keras
4 import matplotlib.pyplot as plt
5 from tqdm.notebook import tqdm
6 import pandas as pd #Modulos para la construccion de data frames
7 import seaborn as sns #Usaremos este graficador en vez de matplolib
   por estar enfocado a grandes datos
8
9 epochs =550
10
11 x_t[:,0] = X_datos
12 y_t[:,0] = Y_datos
13
14
15 x      = tf.constant( x_t , dtype=float )
16 y      = tf.constant( y_t , dtype=float )
17
18 losses = [] #lista que guarda la fun. de costo en cada iteracion
19 ApproF1 = [] #lista que guarda el modelo (energia) para primeros
   vecinos en cada iteracio
20
21
22 #Creamos listas donde se guardaran los dataframes que se generaran
   en cada iteracion
23 ERRORES, RESULTADOS, RESULTADOS_prome,Tc = [], [], [], []
24
```

```

25
26 #===== BUCLE DE MULTIPLES AJUSTES/APREDIZAJES =====#
27 for n in range(1,60):
28
29 #MALLA DE AJUSTE SE QUE REINICIA EN CADA ITERRACION
30     modelo = keras.Sequential() #generamos la red
31     modelo.add(keras.layers.Dense(units = 1, input_shape=[1] ))
32     modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'tanh'))
33     modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'tanh'))
34     modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation =
35         'softmax'))
36     modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'selu'))
37     modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'gelu'))
38     modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'selu'))
39     modelo.add(keras.layers.Dense(units = 1
40         ))
41
42 #Exactitud del adams
43 Adam = tf.keras.optimizers.Adam(1e-3)
44
45 trainable_vars = modelo.trainable_variables
46 #===== ENTRENAMIENTO =====#
47 for _ in tqdm(range(epochs)):
48
49     ***** CONSTRUIMOS LA FUNCION DE COSTO *****#
50     with tf.GradientTape(persistent=True) as tape:
51
52         Func = modelo(x,training=True)
53
54         ===== Funciones de aprendizaje =====
55         f1 = Func[:,0]
56         =====
57
58         ===== Ecuacion algebraica=====
59         K1= f1/y[:,0] #K(p)/Tc
60
61         #tomamos la relacion de recurrencia
62         rela = (1 - (7/8)*(1+ (x[:,0])*(x[:,0])* tf.tanh(K1))
63
64         ===Con base a la relacion tomamos la funcion de costo===#
65         L2 = tf.reduce_mean( tf.abs( rela ) )
66
67         *****REALIZAMOS EL APRENDIZAJE*****#
68         #Aplicando el gradiente
69         gradients = tape.gradient(L2, trainable_vars)
70
71         #Usando el metodo de adajms
72         Adam.apply_gradients(zip(gradients, trainable_vars))

```

```

71
72     #Guardando la funcion de costo y las funciones aprendidas
73     losses.append( L2.numpy() )
74     ApproF1.append( f1 )
75
76     #---USAMOS LA RED NEURONAL PARA EXTRAPOLAR DATOS DE LA ENERGIA---#
77     #intervalo de la concentracion
78     x_regresion = np.linspace( 0.01 , 1 , 201)
79
80     #Usamos el modelo para predecir puntos para la energia
81     kb=8.617333262*10**(-2) #constante de Boltzma en meV
82
83     y_regresion = modelo.predict(x_regresion)*148.8*kb #Tomamos el
84     modelo para los datos exprerimentales
85     y_regresion_prome= modelo.predict(X_datos)*148.8*kb #Tomamos el
86     modelo para todo el rango de concentraciones
87
88     #Vector de ordenamiento
89     z = n*np.ones_like( x_regresion )
90     z_prome = n*np.ones_like( X_datos )
91
92     #Armando la columna de datos para la energia
93     arreglo2 = np.column_stack( [ x_regresion, y_regresion, z ] )
94     arreglo4 = np.column_stack( [ X_datos, y_regresion_prome, z_prome
95     ] )
96
97     #creando dataframe para registrar predicciones
98     df2 = pd.DataFrame( arreglo2, columns=['data_x', 'data_y',
99     'ordenamiento'] )
100     RESULTADOS.append(df2)
101     df4 = pd.DataFrame( arreglo4, columns=['data_x', 'data_y',
102     'ordenamiento'] )
103     RESULTADOS_prome.append(df4)
104
105     #-----CALCULANDO LA FUNCION DE COSTOS-----#
106     Error = losses
107     arreglo1 = np.column_stack( [ np.array(Error), np.array(
108     range(len(Error)) ) , n* np.ones_like(Error) ] )
109     losses.clear()
110     #creando el dataframe para registrar errores
111     df1 = pd.DataFrame( arreglo1, columns=['error', 'epocas',
112     'ordenamiento'] )
113     ERRORES.append(df1)
114
115     #-USANDO LA RED NEURONAL PARA EXTRAPOLAR DATOS DE LA TEMPERATURA-#
116     #intervalo de la concentracion y temperatura
117     xrange = np.linspace( 0.1 ,1.1 , 101)

```

```

111 yrange = np.linspace(0, 1200, 12000)
112 x2, y2 = np.meshgrid(xrange, yrange)
113
114 x1 = np.linspace( 0.1 ,1.1 , 101)
115
116 #Usando el modelo para predecir la energia
117 J= modelo.predict(x1)*148.8
118
119 #Usando la energia obtenemos la relacion de recurrencia del
120 sistema
121 equation = (7/8)*1+(7/8)*((x2)**2)*np.tanh(J[:,0]/y2)
122
123 #Sacamos el contorno de la relacion
124 teo=plt.contour(x2, y2, equation, [1], colors='green')
125
126 # Extraemos los puntos x y y del contorno
127 for path in teo.get_paths():
128     vertices = path.vertices
129     plt.close()# No mostrar el grafico del contorno
130
131 #redondemaos los valores para que las graficas de todas las
132 iteraciones coincidan
133 for j in range(len(vertices[:,0])):
134     vertices[j,0]=round(vertices[j,0], 2)
135
136 #Armando la columna de datos
137 arreglo3 = np.column_stack( [ vertices[:,0], vertices[:,1] , n*
138     np.ones_like(vertices[:,0]) ] )
139
140 #creando dataframe para registrar predicciones
141 df3 = pd.DataFrame( arreglo3, columns=['x(%Fe)', 'Tc',
142     'ordenamiento'] )
143 Tc.append(df3)

```

Listing B.1: Algoritmo de construcción y aprendizaje de la red para multiples iteraciones

```

1 #####GRAFICO DE LA ENERGIA#####
2 import math
3 sns.set(style="whitegrid")#fondo blanco
4 DataFrameResultados = pd.concat(REULTADOS, ignore_index =
    True)#Extraemos los datos
5 sns.lineplot(data= DataFrameResultados , x="data_x", y="data_y" ,
    ci= 100 , color='green', linewidth=1.5 ) #Graficamos la energia
6 de todas las iteraciones y su promedio
7 plt.grid()
8 #plt.plot(X_datos, ApproF1[-1], "o")
9 plt.xlabel("x(%Fe)")

```

```

9 plt.ylabel("J(x)")
10 plt.grid()
11 plt.xlim(0, 1.05)
12 plt.xlabel("%Fe", fontsize=20)
13 plt.ylabel("Energia (meV)", fontsize=20)
14 plt.xticks(fontsize = 15)
15 plt.yticks(fontsize = 15)
16 plt.xlim(0.3,1.01)
17
18 #Extraemos todos los datos de energia en los puntos experimentales
19 y los promediamos
20 suma_df_ex = RESULTADOS_prome[1].copy()
21 for df in RESULTADOS_prome[1:]:
22     suma_df_ex += df
23 promedio_df_ex = suma_df_ex / len(RESULTADOS_prome)
24 # Graficar el promedio usando seaborn lineplot
25 sns.lineplot( x="data_x", y="data_y" , data=promedio_df_ex,
26               color='green', marker='o', linestyle='',)
27 plt.show()
28
29 #=====GRAFICO DE LA FUNCION DE COSTO=====
30 DataFrameErrores = pd.concat(ERRORES, ignore_index =
31                               True)#Extraemos los datos de la funcion de costo
32 sns.lineplot(data= DataFrameErrores , x="epocas", y="error" , ci=
33              100 , color='red', linewidth=2.5 )#Graficamos los datos extraidos
34 plt.grid()
35 plt.ylim((3e-3,2e-1))
36 plt.yscale('log')
37 plt.grid()
38 #print(min(losses))
39 plt.xticks(fontsize = 15)
40 plt.yticks(fontsize = 15)
41 plt.ylabel("funcion de costo", fontsize=20)
42 plt.xlabel("epocas", fontsize=20)
43 plt.legend()
44
45 #=====GRAFICO DEL AJUSTE=====
46
47 #fondo blanco
48 sns.set(style="whitegrid")
49 DataFrameTc = pd.concat(Tc, ignore_index = True)#Extraemos los
50 datos del ajuste
51 sns.lineplot(data= DataFrameTc , x="x(%Fe)", y="Tc" , ci= 100 ,
52              color='green', label='Linea teorica', linewidth=1.5 )#Graficamos
53 los datos extraidos
54 plt.plot(D[:,0],D[:,1]*148.8,'o', markersize=9,label='Datos
```

```
48 plt.xlabel("%Fe", fontsize=20)
49 plt.ylabel("Temperature (K)", fontsize=20)
50 plt.text(0.8, 500, 'F', fontsize=20)
51 plt.text(0.5, 500, 'P', fontsize=20)
52 plt.xticks(fontsize = 15)
53 plt.yticks(fontsize = 15)
54 plt.xlim(0.3,1.01)
55 plt.ylim(0,1200)
56 plt.legend(loc='upper_left')
57 plt.legend(fontsize=15)
58 plt.xlabel("p(%Fe)")
59 plt.ylabel("Tc(K)")
```

Listing B.2: Algoritmo de graficación de resultados

Apéndice C

Ajuste simple del sistema

$Fe_pMn_{0.6-p}Al_{0.4}$

Para ajustar este tipo de sistemas de implemento un algoritmo similar al usado para en el Apéndice A con la diferencia de que esta vez en vez de una energía de enlace se obtuvieron tres y que el proceso se repitió tres veces (una para cada transición), para este apéndice solo presentaremos uno de los tres ajustes pues los demás son análogos, además tampoco presentaremos la sección de gráficos pues es similar a los casos anteriores, dicho esto, presentaremos el ajuste concerniente a la transición de vidrio de espín el cual se muestra a continuación:

```
1
2 import numpy as np
3 import tensorflow as tf
4 from tensorflow import keras
5 import matplotlib.pyplot as plt
6 from tqdm.notebook import tqdm
7
8
9 #presentamos los datos experimentales ya normalizados y los
   volvemos tensores
10 xSg_t[:,0] = X_datosSg
11 ySg_t[:,0] = Y_datosSg
12 xSg        = tf.constant( xSg_t , dtype=float )
13 ySg        = tf.constant( ySg_t , dtype=float )
14
15
16 lossesSg   = [] #lista que guarda la fun. de costo en cada iteracion
17 ApproSgF1  = [] #lista que guarda el modelo de energia de tipo Fe-Fe
18 ApproSgF2  = [] #lista que guarda el modelo de energia de tipo Mn-Mn
19 ApproSgF3  = [] #lista que guarda el modelo de energia de tipo Fe-Mn
20 #=====
21
22 #MALLA DE AJUSTE
23 modelSg = keras.Sequential()
```

```

24 modelSg.add(keras.layers.Dense(units = 1, input_shape=[1]    ))
25 modelSg.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'tanh'))
26 modelSg.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'linear'))
27 modelSg.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'linear'))
28 modelSg.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'linear'))
29 modelSg.add(keras.layers.Dense(units = 200, activation = 'relu'))
30 modelSg.add(keras.layers.Dense(units = 3 )) #dejar funcion de
    activacion
31
32 #Exactitud del adams
33 Adam = tf.keras.optimizers.Adam(1e-3)
34 trainable_vars = modelSg.trainable_variables
35
36 # ===== ENTRENAMIENTO =====#
37 for _ in tqdm(range(3500)):
38
39     # ***** CONSTRUIMOS LA FUNCION DE COSTO *****#
40     with tf.GradientTape(persistent=True) as tape:
41
42         Funcsg = modelSg(xSg,training=True)
43
44         #===== Funciones de aprendizaje =====
45         f1 = Funcsg[:,0]
46         f2 = Funcsg[:,1]
47         f3 = Funcsg[:,2]
48         #=====
49
50
51         #===== Ecuacion algebraica=====
52         K1= f1/ySg[:,0]
53         K2= f2/ySg[:,0]
54         K3= f3/ySg[:,0]
55
56         # tomamos la relacion de recurrencia
57         rela = (1 -((Z-1)/Z)*(1+xSg[:,0]**2*(tf.tanh(K1))**2+\
58         (0.6-xSg[:,0])**2*(tf.tanh(K2))**2+\
59         2*(0.6-xSg[:,0])*xSg[:,0]*(tf.tanh(K3))**2) )
60
61
62         # == Con base a la relacion tomamos la funcion de costo
63         ==#
64         L2 = tf.reduce_mean( tf.abs( rela ) )
65
66     #***** REALIZAMOS EL APRENDIZAJE *****#
67     #Aplicando el gradiente
68     gradients = tape.gradient(L2, trainable_vars)

```

```

69     #Usando el metodo de adams
70     Adam.apply_gradients(zip(gradients, trainable_vars))
71
72     #Guardando la funcion de costo y las funciones aprendidas
73     lossesSg.append( L2.numpy() )
74     ApproSgF1.append( f1 )
75     ApproSgF2.append( f2 )
76     ApproSgF3.append( f3 )

```

Listing C.1: Algoritmo de construcción de la red y aprendizaje del sistema $Fe_p Mn_{0.6-p} Al_{0.4}$

Apéndice D

Ajuste múltiple del sistema Fe_pAl_{1-p} para segundos vecinos

Finalmente, para el último ajuste, el algoritmo implementado retomó ideas de ajustes previos, combinando los entrenamientos de más de una función del Apéndice C e integrando las múltiples iteraciones y la metodología de graficación descrita en el Apéndice B. Por esta razón, solo se presentará la construcción de la red junto con el algoritmo de aprendizaje, los cuales se muestran a continuación:

```
1
2 import numpy as np
3 import tensorflow as tf
4 from tensorflow import keras
5 import matplotlib.pyplot as plt
6 from tqdm.notebook import tqdm
7 import pandas as pd
8 import seaborn as sns
9
10 epochs =1200
11
12 # presentamos los datos experimentales ya normalizados y los
13 volvemoss tensores
14 x_t[:,0] = X_datos
15 y_t[:,0] = Y_datos
16
17
18 x      = tf.constant( x_t , dtype=float )
19 y      = tf.constant( y_t , dtype=float )
20
21 losses = [] # lista que guarda la fun . de costo en cada iteracion
22 ApproF1 = [] # lista que guarda el modelo de energiaa de primeros
23           vecinos
24 ApproF2 = [] # lista que guarda el modelo de energiaa de segundos
25           #=====
```

```

26  #Creamos listas donde se guardaran los dataframes que se generaran
    en cada iteracion
27  ERRORES, RESULTADOS1, RESULTADOS2, RESULTADOS1_exp,
    RESULTADOS2_exp, Tc = [], [], [], [], [], []
28
29
30
31  # ===== BUCLE DE MULTIPLES AJUSTES / APREDIZAJES
    =====
32  for n in range(1,101):
33      print(n)
34  ## MALLA DE AJUSTE SE QUE REINICIA EN CADA ITERRACION
35      modelo = keras.Sequential()
36      modelo.add(keras.layers.Dense(units = 1, input_shape=[1] ))
37      modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'tanh'))
38      modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'tanh'))
39      modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation =
        'softmax'))
40      modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'selu'))
41      modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'gelu'))
42      modelo.add(keras.layers.Dense(units = 100, activation = 'selu'))
43      modelo.add(keras.layers.Dense(units = 2
        ))
        #dejar funcion de activacion ninguna, o linear
44
45  #Exactitud del adams
46  Adam = tf.keras.optimizers.Adam(1e-3)
47  # ===== ENTRENAMIENTO =====
48  trainable_vars = modelo.trainable_variables
49
50  for _ in tqdm(range(epochs)):
51
52      # ***** CONSTRUIMOS LA FUNCION DE COSTO *****
53      with tf.GradientTape(persistent=True) as tape:
54
55          Func = modelo(x, training=True)
56
57          ===== Funciones de aprendizaje =====
58          f1 = Func[:,0] # K_primeros ( p ) / Tc
59          f2 = Func[:,1] # K_segundo ( p ) / Tc
60          =====
61
62          ===== Ecuacion algebraica=====
63          K1= f1/y[:,0]
64          K2= f2/y[:,0]
65
66          # tomamos la relacion de recurrencia
67          rela = (1 - (x[:,0])**2 *

```

```

        tf.tanh(K1)*((Z-1)*K1+Zp*(1-x[:,0])*K2) / K1 )
68     #=====
69
70
71     # == Con base a la relacion tomamos la funcion de costo
        ==#
72     L2 = tf.reduce_mean( tf.abs( rela ) )
73
74     ***** REALIZAMOS EL APRENDIZAJE *****#
75     #Aplicando el gradiente
76     gradients = tape.gradient(L2, trainable_vars)
77
78     #Usando el metodo de adajms
79     Adam.apply_gradients(zip(gradients, trainable_vars))
80
81     #Guardando la funcion de costo y las funciones aprendidas
82     losses.append( L2.numpy() )
83     ApproF1.append( f1 )
84     ApproF2.append( f2 )
85
86     # --- USAMOS LA RED NEURONAL PARA EXTRAPOLAR DATOS DE LA ENERGIA
        - - -#
87     #intervalo de la concentracion
88     x_regresion = np.linspace( 0.01 , 1 , 201)
89
90     # Usamos el modelo para predecir puntos para la energia
91     kb=8.617333262*10**(-2)# constante de Boltzma en meV
92     y_regresion = modelo.predict(x_regresion)*148.8*kb # Tomamos el
93     modelo para los datos expererimentales
94     y_regresion_exp = modelo.predict(X_datos)*148.8*kb# Tomamos el
95     modelo para todo el rango de concentraciones
96
97     #Vector de ordenamiento
98     z = n*np.ones_like( x_regresion )
99     z_exp = n*np.ones_like( X_datos )
100
101     #Armando la columna de datos
102     ***primeros vecinos**
103     arreglo2 = np.column_stack( [ x_regresion, y_regresion[:,0], z ]
        )
104     arreglo5 = np.column_stack( [ X_datos, y_regresion_exp[:,0],
        z_exp ] )
105     ***segundos vecinos**
106     arreglo4 = np.column_stack( [ x_regresion, y_regresion[:,1], z ]
        )
107     arreglo6 = np.column_stack( [ X_datos, y_regresion_exp[:,1],
        z_exp ] )

```

```

108
109 #creando dataframe para registrar predicciones
110 ***primeros vecinos**
111 df2 = pd.DataFrame( arreglo2, columns=['data_x', 'data_y',
112                                     'ordenamiento'] )
112 RESULTADOS1.append(df2)
113 df5 = pd.DataFrame( arreglo5, columns=['data_x', 'data_y',
114                                     'ordenamiento'] )
114 RESULTADOS1_exp.append(df5)
115 ##segundos vecinos**
116 df4 = pd.DataFrame( arreglo4, columns=['data_x', 'data_y',
117                                     'ordenamiento'] )
117 RESULTADOS2.append(df4)
118 df6 = pd.DataFrame( arreglo6, columns=['data_x', 'data_y',
119                                     'ordenamiento'] )
119 RESULTADOS2_exp.append(df6)
120
121
122
123 #-----CALCULANDO LA FUNCION DE COSTOS-----#
124
125 Error = losses
126 arreglo1 = np.column_stack( [ np.array(Error), np.array(
127     range(len(Error)) ) , n* np.ones_like(Error) ] )
127 losses.clear()
128 #creando el dataframe para registrar errores
129 df1 = pd.DataFrame( arreglo1, columns=['error', 'epocas',
130                                     'ordenamiento'] )
130 ERRORES.append(df1)
131
132 #-USAMOS LA RED NEURONAL PARA EXTRAPOLAR DATOS DE LA TEMPERATURA -#
133 #intervalo de la concentracion
134 xrange = np.linspace( 0.1 ,1 , 100)
135 yrange = np.linspace(0, 1200, 12000)
136 x2, y2 = np.meshgrid(xrange, yrange)
137
138 x1 = np.linspace( 0.1 ,1 , 100)
139
140 #Usamos el modelo para predecir la energia
141 J1= modelo.predict(x1)*148.8
142 #Usando la energ a sacamos los puntos del contorno ajustado
143 equation = (x2)**2
144     *np.tanh(J1[:,0]/y2)*((Z-1)*J1[:,0]+Zp*(1-x2)*J1[:,1])/J1[:,0]
145
146 # Sacamos el contorno de la relacion
147 teo=plt.contour(x2, y2, equation, [1], colors='green')

```

```

148     # Extraer los puntos x y y del contorno
149     for path in teo.get_paths():
150         vertices = path.vertices
151     plt.close() # No mostrar el grafico
152
153     # redondemaos los valores para que las graficas de todas las
154 iteraciones coincidan
155     for j in range(len(vertices[:,0])):
156         vertices[j,0]=round(vertices[j,0], 2)
157
158     #Armando la columna de datos
159     arreglo3 = np.column_stack( [ vertices[:,0], vertices[:,1] , n*
160         np.ones_like(vertices[:,0]) ] )
161
162     #creando dataframe para registrar predicciones
163     df3 = pd.DataFrame( arreglo3, columns=['x(%Fe)', 'Tc',
164         'ordenamiento'] )
165     Tc.append(df3)

```

Listing D.1: Algoritmo de construcción de la red y aprendizaje de la red con segundos vecinos

Referencias

- [1] B.D. Cullity and C.D. Graham. *Introduction to Magnetic Materials*. Wiley, 2011. ISBN 9781118211496. URL https://books.google.com.co/books?id=fh_FOG9KuSgC.
- [2] Leo P. Kadanoff. Scaling laws for ising models near T_c . *Physics Physique Fizika*, 2: 263–272, Jun 1966. doi: 10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.2.263. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.2.263>.
- [3] JO Indekeu, A Maritan, and AL Stella. Renormalisation group recursions by mean-field approximations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 15(6):L291, 1982.
- [4] Juan Esteban Bedoya Rodríguez and Germán Antonio Pérez Alcázar. Diluted and random-bond ising model and the mean-field renormalization group (mfrg) method for the interpretation of the magnetic phase diagram of the $\text{Fe}_x\text{Mn}_{0.6x}\text{Al}_{0.4}$ alloy series. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 625:129028, 2023. ISSN 0378-4371. doi: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2023.129028>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437123005836>.
- [5] Prabodh Shukla and Michael Wortis. Spin-glass behavior in iron-aluminum alloys: A microscopic model. *Phys. Rev. B*, 21:159–164, Jan 1980. doi: 10.1103/PhysRevB.21.159. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.21.159>.
- [6] E. Mina, A. Bohórquez, Ligia E. Zamora, and G. A. Pérez Alcazar. Diluted and random-bond ising model for the fe-al disordered alloys. *Phys. Rev. B*, 47:7925–7928, Apr 1993. doi: 10.1103/PhysRevB.47.7925. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.47.7925>.
- [7] NN Delyagin, AL Erzinkyan, VP Parfenova, and IN Rozantsev. Transition from the ferromagnetic state to the spin glass state in ordered fe 0.75- x al 0.25+ x alloys and the temperature evolution of the magnetic structure of the fe 0.70 al 0.30 alloy. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 101:1091–1097, 2005.
- [8] O. Calin. *Deep Learning Architectures: A Mathematical Approach*. Springer Series in the Data Sciences. Springer International Publishing, 2020. ISBN 9783030367213. URL <https://books.google.com.co/books?id=R3vQDwAAQBAJ>.

- [9] Stephen Blundell. *Magnetism in condensed matter*. OUP Oxford, 2001.
- [10] A. Sommerfeld and H. Bethe. *Elektronentheorie der Metalle*, pages 333–622. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1933. ISBN 978-3-642-91116-3. doi: 10.1007/978-3-642-91116-3_3. URL https://doi.org/10.1007/978-3-642-91116-3_3.
- [11] Charles Kittel and Paul McEuen. *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons, 2018.
- [12] Louis Néel. Influence des fluctuations du champ moléculaire sur les propriétés magnétiques des corps. In *Annales de physique*, volume 10, pages 5–105, 1932.
- [13] John A Mydosh. *Spin glasses: an experimental introduction*. CRC Press, 1993.
- [14] M.P Nightingale. Scaling theory and finite systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 83(3):561–572, 1976. ISSN 0378-4371. doi: [https://doi.org/10.1016/0378-4371\(75\)90021-7](https://doi.org/10.1016/0378-4371(75)90021-7). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0378437175900217>.
- [15] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944. doi: 10.1103/PhysRev.65.117. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>.
- [16] Pierre Weiss. L’hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. *J. Phys. Theor. Appl.*, 6(1):661–690, 1907. doi: 10.1051/jphystap:019070060066100. URL <https://hal.science/jpa-00241247>.
- [17] Paul D Beale. *Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinemann, 1996.
- [18] M Droz, A Maritan, and AL Stella. Mean field like renormalization group for disordered systems. *Physics Letters A*, 92(6):287–292, 1982.
- [19] Sahin YILDIRIM. Vertical vibration analysis of vehicles due to toad roughness using radial basis neural network. 09 1999.
- [20] Jan Blechschmidt and Oliver G Ernst. Three ways to solve partial differential equations with neural networks—a review. *GAMM-Mitteilungen*, 44(2):e202100006, 2021.
- [21] Neha Yadav, Anupam Yadav, Manoj Kumar, et al. *An introduction to neural network methods for differential equations*, volume 1. Springer, 2015.
- [22] M E J Newman and G T Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 02 1999. ISBN 9780198517962. doi: 10.1093/oso/9780198517962.001.0001. URL <https://doi.org/10.1093/oso/9780198517962.001.0001>.
- [23] Nicholas Metropolis, Arianna W Rosenbluth, Marshall N Rosenbluth, Augusta H Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, 21(6):1087–1092, 1953.

- [24] López R. Victor J. *Calculo de temperaturas criticas de un sistema magnético ternario usando la teoria de grupos de renormalización*. Tesis de pregrado, Departamento de Física, Universidad del Valle, 2010.
- [25] Alexander Osorio C. *Modelo de Ising con sitios aleatorios: propiedades termodinamicas y aplicación al sistema Fe Mn Al*. Tesis de maestria, Departamento de Física, Universidad del Valle, 1999.
- [26] Ligia E Zamora, GA Perez-Alcazar, A Bohórquez, JF Marco, and JM González. Magnetic properties of the $\text{Fe}_{0.40}\text{Mn}_{0.58}$ alloy series. *Journal of applied physics*, 82:6165–6169, 1997.
- [27] D. Peña Lara, G. A. Pérez Alcázar, Ligia E. Zamora, and J. A. Plascak. Blume-capel model for $(\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35})_{1-x}\text{Mn}_x$ and $\text{Fe}_{1-q}\text{Al}_q\text{Mn}_x$ alloys. *Phys. Rev. B*, 80:014427, Jul 2009. doi: 10.1103/PhysRevB.80.014427. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.014427>.
- [28] A. Bohórquez, Ligia E. Zamora, and G. A. Pérez Alcázar. Theoretical magnetic phase diagram for the $(\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35})_{1-x}\text{Mn}_x$ system. *Phys. Rev. B*, 49:16035–16037, Jun 1994. doi: 10.1103/PhysRevB.49.16035. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.16035>.
- [29] Ligia E. Zamora, G. A. Pérez Alcázar, A. Bohórquez, A. Rosales Rivera, and J. A. Plascak. Phase diagrams of the diluted and random-bond ising model. *Phys. Rev. B*, 51:9329–9332, Apr 1995. doi: 10.1103/PhysRevB.51.9329. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.9329>.
- [30] OF De Alcantara Bonfim. Mean field renormalization group analysis of the blume-capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 130(1-2):367–373, 1985.
- [31] D. Peña Lara, J. E. Diosa, and C. A. Lozano. Blume-capel spin-glass model for fe-mn-al alloys. *Phys. Rev. E*, 87:032108, Mar 2013. doi: 10.1103/PhysRevE.87.032108. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.032108>.
- [32] GA Perez Alcazar and E Galvao Da Silva. Mossbauer effect study of magnetic properties of $\text{Fe}_{1-q}\text{Al}_q$, $0 \leq q \leq 0.5$, alloys in the disordered phase. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 17(11):2323, 1987.
- [33] G. A. Pérez Alcazar, J. A. Plascak, and E. Galvão da Silva. Site-diluted ising model for the magnetic properties of $\text{Fe}_{1-q}\text{Al}_q$, $0 \leq q \leq 0.5$, alloys in the disordered phase. *Phys. Rev. B*, 34:1940–1943, Aug 1986. doi: 10.1103/PhysRevB.34.1940. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.34.1940>.
- [34] Juan E. Bedoya. *Determinación teórica de diagramas de fase mediante el modelo de Ising y los Grupos de Renormalización en Campo Medio (GRCM)*. Tesis de pregrado, Departamento de Física, Universidad del Valle, 2022.

-
- [35] J. A. Plascak, Ligia E. Zamora, and G. A. Pérez Alcazar. Ising model for disordered ferromagnetic Fe – Al alloys. *Phys. Rev. B*, 61:3188–3191, Feb 2000. doi: 10.1103/PhysRevB.61.3188. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.3188>.
- [36] D Parsons, W Sucksmith, and JE Thompson. The magnetization of cobalt-aluminium, cobalt-silicon, iron-aluminium and iron-silicon alloys. *Philosophical Magazine*, 3(34): 1174–1184, 1958.
- [37] GA Perez Alcazar and E Galvao Da Silva. Mossbauer effect study of magnetic properties of fe1-qalq, 0;q 0.5, alloys in the disordered phase. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 17(11):2323, 1987.
- [38] EP Yelsukov, EV Voronina, and VA Barinov. Mössbauer study of magnetic properties formation in disordered fe-al alloys. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 115 (2-3):271–280, 1992.
- [39] Claudia González, Germán A Pérez Alcázar, Ligia E Zamora, Jesus A Tabares, and Jean-Marc Greneche. Magnetic properties of the $Fe_xMn_{0.600-x}Al_{0.400}$, $0.200 < x \leq 0.600$, disordered alloy series. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(25):6531–6542, jun 2002. doi: 10.1088/0953-8984/14/25/320. URL <https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/25/320>.
- [40] Fatima Es-sabery, Abdellatif Hair, Junaid Qadir, Beatriz Sainz de Abajo, Begona Garcia-Zapirain, and Isabel De la Torre Díez. Sentence-level classification using parallel fuzzy deep learning classifier. *IEEE Access*, PP:1–1, 01 2021. doi: 10.1109/ACCESS.2021.3053917.
- [41] Günter Klambauer, Thomas Unterthiner, Andreas Mayr, and Sepp Hochreiter. Self-normalizing neural networks. *Advances in neural information processing systems*, 30, 2017.
- [42] Pi-Yun Chen, Xuan-Hao Zhang, Jian-Xing Wu, Ching-Chou Pai, Jin-Chyr Hsu, Chia-Hung Lin, and neng-sheng Pai. Automatic breast tumor screening of mammographic images with optimal convolutional neural network. *Applied Sciences*, 12:4079, 04 2022. doi: 10.3390/app12084079.
- [43] SN Kaul. Low-temperature magnetization and spin-wave excitations in amorphous ni-rich transition-metal—metalloid alloys. *Physical Review B*, 27(9):5761, 1983.