

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

“SIMULACIÓN DE MACROMOLÉCULAS  
MEDIANTE CAMINATAS AL AZAR”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS QUÍMICAS  
(FISICOQUÍMICA)

PRESENTA:

RICARDO BALTAZAR AYALA

ASESOR:

DRA. SUEMI RODRÍGUEZ ROMO

México, D.F.

1997

M-251152



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## DEDICATORIAS

A Mary por que siempre estuvo junto a mí cuando se lo pedí y supo escucharme siempre.

A mi padres y a mis hermanos.

A Paulina, Valeria y Sebastian.

A dos grandes amigos, Rafael y Roberto.

Al Dr. Alberto Rojas Hernández por ser siempre un ejemplo a seguir.

# AGRADECIMIENTOS

A la Dra. Suemi Rodriguez Romo por la ayuda y conocimientos que me brindó.

Al Dr. Vladimir Tchijov por su ayuda para la realización de este trabajo.

A Rafael y Ana por su apoyo.

A la UNAM por permitirme ser parte de ella.

A la Dra. Katja Lindenberg, Dr Emilio Cortés, Dr Magdaleno Medina, Dr Miguel Costas y Dr William Wassam Jr, por haber aceptado ser mis sinodales.

A CONACYT por la ayuda económica otorgada.

# ÍNDICE

	PAG
INTRODUCCIÓN.....	1
CAMINATAS AL AZAR JERÁRQUICAS.....	6
MEDIDAS CONFIGURACIONALES.....	9
MEDIDAS QUE CRECEN CINÉTICAMENTE.....	11
REJILLAS JERÁRQUICAS.....	16
GRUPO DE RENORMALIZACIÓN Y EXONENTES CRÍTICOS.....	20
RENORMALIZACIÓN DE UNA REJILLA.....	21
RENORMALIZACIÓN DE UN HAMILTONIANO.....	23
CALCULO DE $v$ .....	33
RENORMALIZACIÓN DE UNA CAMINATA AL AZAR SIMPLE EN TIEMPO CONTINUO.....	36
RENORMALIZACIÓN DE UNA CAMINATA AL AZAR EN TIEMPO CONTINUO QUE PENALIZA LAS INTERACCIONES DE DOS CUERPOS.....	44
RENORMALIZACIÓN DE UNA CAMINATA AL AZAR EN TIEMPO CONTINUO QUE PENALIZA LAS INTERACCIONES DE TRES CUERPOS.....	62

SIMULACIÓN MONTECARLO.....	79
ALGORITMOS ESTÁTICOS.....	86
ALGORITMOS DINÁMICOS.....	87
EXPERIMENTO COMPUTACIONAL.....	87
CONCLUSIONES.....	93
GLOSARIO.....	95
BIBLIOGRAFÍA.....	96

## INTRODUCCIÓN.

Numerosas propiedades de las macromoléculas, en especial la de sus soluciones, están íntimamente relacionadas con la conformación de las mismas. Este problema sería resuelto muy fácilmente si todos los átomos de la macromolécula estuvieran unidos de una manera única y rígida, ya que la estructura sólo dependería de la naturaleza de los átomos. En la naturaleza, las uniones entre los átomos son, muy a menudo, enlaces de tipo  $\tau$  los cuales presentan una rotación interna más o menos libre, esto hace que la macromolécula adquiera un gran número de grados de libertad, por esta razón el problema geométrico de las macromoléculas adquiere un carácter estadístico y las magnitudes geométricas serán sólo valores medios o más probables. Como una consecuencia del gran número de grados de libertad, las macromoléculas pueden ser consideradas como sistemas macroscópicos o mesoscópicos, por lo que el uso de métodos estadísticos se hace indispensable para determinar valores medios de variables, tales como la distancia principio-fin o tamaño físico de la macromolécula. El resultado de numerosos experimentos y evaluaciones teóricas muestran que la estructura a pequeña escala llega a ser cada vez menos esencial para la explicación de propiedades macroscópicas. La estadística conformacional de las macromoléculas está dada por su estructura y el llamado efecto de volumen excluido, de acuerdo al cual, un elemento de volumen dado no puede tener dos o más monómeros a un mismo tiempo dado. Son precisamente estos factores los que determinan los rasgos típicos del comportamiento de las macromoléculas. Una macromolécula puede ser vista como una partícula que se mueve al azar, o dicho de otra forma una caminata al azar donde la longitud del paso representa a un monómero de la cadena. Para hacer la analogía completa es necesario introducir el efecto de volumen excluido en la teoría de caminatas al azar. Así el problema bajo consideración es conocido como caminatas al azar autorrepelentes, las cuales abreviaremos en este texto como (CAAR).

Debemos señalar que las caminatas al azar no sólo han sido aplicadas al estudio de macromoléculas, también han sido aplicadas a sistemas tales como: relajación

de sistemas complejos [1], migración de sistemas dinámicos clásicos [2], migración de energía en rejillas regulares [3], transporte de isótopos radiactivos en canales de membranas neuronales [4], nucleación homogénea en condensación de vapor [5] y en especial la migración de fotones en medios turbios y la teoría de reacciones de difusión controlada en medios al azar [6].

Las caminatas al azar han sido estudiadas ampliamente, de tal forma que es posible clasificar a éstas, de acuerdo a varias categorías. En especial tenemos las caminatas en tiempo discreto y en tiempo continuo. Ya que toda caminata es una secuencia ordenada de sitios, donde a cada sitio le corresponde un tiempo, para las caminatas en tiempo discreto ese tiempo siempre es uno, así la sucesión de tiempos es 1, 2, 3, 4, ... para una caminata en tiempo continuo esta sucesión de tiempos puede tomar cualquier valor y no necesariamente en los enteros.

Debido a la semejanza entre las macromoléculas y las caminatas autorrepelentes, algunas técnicas han sido desarrolladas para el entendimiento de estos procesos estocásticos y su conexión con la fisicoquímica de fenómenos críticos asociados, en especial tenemos la técnica de integración funcional, el grupo-de-renormalización, así como también eficientes métodos numéricos y computacionales como la simulación Montecarlo.

En lo referente al método de integración funcional, es posible establecer los exponentes críticos de las caminatas autorrepelentes siempre y cuando la dimensión del problema sea cercana a 4, y no está claro aun como obtener resultados en un espacio real. Sin embargo existe otro camino menos usado, pero no menos eficiente para estudiar este problema; la resolución de las ecuaciones para la densidad de probabilidad de la distancia principio-fin de la macromolécula. Este método provee una excelente descripción de los exponentes críticos y funciones de correlación de una amplia variedad de sistemas asociados a macromoléculas. Dado el éxito de esta técnica se cree que es posible su aplicación a el punto  $\theta$  (trícritico) donde la constante de acoplamiento de dos cuerpos es pequeña por la incorporación de un término que representa la interacción de tres cuerpos [7].

El método grupo-de-renormalización es usado para calcular los exponentes críticos que determinan el grado de singularidad de diferentes variables termodinámicas en



una transición de fase, debemos añadir que cuando dos sistemas presentan los mismos exponentes críticos se da el fenómeno de universalidad, así uno puede asignar a cada sistema una clase de universalidad, de forma tal que dos sistemas en la misma clase de universalidad tienen la misma dimensionalidad y parámetro de orden. Resultados experimentales sugieren que dos sistemas en la misma clase de universalidad presentan los mismos exponentes críticos.

Las bases conceptuales del grupo-de-renormalización establecen que los exponentes críticos deben ser independientes del comportamiento de los potenciales de interacción y deberían ser determinados principalmente por propiedades de gran escala como por ejemplo, la dimensión del sistema.

Dado que nuestro estudio es llevado a cabo para macromoléculas en solución, existe un estado interesante para este tipo de fenómenos. Cuando una macromolécula es colocada en un buen solvente, ésta toma la configuración de una caminata al azar, lo anterior todavía es válido para un mal solvente, siempre y cuando la temperatura este por arriba de un valor crítico  $T_\theta$ . En este caso la energía interna estará disminuida si la macromolécula forma una estructura globular empaquetada densamente, pero esto es compensado por una disminución en la entropía. Por abajo de la temperatura  $\theta$  la contribución entrópica a la energía libre  $F = U - TS$  no es suficiente para mantener una configuración extendida, por lo que la macromolécula colapsa. Es generalmente aceptado [8] que este colapso es una transición de segundo orden en el sentido de que la densidad de un globulo es cero a  $T = T_\theta$  y aumenta continuamente cuando  $T$  es disminuida, más precisamente éste es un punto tricrítico. Desde otro punto de vista, al irnos acercando a este estado termodinámico, el efecto de volumen excluido se hace cada vez menos importante ya que los monómeros están cada vez más cercanos, hasta un punto en el cual podemos decir que las interacciones vía dos cuerpos dejan de ser importantes, con respecto a las interacciones vía tres cuerpos, ya que éstas son mucho más importantes que las anteriores, al grado tal, que las primeras pueden ser consideradas mínimas en el estudio de éste estado característico. Este punto en especial es conocido como el punto  $\theta$  de Flory [9].

Una caminata puede en principio ser simulada en cualquier número de dimensiones, el caso de una dimensión es trivial, en dos dimensiones el caminante puede

moverse sobre una superficie y en tres dimensiones en un espacio y así sucesivamente. Es por lo anterior que el caso de más interés desde el punto de vista físico es el de tres dimensiones, así mismo los resultados que se obtengan de simular una caminata dependerán de la dimensión del problema en cuestión.

El trabajo presente tiene como objetivo principal encontrar el comportamiento de la distancia principio-final de la macromolécula, en el punto  $\theta$  de Flory, determinar la forma fija de la transformación, así como determinar los exponentes críticos relacionados a este sistema. Se seleccionó este sistema en especial debido a la discrepancia existente en la literatura, para resolver estas diferencias utilizamos la metodología presentada en [10], en esta misma referencia la metodología desarrollada predice los resultados que se obtienen de llevar a cabo una simulación Montecarlo del problema en cuestión.

Este reporte presenta la siguiente estructura. En el capítulo 1 indicamos las dos categorías diferentes de modelos de caminatas al azar, así tenemos los modelos con medidas de probabilidad configuracionales, donde la probabilidad de que una caminata ocurra es pesada de acuerdo a su configuración y los modelos con medidas de probabilidad que crecen cinéticamente, donde esta probabilidad es producto de alguna función de transición. En este trabajo usamos modelos con medida configuracional (en el otro caso el proceso tiene una medida de probabilidad consistente, lo que lo hace sumamente difícil de estudiar), también se presenta el espacio donde las caminatas estarán soportadas. En el capítulo 2 se muestra la técnica de grupo-de-renormalización y la forma de calcular los exponentes críticos a partir de los parámetros involucrados en ésta. En el capítulo 3 se aplica la técnica grupo-de-renormalización a una caminata al azar simple, es decir, aquella que no presenta efecto de volumen excluido, encontrándose el punto fijo de la transformación, tomando como base la técnica presentada en el capítulo 2, en el capítulo 4 el grupo-de-renormalización es aplicado a una caminata al azar en tiempo continuo que penaliza las interacciones entre dos cuerpos, encontrándose la forma fija de la transformación y los exponentes críticos asociados. En el capítulo 5, una transformación del mapa grupo-de-renormalización se aplica a una caminata al azar que penaliza las interacciones de tres cuerpos, para de esta manera encontrar la forma fija de la transformación, los exponentes críticos

y el comportamiento de la distancia principio-final de la macromolécula igualmente explicamos la conexión entre este tipo de caminatas y el punto de  $\theta$  Flory..

Finalmente en el capítulo 6 se dan los argumentos en los que está basada la simulación Montecarlo y se presentan los resultados obtenidos de simular una caminata al azar autorrepelente (macromolécula) en dimensión tres en tiempo continuo, esto es el comportamiento de la distancia principio-final y se comparará con resultados previamente presentados en la literatura.

En las conclusiones se presenta un resumen de los resultados obtenidos al aplicar de mapa grupo-de-renormalización a los diferentes casos, para compararlos con resultados que ya habian sido obtenidos mediante otras técnicas.

CAMINATAS AL AZAR  
JERÁRQUICAS.

El estudio de las caminatas al azar es de sumo interés en la fisicoquímica como una forma de modelar macromoléculas. Rigurosamente hablando, una macromolécula está compuesta por un gran número de monómeros que se pueden encontrar al azar excepto por el hecho que los monómeros no se pueden traslapar. Esta restricción es modelada por un término de autorrepulsión.

El modelo matemático más simple que posee un término de autorrepulsión es conocido como caminatas al azar autorrepelentes (CAAR). Una CAAR es una caminata al azar simple que no visita más de una vez un mismo sitio. Es extremadamente difícil obtener resultados rigurosos con este modelo, en especial para casos en dimensión baja, o sea  $d = 2$  y  $d = 3$  que son los más interesantes desde el punto de vista fisicoquímico.

Por supuesto existen otras formas de introducir términos de repulsión en las caminatas al azar. Estas son divididas en dos categorías: medidas configuracionales, donde las caminatas son pesadas por el número de interacciones y las medidas que crecen cinéticamente, donde las caminatas son producto de alguna función de transición.

Igualmente importante es definir el espacio sobre el cual estarán soportadas estas caminatas. Por supuesto existen una variedad de espacios que son utilizados para simular caminatas al azar, pero en nuestro caso sólo nos enfocaremos en rejillas de tipo jerárquico, que serán explicadas con mas detalle más adelante. En estas rejillas el mapa grupo-de-renormalización factoriza apropiadamente.

Una forma de modelar macromoléculas es mediante caminatas al azar donde los pasos o saltos son dados desde un sitio inicial  $X$  hasta un sitio final  $Y$ , para después proceder de  $Y$  hasta  $W$  y así repetir el proceso  $n$  veces, de ésta forma se modela una macromolécula que está constituida por  $n + 1$  monómeros. Podemos tener o no la condición de que tanto  $X$  y  $Y$  así como también  $Y$  y  $W$  sean vecinos cercanos. Es así que el proceso que llamaremos  $w$ , es definido como una secuencia ordenada de sitios en alguna rejilla  $G$  (es decir sus elementos son llamados sitios) expresado como sigue:

$$w(t_0), w(t_0 + t_1), w(t_0 + t_1 + t_2), \dots, w(t_0 + t_1 + t_2 + \dots + t_n)$$

donde

$$w(t_0 + \dots + t_i) = X_i \in G$$

con la condición

$$T = \sum_{i=0}^n t_i \quad \text{para} \quad n > 0.$$

De aquí en adelante  $t_i$  es el tiempo esperado en  $X_i$  y  $T$  o tiempo total será considerado fijo.

En otras palabras, diremos que  $w$  es una función al azar, de variables al azar, a la cual le damos como dato  $t_0 + t_1 \dots + t_i$  y nos dice el sitio  $X_i$  donde se encuentra el caminante, de tal forma que el conjunto de todos esos sitios será definido como el soporte de la caminata ( el dominio de  $w$  ), y lo escribiremos como:

$$\text{soporte}(w) := \{X \in G \mid w(t_i) = X \text{ para cualquier } i\}.$$

$w$  define una caminata,  $P(w)$  es una probabilidad en el espacio definido por  $w$ . Si no existe ninguna restricción en la trayectoria que sigue el caminante, entonces generamos una caminata al azar simple que abreviamos como CAS, sin embargo es claro que existe un cierto número de estas caminatas que no pueden representar una macromolécula ya que estas pueden tocar dos o más veces el mismo sitio y es obvio que los monómeros (simulados por la etapas de la caminata) en las macromoléculas no pueden hacer eso. Por esto es más conveniente usar caminatas al azar autorrepelentes (CAAR), es decir caminatas que no pueden tocar dos o más veces el mismo sitio, para obtener mejores modelos de macromoléculas.

Si quisieramos modelar macromoléculas mediante CAAR sería un problema sumamente difícil, ya que esto implicaría que el proceso tuviera una memoria infinita, es por esto que es más conveniente usar medidas de probabilidad de caminatas al azar que favorezcan las CAAR en el espacio de las CAS.

## MEDIDAS CONFIGURACIONALES.

Para una CAAR con las siguientes condiciones

$$|w(t_i) - w(t_{i-1})| = 1 \text{ para } i = 1, 2, 3, \dots, n, \quad (1.1)$$

definimos  $\Gamma_n$  como el conjunto de todas las CAAR que empiezan en cero, es decir  $w(t_0) = 0$  y  $\Lambda_n$  como el conjunto de todas las CAS que empiezan en cero, es decir  $w(t_0) = 0$ , es obvio que  $|\Lambda_n| = (Ld)^n$  y por supuesto  $\Gamma_n \subset \Lambda_n$ , además si  $C_n = |\Gamma_n|$  entonces  $C_n \leq (Ld)(Ld - 1)^{n-1}$ .  $L$  es un entero mayor o igual a 2 que depende del tipo de rejilla sobre la cual está la caminata.

Como nuestra meta es usar medidas de caminatas que favorecen las CAAR es conveniente definir para cualquier  $w \in \Lambda_n$ ,  $J(w)$  como el número de interacciones. Entiéndase interacción como un cruce de la caminata, es decir la caminata tocó más de una vez el mismo sitio. Entonces

$$J(w) = \sum_{0 \leq i+1 \leq j \leq n} I\{w(t_i), w(t_j)\} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \delta\{w(t_i), w(t_j)\} \quad (1.2)$$

Entonces para cualquier  $\beta \geq 0$  definimos  $U^\beta$  como la medida de probabilidad en  $\Lambda_n$  tal que

$$U^\beta(w) = \frac{\exp\{-\beta J(w)\}}{(\exp\{-\beta J(w)\})_P} \quad (1.3)$$

Observe que si  $\beta = 0$  recuperamos una CAS y para  $\beta \rightarrow \infty$  obtenemos una CAAR. Esta medida de probabilidad es conocida como CAAR débil o como el modelo de Domb-Joyce. Se cree que para  $\beta > 0$  esta medida está en la misma clase de universalidad que una CAAR, es decir, su comportamiento crítico es el mismo.

Existe un modelo similar, el cual considera un movimiento Browniano en lugar de una caminata al azar, que ha sido ampliamente usado en la literatura [11], [12] y [13]. En este modelo, llamado de Edwards, la variable de interacción es la siguiente:

$$V = \int_0^1 \int_0^1 \delta(B_s - B_t) ds dt. \quad (1.4)$$

Donde  $B_s$  y  $B_t$  son movimientos Brownianos abstractos. Definamos para una  $\beta \geq 0$ , una medida  $Q_\beta$  como sigue

$$\frac{dQ_\beta}{dP} = \frac{\exp\{-\beta V\}}{\langle \exp\{-\beta V\} \rangle_P} \quad (1.5)$$

El conjunto de movimientos Brownianos  $B_t$  con la medida  $Q_\beta$  es llamado el modelo de Edwards. Se puede hacer una aproximación de la función  $\delta$ , esto es considerando una caminata  $w$  de longitud  $n$ , como  $B_t = n^{-\frac{1}{2}}w([nt])$ , donde los pasos son de tamaño  $n^{-\frac{1}{2}}$ . En consecuencia

$$\delta^n(x) = \delta^n(x^1, x^2, \dots, x^d) = \begin{cases} n^{\frac{d}{2}} \text{ si } |x^i| \leq \frac{1}{2}n^{-\frac{1}{2}} \\ 0 \text{ de otra manera} \end{cases} \quad (1.6)$$

Entonces (1.4) puede ser aproximada por:

$$\begin{aligned} V &= \int_0^1 \int_0^1 \delta(B_s - B_t) ds dt = \frac{1}{n^2} \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \delta^n(B_s - B_t) \\ &= n^{\frac{d-4}{2}} \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \delta^n(w(t_i) - w(t_j)) \\ &= n^{\frac{d-4}{2}} (2J(w) - (n+1)). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Lo cual puede ser escrito como:

$$V = J^- + 2n^{\frac{d-4}{2}} \langle J \rangle_P - n^{\frac{d-4}{2}} (n-1) \quad (1.8)$$

donde

$$J^- = 2n^{\frac{d-4}{2}} (J - \langle J \rangle_P). \quad (1.9)$$



Una característica importante del modelo de Edwards es que no pertenece a la misma clase de universalidad de las CAAR y las CAAR débiles en  $d = 2$  [14].

## MEDIDAS QUE CRECEN CINÉTICAMENTE.

Es claro ver que las CAAR, las CAAR débiles y el modelo de Edwards son medidas configuracionales de caminatas al azar, es decir, estas medidas son naturales desde el punto de vista de la mecánica estadística. En estas medidas las caminatas que minimizan la energía son favorecidas, donde la energía es alguna función del número de interacciones y por consiguiente de la configuración.

Tanto el modelo de Edwards como el modelo de Domb-Joyce no son naturales si se quiere considerar una caminata al azar como un proceso estocástico. Un proceso estocástico es simplemente una función de dos variables, una de las cuales es el tiempo y la otra es una variable estocástica. Una variable estocástica debe poseer un conjunto de posibles valores y una distribución de probabilidades sobre este conjunto. En general decimos que una secuencia de medidas de probabilidad  $\lambda_n$  en  $\Lambda_n$  es consistente si para  $w \in \Lambda_n$ ,  $m \geq 0$

$$\lambda_n(w) = \sum_{w \prec \eta} \lambda_{n+m}(\eta). \quad (1.10)$$

Donde  $w \prec \eta$  quiere decir que  $\eta$  extiende a  $w$ , en otras palabras  $\eta(t_i) = w(t_i)$  para  $0 \leq i \leq n$ . Esto se observa con más detalle en el ejemplo 1.

### EJEMPLO 1.

Supongamos que tenemos la caminata  $w$  que consta de  $n$  pasos y es mostrada en la figura 1.

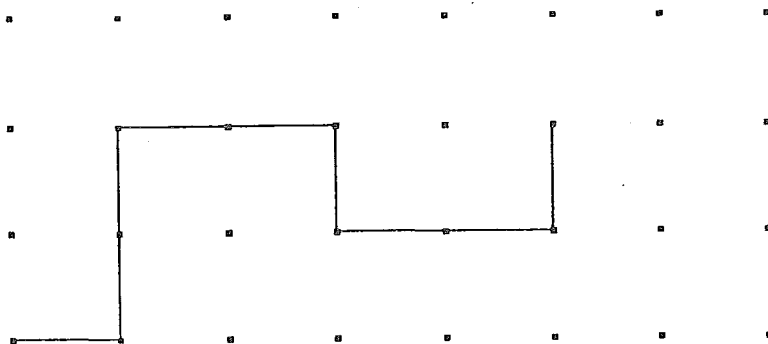


FIGURA 1. Caminata  $w$  que consta de  $n=9$  pasos.

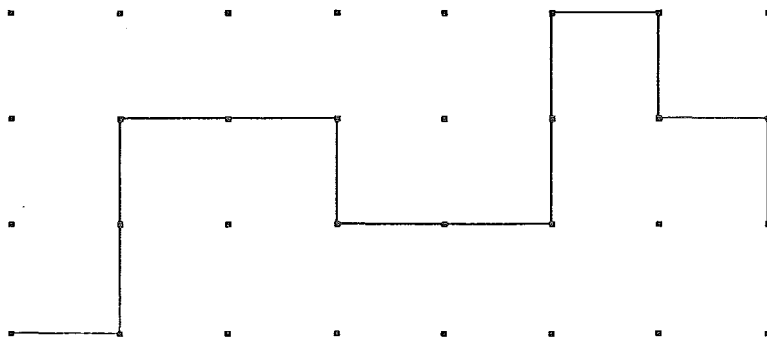


FIGURA 2. Caminata  $w$  de 9 pasos que ha sido extendida a la caminata  $\eta$  que está formada de  $n=9 + m=5$  pasos.



Con  $w^i$  como la única caminata en  $\Lambda_i$  que puede ser extendida a  $w^{i+1}$ , es decir  $w \prec \bar{w}$ . Este tipo de caminatas son conocidas como caminatas que crecen cinéticamente, que abreviaremos como CCC.

Sea  $V_{n(x)}$  el número de visitas al sitio  $x$ , que escribimos como

$$V_{n(x)} = V_{n(x,w)} = |\{j : w(j) = x\}|. \quad (1.13)$$

Entonces definimos la transición

$$\pi(\bar{w}(n+1) = x/w) = \frac{1 - V_{n(x)}}{\sum_{|y-w(n)|=1} (1 - V_{n(y)})}, \text{ con } |x - w(n)| = 1. \quad (1.14)$$

La sumatoria del denominador indica que se tiene que sumar sobre todos los sitios tales que  $|y - w(n)| = 1$ , donde  $y$  es por supuesto un vecino cercano del sitio  $w(n)$ . Una aplicación de este metodo es mostrada en el ejemplo 2.

## EJEMPLO 2.

Para la caminata de la figura 4 tenemos que

$$\pi(\bar{w}(n+1) = x/w) = \frac{1 - V_{n(x)}}{(1 - V_{n(x)}) + (1 - V_{n(a)}) + (1 - V_{n(b)}) + (1 - V_{n(c)})}$$

donde

$$V_{n(x)} = 0$$

$$V_{n(a)} = 1$$

$$V_{n(b)} = 1$$

$$V_{n(c)} = 0$$

por lo tanto

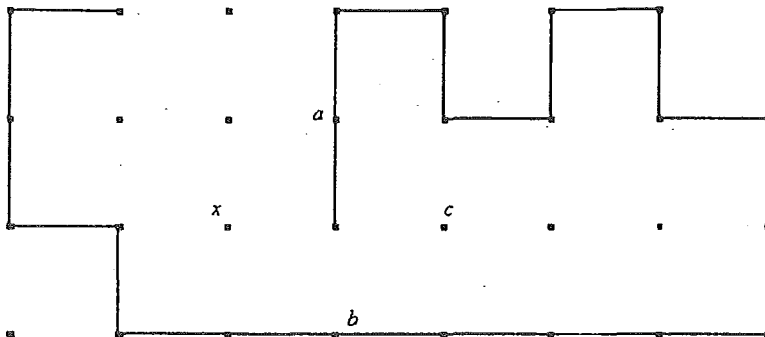


FIGURA 4. Una CCC con sitio final  $w(n)$ , cuyos vecinos cercanos son  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $x$ .

$$\pi(\bar{w}(n+1) = x/w) = \frac{1-0}{1+0+0+1} = \frac{1}{2}$$

□

Desafortunadamente una caminata con esta transición de probabilidades tarde o temprano quedará atrapada y será descartada, es decir, todos los vecinos cercanos estarán ocupados. Sin embargo podemos hacer una versión débil de este modelo al penalizar más alto las interacciones en sitios más ocupados. Así para una  $\beta > 0$  definimos

$$\pi(\bar{w}(n+1) = x/w) = \frac{\exp\{-\beta V_u(x)\}}{\sum_{|y-w(n)|=1} \exp\{-\beta V_u(y)\}}, \text{ con } |x-w(n)|=1 \quad (1.15)$$

A este tipo de caminatas se les conoce como CAAR miope, aquí miope significa que el caminante sólo considera a vecinos cercanos cuando escoge el siguiente paso.

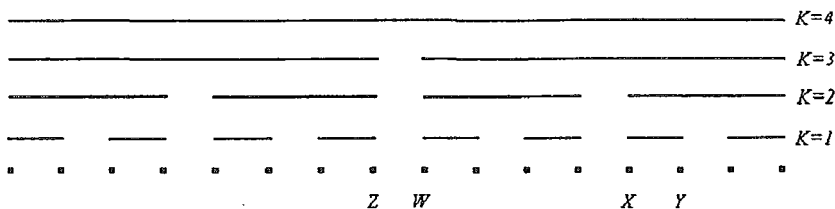


FIGURA 5. Rejilla jerárquica unidimensional.

esta caminata también ha sido llamada CAAR verdadera. Este modelo puede ser aplicado a reacciones de polimerización donde la macromolécula crece conforme avanza la reacción, igualmente puede ser aplicado a fenómenos de adsorción catalítica, ya que un paso de la caminata corresponde a una molécula adsorbida. Sin embargo ¿Puede esta caminata verse como una CAAR?. Mientras esto no se halla probado rigurosamente, argumentos heurísticos y trabajos numéricos sugieren que son significativamente diferentes, por ejemplo, el desplazamiento promedio cuadrado se espera que crezca como  $n^{1/2}$  para  $d = 1$  y como  $n$  para  $d \geq 2$  ( con posibles correcciones logarítmicas para  $d = 2$  ) [14]. Esto muestra que la dimensión crítica es 2 y no 4 como en una CAAR usual [15].

## REJILLAS JERÁRQUICAS

Para ser capaces de simular una macromolécula mediante una caminata al azar, es necesario definir el espacio sobre el cual estará definida ésta. En este trabajo usaremos rejillas de tipo jerárquico, como ejemplo de ello se muestra la rejilla unidimensional en la figura 5, tomada de [16]. Se usa una rejilla jerárquica para que el mapa grupo-de-renormalización factorice apropiadamente.

En nuestra rejilla jerárquica los elementos o sitios son etiquetados como elementos de  $G = \bigoplus_{k=0}^{\infty} Z_{L^k}$ . Donde  $L$  es un número entero tal que  $L \geq 2$ . La rejilla de la figura

5 ha sido re-escalada a diferentes valores de  $K$ , es decir, si en la rejilla original se tenían 16 sitios, en la rejilla re-escalada a  $K = 1$  se tienen 8 sitios, 4 para  $K = 2$  y así sucesivamente. Esto será de mucha ayuda una vez que utilizemos una transformación de grupo de renormalización. Al hacer este re-escalamiento estamos usando el hecho de que  $G$  tiene diferentes subgrupos, es decir

$$\{0\} = G_0 \subset G_{k=1} \subset G_{k=2} \subset G_{k=3} \subset \dots \subset G. \quad (1.16)$$

Donde  $G$  etiqueta a la rejilla completa. Esta división está hecha de tal forma que el número de elementos dentro de cada subgrupo, que de ahora en adelante llamaremos bloque, está dado por  $L^{dk}$ , donde  $d$  es la dimensión de la rejilla. En la figura 5,  $L = 2$  y  $d = 1$ .

La distancia sobre esta rejilla jerárquica está definida de la siguiente forma. Sea  $|X|_H = D_H(0, X)$  la distancia del origen al sitio  $X$

$$|X|_H = \begin{cases} 0 & \text{si } X = 0 \\ L^p & \text{si } X \neq 0 \text{ donde } p = \min \{K \mid X \in G_k\} \end{cases} \quad (1.17)$$

Aquí la distancia mínima entre dos sitios no es la misma que en una rejilla cúbica, y el subíndice  $H$  significa que ésta es una distancia basada en una ultramétrica. En el último caso la rejilla es considerada isomorfa a un grupo aditivo de enteros. Vea la figura 6.

En el ejemplo 3 se observa con más detalle como una distancia entre dos sitios de una rejilla jerárquica es calculada.

### EJEMPLO 3.

Tomemos como ejemplo las distancias entre los sitios  $X$  y  $Y$  y los sitios  $Z$  y  $W$  de la figura 5, que escribiremos como:

$$\begin{aligned} D_H(X, Y) &= 2^{K(x,y)} = 2^1 = 2 \\ D_H(Z, W) &= 2^{K(z,w)} = 2^4 = 16 \end{aligned}$$

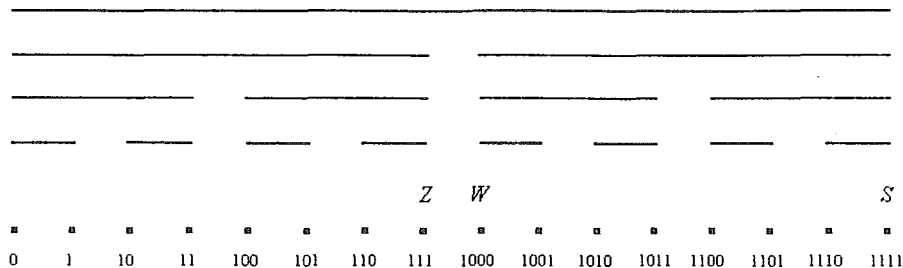


FIGURA 6. Rejilla jerárquica unidimensional en la que se han etiquetado los sitios como elementos de  $G$ .

Donde  $D_H(Z, W) = |Z - W|_H$ , además en la figura 6 observamos que

$$Z = (\dots, 0, 1, 1, 1, 1) \text{ y } W = (\dots, 0, 1, 0, 0, 0)$$

Por lo tanto

$$|Z - W|_H = Z - W = (\dots, 0, 1, 1, 1, 1)$$

Observamos que el sitio  $(\dots, 0, 1, 1, 1, 1)$  corresponde al sitio etiquetado como  $S$  en la figura 6, así encontramos que

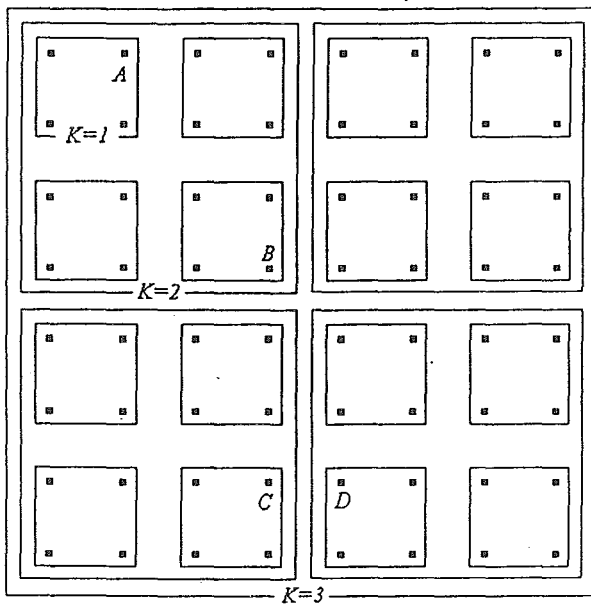
$$D_H(0, S) = |Z - W|_H = 2^4 = 16$$

Resultado que corresponde al previamente calculado.

□

Un ejemplo de rejilla jerárquica bidimensional es presentado en la figura 7.





$$D_H = (A, B) = 2^{K(A,B)} = 2^2 = 4$$

$$D_H = (C, D) = 2^{K(C,D)} = 2^3 = 8$$

FIGURA 7. Rejilla jerárquica bidimensional donde han sido calculadas las distancias entre los sitios  $A$  y  $B$  y los sitios  $C$  y  $D$ .

**GRUPO DE  
RENORMALIZACIÓN Y  
EXONENTES CRÍTICOS.**

A grandes rasgos el mapa grupo-de-renormalización actúa cambiando la longitud de escala de un sistema, disminuyendo grados de libertad y analizando los resultados físicos de esto. Sólo en la criticalidad el sistema permanece invariante bajo un cambio de escala y el comportamiento crítico es descrito por los llamados puntos fijos de la transformación.

## RENORMALIZACIÓN DE UNA REJILLA.

Las técnicas de renormalización en espacio real son solo aplicables a modelos basados en una rejilla, y más aún, la rejilla tiene que ser de un tipo muy especial; tiene que tener una simetría de escalamiento discreta. Para entender lo que esto significa, consideremos una rejilla y dividamos los sitios de la rejilla en grupos o bloques, después remplacemos cada bloque o grupo por solo un sitio, el cual estará en cualquier posición de los sitios originales de ese bloque. La rejilla tendrá una simetría de escalamiento discreta si podemos dividir la rejilla de esta manera, para obtener una rejilla exactamente igual a la original, excepto por el hecho que las dimensiones se han incrementado de  $a$  a  $a'$ . La renormalización de la rejilla será completada al reducir todas las dimensiones en la nueva rejilla por un factor de escala  $b$  tal que  $a = ba'$ .

De hecho algo cambia cuando renormalizamos nuestra rejilla. Al agrupar los sitios de nuestra rejilla de la manera mencionada, cada bloque tendrá  $p$  sitios, entonces la rejilla renormalizada tendrá menos sitios que la original. Ya que escalamos la rejilla por un factor  $b$ , su volumen debe haberse encogido por un factor  $b^d$ , donde  $d$  es la dimensión de la rejilla. Es claro que si los sitios son acomodados de una manera exactamente igual a la original, su número debe reducirse por un factor  $p = b^d$ . Ejemplos de renormalización de rejillas son presentados en las figuras 8, 9 y 10.

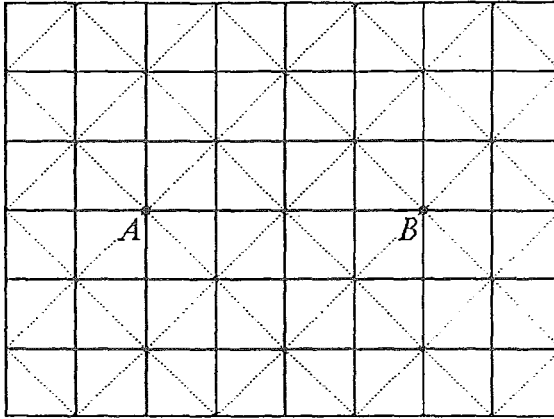


FIGURA 8. Renormalización de una rejilla cuadrada por un factor de escala  $b=2^{1/2}$ . La rejilla original y la renormalizada están trazadas en líneas continuas y punteadas respectivamente.

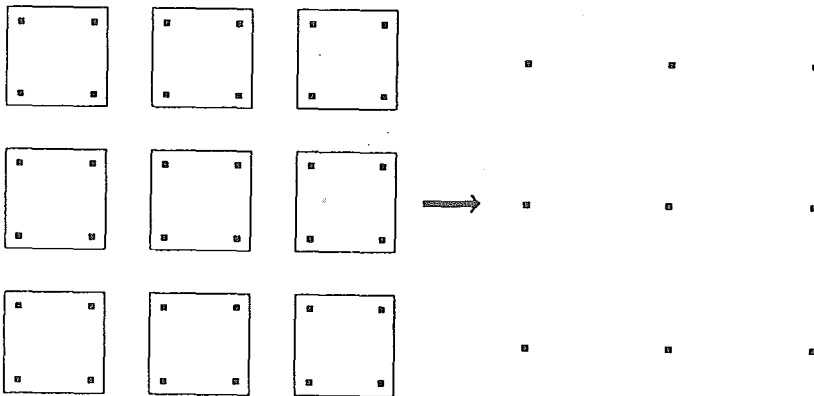


FIGURA 9. Renormalización de una rejilla cuadrada. Las dimensiones lineales de la rejilla de la derecha deben ser encogidas por un factor de escala  $b=2$  para obtener una rejilla similar a la original.

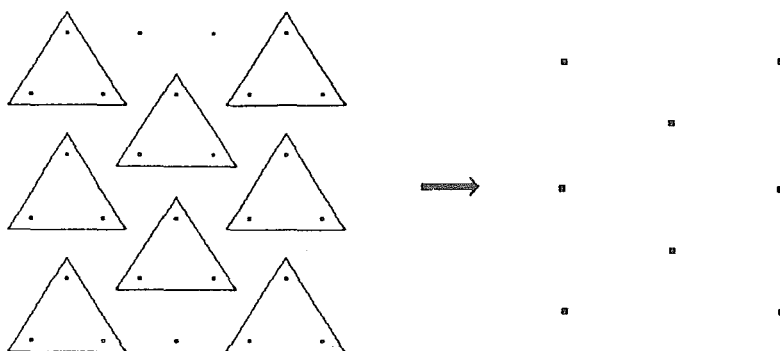


FIGURA 10. Renormalización de una rejilla triangular. Las dimensiones lineales de la rejilla de la derecha deben ser encogidas por un factor  $b=3^{1/2}$  para obtener una rejilla similar a la original.

## RENORMALIZACIÓN DE UN HAMILTONIANO.

Tomemos como ejemplo un modelo de espines, en este modelo un espin  $s_i$  es definido en cada sitio de nuestra rejilla, cuando renormalizamos el sistema, definimos una nueva variable  $\sigma_k$  para cada bloque, esta nueva variable es alguna función  $f$  de los espines en ese bloque, llamaremos a estas nuevas variables como variables de bloque y lo escribiremos como

$$\sigma_k^{(1)} = f(\{s_i\}) \quad (2.1)$$

Ahora remplazamos cada bloque por un solo sitio y encogemos nuestra rejilla para obtener una igual a la original, así obtenemos un sistema con la misma rejilla y con las mismas variables.

Esta técnica de renormalización involucra la sucesiva aplicación de este tipo de transformaciones, así

$$\sigma_k^{(n+1)} = f \left( \left\{ \sigma_k^{(n)} \right\} \right) \quad (2.2)$$

Donde hemos aplicado la transformación  $n$  veces y  $s_i = \sigma_i^{(0)}$ . Si  $P(\{s_i\})$  es la probabilidad de que los espines tomen algun conjunto particular de valores  $\{s_i\}$ , entonces podemos definir un Hamiltoniano para nuestro modelo mediante la ecuación

$$P(\{s_i\}) = \frac{1}{Z} \exp \left[ \hat{H}(\{s_i\}) \right] \quad (2.3)$$

Este Hamiltoniano dependerá de la temperatura y de la selección de parámetros tales como interacciones espín-espín. Por ejemplo, en el modelo de Ising estos parámetros involucrarán las interacción entre el campo magnetico y los espines individuales, interacciones entre primeros, segundos y demas vecinos, interacciones entre tres espines y así. Un ejemplo de un Hamiltoniano para el modelo de Ising es el siguiente.

$$H = -\frac{a}{kt} \sum \sigma_i \sigma_j - \frac{b}{kt} \sum \sigma_i \quad (2.4)$$

Cuando llevamos a cabo una transformación grupo-de-renormalización estipulamos que el Hamiltoniano  $H^{(n+1)}$  debe tener la misma forma funcional que  $H^{(n)}$ , para que el modelo sea exactamente el mismo en cada estado excepto por un cambio en los parámetros que aparecen el Hamiltoniano. Aquí uno se preguntaría ¿Como satisfacer esta condición cuando en el sistema el Hamiltoniano ya ha sido establecido completamente?. Esta última condición es estrictamente imposible de establecer en todos los casos. Al hacer ésto los parámetros que aparecen en la función darán la mejor aproximación posible, pero algún grado de aproximación es inevitable. Sin embargo si vamos a proceder de esta manera, debemos de una manera u otra forzar a nuestro Hamiltoniano renormalizado a tener la misma forma funcional que el original

para que por ejemplo, el Hamiltoniano renormalizado de Ising a campo cero sea otro Hamiltoniano de Ising pero con una temperatura diferente. La renormalización de un Hamiltoniano es algún mapa que toma a  $H^{(n)}$  y lo transforma a  $H^{(n+1)}$ .

$$\hat{H}^{(n+1)} = R\hat{H}^{(n)} \quad (2.5)$$

o bien

$$\hat{H}' = R\hat{H} \quad (2.6)$$

De aquí en adelante las ecuaciones (2.5) y (2.6) serán usadas indistintamente. Así el único efecto de la transformación  $R$  es cambiar el valor de los campos conjugados que aparecen el Hamiltoniano. Los valores de los nuevos campos dependerán únicamente de los valores de los viejos y de nada más, aunque algunas veces esta dependencia involucre complicadas dependencias no lineales.

Aunque las ecuaciones (2.6) y (2.7) se refieren a  $\hat{H}$ , lo que realmente cambia de un estado a otro al aplicar la transformación  $R$  son los valores de los parámetros, así es posible adoptar otra notación. Supongamos que los parámetros que aparecen el el Hamiltoniano son  $H_1, H_2, \dots$ , entonces podemos construir un vector  $H$  con ellos y escribir la renormalización de éste como

$$H' = RH \quad (2.7)$$

Por supuesto la temperatura debe estar incluida en las  $H_n$  ya que como dijimos el Hamiltoniano depende de esta. Algunas veces ayuda pensar en un espacio de parámetros, es decir, un espacio de dimensión finita, en el cual un punto con vector de posición  $H$  representa el Hamiltoniano con los correspondientes valores de parámetros. Llamemos  $H_1, H_2, \dots$  a los parámetros que aparecen en el Hamiltoniano, de esta forma  $H_n$  toma el rol de coordenadas. En el caso del modelo de Ising a campo cero, por ejemplo, tendríamos un espacio de dimensión uno, ya que el único parámetro libre en el Hamiltoniano sería la temperatura, cuando tenemos el modelo

de Ising con campo diferente de cero nuestro espacio sería de dos dimensiones con coordenadas temperatura y campo magnético. Nuestra transformación de renormalización  $R$  dentro de este espacio es por medio de saltos discretos. Si empezamos en algún punto inicial  $H^{(0)}$  (esto significa que aun no ha sido aplicado  $R$ ) y aplicamos  $R$  varias veces, nos moveremos en pasos a lo largo de alguna trayectoria a través del espacio de parámetros. En cada paso los valores de los parámetros que aparecen en el Hamiltoniano son remplazados por otros nuevos que son calculados a partir de los viejos parámetros.

De aquí en adelante trabajaremos exclusivamente con el vector  $H$  y frecuentemente nos referiremos a él como hamiltoniano. En general habrá puntos fijos en nuestro espacio. Un punto fijo está caracterizado por

$$H' = RH = H^* \quad (2.8)$$

Si nos expandimos alrededor del punto fijo  $H^*$  escribimos

$$\begin{aligned} H &= H^* + \delta H \\ H' &= H^* + \delta H' \end{aligned} \quad (2.9)$$

Usando las ecuaciones (2.8) y (2.9) encontramos

$$H^* + \delta H' = R(H^* + \delta H) = R(H^*) + M\delta H + O(\delta H)^2 \quad (2.10)$$

En la ecuación anterior hemos expandido  $R$  en una serie de Taylor, y  $M$  es una matriz que debe ser evaluada en el punto fijo. Ya que  $H^*$  es un punto fijo se tiene que

$$\delta H' = M\delta H + O(\delta H)^2 \quad (2.11)$$

una buena aproximación es



$$\delta H' = M \delta H \quad (2.12)$$

Así cuando estamos infinitesimalmente cerca del punto fijo, nuestra trayectoria está completamente determinada por la matriz  $M$ , o bien por sus eigenvalores  $\lambda_i$  y sus correspondientes eigenvectores  $\vec{v}_i$ . Si  $M$  tiene un eigenvalor  $\lambda_i > 1$  el punto fijo será repulsivo en la dirección del correspondiente eogen vector, de la misma forma si  $\lambda_i < 1$  el punto fijo será atractivo en la correspondiente dirección. En una primera aproximación, si dos transformaciones del mapa de grupo-de-renormalización son aplicadas con factores de escala  $b_1$  y  $b_2$ , el cambio de escala total será  $b_1 b_2$ , entonces

$$\lambda_i(b_1) \lambda_i(b_2) = \lambda_i(b_1 b_2). \quad (2.13)$$

por lo que

$$\lambda_i(b) = b^{y_i} \quad (2.14)$$

con  $y_i$  como exponente crítico.

Para un Hamiltoniano  $H$  que está cerca del punto fijo  $H^*$  la desviación del punto fijo puede ser expresada como en terminos de los  $\vec{v}_i$ .

$$H = H^* + \sum g_i \vec{v}_i \quad (2.15)$$

Donde los coeficientes son denominados campos escalares, ejemplos de ello son la temperatura y el campo magnético. Procediendo bajo renormalización tenemos

$$H' = H^* + \sum b^{y_i} g_i \vec{v}_i \quad (2.16)$$

donde

$$g'_i = b^{y_i} g_i \quad (2.17)$$

Si la matriz  $M$  de la ecuación (2.12) tiene  $\lambda_i < 1$  y  $y_i$  negativo el correspondiente campo escalar decae bajo repetidas aplicaciones de la transformación, así mueve al sistema cada vez más cerca del punto fijo. por lo tanto tendremos un punto fijo atractivo y los campos escalares son denominados variables irrelevantes, si por el contrario  $\lambda_i > 1$  y  $y_i$  positivo el correspondiente campo escalar aumenta bajo repetidas aplicaciones de la transformación, así mueve al sistema cada vez más lejos del punto fijo por lo que será denominado un punto fijo repulsivo y los campos son denominados variables relevantes.

Un caso especial ocurre cuando  $\lambda_i = 1$ , en este caso la aplicación de  $R$  no mueve en el espacio formado por los  $H_n$ .

El mapa de grupo de renormalización será usado para ver como se comporta la energía de interacción bajo una transformación del mapa y como consecuencia de esto será posible escribir los exponentes críticos  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ , que están definidos en la tabla 1 y 2, en términos de los exponentes  $y_i$ , los cuales están completamente relacionados con los eigenvalores de la matriz de transformación en la vecindad del punto fijo.

Calor específico a campo cero	$C_H \sim  (T - T_c)/T_c ^{-\alpha}$
Magnetización a campo cero	$M \sim (T_c - T)^\beta$
Susceptibilidad isotérmica	$\chi_T \sim  T_c - T ^{-\gamma}$
Isoterma crítica	$H \sim  M ^{1/\delta}$
Longitud de correlación	$\epsilon \sim  T_c - T ^{-\nu}$
Función de correlación de dos puntos	$G^{(2)}(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

TABLA 1. Definición de los exponentes críticos para sistemas magnéticos.

Calor específico a volumen constante	$C_V \sim  (T - T_c)/T_c ^{-\alpha}$
Diferencia de densidades (liq-gas)	$(\rho_{liq} - \rho_{gas}) \sim (T - T_c)^\beta$
Susceptibilidad isotérmica	$K_T \sim  T - T_c ^{-\gamma}$
Isoterma crítica	$P - P_c \sim  \rho_{liq} - \rho_{gas} ^{1/\delta}$
Longitud de correlación	$\epsilon \sim  T_c - T ^{-\nu}$
Función correlación de dos puntos	$G^{(2)}(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

TABLA 2. Definición de los exponentes críticos más comunes para sistemas fluidos.

En el ejemplo 3 se calculan los exponentes  $\alpha$ ,  $\beta$ , y  $\gamma$  para un sistema magnético siguiendo el algoritmo presentado en [17]. Se presenta como ejemplo el caso de los sistemas magnéticos debido a su relación con las caminatas autorrepelentes y las teorías de campo cuántico euclideo [20] [22].

Se ha comprobado que cuando en un modelo  $\phi_N^2$  los espines toman valores en una esfera  $N$ -dimensional de radio  $\sqrt{N}$  para algún entero positivo, en el límite  $N \rightarrow \infty$  se recupera la estadística de caminata autorrepelentes [18] [23].

### EJEMPLO 3.

Para el caso de sistemas magnéticos tenemos dos variables relevantes. Una variable relevante es la que nos aleja del punto fijo bajo un cambio de escala, si ocurre lo contrario serán variables irrelevantes, por lo tanto sólo dos parámetros tienen que ser ajustados, estos son la temperatura reducida  $t$  y el campo magnético reducido  $h$  donde:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}$$

$$h = \frac{H}{KT}.$$

Asumiendo que los demas campos son irrelevantes, encontramos

$$f(t, h, g_3, g_4, \dots) \approx b^{-d} f(b^{y_1} t, b^{y_2} h, b^{y_3} g_3, b^{y_4} g_4, \dots)$$

cuando  $t, h, g_3, g_4, \dots \rightarrow 0$

Recordando que  $f$  es la energía por espín y  $C_H$  se comporta cerca del estado crítico como

$$C_H = \left( \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right)_{h=0} \equiv f_{tt}(h=0) \approx |t|^{-\alpha}$$

Diferenciando dos veces y fijando  $h$  a cero, obtenemos

$$f_{tt}(t, 0) \approx b^{-d+2y_1} f_{tt}(b^{y_1} t, 0)$$

Ya que  $b$  es arbitrario, podemos hacer que  $b^{y_1} |t| = 1$  y obtener

$$b = |t|^{-\frac{1}{y_1}} \Rightarrow b^{-d+2y_1} = |t|^{-\frac{1}{y_1}(-d+2y_1)} = |t|^{\frac{d}{y_1}-2} = |t|^{-\left(2-\frac{d}{y_1}\right)}$$

por lo que podemos escribir

$$f_{tt}(t, 0) \approx |t|^{\frac{1}{y_1}(d+2y_1)} f_{tt}(\pm 1, 0)$$

y por lo tanto  $\alpha = 2 - \frac{d}{y_1}$ .

Procediendo igual para  $\bar{\beta}$  encontramos

$$\mu = \left( \frac{\partial f}{\partial h} \right)_{T=0} \equiv f_h(T=0) \approx t^{\bar{\beta}}.$$

Diferenciando una vez y haciendo  $T$  y las demás variables irrelevantes igual a cero obtenemos

$$f_h(0, h) \approx b^{-d+y_2} f_h(0, b^{y_2} t).$$

Como  $b^{y_1} |t| = 1$  se debe cumplir que  $b = (-t)^{-\frac{1}{y_1}}$  por lo que

$$f_h(0, h) \approx (-t)^{-\frac{1}{y_1}(-d+y_2)} f_h(0, b^{y_2} t)$$

$$f_h(0, h) \approx (-t)^{\frac{(d-y_2)}{y_1}} f_h(0, b^{y_2} t)$$

y así vemos que  $\bar{\beta} = \frac{d-y_2}{y_1}$ .

Una vez más repetimos el algoritmo para  $\gamma$  encontrando lo siguiente:

$$\begin{aligned} -X_T &= \left( \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \right)_{T=0} \equiv f_{hh}(T=0) \approx |t|^{-\gamma} \\ f_{hh}(0, h) &\approx b^{-d+2y_2} f_{hh}(0, b^{y_2} t) \\ f_{hh}(0, h) &\approx |t|^{-\left(\frac{1}{y_1}\right)\left(\frac{-d}{2y_2}\right)} f_{hh}(0, b^{y_2} t) \\ f_{hh}(0, h) &\approx |t|^{\left(\frac{2y_2-d}{y_1}\right)} f_{hh}(0, b^{y_2} t) \\ \gamma &= \left( \frac{2y_2-d}{y_1} \right) \end{aligned}$$

□

Existe otro camino mucho más simple para conocer los exponentes críticos, el cual está basado en las leyes de escalamiento, estas leyes permiten conocer todos los exponentes críticos a partir de sólo dos de ellos.

Cuando un sistema experimenta una transición de fase, dos puntos fijos son identificados fácilmente, el punto fijo de alta temperatura es el Hamiltoniano cuando  $T \rightarrow \infty$ . En este caso todas nuestras variables toman valores al azar y están completamente no correlacionadas, cuando agrupamos nuestras variables en bloques, es claro que para cualquier definición (2.1) las variables de bloque están todavía no correlacionadas y su distribución de probabilidades no cambia, por lo tanto el Hamiltoniano no pudo haber cambiado tampoco y así estamos en un punto fijo. El otro punto fijo es el punto fijo de baja temperatura para un sistema cuando  $T \rightarrow 0$ , en este caso el completo orden reina, así cuando agrupamos las variables, las nuevas variables de bloque están igualmente ordenadas, al igual que la distribución de probabilidades de

esta forma el Hamiltoniano será el mismo antes y después de renormalizar así estamos en un punto fijo.

Para conocer la naturaleza de estos puntos, consideremos un Hamiltoniano para una temperatura arriba de  $T_c$ , cuando aplicamos la transformación todas las longitudes deben encogerse por el factor de escala  $b$ , incluida la longitud de correlación, esto es

$$\varepsilon' = \frac{\varepsilon}{b} \quad (2.18)$$

Cuando  $n \rightarrow \infty$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$  dejando a las variables de bloque completamente no correlacionadas, así concluimos que toda  $T > T_c$  es atraída al punto fijo de alta energía.

Situemonos en un punto abajo de  $T_c$ . Por abajo de  $T_c$  tendremos algún valor promedio para nuestros espines diferente de cero, por ejemplo una magnetización espontanea, Cuando agrupamos espines en variables de bloque cada vez más grandes, estamos promediando sobre más y más espines hasta que en el límite  $n \rightarrow \infty$  todas las variables de bloque serán iguales. Así concluimos que toda  $T < T_c$  es atraída al punto fijo de baja temperatura.

La pregunta ahora es ¿Qué pasa en  $T = T_c$ ? Los Hamiltonianos que fluyen hacia los puntos fijos de alta y baja temperatura deben estar separados por algún plano (o línea) a través de nuestro espacio de  $H_n$ , que llamaremos superficie crítica. Cada punto en esta superficie corresponde a un Hamiltoniano que está a la temperatura crítica apropiada. La única posibilidad que tenemos ahora es definir un punto fijo en la superficie crítica, conocido como punto fijo crítico, el cual será atractivo dentro de la superficie crítica y repulsivo fuera de ella, de esta forma la matriz  $M$  correspondiente a este punto tendrá solo un eigenvalor mayor a uno. Este punto crítico es el más interesante de los puntos fijos ya que sus propiedades nos hablan directamente del comportamiento crítico de nuestro sistema.

## CÁLCULO DE $\nu$ .

Sabemos que la longitud de correlación después de aplicar el mapa de grupo de renormalización  $n$  veces será

$$\varepsilon^{(n)} = \frac{\varepsilon^{(0)}}{b^n}. \quad (2.19)$$

Propongamos la condición siguiente

$$\frac{\varepsilon^{(0)}}{b^n} = u \quad (2.20)$$

El valor exacto de  $u$  no es importante en el siguiente análisis. Supongamos ahora que hemos encontrado el punto fijo y expandemos la transformación  $R$  para encontrar la matriz  $A$ , supongamos también que encontramos los eigenvalores de  $A$ , que son  $\lambda_R > 1$  (repulsivo) y  $\lambda_A < 1$  (atractivo), también encontramos los correspondientes eigenvectores  $H_R$  y  $H_A$ . Si tomamos nuestro Hamiltoniano muy cerca del punto crítico podemos expresar su diferencia con  $H^*$  como una combinación lineal de dos eigenvectores, es decir

$$H = H^* + x_A H_A + x_R H_R. \quad (2.21)$$

Si  $H$  permanece en la vecindad de  $H^*$  y aplicamos el mapa  $R$   $m$  veces, podemos escribir

$$H = H^* + x_A \lambda_A^m H_A + x_R \lambda_R^m H_R. \quad (2.22)$$

Si empezáramos con nuestro Hamiltoniano en un punto que no está en la inmediata vecindad de  $H^*$ , pero en otro punto cerca del punto crítico tendríamos que aplicar un cierto número de veces  $r$  para llevar a  $H$  a la región donde es válida la ecuación

(2.22). En este caso  $m = n - r$ , siendo  $n$  el número total de veces que se aplico  $R$ , así escribimos

$$H = H^* + x_A \lambda_A^{n-r} H_A + x_R \lambda_R^{n-r} H_R. \quad (2.23)$$

Si empezamos a una temperatura  $T$  y nos aproximamos a la temperatura crítica manteniendo todos los demás parámetros del problema constantes  $x_R$  se hace cada vez más pequeña hasta que se desvanece en  $T_c$ , es decir  $H \rightarrow H^*$  cuando  $n \rightarrow \infty$ . Una buena aproximación es hacer  $x_R = y_R (T - T_c)$  para  $T$  suficientemente cercanas a  $T_c$ , ya que  $T - T_c = 0$  en la temperatura crítica, entonces

$$H = H^* + x_A \lambda_A^{n-r} H_A + y_R (T - T_c) \lambda_R^{n-r} H_R \quad (2.24)$$

Propongamos ahora la siguiente condición

$$y_R (T - T_c) \lambda_R^{n-r} = v \quad (2.25)$$

Una vez más el significado de  $v$  no es importante. Eliminando  $n$  entre (2.25) y (2.20) encontramos

$$\varepsilon = u \left( \frac{v \lambda_R^r}{y_R} \right)^\nu |T - T_c|^{-\nu} \quad (2.26)$$

que se puede escribir como

$$\varepsilon \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad (2.27)$$

con

$$\nu = \frac{\log b}{\log \lambda_R}. \quad (2.28)$$



Para lo cual sólo basta encontrar los eigenvalores de la matriz  $A$  evaluada en el punto fijo, para conocer el valor de  $\nu$ .

Para conocer los demás exponentes críticos basta con conocer sólo otro de ellos; por ejemplo  $\eta$  [16]. Esto se logra usando leyes de escalamiento [18], que son:

$$\begin{aligned}
 2\bar{\beta} + \gamma &= 2 - \alpha && \text{Ley de Rushbrooke} \\
 2\bar{\beta}\delta - \gamma &= 2 - \alpha && \text{Ley de Griffiths} \\
 \gamma &= \nu(2 - \eta) && \text{Ley de Fisher} \\
 \nu d &= 2 - \alpha && \text{Ley de Josephson}
 \end{aligned}
 \tag{2.29}$$

De aquí en adelante la investigación se centrará en la solución de un problema clásico de teoría de probabilidades (las propiedades de intersección de una caminata al azar simple), usando para ello teoría de perturbaciones y argumentos de grupo de renormalización como los dados anteriormente. La teoría de perturbaciones será incluida en capítulos posteriores, mientras que el grupo de renormalización será aplicado tanto para encontrar la forma fija de una transformación, así como para determinar los exponentes críticos del modelo a considerar.

El primer problema al que nos enfrentemos será una CAS, en este caso nuestro resultado es riguroso ya que la caminata renormaliza en forma exacta.

RENORMALIZACIÓN DE UNA  
CAMINATA AL AZAR SIMPLE  
EN TIEMPO CONTINUO.

En este trabajo definimos un proceso de Lévy como una caminata al azar en tiempo continuo. Los elementos de la rejilla son llamados sitios y los saltos son efectuados de un sitio inicial dado  $X$  a un sitio final dado  $Y$ . De hecho el proceso de Lévy " $w$ " es definido de acuerdo a lo dicho en el capítulo anterior.

Existe una función  $w$  para cada caminata, igualmente existe una probabilidad  $P(w)$  para cada  $w$ . En nuestro modelo el proceso de Lévy tiene una probabilidad  $r dt$  de realizar un paso en un tiempo  $dt$  y la probabilidad de saltar de  $X$  a  $Y$ , dado que un paso fue realizado es,  $q(X, Y)$  [10]. Entonces el proceso tiene la siguiente densidad de probabilidad

$$P(w) = r^n \exp\{-rT\} \prod_{i=0}^{n-1} q(X_{i+1} - X_i). \quad (3.1)$$

Se puede demostrar que  $\sum_w P(w) = \langle \sum_{[X_i]} \prod_{i=0}^{n-1} q(X_{i+1} - X_i) \rangle = 1$ . Proponemos formalmente un mapa grupo-de-renormalización  $R$  tal que  $R(X_i) = LX'_i$  donde  $X_i$  es un sitio de la rejilla, es decir  $X_i \in G$ , donde  $G$  es la rejilla original descrita en el capítulo 1. Aquí los nuevos sitios de la rejilla son  $LX'_i$ , tal que  $LX'_i \in G'$  y  $G' = \frac{G}{G_1} \sim G$ , esto quiere decir que cuando el mapa  $R$  es aplicado a la rejilla original  $G$ , se obtiene una rejilla  $G'$  que es isomórfica a  $G$ .

Aplicamos este mapa grupo-de-renormalización al espacio de caminatas al azar generado por  $w$ ,  $R(w) = w'$  donde  $w'$  es la caminata renormalizada. Así  $w'$  es una secuencia de sitios en  $G'$ . Procediendo igual que antes, encontramos

$$w(t'_0), w(t'_0 + t'_1), w(t'_0 + t'_1 + t'_2), \dots, w(t'_0 + \dots + t'_n) \quad (3.2)$$

donde

$$w(t'_0 + \dots + t'_i) = LX'_i \in G', \quad (3.3)$$

con la condición de que

$$T' = \sum_{i=0}^l t'_i \text{ para } 0 \leq l \leq n \text{ y } T = L^\beta T' \quad (3.4)$$

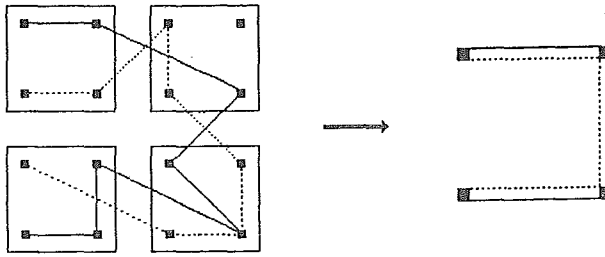


FIGURA 11. Un ejemplo de dos caminatas diferentes que una vez que sean renormalizadas generarán la misma caminata.

Aquí  $t'_i$  es el tiempo gastado o de espera renormalizado en  $LX'_i$ . Dicho de otra forma, para cada uno de los  $l$  conjuntos de tiempos esperados  $\{t_i\}$  tales que  $w(\{t_i\}) \in G_1$  el mapa grupo-de-renormalización  $R$  suma todos los elementos del conjunto y los declara un tiempo esperado renormalizado en el centro del bloque y rescalado por  $L^\beta$ . El mapa actúa sobre todo conjunto de tiempos esperados de cada bloque  $G_1$ , que conforman la rejilla  $G$ .

Existe un subconjunto de caminatas que una vez que se aplique el mapa van a generar la misma caminata renormalizada, véase la figura 11 para un ejemplo. De acuerdo a la figura 11 tenemos que  $P'(w')$  es la suma de las probabilidades de  $P(w)$  (que corresponde a la caminata con líneas continuas) y  $\mathbf{P}(w)$  (corresponde a la caminata con líneas punteadas) rescaladas por  $L^{\beta k}$ .

Al escribir formalmente esta idea

$$P'(w') = L^{\beta k} \int Dw P(w) \chi(R(w) = w') \quad (3.5)$$

Aquí  $\chi(R(w) = w')$  es una función característica que toma el valor de uno cuando a cualquier caminata  $w$  le aplicamos el mapa  $R$  y genera  $w'$ . Si una caminata  $w$  no

genera  $w'$  bajo el mapa  $R$ , entonces  $\chi$  toma el valor de cero.

Cuando se usa  $\chi$  se garantiza sumar las probabilidades de todas las caminatas que una vez que les aplique el mapa  $R$  generan la misma caminata renormalizada  $w'$ .

El término  $\int DwP(w) \chi(R(w) = w')$  es la suma de probabilidades de todas las caminatas que generan una misma caminata  $w'$  despues de que el mapa  $R$  ha sido aplicado.

Para ser capaces de encontrar la forma fija de la transformación aplicada a  $P(w)$  como ha sido definida en (3.5), necesitamos formular las siguientes definiciones.

$n$  = número de pasos de la caminata no renormalizada

$n_{i'}$  = número de pasos de la caminata no renormalizada en el bloque  $G_{i'}$

$k$  = bloques  $G_1$  tocados por la caminata renormalizada que, bajo el mapa  $R$ , corresponden a sitios renormalizados.

$m_{j'}$  = número de pasos dados desde el comienzo de la caminata no renormalizada hasta que se toca el bloque  $j$

$$n = \sum_{i'=0}^l n_{i'} + k$$

$$m_{j'} = \sum_{i'=0}^{j'} n_{i'} + j'$$

donde

$$0 \leq j' \leq k$$

Haciendo uso de lo anterior, es posible escribir  $P'(w')$  como sigue

$$P'(w') = L^{\beta k} \sum_{[X_i]_{i=0}^n} \sum_{[n_{i'}]_{i'=0}^k} \int \prod_{i=0}^n dt_i \prod_{j'=0}^k \delta \left( \sum_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} t_i - L^{\beta} t_{j'} \right) \chi(X_i \in LX_{j'}) P(w). \quad (3.6)$$

Donde  $\sum_{[n_{i'}]_{i'=0}^k}$  indica la sumatoria para todo posible número de pasos dentro de cada bloque  $G_1$ , y  $\sum_{[X_i]_{i=0}^n}$  indica lo sumatoria sobre todo posible sitio que tocó la caminata. Esta expresión será usada en cálculos posteriores.

Ahora dividimos  $P'(w')$  en dos factores, el primero corresponderá a saltos entre diferentes bloques  $G_1$ , y el otro a saltos dentro de un mismo bloque  $G_1$ . Esto queda escrito como

$$P'(w') = L^{\beta k} \exp \{-rT\} AB.$$

Donde  $A$  corresponde a saltos entre diferentes bloques  $G_1$ , y  $B$  a saltos dentro de un mismo bloque  $G_1$ . Primeramente estudiamos el factor  $A$ . Puesto que  $k$  es el número de bloques  $G_1$  que la caminata tocó, entonces

$$A \simeq r^k \exp \{-rT\} \prod_{j'=0}^{k-1} q \left( LX'_{j'+1} - LX'_{j'} \right).$$

Ya que es posible saltar de  $L^d$  formas diferentes de un bloque a otro (en un bloque hay  $L^d$  sitios equivalentes donde caer), entonces

$$A = r^k \exp \{-rT\} \prod_{j'=0}^{k-1} q \left( LX'_{j'+1} - LX'_{j'} \right) L^d.$$

Como dentro de un mismo bloque se han definido  $n_{j'}$  como los saltos efectuados y la caminata puede tocar  $L^d - 1$  sitios diferentes con un tiempo de espera  $L^{\beta t'_{j'}}$ , entonces

$$B = \prod_{j'=0}^k \sum_{n_{j'}} r^{n_{j'}} \left( q_1 (L^d - 1) \right)^{n_{j'}} \frac{\left( L^{\beta t'_{j'}} \right)^{n_{j'}}}{n_{j'}!}.$$

Donde  $\sum_{n_{j'}}$  corresponde a la sumatoria sobre cualquier posible número de pasos dentro de un mismo bloque y  $\prod_{j'=0}^k$  es el producto sobre todo bloque ocupado después de renormalizar. Finalmente obtenemos

$$P'(w') = L^{\beta k_r k} \exp\{-rT\} \prod_{j'=0}^{k-1} \left[ q(LX'_{j'} - LX'_{j+1}) L^d \right] \prod_{j'=0}^k \sum_{n_{j'}} r^{n_{j'}} (q_1 (L^d - 1))^{n_{j'}} \frac{(L^{\beta} l'_{j'})^{n_{j'}}}{n_{j'}!}. \quad (3.7)$$

Para garantizar la existencia de una bien definida y comportada función de Green para el proceso estocástico de Lévy en estudio, sobre la red jerárquica [16], proponemos lo siguiente

$$q(X_{i+1} - X_i) = c |X_{i+1} - X_i|^{-\alpha} \quad (3.8)$$

donde  $c$  y  $\alpha$  son constantes positivas. Además por normalización se cumple

$$\sum_{X_i \in G} c |X_{i+1} - X_i|^{-\alpha} = 1.$$

Dado que es posible saltar de  $(L^d - 1)$  formas diferentes dentro de un mismo bloque y los sitios están todos a la misma distancia  $L$  y es posible saltar de  $(L^{kd})$  diferentes pero equivalentes maneras entre diferentes bloques y la distancia de bloque a bloque es  $L^k$ , entonces

$$\sum_K c L^{-\alpha} L^{-K\alpha} (L^d - 1) (L^{kd}) = 1.$$

Reemplazando  $X = L^{d-\alpha}$  y como  $\sum_k X^k = \frac{1}{1-X}$ , encontramos

$$c = \frac{L^{\alpha-d} - 1}{1 - L^{-d}} \quad (3.9)$$

$$q_1 = \frac{1 - L^{d-\alpha}}{L^d - 1}. \quad (3.10)$$

Ahora (3.7) se puede escribir como

$$P'(w') = L^{\beta k} r^k \exp \{-rT\} \prod_{j'=0}^{k-1} \left\{ q(LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) \right\} L^d \quad (3.11)$$

$$\prod_{j'=0}^k \exp \left\{ r q_1 (L^d - 1) (L^{\beta} t'_{j'}) \right\}.$$

Introduciendo el valor de  $q_1$  en (3.11) obtenemos

$$P'(w') = L^{\beta k} r^k \exp \{-rL^{\beta} T'\} \prod_{j'=0}^{k-1} \left\{ q(LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) \right\} L^d \quad (3.12)$$

$$\exp \left\{ \sum_{j'=0}^k r \left( \frac{1 - L^{d-\alpha}}{L^d - 1} \right) (L^d - 1) (L^{\beta} t'_{j'}) \right\}.$$

La ecuación (3.12) puede ser escrita como

$$P'(w') = L^{\beta k} r^k \exp \{-rL^{\beta} T'\} \prod_{j'=0}^{k-1} \left\{ q(LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) \right\} L^d \quad (3.13)$$

$$\exp \left\{ r \left( \frac{1 - L^{d-\alpha}}{L^d - 1} \right) (L^d - 1) (L^{\beta} T') \right\}.$$

Debido a que  $T = L^{\beta} T'$  (3.13) se transforma a

$$P'(w') = L^{\beta k} r^k \exp \{-rT\} \prod_{j'=0}^{k-1} \left\{ q(LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) \right\} L^d \quad (3.14)$$

$$\exp \left\{ rL^{\beta} T' \right\} \exp \left\{ -rL^{d-\alpha+\beta} T' \right\}.$$

Rearreglando esta expresión encontramos

$$P'(w') = L^{(\beta+d-\alpha)k} r^k \exp \{-rL^{d-\alpha+\beta} T'\} \prod_{j'=0}^{k-1} \left\{ q(LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) \right\}.$$

Si  $d + \beta - \alpha = 0$  entonces

$$P'(w') = r^k \exp \{-rT'\} \prod_{j'=0}^{k-1} q(X'_{j'} - X'_{j'+1}). \quad (3.15)$$



La ecuación (3.15) corresponde al punto fijo del mapa  $R$ , bajo la condición dada en (3.8). Este resultado es riguroso y demuestra como toda CAS con una probabilidad como la definida en (3.1) es invariante ante la acción del mapa  $R$ .

RENORMALIZACIÓN DE UNA  
CAMINATA AL AZAR EN  
TIEMPO CONTÍNUO QUE  
PENALIZA LAS  
INTERACCIONES DE DOS  
CUERPOS

Para modelar una CAAR, usaremos la medida de probabilidad del modelo de Domb-Joyce en donde la energía es una función del número de interacciones. Su medida de probabilidad se escribe como sigue;

$$P_{U(w)} = \frac{U(w) P(w)}{\int U(w) P(w) D(w)} \quad (4.1)$$

Donde  $U(w)$  es la energía de interacción de la caminata. En nuestro modelo, aquellas caminatas que tengan más interacciones serán menos probables de ocurrir que aquellas sin interacciones. En este capítulo, como primer caso, estudiaremos  $U(w)$  donde se penalizan las interacciones de dos cuerpos. Sea

$$U(w) = \prod_{X_i \in G} \exp \left\{ -a \sum_{i \in J_{X_i}} t_i \right\} \exp \left\{ -b \sum_{i+1 < j \in J_{X_i}} t_i t_j \{w(t_i)=w(t_j)\} \right\} \quad (4.2)$$

Donde  $a$  y  $b$  son constantes, siendo  $b$  pequeña. Es claro que el término  $\exp \left\{ -a \sum_{i \in J_{X_i}} t_i \right\}$  es simplemente una constante, pero el término  $\exp \left\{ -b \sum_{i+1 < j \in J_{X_i}} t_i t_j \{w(t_i)=w(t_j)\} \right\}$  es siempre menor a uno cuando ocurren interacciones de dos cuerpos, para  $b > 0$ , por lo tanto  $U(w)$  decrece cuando  $\left\{ -b \sum_{i+1 < j \in J_{X_i}} t_i t_j \{w(t_i)=w(t_j)\} \right\}$  aumenta, es decir, cuando existen más interacciones. La forma en como está expresada  $U(w)$  permite dar un mayor peso estadístico a aquellas caminatas que son autorrepelentes, esto quiere decir que el polímero presenta una estructura extendida, sin embargo, haciendo  $b < 0$ , favoreceremos aquellas estructuras que son compactas, que no es el caso que deseamos estudiar en este capítulo.

En la misma forma que en el caso anterior, podemos penalizar interacciones de dos y tres cuerpos de acuerdo a la ecuación:

$$U(w) = \prod_{X_i \in G} \exp \left\{ -a \sum_{i \in J_{X_i}} t_i \right\} \exp \left\{ -b \sum_{i+1 < j \in J_{X_i}} t_i t_j \{w(t_i)=w(t_j)\} \right\} \exp \left\{ -c \sum_{i+1 < j < k-1 \in J_{X_i}} t_i t_j t_k \{w(t_i)=w(t_j)=w(t_k)\} \right\} \quad (4.3)$$

Donde  $a$  es una constante,  $b$  es una constante pequeña, que puede ser positiva o negativa según sea el caso y  $c$  debe ser siempre positiva, esto último debido a condiciones de estabilidad, así la función de partición deberá existir y ser finita. Procediendo siempre de la misma manera, podríamos introducir interacciones de 4 o más cuerpos.

Si queremos estudiar el efecto del mapa grupo-de-renormalización en  $P_{U(w)}$  debemos seguir la trayectoria de  $U(w)$  después de aplicar el mapa. La idea general de la transformación se muestra en la figura 12. De acuerdo a la definición del mapa usada en el capítulo anterior, tenemos

$$P'_{U'(w')} = L^{\beta k} \int P_U(w) \chi(R(w) = w') Dw \quad (4.4)$$

En la ecuación (4.4) se suman las probabilidades de las caminatas  $w$  pesadas por  $U(w)$ , que después de aplicar  $R$  generan la misma  $w'$ . Esto, bajo el factor de escalamiento  $L^{\beta k}$  que define a la probabilidad renormalizada. A partir de la ecuación (4.4) sabemos que solamente nos resta estudiar la evolución de la energía de interacción bajo el mapa grupo-de-renormalización, es decir

$$U'(w') = \frac{\int P(w) \chi(R(w) = w') U(w) Dw}{\int P(w) \chi(R(w) = w') Dw} \quad (4.5)$$

La ecuación (4.5) es el valor esperado condicional desde el punto de vista estadístico de  $U(w)$  una vez que el mapa de grupo-de-renormalización ha sido aplicado. Para simplificar la notación se usará

$$U'(w') = \langle U(w) \rangle_{w'}$$

Propongamos un modelo de caminata al azar con energía de interacción igual a (4.2), así podemos escribir:

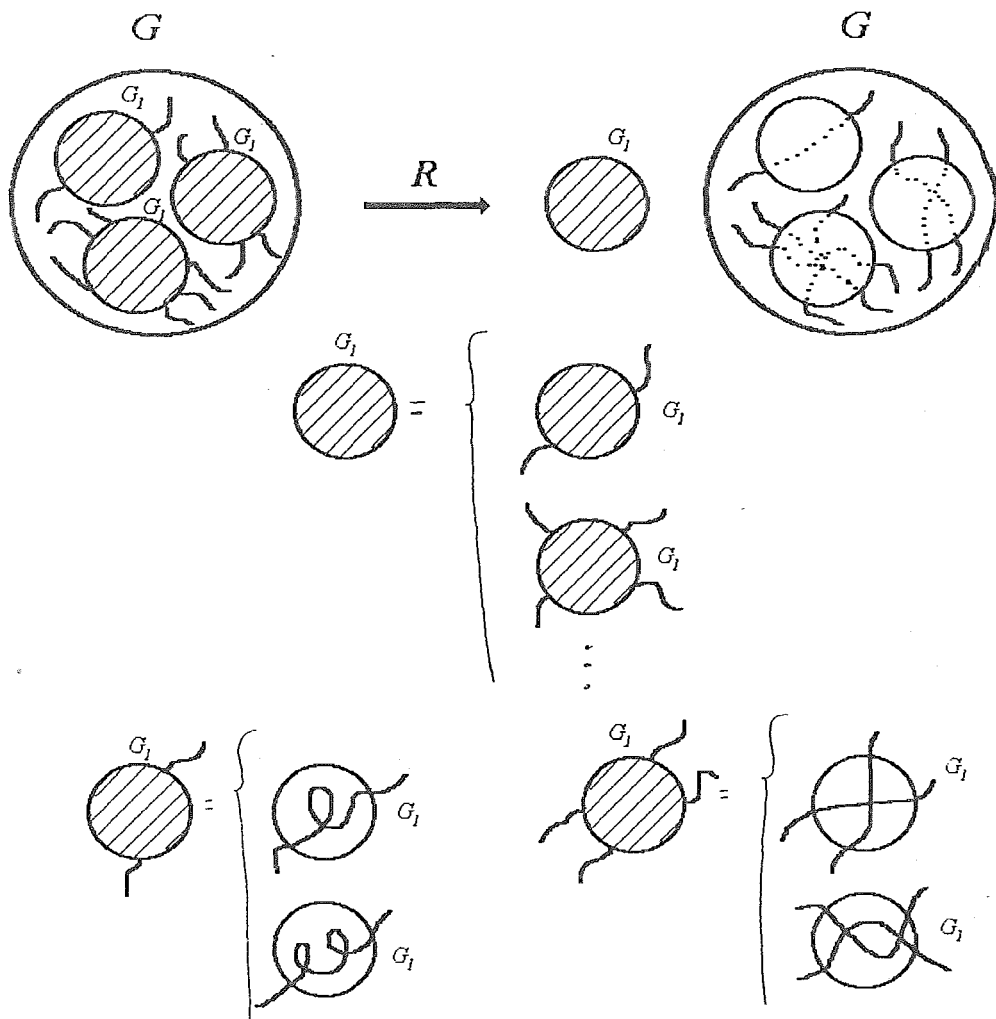


FIGURA 12. Factorización de una caminata en  $G$  por un mapa grupo-de-normalización. El mapa factoriza a la caminata en diferentes clases en los bloques  $G_1$

$$U'(w') = \langle U_a(w) \rangle_{w'} \langle U_b(w) \rangle_{w'} \quad (4.6)$$

En la ecuación (4.6) se identifican claramente dos factores etiquetados por los subíndices  $a$  y  $b$  es decir:

$$\begin{aligned} U_a(w) &= \prod_{X_i \in G} \exp \left\{ -a \sum_{i \in J_{X_i}} t_i \right\} \\ U_b(w) &= \prod_{X_i \in G} \exp \left\{ -b \sum_{i+1 < j \in J_{X_i}} t_i t_{j\{w(t_i)=w(t_j)\}} \right\} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Ahora estudiaremos cada factor en forma independiente. De acuerdo a (4.5) y usando las ecuaciones (3.6) y (3.11) tenemos que la expresión para  $U_a(w)$  es:

$$\begin{aligned} \langle U_a(w) \rangle_{w'} &= \frac{\sum_{\{X_i\}_{i=0}^n} \sum_{\{n_{j'}\}_{j'=0}^k} \int \prod_{i=0}^n dt_i \prod_{j'=0}^k \delta \left( \sum_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} t_i - L^{\beta} t_{j'} \right) \times \\ &\quad \times \prod_{j'=0}^k \prod_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} \chi(X_i \in LX'_{j'}) r^n \exp \{-rT\} \prod_{i=0}^n q(X_{i+1} - X_i) U_a(w)}{\exp \{-rT\} r^k \prod_{j'=0}^k \left( q(LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) L^d \right) \prod_{j'=0}^k \exp \{rq(L^d - 1) L^{\beta} t_{j'}\}} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Un caso particular de una caminata que es renormalizada es mostrado en el ejemplo 4.

#### EJEMPLO 4.

Tomando como ejemplo la CAS de la figura 13, observamos que  $\prod_{j'=0}^{k-1} \left( q(LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) L^d \right)$  en el denominador de (4.8) puede ser escrito como:

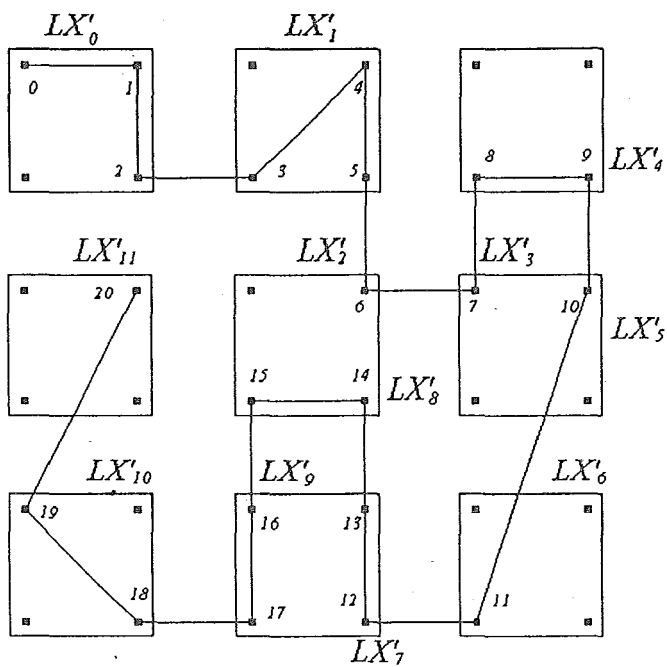


FIGURA 13. Una CAS donde los bloques que visita  $w$  son etiquetados como  $LX'_i$ .

$$\prod_{j'=0}^{k-1} \left( q \left( LX'_{j'} - LX'_{j'+1} \right) L^d \right) = A$$

donde

$$\begin{aligned} A = & q(LX'_0 - LX'_1) q(LX'_1 - LX'_2) q(LX'_2 - LX'_3) q(LX'_3 - LX'_4) \\ & q(LX'_4 - LX'_5) q(LX'_5 - LX'_6) q(LX'_6 - LX'_7) q(LX'_7 - LX'_8) \\ & q(LX'_8 - LX'_9) q(LX'_9 - LX'_{10}) q(LX'_{10} - LX'_{11}) L^{11d}. \end{aligned}$$

Esto puede ser reorganizado como:

$$\begin{aligned} A = & \left\{ L^{11d} \right\} \left\{ q(LX'_0 - LX'_1) \right\} \left\{ q(LX'_1 - LX'_2) \right\} \left\{ q(LX'_2 - LX'_3) q(LX'_8 - LX'_9) \right\} \\ & \left\{ q(LX'_3 - LX'_4) q(LX'_5 - LX'_6) \right\} \left\{ q(LX'_4 - LX'_5) \right\} \left\{ q(LX'_6 - LX'_7) \right\} \\ & \left\{ q(LX'_7 - LX'_8) q(LX'_9 - LX'_{10}) \right\} \left\{ q(LX'_{10} - LX'_{11}) \right\}. \end{aligned}$$

Cada término entre corchetes puede ser escrito como:

$$\prod_{j' \in J_{X'_i}} \left\{ q \left( LX'_{j'} - LX'_{j'+1} \right) \right\} L^d \text{ es decir, un sitio renormalizado.}$$

Multiplicando para todo sitio renormalizado encontramos:

$$\prod_{j'=0}^{k=11} \left( q \left( LX'_{j'} - LX'_{j'+1} \right) L^d \right) = \prod_{X'_i} \prod_{j' \in J_{X'_i}} \left\{ q \left( LX'_{j'} - LX'_{j'+1} \right) \right\} L^d. \quad (4.9)$$

De la misma manera se encuentra fácilmente que

$$\prod_{j'=0}^{k=11} \exp \left\{ r q \left( L^d - 1 \right) L^{\beta t'_{j'}} \right\} = \prod_{X'_i} \prod_{j' \in J_{X'_i}} \exp \left\{ r q \left( L^d - 1 \right) L^{\beta t'_{j'}} \right\}. \quad (4.10)$$

Para resolver el numerador de (4.8) escribamos el término  $r^n \prod_{i=0}^{n-1} q(X_i - X_{i+1})$  como



$$C = r^n \prod_{i=0}^{n-1} q(X_i - X_{i+1}).$$

Desarrollando  $C$  tenemos:

$$\begin{aligned} C = & q(X_0 - X_1) q(X_1 - X_2) q(X_2 - X_3) q(X_3 - X_4) q(X_4 - X_5) \\ & q(X_5 - X_6) q(X_6 - X_7) q(X_7 - X_8) q(X_8 - X_9) q(X_9 - X_{10}) q(X_{10} - X_{11}) \\ & q(X_{11} - X_{12}) q(X_{12} - X_{13}) q(X_{13} - X_{14}) q(X_{14} - X_{15}) q(X_{15} - X_{16}) \\ & q(X_{16} - X_{17}) q(X_{17} - X_{18}) q(X_{18} - X_{19}) q(X_{19} - X_{20}) r^{20}, \end{aligned}$$

que se puede reordenar como:

$$C = DE$$

donde

$$\begin{aligned} D = & \{q(X_0 - X_1) q(X_1 - X_2) r^2\} \{q(X_3 - X_4) q(X_4 - X_5) r^2\} \{q(X_8 - X_9) r\} \\ & \{q(X_{12} - X_{13}) q(X_{16} - X_{17}) r^2\} \{q(X_{14} - X_{15}) r\} \{q(X_{18} - X_{19}) r\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E = & \{q(X_2 - X_3) r\} \{q(X_5 - X_6) r\} \{q(X_6 - X_7) r\} \{q(X_7 - X_8) r\} \\ & \{q(X_9 - X_{10}) r\} \{q(X_{10} - X_{11}) r\} \{q(X_{11} - X_{12}) r\} \{q(X_{13} - X_{14}) r\} \\ & \{q(X_{15} - X_{16}) r\} \{q(X_{17} - X_{18}) r\} \{(X_{18} - X_{19}) r\}. \end{aligned}$$

Cada término entre corchetes de  $D$  puede ser escrito como

$$\prod_{j' \in J_{X_{j'}}} r^{n_{j'}} \left( q(L^d - 1) \right)^{n_{j'}} \text{ es decir un sitio renormalizado.}$$

De la misma forma cada término entre corchetes de  $E$  puede ser escrito como:

$$\prod_{j' \in J_{X_{j'}}} r^{11} q(LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) L^d \text{ es decir un sitio renormalizado.}$$

Al multiplicar para todo bloque obtenemos lo siguiente

$$\prod_{X_{i'}} \prod_{j' \in J_{X_{i'}}} r^{n_{j'}} \left( q \left( L^d - 1 \right) \right)^{n_{j'}} \prod_{j' \in J_{X_{i'}}} r^{11} q \left( LX'_{j'} - LX'_{j'+1} \right) L^d.$$

Si queremos generalizar esto para cualquier caminata  $w$ , que despues de aplicar R genere  $w'$  debemos hacer la suma para cada posible número de pasos dentro de cada bloque, esto es

$$\sum_{[n_{j'}]_{i=0}^{11}} \prod_{X_{i'}} \prod_{j' \in J_{X_{i'}}} r^{n_{j'}} \left( q \left( L^d - 1 \right) \right)^{n_{j'}} \prod_{j' \in J_{X_{i'}}} r^{11} q \left( LX'_{j'} - LX'_{j'+1} \right) L^d.$$

De la ecuación anterior vemos que  $\prod_{j' \in J_{X_{i'}}} r^{11} q \left( LX'_{j'} - LX'_{j'+1} \right) L^d$  es una constante y como  $n_{j'}$  puede tomar cualquier valor para cada bloque, la expresión anterior se puede escribir como:

$$\prod_{j' \in J_{X_{i'}}} r^{11} q \left( LX'_{j'} - LX'_{j'+1} \right) L^d \prod_{X_{i'}} \sum_{[n_{j'}]_{i=0}^{11}} \prod_{j' \in J_{X_{i'}}} r^{n_{j'}} \left( q \left( L^d - 1 \right) \right)^{n_{j'}}. \quad (4.11)$$

Utilizando los mismos argumentos, es fácil encontrar lo siguiente:

$$\prod_{i=0}^{20} dt_i = \prod_{X_{i'}} \prod_{i \in I_{X_{i'}}} dt_i \text{ con } I_{X_{i'}} = \{i \mid X_i \in LX'_{i'}\} \quad (4.12)$$

$$\prod_{j'=0}^{11} \delta \left( \sum_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right) = \prod_{X_{i'}} \prod_{j' \in J_{X_{i'}}} \delta \left( \sum_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right). \quad (4.13)$$

Introduciendo las expresiones (4.9), (4.10), (4.11), (4.12), y (4.13) en la ecuación (4.8) encontramos que

$$\begin{aligned}
\langle U_a(w) \rangle_{w'} = & \prod_{X'_i} \frac{\prod_{j' \in J_{X'_i}} r^{11} q (LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) L^d \times \\
& \times \sum_{n_{j'}} \int \prod_{i \in I_{X'_i}} dt_i \prod_{j' \in J_{X'_i}} \delta \left( \sum_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right) r^{n_{j'}} (q(L^d - 1))^{n_{j'}} \times \\
& \times \prod_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} \chi(X_i \in LX'_{j'}) \exp \left\{ -a \sum_{X'_i \in G} \sum_{j \in J_{X_i}} t_j \right\}}{\prod_{j' \in J_{X'_i}} r^{11} q (LX'_{j'} - LX'_{j'+1}) L^d \prod_{j' \in J_{X'_i}} \exp \{ r q (L^d - 1) L^\beta t'_{j'} \}}.
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Eliminando términos obtenemos:

$$\begin{aligned}
\langle U_a(w) \rangle_{w'} = & \prod_{X'_i} \frac{\sum_{n_{j'}} \int \prod_{i \in I_{X'_i}} dt_i \prod_{j' \in J_{X'_i}} \delta \left( \sum_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right) r^{n_{j'}} q (L^d - 1)^{n_{j'}} \times \\
& \times \prod_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} \chi(X_i \in LX'_{j'}) \exp \left\{ -a \sum_{X'_i \in G} \sum_{j \in J_{X_i}} t_j \right\}}{\prod_{j' \in J_{X'_i}} \exp \{ r q (L^d - 1) L^\beta t'_{j'} \}}.
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Esta metodología seguida para encontrar la expresión para  $\langle U_a(w) \rangle_{w'}$  puede ser generalizada para cualquier caminata  $w$  que es renormalizada a  $w'$ .

□

Tomando como base la ecuación (4.15) encontramos que para cualquier caminata  $w$  de  $n$  pasos,  $\langle U_a(w) \rangle_{w'}$  toma la forma siguiente

$$\begin{aligned}
& \sum_{n_{j'}} \int \prod_{i \in I_{X_{j'}}} dt_i \prod_{j' \in J_{X_{j'}}} \delta \left( \sum_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right) r^{n_{j'} q} (L^d - 1)^{n_{j'}} \times \\
& \quad \times \prod_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} \chi(X_i \in LX'_{j'}) \exp \left\{ -a \sum_{X'_{j'} \in G} \sum_{j \in J_{X_i}} t_j \right\} \\
\langle U_a(w) \rangle_{w'} = & \prod_{X'_{j'}} \frac{\prod_{j' \in J_{X'_{j'}}} \exp \{ r q (L^d - 1) L^\beta t'_{j'} \}}{\prod_{j' \in J_{X'_{j'}}} \exp \{ r q (L^d - 1) L^\beta t'_{j'} \}}.
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Ya que  $\sum_{j \in J_{X_i}} t_j = L^\beta t'_{j'}$ , el término  $\exp \left\{ -a \sum_{X'_{j'} \in G} \sum_{j \in J_{X_i}} t_j \right\}$  de la ecuación (4.16), puede ser escrito como:

$$\exp \left\{ -a \sum_{X'_{j'} \in G} \sum_{j \in J_{X_i}} t_j \right\} = \exp \left\{ -a \sum_{X'_{j'} \in G} L^\beta t'_{j'} \right\} = \exp \left\{ -a L^\beta \sum_{X'_{j'} \in G} t'_{j'} \right\}.$$

Tenemos que

$$\exp \left\{ -a'_1 \sum_{X'_{j'} \in G} t'_{j'} \right\} \text{ con } a'_1 = a L^\beta, \tag{4.17}$$

por lo tanto la energía de interacción definida como  $U_a(w)$  en (4.7) es un punto fijo del mapa  $R$ , siempre y cuando  $a'_1 = a L^\beta$ .

La ecuación (4.17) será empleada para encontrar la forma fija de la transformación así como para calcular los exponentes críticos de  $U(w)$  definida en (4.2).

Estudiemos ahora el término  $\langle U_b(w) \rangle_{w'}$ . Siguiendo el mismo algoritmo que en el caso anterior, es posible obtener una expresión similar para  $\langle U_b(w) \rangle_{w'}$ , siendo esta

$$\langle U_b(w) \rangle_w = \prod_{X'_i} \frac{\sum_{n_{j'}} \int \prod_{i \in I_{X'_i}} dt_i \prod_{j' \in J_{X'_i}} \delta \left( \sum_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right) r^{n_{j'}} q (L^d - 1)^{n_{j'}} \times}{\prod_{j' \in J_{X'_i}} \exp \{ r q (L^d - 1) L^\beta t'_{j'} \}} \times \prod_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} \chi (X_i \in L X'_{j'}) \exp \left\{ -b \sum_{X'_i \in G} \sum_{i+1 < j \in J_{X_i}} t_i t_j \right\}. \quad (4.18)$$

La ecuación (4.18) se escribe como

$$\langle U_b(w) \rangle_w = \prod_{X'_i} \langle U_b(w) \rangle_w^{X'_i}$$

Donde

$$\langle U_b(w) \rangle_w^{X'_i} = \frac{\sum_{n_{j'}} \int \prod_{i \in I_{X'_i}} dt_i \prod_{j' \in J_{X'_i}} \delta \left( \sum_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right) r^{n_{j'}} q (L^d - 1)^{n_{j'}} \times}{\prod_{j' \in J_{X'_i}} \exp \{ r q (L^d - 1) L^\beta t'_{j'} \}} \times \prod_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} \chi (X_i \in L X'_{j'}) \exp \left\{ -b \sum_{X'_i \in G} \sum_{i+1 < j \in J_{X_i}} t_i t_j \right\}.$$

Notese que  $\langle U_b(w) \rangle_w^{X'_i}$  corresponde a un sólo sitio renormalizado. Además el modelo está construido de tal forma que la caminata  $w$  puede tocar 1, 2 o 3 veces cada sitio renormalizado, así tenemos que

$$\langle U_b(w) \rangle_w = \prod_{X'_i} \prod_{[n_{j'}]=1}^3 \langle U_b(w) \rangle_w^{X'_i} \quad (4.19)$$

Aquí  $\langle U_b(w) \rangle_w^{X'_i}$  es la energía de interacción renormalizada para toda posible topología de caminatas  $w$  dentro de un bloque  $X'_i$ , tal que una vez que el mapa del grupo de renormalización es aplicado, corresponde a una topología fija en  $X'_i \in G$ .

Al introducir una expansión en series de Taylor en  $b$  como se encuentra en [20], encontramos que

$$\begin{aligned} \langle U_b(w) \rangle_{w, n_{i'}^*}^{X_{i'}} &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-b)^s}{s!} \left\langle \sum_{X_{i'} \in G} \sum_{i+1 < j < \dots < k-1 < l} t_i t_j \{w(t_i)=w(t_j)\} \times \dots \right. \\ &\quad \left. \times t_k t_l \{w(t_k)=w(t_l)\} \chi(\{i, j, \dots, k, l\} \in X_{i'}) \right\rangle_w \end{aligned} \quad (4.20)$$

El significado físico de los parámetros involucrados en la renormalización de  $\langle U_b(w) \rangle$  se muestran en la tabla 3.

$\gamma_1$	es la contribución al	una doble		un tiempo
$\gamma_2$	valor esperado	dos dobles	intersección (es)	local
$\xi_1$	condicional de	una doble	de la caminata $w$	la intersección
$\xi_2$	tiempos locales	dos dobles	es vista como	de dos cuerpos
$\phi_2$	dado que	dos dobles		la intersección de tres cuerpos

TABLA 3. Significado físico de los parámetros involucrados en la renormalización de  $\langle U_b(w) \rangle$ .

Analizemos el caso cuando la caminata  $w$  sólo toca una vez el sitio renormalizado, es decir  $n_{i'}^* = 1$  encontrando:

$$\begin{aligned} \langle U_b(w) \rangle_{w, n_{i'}^*=1}^{X_{i'}} &= 1 - b \left\langle \sum_{X_{i'} \in G} \sum_{i+1 < j} t_i t_j \{w(t_i)=w(t_j)\} \chi(\{i, j\} \in X_{i'}) \right\rangle + \\ &+ b^2 \left\langle \sum_{X_{i'} \in G} \sum_{i+1 < j < \dots < k+1 < l} t_i t_j \{w(t_i)=w(t_j)\} t_k t_l \{w(t_k)=w(t_l)\} \chi(\{i, j, k, l\} \in X_{i'}) \right\rangle + r_1' \end{aligned} \quad (4.21)$$

Donde  $r'_1 \sim O(b^3)$

La ecuación (4.21) puede ser escrita como:

$$\langle U_b(w) \rangle_{w, n'_1}^{X'_1} = 1 - (b\gamma_1 - b^2\gamma_2 + O(b^3)) \sum_{i' \in J_{X'_1}} t'_{i'} \simeq \exp \left\{ -a'_2 \sum_{i' \in J_{X'_1}} t'_{i'} \right\}$$

donde

$$a'_2 = b\gamma_1 - b^2\gamma_2 + O(b^3)$$

De la misma forma se estudia el caso para  $n'_i = 2$ , encontrándose

$$\begin{aligned} \langle U_b(w) \rangle_{w, n'_{i'}=2}^{X'_{i'}} &= 1 - (b\xi_1 - b^2\xi_2 + O(b^3)) \sum_{i'+1 < j' \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} t'_{j'} \simeq \\ &\exp \left\{ -b' \sum_{i'+1 < j' \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} t'_{j'} \right\} \end{aligned} \quad (4.22)$$

donde

$$\xi_1 = L^{2\beta-d}$$

$$b' = bL^{2\beta-d} - b^2\xi_2 + O(b^3)$$

para  $n'_i = 3$  tenemos:

$$\langle U_b(w) \rangle_{w, n'_{i'}=3}^{X'_{i'}} = 1 - (b\phi_1 - b^2\phi_2 + O(b^3)) \sum_{i'+1 < j' < k-1 \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} t'_{j'} t'_{k'} \quad (4.23)$$

Donde  $\phi_1 = 0$ , por razones topológicas.

Introduciendo (4.21) (4.22) y (4.23) en (4.19) encontramos:

$$\begin{aligned} \langle U_b(w) \rangle_{w'} &= \prod_{X'_{i'}} \exp \left\{ -a'_2 \sum_{i' \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} - b' \sum_{i'+1 < j' \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} t'_{j'} \right\} \times \\ &\times \left[ 1 + b\phi_2 \sum_{i'+1 < j' < k+1 \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} t'_{j'} t'_{k'} \right] + r' \end{aligned} \quad (4.24)$$

Donde  $r'$  colecta todos los términos  $O(b^3)$ . Insertando (4.24) y (4.17) en (4.6), obtenemos finalmente:

$$\begin{aligned} \langle U(w) \rangle_{w'} &= \prod_{X'_{i'}} \exp \left\{ -a' \sum_{i' \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} - b' \sum_{\{i'+1 < j'\} \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} t'_{j'} \right\} \times \\ &\times \left[ 1 + b\phi_2 \sum_{\{i'+1 < j' < k+1\} \in J_{X'_{i'}}} t'_{i'} t'_{j'} t'_{k'} \right] + r' \end{aligned} \quad (4.25)$$

donde

$$a' = aL^\beta + b\gamma_1 - b^2\gamma_2 \quad (4.26)$$

$$b' = bL^{2\beta-d} - b^2\xi_2 \quad (4.27)$$

La forma fija de la transformación aplicada sobre la probabilidad (4.2) se sigue por inducción y se reporta en [10]. Ahora es necesario calcular los exponentes críticos definidos en el capítulo 2, El punto fijo de  $P(w)$  se obtiene como sigue:

$$a' = a = a^*$$

$$b' = b = b^*$$

las ecuaciones (4.26) y (4.27) se transforman a:



$$a^* = aL^\beta + b\gamma_1 - b^2\gamma_2 \quad (4.28)$$

$$b^* = bL^{2\beta-d} - b^2\xi_2 \quad (4.29)$$

Si resolvemos (4.29) para  $b$  encontramos que

$$b^* = 0$$

$$b^* = \frac{L^{2\beta-d} - 1}{\xi_2}$$

Cuando  $b^* = 0$  entonces  $a^* = 0$  que es la solución trivial, pero cuando

$$b^* = \frac{L^{2\beta-d} - 1}{\xi_2} \quad (4.30)$$

$$a^* = \frac{\gamma_1 \left( \frac{L^{2\beta-d} - 1}{\xi_2} \right) - \gamma_2 \left( \frac{L^{2\beta-d} - 1}{\xi_2} \right)^2}{1 - L^\beta} \quad (4.31)$$

Que es el punto fijo no trivial de la transformación. Ahora es necesario encontrar los eigenvalores de la matriz evaluada en el punto fijo, como se explica en [17].

$$\begin{pmatrix} \delta b^* \\ \delta a^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\delta b^*}{\delta b^*} & \frac{\delta b^*}{\delta a^*} \\ \frac{\delta a^*}{\delta b^*} & \frac{\delta a^*}{\delta a^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta b^* \\ \delta a^* \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \delta b^* \\ \delta a^* \end{pmatrix}$$

esto es

$$\begin{pmatrix} \delta b^* \\ \delta a^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L^{2\beta-d} - 2\xi_2 b^* & 0 \\ \gamma_1 - 2\gamma_2 b^* & L^\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta b^* \\ \delta a^* \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \delta b^* \\ \delta a^* \end{pmatrix}$$

Lo anterior implica que

$$(L^{2\beta-d} - 2\xi_2 b^*) \delta b^* = \lambda \delta b^*$$

$$(\gamma_1 - 2\gamma_2 b^*) \delta b^* + L^\beta \delta a^* = \lambda \delta a^*$$

reordenando

$$\begin{aligned} \left( (L^{2\beta-d} - 2\xi_2 b^*) - \lambda \right) \delta b^* &= 0 \\ (\gamma_1 - 2\gamma_2 b^*) \delta b^* + (L^\beta - \lambda) \delta a^* &= 0 \end{aligned} \quad (4.32)$$

El determinante secular de (4.32) es:

$$\begin{vmatrix} (L^{2\beta-d} - 2\xi_2' b^*) - \lambda & 0 \\ \gamma_1' - 2\gamma_2' b^* & L^\beta - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

lo que implica que

$$\left( (L^{2\beta-d} - 2\xi_2' b^*) - \lambda \right) (L^\beta - \lambda) = 0$$

Por lo tanto los eigenvalores son:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= L^{2\beta-d} - 2\xi_2' b^* \\ \lambda_2 &= L^\beta \end{aligned}$$

Sustituyendo el valor de  $b^*$  en  $\lambda_1$  encontramos:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 2 - L^{2\beta-d} \\ \lambda_2 &= L^\beta \end{aligned}$$

Por lo tanto los exponentes críticos son:

$$y_1 = \frac{\ln(2 - L^{2\beta-d})}{\ln L} \quad (4.33)$$

$$y_2 = \beta \quad (4.34)$$

Ahora es posible encontrar el valor del exponente crítico  $\nu$  de acuerdo a la ecuación (2.28) que corresponde a

$$\nu = \frac{\log b}{\log \lambda}$$

Al sustituir los valores encontramos

$$\nu = \frac{\log b}{\log \lambda} = \frac{\log b}{\log L^\beta} = \frac{\log b}{\beta \log L} = \frac{\log 2}{\beta \log 2} = \frac{1}{2}$$

Si quisieramos encontrar los demas exponentes críticos sería necesario conocer al menos otro de ellos.

RENORMALIZACIÓN DE UNA  
CAMINATA AL AZAR EN  
TIEMPO CONTÍNUO QUE  
PENALIZA LAS  
INTERACCIONES DE TRES  
CUERPOS.

En este capítulo consideramos las macromoléculas interactuando vía fuerzas de tres cuerpos. Esto es un modelo de como una macromolécula puede expandirse en un buen solvente y colapsar a una temperatura  $\theta$ . Lo anterior es debido a que las interacciones entre dos cuerpos (que son las que dominan el sistema cuando la macromolécula está extendida) son cada vez menos importantes cuando nos acercamos a este estado termodinámico, sin embargo las interacciones de tres cuerpos se hacen más importantes cada momento. La transición desde una forma extendida hasta una forma globular es de interés teórico como un primer paso hacia el entendimiento de las estructuras micelares [10].

En nuestro modelo proponemos una energía de interacción de la macromolécula expresada como sigue

$$U(w) = \prod_{X_i \in G} \exp \left\{ -a \sum_{i \in J_i} t_i \right\} \exp \left\{ -c \sum_{i+1 < j < k-1 \in J_i} t_i t_j t_k \left\{ w(t_i) = w(t_j) = w(t_k) \right\} \right\} \quad (5.1)$$

Donde  $c < 0$ , para satisfacer condiciones de estabilidad. Procediendo de la misma manera que en el capítulo anterior donde se estudian caminatas al azar que penalizaban las dobles interacciones, proponemos

$$U'(w') = \langle U_a(w) \rangle_{w'} \langle U_c(w) \rangle_{w'} \quad (5.2)$$

Dado que el término  $\langle U_a(w) \rangle_{w'}$  ya ha sido anteriormente estudiado, sólo nos concentraremos en el término  $\langle U_c(w) \rangle_{w'}$ . De acuerdo a lo hecho en el capítulo anterior tenemos que:

$$\langle U_c(w) \rangle_{w'} = \prod_{X'_{i'}} \frac{\sum_{n_{j'}} \int \prod_{i \in I_{X'_{i'}}} dt_i \prod_{j' \in J_{X'_{i'}}} \delta \left( \sum_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right) r \left( n_{j'} q (L^d - 1) \right)^{n_{j'}} \times}{\prod_{j' \in J_{X'_{i'}}} \exp \left\{ r q (L^d - 1) L^\beta t'_{j'} \right\}} \times \prod_{i=m_{j'-1}+1}^{m_{j'}} \chi \left( X_i \in L X'_{i'} \right) \exp \left\{ -c \sum_{X'_{i'}} \sum_{i+1 < j < k-1 \in J_{X_i}} t_i t_j t_k \right\} \quad (5.3)$$

Seguindo una metodología análoga a la usada con  $\langle U_b(w) \rangle_{w'}$ , podemos escribir

$$\langle U_c(w) \rangle_{w'} = \prod_{X'_{i'}} \prod_{[n_{i'}]_1}^3 \langle U_c(w) \rangle_{w' n_{i'}}^{X'_{i'}} \quad (5.4)$$

Introduciendo una expansión en series de Taylor en  $c$  encontramos

$$\langle U_c(w) \rangle_{w' n_{i'}}^{X'_{i'}} = \sum_{s=0}^{\infty} \left( \frac{-c}{s!} \right)^s \left\langle \sum_{X'_{i'} \in G} \sum t_i t_j t_k \{w(t_i)=w(t_j)=w(t_k)\} \times \dots \right. \quad (5.5)$$

$$\left. \times t_l t_m t_n \{w(t_l)=w(t_m)=w(t_n)\} \chi(\{i, j, k, l, m, n\} \in X'_{i'}) \right\rangle_{w'}$$

El significado físico de los parámetros involucrados en la renormalización de  $\langle U_c(w) \rangle$  y que serán usados en las ecuaciones (5.6), (5.7) y (5.8) son mostrados en la tabla 4.

$\varphi_1$	es la contribución	una triple	interacción (es)	un tiempo
$\varphi_2$	al valor esperado	dos triples	de la caminata	local
$\zeta_1$	condicional de	una triple	$w$ dentro	una interacción
$\zeta_2$	tiempos locales,	dos triples	de $G_1$ es	de dos cuerpos
$\psi_1$	dado que	una triple	vista como	una interacción
$\psi_2$		dos triples		de tres cuerpos

TABLA 4. Significado físico de los parámetros involucrados en la renormalización de  $\langle U_c(w) \rangle$

Cuando  $n_{i'}^* = 1$  tenemos

$$\langle U_c(w) \rangle_{w_{n_{i'}^*=1}}^{X_{i'}} = 1 - (\varphi_1 c - \varphi_2 c^2 + O(c^3)) \sum_{i' \in J_{X_{i'}}} t_{i'} \simeq \exp \left\{ -a'_3 \sum_{i' \in J_{X_{i'}}} t_{i'} \right\} \quad (5.6)$$

Haciendo lo mismo para  $n_{i'}^* = 2$  y para  $n_{i'}^* = 3$  tenemos

$$\langle U_c(w) \rangle_{w_{n_{i'}^*=2}}^{X_{i'}} = 1 - (\zeta_1 c - \zeta_2 c^2 + O(c^3)) \sum_{i'+1 < j' \in J_{X_{i'}}} t_{i'} t_{j'} \left\{ w(t_{i'}) = w(t_{j'}) \right\} \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} \langle U_c(w) \rangle_{w_{n_{i'}^*=3}}^{X_{i'}} &= 1 - (\psi_1 c - \psi_2 c^2 + O(c^3)) \sum_{i'+1 < j' < k' - 1 \in J_{X_{i'}}} t_{i'} t_{j'} t_{k'} \simeq \\ &\exp \left\{ -c' \sum_{i'+1 < j' < k' - 1 \in J_{X_{i'}}} t_{i'} t_{j'} t_{k'} \left\{ w(t_{i'}) = w(t_{j'}) = w(t_{k'}) \right\} \right\} \end{aligned} \quad (5.8)$$

Donde  $\psi_1 = L^{3\beta-2d}$

Por inducción encontramos que el punto fijo está caracterizado por una energía de interacción de la forma

$$\begin{aligned} \langle U_c(w) \rangle_{w'} &= \prod_{X_{i'}} \left\{ \exp -a' \sum_{i' \in J_{X_{i'}}} t_{i'} - c' \sum_{i'+1 < j' < k' - 1 \in J_{X_{i'}}} t_{i'} t_{j'} t_{k'} \left\{ w(t_{i'}) = w(t_{j'}) = w(t_{k'}) \right\} \right\} \times \\ &\times \left[ 1 - (\zeta_1 c - \zeta_2 c^2) \sum_{i'+1 < j' \in J_{X_{i'}}} t_{i'} t_{j'} \left\{ w(t_{i'}) = w(t_{j'}) \right\} \right] + r' \end{aligned} \quad (5.9)$$

donde

$$a' = aL^\beta + c\varphi_1 - c^2\varphi_2 \quad (5.10)$$

$$c' = cL^{3\beta-2d} - c^2\psi_2 \quad (5.11)$$

Una vez encontrada la forma fija de la transformación, es necesario encontrar los exponentes críticos, Para esto se fija

$$a' = a = a^*$$

$$c' = c = c^*$$

Por lo tanto las ecuaciones (5.10) y (5.11) se transforman en:

$$a^* = aL^\beta + c\varphi_1 - c^2\varphi_2 \quad (5.12)$$

$$c^* = cL^{3\beta-2d} - c^2\psi_2 \quad (5.13)$$

Resolviendo (5.13) para  $c^*$  encontramos

$$c^* = 0$$

$$c^* = \frac{L^{3\beta-2d} - 1}{\psi_2}$$

Cuando  $c^* = 0$ ,  $a^* = 0$  es la solución trivial, pero cuando

$$c^* = \frac{L^{3\beta-2d} - 1}{\psi_2} \quad (5.14)$$

$$a^* = \frac{\varphi_1 \left( \frac{L^{3\beta-2d} - 1}{\psi_2} \right) - \varphi_2 \left( \frac{L^{3\beta-2d} - 1}{\psi_2} \right)^2}{1 - L^\beta} \quad (5.15)$$

Las ecuaciones (5.14) y (5.15) representan el punto fijo de la transformación. Procediendo de acuerdo al método descrito en el capítulo dos, es necesario evaluar

$$\begin{pmatrix} \delta c^* \\ \delta a^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\delta c^*}{\delta a^*} & \frac{\delta c^*}{\delta a^*} \\ \frac{\delta a^*}{\delta c^*} & \frac{\delta a^*}{\delta a^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta c^* \\ \delta a^* \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \delta c^* \\ \delta a^* \end{pmatrix}$$



es decir

$$\begin{pmatrix} \delta c^* \\ \delta a^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L^{3\beta-2d} - 2c\psi_2 & 0 \\ \varphi_1 - 2c\varphi_2 & L^\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta c^* \\ \delta a^* \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \delta c^* \\ \delta a^* \end{pmatrix}$$

lo anterior implica que

$$(L^{3\beta-2d} - 2c\psi_2) \delta c = \lambda \delta c$$

$$(\varphi_1 - 2c\varphi_2) \delta c + L^\beta \delta a^* = \lambda \delta a^*$$

reordenando encontramos

$$\begin{aligned} ((L^{3\beta-2d} - 2c\psi_2) - \lambda) \delta c &= 0 \\ (\varphi_1 - 2c\varphi_2) \delta c + (L^\beta - \lambda) \delta a^* &= 0 \end{aligned} \tag{5.16}$$

Por lo tanto el determinante secular de (5.16) es

$$\begin{vmatrix} (L^{3\beta-2d} - 2c\psi_2) - \lambda & 0 \\ \varphi_1 - 2c\varphi_2 & L^\beta - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Cuya solución tiene la forma

$$((L^{3\beta-2d} - 2c\psi_2) - \lambda) (L^\beta - \lambda) = 0$$

Así los eigenvalores son

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= L^{3\beta-2d} - 2c\psi_2 \\ \lambda_2 &= L^\beta \end{aligned}$$

Sustituyendo el valor de  $c$  en  $\lambda_1$  encontramos

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 2 - L^{3\beta-2d} \\ \lambda_2 &= L^\beta\end{aligned}$$

De acuerdo a lo dicho en el capítulo dos, los exponentes críticos son:

$$y_1 = \frac{\ln(2 - L^{3\beta-2d})}{\ln L} \quad (5.17)$$

$$y_2 = \beta \quad (5.18)$$

Como se dijo en capítulos anteriores, es posible determinar los exponentes  $\alpha$ ,  $\bar{\beta}$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\eta$ , y  $\nu$  si conocemos dos de ellos. Entonces de acuerdo a (2.28) tenemos

$$\nu = \frac{\log b}{\log \lambda_i}$$

Cabe subrayar que en el problema que nos ocupa se ha demostrado que  $\eta = 0$  [16]. Además tenemos que para nuestro caso  $b = L$ ,  $d = 3$  y  $\beta = 2$ , de esta forma encontramos  $\lambda_1 = 1$ , que corresponde a un punto fijo trivial. Pero cuando  $\lambda_2 = L^\beta$  y sustituimos los valores de  $L$ ,  $\lambda_2$ ,  $d$  y  $\beta$  en las ecuaciones (2.28) y (2.29) encontramos

$$\nu = \frac{1}{2} \quad \eta = 0 \quad \alpha = \frac{1}{2}$$

$$\bar{\beta} = \frac{1}{4} \quad \gamma = 1 \quad \delta = 5$$

El otro parámetro que estudiaremos en nuestro modelo es  $\langle w^\alpha(T) \rangle_\alpha^{\frac{1}{\alpha}}$ , pero con correcciones logarítmicas. desde el punto de vista heurístico, es decir, la distancia media principio-fin de la macromolécula, para lo cual debemos conocer como se comporta esta magnitud bajo renormalización. Todas las magnitudes tipo espacio se encogen por un factor  $L$ , cuando el mapa es aplicado, entonces podemos escribir

$$\langle w^\alpha(T) \rangle^{\frac{1}{\alpha}} = \frac{\langle w^\alpha(1) \rangle^{\frac{1}{\alpha(p)}}}{L^p} \quad (5.19)$$

Donde  $p$  son las veces que se aplica el mapa grupo-de-renormalización,  $\langle w^\alpha(1) \rangle^{\frac{1}{\alpha}}$  es la distancia media principio-fin de la macromolécula, que tiene como tiempo total de vida 1 y  $\langle w^\alpha(1) \rangle^{\frac{1}{\alpha}} = D$ , con  $D = \text{constante}$ , que representa la constante de difusión del proceso. Entonces

$$\langle w^\alpha(T) \rangle^{\frac{1}{\alpha}} = L^{-p} D \quad (5.20)$$

La pregunta ahora es ¿Qué pasa con el tiempo una vez que el mapa es aplicado?. El tiempo local renormalizado tiene dos contribuciones, la primera proviene de los tiempos locales gastados por la caminata  $w$  dentro de los cosets  $G_1$ , que a causa del mapa son vistos como tiempos locales renormalizados gastados por la caminata  $w'$  en un sitio de la rejilla renormalizada y rescalados por  $L^\beta$ . La otra contribución a los tiempo locales está dada por el valor esperado condicional de un evento, en nuestro caso es una triple interacción dentro del bloque  $G_1$ , que es visto como un tiempo local renormalizado. esto es  $\varphi_1 c^{(i)}$ , por supuesto podemos tener contribuciones debidas a otros eventos, pero los consideramos poco probables Así en nuestro modelo, cuando el mapa es aplicado  $p$  veces tenemos

$$T = \frac{1}{L^{\beta p} \prod_{i=1}^p (1 + \varphi_1^* c^{(i)})} \quad (5.21)$$

donde

$$\varphi_1^* = \frac{\varphi_1}{L^\beta}$$

Despejando  $L^p$  de (5.21), fijando  $\beta = 2$  que es el límite difusivo y sustituyendolo en (5.20) encontramos

$$\langle w^\alpha(T) \rangle^{\frac{1}{\alpha}} = DT^{\frac{1}{2}} \left( \prod_{i=1}^p (1 + \varphi_1^* c^{(i)}) \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.22)$$

(5.22) puede ser escrito como

$$\langle w^\alpha(T) \rangle^{\frac{1}{\alpha}} = DT^{\frac{1}{2}} \left( \exp \left\{ -\varphi_1^* \sum_{i=1}^p c^{(i)} \right\} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.23)$$

Recordando que  $c' = cL^{3\beta-2d} - c^2\psi_2$  y en nuestro modelo  $\beta = 2$  y  $d = 3$  encontramos

$$c' = c - c^2\psi_2$$

Si el mapa es aplicado  $i$  veces escribimos

$$c^{(i+1)} = c^{(i)} - (c^{(i)})^2 \psi_2$$

Introduciendo la solución de la recursión de la ecuación anterior en la ecuación (5.23) obtenemos

$$w^\alpha(T)^{\frac{1}{\alpha}} = DT^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{\varphi_1^*}{2\psi_2} \ln p \right\} \simeq DT^{\frac{1}{2}} p^{\frac{\varphi_1^*}{2\psi_2}} \quad (5.24)$$

En (5.24) hemos asumido que  $p$  es lo suficientemente grande para que  $c^{-1} \ll \psi_2(p)$ . Tomando el límite  $p \rightarrow \infty$ , Entonces podemos aproximar  $p \rightarrow \log T$ , y (5.24) llega a tomar la forma siguiente

$$\langle w^\alpha(T) \rangle^{\frac{1}{\alpha}} \simeq DT^{\frac{1}{2}} \log^{\frac{\varphi_1^*}{2\psi_2}} T \quad (5.25)$$

Lo anterior es el comportamiento asintótico de la distancia media principio-fin de la macromolécula, en el límite de grandes macromoléculas. Entonces sólo es necesario conocer los valores de  $\varphi_1$  y  $\psi_2$  para determinar el comportamiento de  $\langle w^\alpha(T) \rangle^{\frac{1}{\alpha}}$ .

Recordando que  $\varphi_1$  es el valor esperado de una triple interacción de una caminata  $w$  dentro de un bloque que una vez que ha sido renormalizada es vista como si visitara una vez el sitio renormalizado. Esto es

$$\varphi_1 = \left\langle \sum_{X_i \in G} \sum_{i+1 < j < k-1} t_i t_j t_k \chi_{\{w(t_i)=w(t_j)=w(t_k)\}} \chi_{\{(i,j,k) \in X'_{j'}\}} \right\rangle_{w'} \quad (5.26)$$

Si la probabilidad de que se dé una triple interacción dentro de un bloque en el cual se dan  $n_{j'}$  pasos, está dada por

$$\binom{n_{j'} + 1}{3} (L^d - 1) (L^d - 2) (L^d - 3) \dots (L^d - (n_{j'} - 2)) \quad (5.27)$$

donde

$$\binom{n_{j'} + 1}{3} = \frac{(n_{j'} + 1)!}{3!((n_{j'} + 1) - 3)!}$$

Haciendo uso de (5.3) y insertándole (5.27) tenemos

$$\begin{aligned} \varphi_1 = & \frac{\sum_{n_{j'}} \int \prod_{i \in I'_{j'}} dt_i \prod_{j' \in J'_{j'}} \delta \left( \sum_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t'_{j'} \right) \times \\ & \times \prod_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} X(X_i \in LX'_{j'}) q^{n_{j'}-2} r^{n_{j'}} \binom{n_{j'} + 1}{3} \times \\ & \times (L^d - 1) (L^d - 2) \dots (L^d - (n_{j'} - 2)) \sum_{X_i \in G_{i+1}(j)(k-1)} \sum t_i t_j t_k}{\prod_{j' \in J'_{j'}} \exp \left\{ q(L^d - 1) r (L^\beta t'_{j'}) \right\}} \quad (5.28) \end{aligned}$$

Para resolver el numerador de (5.28), fijemos  $i, j, k$ , para obtener

$$\langle t_i, t_j, t_k \rangle = \frac{\prod_{j' \in J_{x'}} \int t_i t_j t_k \delta \left( \sum_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t_{j'} \right) \prod_{i \in I_{x'}} dt_i}{\prod_{j' \in J_{x'}} \int \delta \left( \sum_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} t_i - L^\beta t_{j'} \right) \prod_{i \in I_{x'}} dt_i}. \quad (5.29)$$

Escribiendo el numerador de  $\langle t_i, t_j, t_k \rangle$  que llamaremos  $N$ , como

$$N = \int_0^{L^\beta t_{j'}} t_i t_j t_k dt_i dt_j dt_k \times \\ \times \int_0^{L^\beta t_{j'} - t_i - t_j - t_k} \delta \left( \sum_{i=m_{j'}-1+1}^{m_{j'}} t_i - (L^\beta t_{j'} - t_i - t_j - t_k) \right) \prod_{i \in I_{x'}, \text{ excepto } dt_i, dt_j, dt_k} dt_i. \quad (5.30)$$

Encontramos

$$\langle t_i, t_j, t_k \rangle = \frac{n_{j'}!}{(n_{j'} - 3)!} \int_0^{L^\beta t_{j'}} t_i t_j t_k dt_i dt_j dt_k \frac{(L^\beta t_{j'} - t_i - t_j - t_k)^{n_{j'}-3}}{(n_{j'} - 3)!}. \quad (5.31)$$

Haciendo los siguientes cambios de variables

$$t_i = L^\beta t_{j'} t_1, \\ t_j = L^\beta t_{j'} t_2, \\ t_k = L^\beta t_{j'} t_3.$$

Encontramos que (5.31) queda de la forma

$$\langle t_i, t_j, t_k \rangle = \frac{n_{j'}!}{(n_{j'} - 3)!} \frac{(L^\beta t_{j'})^{n_{j'}-3}}{(L^\beta t_{j'})^{n_{j'}}} (L^\beta t_{j'})^6 \times \\ \times \int_0^1 (1 - t_1 - t_2 - t_3)^{n_{j'}-3} t_1 dt_1 t_2 dt_2 t_3 dt_3. \quad (5.32)$$

Haciendo la aproximación  $L^d \gg n_{j'}$  lo cual significa que el número de sitios en un bloque es mucho mayor que el número de saltos en el mismo bloque, es posible decir que

$$(L^d - 1)(L^d - 2) \dots (L^d - (n_{j'} - 2)) \simeq (L^d - 1)^{n_{j'} - 2}. \quad (5.33)$$

Sustituyendo (5.32) y (5.33) en el numerador de (5.28), que llamaremos  $N_A$ , encontramos lo siguiente:

$$\begin{aligned} N_A = & \sum_{n_{j'}} \prod_{j' \in J'_{X'_{j'}}} r^{n_{j'}} q^{n_{j'} - 2} (L^d - 1)^{n_{j'} - 2} \times \\ & \times \frac{n_{j'}(n_{j'} - 1)(n_{j'} - 2)(n_{j'} + 1)n_{j'}(n_{j'} - 1)}{6n_{j'}!} \times \\ & \times (L^{\beta} t'_{j'})^{n_{j'} + 3} \int_0^1 (1 - t_1 - t_2 - t_3)^{n_{j'} - 3} t_1 dt_1 t_2 dt_2 t_3 dt_3. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Tomando el límite  $n \rightarrow \infty$  es posible escribir lo siguiente:

$$\begin{aligned} N_A = & \prod_{j' \in J'_{X'_{j'}}} \frac{\left( \sum_{j' \in J'_{X'_{j'}}} L^{\beta} t'_{j'} \right)^3}{q^2 (L^d - 1)^2} \int_0^1 \sum_{n_{j'}} n_{j'}(n_{j'} - 1)(n_{j'} - 2)(n_{j'} - 3)(n_{j'} - 4)(n_{j'} - 5) \times \\ & \times \frac{\left[ r q (L^d - 1) \left( \sum_{j' \in J'_{X'_{j'}}} L^{\beta} t'_{j'} \right) (1 - t_1 - t_2 - t_3) \right]^{n_{j'}}}{n_{j'}!} t_1 dt_1 t_2 dt_2 t_3 dt_3. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Para ser capaces de resolver (5.35) hacemos uso de la siguiente identidad

$$x^m e^x = x^m \sum_n \frac{x^n}{n!} = \sum_n \frac{x^{m+n}}{n!} \quad (5.36)$$

si  $s = m + n \Rightarrow n = s - m$  entonces

$$x^m e^x = \sum_s \frac{x^s}{(s-m)!} = \sum_s s(s-1)(s-2)(s-3)(s-4) \dots (s-(m+1)) \frac{x^s}{s!} \quad (5.37)$$

Sea

$$x = rq \left( L^d - 1 \right) \left( \sum_{j' \in J'_{X'_{i'}}} L^\beta t'_{j'} \right) (1 - t_1 - t_2 - t_3) \text{ y } m = 6. \quad (5.38)$$

Sustituyendo (5.38) en (5.37) encontramos:

$$\begin{aligned} & \left[ rq \left( L^d - 1 \right) \left( \sum_{j' \in J'_{X'_{i'}}} L^{-\beta} t'_{j'} \right) (1 - t_1 - t_2 - t_3) \right]^6 \\ & \exp \left\{ rq \left( L^d - 1 \right) \left( \sum_{j' \in J'_{X'_{i'}}} L^\beta t'_{j'} \right) (1 - t_1 - t_2 - t_3) \right\} = \\ & = \sum_{n_{j'}} n_{j'} (n_{j'} - 1) (n_{j'} - 2) (n_{j'} - 3) (n_{j'} - 4) (n_{j'} - 5) \times \\ & \quad \times \frac{rq \left( L^d - 1 \right) \left( \sum_{j' \in J'_{X'_{i'}}} L^{-\beta} t'_{j'} \right) (1 - t_1 - t_2 - t_3)^{n_{j'}}}{n_{j'}!}. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Al sustituir (5.39) en (5.34), ésta se transforma a

$$\begin{aligned} N_A = & \prod_{j' \in J'_{X'_{i'}}} \frac{\left( \sum_{j' \in J'_{X'_{i'}}} L^\beta t'_{j'} \right)^9 r^2 [r(L^d - 1)q]^4}{6} \prod_{j' \in J'_{X'_{i'}}} \exp \left\{ -rq \left( L^d - 1 \right) \left( L^{-\beta} t'_{j'} \right) \right\} \\ & \int_0^1 (1 - (t_1 + t_2 + t_3))^6 \exp \left\{ - \sum_{j' \in J'_{X'_{i'}}} rq \left( L^d - 1 \right) \left( L^\beta t'_{j'} \right) (t_1 + t_2 + t_3) \right\} t_1 dt_1 t_2 dt_2 t_3 dt_3. \end{aligned} \quad (5.40)$$



Al sustituir (5.40) en (5.28) obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \varphi_1 = & \frac{\prod_{j' \in J_{x'_i}} \frac{(L^\beta t'_{j'})^9 r^2 [r(L^d - 1)q]^4}{6} \times}{\prod_{j' \in J_{x'_i}} \exp \left\{ -rq (L^d - 1) (L^{-\beta} t'_{j'}) \right\} \times} \\
 & \times \prod_{j' \in J_{x'_i}} \exp \left\{ -rq (L^d - 1) (L^{-\beta} t'_{j'}) \right\} \times \\
 & \times \int_0^1 (1 - (t_1 + t_2 + t_3))^6 t_1 dt_1 t_2 dt_2 t_3 dt_3 \times \\
 & \times \exp \left\{ - \sum_{j' \in J_{x'_i}} rq (L^d - 1) (L^\beta t'_{j'}) (t_1 + t_2 + t_3) \right\} \\
 & \times \exp \left\{ q (L^d - 1) r (L^\beta t'_{j'}) \right\}
 \end{aligned} \tag{5.41}$$

Eliminando términos de (5.41) obtenemos

$$\begin{aligned}
 \varphi_1 = & \frac{\left( \sum_{j' \in J_{x'_i}} L^\beta t'_{j'} \right)^9 r^2 [r(L^d - 1)q]^4}{6} \int_0^1 (1 - (t_1 + t_2 + t_3))^6 \times \\
 & \times \exp \left\{ - \sum_{j' \in J_{x'_i}} rq (L^d - 1) \left( \sum_{j' \in J_{x'_i}} L^\beta t'_{j'} \right) (t_1 + t_2 + t_3) \right\} t_1 dt_1 t_2 dt_2 t_3 dt_3.
 \end{aligned} \tag{5.42}$$

Proponiendo una *velocidad de salto*  $r$  tal que  $r(L^d - 1)q \simeq 1$  [15], para obtener la adecuada función de Green en la red jerárquica, es posible escribir (5.42) como

$$\varphi_1 = \frac{\left( \sum_{j' \in J'_{x'_i}} L^\beta t'_{j'} \right)^9}{6} r^2 \int_0^1 (1 - (t_1 + t_2 + t_3))^6 \times \quad (5.43)$$

$$\times \exp \left\{ - \left( \sum_{j' \in J'_{x'_i}} L^\beta t'_{j'} \right) (t_1 + t_2 + t_3) \right\} t_1 dt_1 t_2 dt_2 t_3 dt_3.$$

Haciendo uso de las siguientes igualdades

$$(1 - (t_1 + t_2 + t_3))^6 = \sum_{h=0}^6 \binom{6}{h} (t_1 + t_2 + t_3)^h (-1)^h$$

$$(t_1 + t_2 + t_3)^h = \sum_h \frac{h!}{h_1! h_2! h_3!} t_1^{h_1} t_2^{h_2} t_3^{h_3} \text{ donde } h_1 + h_2 + h_3 = h$$

$$(1 - (t_1 + t_2 + t_3))^6 = \sum_{h=0}^6 \binom{6}{h} (-1)^h \sum_h \frac{h!}{h_1! h_2! h_3!} t_1^{h_1} t_2^{h_2} t_3^{h_3},$$

es posible escribir (5.43) como

$$\varphi_1 = \sum_{h=0}^6 \sum_h \binom{6}{h} (-1)^h \frac{h!}{h_1! h_2! h_3!} \frac{\left( \sum_{j' \in J'_{x'_i}} L^\beta t'_{j'} \right)^9}{6} \quad (5.44)$$

$$\prod_{j' \in J'_{x'_i}} \int_0^1 \exp \left\{ - \sum_{j' \in J'_{x'_i}} L^\beta t'_{j'} t_1 \right\} t_1^{h_1+1} dt_1 \int_0^1 \exp \left\{ - \sum_{j' \in J'_{x'_i}} L^\beta t'_{j'} t_2 \right\} t_2^{h_2+1} dt_2$$

$$\int_0^1 \exp \left\{ - \sum_{j' \in J'_{x'_i}} L^\beta t'_{j'} t_3 \right\} t_3^{h_3+1} dt_3.$$

(5.44) tiene que ser resuelta para  $h = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ . De esta manera resolvemos primero el caso para  $h = 0$ , lo que implica  $h_1 = h_2 = h_3 = 0$ , y haciendo  $L^\beta t'_{j'} \rightarrow \infty$  encontramos

$$\varphi_{h=0} = \frac{\left( \sum_{j' \in J'_{x'_t}} L^\beta t'_{j'} \right)^3}{6} r^2. \quad (5.45)$$

Resolviendo (5.44) para  $h = 1$ , tenemos que hacer la suma para  $h_2 = h_3 = 0$ ,  $h_1 = \tilde{h}_3 = 0$  y para  $h_1 = h_2 = 0$ , además sabemos que los tres términos son iguales, por consiguiente encontramos

$$\varphi_{h=1} = -6 \left( \sum_{j' \in J'_{x'_t}} L^\beta t'_{j'} \right)^2 r^2. \quad (5.46)$$

Procediendo de la misma manera se encuentra lo siguiente para  $h = 2$

$$C_{h=2} = 105 \left( \sum_{j' \in J_{x'_t}} L^\beta t'_{j'} \right) r^2. \quad (5.47)$$

Los términos para  $h = 3$ ,  $h = 4$ ,  $h = 5$  y  $h = 6$  no tienen sentido físico, por lo que no serán calculados. Así al hacer la suma de (5.45), (5.46) y (5.47) se encuentra finalmente

$$\varphi_1 = \frac{\left( \sum_{j' \in J'_{x'_t}} L^\beta t'_{j'} \right)^3}{6} r^2 - 6 \left( \sum_{j' \in J_{x'_t}} L^\beta t'_{j'} \right)^2 r^2 + 105 \left( \sum_{j' \in J_{x'_t}} L^\beta t'_{j'} \right) r^2. \quad (5.48)$$

Dado que (5.48) es el valor medio de una triple interacción sólo el tercer término tiene el sentido físico que nos interesa. Por lo tanto es posible escribir lo siguiente

$$\varphi_1 \simeq 105 \left( \sum_{j' \in J_{x'_t}} L^\beta t'_{j'} \right) r^2. \quad (5.49)$$

El valor de  $\psi_2$  puede ser calculado fácilmente a partir de (5.8) ya que  $\psi_2$  es el valor medio de dos triples interacciones en un bloque, así  $\psi_2$  es sólo el cuadrado  $\varphi_1$ , esto es

$$\psi_2 \simeq 105^2 Q \text{ donde } Q = \text{const} \quad (5.50)$$

Introduciendo (5.49) y (5.50) en (5.25) encontramos finalmente

$$\langle w^2(T) \rangle^{\frac{1}{2}} \simeq DT^{\frac{1}{2}} \log \frac{1}{105} T \quad (5.51)$$

Que es el comportamiento asintótico de la distancia media principio-fin de la macromolécula, en que las interacciones de tres cuerpos dominan con mucho a las interacciones de dos cuerpo. Esto como un modelo de comportamiento de las macromoléculas en el punto  $\theta$  de Flory. En la referencia [11] se encuentra reportada la siguiente expresión para para la distancia principio final de la macromolécula en el mismo estado termodinámico.

$$\langle w^2(n) \rangle = nA \left( 1 - \frac{37}{363 \ln n} \right) \quad (5.52)$$

En este caso la caminata es en tiempo discreto y está formada por  $n$  pasos, siendo  $A$  una constante. Cabe mencionar que en las ecuaciones (5.51) y (5.52)  $T$  y  $n$  no son estrictamente equivalentes en cualquier circunstancia. En el próximo capítulo se compararán gráficamente nuestro resultado (5.51) con el reportado por Duplantier (5.52); así como el caso dado por la simulación Montecarlo para una CAAR en  $d = 3$ , como referencia. En [8] se pueden encontrar otras expresiones para la distancia principio final.

# SIMULACIÓN MONTECARLO.



QUIMICA  
D.E.F.G.

Los métodos Montecarlo son muy usados para hacer estimaciones estadísticas de ciertas constantes, por ejemplo, exponentes críticos relacionados con CAAR. En esencia una simulación Montecarlo es un experimento en computadora que lleva a cabo versiones al azar de un sistema en particular, y una vez que se tienen suficientes datos, uno puede hacer uso de técnicas estadísticas para hacer estimaciones confiables de la cantidad o cantidades deseadas.

Una manera de llevar a cabo una simulación Montecarlo para hacer una estimación de un parámetro  $X$  relacionado con CAAR en tiempo continuo es, por ejemplo, la siguiente forma:

a) Seleccionar diferentes valores de  $n$ , digamos  $n_1, n_2, \dots, n_j$ , (recordando que  $n$  es el número de pasos de la caminata  $w$ )

b) Para cada  $n_i$  generar muchas CAAR de  $n_i$  pasos al azar, usando esto, hacer una estimación de algún parámetro  $Y$ , por ejemplo, la distancia media cuadrada principio-fin de la macromolécula, es decir  $\langle |w(n_i)|^2 \rangle$

c) Proponer una forma funcional para la magnitud en estudio, por ejemplo,  $Y = An^{2\nu}$ . El mejor valor de  $\nu$  corresponderá a  $X$ .

Sin embargo existe muchas preguntas acerca de la forma en como procedimos. En el inciso a) podemos preguntarnos ¿Cuántos y cuales valores de  $n_i$  deberan ser escogidos? en b) ¿Cuántas son muchas caminatas?, ¿Cual es el más eficiente método para generar CAAR? Por supuesto nosotros nos enfocaremos en lo que podemos decir rigurosamente acerca de las propiedades de este método.

Se empieza con una pregunta básica ¿Como podemos generar una CAAR de  $n$  pasos o en tiempo discreto al azar ?. Una forma es la siguiente

Muestra Simple Elemental (MSE). Este algoritmo genera una caminata al azar simple (CAS) hasta que obtiene una que es autorrepelente.

1. Sea  $w(0)$  el origen y fija  $i = 0$
2. Aumenta  $i$  en uno y escoge uno de los  $2d$  vecinos cercanos de  $w(i-1)$  al azar y sea  $w(i)$  el punto escogido.
3. Si  $w(i) = w(j)$  para algún  $j = 0, 1, \dots, i-1$  entonces se regresa al paso uno, si no se continua en el paso dos en caso de que  $i < n$  y el proceso se detiene cuando  $i = n$ .

Además se debe de cumplir que para cualquier  $w \in \Gamma_n$ ,  $P(w) = (C_n)^{-1}$ , donde  $\Gamma_n$  es el conjunto de todas las CAAR de  $n$  pasos. La probabilidad de que este algoritmo genere CAAR es  $C_n/(2d)^n$ , aquí  $C_n = |\Gamma_n|$ , así el valor esperado de intentos para generar una CAAR es  $(2d)^n/C_n$ . Si  $T$  es el valor esperado de tiempo de cómputo requerido para generar una CAAR de  $n$  pasos, entonces

$$T \approx (2d)^n / C_n.$$

Si sólo permitimos que la caminata dé el siguiente paso a uno de los  $2d - 1$  vecinos cercanos sin tocar, a este algoritmo la llamaremos Muestra Simple Elemental Sin Retorno (MSESR), y encontramos

$$T \approx (2d - 1)^n / C_n.$$

Este resultado es mejor que el anterior, pero sin llegar a ser muy bueno. Otro algoritmo natural para generar CAAR pero que genera la estadística apropiada, es conocido como CAAR miope, el cual produce una caminata al azar, escogiendo cada sitio sólo en aquellos sitios que aún no han sido visitados, no es práctico ya que este método requiere de un tiempo de cómputo más grande aún que MSE. Este algoritmo produce caminatas que pertenecen a  $\Gamma_n$  pero con otra estadística, para ver donde está el problema, consideremos una caminata de cuatro pasos en  $Z^2$ , así la probabilidad de obtener una caminata en un intento dado puede ser  $\frac{1}{4} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{3}$ , pero la probabilidad de obtener alguna otra caminata puede ser  $\frac{1}{4} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{3} \times \frac{1}{2}$ , es decir la probabilidad no es una función uniforme de  $\Gamma_n$ , de hecho, para números grandes de  $n$ , la probabilidad dista mucho de ser uniforme.

El problema al que nos enfrentamos es el siguiente ¿Existirá algún algoritmo que genere CAAR con una distribución que sea exactamente uniforme en  $\Gamma_n$  y que además  $T$  este delimitado por un polinomio en  $n$ ?. Queremos que el algoritmo sea exactamente uniforme en  $\Gamma_n$  para que cada caminata  $w$  de  $n$  pasos que sea generada tenga la misma probabilidad de ocurrir y que  $T$  esté delimitado por un polinomio en  $n$

para que el tiempo necesario para generar cada CAAR esté apropiadamente acotado. Actualmente el problema está abierto para  $d \leq 4$ .

Existen ciertos algoritmos que son capaces de generar CAAR delimitados por un polinomio en  $n$ , como ejemplo tenemos a los algoritmos **estáticos** y **dinámicos**, dentro de los algoritmos estáticos tenemos al conocido como *dimerización* que está delimitado por un polinomio, además este algoritmo es el más eficiente método para generar caminatas exáctamente uniformes, sin embargo los algoritmos **dinámicos** son más eficientes para generar CAAR pero con una distribución casi uniforme, estos métodos no generan una secuencia de CAAR independientes, sino que generan nuevas CAAR modificando CAAR que ya habían sido previamente generadas, dentro de los algoritmos dinámicos tenemos al algoritmo *pivote*.

La idea básica de un algoritmo **dinámico** es la siguiente. Supongamos que  $\pi$  es una distribución de probabilidades en algún conjunto  $S$  ( es decir, para cada  $i \in S$ ,  $\pi(i)$  es la probabilidad de  $i$ , y  $\sum_{i \in S} \pi(i) = 1$ ), y que deseamos generar un objeto al azar con la distribución  $\pi$ . en nuestro caso, por ejemplo se escoge  $S = S_n$  y  $w(\pi) = 1/C_n$  para toda  $w$  en  $S_n$ .

Si inicia con una caminata  $w^{[0]} \in S_n$  y le aplicamos algún proceso al azar que cambie  $w^{[0]}$  para conseguir otra CAAR  $w^{[1]}$ ; entonces volvemos a aplicar el mismo proceso a  $w^{[1]}$  para conseguir otra  $w^{[2]}$  y así sucesivamente, de esta forma estamos generando una secuencia de caminatas  $\{w^{[n]} : n \geq 0\}$ . Para  $n$  suficientemente grande se espera tener una distribución uniforme.

Por el momento no nos ocupemos de como generar CAAR con una distribución uniforme, ya que esto se verá más adelante en este mismo capítulo. Ahora nos centraremos en entender como se comporta algún parámetro relacionado a la CAAR, por ejemplo,  $\langle |w(n_i)|^2 \rangle$  y averiguar como se comporta esta cantidad como una función de  $n$ .

Consideremos que tenemos suficientes puntos  $(n_i, Y_i)$  donde  $\hat{Y}_i = \langle |w(n_i)|^2 \rangle$  que se obtuvieron de generar suficientes CAAR de  $n_i$  pasos, y  $\sigma_i^2$  es la varianza de  $\hat{Y}_i$ . Si quisiéramos hacer una estimación de algún parámetro, digamos  $\nu$ , empezariamos con la relación



$$\langle |w(n_i)|^2 \rangle \sim An^{2\nu}$$

Esta relación se podría escribir como una igualdad agregando términos correctivos

$$\langle |w(n_i)|^2 \rangle = An^{2\nu} (1 + Bn^{-\Delta} + \dots)$$

Los exponentes de los términos correctivos tienen que ser estrictamente positivos, y  $\Delta$  es el más pequeño de ellos, eso significa que  $Bn^{-\Delta}$  es el término dominante, además se cree que estos exponentes sólo dependen de la dimensión. ( otras formas correctivas, como logarítmicas también son permitidas ). Nuestro objetivo es trazar una curva  $Y = f(n)$  y para hacer esto debemos sólo permitir un número pequeño de parámetros, la elección obvia sería no tomar en cuenta los términos correctivos, es decir

$$Y = An^{2\nu} \tag{6.1}$$

o bien eliminar todos pero no el término dominante, o sea

$$Y = An^{2\nu} (1 + Bn^{-\Delta}) \tag{6.2}$$

La forma (6.1) es apropiada si las  $n_i$  son lo suficientemente grandes para que los términos correctivos sean más pequeños que el error estadístico ( es decir la desviación estándar ). En general no podemos esperar esto a priori. Si elegimos trabajar con (6.2), no tenemos garantía de que la mejor curva reflejara el valor verdadero de  $\Delta$ , ya que no sabemos el peso de los términos correctivos omitidos, especialmente para  $n$  pequeñas, así es muy complicado hacer una estimación del valor verdadero de  $\Delta$ .

La herramienta estadística apropiada para conocer los exponentes de las ecuaciones (6.1) y (6.2) es el método de mínimos cuadrados. Estas ecuaciones son ejemplos de funciones de regresión y son las más fáciles de trabajar, se toman log a ambas ecuaciones, obteniendose

$$\log Y = \log A + 2\nu \log N \quad (6.3)$$

y

$$\log Y = \log A + 2\nu \log N + BN^{-\Delta}, \quad (6.4)$$

donde el último término de la ecuación (6.4) fue obtenido por la aproximación  $\log(1+x) \approx x$  para  $x$  cercanas a cero.

Abordemos primeramente la ecuación (6.1). Una estimación ordinaria por mínimos cuadrados nos daría un valor estimado de  $A$  y  $\nu$  para aquellos valores que minimizan la suma de cuadrados.

$$\sum_{i=1}^m (\log \hat{Y}_i - \log A + 2\nu \log N_i)^2 \quad (6.5)$$

Pero este método no es el más apropiado para nosotros ya que estamos asumiendo que la varianza de  $\log \hat{Y}_i$  es la misma para toda  $i$ . En vez de eso deberíamos usar una estimación de mínimos cuadrados ponderados, esto se logra pesando cada término de acuerdo al inverso de su varianza, para que las  $\hat{Y}_i$  que tengan una varianza menor tengan más peso a la hora de determinar la mejor curva. La forma de proceder es la siguiente. Suponga que observamos variables al azar independientes  $U_i, \dots, U_m$  donde cada  $U_i$  es normalmente distribuida con media  $a + bM_i$  (donde conocemos las  $M_i$  y queremos estimar  $a$  y  $b$ ) y varianza  $v_i^2$ . (en nuestro caso tenemos  $b = \nu$ ,  $a = \log A_i$ ,  $U_i = \log \hat{Y}_i$  y  $M_i = 2 \log N_i$ ). Entonces las estimaciones de  $\hat{a}$  y  $\hat{b}$  son los valores de  $a$  y  $b$  que minimizan la suma de cuadrados ponderados.

$$\sum_{i=1}^m w_i (U_i - a - bM_i)^2 \quad (6.6)$$

Donde  $w_i$  es un peso positivo (típicamente  $1/v_i^2$ , pero no necesariamente). Así los valores que minimizan (5.6) son:

$$\hat{b} = \frac{\sum w_i \sum w_i M_i U_i - \sum w_i M_i \sum w_i U_i}{\sum w_i \sum w_i M_i^2 - (\sum w_i M_i)^2} \quad (6.7)$$

y

$$\hat{a} = \frac{\sum w_i U_i - \hat{b} \sum w_i M_i}{\sum w_i} \quad (6.8)$$

Cuando aplicamos esta teoría a nuestro modelo, debemos decidir si las estimaciones de  $\hat{Y}_i$  son normalmente distribuidas. Típicamente,  $\hat{Y}_i$  es el promedio de un largo número de observaciones

$$\hat{Y}_i = \frac{X_1 + \dots + X_T}{T} \quad (6.9)$$

Así podemos estimar la varianza de  $\hat{Y}_i$ , por

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{1}{T-1} \sum_{t=1}^T (X_t - \hat{Y}_i)^2 \quad (6.10)$$

Supongamos ahora que  $\hat{Y}_i$  es normalmente distribuida, digamos con media  $Y_i$  y varianza  $\sigma_i^2$ , ahora la pregunta es ¿Qué podemos decir acerca de  $U_i = \log \hat{Y}_i$ ?, para contestar esta pregunta escribamos  $\hat{Y}_i = Y_i + Z\sigma_i^2$  donde  $Z$  es también normalmente distribuida con media 0 y varianza 1; entonces

$$U_i = \log \left[ Y_i \left( 1 + \frac{Z\sigma_i^2}{Y_i} \right) \right] = \log Y_i + \log \left( 1 + \frac{Z\sigma_i^2}{Y_i} \right) \approx \log Y_i + \frac{Z\sigma_i^2}{Y_i} \quad (6.11)$$

Así hemos encontrado una adecuada estimación de la varianza de  $U_i$ , además en el procedimiento de mínimos cuadrados ponderados descrito arriba, nuestra elección de los pesos es  $w_i = \hat{Y}_i / \hat{\sigma}_i^2$ . Con esto hemos encontrado una mejor estimación de los parámetros buscados. La metodología presentada es conocida como el método lineal,

Por lo que ahora presentaremos el metodo lineal, que consiste en proponer una forma funcional de la propiedad a estudiar, que escribiremos como

$$y = y(x; a) \quad (6.12)$$

donde  $a$  es el conjunto de parametros de deseamos conocer.

Para conocer los parametros de la ecuación (6.12) proponemos una sumatoria de mínimos cuadrados escrita como

$$\chi(a) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - y(x_i; a)}{\sigma_i} \right]^2 \quad (6.13)$$

La función  $\chi(a)$  será mínima cuando

$$\frac{\partial \chi(a)}{\partial a_k} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - y(x_i; a)]}{\sigma_i^2} \frac{\partial y(x_i; a)}{\partial a_k} = 0 \quad (6.14)$$

para  $k = 1, 2, \dots, M$ .

De la forma anterior se obtienen  $M$  ecuaciones con  $M$  incognitas que en principio es posible de resolver. De esta forma es posible encontrar el valor de los parámetros  $a_k$  involucrados en la ecuación (6.12) y así determinar completamente el comportamiento de la propiedad de estudio.

## ALGORITMOS ESTÁTICOS.

Este tipo de algoritmos generan ya sea una secuencia de CAAR independientes o una secuencia de colecciones de CAAR (las caminatas dentro de cada secuencia son posiblemente altamente correlacionadas). Nosotros enfocaremos nuestra atención en el algoritmo conocido como dimerización, no olvidando que existen otros métodos como los presentados en [18].

La idea básica es que si queremos generar una CAAR de  $n$  pasos, debemos generar primeramente dos CAAR independientes de  $\frac{n}{2}$  pasos que llamaremos dímeros, y después tratar de conectarlos de alguna forma. Si el resultado es una CAAR, el trabajo está hecho, de otra manera se desechan ambos dímeros y se empieza nuevamente. Para

generar cada uno de los dos dímeros de  $n/2$  pasos, debemos generar dos caminatas de  $\frac{n}{4}$  pasos y tratar de conectarlos de alguna manera y así sucesivamente. Esta recursión se detiene en el  $k$ -th nivel si existe una forma rápida de generar una CAAR de  $n/2k$  pasos. Por ejemplo una CAAR de 10 pasos es fácil de generar con el algoritmo MSESER, así sólo son necesarios tres niveles para crear una CAAR de 80 pasos mediante el algoritmo de dimerización.

### ALGORITMOS DINÁMICOS.

Este tipo de métodos generan CAAR teniendo un número fijo de pasos, cada uno de estos métodos toma una CAAR y trata de cambiarla en una forma al azar, para conseguir otra CAAR del mismo número de pasos. Existen varios métodos dinámicos como los reportados en [18], sin embargo solamente nos enfocaremos en el conocido como pivote.

El algoritmo pivote parte de una CAAR que ha sido generada previamente por cualquier método, entonces escoge al azar un sitio de la caminata que llamaremos *sitio pivote* y rompe la caminata en dos partes en ese sitio y entonces aplica al azar una operación de simetría a uno de los dos fragmentos usando el sitio pivote como origen, por supuesto el resultado es aceptado si y sólo si se trata de otra CAAR. El algoritmo pivote es muy eficiente para la investigación de observables globales, ya que el tiempo de cómputo requerido para generar una CAAR es del orden  $n \log n$  [18].

### EXPERIMENTO COMPUTACIONAL.

En esta sección reportamos los resultados que fueron obtenidos al llevar a cabo una simulación Montecarlo de una CAAR en tiempo continuo en dimensión tres en una rejilla cúbica  $Z^3$ , para comparar el comportamiento asintótico de la distancia principio-final de la macromolécula como una función del tiempo, con otros resultados previos.

La primera parte del experimento consiste en seleccionar un intervalo de tiempo, que va de  $T_{\min}$  hasta  $T_{\max}$ , es decir  $[T_{\min}, T_{\max}]$ , posteriormente este intervalo es dividido en  $I$  segmentos de igual tamaño, que llamaremos ventanas, esto último es escrito

como  $[T_i, T_{i+1}]$ , donde  $i = 1, 2, 3, \dots, I$ . Cada ventana es dividida en  $M$  subventanas de igual tamaño, y se le asigna una  $n_{\min}^i$  y una  $n_{\max}^i$ , aquí  $n$  es un entero positivo, En la tabla 5 aparecen los parámetros que fueron usados en nuestra simulación. Una vez fijados los parámetros se llevo a cabo el siguiente algoritmo:

- 1) Fije  $i = 1$  y  $j = 0$ .
- 2) Fije  $n_j$  tal que  $n_j = n_{\min}^i + j$
- 3) Genere  $n_j$  tiempos al azar  $t_i$  y calcule  $T = \sum_{m=0}^{n_j-1} t_m$ , donde  $t_m$  tiene una distribución de probabilidades de la forma  $\exp\{-t_m\}$ .
- 4) Si  $T \in [T_i, T_{i+1}]$  entonces se genera una CAAR de  $n_j$  pasos  $w(n_j)$ , y se calcula el cuadrado de la distancia principio-final de la caminata ( $w^2(T)$ ). Si  $T \notin [T_i, T_{i+1}]$  se desecha a  $T$  y no genera la caminata.
- 5) Regresa  $k - 1$  veces al punto 3.
- 6) Incrementa  $j$  en 1 y retorna al punto 2, hasta que  $n_j = (n_{\max}^i - n_{\min}^i)$ .
- 7) Para cada una de las  $M$  subventanas, calcule el promedio de  $R^2(T)$ , para todas aquellas caminatas cuyo  $T$  pertenece a esa subventana.
- 8) Incremente  $i$  en 1 y regrese al punto 1, hasta  $i = I$ .

$$T_{\min} = 40, T_{\max} = 200$$

$$I = 8, M = 1000 \text{ y } k = 100000$$

Ventana	$n_{\min}$	$n_{\max}$
40...60	10	150
60...80	20	180
80...100	30	180
100...120	40	200
120...140	50	220
140...160	60	260
160...180	70	280
180...200	80	300

TABLA 5. Parámetros involucrados en la simulación Montecarlo.

La selección de los valores arriba mencionados fueron hechos arbitrariamente, sin embargo existen razonables limitaciones para las  $n_{max}^i$  y las  $n_{min}^i$ , esto debido a que para una CAAR en tiempo continuo de número de pasos  $n$ , el valor medio de su tiempo total  $T$  es también  $n$ , debido a que el valor medio para cada  $t_i$  es 1, en concordancia con la distribución exponencial para las  $t_i$ . Así la principal contribución a la distancia principio final es hecha por aquellas caminatas cuyo número de pasos sea cercano a  $T$ . Existe una limitante en el intervalo de tiempo seleccionado  $[T_{min}, T_{max}]$  y ésta es dada por la capacidad del equipo de cómputo utilizado para la simulación. El algoritmo usado para generar CAAR es el método de dimerización de Alexandrowicz [21].

Una vez concluida la simulación, se grafica  $\langle w^2(T) \rangle$  vs  $T$  y se propone una forma funcional para  $\langle w^2(T) \rangle = \langle w^2(T) \rangle(T)$  de la forma

$$\langle w^2(T) \rangle = AT^B \quad (6.15)$$

o bien

$$y = AT^B.$$

Para determinar los parámetros  $A$  y  $B$  de la ecuación anterior, hacemos uso del método no lineal, por lo que tenemos

$$\chi(A, B) = \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - AT_i^B]^2}{\sigma_i^2} \quad (6.16)$$

$\chi(A, B)$  será mínima cuando

$$\frac{\partial \chi(A, B)}{\partial A} = 2 \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - AT_i^B]}{\sigma_i^2} \frac{\partial y(T_i; A, B)}{\partial A} = 0 \quad (6.17)$$

y

$$\frac{\partial \chi(A, B)}{\partial B} = 2 \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - AT_i^B]}{\sigma_i^2} \frac{\partial y(T_i; A, B)}{\partial B} = 0 \quad (6.18)$$

Llevando a cabo las operaciones indicadas en (6.17) y (6.18) encontramos

$$\frac{\partial(A, B)}{\partial A} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - AT_i^B]}{\sigma_i^2} T_i^B = 0 \quad (6.19)$$

$$\frac{\partial(A, B)}{\partial B} = 2 \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - AT_i^B]}{\sigma_i^2} AT_i^B \ln T_i = 0 \quad (6.20)$$

Las ecuaciones (6.19) y (6.20) son un sistema de ecuaciones con dos incógnitas que se resuelven como está descrito en [24]. Una vez hecho lo anterior se encuentra que

$$\langle w^2(T) \rangle = 1.1869T^{1.1774} \quad (6.21)$$

En la figura 14 se muestra la gráfica correspondiente a (5.51), (5.52) y en la figura 15 se muestra la gráfica para (6.21).



$\langle w^2(T) \rangle$

91

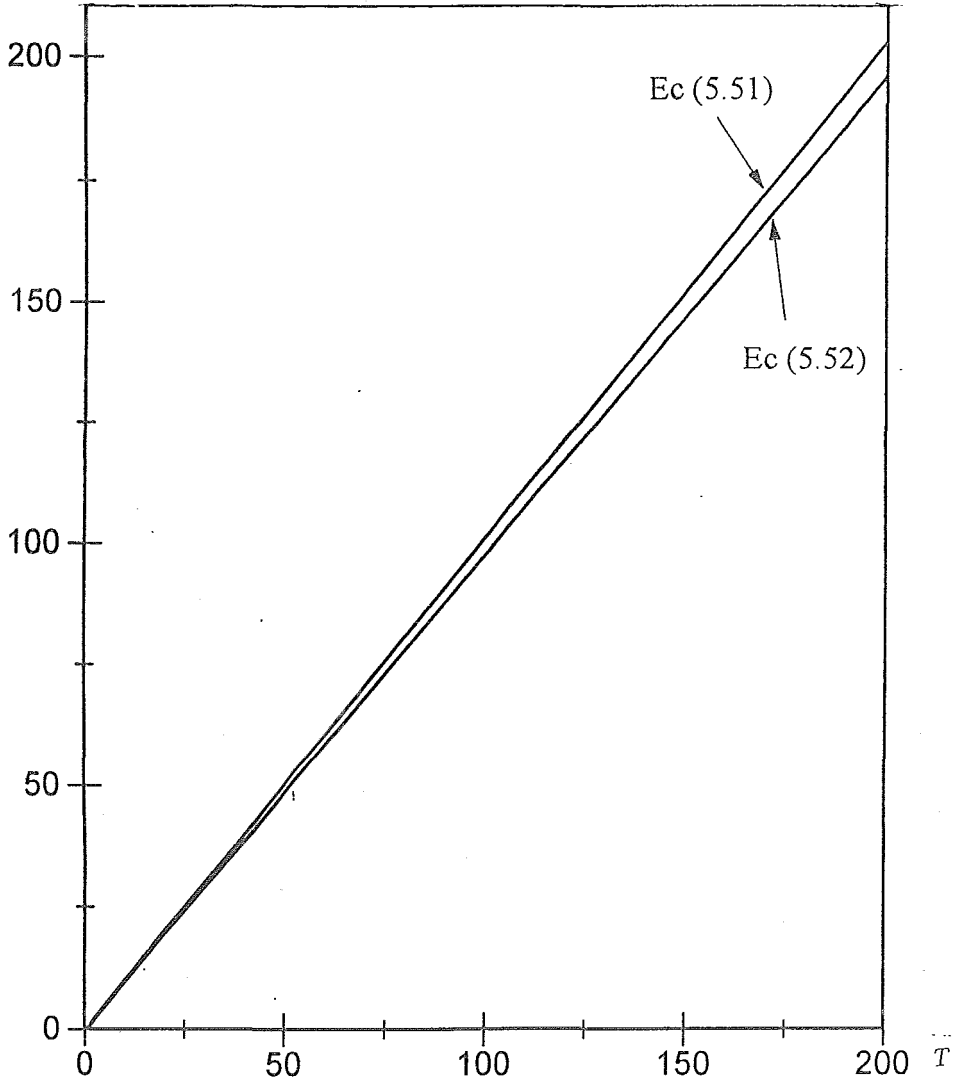


FIGURA 14. Comportamiento de la distancia principio-final para las ecuaciones (5.51) y (5.52).

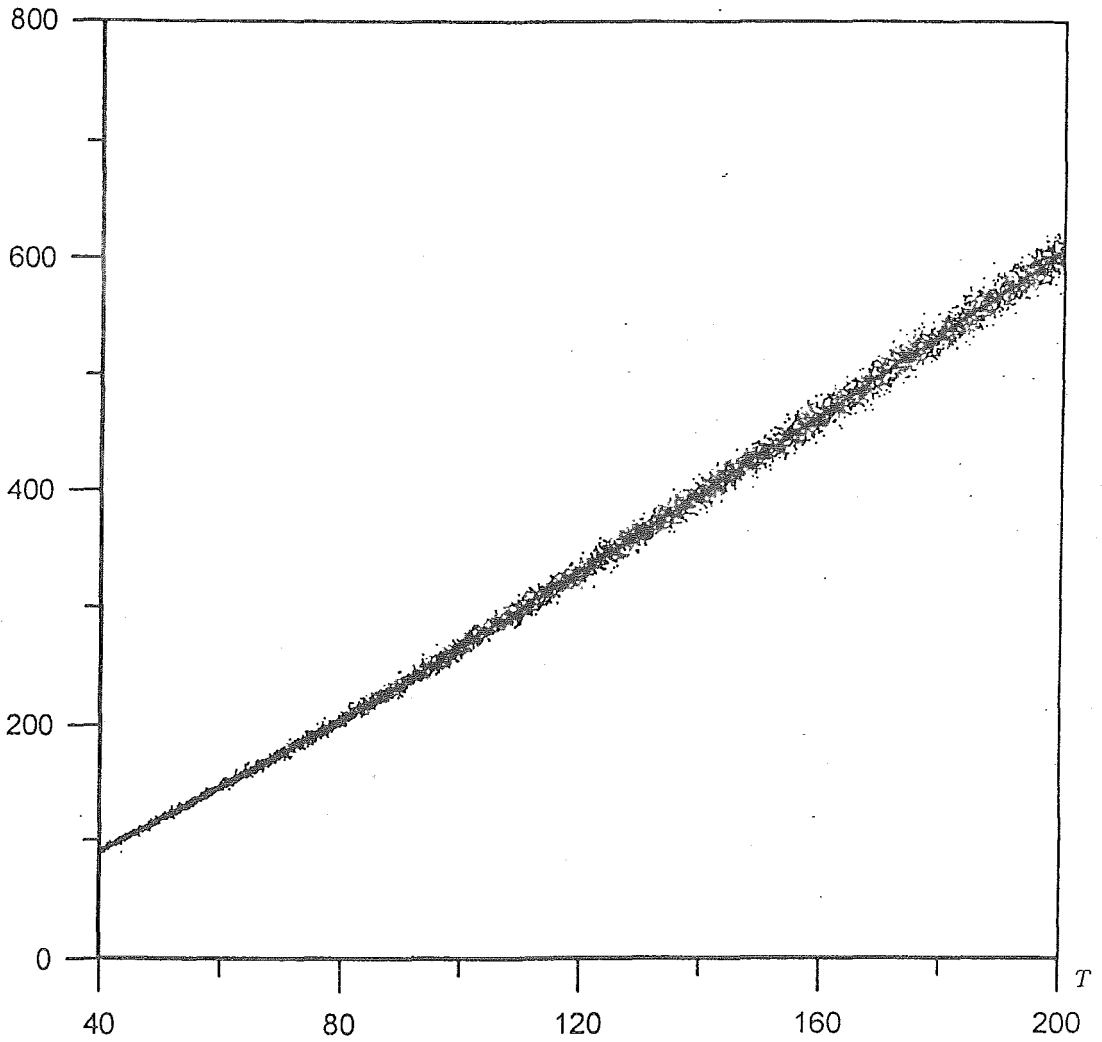


FIGURA 15. Comportamiento de la distancia principio-final para la ecuación (6.21).

## CONCLUSIONES.

En la investigación desarrollada simulamos macromoléculas mediante caminatas al azar en tiempo continuo que estaban soportadas en una rejilla jerárquica  $G$ . Esta simulación muestra que para una caminata al azar simple en tiempo continuo con densidad de probabilidad como en la ecuación (3.1), que está escrita como un producto de términos por sitio de la rejilla, es invariante ante la acción del mapa grupo-de-renormalización  $R$ , siempre y cuando la probabilidad  $P'(w')$  esté reescalada por  $L^{\beta k}$  como en la ecuación (3.5), sin embargo la condición expresada en la ecuación (3.8) es una condición suficiente pero no necesaria para que (3.1) sea invariante ante  $R$ .

Posteriormente se aplicó la transformación grupo-de-renormalización a una caminata al azar en tiempo continuo que penalizaba las interacciones de dos cuerpos, donde fue posible determinar la forma fija de la transformación, además de determinar el valor de los parámetros que aparecen en la expresión de energía renormalizada a partir de los parámetros iniciales. Parte de los resultados anteriores fueron usados para estudiar el caso en el que las interacciones de tres cuerpos eran penalizadas y no así las de dos (punto  $\theta$  de Flory).

Para el caso en el que las interacciones de tres cuerpos eran penalizadas fue posible determinar de forma fija de la transformación, Esta forma fue usada para determinar el valor de los exponentes críticos. También fue posible determinar el comportamiento de la distancia principio-final de la macromolécula cuando las interacciones de tres cuerpos dentro de un bloque era el evento penalizado más probable. Este comportamiento fue determinado en el límite  $p \rightarrow \infty$  donde  $p$  es el número de veces que se aplica el mapa. El resultado obtenido presenta una buena concordancia con el reportado en la referencia [11], esta diferencia se debe principalmente a que en la referencia citada, la caminata es llevada a cabo solo a vecinos cercanos y el tiempo gastado en cada etapa era 1, sin embargo, aunque en nuestro modelo lo más probable de suceder era esto, otras posibilidades eran posibles, de ahí que nuestro modelo presente una distancia principio-final mayor que en la referencia anterior.

Por último fue llevada a cabo una simulación Montecarlo de una caminata al azar autorrepelente en tiempo continuo, donde se generaron 100000 caminatas para

cada "tiempo" aceptado, el comportamiento de la distancia principio-final para esta simulación se determinó al proponer una forma funcional para esta magnitud como lo muestra la ecuación (6.15).

Fisicamente una macromolécula colapsada debe tener un tamaño menor que una macromolécula en solución, y si consideramos que la ecuación (6.21) nos da información acerca del tamaño físico de la macromolécula en solución, y la ecuación (5.51) acerca de la macromolécula colapsada entonces el comportamiento de la distancia principio-final debe ser mayor en la ecuación (6.21) que en la (5.51), esto último se comprueba en las figuras 14 y 15.

## GLOSARIO.

- CAAR Caminata al azar autorrepelente.
- CAS Caminata al azar simple.
- CCC Caminatas que crecen cinéticamente.
- $w$  Una caminata.
- $\Lambda_n$  Conjunto de todas las CAS que empiezan en cero.
- $\Gamma_n$  Conjunto de todas las CAAR que empiezan en cero.
- $\lambda_n$  Secuencia de medidas de probabilidad.
- $G$  Rejilla jerárquica.
- $X_i$  Un sitio en  $G$ .
- $d$  Dimensión de la rejilla  $G$ .
- $b$  Factor de escala.
- $H$  Hamiltoniano.
- $R$  Mapa grupo-de-renormalización.
- $n$  Número de pasos de  $w$ .
- $P(w)$  Densidad de probabilidad de  $w$ .
- $T$  Tiempo total de vida de  $w$ .

## BIBLIOGRAFÍA.

- [1] J. T. Bendler, M. F. Shlesinger, The wonderfool of stochastics, *Stud. Statics. Mech.*, XII (North-Holland, Amsterdam-New York, 1986).
- [2] R. Zwansig, *J. Stat. Phys.* **30**:255 (1983).
- [3] A. Blumen, G. Zumofen, *J. Chem. Phys.* **77**:5127 (1982).
- [4] M. F. Shlesinger, U. Landman, "Solution of physical stochastic processes via mapping onto ideal defective random walk lattices" Collection: applied stochastic processes. (Proc. Conf. Univ. Georgia Athens, 6a 1978), 151.
- [5] D. T. Gillespie, *J. Chem Phys.* **74**:661 (1981).
- [6] G. H. Weiss, Sh Halvin, *J. Stat. Phys.* **63**:1005 (1991).
- [7] A. L. Kholodenko, K. F. Freed. *J. Phys A: Math. Gen* **17**:L191(1984).
- [8] P. Grassberger, R. Hegger. *J Chem Phys.* **102**:6881 (1995).
- [9] P. J. Flory. *J. Chem Phys.* **17**:303 (1949).
- [10] Rodríguez Romo S. *Int. J. Mod. Phys A*. Vol. 12 No. 5 963-974 (1997).  
para aparecer en *J. Stat. Phys.*  
para aparecer en Proceedings DUBN 96, Renormalization group.
- [11] B. Duplantier, *Europhys Lett.* **1**(10) 491-498 (1986).
- [12] B. Duplantier, *J. Physique.* **47**:745-756 (1982).
- [13] B. Duplantier, *J. Physique.* **43**:991-1019 (1982).
- [14] Lawler G. F. Intersection of random walks. (Birkhäuser, Boston 1991).
- [15] Alkhimov V. I. *Physics-Uspkhi.* **23** (6) (1994).
- [16] D. Bridges, S. N. Evans, J. Z. Imbrie, *Ann Probab.* **20**:82 (1992).
- [17] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions. (Clarendon Press, Oxford, 1992).

- [18] N. Madras, G. Slade, *The self-Avoiding Walk*. (Birkhäuser, Boston 1993).
- [19] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of critical Phenomena. An introduction to the Renormalization Group*. (Clarendon Press, Oxford, 1993).
- [20] R. Fernández, J. Frolich, A. D. Sokal, *Random Walk, Critical Phenomena, and Triviality in Quantum Field Theory*. (Springer-Verlag, USA, 1992).
- [21] Z. Alexandrowitz, *J. Chem. Phys.* **51**:561 (1969).
- [22] E. P. Raposo, S. M. de Oliveira, A. M. Nemirovsky and D. Coutinho-Filho, *Am J. Phys.* **59** (7) 1991.
- [23] P. G. de Gennes, *The scaling concepts in Polymer Physics*. Ithaca, Cornell University Press, NY, 1979.
- [24] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C, The art of Scientific Computing*. Cambridge University Press USA 1988.