

LA ECUACION LOGISTICA Y LA FISICA DE LAS TRANSICIONES DE FASE

Jorge L.M. Quiroz - David Thompson

Introducción

En las dos últimas décadas, se ha podido apreciar que el tema de las transiciones de fase y de los fenómenos críticos relacionados con ellas resulta un campo de sostenido interés.

Esto por varios motivos, de los cuales podemos señalar tres: En primer lugar el fenómeno en si, que constituye una atractiva manera de ver actuar a la naturaleza; en segundo lugar, varias transiciones de fase son usadas regularmente en la labor y desarrollo tecnológico actual (basta mencionar el área de ciencias de materiales).

Finalmente, el tema de transiciones de fase no está restringido al campo de la física, sino que -por ejemplo- abarca también fenómenos en la química y en la biología.

En el presente artículo queremos aprovechar el comportamiento diferenciado (conforme variemos el parámetro λ) que muestra la ecuación logística :

$$X_{n+1} = 4\lambda X_n (1-X_n), \quad 0 \leq \lambda \leq 1 \quad (1)$$

para mostrar algunos elementos que se dan en la física de las transiciones de fase.

La ecuación logística

La ecuación (1) es propiamente un mapeo que tiene su origen en el estudio del tamaño de la población de una determinada especie según la variación del tiempo. Fue estudiada de esta manera por Robert May [1] en la Universidad de Princeton.

La forma que tiene la ecuación (1), aplicada al estudio del tamaño de la población de cierta especie, debe contener información sobre la tasa de nacimientos y decesos. Además, si no existe cruce entre una generación y la siguiente (podríamos estar analizando los datos obtenidos en censos realizados periódicamente) no hay problema en considerar una ecuación discreta en el tiempo en vez de continua. Al iniciar el estudio podríamos escoger : $X_{n+1} = aX_n$. Esta expresión sencilla (un modelo *lineal*) indica que a representa el factor de crecimiento y será mayor que uno si la tasa de nacimientos se mantiene superior a la de muertes y menor que uno en caso contrario (la igualdad en las tasas se expresa obviamente por $a = 1$). Sin embargo, en la vida real el modelo es más complejo pues debemos tener en cuenta que la especie analizada está inmersa en un medio del cual recibe el sustento. Si la población creciera en demasía, los recursos se verían mermados y el factor de crecimiento *disminuiría automáticamente*. Con una población máxima este factor sería nulo, de aquí que consideramos mejor un cambio del tipo $a \rightarrow a(1- X_n)$. Este nuevo factor hace que nuestro modelo sea *no lineal*. Apréciase que estamos considerando X_n como la fracción de habitantes según la población máxima. También, mediante el proceso de iteración, la ec. (1) va reportando el nuevo número de ‘habitantes’ en una determinada especie. La variable tiempo está asociada con la variable n .

Para estudiar el comportamiento que tiene el *mapeo logístico* (como también se le conoce sólo basta escoger un valor para λ y partir de un valor inicial para X_n^1 . Luego de operar en la ecuación (1) obtenemos X_1 , que a su turno proporcionará el siguiente valor X_2 . Seguimos así, realizando en cada

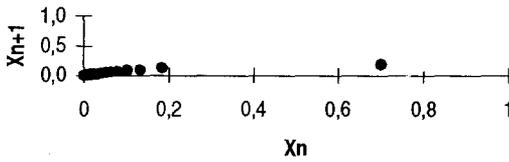
¹ El valor X_0 que da inicio a la cadena de iteraciones recibe el nombre de “semilla”.

turno una secuencia de operaciones simples, y con un poco de paciencia vamos edificando el comportamiento de esta ecuación. Al final encontraremos, según el valor elegido para el parámetro λ , un valor al cual tienden las iteraciones (que denotaremos por X_∞ y al cual llamaremos *punto fijo*), pero además, y aquí está para muchos lo más interesante de esta ecuación, apreciaremos que el mapeo se vuelve impredecible. Pero hay más, antes de llegar a este comportamiento aparentemente aleatorio, otros valores de λ conducen a una serie de oscilaciones (*ciclos límites*) entre determinados valores de X_n , es decir, existe un comportamiento periódico. La siguiente tabla muestra los valores alcanzados por X_∞ según el rango empleado para λ :

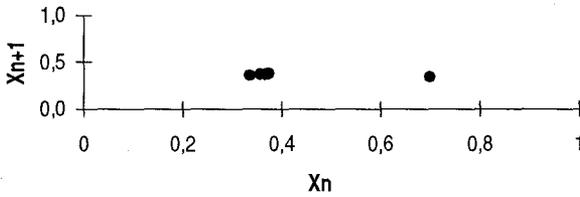
Tabla 1. Comportamiento de X_∞	
<i>Rango</i>	<i>Valor de X_0</i>
$0 < \lambda \leq \frac{1}{4}$	0
$\frac{1}{4} < \lambda \leq \frac{3}{4}$	$1 - \frac{1}{4\lambda}$
$\frac{3}{4} < \lambda \leq \frac{1+\sqrt{6}}{4}$	$\frac{(1+4\lambda)-4\sqrt{\lambda-3/4}(\lambda+1/4)}{8\lambda}$ $\frac{(1+4\lambda)+4\sqrt{\lambda-3/4}(\lambda+1/4)}{8\lambda}$
$\frac{1+\sqrt{6}}{4} < \lambda \leq \frac{3,569}{4}$	<i>Variable y múltiple</i>
$\frac{3,569}{4} < \lambda \leq 1$	<i>caótico</i>

Para facilitar la observación de este comportamiento podemos graficar X_n vs n que mostrará la dirección que toma el mapeo conforme avanzamos en la iteración, sin embargo le animaré a usted que realice esos diagramas (en todo caso puede revisar [2]). A continuación le presentaré otro tipo de diagramas, igualmente útiles, en donde graficamos el *espacio de fase* X_{n+1} vs X_n . Para todos los diagramas de la Fig. (1) la semilla ha sido la misma ($X_0 = 0.7$), además se han tomado los primeros 100 iterados y la única variación viene dada por el valor de λ . Es fácil reconocer en las Fig. (1.1) - (1.6) hacia donde tiende el mapeo apreciando la acumulación de puntos en los diagramas. Los dos primeros muestran un valor fijo y el último delata una distribución en todo el espacio.

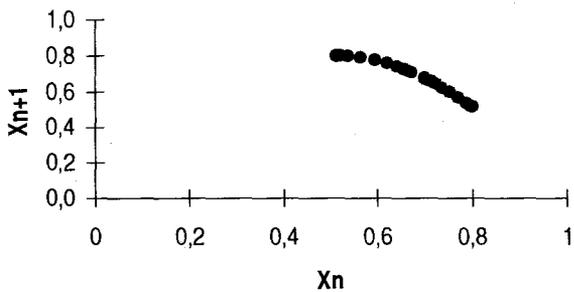
**Fig. (1.1) Diagrama de fase
($\lambda = 0.22$)**



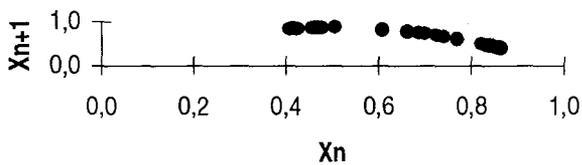
**Fig. (1.2) Diagrama de fase
($\lambda = 0.40$)**



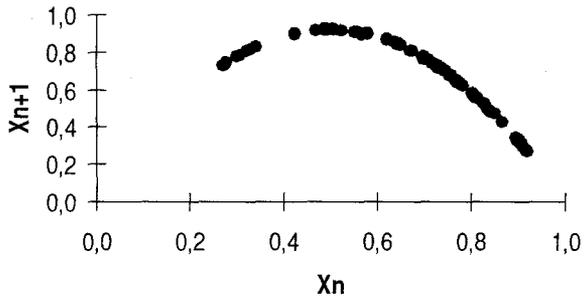
**Fig. (1.3) Diagrama de fase
($\lambda = 0.80$)**



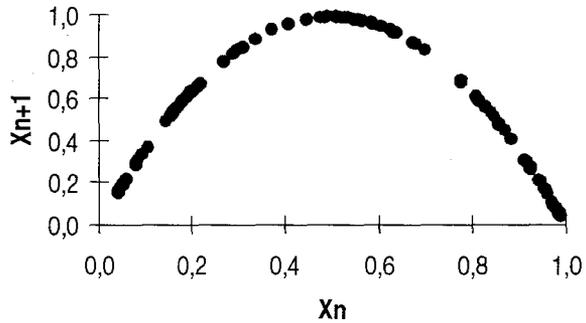
**Fig. (1.4) Diagrama de fase
($\lambda = 0.863$)**



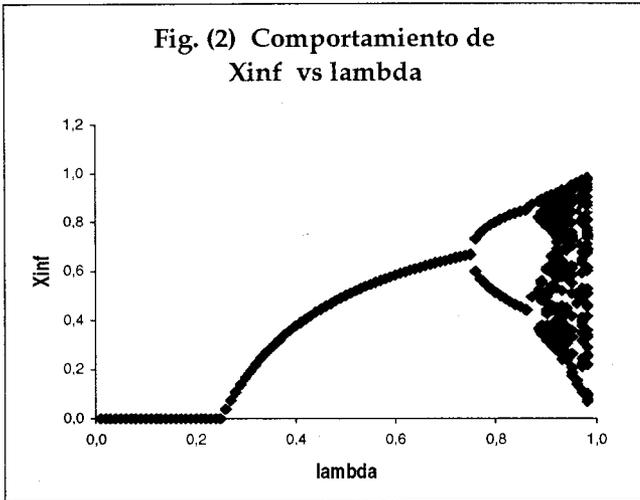
**Fig. (1.5) Diagrama de fase
($\lambda = 0.92$)**



**Fig. (1.6) Diagrama de fase
($\lambda = 0.99$)**



El camino que se sigue hasta el *caos* (ese comportamiento aperiódico del mapeo para valores de λ cercanos a 1) es representado en la Fig. (2) - X_{∞} es denotado por el símbolo X_{inf} - . Se han graficado los distintos valores que alcanza X_{∞} conforme vamos modificando λ . Apreciamos que primero se tiene un valor nulo (la población se extingue!), luego X_{∞} se torna finito distinto de cero y posteriormente, al cruzar $\lambda = 0.75$, aparece un desdoblamiento en los valores que alcanza X_{∞} . La ruta hacia el caos está iniciada.



Las Transiciones de Fase

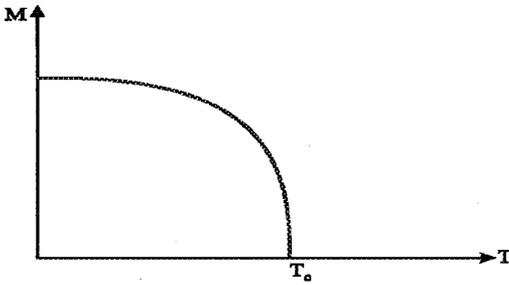
Bueno, detendremos un instante el análisis de la ecuación logística. Es el momento de presentar la relación con las transiciones de fase.

¿Qué es una transición de fase? en pocas palabras es el proceso mediante el cual una sustancia o sistema adquiere una nueva estructura o una nueva propiedad la cual estuvo ausente antes de la transición (por ejemplo, en una transición paramagnética-ferromagnética será el momento magnético espontáneo). Tales transformaciones están caracterizadas por cambios abruptos, discontinuidades y fluctuaciones fuertes de ciertas variables físicas [3] - [4].

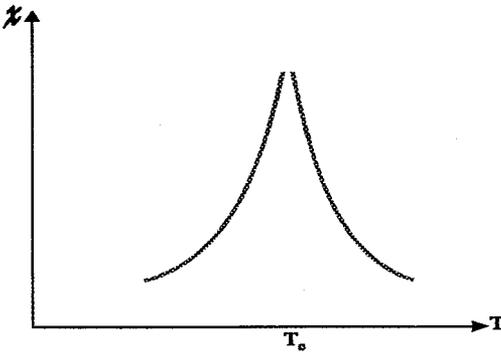
La Fig. (3) presenta el comportamiento de la magnetización M y de la susceptibilidad χ versus la temperatura en una transición de fase ferro-

paramagnética. En el primer diagrama de la Fig. (3) apreciamos que conforme aumentamos la temperatura la cantidad M - asociada con las propiedades magnéticas del material - va disminuyendo en valor. Para cierta temperatura T_c (*temperatura crítica* o también conocida como *temperatura de Curie*) la magnetización se vuelve nula y el material deja de tener - a nivel macroscópico - alguna propiedad magnética de interés. Obsérvese que la transición también se da en sentido contrario, esto es, si empezamos desde una temperatura alta y luego vamos enfriando el material apreciamos un cambio en las propiedades magnéticas de la sustancia.

Fig. (3) Diagramas relacionados con la Transición de fase ferro-paramagnética



Dependencia de la Temperatura de la Magnetización



Dependencia de la Temperatura de la Susceptibilidad

No todas las transiciones de fase son de un mismo tipo. En general, las transiciones de fase se clasifican en :

- Transiciones de primer orden.
- Transiciones de segundo orden, también denominadas continuas o críticas (las primeras derivadas de la energía libre son continuas pero las segundas derivadas son discontinuas o infinitas).

De lo expresado anteriormente y recordando la definición de la magnetización y la susceptibilidad² de la Fig. (3) tenemos, por ejemplo, que la transición ferro-paramagnética es una *transición continua*.

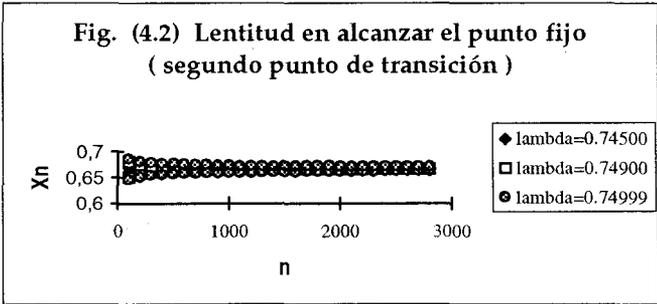
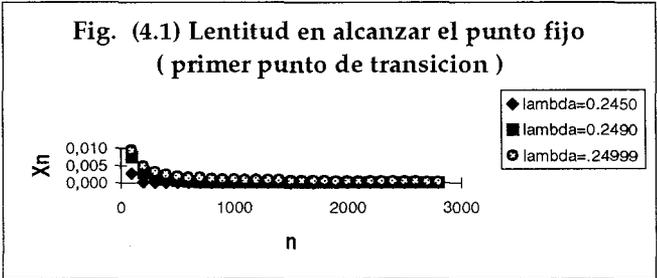
A nivel interno, los constituyentes microscópicos de la materia muestran un alto grado de interrelación. Este fenómeno cooperativo es responsable del comportamiento singular de la susceptibilidad magnética χ mostrado en la segunda gráfica de la Fig (3). Decimos que durante la transición ocurren un conjunto de peculiaridades en la conducta del sistema. Son los *Fenómenos críticos* asociados a la transición de fase continuas. Empíricamente se aprecia que ciertas cantidades asociadas con la transición de fase varían siguiendo la ley de potencias $|T - T_c|^\mu$ en la vecindad de la temperatura crítica T_c . Las cantidades que caracterizan tal comportamiento, tales como μ en la ecuación anterior, se denominan *exponentes críticos*. Ellos son inherentes a las cantidades físicas analizadas y se suponen tener *valores universales* independientemente del material bajo consideración.

Comportamiento crítico de la ecuación logística

Al observar el gráfico de X_∞ vs λ cerca del valor de $\lambda_{c1} = \frac{1}{4}$ (ver Fig. (2)) y comparándolo con el gráfico de M vs T para T cerca de T_c (ver Fig. (3)), apreciamos una gran similitud. Ambas curvas se hacen, o dejan de ser, cero a partir de un valor determinado pudiendo definir claramente el cambio de conducta. Lo mismo podemos afirmar del comportamiento en la vecindad de $\lambda_{c2} = \frac{3}{4}$, si ahora observamos la diferencia entre los puntos fijos alcanzados.

² Si la Energía Libre se obtiene de la función partición Z : $F = -k T \ln Z$, donde T es temperatura y K la constante de Boltzman, la Magnetización se encuentra a partir de $(\frac{\partial F}{\partial H})_T$ y la Susceptibilidad Isotérmica a partir de $(\frac{\partial M}{\partial H})_T$.

Este comportamiento diferenciado y la lentitud en alcanzar su valor definitivo conforme avanzamos hacia el punto de transición (en inglés denominado *critical slowing down*) (ver Fig. (4.1) y Fig. (4.2)) nos lleva a tratar la ecuación logística como un sistema que sufre múltiples transiciones de fase. Por lo tanto, debe manifestarse también una conducta crítica en la región de transición.



Para el estudio del comportamiento crítico del mapeo logístico definimos un *Parámetro de Orden* (cantidad que permite reconocer la presencia de la transición) según el valor de λ empleado.

Cuando λ esté en la vecindad de $\lambda_{c1} = 0,25$, tomamos el valor del punto fijo X_∞ como parámetro que indique el cambio de fase:

$$X_\infty \begin{cases} = 0, & \lambda \leq \lambda_{c1} \\ \neq 0, & \lambda > \lambda_{c1} \end{cases}$$

Según la teoría de las transiciones de fase continuas este parámetro, cerca del punto de transición, se puede expresar mediante la siguiente ley:

$$X_\infty \approx A_1 (\lambda - \lambda_{c1})^{\beta_1}, \text{ donde aquí } \lambda > \lambda_{c1} \quad (2)$$

Cuando $\lambda > \lambda_{c2} = 0,75$ la bifurcación hace su aparición; por lo tanto, tomamos como parámetro de orden la diferencia entre los puntos límites alcanzados (∂), que representa la ‘amplitud’ de la bifurcación:

$$\partial \equiv [X_{\infty\text{MAYOR}} - X_{\infty\text{MENOR}}] \begin{cases} = 0, & \lambda \leq \lambda_{c2} \\ \neq 0, & \lambda > \lambda_{c2} \end{cases}$$

Obsérvese que ahora el parámetro de orden necesita dos números para su definición. Además, de la misma forma que para el primer parámetro, haremos uso de una ley de potencias, dada en este caso por:

$$\partial = [X_{\infty\text{MAYOR}} - X_{\infty\text{MENOR}}] \approx A_2 (\lambda - \lambda_{c2})^{\beta_2}, \text{ donde } \lambda > \lambda_{c2} \quad (3)$$

De lo anterior, tenemos que β_1 y β_2 son los dos primeros exponentes críticos que usaremos.

Asimismo, definimos una *Función Correlación* que mide la relación entre la ‘distancia’ al punto fijo desde una población en el instante actual y la población al inicio. Estas fluctuaciones, cercanas al punto de transición, decaen exponencialmente:

$$\Gamma = (X_0 - X_\infty)(X_n - X_\infty) \underset{n \rightarrow \infty}{\approx} C' \exp\left[-\frac{n}{\tau}\right] \quad (4)$$

donde τ representa el *tiempo de relajación*. Es propiamente un parámetro que nos indica la escala del sistema (viene a estar relacionado con el número característico de pasos para alcanzar el estado final).

Como hemos señalado, en el proceso de la transición ciertos parámetros presentan una discontinuidad. El tiempo de relajación τ presenta una divergencia en el momento de la transición y su comportamiento en la vecindad de ese punto se puede representar mediante la ley :

$$\tau \approx D |\lambda - \lambda_c|^{-\Delta} \quad (5)$$

donde Δ es otro exponente crítico y está definido como un número positivo, al igual que el resto de exponentes críticos tratados.

En el punto crítico mismo, rangos de gran 'longitud' se desarrollan en el sistema, el tiempo de relajación se convierte infinito y las fluctuaciones decaen como una ley de potencias:

$$\Gamma \approx \frac{1}{n^p}, \quad \text{con} \quad \lambda = \lambda_c \quad (6)$$

donde p es el exponente crítico de la ley de potencias para la función correlación.

Resultados del estudio numérico y analítico sobre la ecuación logística

El trabajo se ha concentrado en el estudio del comportamiento de la ecuación logística en los dos primeros puntos críticos. El trabajo no incluye el comportamiento caótico del mapeo que viene a ser, por si mismo, otro tema de investigación.

A continuación mostraremos los resultados numéricos producto de aplicar el formalismo de las transiciones de fase (fenómenos críticos) al mapeo logístico. La ventaja de trabajar analíticamente reside en la posibilidad de encontrar una solución completa y precisa (en la medida de las aproximaciones realizadas) del modelo planteado; sin embargo, no siempre se dispone de una vía sencilla (como por ejemplo, a partir del

segundo punto de transición) y de aquí que surja el interés de realizar un modelado numérico de los datos obtenidos vía recurrencia dentro del mapeo.

Al realizar el ajuste de los datos del mapeo con los distintos modelos planteados en el acápite anterior hemos seguido el *ajuste lineal de mínimos cuadrados* [5] para el caso general :

$$y(x_i) = \sum_{k=1}^M a_k \psi_k(x_i) \quad (7)$$

donde:

- $y(x)$ representa los datos obtenidos del mapeo a ser modelado.
- a_k representa los coeficientes a ajustar buscando el mejor acuerdo entre los datos y_i y el modelo.
- ψ_k representa las *funciones base* del modelo.

Aquí y y x dependerán de las X y las n involucradas en el mapeo. Además, consideramos trabajar con N datos $y(x)$, buscando M parámetros a_k . En general, en nuestros cálculos usamos $N = 21$ y $M = 2$, aunque también se utilizaron otras combinaciones según se comenta en [2].

La función escogida para medir el acuerdo entre los datos y el modelo, denominada *función de mérito*, varía según el conjunto de coeficientes a_k seleccionados. El proceso de ajuste termina cuando se encuentran los mejores parámetros a_k que hacen que la función de mérito alcance un mínimo. En nuestro caso hemos elegido minimizar *Chi-cuadrado* que viene dado por la siguiente expresión:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{y_i - \sum_{k=1}^M a_k \psi_k(x_i)}{\sigma_i} \right]^2 \quad (8)$$

donde y_i representa el i -ésimo dato con una desviación estándar asociada σ_i .

Los resultados obtenidos siguiendo las técnicas numéricas comentadas anteriormente son (ver también desde la Ec. (2) hasta la Ec. (6)):

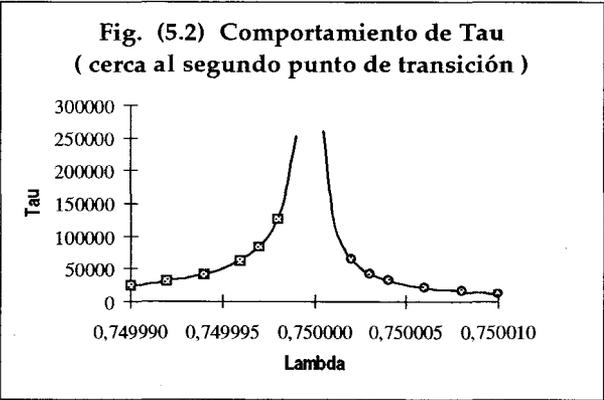
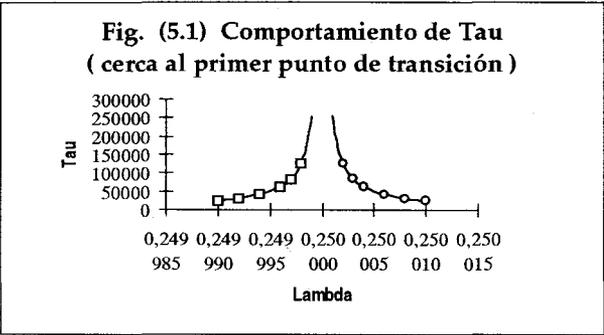
TABLA 2. Valores numéricos de los exponentes críticos analizados

Cantidad	Valor
A_1	3.9981 ± 0.0001
β_1	0.999963 ± 0.000004
A_2	1.33320 ± 0.00001
β_2	0.4999924 ± 0.0000008

Cantidad	Valor
p_1	0.99801 ± 0.00002
p_2 (rama inferior)	0.5599 ± 0.0002
p_2 (rama superior)	0.5599 ± 0.0002

Cantidad	Valor
C_{1-} (antes del pto. crítico)	0.253 ± 0.007
Δ_{1-}	1.000 ± 0.002
C_{1+} (después del pto. crítico)	0.25 ± 0.02
Δ_{1+}	1.000 ± 0.005
C_{2-}	0.26 ± 0.02
Δ_{2-}	0.997 ± 0.006
C_{2+} (rama inferior)	0.124 ± 0.008
Δ_{2+} (rama inferior)	1.003 ± 0.006
C_{2+} (rama superior)	0.124 ± 0.008
Δ_{2+} (rama superior)	1.003 ± 0.006

En la Fig. (5.1) y en la Fig. (5.2) presentamos el comportamiento divergente del tiempo de relajación τ en la vecindad de los dos primeros puntos de transición. Las líneas continuas están formadas por los datos obtenidos del ajuste numérico. Ambos gráficos muestran la misma tendencia divergente del mapeo logístico, con la diferencia - en la Fig. (5.2) - de tener las funciones respectivas coeficientes diferentes.



Un desarrollo analítico, que incluye aproximaciones a la ecuación logística (ver [2]), nos lleva a los siguientes valores bastantes cercanos a los mostrados anteriormente :

TABLA 3. Valores analíticos de los exponentes críticos analizados

Exp. crítico	Valor
β_1	1
β_2	1/2
p_1	1
p_2	1/2
Δ_1	1
Δ_2	1

El conjunto de valores hallados para estos exponentes vienen a caracterizar cada transición sufrida por el mapeo.

Comentarios

Entre lo notable que podemos apreciar señalamos :

- * El comportamiento de $X_\infty(\lambda)$ alrededor de λ_{c1} y λ_{c2} muestra fenómenos críticos que se describen con el lenguaje de las transiciones de fase continuas.
- * El mapeo logístico proporciona un ejemplo de un sistema que experimenta un retardo en alcanzar su estado final conforme nos acercamos al punto de transición.
- * Al ser los parámetros de orden de cada transición de distinta dimensionalidad (en función de las variables necesarias para su definición) se encuentra que los exponentes críticos asociados con estas variables (β_1 y β_2) son distintos. El hecho que p_1 y p_2 sean también distintos permite señalar que las dos transiciones estudiadas son de distinta clase de universalidad.
- * El exponente crítico asociado a la variable que caracteriza la rapidez de convergencia hacia el estado final es el mismo en las dos transiciones.

- * Igualmente es interesante encontrar que el exponente que describe la divergencia del tiempo de relajación para el primer punto de transición sea igual al respectivo exponente del segundo punto. Nos confirma que existe un exponente constante relacionado con la variable 'temporal' que describe la rapidez de la convergencia cerca de los puntos de bifurcación (ver [6]).

Referencias

- [1] May, R. M. (1976) . *Nature* **261**, 459
- [2] Jorge L. M. Quiroz González, "Fenómenos críticos asociados con la ecuación logística". Tesis para optar el grado académico de Magister en Física. PUCP - Junio, 1996 (TC/3/003F. PUCP, 1996).
- [3] K. Huang, "Statistical Mechanics". 2nd Edition , John Wiley & Sons, New York (1987), Cap. 16.
- [4] J.M. Yeomans, "Statistical Mechanics of Phase Transitions". Claredon Press, Oxford (1992), Cap. 2 y 8.
- [5] W. Press - S. Teukolsky - W. Vetterling, "Numerical Recipes in FORTRAN : The Art of Scientific Computing" - B. Flannery 2nd Edition , Cambridge University Press (1992), Cap. 2, 3, y 15.
- [6] Bai-Lin Hao, "Universal slowing-down exponent near period-doubling bifurcation points". *Physics Letters*, Volumen 86A, number 5, 267 (1981)

jquiroz@fisica.pucp.edu.pe
dthomps@fisica.pucp.edu.pe
Departamento de Ciencias - Sección Física
PUCP