

P1 Se desea estudiar, mediante el algoritmo de Metropolis, el coeficiente de expansión λ , como función de la temperatura, de un sistema bidimensional de 60 partículas que interactúan con el potencial

$$V(r_{ij}) = V_0 (e^{1-2r_{ij}} - 2e^{-r_{ij}-1})$$

donde r_{ij} es la distancia entre el par de partículas (i, j) y $V_0 = 20$. Según mecánica estadística una configuración particular $X \equiv (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ tiene asociada la probabilidad

$$W(X) = \frac{e^{-\sum_{ij} V_{ij}/T}}{Z}$$

donde la temperatura se mide en unidades de energía para que no aparezca la constante de Boltzmann y Z es la suma formal $Z = \sum_X W(X)$ de las probabilidades sobre todas las configuraciones posibles.

Puesto que la traslación del sistema como un todo no es interesante, se puede dejar fija a una de las partículas. También puede colocar otra sobre el eje X ($y = 0$) y solo variar su coordenada x , para que así el sistema tampoco pueda rotar.

No se olvide de “termalizar” cada vez que tenga una temperatura nueva y durante la termalización ajuste la formas de generar el X_{prueba} para que la tasa de aceptación no esté muy lejos de $\frac{1}{2}$. Puesto que se trata de una tarea que no queremos que tome demasiadas horas de cómputo haga tan solo 4mil iteraciones midiendo y no más de 500 para termalizar.

El método de Metropolis genera secuencias que normalmente tienen puntos repetidos ya que Metropolis no siempre acepta los cambios. *Iterar una vez al sistema* significa intentar cambiar la posición de cada una de las partículas, una a una. Iterar 500 veces significa iterar al sistema 500 veces. La forma de intentar cambiar la posición de la partícula “k” es efectuar el cambio

$$\begin{aligned} X_k &= X_k + \delta \left(\text{rnd} - \frac{1}{2} \right) \\ Y_k &= Y_k + \delta \left(\text{rnd} - \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Durante las iteraciones de relajación debe dejarse flotar al valor de δ para alcanzar un valor tal que Metropolis acepte alrededor de la mitad de los intentos. En las iteraciones de medición δ debe ser mantenido fijo.

Calcule promedios $L(T)$ con $0,001 \leq T \leq 0,4$ con $dT = 0,01$ y con estos valores dé el coeficiente de expansión, $\lambda = dL/dT$ si es que tiene sentido. Discuta.

Es recomendable usar como configuración inicial para cada T la última obtenida con el T anterior. Obtenga $L(T)$ tanto disminuyendo T y luego aumentando T a partir de la última configuración para el valor mínimo de T .

Es importante que tan solo una vez inicialice las posiciones de las partículas, que esto sea cuando T tenga el valor máximo y en esta inicialización las partículas deben estar muy cerca una de otra.