

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA, FÍSICA TÉRMICA Y
ELECTRÓNICA



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Código de TFG: ETE37

Modelos Computacionales en Física Estadística

Computational models in Statistical Physics

Supervisor/es: Ricardo Brito López

Manuel Fdez-Arroyo Soriano

Grado en Física

Curso académico 2019-20

Convocatoria Extraordinaria

[Simulaciones Interactivas como recurso didáctico]

Resumen:

Esto es una prueba para probar el formato del Resumen. Esto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del ResumenEsto es una prueba para probar el formato del Resumen.

Abstract:

This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.This is a test to prove the abstract's layout.

Nota: el título extendido (si procede), el resumen y el abstract deben estar en una misma página y su extensión no debe superar una página. Tamaño mínimo 11pto

Extensión máxima 20 páginas sin contar portada ni resumen (sí se incluye índice, introducción, conclusiones y bibliografía

Índice

1	Introducción	3
1.1	Física estadística	3
1.2	Simulaciones interactivas	3
1.3	Programación	3
1.4	Recursos didácticos en física	3
2	Breve repaso de mecánica estadística	4
3	Modelos computacionales	4
4	Los applets	5
4.1	Teorema del límite central	5
4.2	Transformaciones del panadero y de Arnold	6
4.2.1	Transformaciones del panadero	6
4.2.2	Transformaciones de Arnold	6
4.2.3	Transformaciones de Arnold no ergódicas	6
4.3	Anillo de Kac	7
4.4	Ergodicidad y entropía en un conjunto de osciladores armónicos	8
4.5	Vibraciones moleculares	9
4.5.1	Calor específico de un gas de moléculas diatómicas	9
4.5.2	Teoría de Debye: Vibraciones de sólidos cristalinos	9
4.6	Expansión libre de un gas	10
4.6.1	Irreversibilidad y fluctuaciones en equilibrio	10
4.6.2	Colectividad macrocanónica	10
4.7	Estadísticas de bosones y fermiones	11
4.8	Modelo de Ising	12
4.8.1	Dimensión y límite termodinámico	12
4.8.2	Transiciones de fase y magnetización	12
5	Conclusiones	13
A	Método de Monte-Carlo	14

1. Introducción

En física hay muchos conceptos que son complicados de entender la primera vez que se aprenden.

Las nuevas tecnologías y en concreto, las aplicaciones web, ofrecen la posibilidad de ilustrar los conceptos de manera interactiva.

Las herramientas computacionales juegan un papel clave en la física moderna. Por lo que programar simulaciones y aprender a tratar con datos en el ordenador son habilidades casi imprescindibles.

1.1. Física estadística

En especial, en física estadística, muchos conceptos son confusos para el estudiante novel.

Por un lado, la estadística es una de las ramas de la matemática más contraintuitiva, los sesgos cognitivos....

Por otro lado, las numerosas aparentes paradojas de la física estadística....

1.2. Simulaciones interactivas

Originalmente se creó una página con un montón de applets de física. Java quedó obsoleto y ya no funcionan.

El objetivo de este trabajo es devolverlos a la vida. Al menos a la parte de física estadística. Y dejar los pasos marcados para tal vez continuar rehaciendo la página original y ampliarla con las ideas de nuevos estudiantes.

Simulaciones numéricas.

Por qué son importantes?

Enfoque docente.

1.3. Programación

Primer intento en Python.

Python vs Javascript.

Javascript como paradigma open-source para la web.

Librerías utilizadas.

Dificultades de creación de los applets.

1.4. Recursos didácticos en física

La importancia del aprendizaje interactivo.

La gamificación.

2. Breve repaso de mecánica estadística

Esta sección y la siguiente deberían ocupar una página y media o dos. Cada vez que se nombra un nuevo concepto, debería haber un enlace al applet que lo ilustra.

La mecánica que gobierna los procesos microscópicos de la materia es invariante bajo inversión temporal, es decir, reversible. Sin embargo, los procesos macroscópicos que observamos son irreversibles. ¿Cómo puede emerger una dinámica irreversible a partir de procesos reversibles?

Paradoja de Loschmidt.

Ludwig Boltzmann reflexionó profundamente sobre este tema y enunció el llamado teorema H. Este teorema es el fundamento estadístico de la segunda ley de la termodinámica.

Hipótesis del caos molecular.

Irreversibilidad y ergodicidad.

Tiempo de recurrencia de Poincaré.

[1]

3. Modelos computacionales

En esta sección sólo comentar cosas importantes de los modelos, y algunos que no se discutan a fondo en este TFG. Debería haber un enlace a un apéndice en que se explique el método de Monte Carlo.

Problemas a la hora de generar números aleatorios

Discusión del método de Monte Carlo.

4. Los applets

4.1. Teorema del límite central

El teorema del límite central (CLT, por sus siglas en inglés) establece que la suma de variables aleatorias sigue una distribución normal (siempre que el número de variables sumadas sea suficientemente grande). La única condición es que las variables que se suman sean independientes y generadas por la misma distribución de probabilidad, de valor esperado y varianza finitas.

Teorema del límite central. Sean $X_i, i = 1, \dots, N$ un conjunto de N variables aleatorias independientes, todas distribuidas según la misma distribución de probabilidad de media μ y varianza $\sigma^2 \neq 0$ finitas. Entonces, cuando N es suficientemente grande (de forma rigurosa, tendiendo a infinito), la probabilidad de que la variable aleatoria Y definida como la suma de las anteriores ($Y = X_1 + X_2 + \dots + X_N$) tome el valor y y siga una distribución gaussiana de media $\mu_Y = N\mu$ y varianza $\sigma_Y^2 = \sigma^2/n$:

$$P_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(y - N\mu)^2}{2N\sigma^2} \right] \quad (1)$$

Hay otras versiones del teorema más generales. Por ejemplo en la de Lyapunov se permite que las variables X_i no estén distribuidas idénticamente, pero se imponen ciertas condiciones sobre los momentos de orden superior de las distribuciones individuales.

Es un ejemplo de la aplicación de la ley de los grandes números de la teoría de la probabilidad.

En el applet se puede elegir el número de variables aleatorias y la distribución de éstas.

En la versión original se podía elegir la distribución con que se generan las variables aleatorias X_i entre tres opciones: Como un dado (del 1 al 6), como una moneda (0 ó 1) y uniformemente distribuidas entre 0 y 1 (ambos incluidos).

En esta nueva versión he añadido otras dos opciones, para ilustrar que no importa que la distribución de partida no sea uniforme: una distribución triangular y una distribución de Poisson ambas normalizadas entre 0 y 1.

[Posible figura: Dos columnas, 5 filas. En cada fila a la izquierda está la distribución de las X y a la derecha el histograma normalizado de Y para $N = 25$, tras 20 tiradas.]

Aplicaciones del CLT.

Debería añadir distribuciones de probabilidad no uniformes, para ejemplificar mejor el contenido del teorema.

4.2. Transformaciones del panadero y de Arnold

4.2.1. Transformaciones del panadero

Esta transformación actúa sobre la región $[0, 1] \times [0, 1]$, contrayendo la dirección y en un factor $1/2$ y expandiendo la dirección x en un factor 2. A continuación, la región con $x > 1$ se corta y se coloca en la parte superior del intervalo $[0, 1]$. La transformación de un punto (x, y) es:

$$\begin{aligned} x' &= 2x(\text{mód}1) \\ y' &= \begin{cases} y/2 & \text{si } x < 1/2 \\ y/2 + 1/2 & \text{si } x > 1/2 \end{cases} \end{aligned}$$

Puede verificarse de manera sencilla que esta transformación conserva el área del espacio Γ . Tiene aplicaciones en óptica, mecánica de fluidos, reconocimiento de patrones

4.2.2. Transformaciones de Arnold

También llamado (Arnold's Cat Map, ya que originalmente arnold lo ejemplificó con un dibujo de un gato).

4.2.3. Transformaciones de Arnold no ergódicas

4.3. Anillo de Kac

El modelo del anillo de Kac es un sencillo modelo matemático que ilustra perfectamente la compatibilidad entre estados macroscópicos y microscópicos, el tiempo de recurrencia de Poincaré y otros aspectos de teoría cinética que en principio pueden parecer paradójicos. Su dinámica es la siguiente:

Modelo del anillo de Kac. *Disponemos N casillas en un círculo. En cada casilla colocamos una bolita, que puede ser de color azul o rojo. También marcamos al azar M sitios o "túneles" entre bolitas. En cada instante de tiempo las bolitas saltan de su casilla a la contigua, siguiendo el sentido de las agujas del reloj. Si en este salto una bolita pasa sobre uno de los M "túneles", al llegar a la nueva casilla habrá cambiado de color.*

A nivel macroscópico, podemos describir el sistema con la cantidad de bolitas de cada color que hay en cada instante de tiempo: $B(t)$ para las azules y $R(t)$ para las rojas. Definamos también el número de bolitas que tienen un sitio marcado delante (aquellas que cambiarán de color en el siguiente instante de tiempo) como $b(t)$ y $r(t)$. En estos términos las ecuaciones de evolución o de balance del sistema serán:

$$B(t+1) = B(t) - b(t) + r(t) \quad R(t+1) = R(t) - r(t) + b(t) \quad (2)$$

Con estas ecuaciones no disponemos de información suficiente para resolver la dinámica macroscópica del sistema. Necesitamos una hipótesis adicional, que juega un papel similar al de la hipótesis de caos molecular en la ecuación de Boltzmann [2].

Hipótesis de caos molecular. [3]

Periodicidad y modificación para no periodicidad.

La simulación es...

Podría añadir más opciones con que distribuir las marcas entre casillas para ejemplificar las gráficas de [3].

4.4. Ergodicidad y entropía en un conjunto de osciladores armónicos

Este applet nos servirá para ilustrar el concepto de ergodicidad:

Tenemos un sistema de N osciladores independientes, cada uno con su frecuencia ω_i , $i = 1, 2, \dots, N$. Podemos describir el estado de cada oscilador con una variable ángulo $\phi_i(t) \in [0, 2\pi)$, de forma que la evolución de cada oscilador viene dada por $\phi_i(t) = \phi_i(0) + \omega_i t$, donde $\phi_i(0)$ es la fase inicial del oscilador. La evolución de cada oscilador está determinada por su frecuencia y su fase.

En principio puede parecer que el sistema siempre será periódico, ya que se trata de un conjunto de osciladores armónicos, cuyo comportamiento individual es *extremadamente predecible*. Sin embargo, eligiendo adecuadamente la forma de obtener las frecuencias, el sistema será ergódico, llegando a un estado de equilibrio, de entropía máxima y no periódico.

La condición que ha de cumplirse para que dos osciladores estén sincronizados es que sus frecuencias tengan algún factor común. Para un periodo T tendremos que $\phi_1(T) = \phi_1(0) + \omega_1 T$ y $\phi_2(T) = \phi_2(0) + \omega_2 T$. Si el factor común $r_{ij} = \omega_i/\omega_j$ es irracional para todo par de osciladores, el sistema es ergódico.

Esto tengo que trabajarlo más. Tal vez preguntar a Parrondo sobre el tema,, ya que la idea del modelo y el applet es suya al parecer.

En este caso la distribución de probabilidad microcanónica es:

$$\rho(x) = \frac{1}{(2\pi)^N}$$

El volumen de un toro N -dimensional donde se mueven las variables ϕ .

En el applet aparecen representados los osciladores como manecillas de reloj, el ángulo de la manecilla es el estado del oscilador. Podemos elegir tanto N como la forma en que se eligen las frecuencias y las fases iniciales.

4.5. Vibraciones moleculares

He decidido juntar estos dos applets en un sólo apartado porque ambos tienen una temática similar: Ejemplificar funciones de física atómica en gráficas a las que puedes cambiar los parámetros.

4.5.1. Calor específico de un gas de moléculas diatómicas

Contribución de vibración y contribución de rotación. En el applet original no aparece la expresión final que planteamos, debería sacarla y ponerla.

Comentar más a fondo qué significan las líneas horizontales y verticales que se marcan.

4.5.2. Teoría de Debye: Vibraciones de sólidos cristalinos

Este applet es sencillo:

Derivar la ecuación del calor específico en un sólido cristalino como hacemos en Física del Estado Sólido:

$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$$

Y representarlo para distintas temperaturas de Debye.

Comentar sobre el gas de electrones, de fonones, la aproximación del campo medio y demás.

4.6. Expansión libre de un gas

Estos dos también los he juntado por la temática común muy obvia del gas. De hecho el código será muy parecido.

4.6.1. Irreversibilidad y fluctuaciones en equilibrio

Gas de partículas con y sin interacción.

Expansión libre en sí.

4.6.2. Colectividad macrocanónica

Ahondar el concepto de función de macropartición.

Diferentes experiencias para distintos tamaños de la región.

4.7. Estadísticas de bosones y fermiones

4.8. Modelo de Ising

4.8.1. Dimensión y límite termodinámico

4.8.2. Transiciones de fase y magnetización

5. Conclusiones

A. Método de Monte-Carlo

Metropolis Monte-Carlo

Referencias

- [1] A. Calles A. Salcido, R. Rechtman. Simulaciones de modelos de teoría cinética como recursos didácticos. *Revista Mexicana de Física*, 36(1):131–145, 1989.
- [2] A. Santos M. López de Haro. Boltzmann y la Segunda Ley.
- [3] M. Oliver G. A. Gottwald. Boltzmann’s dilemma – an introduction to statisticalmechanics via the Kac ring.
- [4] Albert Einstein. Zur Elektrodynamik bewegter Körper. (German) [On the electrodynamics of moving bodies]. *Annalen der Physik*, 322(10):891–921, 1905.
- [5] L. M. Martyusheva and V. D. Seleznevb. Maximum entropy production principle in physics , chemistry and biology, 2006.