

Proyectos de Mecánica Estadística

Pedro Tarazona, curso 2023-24

1.-EFECTOS DE FRONTERA Y CORRELACIONES EN EL MODELO DE ISING 1D (TEÓRICO)

Considerar una cadena lineal abierta de N spines del modelo de Ising, de modo que los spines σ_i de $i = 1$ y de $i = N$ solo tienen un vecino. Ver como se puede escribir su función de partición en términos de su matriz de transferencia y que expresión se obtiene si diagonalizamos esa matriz, en términos de sus autovalores y de su matriz autovectores.

- Obtener la magnetización media $\langle \sigma_i \rangle$ para una cadena muy larga $N \gg 1$, en función de h/T y del índice i , esto es de la distancia al extremo de la cadena. Compararla con el caso de cadena cerrada, en el que todos los sitios son equivalentes.
- Repetir el análisis si consideramos $h = 0$ pero añadiendo dos spines "congelados" (con valores fijos $\sigma_0 = 1$ y $\sigma_{N+1} = 1$) como vecinos de los spines σ_1 y σ_N , respectivamente.
- Calcular la energía libre por sitio en toda la cadena F/N y la magnetización media $\langle \sigma_i \rangle$ en función de i , para $N \gg 1$. ¿Como cambia ese resultado si fijamos $\sigma_0 = 1$ y $\sigma_{N+1} = -1$?
- Repetir el apartado anterior en función de N si consideramos ahora que la cadena tiene un tamaño corto.
- ¿Como podemos aprovechar los resultados previos para analizar la correlación entre spines $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ en una cadena cerrada con $N \gg 1$?

2.-APROXIMACIÓN DE BETHE PARA EL MODELO DE ISING EN 1D, 2D Y 3D (TEÓRICO)

La aproximación de campo medio puede ser mejorada sistemáticamente incluyendo las correlaciones entre spines vecinos. En una red con condiciones de contorno periódicas, para que todos los sitios sean equivalentes, la aproximación de Bethe (BA) se puede obtener suponiendo que consideramos explícitamente el spin de un sitio (digamos σ_0) y el de todos sus ν vecinos σ_j , pero aproximamos el resto del sistema (con $N \gg 1$) mediante un campo efectivo h_{ef} que actúa sobre los ν vecinos, de este modo tenemos un sistema de $1 + \nu$ spines, con un Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{BA} = -h\sigma_0 - h_{ef} \sum_{j=1}^{\nu} \sigma_j - J \sum_{j=1}^{\nu} \sigma_0 \sigma_j,$$

en el que nos queda por determinar cuánto es ese campo efectivo que actúa sobre los spines vecinos de σ_0 . Para ello

- Obtener la magnetización media $\langle \sigma_0 \rangle$ del spin central y la $\langle \sigma_l \rangle$ de cualquiera de los vecinos, en función de J/T , h/T y h_{ef}/T .
- Imponer la condición de auto-consistencia $\langle \sigma_0 \rangle = \langle \sigma_l \rangle$ para obtener una ecuación que nos de h_{ef} , en función de J/T y de h/T .
- Demostrar que para $h = 0$ siempre hay una solución trivial para esa ecuación que corresponde a $h_{ef} = 0$ y que nos da $\langle \sigma_0 \rangle = \langle \sigma_l \rangle = 0$
- Explorar la posible existencia de otras soluciones no triviales, que describan la transición de fase ferromagnética en la cadena lineal (1D), en las redes 2D cuadrada, panal de abeja y triangular y en la red 3D cubica. De darse esas soluciones, calcular numéricamente la temperatura crítica y compararla con los resultados de campo medio.
- ¿Como se podría mejorar sistemáticamente esta aproximación?

3.- METODO DE MATRIZ DE TRANSFERENCIA PARA UNA BANDA CILINDRICA (TEÓRICO)

Considerar el modelo de Ising en una red 2D cuadrada pero con una longitud N_x pequeña (por ejemplo $N_x = 3$ o 4) mientras que para N_y tomamos el límite termodinámico suponiéndola infinita. Con condiciones de contorno periódicas en ambas direcciones, el sistema tiene la forma de un toro estrecho pero muy largo. El método de la matriz de transferencia para obtener el resultado exacto de $Z(t, h, N_x, N_y)$ en esa red se puede aplicar considerando que N_x spins para un valor de $i = 1, 2, \dots, N_y$ dado son una "meta-variable" $\vec{\sigma}_i = (\sigma_{1,i}, \sigma_{2,i}, \dots, \sigma_{N_x,i})$, que puede tomar 2^{N_x} valores.

- Elegir una forma de numerar esos 2^{N_x} posibles valores de $\vec{\sigma}_i$ y escribir la matriz de transferencia \mathcal{T} tal que $Z(T, h, N_x, N_y) = \text{Tr}(\mathcal{T}_y^N)$.
- Diagonalizar (mediante cálculo simbólico o numérico) la matriz \mathcal{T} para extraer su mayor autovalor y utilizarlo para obtener la energía libre por spin $\beta F(T, h, N_x, N_y)/(N_x N_y) = -\log_{(max)}/N_x$, dado para valores de T/J y de h/T dados. Nótese que todos los elementos de \mathcal{T} son una potencia (positiva o negativa) de $x = e^{J/T}$ por otra potencia de $y = e^{h/T}$, de modo que en términos de esas x e y resulta más fácil manejar el álgebra.
- Nótese que para el caso $h = 0$ los elementos de \mathcal{T} son solo potencias (positiva o negativa) de $x = e^{J/T}$. En ese caso, mediante cálculo simbólico o numérico, obtener el mayor autovalor de \mathcal{T} y sus derivadas primera y segunda con respecto a T , sobre un rango de T que cubra el punto crítico del sistema 2D infinito ($J/T_c \approx 0.44$). A partir de esos resultados obtener la energía media $E(T) = \langle \mathcal{H} \rangle$ y la capacidad calorífica $C(T) = dE/dT$. ¿Se observa alguna indicación de esa transición de fase en el sistema con N_x finito?
- Comparar el valor de $F(T, h = 0, N_x, N_y)/(N_x N_y)$ obtenido en el punto anterior con el resultado exacto de Onsager para la red infinita, mediante el cálculo numérico de la integral sobre (k_x, k_y) .
- Dentro de la disponibilidad computacional y mediante cálculo numérico para la diagonalización de \mathcal{T} y el cálculo de derivadas de su mayor autovalor, explorar la misma cuestión de los puntos anteriores para valores más grandes de N_x .

4.- COMPORTAMIENTO CRÍTICO DE LA SOLUCIÓN DE ONSAGER PARA EL MODELO DE ISING EN LA RED CUADRADA (TEÓRICO)

Dada la solución exacta de Onsager para la energía libre del modelo de Ising en una red cuadrada infinita en 2D

$$\begin{aligned} \beta f(T, h = 0) \equiv \frac{F(T, 0, N)}{TN} &= -\frac{1}{N} Z(T, 0, N) = -\log \left(2 \cosh^2 \left(\frac{2J}{T} \right) \right) - \\ &- \frac{1}{8\pi^2} \int \int dk_x dk_y \log \left[1 - \frac{\sinh \left(\frac{2J}{T} \right)}{\cosh^2 \left(\frac{2J}{T} \right)} (\cos(k_x) + \cos(k_y)) \right] \end{aligned}$$

y sabiendo que la temperatura crítica es la que hace $e^{\pm J/T_c} = \sqrt{2} \pm 1$, de modo que $\sinh(2J/T_c) = 1$ y $\cosh(2J/T) = \sqrt{2}$,

- Analizar el comportamiento de $\beta f(T, 0)$ en la vecindad del punto crítico, considerando el desarrollo Taylor del integrando alrededor de $(k_x, k_y) = (0, 0)$
- Analizar el comportamiento de la energía interna por sitio $E/N = T^2 d(\beta f)/dT$ en la vecindad del punto crítico.
- Analizar el comportamiento de la capacidad calorífica por sitio $C/N = d(E/N)/dT$ en la vecindad del punto crítico.
- Mediante integración numérica, obtener la energía y la capacidad calorífica sobre un rango amplio de T , desde bastante por encima a bastante por debajo de T_c y comparar con las predicciones analíticas de los puntos anteriores
- Comparar los resultados anteriores con los que da la aproximación de campo medio, resuelta numéricamente sobre el mismo rango de T .

5.- MODELO DE POTTS EN 1D (TEÓRICO Y SIMULACIÓN MC)

El modelo de Potts considera que la variable σ_i en cada sitio $i = 1, \dots, N$ de una red puede tener q valores distintos ($\sigma_i = 1, 2, \dots, q$) de modo que la "atracción" (la tendencia del sistema a auto-organizarse) solo distingue si el valor de σ_i es igual o no al de σ_j en los pares de sitios vecinos (i, j) . El Hamiltoniano (en ausencia de campos externos que pudiesen favorecer uso u otro valor de σ_i , se escribe como

$$\mathcal{H} = -\epsilon \sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i \sigma_j}$$

con la delta de Kronecker $\delta_{\sigma\sigma} = 1$ y $\delta_{\sigma\sigma'} = 0$ para $\sigma \neq \sigma'$.

- Escribir la matriz de transferencia del modelo de Potts 1D para cualquier q y obtener sus autovalores para el caso $q = 3$.
- Utilizar el resultado anterior para obtener la energía libre en el límite termodinámico ($N \gg 1$) y, mediante su derivada con respecto a T obtener la energía interna $E = \langle \mathcal{H} \rangle / N$ y el valor de la probabilidad de que dos sitios, primeros vecinos, tengan el mismo valor $P_e = \langle \delta_{\sigma_i \sigma_j} \rangle$, siendo $P_n = (1 - P_e)/(q - 1)$ la probabilidad de que tengan uno de las $q - 1$ posibles diferencias.
- ¿Cuál es la probabilidad de que todos los n sitios consecutivos a partir de un sitio cualquiera i tengan el mismo valor de su variable $\sigma_i = \sigma_{i+1} = \sigma_{i+2} = \dots = \sigma_{i+n}$? ¿Cómo depende de la temperatura T/ϵ ?
- Realizar simulaciones de Monte Carlo para anillo 1D periódicos con un valor de N razonablemente grande y con valores de ϵ/T elegidos como representativos (según el cálculo teórico anterior) para comprobar numéricamente los resultados anteriores. ¿Cómo de grande esperamos que tenga ser N para que la simulación de MC sea representativa del límite termodinámico?

6.- TRANSICIÓN DE FASE EN EL MODELO DE POTTS EN 2D (SIMULACIÓN MC)

Hacer un programa de simulación de Monte Carlo para el modelo de Potts en una red 2D cuadrada, de tamaño $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$ con condiciones de contorno periódicas. Las variables, en cada sitio de la red tienen q posibles valores, $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$, y el Hamiltoniano del modelo favorece que sitios vecinos (ij) tengan el mismo valor,

$$\mathcal{H} = -\epsilon \sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i \sigma_j}$$

con la delta de Kronecker $\delta_{\sigma\sigma} = 1$ y $\delta_{\sigma\sigma'} = 0$ para $\sigma \neq \sigma'$.

- Demostrar que para $q = 2$ el modelo es equivalente al modelo de Ising con $h = 0$ y encontrar la relación entre el valor de J/T en Ising y el de ϵ/T en Potts que den el punto crítico para una separación de fases.
- Realizar simulaciones (con un tamaño N ajustado a los medios de simulación de que dispongáis) para el caso $q = 4$ obteniendo algunas configuraciones representativas de como se organizan las variables a temperaturas altas y a temperaturas bajas, para ver cualitativamente la aparición de una transición de fase.
- Decidir como se puede cuantificar esa transición, eligiendo un "parámetro de orden" η que sea (en promedio y dentro de las fluctuaciones térmicas) $\langle \eta \rangle = 0$ si no hay separación de fases, que se haga $\langle \eta \rangle \neq 0$ cuando la transición ocurre y que tienda a $\eta = 1$ si el sistema está totalmente ordenado, con todas sus variables iguales.
- Realizar simulaciones de MC a varias temperaturas para calcular el valor de ese parámetro de orden $\langle \eta(T) \rangle$ y sus fluctuaciones $\langle \eta^2 \rangle - \langle \eta \rangle^2$
- Realizando simulaciones en sistemas más pequeños, analizar la dependencia de $\langle \eta(T) \rangle$ y de $\langle \eta^2 \rangle - \langle \eta \rangle^2$ con N .

7.- SIMULACIÓN DE MONTE CARLO DEL MODELOS XY EN 2D (SIMULACIÓN)

El modelo XY considera una variable por sitio que es un vector unitario en el plano $\vec{\sigma}_i$, que podemos representar mediante su ángulo $0 \leq \phi_i \leq 2\pi$ en coordenadas polares. La interacción entre sitios vecinos (ij) es

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j$$

favorece que tengan la misma orientación, pero (al contrario que el modelo de Potts) distingue entre valores mas o menos cercanos de sus orientaciones.

- Desarrollar una simulación de Monte Carlo sobre una red cuadrada en 2D y utilizarla para observar configuraciones típicas a alta y baja T , identificando visualmente la aparición de una posible transición de fase
- Utilizando un parámetro de orden vectorial $\vec{\eta} = N^{-1} \sum_{i=1}^N \vec{\sigma}_i$, que podemos describir como un numero complejo $\vec{\eta} \equiv \eta e^{i\phi}$, calcular su valor medio $\langle \vec{\eta} \rangle$, el valor medio de su modulo $\langle |\vec{\eta}| \rangle = \langle \eta \rangle$ y el de su modulo cuadrado $\langle \vec{\eta} \cdot \eta \rangle = \langle |\eta|^2 \rangle$, discutiendo la interpretación de cada uno
- Utilizando una sistema relativamente grande, examinar visualmente la formación de vórtices y discutir como se pueden identificar y cuantificar a lo largo de la simulación.

8.- MODELO DE BLUME-HAPEL (TEORÍA Y SIMULACIÓN)

El modelo de Blume-Hapel considera la posibilidad de que se formen vacantes en el modelo de Ising, de modo la variable de cada sitio tiene tres posibles valores $\sigma_i = 0, \pm 1$ y el Hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = -h \sum_{i=1}^N \sigma_i - J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + \Delta \sum_{i=1}^N \sigma_i^2$$

de esta forma el orden ferromagnético puede ser destruido por el desorden de los spines ($\sigma_i = \pm 1$) o por la desaparición de esos spines ($\sigma_i = 0$).

- Desarrollar la teoría de campo medio (o de Weiss) para este modelo con $h = 0$ utilizando como parámetros $T^* \equiv T/J$ y $\gamma \equiv 2e^{-\Delta/T}$.
- Determinar las regiones en el plano (γ, T^*) en las que se predice el sistema estará ordenado ($m \equiv \langle \sigma_i \rangle \neq 0$) o desordenado ($m = 0$).
- Analizar el límite $\Delta \rightarrow \infty$ comparándolo con el modelo de Ising original.
- Preparar y utilizar una simulación de Monte Carlo en una red cuadrada 2D para contrastar los resultados de la aproximación de campo medio, muestreando puntos elegidos en el plano (γ, T^*) .

9.- MODELO DE GAS DE RED EN 2D, COLECTIVOS CANÓNICO Y GRAN CANÓNICO (TEORÍA Y SIMULACIÓN)

El modelo gas de red, para la condensación de un líquido, es isomorfo al de Ising para el orden ferromagnético. Utiliza M variables binarias $n_i = 0, 1$, una en cada "celda" (o "sitio" de una red) con un Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_{i=1}^M n_i - u \sum_{(i,j)} n_i n_j,$$

con parámetros que representa el potencial químico μ y la atracción entre sitios vecinos.

- Para enlazar con la representación de una transición gas-líquido en términos de la densidad de las fases que coexisten, se asume que cada celda del modelo tiene un volumen v_o de modo que el volumen total es $V = v_o N$ y la densidad $\rho = \langle N \rangle / V = \langle \sum_i n_i \rangle / (v_o M)$. Utilizar el isomorfismo con el modelo de Ising para calcular el punto crítico (ρ_c, T_c) del modelo en una red cuadrada 2D tanto de forma exacta como en la aproximación de campo medio.

- Desarrollar y utilizar una simulación de Monte Carlo en el colectivo gran canónico (utilizando cambios $n_i : 0 \rightarrow 1$ y $1 \rightarrow 0$ (en un sitio i elegido a azar) que producen cambios en el numero total de partículas. Utilizar las predicciones teóricas para elegir valores de T/u y de μ/T que muestren la transición de fase.
- Desarrollar y utilizar una simulación de Monte Carlo en el colectivo canónico, de modo que los cambios que se intentan consisten en intercambiar los valores n_i y n_j para pare de vecinos elegidos al azar, de modo que la densidad global del sistema se mantenga constante.
- Discutir a que situaciones experimentales representan cada una de las dos tipos de simulaciones.
- Estudiar la evolución del sistema a lo largo de una simulación de MC canónico y otra gran-canónica si inicializamos el sistema en una configuración con todas las n_i elegidas aleatoriamente y manteniendo $\mu(T)$ en el valor que debe darnos la transición de fase (por comparación con Ising) enfriamos de golpe el sistema, poniendo un valor de T que sea la mitad de la temperatura crítica exacta.

10.- SIMULACIONES DE DINÁMICA MOCULAR (MD) Y DE MONTE CARLO (MC) PARA UN MODELO 2D DE PARTÍCULAS CON INTERACCIÓN REPULSIVA (SIMULACIÓN)

El equilibrio termodinámico se debe poder obtener de formas muy distintas de las que MD (resolver las ecuaciones de movimiento) y MC (muestreo al azar de configuraciones) son casos extremos. En un líquido la función de distribución de pares $g(r)$ se obtiene midiendo la densidad media de otras partículas ($j \neq i$) que hay alrededor de cualquier partícula i medida en cascarras esféricas con $r - \delta/2 \leq |\vec{r}_i - \vec{r}_j| < r + \delta/2$, tomando un paso δ que sea razonablemente pequeño (que permita sacar muchos puntos discretos para la función $g(r)$, pero que no sea tan pequeño que en el tiempo que podemos correr la simulación no tengamos un buen muestreo del numero medio de partículas en cada caja, porque sea demasiado pequeño y fluctuante).

- Desarrollar y utilizar códigos de MD y de MC para simular un líquido 2D con interacciones puramente repulsivas, dadas por una energía potencial entre pares

$$\Phi(r) = \epsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6.$$

Discutir la relevancia de los parámetros ϵ y σ , su papel para determinar la escala de temperaturas y de densidades. También la elección de los parámetros utilizados en cada simulación, como la masa de las partículas y los tiempos de integración en MD, y la elección de movimientos en el MC.

- Utilizar ambos códigos para calcular, eligiendo valores de T y de la densidad media (numero de partículas por área de la caja), la función de distribución de pares $g(r)$, el valor medio de la energía potencial por partícula

$$\langle U \rangle / N = \left\langle \frac{1}{2N} \sum_{i \neq j=1}^N \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \right\rangle$$

y desviación cuadrática media $\sqrt{\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2}$ relativa a $\langle U \rangle$.

- ¿Que comportamiento esperamos para la función $g(r)$ a r grandes? ¿Y a r pequeños? Comparar esas expectativas teóricas con los resultados de las simulaciones.
- Comparar la eficiencia computacional de una y de otra simulación en términos del tiempo de computación necesario para obtener datos de similar calidad.
- Comparar el calculo de $\langle U \rangle$ directo en las simulaciones con el que se puede calcular a partir de la función $g(r)$ como

$$\frac{U}{N} = \frac{\rho}{2} \int d^2 \vec{r} g(r) \Phi(r) = \rho \pi \int_0^\infty dr r g(r) \Phi(r)$$

11.- CRISTALIZACIÓN DE UN FLUIDO DE ESFERAS DURAS (TEORÍA Y CALCULO NUMÉRICO)

El modelo de esferas duras (de diámetro σ) es una energía potencial a pares $\Phi(r) = 0$ para $r \geq \sigma$ e infinita para $r < \sigma$. El modelo contiene lo esencial de la entropía de empaquetamiento molecular, incluyendo la transición desde un fluido (altamente correlacionado pero sin orden a largo alcance) y un cristal en una cúbica FCC. El parámetro adimensional para describir la densidad es la fracción de empaquetamiento $\eta = \pi\rho\sigma^3/6$, que da la fracción del volumen total que esta dentro de alguna de las esferas.

- Calcular el valor máximo (geométricamente posible) de η que corresponde a una red cristalina FCC (o HCP) en la que la distancia entre primeros vecinos $d(\rho)$ es exactamente σ , de modo que no queda nada de holgura para que las partículas del cristal vibren.
- La ecuación de estado para el fluido esta representada por la serie del virial

$$\frac{p}{kT\rho} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} B_{n+1}\rho^n$$

para la que Carnahan y Starling (CS) consiguieron una excelente (cuasi-exacta) aproximación semi-empírica con la forma $B_n = (n^2 + 3n)(\pi\sigma^3/6)^n$. Utilizando la suma de la serie geométrica $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1/(1-x)$ y sus derivadas, demostrar que con esos coeficientes del virial la ecuación de estado de CS tiene una forma compacta

$$\frac{p}{kT\rho} = \frac{1 + \eta + \eta^2 - \eta^3}{(1 - \eta)^3}$$

- Utilizar las relaciones termodinámicas para obtener a partir de la ecuación de estado el exceso de energía libre por partícula, respecto del gas ideal con la misma densidad

$$\frac{\Delta F}{NkT} \equiv \frac{F - F_{id}}{NkT}$$

- Para estudiar la transición de fase del fluido al cristal, según vamos aumentando η , podemos aproximar la energía libre del cristal mediante la "aproximación de volumen libre", en la que fijamos las partículas en una red cristalina FCC con distancia entre vecinos $d(\eta)$ y nos preguntamos cual es el volumen $v_{free}(\eta)$ sobre el que podemos mover el centro de una esfera si dejamos todos sus 12 vecinos quietos en sus posiciones en la red. La forma de esa región es complicada y su volumen resulta muy laborioso de obtener de forma analítica, pero podemos obtenerlo con muy buena precisión mediante una integral numérica en una red regular o mediante el método de Monte Carlo para realizar una integral con integrando constante pero sobre un volumen de forma complicada. Realizar ese calculo para valores de la densidad en los que $d(\eta)$ sea solo ligeramente mayor que σ y comprobar que se puede aproximar bien por $v_{free}(\eta) \propto (d(\eta) - \sigma)^3$.
- Utilizando que, dentro de esa aproximación la energía libre del cristal es $F = -NkT\log(v_{free})$ (es decir una entropía igual a $\log(v_{free})$ por partícula), calcular las densidades de coexistencia entre el fluido (en la aproximación CS) y el cristal, imponiendo igualdad de presión y de potencial químico.

12.- SIMULACIÓN DE UNA PARTÍCULA CUÁNTICA MEDIANTE EL MÉTODO DE LAS INTEGRALES DE CAMINO ("PATH-INTEGRAL") EN DINÁMICA MOLECULAR (SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ANÁLISIS)

Una partícula cuántica en contacto con un baño a temperatura T (lo que en la práctica aplica a cualquier partícula!) no puede describirse como un estado cuántico "puro", sino que es en realidad un estado mezcla, que debemos describir mediante una matriz de densidad con probabilidades $\sim e^{-\beta E_i}$ para cada estado. Dentro del formalismo de las integrales de camino de Feynman, hay una identidad estricta entre una partícula cuántica, de masa m a temperatura T y un polímero cíclico formado por n partículas clásicas de masa m , a una temperatura $T_n = nT$, con esas partículas clásicas unidas entre si por muelles con constante de fuerza $\kappa = mT_n^2/\hbar^2$. La representación se hace exacta en el límite $n \rightarrow \infty$, pero podemos hacer simulaciones clásicas de un polímero cíclico con n grande pero finito y tener ya una buena representación de la partícula cuántica termalizada.

- Considerar una partícula cuántica libre en una dimensión, representada por n (del orden 10^2 o 10^3) partículas clásicas formando ese anillo cíclico, moviéndose sobre el eje x . Las partículas son "fantasmales" pueden pasar

unas sobre otras sin ningún efecto, las únicas fuerzas sobre la partícula i , en posición x_i , son las de los muelles que la unen con las partículas a un lado y al otro:

$$m \frac{d^2x_i(t)}{dt^2} = -\kappa (x_i(t) - x_{i-1}(t)) - \kappa (x_i(t) - x_{i+1}(t))$$

para $i = 1, 2, \dots, n$ e interpretando $i - 1 = n$ para $i = 1$, e $i + 1 = 1$ para $i = N$. Desarrollar un programa de dinámica molecular para describir ese "polímero fantasma" dándoles a las partículas una posición inicial común (para que no haya energía en los muelles) y velocidades elegidas aleatoriamente con una distribución Gausiana de media nula y de valor cuadrático medio $\langle v^2 \rangle = 2nT/m$. Comprobar que después de cierto tiempo, la dinámica del sistema clásico repartirá esa energía para que fluctue alrededor de iguales valores para la energía cinética de las n masas y la energía potencial de los n muelles. Comprobar que promediados en esa situación de equilibrio se tiene

$$\langle v_i^2 \rangle = \frac{nT}{m}$$

y

$$\langle |x_i(t) - x_{i-1}(t)|^2 \rangle = \frac{n T}{\kappa} = \frac{\hbar^2}{n T m}$$

Nota: Utilizar \hbar , m y T como unidades naturales, escalando con ellas tiempos y distancias, para hacer las simulaciones con números razonables, en lo que lo único relevante es comprobar la dependencia con n .

- Puesto que el polímero (plegado sobre el eje x) está compuesto de n segmentos de longitud típica \hbar/\sqrt{nTm} que pueden ir indistintamente hacia la derecha o hacia la izquierda, demostrar que la distancia máxima (longitud total del polímero sobre el eje) $\langle \max(x_i(t) - x_j(t)) \rangle$ es proporcional a \sqrt{n} por la longitud típica y que por lo tanto es independiente de n . Esa es la extensión típica de deslocalización de la partícula cuántica, representada por el polímero clásico. Obtener la distribución de densidad de las partículas clásicas

$$\rho(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \langle \delta(x - x_i(t)) \rangle$$

que representa la probabilidad $|\psi(x)|^2$ para la partícula cuántica y ver que es también independiente de n (para n suficientemente grande) y con anchura $\sim \hbar/\sqrt{Tm}$.

- Pasando a unidades SI, obtener esa distancia de deslocalización cuántica para una partícula termalizada para los siguientes casos:
 - i) Un electrón a 300K, a 3K y a 0.03K
 - ii) Un protón a esas mismas temperaturas
 - iii) Una nanopartícula de oro, de 10nm de diámetro, a las mismas temperaturas
 - iv) Una canica de $m = 1\text{gr}$, a las mismas temperaturas.

La "naturaleza" clásica o cuántica de esos objetos no tiene representación clásica, sino que se trata de un cambio gradual. Una partícula será (en la práctica) clásica cuando su tamaño de deslocalización cuántico es demasiado pequeño comparado con la escala de longitudes relevante para ese objeto. Describir cuales pueden ser esas "escalas relevantes típicas" para los objetos y temperaturas listados arriba y determinar si es apropiado tratarlos como "clásicos", como "cuánticos" o si están en la zona marginal.

13.- TRANSICIÓN DE PERCOLACIÓN GEOMÉTRICA (SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ANÁLISIS)

El problema de la percolación en una red es esencial para muchos efectos en los que lo crucial es la existencia o no de un camino continuo a través de una región. El modelo más simple es una red 2D, que podemos elegir como la cuadrada, en la que elegimos al azar N_s sitios (nodos) del total de N que tiene la red. El parámetro de control es $p = N_s/N$, que nos da la probabilidad de que un nodo cualquiera haya sido elegido.

El problema es ahora preguntarse si, para una elección dada de esos nodos, existe o no un camino, saltando siempre entre nodos vecinos de los que han sido elegidos, que nos lleve de un borde al borde opuesto del sistema. Típicamente podemos tomar condiciones de contorno periódicas en una dirección (digamos la X) y fijar esos bordes en los valores

mínimo (y_{min}) y máximo (y_{max}) de la variable Y . Para comprobar si el sistema percola o no debemos computar los "clusters" (grupos conectados) de nodos que estén unidos entre sí y después ver si alguno de esos clusters percola, es decir si tiene nodos con $y = y_{min}$ y otros nodos con $y = y_{max}$ de modo que sin salir de él se pueda recorrer el sistema de extremo a extremo.

- Buscar o diseñar un buen algoritmo para obtener esos clusters de nodos y comprobar su posible percolación de la forma más eficiente posible. Este es un problema no trivial, que puede consumir un enorme tiempo de computación si no se usa un buen algoritmo.
- Realizar una serie de M experimentos, es decir de elección de los $N_s = pN$ nodos, para calcular la probabilidad de percolación $P(p) = M_p/M$ como el numero de casos en los que si que hay percolación respecto del numero total de intentos. Computar $P(p)$ para distintos valores de p para localizar el valor de transición p_c para el que $P(p)$ deja de ser cero. Esta primera estimación se puede hacer con series relativamente cortas ($M \approx 10$).
- Realizar otra serie de experimentos con un barrido fino alrededor de p alrededor del valor estimado para p_c y utilizando un valor mayor de M (según disponibilidad de calculo), para tener una mejor estimación de $P(p)$ y tratar de ajustarla a una forma $P(p) \propto (p - p_c)^\beta$
- Dentro de la disponibilidad computacional, analizar la dependencia de $P(p)$ con el tamaño de la red N .

14.- DIFUSIÓN NORMAL Y DIFUSIÓN ANÓMALA (TEORÍA, SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ANÁLISIS)

La ecuación de difusión

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t)$$

describe, en "grano grueso" la densidad dependiente del tiempo de partículas que se mueven haciendo caminos aleatorios, independientemente unas de otras. Una posible realización de "grano fino" de estos procesos son partículas que mueven (independientemente unas de otras) dando pasos discretos entre puntos vecinos de una red periódica.

- Considerar una red triangular en 2D de la que las $N \gg 1$ partículas surgen en el punto origen $\vec{r}_0 = (0, 0)$ y realizan t pasos (usando el tiempo de cada paso como unidad), para calcular el desplazamiento cuadrado medio $\langle r^2 \rangle(t) = (\sum_r r^2 N_r(t))/N$ en donde $N_r(t)$ es el numero de partículas que han acabado a distancia $r = |\vec{r}(t)|$ del punto de salida, después de dar t pasos. Obviamente, $\sum_r N_r = N$.
- La densidad de las partículas se puede acumular para promediar entre los M_r sitios a una distancia $r = |\vec{r}|$, para obtener la distribución de densidad $\rho(r, t) = N_r(t)/M_r$, cuya suma sobre todo los puntos debe dar $\sum_r M_r \rho(r, t) = N$ y el desplazamiento cuadrático medio debe ser $\langle r^2 \rangle(t) = (\sum_r M_r r^2 \rho(r, t))/N$.
- Resolver la ecuación de difusión en el plano continuo, desde una condición inicial $\rho(\vec{r}, t = 0) = N\delta(\vec{r})$, y comparar con los resultados en la red para ver si están bien representados por ese límite continuo y obtener el valor de la constante D .
- Para estudiar un sistema con lo que se denomina "difusión anómala", podemos ahora considerar la misma red triangular pero en la que elegimos al azar una mitad de puntos que pasan a estar "prohibidos". Repetir ahora los caminos aleatorios de las N partículas pero de modo que en cada paso solamente puedan ir a aquellos sitios vecinos que no estén prohibidos. Obtener $\langle r \rangle(t)$ y estudiar su dependencia con t . ¿Esta en acuerdo con el resultado de la ecuación de difusión continua?
- Analizar la forma de $\rho(r, t)$ y comparar también con el resultado de la ecuación de difusión normal.

15.- DINÁMICA DE LANGEVIN PARTÍCULAS IDEALES (TEORÍA, SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ANÁLISIS)

Considerar nano-partículas (pequeñas a escala macroscópica pero grandes a escala atómica) que se mueven en un fluido, que produce una fuerza de rozamiento viscoso $\vec{f}_r = -\gamma \vec{v}$. En ausencia de otras fuerzas, esta fricción llevaría a las partículas al reposo (respecto del fluido que se considera un sistema de referencia fijo), pero al ser nanométricas los efectos de la agitación térmica (choques al azar de las moléculas del fluido) deben ser observables y provocar la difusión de las partículas como un camino aleatorio (como utilizó Einstein para su famosa relación entre fricción y

difusión, que permitió "contar" las partículas en un mol, es decir obtener la constante de Boltzmann $k = R/N_A$ a partir de la constante de los gases ideales y el número de Avogadro).

El modelo de dinámica de Langevin incorpora ese efecto diciendo que, en presencia de un posible campo externo con energía potencial $U(\vec{r})$, la fuerza instantánea sobre una partícula, en la posición $\vec{r}(t)$ y con velocidad $\vec{v}(t)$, es

$$\vec{f}(t) = -\vec{\nabla}U(\vec{r}(t)) - \gamma\vec{v}(t) + \vec{f}_r(t)$$

en donde $\vec{f}_r(t) = (\xi_x(t), \xi_y(t), \xi_z(t))$ es un vector de fuerza cuyas componentes son números aleatorios, cuyo efecto debe ser que (en ausencia de campos externos) la velocidad media sea nula, $\langle v \rangle = 0$ pero su valor cuadrático medio sea la que corresponde a la equipartición de la energía, $\langle v^2 \rangle = kT/m$, con la temperatura T del baño y la masa m de las nanopartículas. En donde los promedios $\langle \dots \rangle$ se deben entender indistintamente sobre distintas partículas al mismo tiempo (es decir distintas elecciones de las fuerzas aleatorias $\vec{f}_r(t)$ a cada tiempo), o sobre una única partícula promediado sobre un tiempo largo.

- Para calibrar como debemos elegir esas fuerzas aleatorias, considerar un sistema unidimensional (solo eje X) y en ausencia de campos externos, para el que resolvemos la ecuación de movimiento de forma discreta, con intervalos de tiempo δ_t que sean pequeños respecto del tiempo típico de frenado ($\delta_t \ll m/\gamma$), de modo que partiendo de una situación inicial $x(0) = x_0$ y $v(0) = v_0$ cualquiera, vamos obteniendo las posiciones y momentos a tiempos $t_n = n\delta_t$, con $n = 1, 2, \dots$, como

$$x(t_n) = x(t_{n-1}) + v(t_{n-1})\delta_t$$

y

$$v(t_n) = v(t_{n-1}) + \left(-\frac{\gamma}{m}v(t_{n-1}) + \frac{1}{m}f_r(n) \right) \delta_t$$

en donde ξ_n son una serie de números aleatorios con distribución Gaussiana, de media cero ($\langle f_n \rangle = 0$) de varianza cuadrada $\sigma^2 = \langle (f_n/m)^2 \rangle$ y descorrelacionados entre tiempos distintos $\langle f_n f_{n'} \rangle = 0$ si $n \neq n'$. Obtener, promediando sobre una serie larga de números aleatorios Gaussianos, la relación que hay entre el valor σ para esa distribución Gaussiana de las fuerzas y la velocidad cuadrática media $\langle v^2 \rangle$, tanto calculada como promedio sobre muchas partículas (es decir, distintas series aleatorias) o sobre una sola partícula a lo largo de una sola serie larga. Nótese que podemos utilizar $\tau = m/\gamma = 1$ como escala de tiempos, y $\sqrt{kT/m\tau} = 1$ como escala de longitudes, al resolver las ecuaciones de movimiento, de modo que debemos buscar el valor de σ que haga $\langle v^2 \rangle = 1$ (en esas unidades) y que corresponderá a $\langle v^2 \rangle = kT/m$. ¿Cuál es el valor de ese σ en unidades físicas de kT , m y γ ? ¿Depende ese σ de nuestra elección de δ_t ?

- Realizar simulaciones incluyendo ahora un potencial externo armónico $U(x) = \kappa x^2/2$, eligiendo un valor de κ suficientemente pequeño (siempre en las unidades naturales del problema!), para que en ausencia del ruido térmico la partícula fuese un oscilador armónico sobreamortiguado. Obtener los valores promedios $\langle x(t) \rangle$ y $\langle x(t)^2 \rangle$, comparándolos con los que nos da la aplicación directa de esos valores para un oscilador armónico en el colectivo canónico.
- Considerar ahora las partículas bajo una fuerza constante ($U(x) = -f_0 x$) en una trayectoria bastante larga, obteniendo una "serie de tiempo grueso" para las posiciones $X(t_N) = x(t_n)$ con $t_n \equiv n\delta_t = N\Delta_t$, utilizando un $\Delta_t \gg \tau = m/\gamma \gg \delta_t$. Comprobar que las velocidades medias en esa serie tienen como media la velocidad límite de la partícula, bajo la acción de la fuerza constante y el rozamiento viscoso $\langle v \rangle = f_0/\gamma$ y que la serie $X(t_N)$, con $N = 1, 2, \dots, N_{max} \gg 1$ corresponde con un camino aleatorio sesgado, con $\langle X(t_N - X(t_{N-1})) \rangle = \langle v \rangle \Delta_t$ y obtener la desviación cuadrática media $\Delta X^2 \equiv \langle (X(t_N - X(t_{N-1}))^2 \rangle - \langle X(t_N - X(t_{N-1})) \rangle^2$
- Esta serie corresponde a la dinámica Browniana, como límite de la dinámica de Langevin. ¿Qué relación hay entre ΔX^2 y Δ_t ?

16.- MODELO DE PROPAGACIÓN DE OPINIONES EN UNA RED SOCIAL (MODELIZACIÓN, SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ANÁLISIS)

En una simulación de MC del modelo de Ising las variables $\sigma_i = \pm 1$ se cambian mediante un proceso que las elige al azar y que acepta o no voltearlas según una probabilidad que condicionada por el factor de Boltzmann para el cambio de energía $e^{-\Delta E/T}$. Un proceso similar se puede usar para modelizar como la interacción entre las opiniones

de individuos puede producir patrones globales, describiendo la variable $\sigma_i = \pm 1$ en cada sitio de una red la opinión (a favor o en contra) de cada individuo sobre una determinada cuestión política (una ley, la actuación del gobierno,...), o social (un programa de TV, un libro...), o económica (comprar/vender acciones de una determinada empresa u otros bienes, por la expectativa de que el precio vaya a subir o bajar). Los individuos están conectados entre si por "enlaces", que podemos empezar considerando una red regular periódica de "contactos". Una dinámica que (aunque no se puede derivar de un Hamiltoniano) resulta similar a una simulación de MC corresponde a decir que probamos cambios al azar en la opinión de los individuos, $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$, que los aceptamos siempre si van a favor de la opinión de sus "contactos", es decir si el valor de σ_i antes del cambio tiene signo contrario a la suma de los valores $S_i = \sum_{j \in \text{contactos de } i} \sigma_j$. En caso contrario, (es decir si el cambio $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ le va a poner en contra de la opinión de sus contactos) aceptamos el cambio solo si $e^{-S_i \sigma_i / T}$ es mayor que un numero al azar en el intervalo $[0, 1]$. El parámetro T (que juega el papel de "temperatura") caracteriza lo "influenciables" que son los individuos. Una T grande corresponde a una sociedad poco influenciable, en la que cada individuo puede cambiar su opinión por motivos personales, sin dejarse llevar por la opinión de sus contactos. Por contra, una T muy baja hará que cada individuo de muy peso a la opinión mayoritaria entre sus contactos.

- Desarrollar y explorar los resultados de una simulación de este modelo, sobre una red cuadrada 2D, identificando el rango de T en el que se producen cambios cualitativos en la "opinión media" $\langle \sigma \rangle$.
- Estudiar como cambia el comportamiento del sistema si, en vez de suponer una red regular en la que cada individuo tiene $\nu = 4$ contactos, establecemos la relación de contacto de una forma aleatoria, echando a suertes quien esta conectado con quien. ¿Como dependen el comportamiento del numero total de contactos? ¿Que ocurre si establecemos los contactos de forma que unos pocos individuos tengan muchos mas contactos que la media?
- Una variación interesante es hacer que los contactos no sean permanentes, sino que tengan su propia dinámica. Por ejemplo, podemos intercalar los "cambios de opinión" con cambios en los que el individuo seleccionado rompe uno de sus contactos y establece uno nuevo con otro individuo seleccionado al azar. Ese proceso podemos hacerlo depender de las opiniones a ambos lados, si para el sitio i se elige el enlace con su contacto j , podemos hacer que no haya cambio si $\sigma_i \sigma_j > 0$ (si tienen igual opinión), pero que si que se rompa si $\sigma_i \sigma_j < 0$ (si tienen distinta opinión), eligiendo en ese caso un nuevo contacto j' , al azar entre todos los individuos de la red. Analizar tanto el valor medio de la opinión como la conectividad de la red.

17.- MODELO DE FORMACIÓN DE CONTACTOS EN UNA RED SOCIAL (MODELIZACIÓN, SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ANÁLISIS)

Relacionado con el problema anterior, podemos considerar la evolución *per se* de la red de contactos, sin que dependa de ninguna variable de "opinión". Así podríamos aplicar el modelo a estudiar redes sociales en las que se prima más "el contacto, con carácter general" que las opiniones sobre un asunto concreto.

Desarrollar y explorar un modelo en el que se establecen (initialmente al azar) "contactos" entre $N \gg 1$ individuos. El numero medio de contactos por individuo ν es un parámetro relevante que hay que explorar. Se seleccionan al azar un individuo i y uno de los contactos j que tenga ese individuo, se elige al azar otro individuo cualquiera j' . Si j' ya era contacto de i no se cambia nada y se elige al azar otro nuevo individuo para volver a probar. Si j' no es contacto de i se compara su "popularidad" con la de individuo j . Si j' tiene mas contactos que j , se rompe el contacto (i, j) y se forma el contacto (i, j') ; si j' tiene menos contactos que j se mantiene el contacto inicial (i, j) .

Obtener la evolución de la distribución de numero de contactos ($P(\nu)N$ da cuantos individuos tienen ν contactos), calculando su valor medios $\langle \nu \rangle$ (que debe permanecer constante) y su fluctuación $\langle \nu^2 \rangle - \langle \nu \rangle^2$. ¿Que tipo de distribución $P(\nu)$ se obtiene? ¿Depende del numero medio de contactos?

18.- MODELO SIR DE PROPAGACIÓN DE UN VIRUS (MODELIZACIÓN, SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ANÁLISIS)

El modelo mas simple para como se propaga una enfermedad infecciosa (no letal e inmunizante) contempla tres posibles estados de cada individuo: S (sano), I (infectado), R (recuperado). Las proporciones en la población son $s(t)$, $i(t)$ y $r(t)$, que evolucionan en el tiempo pero siempre suman la unidad $s(t) + i(t) + r(t) = 1$. La descripción determinista (de grano grueso) usa las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\frac{ds(t)}{dt} = -b i(t) s(t)$$

que describe que los individuos que no han sufrido la enfermedad decrecen al ritmo de que se encuentran con un individuo infectado. Una constante b grande representa un virus muy contagioso y una b pequeña es un contagio poco probable. La fracción de "recuperados" se incrementa proporcionalmente a los infectados

$$\frac{dr(t)}{dt} = k \cdot i(t)$$

que se recuperan en un tiempo típico $1/k$, dejando de ser contagiosos y sin que puedan volver a contagiarse, porque han desarrollado anticuerpos frente a ese virus. La variación del numero de infectados esta dada por

$$\frac{di(t)}{dt} = -\frac{ds(t)}{dt} - \frac{dr(t)}{dt}$$

manteniendo la suma total $s(t) + i(t) + r(t) = 1$, puesto que se supone que nadie muere de esa infección.

- Explorar el resultado de resolver esas ecuaciones diferenciales (realmente son solo dos ecuaciones independientes) a partir de una condición inicial $r(0) = 0$, $i(0) = i_0 \ll 1$ (una pequeña intrusión de individuos infectados) y $s(0) = 1 - i_0 \approx 1$ (una población inicial muy sana, pero susceptible a enfermar). El estado final es una situación en la que la infección ha desaparecido ($i(t \rightarrow \infty) = 0$) por lo que las poblaciones $s(t)$ y $r(t)$ tienen valores constantes, que dependerán de los parámetros b y k , y que describen la fracción de la población que ha generado anticuerpos.
- Considerar ahora un modelo discreto, en el que hay unos números $S(t) = Ns(t)$, $I(t) = i(t)N$ y $R(t) = r(t)N$ de individuos en cada estado, con $N \gg 1$. Inicialmente, casi todos los individuos son S , salvo una pequeña cantidad de I que se distribuye al azar Los procesos de infección $S \rightarrow I$ y de recuperación $I \rightarrow R$ ocurren de forma estocástica. Seleccionamos al azar, uno a uno, a un individuo y si está es estado S se le cambia su estado a I (o se le mantiene el S) con una probabilidad que depende de el numero de vecinos que estén en el estado I . Si el individuo seleccionado está en el estado I se le cambia al estado R (o se le mantiene como I) con una probabilidad que es independiente de los estados de los vecinos (la recuperación es un proceso interno). Si se selecciona un individuo en estado R no se hace nada, puesto que ese estado ya es permanente. Demostrar que con $N \gg 1$ y en una aproximación de "campo medio", en la que la probabilidad de pasar de S a I es proporcional a la proporción total de infectados que haya en el sistema, se recuperan las ecuaciones deterministas. ¿Como hemos de elegir las probabilidades de las transiciones en el modelo discreto para que se reproduzcan los valores de los parámetros b y k en la descripción continua?
- Analizar ahora simulaciones del modelo discreto en las que suponemos que los individuos están fijos en una red cuadrada 2D y que la probabilidad de la transición de S a I para el individuo en el sitio i depende de la proporción de I entre sus $\nu = 4$ primeros vecinos. Observar como se distribuyen los individuos en cada estado sobre el sistema. ¿Cambian las cosas si aumentamos el rango de la infección, diciendo que para la probabilidad de infección consideramos tenemos en cuenta todos los vecinos en un rango de distancia mayor?
- ¿Como analizaríamos en este modelo los efectos de confinar a la población, de modo que se reduzcan los contactos fuera de un pequeño entorno familiar?

19.- MODELO DE PROPAGACIÓN DE UN INCENDIO FORESTAL (MODELIZACIÓN, SIMULACION NUMERICA Y ANÁLISIS)

El modelo discreto SIR para propagación de una epidemia, con contagios entre vecinos, se puede reformular para estudiar la propagación de un incendio en un bosque. El estado S corresponde a un árbol vivo, el estado I a un árbol que está ardiendo y el estado R a un árbol que ya se ha consumido del todo. La inicialización se puede hacer con un único individuo I y todos los demás S , o se puede incluir zonas localizadas R (cortafuegos) en los que se ha eliminado la posibilidad de propagación del fuego mediante talas o quemas controladas, o son obstáculos naturales (ríos, zonas rocosas...).

- ¿Que interpretación hemos de darle a los parámetros b y k ? ¿Para que valores de estos parámetros el incendio será mas peligroso? Correr simulaciones, con distintas variantes (con y sin zonas de cortafuego) y describir como cuantificar los resultados.
- En esta interpretación del modelo podemos incluir además el efecto del viento, que resulta crucial para la propagación de los incendios. Para ello podemos fijar una dirección del viento (a lo largo de uno de los ejes de

la red) y decir que los únicos vecinos que contribuyen al calcular la probabilidad de que un árbol se incendie son los arboles en estado I que estén a barlovento del árbol S . La dirección del viento puede usarse también como una variable estocástica, que cambia al azar a lo largo de la simulación, aunque con una escala de tiempo relativamente larga.

20.- MODELO HOPFIELD DE IDENTIFICACIÓN DE PATRONES EN REDES NEURONALES (MODELIZACIÓN, SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ANÁLISIS)

Podemos utilizar un modelo de Ising, sobre una red 2D cuadrada de $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$ spines ($\sigma_i = \pm 1$) para representar una imagen ($\sigma_i = 1$ para "negro" y $\sigma_i = -1$ para "blanco"). Una forma de "almacenar" y de "recuperar" (o "recordar") esa imagen es utilizar un Hamiltoniano en el que se permiten interacciones distintas J_{ij} entre cualquier par de punto (i, j) en la red, de modo que

$$\mathcal{H}(\{\sigma\}_n) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

y Hopfield se preguntó en 1982 como se podrían diseñar esas constantes de interacción J_{ij} (que pueden ser positivas o negativas, mayores o menores) para conseguir que el mínimo de $\mathcal{H}(\{\sigma\}_n)$ fuese precisamente la configuración de $\sigma_i = \xi_i \pm 1$ para unos ξ_i dados (con $i = 1, \dots, N$) que queremos "recordar". Que cada elemento σ_i este conectado con otros muchos (sin una vecindad geométrica restrictiva) parece algo característico de las neuronas en nuestro cerebro, que tienen la peculiar estructura descubierta por Ramón y Cajal que les permite miles de conexiones y con distinto carácter (excitadoras, inhibidoras,...) de modo que es muy sugerente describir el modelo como una "red neuronal".

- Hopfield descubrió que para que el mínimo de su Hamiltoniano correspondiese a un determinado patrón (codificado como $\vec{\xi} \equiv (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$) bastaba con definir las constantes de interacción como $J_{ij} = \xi_i \xi_j$. Demostrar que esto es así y que en realidad el mínimo que se genera está degenerado, porque la imagen "en negativo" cambiando "blanco" por "negro" ($\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$) también es un mínimo. De este modo. Inicializando el sistema de cualquier forma y haciendo una simulación de Monte Carlo del modelo a T muy baja el sistema irá a la configuración que habíamos almacenado, o a la que da la imagen "en negativo".
- Lo interesante del modelo es que podemos almacenar varias imágenes $\vec{\xi}^{(\alpha)}$ (con $\alpha = 1, 2, \dots, n$) (además de sus "negativos" $-\vec{\xi}^{(\alpha)}$) haciendo simplemente la suma de las contribuciones de cada imagen a las constantes de interacción:

$$J_{ij} = \sum_{\alpha=1}^n \xi_i^{(\alpha)} \xi_j^{(\alpha)}$$

de modo que si empezamos en una configuración (un patrón o dibujo en la red) (σ_i)_N y hacemos un MC a baja T el sistema irá a la configuración "aprendida" que sea más parecida a la inicial. Es decir, "reconocerá" el patrón aun cuando solo se lo hayamos dado de forma aproximada o parcial. Programar el modelo, en una red de tamaño razonable (pequeño para que podamos hacer simulaciones de forma rápida, pero lo suficientemente grande para que en la malla $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$) podamos "hacer dibujos" con cierta versatilidad. Diseñar y almacenar dos o tres patrones diferentes, y probar a correr simulaciones bajando paulatinamente T y observar la configuración que aparece como estado de equilibrio a cada T .

- Utilizando el valor de T para el que, en el apartado anterior, se hayan encontrado los diferentes patrones, inicializar la red con un patrón que se parezca a alguno de ellos y ver si la red lo localiza correctamente. ¿Cuán diferente podemos hacer el patrón inicial para que la red todavía lo "reconozca"?
- Probar a almacenar más patrones distintos y ver hasta cuánto podemos "memorizar" en la red y "recordar" de forma eficiente.