תרגיל בית 10 – מונטה-קרלו ומטרופוליס

שאלה 1 – אינטגרציה בשיטת מונטה-קרלו

נתון משטח הנמצא על המישור $z = 0$ ומוגדר ע"י השטח בין האליפסה $\frac{x^2}{2^2} + \frac{y^2}{3^2} = 1$ ובין מעגל ברדיוס $R = 3$. המשטח טעון בצפיפות מטען משטחית:

$$\sigma(x, y) = \sigma_0 - y\sqrt{x^2 + y^2}$$

כאשר $\sigma_0 = 3$ (ביחידות המתאימות).

נחשב את השדה החשמלי בנקודה $(x_0, y_0, z_0) = \left(\frac{1}{2}, 1, 1\right)$. השדה נתון ע"י האינטגרל:

$$\vec{E} = \int_S dx\, dy\, \sigma(x, y) \frac{(x_0 - x)\hat{x} + (y_0 - y)\hat{y} + (z_0 - z)\hat{z}}{((x_0 - x)^2 + (y_0 - y)^2 + (z_0 - z)^2)^{\frac{3}{2}}}$$

(אלו שלושה אינטגרלים: E_x, E_y, E_z).

חשבו את השדה בשיטת מונטה-קרלו, עם הגרלה של 10^6 נקודות. ציירו את הערך של כל אינטגרל (בנפרד), כפונקציה של מספר הנקודות שהוגרלו עד כה. (תוכלו לשנות את גבולות מערכת הצירים, או להראות את התוצאות רק החל מ-N כלשהו, כדי לראות בבירור את ההתנהגות).

שאלה 2 – מטרופוליס במודל אייזינג

הקדמה

בשאלה זו נחשב את המגנטיזציה של מודל אייזינג באמצעות אלגוריתם מטרופוליס.

מודל אייזינג (דו מימדי) מתאר סריג מרובע (עם תנאי שפה מחזוריים) של $L \times L$ חלקיקים עם ספין באחד משני מצבים: $s = \pm 1$. יש אינטראקציה בין ספין לספין, ובין הספין לשדה חיצוני B. האנרגיה של המערכת נתונה ע"י:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

כאשר s_i הוא הספין של חלקיק i, ו-J הוא חוזק האינטראקציה בין הספינים.

בשאלה שלנו, נניח שהאינטראקציה (הסכימה $\langle i,j \rangle$) רק בין <u>זוגות חלקיקים סמוכים</u>, כלומר: כל חלקיק מקיים אינטראקציה רק עם החלקיק שמעליו, מתחתיו, מימינו ומשמאלו.

ניתן לראות שכאשר שני חלקיקים סמוכים הם עם ספין באותו הכיוון, הם מקטינים את אנרגיית המערכת, כלומר: המערכת תעדיף להימצא במצב בו כל החלקיקים עם ספין באותו הכיוון, והכיוון הזה הוא כיוונו של השדה המגנטי החיצוני.

בשאלה שלנו, נניח שהשדה המגנטי החיצוני הוא <u>$B = 0$</u>, וחוזק האינטרקציה בין ספינים סמוכים הוא <u>$J = 1$</u>.

בטמפרטורות נמוכות מאוד, המגנטיזציה הממוצעת של המערכת תהיה 1 או -1, כי כל הספינים יתיישרו באחד הכיוונים, ואין להם העדפה לאיזה כיוון. בטמפרטורות גבוהות, המגנטיזציה הממוצעת של המערכת תהיה סביב 0, כי הרעש התרמי גורם לספינים שלא להתיישר. תהיה טמפרטורה בה יתרחש מעבר פאזה, ומתחתיה המגנטיזציה הממוצעת בשווי משקל תתחיל לעלות או לרדת לכיוון ± 1.

המשימה

הגדירו מערכת של $L \times L$ חלקיקים, $L = 32$. התחילו את המערכת ממצב בו כל ספין הוא בכיוון אקראי.

בצעו $N = 2 \cdot 10^5$ צעדי מטרופוליס, כאשר בכל move אנו בוחרים חלקיק אקראי, ומנסים להפוך את כיוון הספין שלו.

ציירו גרף של המגנטיזציה הממוצעת $M = \frac{1}{L^2}\sum_i s_i$ לאורך התהליך (כלומר: אחרי כל צעד).

עשו את כל זה עבור שתי טמפרטורות שונות:

א. $K_B T = 1$
ב. $K_B T = 10$

שימו לב: הסריג הוא מחזורי, ולכן החלקיקים בשורה הראשונה ובשורה האחרונה (באותה העמודה) הם שכנים, והחלקיקים בעמודה הראשונה ובעמודה האחרונה (באותה השורה) הם שכנים.

טיפ: באלגוריתם מטרופוליס, אין צורך לחשב את האנרגיה של כל המערכת בכל אחד מהצעדים. במקום זה, ניתן לחשב את ΔE שנקבל מה-move. ΔE מושפע רק מהאינטראקציה עם ארבעת השכנים של החלקיק שאנו מנסים להפוך, ולכן הרבה יותר מהיר לחשב אותו מאשר לחשב את אנרגיית כל המערכת בכל צעד.