CompPhys Assignment 09

李尚坤　物理学系　20307130215

1 Hypersphere

1.1 题目描述

The interior of a d-dimensional hypersphere of unit radius is defined by the condition $x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_d^2 \leq 1$. Write a program that finds the volume of a hypersphere using a Monte Carlo method. Test your program for $d = 2$ and $d = 3$ and then calculate the volume for $d = 4$ and $d = 5$, compare your results with the exact results.

1.2 解决方案描述

本题中采用 Hit and Miss Method 进行计算。我们一共在 n 维边长为 2 的立方体中投 N 个点，按照 $x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2 \leq 1$ 选出这 N 个点中位于球内的点的个数，记为 $number$，则球的体积为:

$$V_{sphere} = 2^n \times \frac{number}{N} \tag{1.1}$$

对于一般的 n 维单位球，其体积的严格表达式为 $V = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} r^n$。

1.3 伪代码

Algorithm 1: Hypersphere

Input: The dimension n, the number of points N

Output: The volume of n-dimensional hypersphere

for $i \leftarrow 1$ **to** N **do**
    for $j \leftarrow 1$ **to** n **do**
        $x_j \leftarrow$ random(-1,1)
    end
    if $\sum_1^n x_i^2 \leq 1$ **then**
        $number \leftarrow number + 1$
    end
end
$V \leftarrow 2^n \times \frac{number}{N}$
return V

1.4 输入输出示例

本题中我们设定取样点数 $N = 60000$，分别输出 $2 \sim 5$ 维的单位球体积。

维数 n	计算结果	理论结果	相对误差
2	3.14067	3.14159265	-0.029%
3	4.21533	4.18879020	0.63%
4	4.92347	4.93480220	-0.23%
5	5.23627	5.26378901	-0.52%

表 1: 输入输出结果

程序在终端运行时的输出结果如下：

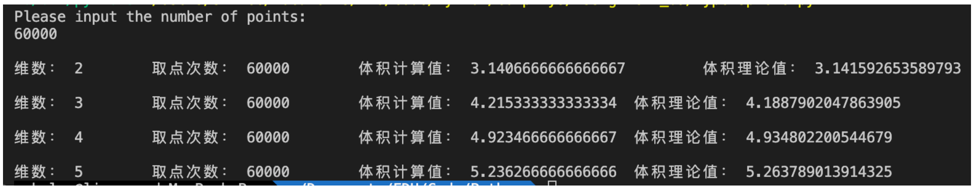

图 1: Hypersphere

可以看见，当撒点次数为 60000 次时，相对误差均在 1% 以内，如需要更高精度的结果，则应当进一步增加撒点次数。

1.5 用户手册

1. 本程序的源程序为 Hypersphere.py
2. 在执行源程序之前，应当先安装 numpy, math,random 库
3. 本程序分别利用 Hit and Miss Method 求解高维空间中单位球的体积
4. 运行程序后，将在 Terminal 中弹出提示语："Please input the number of points:"，提示您输入需要取点的个数
5. 输入之后按下回车键，将在终端依次输出 $2 \sim 5$ 维的单位球体积

2 Heisenberg Spin model

2.1 题目描述

Write a MC code for a 3D Face-Centered Cubic lattice using the Heisenberg spin model (adopt periodic boundary condition). Estimate the ferromagnetic Curie temperature.

$$H = -J \sum_{<i,j>_{NN}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j,\ J = 1,\ |\vec{S}_i| = 1 \tag{2.1}$$

2.2 解决方案描述

本题为一个经典的三维海森堡模型，我们的求解将分为以下 5 个部分。

1. 产生随机取向的自旋矢量。在本题中，格点的自旋是一个任意取向但长度为 1 的矢量。为了生成一个 3 维随机分布的单位矢量，我们需要生成两个角度，其中一个是矢量与 z 轴夹角 θ，另一个是矢量在 x-y 平面上的投影与 x 轴夹角 ϕ。θ 的产生方式是生成一个-1 到 1 之间的均匀分布随机数，然后通过取反余弦得到。ϕ 的产生是直接生成一个在 $[0, 2\pi]$ 之间均匀分布的随机数。
2. 计算单个格点的能量。对于本题中的面心立方晶格，我们以一个顶角为起点，到三个面心为终点的三个非正交矢量作为基矢对格点进行描述。海森堡模型中仅考虑近邻相互作用，忽略次近邻相互作用。因此当考虑某一格点的能量时，我们只考虑与该格点相差某一单位基矢的近邻格点与其的相互作用。然后再在边界处利用周期性条件即可。
3. 计算体系整体的能量。将上一步骤中计算出的每一个格点的能量相加除以 2 即可。（因为直接相加会重复计算相互作用能）
4. 随机挑选出一个格点，重新随机生成一个自旋矢量，计算能量的改变量 ΔE。若 $\Delta E < 0$，则接受该改变；若 $\Delta E > 0$，则以 $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$ 的概率接受该改变。重复该步骤多次以得到体系平衡态。
5. 对多个温度值进行上述操作，作出温度-能量图像，观察得到居里温度。

2.3 伪代码

由于伪代码过长，我们分为两部分展示，分别为 Heisenberg Spin Model Part 1 和 Heisenberg Spin Model Part 2。代码中的 Spin 变量是一个存储有格点自旋状态的 3 维矩阵

Heisenberg Spin Model Part 1 中包含用于生成三维随机变量的函数 Random_Spin()；用于计算单个格点与最近邻格点相互作用能的函数 Energy_single(i,j,k,Spin)，其中利用了周期性边界条件；用于计算所有格点相互作用能的函数 Energy_total(Spin)；以及最重要的，用于实现 Metropolis 算法的函数 Metropolis_MC(Spin,T)。

Heisenberg Spin Model Part 2 中包含函数 loop(N,T)，用于计算一个温度值 T 下体系达到平衡态时的能量，我们通过多次迭代，并取迭代的最后 100 次的能量值作为体系能量的平均值。最后我们通过取多个温度值，依次计算出对应温度下体系的平衡能量值，最后绘制出能量随温度的变化曲线。通过观察图像，就可以得出居里温度。

Algorithm 2: Heisenberg Spin Model Part 1

Input: The number of lattice N

Output: Plot the figure of $Energy \sim T$

```
def Random_Spin():    //generate the random spin vector
    φ ←random(0, 2π)
    θ ← arccos(random(−1, 1))
    return φ, θ
end
def Energy_single(i,j,k,Spin):    //calculate the single lattice's energy
    if (i, j, k) is at the boundary then
        Using the periodic condition
    else
        neighbour ← the spin vector of the 12 near lattices
    end
    for each spin vector in neighbour do
        single_energy ← single_energy + vector · spin
    end
    return single_energy
end
def Energy_total(Spin):
    for each vector in Spin do
        total_energy ← total_energy + Energy_single(the position of vector)
    end
    return total_energy/2
end
def Metropolis_MC(Spin,T):    //Get the stable state
    i, j, k ← random(0, N − 1)    //Select a lattice randomly
    E_1 ← Energy_single(i, j, k, Spin)
    tem ← Spin[i, j, k]
    Spin[i, j, k] ←Random_Spin()
    E_2 ← Energy_single(i, j, k, Spin)
    α ← min(1, e^(−(E_2−E_1)/(k_B T)))
    if α < random(0, 1) then
        Spin[i, j, k] ← tem
    end
end
```

Algorithm 3: Heisenberg Spin Model Part 2

Input: The number of lattice N

Output: Plot the figure of $Energy \sim T$

```
def loop(N,T)   //Get the average stable energy of the model at T
    Ē ← 0
    for i ← 1 to max_loop_times do
        Metropolis_MC(Spin,T)
        if i > max_loop_times − 100 then
            Ē ← Ē+Energy_total(Spin)
        end
    end
    Ē ← Ē/99
    return Ē
end
for T in (0,5) by step = 0.2 do
    E ← loop(N,T)
end
PLOT the figure of E-T
```

2.4 输入/输出示例

不失一般性，我们取 $J=1, k_B=1$。在本题中我们取格点数目为 $N\times N\times N=10\times10\times10$。

由于事先并不知道居里温度在何处，我们在 $T\in(0,10)$ 的范围内绘图，如下左图所示。居里温度对应的点二阶导为 0，图中我们可以发现距离温度点在 $0\sim5$ 之间。

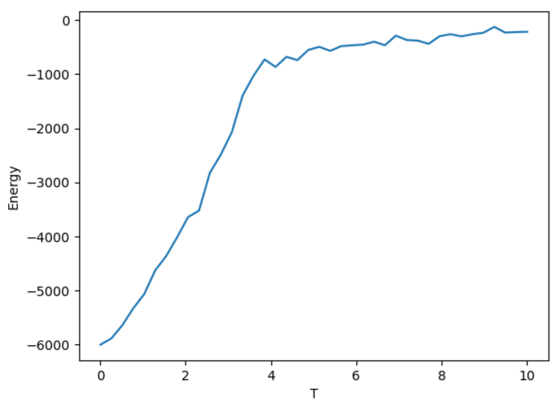

图 2: $\bar{E}\sim T$ 图

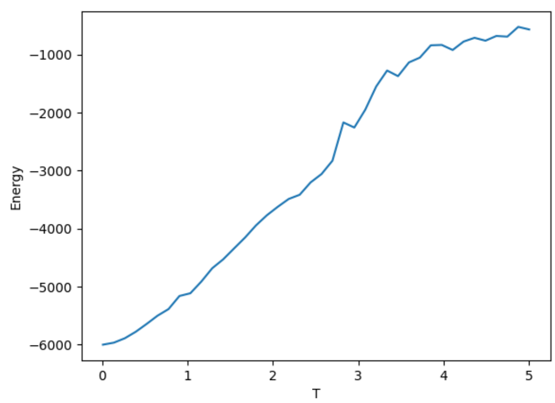

图 3: $\bar{E}\sim T$ 图

于是我们在 $T\in(0,5)$ 的范围内绘图，如上右图所示，可以发现居里温度在 4.0 左右。

2.5 用户手册

1. 本程序的源程序为 Heisenberg_spin.py
2. 在执行源程序之前，应当先安装 numpy, matplotlib, math，random 库
3. 本程序利用蒙特卡洛方法计算面心立方堆积的 Heisenberg Spin Model。
4. 运行程序后，将绘制出体系平衡时的能量随温度变化关系
5. 本程序计算量较大，还请您耐心等待