

计算物理作业 9

杨远青 22300190015

CompPhys 24

2024 年 12 月 11 日

破晓时分。

1 题目 1：超球体积计算

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 程序描述

本程序用于估计 n 维单位超球体的体积，并通过蒙特卡洛方法进行比较分析。主要功能包括：

- 动画演示 2 维和 3 维下的蒙特卡洛采样过程。
- 使用简单的均匀采样和重要性采样两种方法对 1 到 20 维的单位超球进行体积估计，并与理论值比较。
- 在高维数据下通过 PCA 降维进行可视化，并绘制误差、计算时间等分析图表。

在这里， n 维单位超球体指的是半径为 1 的 n 维球体（n-ball），即集合 $\{x \in \mathbb{R}^n : \|x\| \leq 1\}$ 其理论体积公式为：

$$V_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)}$$

1.2.1 简单均匀采样

在 \mathbb{R}^n 空间中从 $[-1, 1]^n$ 的均匀分布中采样 `num_samples` 个点，统计其中有多少点在单位超球体内，计算落入比例与超立方体的体积 2^n ，从而估计体积。该方法在高维空间收敛较慢，误差较大，因为高维空间中单位超球体的体积占整个超立方体的比例很小，采样集中在浅表面。

1.2.2 重要性采样

本程序的重要性采样使用多元正态分布 $N(0, \sigma^2 I)$ 作为提议分布 $q(x)$ 进行采样，即

$$q(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left(-\frac{\|x\|^2}{2\sigma^2}\right)$$

采样后统计各点到原点的距离，定义指示函数 $f(x) = 1_{B_n}(x)$ 表示该点是否在单位球内（在则为 1，否则 0）。该提议分布采样的点集中在原点附近，更容易采样到单位球内的点，从而提高采样效率。若定义相对于 *Lebesgue* 测度 dx 的目标分布 $p(x) \equiv 1$ （其不满足归一化，故不是狭义的概率分布），则可将体积估计问题转化为期望值问题：

$$\int f(x)p(x)dx = \int f(x) \cdot 1 dx = \int_{\mathbb{R}^n} f(x)dx = V_n$$

重要性采样通常要求良好概率分布的提议分布 $q(x)$ ，满足 $\int q(x)dx = 1$ ，将难以直接采样的期望问题进行转化

$$\mathbb{E}_p[f(X)] = \int f(x)\frac{p(x)}{q(x)}q(x)dx = \mathbb{E}_q\left[f(X)\frac{p(X)}{q(X)}\right]$$

本题的目标分布为常函数 1，故只需要如下估计超球体积

$$\hat{V}_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{q(x_i)}$$

本程序还有一些辅助的可视化工具，在此不一一赘述。用户在 `src` 目录下运行 `python -u hypersphere.py` 即可运行程序，需安装辅助计算的 `numpy` 库与绘图用的 `matplotlib` 库，对于重要性采样，因追求较高精度，默认采样点数较多，故运行时间较长，故建议安装 `tqdm` 库以显示进度条。在主菜单中，用户可以选择

- (1) 动画演示（仅 2 维或 3 维）
- (2) 简单均匀采样分析（1 20 维），并可选择可视化采样点。
- (3) 重要性采样分析（1 20 维），并可选择可视化采样点。

在二级菜单中还将可以自定义一些参数，如采样点数、最大计算维度，提议分布标准差与试验次数等，详见下文的伪代码与结果示例。

1.3 伪代码

Powered by [L^AT_EX pseudocode generator](#)

Algorithm 1: Main Program

Input: $max_dim, num_samples, num_trials, method, \sigma$ (optional)

Output: Results for dimensions 1 to max_dim

```

1 for  $d \leftarrow 1$  to  $max\_dim$  do
2    $exact \leftarrow exact\_volume(d)$ ;  $estimates \leftarrow []$ ;
3   for  $trial \leftarrow 1$  to  $num\_trials$  do
4     if  $method = uniform$  then
5        $v \leftarrow monte\_carlo\_uniform(d, num\_samples)$ ;
6     end
7     else
8        $v \leftarrow importance\_sampling\_volume(d, num\_samples, \sigma)$ ;
9     end
10     $estimates.append(v)$ ;
11  end
12   $mean, std, rel\_err \leftarrow analyze(estimates, exact)$  ;                                // Compute statistics
13 end
14 return All results;
```

Algorithm 2: Uniform Sampling

Input: $n, num_samples$ **Output:** Estimated volume

- 1 $points \leftarrow \text{random uniform in } [-1, 1]^n$;
 - 2 $distances \leftarrow ||points||^2$;
 - 3 $count \leftarrow \text{sum}(distances \leq 1)$;
 - 4 **return** $2^n \cdot (count/num_samples)$;
-

Algorithm 3: Importance Sampling

Input: $n, num_samples, \sigma$ **Output:** Estimated volume

- 1 $samples \leftarrow \text{normal}(mean = 0, cov = \sigma^2 I_n, num_samples)$;
 - 2 $distances \leftarrow ||samples||^2$;
 - 3 $f_x \leftarrow (distances \leq 1); q_x \leftarrow (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \cdot e^{-distances/(2\sigma^2)}$;
 - 4 $weights \leftarrow f_x/q_x$;
 - 5 **return** $\text{mean}(weights)$;
-

1.4 结果示例

1.4.1 简单均匀采样

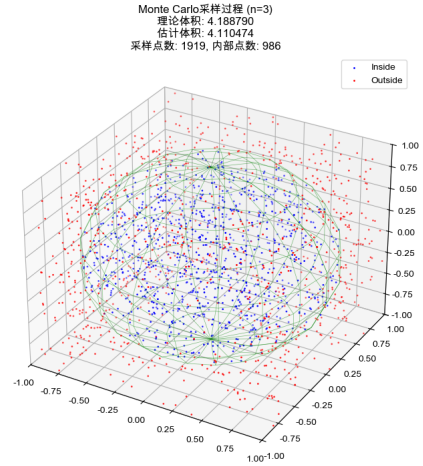
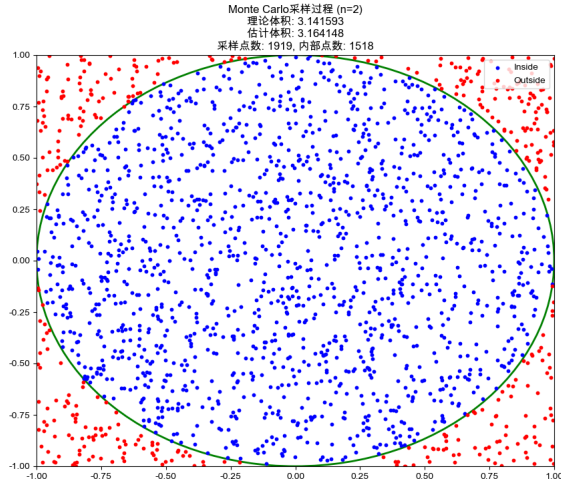


图 1: 二维与三维简单采样动画截图

```

C (base) gilbert@Gilbert-YoungMacBook src % python hypersphere.py

=== 高维单位超球体 (n-ball) 体积估计程序 ===
请选择操作：
1. 动画演示采样过程 (适用于n=2,3)
2. 简单均匀采样分析 (适用于n=1~20)
3. 重要性采样分析 (适用于n=1~20)
4. 退出

请输入选择 (1/2/3/4) : 2
请输入最大维度 (1~20) [默认20]:
请输入每次采样的样本数量 [默认114514]:
请输入试验次数 [默认100]:

分析中...
100% | 20/20 [00:11<00:00, 1.73it/s]
2024-12-02 19:49:31.804 python[3548:53613] +[IMKClient subclass]: chose IMKClient_Modern
2024-12-02 19:49:31.804 python[3548:53613] +[IMKInputSession subclass]: chose IMKInputSession_Modern
2024-12-02 19:49:36.890 python[3548:53613] error messaging the mach port for IMKCFRunLoopWakeUpReliable
2024-12-02 19:49:38.191 python[3548:53613] The class 'NSSavePanel' overrides the method identifier. This method is implemented by class 'NSWindow'

详细结果：

```

维度	理论体积	估计体积	相对误差 (%)	计算时间 (s)
1	2.000000e+00	2.000000e+00	0.00	0.056
2	3.141593e+00	3.141572e+00	0.00	0.151
3	4.188790e+00	4.190438e+00	0.04	0.198
4	4.934802e+00	4.934073e+00	0.01	0.246
5	5.263789e+00	5.267325e+00	0.07	0.295
6	5.167713e+00	5.163559e+00	0.08	0.349
7	4.724766e+00	4.715592e+00	0.19	0.393
8	4.058712e+00	4.079761e+00	0.52	0.447
9	3.298509e+00	3.297726e+00	0.02	0.512
10	2.550164e+00	2.554053e+00	0.15	0.523
11	1.884104e+00	1.895912e+00	0.63	0.617
12	1.335263e+00	1.341678e+00	0.48	0.664
13	9.106288e-01	8.985060e-01	1.33	0.715
14	5.992645e-01	5.694354e-01	4.98	0.772
15	3.814433e-01	3.891618e-01	2.02	0.844
16	2.353306e-01	3.033173e-01	28.89	0.896
17	1.409811e-01	1.945809e-01	38.02	0.914
18	8.214589e-02	9.156749e-02	11.47	0.891

图 2: 简单均匀采样终端输出

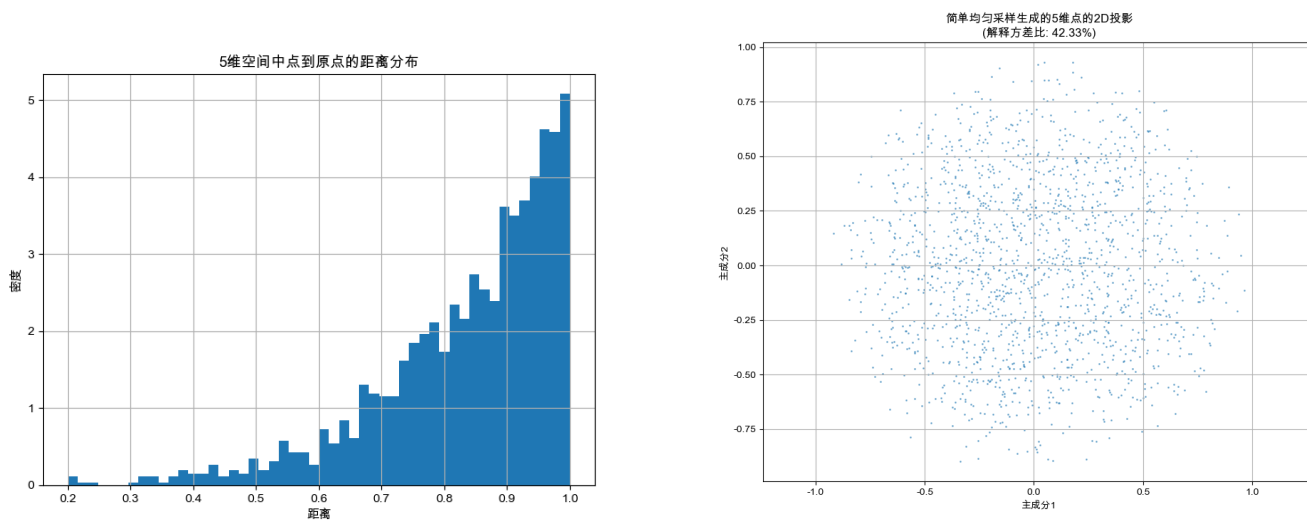


图 3: 简单均匀采样点分布与 PCA 主成分分析 (5 维)

n维单位超球体体积分析 (简单均匀采样)

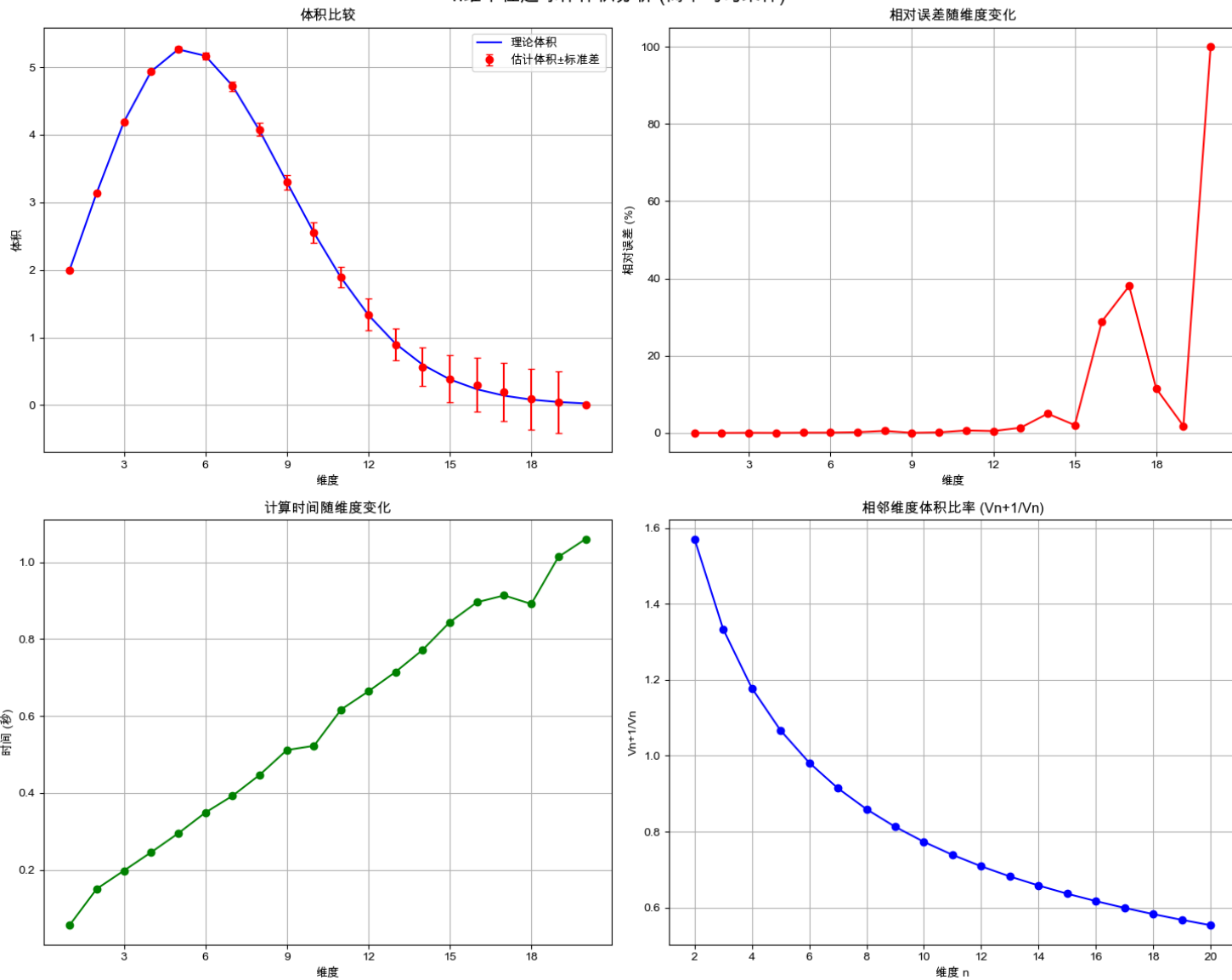


图 4: 简单均匀采样结果分析

可见在高维还是表现不容乐观的，需要借助重要性采样。

```
(base) gilbert@gilbert-YoungMacBook:src % python hypersphere.py
```

```
=== 高维单位超球体 (n-ball) 体积估计程序 ===  
请选择操作：  
1. 动画演示采样过程 (适用于n=2,3)  
2. 简单均匀采样分析 (适用于n=1~20)  
3. 重要性采样分析 (适用于n=1~20)  
4. 退出  
  
请输入选择 (1/2/3/4) : 3  
请输入最大维度 (1~20) [默认20]:  
请输入采样的样本数量 [默认1919810]:  
请输入提议分布的标准差 [默认0.5]:  
请输入试验次数 [默认100]:  
  
分析中...  
100% | 20/20 [15:31<00:00, 46.57s/it]  
2024-12-02 19:34:24.001 python[1853:17902] +[IMKClient subclass]: chose IMKClient_Modern  
2024-12-02 19:34:24.001 python[1853:17902] +[IMKInputSession subclass]: chose IMKInputSession_Modern  
2024-12-02 19:34:37.995 python[1853:17902] error messaging the mach port for IMKCFRunLoopWakeUpReliable  
2024-12-02 19:34:38.396 python[1853:17902] The class 'NSSavePanel' overrides the method identifier. This method is implemented by class 'NSWindow'
```

详细结果：

维度	理论体积	估计体积	相对误差 (%)	计算时间 (s)
1	2.000000e+00	1.999995e+00	0.00	5.239
2	3.141593e+00	3.141818e+00	0.01	13.018
3	4.188790e+00	4.188722e+00	0.00	18.405
4	4.934802e+00	4.934436e+00	0.01	22.586
5	5.263789e+00	5.263612e+00	0.00	23.601
6	5.167713e+00	5.167596e+00	0.00	27.892
7	4.724766e+00	4.724776e+00	0.00	30.678
8	4.058712e+00	4.059015e+00	0.01	35.087
9	3.298509e+00	3.297827e+00	0.02	41.506
10	2.550164e+00	2.549947e+00	0.01	46.036
11	1.884104e+00	1.883534e+00	0.03	48.678
12	1.335263e+00	1.334850e+00	0.03	62.208
13	9.106288e-01	9.118455e-01	0.13	63.531
14	5.992645e-01	5.988328e-01	0.07	53.220
15	3.814433e-01	3.814017e-01	0.01	54.355
16	2.353306e-01	2.355565e-01	0.10	74.189
17	1.409811e-01	1.409728e-01	0.01	63.344

图 5: 重要性采样终端输出

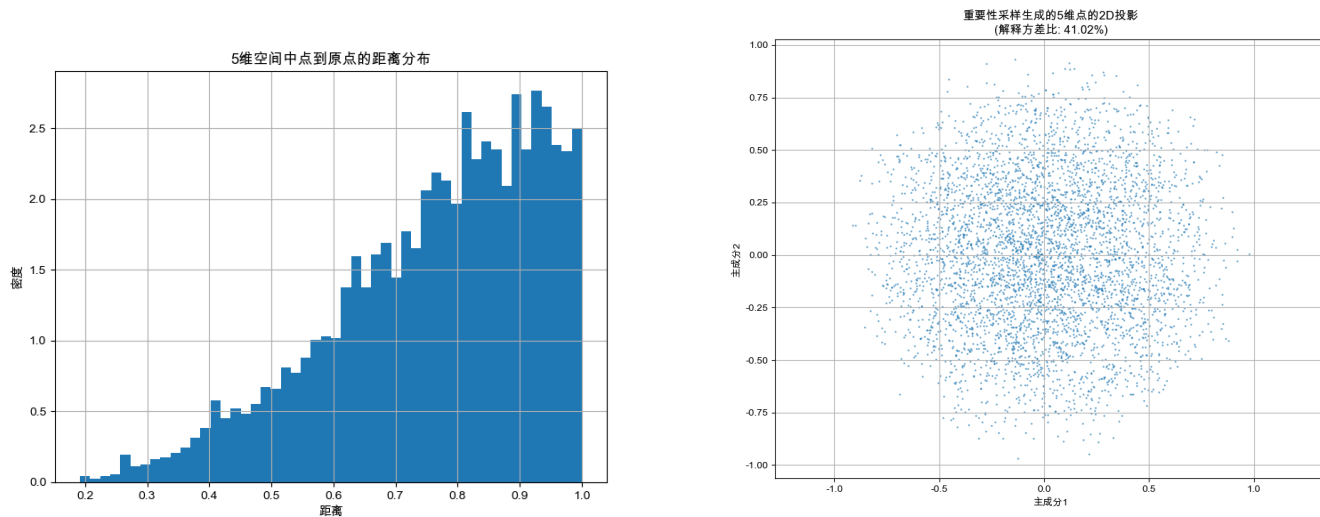


图 6: 重要性采样点分布与 PCA 主成分分析 (5 维)

可见采样点明显向原点附近区域迁移。

n维单位超球体体积分析 (重要性采样)

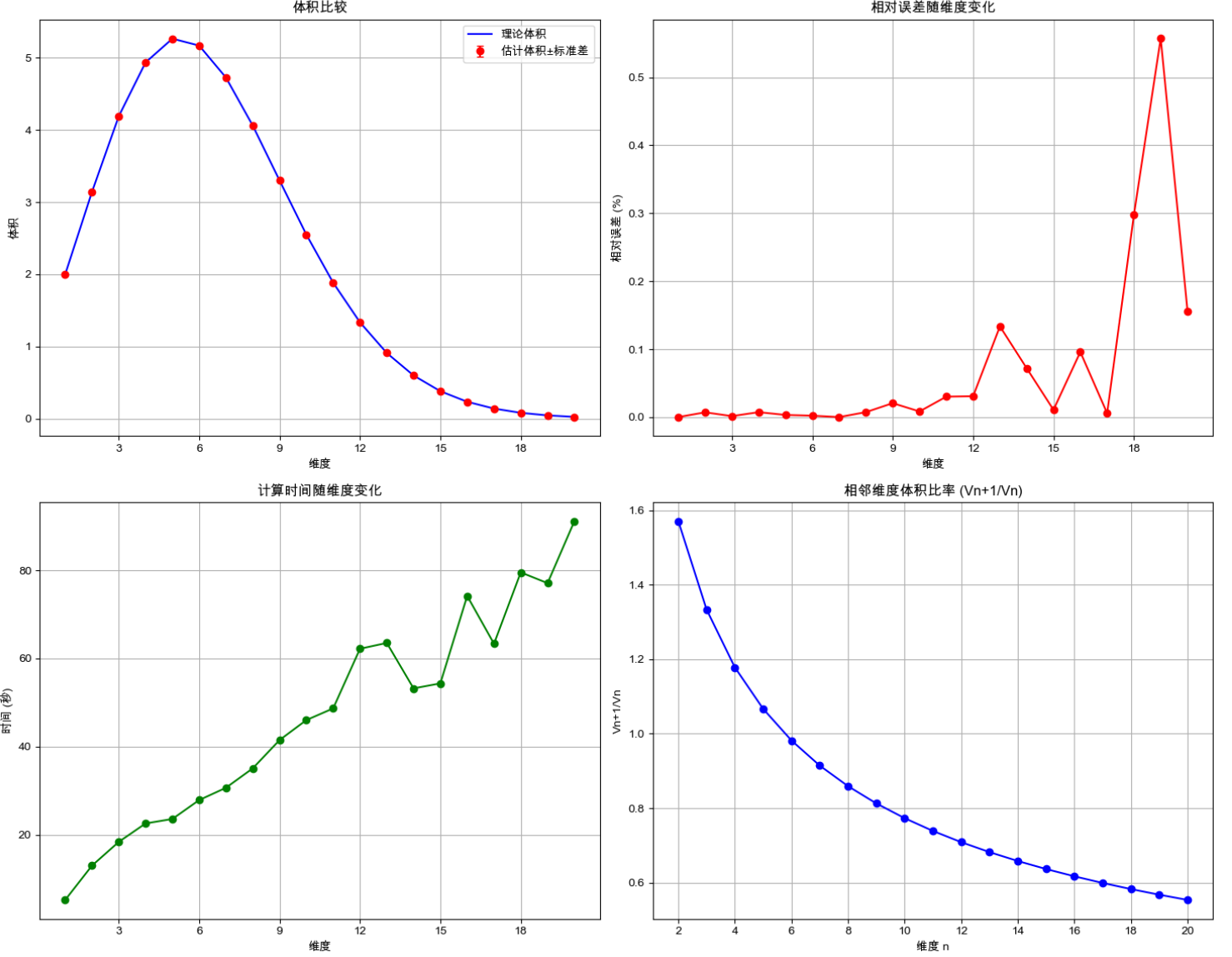


图 7: 重要性采样结果分析

相对误差以解析解为标准，最大值仅为千分之十三，相对于简单均匀采样有了质的提升。计算时间大幅增加是因为不小心将采样点数从 114514 提升至 1919810，增加了一个数量级以上。对于不同维度，还可以精细调整提议分布标准差以获得更好的效果。

2 题目 2: 海森堡模型

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.

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad J = 1, \quad |\vec{S}_i| = 1$$

2.2 程序描述

2.3 伪代码

Powered by [L^AT_EX pseudocode generator](#)

2.4 结果示例