演習 2.　イジング（Ising）モデルのモンテカルロシミュレーション

ここでは、磁性体のモデルとして二次元の $L \times L$ の正方格子上のイジングモデルを考える。各状態のエネルギー $E(\sigma_1, \sigma_2, \ldots)$ は

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \ldots) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

で与えられるとする。ここで σ_i は格子位置 i でのスピンの向きで、± 1 の値をとることができる。$\langle i, j \rangle$ は最近接にある i,j だけについての和をとることを意味している。J は最近接スピン間の交換相互作用の大きさである。境界条件としては周期境界条件を仮定する。

温度 T では、状態 $\Omega_i \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \ldots)$ が実現する確率 $p(\Omega_i)$ は正準分布

$$p(\Omega_i) = \frac{1}{Z} \exp\Big(-\frac{E(\Omega_i)}{k_{\mathrm{B}} T}\Big) \qquad \Big(\quad Z = \sum_i \exp\Big(-\frac{E(\Omega_i)}{k_{\mathrm{B}} T}\Big) \quad\Big)$$

で与えられる。この系についてメトロポリス法を適用してみよう。アルゴリズムとしてはおおよそ次のようにすればよかろう。

1) 初期状態として全格子位置でのスピンの向きをランダムにきめる。

2) 乱数を用いてある格子位置を決める。

3) この格子位置でのスピンの向きを変えたときのエネルギーの変化 ΔE を求める。

4) ΔE が負のとき、この格子位置のスピンを反転させる。

5) ΔE が正のとき、区間 $[0:1]$ の一様乱数を 1 個作り,（これを ζ とする。）$\zeta < e^{-\frac{\Delta E}{k_{\mathrm{B}} T}}$ のとき、この格子位置のスピンを反転させ、そうでなければスピンの向きはそのままにする。

6) 物理量を計算する。

7) 必要な回数に達するまで,2) から 6) までを繰り返す。

(1) 上で述べたアルゴリズムが正準分布に対するメトロポリス法になっていることを確かめ、これを行う FORTRAN プログラムを作成せよ。

(2) メトロポリス法でサンプリングされた N 個の状態 Ω_1, Ω_2, …, Ω_N に対するある物理量が A_1, A_2, …, A_N であるとすると、この物理量の熱力学的平均値 $\langle A \rangle$ は十分大きい N に対して

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} A_i$$

で評価できる。これを用いて $J > 0$, $L = 30$ のときの内部エネルギー $U(T) = \langle E \rangle$、比熱 $C(T)$、磁化 $M(T) = \mu_{\mathrm{B}} \langle \sum_l \sigma_l \rangle$ および磁化率 $\chi(T)$ を温度の関数としてプロットせよ。また、各物理量の統計誤差も見積もれ。

（ヒント：例えば比熱 C に対しては

$$C(T) = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_{\mathrm{B}} T^2}$$

が成り立つ。これを用いよ。磁化率についても似た式があった。）

(3) L をいろいろ変えて磁化を温度の関数としてプロットせよ。この系の転移温度 T_{c} はおよそいくらになるか？これをオンサーガー（Onsager）による厳密解の値と比較せよ。

(4) 余裕のある人は 3 次元の場合はどうなるか？, $J < 0$ の場合はどうか？磁化および比熱の臨界指数を見積もる等を試みよ。