

二次元イジングモデルのシミュレーション

正方格子の上に各スピンの並んでいるとする。一辺に L 個すなわち、全部で $L^2 = N$ 個のスピンのあると考える。ハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i \quad (1)$$

である。

シミュレーションの目的は、この系の熱平衡状態に近づく様子や熱平衡状態における様子を見ることである。

まず、どうすれば熱平衡状態におけるスピンの配列を作り出すことができるのか。熱平衡状態とは前に出てきた $P(s)$ の確率で状態 s が出現するような状態である。エルゴードの仮説でやったように統計平均と長時間平均は一致するので、 $P(s)$ は長時間観測したときの s が出現している割合と同じである。

結論から言うと、状態 s_1 から s_2 に変わるときにハミルトニアンの差 $H_{s_2} - H_{s_1} = \Delta E$ としてやって、 $\min\{e^{-\beta\Delta E}, 1\}$ の確率で s_1 から s_2 に変化することができる。としてやればよい。これによって、状態 s が $P(s)$ の割合で出現するという状況を作り出してやることができる。

これは詳細釣り合いの原理である。