目次

訳者序 v

はじめに vii

目次 xiii

第1章 序論 1

1.1 物理学におけるコンピュータの重要性 1

1.2 コンピュータ・シミュレーションの本質 3

1.3 グラフィックスの重要性 4

1.4 プログラミング言語 5

1.5 プログラミングの学習 7

1.6 この本の利用方法 8

1A 実験レポート 9

第2章 コーヒーの冷却 13

2.1 基礎的な知識 13

2.2 オイラーのアルゴリズム 14

2.3 簡単な例 15

2.4 True BASIC のプログラム 16

2.5 オイラー法のプログラム 21

2.6 コーヒーの冷却の問題 23

2.7 計算の精度と安定性 27

2.8 簡単なグラフ表示 29

2.9 視覚化 31

2.10 原子核の崩壊 35
2.11 概観 37
2A 整数変数と実数変数 38

第 3 章 落体の運動 **41**
3.1 基礎的な知識 41
3.2 落下する物体に働く力 42
3.3 ニュートンの運動の法則についてのオイラー法 45
3.4 1 次元運動のプログラム 46
3.5 2 次元の軌跡 52
3.6 シミュレーションの精密さ 54
3.7 高度な応用 55
3A 座標軸を描くサブルーチン 55
3B データ・ファイル 57
3C 強制型宣言とデバッグ作業 58
3D オイラー–リチャードソンの方法 61

第 4 章 2 体問題 **65**
4.1 はじめに 65
4.2 運動方程式 66
4.3 円軌道と楕円軌道 68
4.4 天文単位 69
4.5 配列変数とアスペクト比 69
4.6 両対数と片対数のプロット 73
4.7 軌道のシミュレーション 75
4.8 摂動 79
4.9 速度空間 82
4.10 ミニ太陽系 84
4.11 2 体散乱 87
4.12 研究課題 94

第 5 章 簡単な線形系と非線形系 **99**

5.1 単振動 99
5.2 調和振動子の数値シミュレーション 101
5.3 単振り子 104
5.4 出力とアニメーション 106
5.5 散逸系 110
5.6 外力に対する応答 111
5.7 電気回路における振動 114
5.8 研究課題 120
5A ニュートンの運動方程式の数値積分 122

第6章 力学系のカオス的な運動 131

6.1 はじめに 131
6.2 簡単な1次元写像 132
6.3 周期倍化 138
6.4 普遍的な性質と自己相似性 144
6.5 カオスの測定 149
6.6 制御されたカオス 153
6.7 高次元のモデル 157
6.8 外力を受けた減衰単振り子 159
6.9 ハミルトン系のカオス 164
6.10 展望 173
6.11 研究課題 173
6A ロジスティック写像の固定点の安定性 183

第7章 ランダム過程 189

7.1 秩序から無秩序へ 189
7.2 ポアソン分布と原子核崩壊 194
7.3 ランダムウォークの初歩 198
7.4 確率の問題 202
7.5 最小2乗法 205
7.6 簡単な変分モンテカルロ法 209

7A ランダムウォークと拡散方程式 214

第 8 章 多粒子系の動力学 217

8.1 はじめに 217

8.2 分子間ポテンシャル 218

8.3 数値計算のアルゴリズム 219

8.4 境界条件 220

8.5 単位 223

8.6 分子動力学法のプログラム 223

8.7 熱力学的諸量 233

8.8 動径分布関数 240

8.9 固い円盤 243

8.10 動力学的特性 258

8.11 発展 264

8.12 研究課題 266

第 9 章 基準モードと波 271

9.1 連成振動と基準モード 271

9.2 フーリエ変換 279

9.3 波動 290

9.4 干渉と回折 294

9A 高速フーリエ変換 298

第 10 章 電気力学 305

10.1 静電荷 305

10.2 ラプラス方程式の数値解 313

10.3 ラプラス方程式のランダムウォーク解 321

10.4 運動する電荷のつくる電場と磁場 324

10.5 マクスウェル方程式 332

10.6 研究課題 342

第 11 章 数値積分とモンテカルロ法 347

11.1 1次元の数値積分法 347
11.2 モンテカルロ法を使った定積分の簡単な計算 353
11.3 多次元積分の数値積分法 355
11.4 モンテカルロ法の誤差解析 356
11.5 一様でない確率分布 361
11.6 中性子の輸送現象 364
11.7 重みつき標本抽出 368
11.8 メトロポリス・モンテカルロ法 369
11A 数値積分の誤差評価 372
11B 平均値の標準偏差 373
11C 採用–棄却法 375

第12章 ランダムウォーク 377
12.1 はじめに 377
12.2 変形されたランダムウォーク 380
12.3 高分子鎖への応用 390
12.4 拡散が支配する化学反応 398
12.5 連続体極限 401
12.6 乱数列 402
12.7 研究課題 407

第13章 パーコレーション 413
13.1 はじめに 413
13.2 パーコレーションのしきい値 416
13.3 クラスターのラベル付け 424
13.4 臨界指数と有限サイズ・スケーリング 430
13.5 繰り込み群 435
13.6 研究課題 443

第14章 フラクタル 451
14.1 フラクタル次元 451
14.2 規則的なフラクタル 461

14.3 フラクタルな成長過程 464
14.4 フラクタルとカオス 490
14.5 いろいろな次元 492
14.6 研究課題 493

第 15 章 複雑性 **501**
15.1 セルラーオートマトン 501
15.2 流体の格子モデル 513
15.3 自己組織化された臨界現象 517
15.4 神経回路網 526
15.5 遺伝的アルゴリズム 531
15.6 まとめと研究課題 537

第 16 章 ミクロカノニカル・アンサンブル **543**
16.1 はじめに 543
16.2 ミクロカノニカル・アンサンブル 543
16.3 デーモン・アルゴリズム 545
16.4 1 次元古典理想気体 546
16.5 温度とカノニカル・アンサンブル 549
16.6 イジング・モデル 550
16.7 熱流 557
16.8 コメント 561
16A 平均デーモン・エネルギーと温度との関係 562

第 17 章 カノニカル・アンサンブルのモンテカルロ・シミュレーション **565**
17.1 カノニカル・アンサンブル 565
17.2 メトロポリス・アルゴリズム 566
17.3 ボルツマン分布の検証 568
17.4 イジング・モデル 572
17.5 イジング・モデルの相転移 585
17.6 イジング・モデルの他の適用例 590
17.7 古典液体のシミュレーション 594

17.8 モンテカルロ法によるデータ解析の最適化 600
17.9 他のアンサンブル 605
17.10 他の応用 607
17.11 研究課題 610
17A カノニカル・アンサンブルにおけるゆらぎ 621
17B 2 × 2 イジング・モデルでの正確な数え上げ 622

第 18 章 量子系 627
18.1 はじめに 627
18.2 量子論のまとめ 628
18.3 束縛状態の解 630
18.4 時間に依存するシュレーディンガー方程式 635
18.5 初等的な変分法 641
18.6 ランダムウォーク量子モンテカルロ法 644
18.7 拡散量子モンテカルロ法 651
18.8 経路積分量子モンテカルロ法 655
訳者付録 量子モンテカルロ法の原理と指数積公式の一般化 661

第 19 章 むすび：同じアルゴリズムは同じ結果を与える 667
19.1 物理学の統一 667
19.2 パーコレーションと銀河系 669
19.3 数, 美しい絵および洞察 674
19.4 コンピュータは物理学にどのような影響を与えるか 676

付録 A BASIC から Fortran へ 679

付録 B BASIC から C へ 701

(訳者補) 本書収録プログラムの実行環境について 725

索引 727