

目 次

第 I 部 計算物理学の新しい方法

1	分子動力学法の新展開	[能勢 修一]
1-1	はじめに	3
1-2	なぜシミュレーションを行うのか	4
1-3	MD 法	5
1-4	シミュレーションで何を求めるか	6
1-5	温度一定の方法	8
1-6	圧力一定の方法	9
1-7	結晶構造と相互作用の関係	10
	参考文献	12
2	量子モンテカルロ法と量子スピン系	[岡部 豊]
2-1	はじめに——古典系のモンテカルロ法	13
2-2	量子スピン系とハミルトニアンの対角化	15
2-3	量子モンテカルロ法の原理と実際	16
2-4	正方格子上のスピン 1/2 反強磁性ハイゼンベルグモデル ——最近の話題	19
2-5	困難な問題——負符号問題	21
	参考文献	22
3	専用計算機による古典スピン系のモンテカルロシミュレーション	[伊藤 伸泰]
3-1	はじめに	23
3-2	イジングモデル	24
3-3	モンテカルロ法の基礎	28
3-4	ランダムウォークのシミュレーション	30
3-5	イジングモデルのモンテカルロ専用計算機	32
3-6	おわりに	35
	参考文献	35

第II部 究極の探求——素粒子から宇宙まで

4	素粒子理論と専用並列計算機 QCDPAX	[岩崎 洋一]
4-1	はじめに.....	39
4-2	格子ゲージ理論.....	40
4-3	統計力学との同等性および数値計算法.....	42
4-4	これまでに得られた物理的結果.....	43
4-5	専用計算機 QCDPAX.....	47
	参考文献.....	49
5	計算機で探る原子核の構造	[小川 健吾]
5-1	はじめに——魔法数の秘密.....	50
5-2	殻模型による原子核の記述.....	51
5-3	大型殻模型計算.....	54
5-4	殻模型における大型計算機の役割.....	57
5-5	これからの核物理と計算機.....	58
	参考文献.....	59
6	計算機で探る一般相対性理論の世界	[中村 卓史]
6-1	天体の諸階層.....	61
6-2	パルサー, 中性子星, ブラックホール.....	63
6-3	数値的相対論.....	65
6-4	回転星の軸対称一般相対論的重力崩壊.....	67
6-5	一般的な一般相対論の数値コード.....	70
	参考文献.....	73
7	星を造る実験	[観山 正見]
7-1	はじめに.....	74
7-2	数値計算法 (Smoothed Particle 法).....	76
7-3	星間雲の分裂.....	77
7-4	回転する雲の収縮と分裂.....	80
7-5	最後に.....	82
	参考文献.....	83

第III部 秩序と混沌——位相空間と実空間の流れ

8	非線形力学におけるカオスと計算機実験	[森 肇・岡本 寿夫]
8-1	カオスとは——複雑だが端正なアトラクター	87
8-2	奇妙なアトラクターの幾何学的構造と分岐	90
8-3	局所構造の動的構造関数	92
8-4	特異な局所構造と q -相転移	94
8-5	カオスの新しい非線形力学に向けて	96
	参考文献	97
9	流れのシミュレーションとその可視化	[桑原 邦郎]
9-1	いとぐち	98
9-2	高いレイノルズ数の解析	100
9-3	2次元流れの計算例	102
9-4	3次元流れの計算例	107
9-5	結 論	110
	参考文献	111
10	核融合プラズマと計算物理学	[佐藤 哲也]
10-1	第3の研究法——計算機シミュレーション	112
10-2	磁気流体的自己組織化	113
10-3	おわりに	121

第IV部 結晶の物性——電子状態と協力現象

11	固体物理学の難問題と電子計算機	[今田 正俊]
11-1	はじめに	125
11-2	典型的な解析的手法	125
11-3	典型的な数値解析の手法	127
11-4	電子ガスの問題	128
11-5	ハバード模型	130
	参考文献	136

12 電子状態からの物性予測

[寺倉 清之]

12-1 はじめに	137
12-2 密度汎関数法	138
12-3 応用例——物質の構造安定性	139
12-4 今後の動向	141
12-5 おわりに	146
参考文献	146

13 スピングラスと神経回路網

[西森 秀稔]

13-1 はじめに	147
13-2 スピングラス	148
13-3 神経回路網	149
13-4 最適化問題	153
13-5 おわりに	155
参考文献	155

14 形態形成——成立する結晶の多様な形

[斎藤 幸夫]

14-1 はじめに	156
14-2 拡散の役割	157
14-3 界面エネルギーの役割	159
14-4 樹枝状結晶成長	161
14-5 界面カイネチクス——多面形結晶	164
14-6 一方向凝固	164
14-7 おわりに	165
参考文献	166

15 金属・セラミック界面電子状態の計算機シミュレーション

[山本 良一・香山 正憲]

15-1 金属・セラミックス界面への理論的アプローチ	167
15-2 クラスタ計算とバンド計算	168
15-3 計算方法	170
15-4 アルミナ・ニオブ界面の電子構造計算	171
15-5 アルミナ・遷移金属界面の電子構造計算	176
15-6 おわりに	177
参考文献	177

第V部 乱れた系の物性——原子・分子の配置と運動

16	放射線損傷の分子動力学シミュレーション	[岩田 忠夫]
16-1	はじめに	181
16-2	計算法	182
16-3	はじき出しのしきいエネルギー	183
16-4	はじき出しのカスケードと熱スパイク	186
16-5	格子間原子と空格子点	189
	参考文献	192
17	超イオン伝導の動的機構のシミュレーション	[金子 豊]
17-1	はじめに	193
17-2	α -AgI と CaF_2	194
17-3	モデル	195
17-4	拡散の動力学	196
17-5	おわりに	201
	参考文献	202
18	古典液体とガラスの分子動力学シミュレーション	[樋渡 保秋]
18-1	はじめに	203
18-2	古典液体と計算機シミュレーション——歴史的発展の概略	204
18-3	単純古典液体——二体相互作用の類似性と分類	206
18-4	Verlet と Gear のアルゴリズム——計算精度の比較	208
18-5	いろいろな物理量の計算方法	209
18-6	ガラスの MD シミュレーション	210
	参考文献	211
19	水の構造	[片岡 洋右]
19-1	はじめに	212
19-2	水の物性のまとめ	213
19-3	異方的な分子間相互作用	213
19-4	液体の水の分子動力学シミュレーション	216
19-5	流体相の状態方程式	216
19-6	輸送係数	218
19-7	液体の水の時間平均による構造	218
19-8	水の構造の時間的变化	219
	参考文献	220

20 量子液体, ヘリウムのシミュレーション

[高橋 實]

20-1 量子系のシミュレーションの歴史	221
20-2 量子多体系の分配関数と統計平均	222
20-3 ヘリウム4のモンテカルロ計算	227
20-4 まとめ	229
参考文献	229
索引	231

