

分類番号

421

テーマ別調べ方ガイド



計算物理学

について調べる



★ 関連授業科目

計算物理学

基礎工学部
第3セメスター

「Paste (はすて)」とは？

ぱっと分かって、すっと頭に入る、テーマ別調べ方ガイドです。みなさんの学習をサポートする、総合図書館ティーチング・アシスタント (TA) による作成です。レポート作成の際などにお役立てください

1. イントロダクション

1-1. 「計算物理学」とは？

物理現象は方程式で記述されますが、この方程式を計算機(コンピューター)で数値的に解くのが計算物理学です。「数値的に解く」という手段は非常に強力で、手計算ではとても解けないような式も簡単に解くことができます。例えば多体問題は一般的に解析解を求めることはできません。しかし、計算機を用いれば数値解は求まります。これによって計算機がなかった頃にはとても解くことのできなかつた複雑で高精度な式を解き、現実に近い解を導くことができるようになったのです。

1-2. 学習するにあたってのポイント

初めて計算物理に触れる人間にとって、最初の関門は「計算物理をはじめること」かもしれません。コンピューターに不慣れな人間にとって、計算物理は異質なものです。異質なものに触れる時、一番早い勉強方法は実際に触ってみる事です。とにかくプログラムを書いて、動かしてみましよう。実際に動かすことが理解への早道です。

1-3. 一般向けに書かれた資料・読み物

■ パソコンで見る複雑系・カオス・量子 / 科学シミュレーション研究会著

「複雑系」や「量子」の振る舞いの理解は難しいですが、パソコンでシミュレーションをしてみるとイメージが掴みやすくなります。式を見ただけではわからなかったことを絵や動画で直観的に理解できるのが計算物理の強みです。

【書誌 ID=2003200003】 総合図-書庫棟 研究用図書 420||KAG
総合図-A 棟 5 階 研究用図書 089||BB||1160

■ シミュレーションの思想 / 廣瀬通孝, 小木哲朗, 田村善昭著

シミュレーションが社会に浸透した状況には「なにを良しとするのか」、「どこへ向かうのか」をはっきりとさせる思想が必要です。シミュレーションの可能性と限界について論じた非常にチャレンジングな本であると言えます。

【書誌 ID=200351950】 総合図-A 棟 3 階 学習用図書 007.1||HIR
総合図-自動書庫 549.6||215

2. 学習用資料

2-1. 手元にあると便利な事典・ハンドブック 類

■ 物理学大辞典(第2版, 普及版) / 物理学大辞典編集委員会編

物理用語などで分からない単語に遭遇した時に参照するとよい本です。

【書誌 ID= 2003660551】 総合図-書庫棟 2 階 参考図書 R420.33||PAR

■ 英和物理学習基本用語辞典 / 北村俊樹著

英語の資料を読む際は専門用語に出くわす機会が多いですが、そんなときはこの本も確認してみてください。

【書誌 ID=2003160012】総合図-A 棟 2 階 参考図書 R420.33||EIW

- 人名のつく現象と法則の辞典：物理・化学・数学 / D. W. G. バレンタイン, D. R. ラベット著
法則や現象のことをざっくり知りたいときはこれを読みましょう。一言で簡潔に説明してくれ、イメージを掴むのに役立つでしょう。

【書誌 ID=2002080096】総合図-書庫棟 2 階 参考図書 R403.3||BAL

総合図-書庫棟 2 階 参考図書 R403.3||JIN

2-2. 最初に読むべき資料：教科書・古典

- NumPy&SciPy 数値計算実装ハンドブック / 松田康晴, 大川洋平著

Python は分かりやすい言語でライブラリも充実しているので、急いで数値計算を学ぶには良い選択肢です。プログラム言語に関しても数値計算に関してもしっかり記述があり、数値計算もプログラムも初めての人にもおすすめの一冊です。

【書誌 ID=2004497476】理工学図-西館 1F LS 選書 418.1||MAT

- 入門 Fortran90 / ラリー・ニーホフ, サンフォード・リーストマー著 ; 渡邊了介訳

Fortran の基本をしっかりと解説してくれる本です。少し昔の人間の典型的な入門書の一つです。

【書誌 ID=2003510012】総合図-A 棟 3 階 学習用図書 007.64||NYH

- 計算物理学入門 / ハーベイ・ゴールド, ジャン・トボチニク著 ; 石川正勝, 宮島佐介訳

分厚い本ですが、基本的な事柄は全て書いてある優れものです。物理の様々な分野の問題を具体的なコードで解いていきます。解き方の事典という呼び方がふさわしいでしょう。言語が古いのが玉に瑕ですが、それを補って余りある情報量です。

【書誌 ID=2003423181】総合図-A 棟 4 階 学習用図書 421.5||GOU

- Numerical recipes in C : the art of scientific computing / William H. Press [et al.]

分厚い本ですが、それに見合うだけの数値計算のアルゴリズムが沢山書かれた本です。手法の解説も具体的なコードも載っているので非常に役に立ちます。しかし、初心者が読むには難しすぎるかもしれません。中級者にお勧めです。

【書誌 ID=2003387583】総合図-A 棟 3 階 学習用図書 007.64||PRE

- Numerical optimization / Jorge Nocedal, Stephen J. Wright

数値最適化のアルゴリズムが沢山書かれた本です。手法の疑似コードやなぜその手法が良いのか数学的な証明も記載されていて、非常に良い本です。しかし逆に具体的なプログラム言語は一切用いない上にプログラムを用いた演習もないので、入門者はこれを読んでも何も得られないかもしれません。中級者にお勧めの一冊です。

【書誌 ID=2003360447】理工学図-東館 2F 図書 417||NOC

2-3. 最新情報が確認できる資料：主要雑誌・年鑑・Web ページ

- 応用物理 【書誌 ID= 3001037591】【ISSN=0369-8009】

- 日本物理学会誌 【書誌 ID=3001037402】【ISSN=0029-0181】

- Review of modern physics 【書誌 ID= OJ00000562】電子ジャーナル

上記三つは最先端の物理を紹介する学会誌。

- Computational and Theoretical Chemistry 【書誌 ID= OJ00050123】電子ジャーナル
最新の理論化学が読める学術誌。

2-4. その他専門書・学術論文等で注目すべきもの

- これからはじめる量子化学：物理・数学のキホンからよくわかる! / 辻和秀著
量子化学についての入門書です。シュレディンガー方程式などを解く際には数学の知識も必須ですが、それも拾ってくれる親切丁寧な本です。この本には数値計算の話はあまり書いていませんが、量子化学は数値計算が威力を発揮する典型的な系です。
【書誌 ID=2004304382】総合図-A 棟 4 階 学習用図書 431.19||TSU
- 物理のための数学入門 / 二宮正夫, 並木雅俊, 杉山忠男著
物理に必要な数学をもれなく、ダブリなく扱ってくれる本です。図なども豊富で非常にわかりやすいです。
【書誌 ID=2004135594】理工学図-東館 2F 図書 420.8||KOD||10
- 新しい量子化学：電子構造の理論入門 / A. ザボ, N. S. オストランド著 ; 大野公男, 阪井健男, 望月祐志訳
ハートリー・フォック法やポスト・ハートリー・フォック法の理論から始まり、数値的な解き方まで紹介してくれる本です。量子化学を専門とする学部四年生の必読書です。
【書誌 ID=2002119484】総合図-A 棟 4 階 学習用図書 431.19||ATA||1
- 生体分子の統計力学入門：タンパク質の動きを理解するために / Daniel M. Zuckerman 著 ; 藤崎弘士, 藤崎百合訳
分子動力学シミュレーションをする方は必見。エントロピーの意味の理解を助けます。この本は数値計算の知識は前提としているので、数値計算そのものに関する話はあまり書いていません。しかし、分子動力学法に関して深く学びたい人におすすめです。
【書誌 ID=2004338450】生命図-3F 南 開架図書 464.2||ZUC
- コンピューター・シミュレーションの基礎 / 岡崎進著
こんな名前ですが、分子動力学シミュレーションの本です。分子動力学シミュレーションに使う様々なアルゴリズムを紹介してくれます。分子動力学を実装してみたい人は一度読んでみると良いでしょう。ただし、この本に載っていることだけでコードを書こうとするとあまり現代的なコードにはならないことには注意して下さい。
【書誌 ID=2003385314】総合図-A 棟 3 階 学習用図書 007.6||OKA

3. レポート・論文執筆用資料

3-1. 有用な検索キーワード

- ◆ 主要キーワード: Python / Fortran / 物理数学 / モンテカルロ法 / ニュートン法 / ルンゲクッタ法 / gnuplot / メトロポリス法
- ◆ 関連キーワード: 分子動力学シミュレーション / 第一原理計算 / イジング模型 / マルコフ連鎖モンテカルロ法
- ◆ 補助キーワード: 乱数列 / 密度汎関数 / LDA 法 / NANDVASP