# スーパーコンピュータを使ったシミュレーションで探る物理

# 藤堂研究室 TODOGROUP

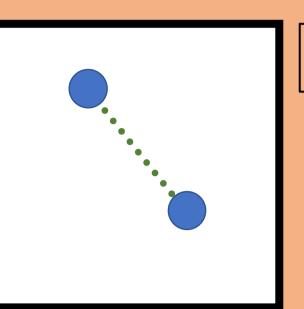
東京大学 大学院理学系研究科物理学専攻/物性研究所 THE UNIVERSITY OF TOKYO DEPARTMENT OF PHYSICS / INSTITUTE FOR SOLID STATE PHYSICS

## スーパーコンピュータで何ができる?

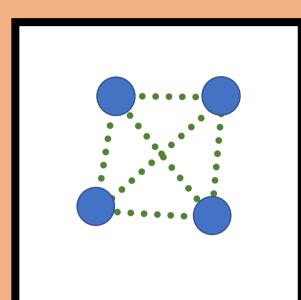


Newtonの運動方程式  $m_i \frac{d^2 m{x}_i}{dt^2} = \sum m{F}_{ij}$ から粒子の動きを計算

……引力



コンピュータを使わなくても手計算で厳密に解ける!



### 粒子数 3~1,000,000=1003くらいまで

厳密解は無い……。しかしスーパーコンピュータを 使えば数が多くても数値的に計算できる!



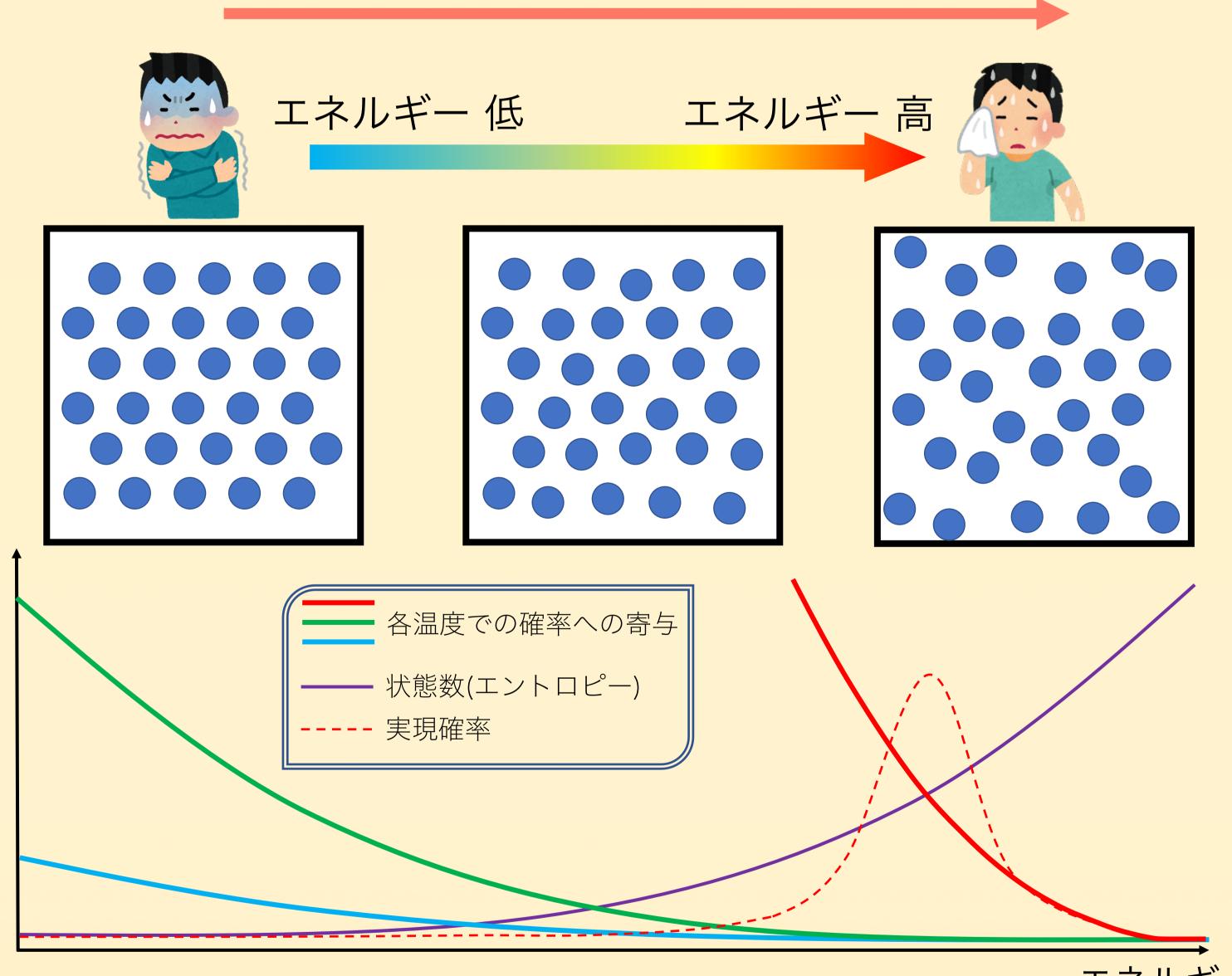
| 粒子数 100…(0が23個)…000 = 約3gの水

スーパーコンピュータを使って、宇宙の年齢(138億 年)程度計算しても、1%の計算すら終わらない。 ミクロな世界を扱う量子力学では30個程度の粒子でもう限界

もともとの方程式そのまま使わずに様々な現象を計算したい →統計力学や様々な計算手法を駆使して効率よく計算する!

### 統計力学で何ができる?

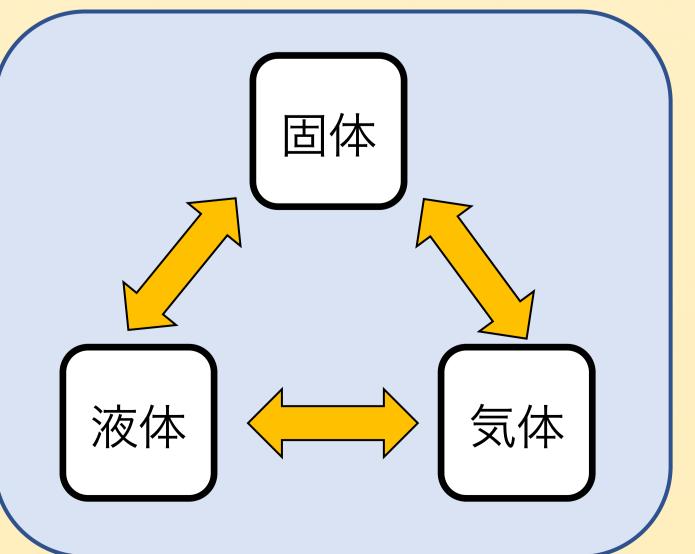
計算物理屋さん

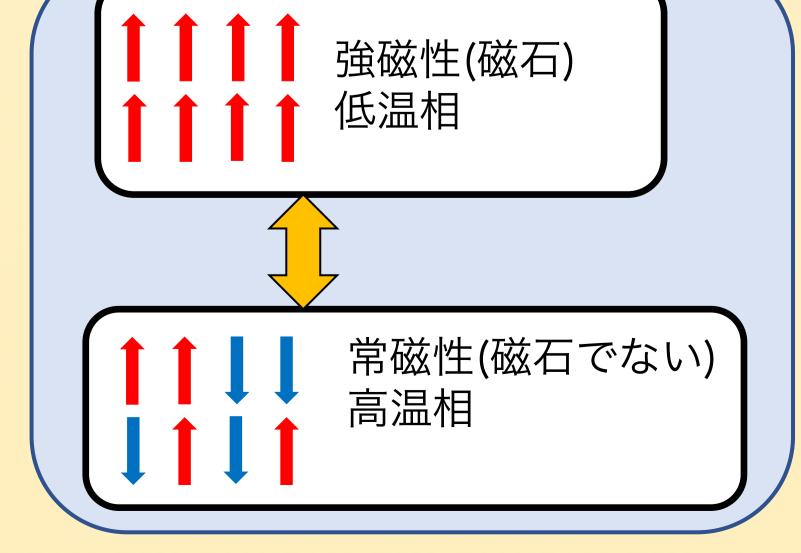


エネルギー

統計力学の考え方 ……

各状態での確率への寄与を考え、 その確率に従って状態が実現する。

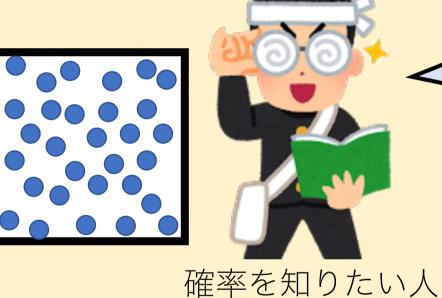




物体の状態(相)がある温度、ある密度で劇的に変化する現象、 相転移を記述できる!

## モンテカル口法で何ができる?







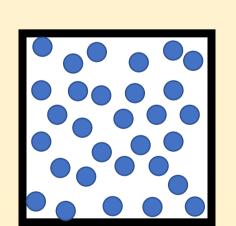
は15°Cです!

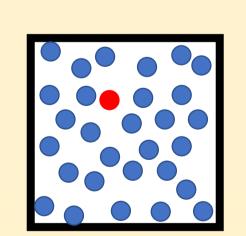
教えてください!温度

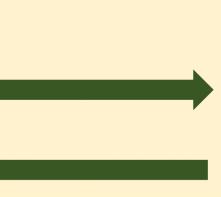


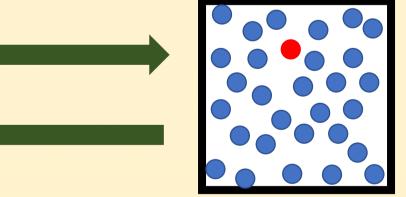
状態数が多すぎて無理です! でも二つの状態の確率の比は 計算できますよ!

統計力学警察



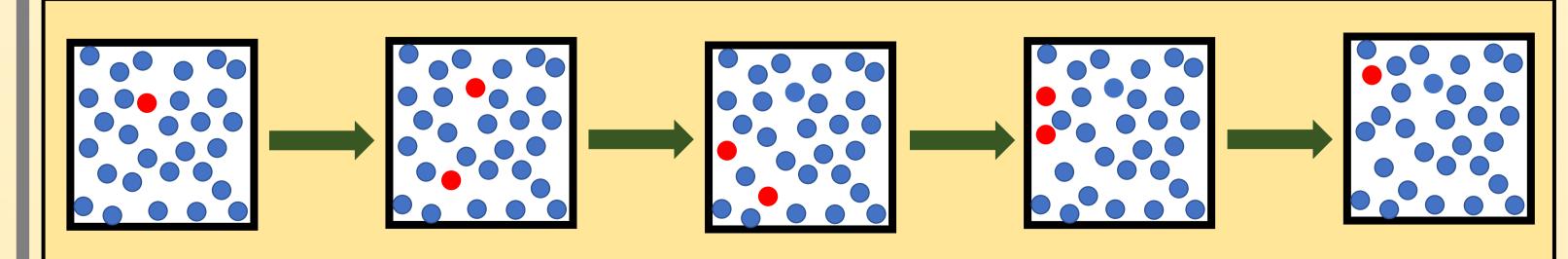






この状態が実現する確率は 計算できなくても……

2つの状態を用意して、その状態間を 行き来する確率は計算できる!



現在の状態に近い状態を用意して、遷移確率に従って状態を変更 していく。確率を使った解析を一般にモンテカル口法という。

粒子数が増えても、このステップを何回も繰り返すことで、目的 の状態の実現確率や、様々な物理量を推定することができる!

[准教授] 藤堂眞治 [特任講師]大久保毅 諏訪秀麿 [助教] [特任研究員] 白井達彦 [学生] 博士: 堀田俊樹

足立大樹 島垣凱 修士: 石川文啓 山本卓矢

鈴木基己 中西健