

目次

編集委員まえがき

第1章	粒子系のシミュレーション	1
§ 1.1	計算機シミュレーションとは	1
(a)	多粒子系の複雑さ	1
(b)	計算機シミュレーションの登場	2
(c)	初期のシミュレーションによる成果	3
§ 1.2	シミュレーションの長所短所	3
(a)	計算を基礎にした研究方法	3
(b)	シミュレーションの長所	4
(c)	シミュレーションの短所	4
§ 1.3	シミュレーションの分類	5
(a)	対象による分類	5
(b)	シミュレーションの問題の設定	6
(c)	新しい方法論	6
§ 1.4	粒子間相互作用	7
(a)	2体相互作用	7
(b)	粒子間相互作用の特徴	7
(c)	分子の場合	8
(d)	第一原理的に定めた相互作用	8
§ 1.5	分子動力学法	9
(a)	分子動力学法の原理	9
(b)	数値積分法についての注意	9
(c)	中心差分法	10
(d)	中心差分法の誤差	11

(e) 予測子・修正子法	11
(f) 二つの積分方法の比較	12
§ 1.6 モンテカルロ法	13
(a) 重みつき平均の効率的な計算法	13
(b) モンテカルロ法の原理	13
(c) 遷移確率の選び方	15
(d) 乱数について	15
§ 1.7 シミュレーションの技法	16
(a) 周期境界条件	16
(b) 相互作用のカットオフ	18
(c) 長距離力の取り扱い	19
§ 1.8 何を求めるか	20
(a) 熱力学的量	20
(b) 構造	21
(c) 動的な量(輸送係数)	21
§ 1.9 シミュレーションを行なう手順	22
(a) 平衡状態計算の場合	22
(b) 温度の制御(速度スケールリング)	22
(c) 平衡状態であることの確認	23
(d) 初期値問題の場合	23
§ 1.10 液体の結晶化(応用例 1)	24
(a) モデル, 方法	24
(b) 結晶化	25
(c) 秩序構造への変化の様子	26
§ 1.11 銀河円盤の形の変化(応用例 2)	28
(a) 重力問題専用計算機 GRAPE	28
(b) モデル, 方法	28
(c) 結果	30
演習問題	30

第 2 章	物質設計の数理	33
§ 2.1	概論	33
(a)	物質の多彩さ	33
(b)	ミクロの理論, ミクロとマクロをつなぐ理論	35
(c)	電子状態計算の基本的考え方	38
§ 2.2	密度汎関数法と局所密度近似	39
(a)	基礎: Levy による定式化	39
(b)	Kohn-Sham の理論	42
(c)	Kohn-Sham 方程式の軌道エネルギーの意味	44
(d)	局所密度近似	45
(e)	全エネルギーに対する変分的表式と Harris の汎関数	46
(f)	密度勾配展開法	49
§ 2.3	電子状態計算手法の階層的構築	50
§ 2.4	第一原理分子動力学法	51
(a)	Hellmann-Feynman 力	52
(b)	繰返し法によるハミルトニアンの部分対角化	54
(c)	Car と Parrinello の方法	56
(d)	第一原理分子動力学法の発展	58
§ 2.5	応用例	62
(a)	液体銅のシミュレーション	62
(b)	Si(001) 表面での秩序・無秩序相転移	63
§ 2.6	まとめと今後の課題	65
第 3 章	計算地球流体力学	67
§ 3.1	地球流体力学とその特色	68
(a)	地球流体力学	68
(b)	重力の効果と静力学平衡	69
(c)	自転効果と地衡風平衡	70
(d)	回転系上の渦定理	73
(e)	傾圧不安定	75

(f) Rossby 波	76
§ 3.2 数値天気予報から気候変動予測まで	77
(a) 数値天気予報	77
(b) 大気大循環数値実験	80
(c) 数値計算手法の進歩	82
(d) 気候モデル	84
(e) 気候モデルによる数値実験	86
§ 3.3 数値天気予報における計算技法	91
(a) 数値天気予報に用いられる方程式系とその特徴	91
(b) 数値解法	96
(c) 4次元データ同化	101
(d) 気象・気候研究における数理的手法の将来	109
参考書	113
索引	117

