

目 次

1. 物理量と次元	1
1.1 物理学の次元	2
1.1.1 力学世界	2
1.1.2 熱力学	3
1.1.3 電磁気学	4
1.2 5つの基本次元	5
1.3 次元解析	6
1.4 無次元化	7
1.5 計算物理学と数学参考書	9
2. 精度と誤差	11
2.1 間 違 い	11
2.2 誤 差	12
2.2.1 丸め誤差	12
2.2.2 桁 落 ち	13
2.2.3 打ち切り誤差	14
2.3 精密化の限界	14
2.3.1 区分求積法	15
2.3.2 単精度変数の計算	15
2.3.3 倍精度変数の計算	16
2.3.4 計算機の利用と誤差	17

3. 方程式の根	18
3.1 見当づけ	18
3.2 中間値の定理にもとづく方法	20
3.3 ニュートン法	22
3.3.1 操作の手順	22
3.3.2 接線の評価法	24
4. 連立方程式	25
4.1 行列演算	26
4.2 クラメル公式の方法	26
4.3 消去法	27
4.3.1 ガウスの消去法	28
4.3.2 ガウス-ジョルダンの消去法	31
4.4 反復法	33
5. 行列の固有値問題の基礎	35
5.1 2重振子の固有振動	35
5.2 固有値の求め方	37
5.2.1 固有値方程式	37
5.2.2 行列の対角化	38
5.2.3 2次元対称行列の対角化	40
5.2.4 ヤコビ法	41
5.3 固有ベクトルの任意性	45
5.3.1 全体の符号	45
5.3.2 縮退のある場合	46
6. 3重対角行列とハウスホルダー法	47
6.1 3重対角行列の固有値	47
6.1.1 スツルムの定理	48
6.1.2 スツルムの定理による3重対角行列の固有値の求め方	48

6.2 ハウスホルダー法	49
6.2.1 第1行目の変換	50
6.2.2 第 k 行目の変換	53
6.2.3 ハウスホルダー法の手順	56
7. 微分方程式の基礎	59
7.1 解析的に解ける場合	59
7.2 解析的に解けない場合	60
7.3 オイラー法	62
7.4 ルンゲ-クッタ法	62
7.5 誤差の爆発	67
8. 微分方程式の応用	69
8.1 非線形の微分方程式の応用としての塩水振動子	69
8.2 微分方程式を解く問題としての量子力学	72
9. 数値積分	75
9.1 数値積分の実行	75
9.1.1 台形法	76
9.1.2 シンプソン法	77
9.1.3 刻み幅と誤差	78
9.2 変数変換法による特異点の回避	79
9.3 多重積分	81
9.4 物理学における数値積分	82
10. 乱数の利用	83
10.1 乱数を利用した定積分計算	84
10.2 現実世界を説明するための物理的なモデル	84
10.2.1 酔歩の問題	85
10.2.2 熱平衡分布の系のモンテカルロシミュレーション	86

10.2.3	メトロポリス法のアルゴリズム	87
10.3	メトロポリス法を利用したシミュレーション	88
10.4	計算の加速	91
11.	最小2乗法とデータ処理	93
11.1	平均値と誤差	93
11.2	最小2乗法	94
11.3	線形モデルの最小2乗法	95
11.4	非線形モデルでの最小2乗法	97
12.	フーリエ変換の基礎	101
12.1	フーリエ級数展開とフーリエ積分変換	101
12.2	三角関数で展開する理由	103
12.3	計算物理としてのフーリエ積分変換	104
12.3.1	離散的フーリエ変換	104
12.3.2	アラリアシング問題	106
12.3.3	有限区間効果問題	107
12.4	塩水振動子のフーリエ変換	107
13.	フーリエ変換の高速化	109
13.1	高速フーリエ変換の原理	109
13.2	$N=8$ の場合の具体的表示	112
13.3	高速フーリエ変換の背景	115
14.	多粒子運動系の動力学シミュレーション	116
14.1	ニュートンの運動方程式	116
14.2	膨大な数値情報の整理	118
14.3	イオンダイナミクス	121
14.3.1	グラファイト表面上のイオンの運動	121
14.3.2	シミュレーション計算の結果	122

問題の略解	127
あとがき	137
参考文献	141
索引	145