

目次

序言	v
前書き	ix
第1章 原子論的力学のあらまし	1
1.1 ニュートン, ラグランジュ, ハミルトンの力学	1
1.2 力学的境界を制御する	4
1.3 熱的境界を制御する	9
1.4 ギブスの統計力学	11
1.5 運動温度の能勢-フーバー制御	14
1.6 非平衡マルチフラクタル分布	17
1.7 非線形輸送	19
1.8 時間可逆な熱浴と温度計	20
1.9 この後の数値計算例の背景	21
1.10 まとめ	23
1.11 参考文献	24
1.12 問題	26
第2章 原子論的シミュレーションの定式化	27
2.1 多体粒子系のニュートン力学	27
2.2 拘束系のラグランジュ力学	32
2.3 ハミルトン力学とリウヴィルの定理	36
2.4 時間可逆なリープフロッグアルゴリズム	39
2.5 ガウス, ラグランジュ, ハミルトンによるエネルギー制御	42

2.5.1	ガウスの最小拘束の原理 $\rightarrow K = K_0$	42
2.5.2	ラグランジュの未定乗数を適用する $\rightarrow K = K_0$	43
2.5.3	ハミルトンの最小作用の原理を使う $\rightarrow K = K_0$	46
2.6	境界条件—ビリアル定理と熱定理	47
2.7	原子論的な性質のなめらか粒子平均	50
2.8	拘束条件とギブスのエントロピー	52
2.9	まとめ	53
2.10	参考文献	54
2.11	問題	55
第3章	熱力学, 統計力学, 温度	57
3.1	熱力学と理想気体温度	57
3.2	古典理想気体の熱力学	59
3.3	熱力学の三法則	60
3.3.1	熱力学第ゼロ法則	61
3.3.2	熱力学第一法則	62
3.3.3	逆説的な熱力学第二法則	64
3.4	ギブスのエントロピーから導かれる温度と Jaynes の失敗	68
3.5	ギブスのカノニカル集団に対する能勢の描像	72
3.6	二種類のカノニカル集団温度, T_K, T_C	74
3.7	運動論的温度: 理想気体温度計	76
3.8	硬い平行な立方体から生じる異方的温度	78
3.9	まとめ	78
3.10	参考文献	79
3.11	問題	79
第4章	連続体力学: 連続性, 応力, 熱流束, 応用	81
4.1	連続体の視点からの力学	81
4.2	質量, 運動量, エネルギーの保存	83
4.2.1	連続の式のオイラー的記述とラグランジュ的記述	83

4.2.2	運動方程式のオイラー的記述とラグランジュ的記述, と 圧力	85
4.2.3	熱流束とエネルギー方程式	87
4.3	連続体のなめらか粒子シミュレーション	89
4.4	構成関係と“エントロピー生成”	92
4.5	正方形の 128×128 容器中の自由膨張	94
4.6	二次元のしずくの振動	97
4.7	衝撃波と流束, 不可逆性, 時間遅延	99
4.7.1	衝撃波構造の単純なモデル	101
4.7.2	不可逆性, 時間遅延, 局所性	103
4.8	まとめ	104
4.9	参考文献	105
4.10	問題	106
第5章	数値分子動力学とカオス	107
5.1	粒子力学の定式化	107
5.2	リープフロッグ法と“速度 Verlet アルゴリズム”	108
5.3	ルンゲ-クッタ積分法	112
5.4	有限精度の解と周期軌道	114
5.5	Levesque と Verlet のビット可逆アルゴリズム	116
5.5.1	ビット可逆な調和振動子	117
5.6	最適化シンプレクティックアルゴリズム—時間可逆性	119
5.7	$\{\dot{q}, \dot{p}, \dot{\zeta}, \dot{\xi}\}$ のエルゴード性とリャプノフ不安定性	122
5.7.1	$\{\dot{q}, \dot{p}, \dot{\zeta}\}$ モデル \rightarrow カオスと秩序の混ぜ合わせ	122
5.7.2	二つの $\{\dot{q}, \dot{p}, \dot{\zeta}, \dot{\xi}\}$ モデル \rightarrow 四次元のカオス	126
5.7.3	振動子問題での次元の低減	128
5.7.4	$\{\dot{q}, \dot{p}, \dot{\zeta}, \dot{\xi}\}$ モデルのカオスの特徴づける	129
5.7.5	ハミルトン型セルモデルのカオスの特徴づける	131
5.8	多体のためのリャプノフ不安定アルゴリズム	134
5.8.1	38 体のリャプノフ不安定性	136
5.8.2	14 体でのリャプノフ不安定性	140

5.8.3	Benettin の N 体リャプノフスペクトルアルゴリズム	142
5.8.4	ベクトルの回転, 共変性, スケール依存性	145
5.8.5	振動子スペクトルの座標依存性	146
5.9	まとめ	149
5.10	参考文献	149
5.11	問題	151
第 6 章	時間可逆な粒子型熱浴	153
6.1	温度, 接触温度, そして熱浴	153
6.2	能勢のハミルトン型熱浴	159
6.2.1	もっと一般的な熱浴の形式	161
6.2.2	振動子-能勢の熱浴と能勢-フーバーの熱浴	162
6.3	非平衡能勢 フーバー振動子	166
6.4	Patra-Bhattacharya 熱浴	168
6.4.1	Patra-Bhattacharya 振動子	170
6.5	Campisi の対数ハミルトン型熱浴	172
6.6	Hoover-Leete の等運動エネルギーハミルトン型熱浴	175
6.7	Landau-Lifshitz の配置熱浴	177
6.8	フィードバック-ガウス型熱浴と能勢-フーバー熱浴	179
6.9	二モーメント, 三モーメント, および鎖型熱浴	180
6.10	時間可逆な確率過程的熱浴?	185
6.10.1	時間可逆なブラウン動力学!	187
6.11	エネルギー調節器 (エルゴスタット), 圧力調節器, …	188
6.12	まとめ	189
6.13	参考文献	190
6.14	問題	190
第 7 章	非平衡シミュレーションによる鍵となる結果	193
7.1	原型的な非平衡シミュレーション	193
7.1.1	初期の平衡シミュレーション	194
7.1.2	非平衡シミュレーション	196

7.1.3	Green-久保による輸送の摂動論	199
7.2	周期シアと人形アルゴリズム, Sllod アルゴリズム	201
7.2.1	人形アルゴリズム	201
7.2.2	Sllod アルゴリズム	203
7.3	境界駆動シア流	204
7.3.1	固体の高ひずみ速度変形	207
7.4	Green-久保の理論と一様な熱流のシミュレーション	208
7.5	周期的熱流の境界駆動シミュレーション	211
7.6	ϕ^4 モデルと位相空間次元の低減	212
7.7	位相空間アトラクターの次元の低減	218
7.7.1	フラクタル情報次元	220
7.8	SPAM 補間によるメゾスコピックな可逆性	222
7.9	衝撃波とそのなめらか粒子表現	224
7.10	衝撃波, テンソル温度, 時間遅延	227
7.10.1	正弦的な衝撃波の発展	227
7.10.2	平面衝撃波のプロファイルの解析	229
7.11	衝撃波のもっともかんたんな連続体モデル	231
7.12	衝撃波のより複雑な連続体モデル	233
7.13	まとめ	235
7.14	参考文献	236
7.15	問題	236
第 8 章	第二法則, 可逆性, 不安定性	239
8.1	時間可逆性: ボルツマン, Loschmidt, Zermélo	239
8.2	ハミルトン系における第二法則	243
8.3	温度制御された系における第二法則	248
8.4	数値計算による平均化, エルゴード性, 回帰	250
8.5	温度制御されたエルゴード的ゴルトン盤	253
8.6	温度制御されたエルゴード的調和振動子	263
8.7	非平衡振動子のリミットサイクルの安定性	266
8.8	ハミルトン系の指数ペアリングの例	268

8.8.1	一つの振動子と一つの二原子系	269
8.8.2	二つの二原子系の時間可逆な衝突	271
8.8.3	静かな二原子系の衝突のスペクトル	273
8.9	多体系のリアプノフ不安定性	276
8.10	骨董品のイヌと確率過程的なノミ	278
8.11	まとめ	280
8.12	参考文献	281
8.13	問 題	283
第9章	進歩を展望する；地球上の生命	285
9.1	序論—水と現実の生命のモデリング	285
9.2	水の数値モデル	286
9.2.1	Bernal-Fowler による水の力学的モデル (1933)	288
9.2.2	Abascal と Vega による水のモデル (2005)	289
9.2.3	ファインマンの経路積分 (1948)	293
9.2.4	Wigner-Kirkwood 対ファインマン (1932~1948)	294
9.2.5	Car-Parrinello のラグランジアン (1985)	295
9.2.6	Thomas-Fermi (1927) → 密度汎関数理論	296
9.2.7	最新の“マルチスケール”シミュレーション	296
9.3	2013 年化学賞：Karplus, Levitt, Warshel	297
9.4	生命の構成要素はどのようにして現れ成長したのか？	299
9.5	Stanley Miller と Harold Urey の実験 (1953)	300
9.6	コンピュータシミュレーションと実証実験	301
9.7	計算生化学と薬物設計	302
9.7.1	糖尿病の薬物治療	304
9.8	まとめ	306
9.9	参考文献	307
9.10	問 題	307
索引		309