

目次

まえがき	i
訳者まえがき	iii

第1章 SPAM がよりどころとする物理概念

1.1 動機とまとめ	1
1.2 粒子対連続体	3
1.3 ニュートンの質点力学	3
1.4 オイラーとラグランジュの連続体力学	8
1.5 微視的コンピュータ・シミュレーション [分子動力学]	12
1.6 リウビルの定理と統計力学	14
1.7 連続体を粒子で模擬する	18
1.8 SPAM [なめらか粒子法]	20
1.9 例題：分子動力学シミュレーション	22
1.10 参考文献	26

第2章 連続体力学

2.1 連続体力学のまとめと限界	29
2.2 流体と固体の発展方程式	30
2.3 初期条件と境界条件	34
2.4 平衡流体の構成方程式	36
2.5 非平衡流体の構成関係	39
2.6 人工粘性と人工伝導性	40
2.7 弾性固体の構成関係	42
2.8 非平衡な塑性体の構成関係	45
2.9 可塑性のアルゴリズム	47
2.10 例題：1次元の熱伝導	49
2.11 例題：1次元での音波の伝播	50

2.12 例題：2次元でのレイリー-ベナール流	51
2.13 参考文献	54

第3章 SPAM

3.1 概要	56
3.2 動機	57
3.3 基礎方程式	57
3.4 不規則格子での補間	58
3.5 他の平均法： $[f_0, f_1, f_2, \dots]$	61
3.6 重み関数	63
3.7 SPAM と $\nabla \cdot v$ から導かれる連続の式	68
3.8 空間微分 $\{\nabla \rho, \nabla \cdot P, \nabla \cdot Q\}$ を計算する	70
3.9 SPAM の運動方程式とエネルギー方程式	70
3.10 再分割：粒子の大きさは重要か？	72
3.11 理想気体と SPAM の同型性	73
3.12 空間微分 $\{\nabla v, \nabla T\}$ を計算する	74
3.13 フォン・ノイマンとリヒトマイヤーの人工 SPAM 粘性	76
3.14 例題：断熱大気の平衡	78
3.15 例題：等温大気の平衡	80
3.16 参考文献	82

第4章 コンピュータ・プログラミング

4.1 概要	83
4.2 FORmula TRANslation 言語	83
4.3 SPAM プログラムの設計	88
4.4 Fortran と C によるルンゲ-クッタ積分	95
4.5 便利な乱数発生器	99
4.6 画像表示と分析	101
4.7 デバッグの道具—誤りを見つける	104
4.8 並列計算	108
4.9 メッシュ分割	111
4.10 メッセージ・パッシングの技法	112

4.11 並列計算における物質の界面	114
4.12 参考文献	118

第5章 初期条件, 境界条件, 補間

5.1 概要	120
5.2 初期座標	121
5.3 自由境界のある SPAM 用メッシュの生成	123
5.4 周期境界と鏡面境界の実装	125
5.5 他のメッシュ—規則格子	130
5.6 埋め込み原子格子の弾性安定性	130
5.7 不変曲率による結晶安定化	135
5.8 例題: SPAM による 1 次元熱輸送問題の解析	136
5.9 例題: SPAM による周期シア流の解析	139
5.10 例題: SPAM によるレイリー—ベナール流の解析	142
5.11 参考文献	144

第6章 収束と安定性

6.1 概要	146
6.2 連続体力学の解の存在と一意性	146
6.3 数値解の正確さと精度	148
6.4 数値解法の収束	149
6.5 線形問題のルンゲ—クッタ積分	149
6.6 安定性	152
6.7 リャプノフ不安定性	153
6.8 カオス問題の安定性解析	155
6.9 大きさ依存性: 分子動力学からの教訓	157
6.10 なめらか粒子の空間積分誤差	158
6.11 格子の不安定性	158
6.12 偶奇不安定性	161
6.13 例題: シア流の収束	162
6.14 参考文献	164

第7章 ルーシー流体と埋め込み原子流体

7.1 概要	165
7.2 ルーシー流体の軌道の同型性	165
7.3 ルーシーポテンシャルの統計熱力学	167
7.4 埋め込み原子流体の軌道の同型性	168
7.5 構造緩和の埋め込み原子法	170
7.6 例題: 埋め込み原子の重力緩和	171
7.7 例題: 落水の埋め込み原子模型	173
7.8 例題: γ -則気体の自由膨張	175
7.9 例題: ルーシー流体の衝撃波構造	179
7.10 参考文献	186

第8章 SPAM の限界と困難

8.1 概要	187
8.2 表面張力	187
8.3 張力不安定性	190
8.4 モナガンの運動方程式	192
8.5 連続体力学: 応力, 剛体回転	194
8.6 動的および静的な構成関係	196
8.7 応力とずれ速度のある変形の例	198
8.8 Jaumann の応力回転速度の力学	201
8.9 角運動量保存	202
8.10 人工輸送係数	204
8.11 残留応力—SPAM における人工塑性	205
8.12 参考文献	206

第9章 固体への応用の実例

9.1 概要	207
9.2 引張試験	207
9.3 標準的分子動力学での引張試験	209
9.4 引張問題の境界条件	210

9.5	SPAM による引張問題の初期条件	212
9.6	SPAM 似の分子動力学での引張試験	213
9.7	SPAM での引張試験	216
9.8	破壊のアルゴリズム	217
9.9	貫入の機構	218
9.10	連続体力学での貫入	218
9.11	標準的分子動力学での貫入	220
9.12	SPAM 似の分子動力学での貫入	222
9.13	SPAM での貫入	222
9.14	研究への示唆	224
9.15	参考文献	225

第10章 まとめ, 文献, 見直し

10.1	はじめに	226
10.2	今日の到達水準	227
10.3	切断と加工	228
10.4	波への構造応答	229
10.5	海氷の動き	230
10.6	天体物理学	230
10.7	並列計算の近未来	231
10.8	終わりに	233
10.9	参考文献	234
ABC 順の文献一覧		235
索引		240