

目 次

1 数値解析の基礎

1.1 数値の内部表現と丸め誤差	4
1.2 打ち切り誤差と数値拡散	9
1.3 数値解析の手法	14

2 行 列 の 計 算

2.1 行列の種類と性質	17
2.2 固定値と固有ベクトル	22
2.2.1 固有値・固有ベクトルの性質	22
2.2.2 ベクトル反復法	26
2.2.3 行 列 変 換 法	30

3 連立方程式の解法

3.1 直接法と反復法	36
3.2 直接法（消去法）	37
3.2.1 ガウス-ジョルダン法（掃出し法）	37
3.2.2 三角分解を用いる方法（コレスキー法と改訂コレスキー法）	41
3.2.3 疎行列用の解法（スカイライン法）	44
3.3 反 復 法	45
3.3.1 古典的な解法	45

3.3.2 共役勾配法	48
3.3.3 前処理付き共役勾配法	53

4**代数方程式，超越方程式の数値解法**

4.1 繰返し法	60
4.2 区間縮小法	61
4.3 ニュートン-ラフソン法	62
4.4 セカント法	64
4.5 連立非線形方程式の数値解法	66
4.6 複素数解の数値解法	70
4.7 多数の解の求め方	73

5**曲線の当てはめ**

5.1 最小2乗法による実験データの当てはめ（1次式）	75
5.2 最小2乗法による実験データの当てはめ（多項式）	78
5.3 最小2乗法による実験データの当てはめ（多変数）	79
5.4 最小2乗法による実験データの当てはめ（非線形関係式）	81
5.5 最小2乗法による実験データの当てはめ（周期関数，フーリエ変換）	83
5.6 関数近似	88

6**数値微分・数値積分**

6.1 数値微分	91
6.1.1 差分法を用いる場合	91
6.1.2 補間公式を用いる場合	95
6.2 数値積分	101
6.2.1 台形則	101

6.2.2 シンプソン則	103
6.2.3 多重積分	105

7**常微分方程式の解法**

7.1 常微分方程式	108
7.2 常微分方程式の解法	110
7.2.1 オイラー法	110
7.2.2 ルンゲ-クッタ法	111
7.2.3 予測子・修正子法	115
7.3 1階常微分方程式の初期値問題	116
7.4 連立常微分方程式	117
7.5 2階常微分方程式の境界値問題	119

8**偏微分方程式**

8.1 物理現象と偏微分方程式	123
8.1.1 2階の偏微分方程式の分類	123
8.1.2 電磁場の偏微分方程式	125
8.1.3 保存量の偏微分方程式	127
8.1.4 波動現象の偏微分方程式	130
8.1.5 流体運動の偏微分方程式	131
8.2 ラプラス-ポアソン方程式の数値解	135
8.3 拡散方程式の数値解	138
8.3.1 陽解法	138
8.3.2 陰解法	141
8.3.3 クランク-ニコルソン法	143
8.3.4 有限な体積要素に対する差分法	145
8.3.5 対流項を含む拡散方程式	147
8.4 波動方程式の数値解	149

8.4.1	波動方程式の解の性質	149
8.4.2	波動方程式の数値解	150
8.4.3	数値解の安定性	151
8.5	流動の数値解	152
8.5.1	質量保存則と運動量保存則の連立	152
8.5.2	MAC法による流動の数値解析	153
8.5.3	スタッガード格子	155

9

モンテカルロ法

9.1	モンテカルロ法の計算手法	157
9.2	乱数の発生方法と検定	163
9.3	モンテカルロ法の適用と応用	169
9.3.1	数 値 積 分	169
9.3.2	応 用 例	170

10

数値解析の応用

10.1	熱 伝 導	176
10.2	流 体 力 学	179
10.3	分子動力学法	183
10.3.1	分子動力学法の計算方法	183
10.3.2	応 用 例	188
10.4	物質拡散の応用（温度場との連成）	191
10.4.1	材料プロセスと溶質拡散	191
10.4.2	単結晶プロセス	192
10.4.3	数 値 計 算 例	194
10.5	連続体力学と有限要素法	196

参 考 文 献	207
---------	-----

索 引	211
-----	-----