

「物性研究者のための計算手法入門」

はじめに：

計算機の発展はめざましく、人々はモデルを作り、作ったモデルを計算機にのせることによって、いろいろな系を仮想的に構築できるようになってきています。

モデルを計算機にのせる時には、モデルを作る段階とは別の種類の工夫が必要になることもあります。例えば、それは離散化に起因する誤差処理であったり、境界条件の設定であったりします。これらは往々にして軽視されがちな傾向もありますが、計算機の中に系をうまく構築する為には重要な問題となることがしばしばです。

そこで本誌では、物性分野で使用されている、または物性以外の分野で使用されているが様々な意味で参考になりそうな数値計算の手法をわかりやすく紹介するシリーズ「物性研究者のための計算手法入門」を企画しました。広い意味で物性分野に寄与できる計算手法の解説を、散発的にではありますが、掲載していく予定です。

第一回は、科学技術振興事業団 岡部恒康氏による「Symplectic Integratorによる定圧定温の分子動力学法」。

「物性研究」編集委員会