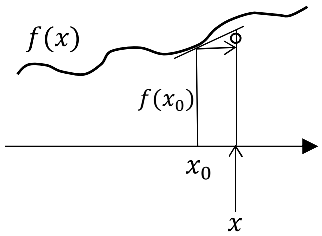
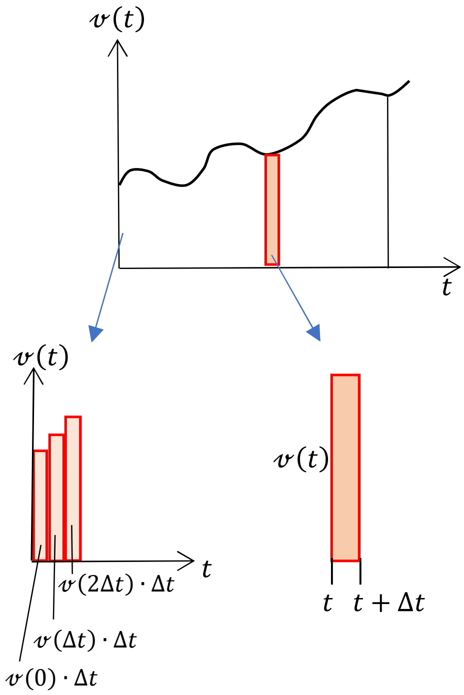


図 4.1　一変数関数$f(x)$のテイラー展開の一次の項の説明。



$v(t)$
t
$v(t)$
t
$v(2\Delta t)\cdot\Delta t$
$v(\Delta t)\cdot\Delta t$
$v(0)\cdot\Delta t$
$v(t)$
t
$t+\Delta t$

図 4.2　　$v(t)-t$ のグラフ

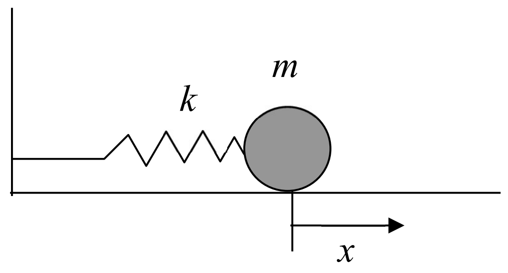


図 4-3.　ばねにつながれた 1 粒子

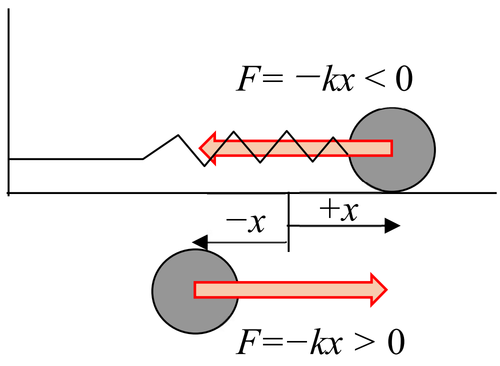


図 4-4　$F = -kx$は変位が右向きのとき力は左向き、変位が左向きのとき力は右向きとなる。

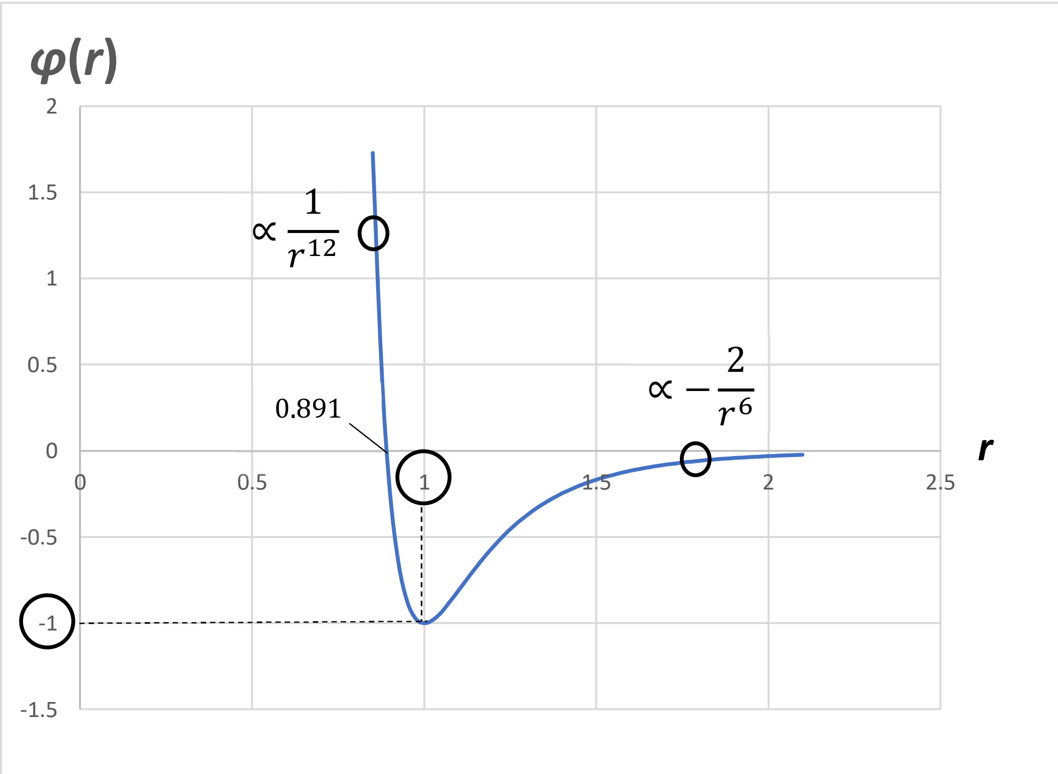


図 4-5.　レナード・ジョーンズポテンシャル $\varphi(r) = \frac{1}{r^{12}} - 2\frac{1}{r^6}$ の概形

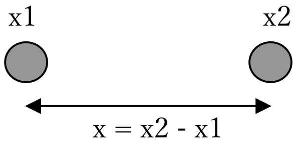


図 4-6.　2 粒子運動の座標設定

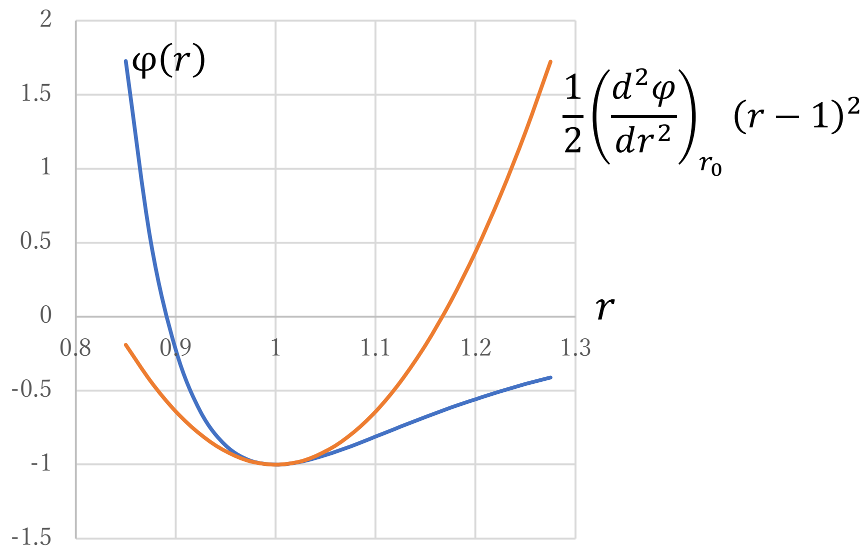


図 4-7.　レナード・ジョーンズポテンシャル $\varphi(r) = \frac{1}{r^{12}} - 2\frac{1}{r^6}$と、その平衡点$r_0 = 1$の近傍でのばね近似 $\varphi(r) \approx \frac{1}{2}\left(\frac{d^2\varphi}{dr^2}\right)_{r_0}(r-1)^2$

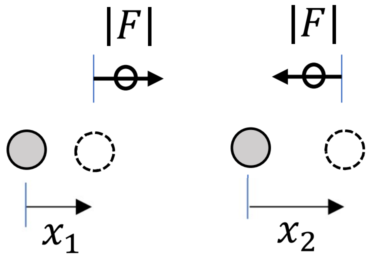


図 4-8.　2 粒子振動の力の大きさ$|F|$と向き

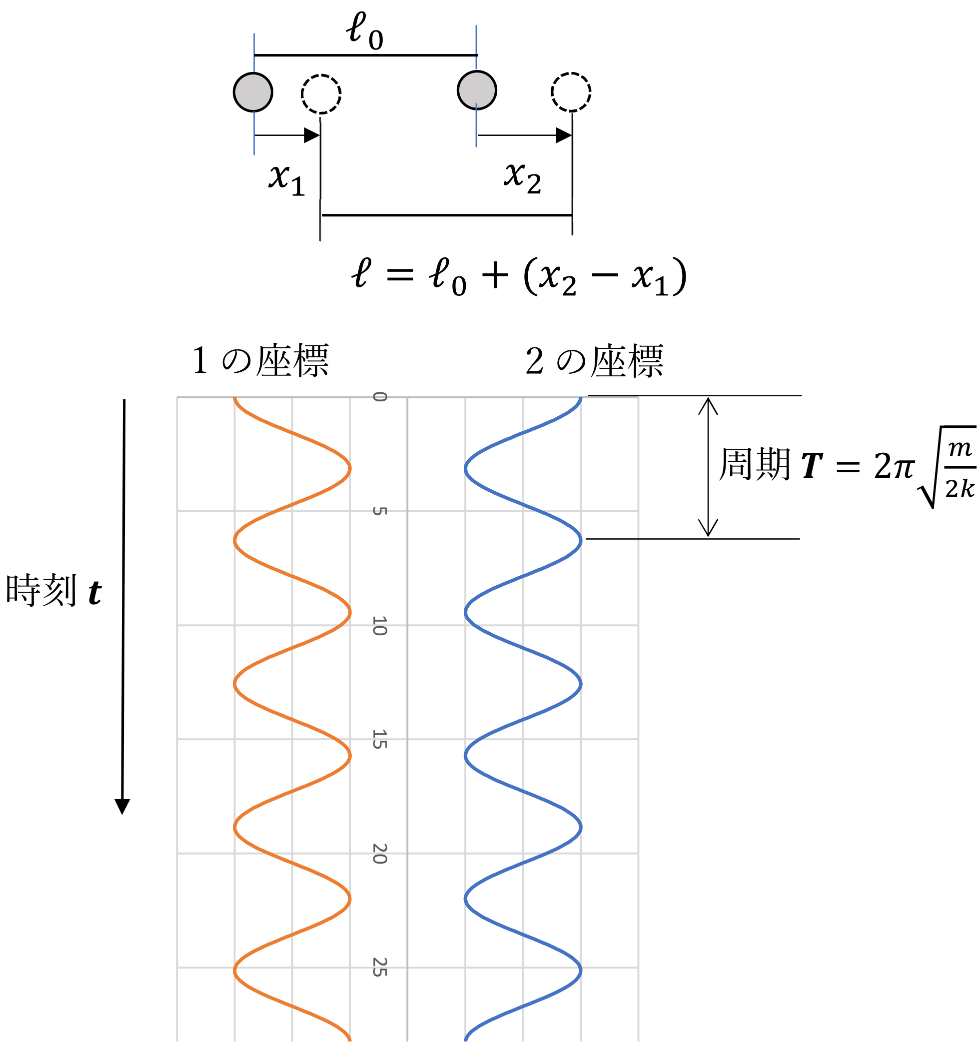


図 4-9. 結合長の伸縮の単振動

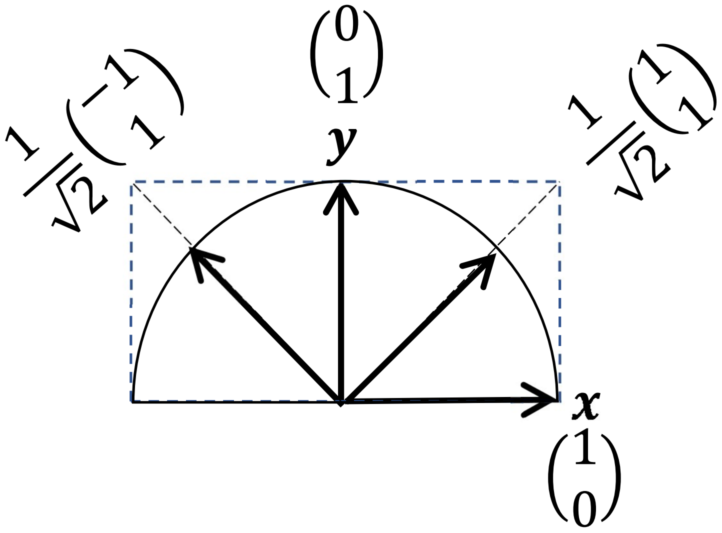


図 4-10　　基本ベクトルから固有ベクトルへの一次変換

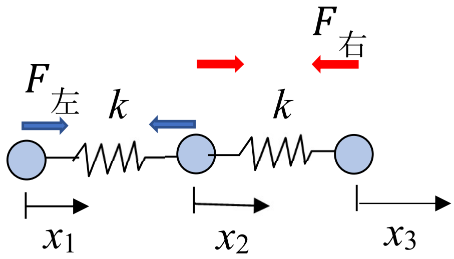


図 4-11　3 原子連成振動

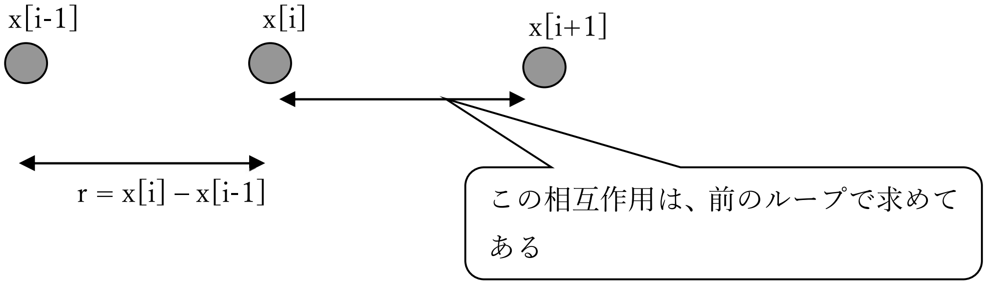


図 4-12　i 番目の原子の力を求める

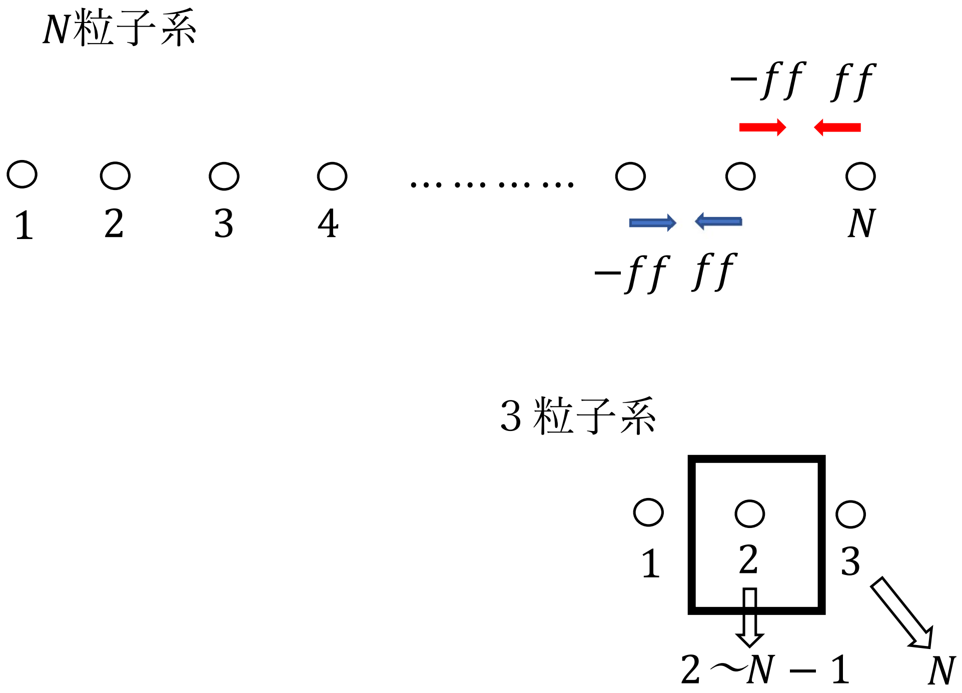


図 4-13　力の計算の手続き。3 粒子の場合を拡張して N 粒子の場合を理解する

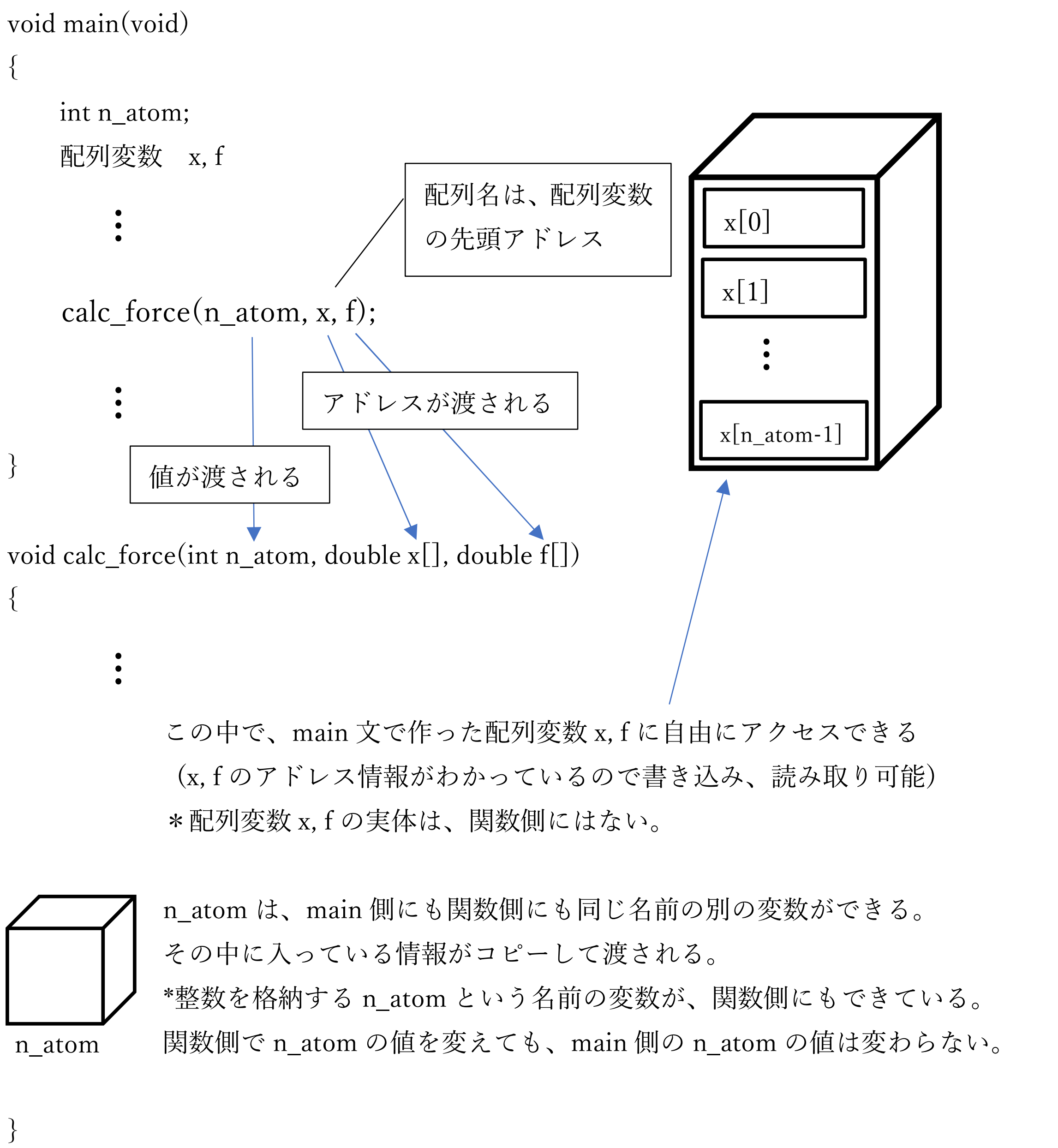
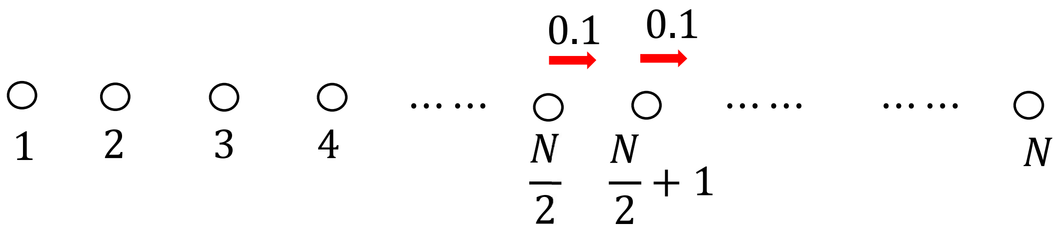


図 4-14　値呼び出し（値がコピーされて関数に渡される）と参照呼出し（配列変数の先頭アドレスが関数に渡される）



変数 x[i]には、位置が入る。
関数 initial_cond の中で、初めの for 文(i=1~n_atom)で x[i]=i(格子点に配置)
その後真ん中だけずらす。x[n_atom/2] +=0.1　(今の値に 0.1 をプラス)
x[n_atom/2 + 1] +=0.1

printf 文で出力する情報は、各粒子の変位である。つまり
x[i] – (double)i　(今の位置座標 – 平衡格子点位置)
初期状態の時、変位分布は下図のようになる。

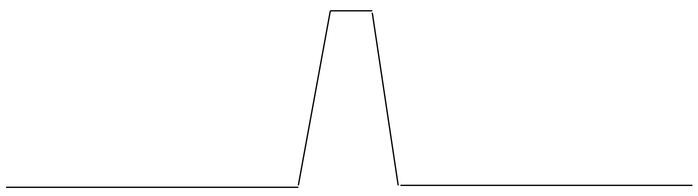


図 4-15　初期条件の与え方

printf を解読すれば、エクセルファイルは下図のようになることがわかる。

n		u(1)		u(2)			u(N)		v(1)		v(2)			v(N)		
整数	タブ	実数	タブ	実数	タブ	・・・・	実数	タブ	実数	タブ	実数	タブ	・・・・	実数	タブ	改行
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮

＊タブ、改行は特殊文字なので、実際には見えない。

整数 n は、ある時刻を表すから、例えば n=0 のときと n=100 の行で、それぞれ変位のみの情報を選択して２D 折れ線線表示すれば、それが、それぞれの瞬間の変位分布となる。(弦で言えば弦の形になる)

n		u(1)		u(2)			u(N)		v(1)		v(2)			v(N)		
整数	タブ	実数	タブ	実数	タブ	・・・・	実数	タブ	実数	タブ	実数	タブ	・・・・	実数	タブ	改行
1																
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋮	⋮	⋮
100																

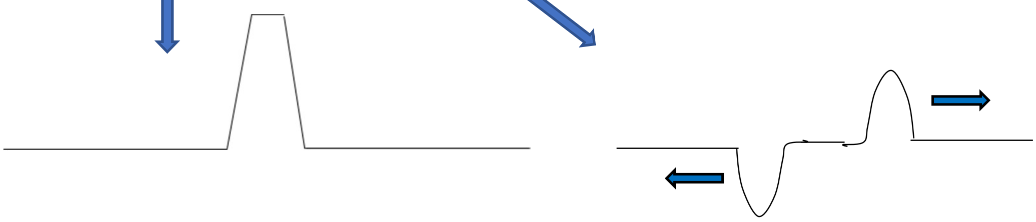


図 4.16　エクセルによるグラフの書き方

int i;

→　32 ビットのメモリを確保して整数を格納

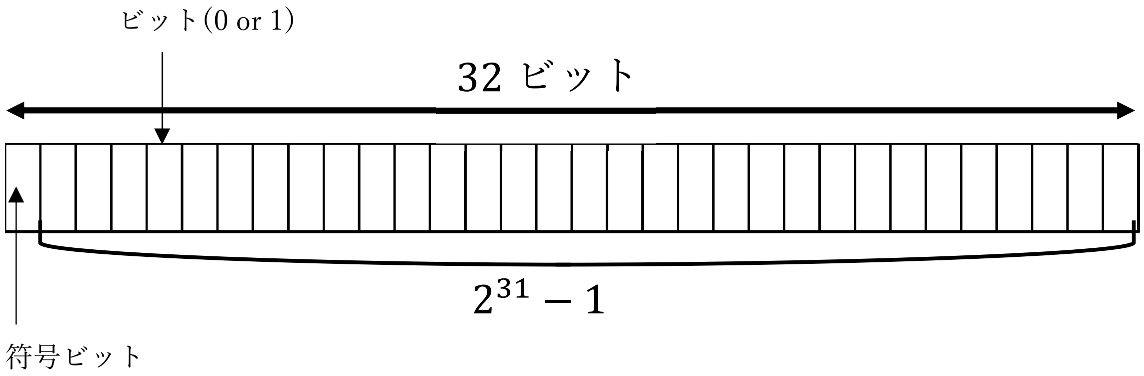


図 4-17　32 ビット整数

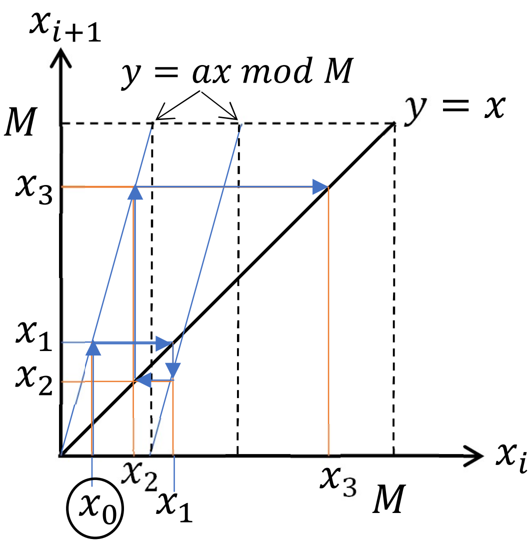


図 4-18　線形合同法の説明図(b=0)。$y = ax\ mod\ M$の直線は、本来はもっと勾配が急で、蛇腹状の非常に多数の直線で構成される。

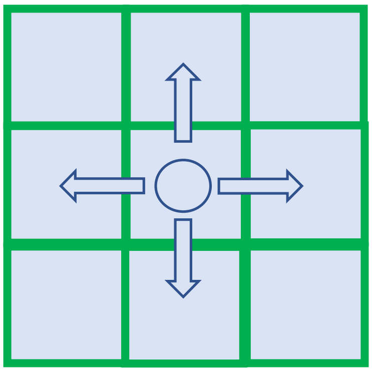


図 4-19　碁盤目上のランダムウォーク

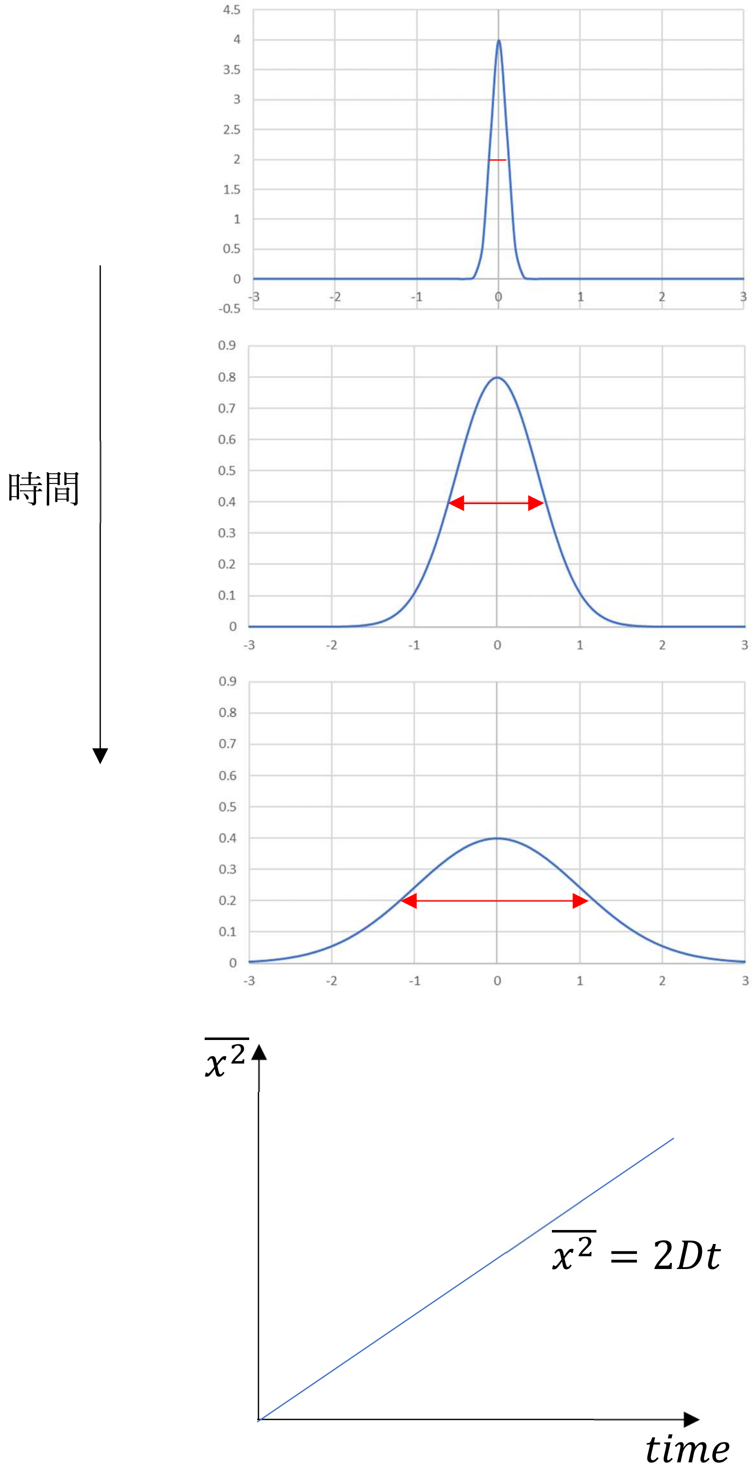


図 4-20　1 次元の拡散

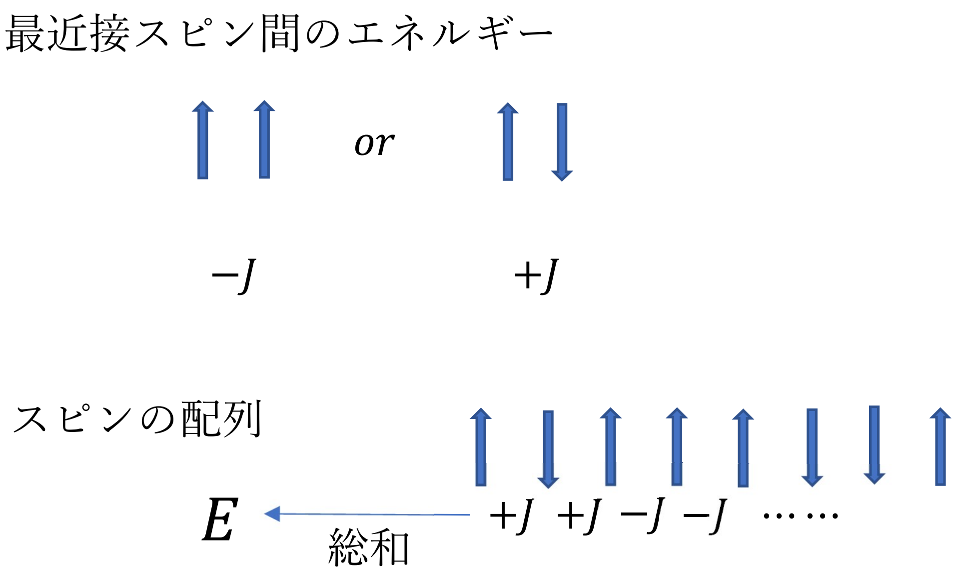


図 4-21　もっとも単純なイジングモデル

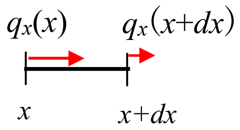


図 4-22　注目した場所、x〜$x+dx$ に、1 秒間でどれだけ熱エネルギーがたまるか？

図 4-23　長さ L の棒を、はじめ 100℃にして、その後側面を断熱材で覆い、両端を 0℃の氷水につける。

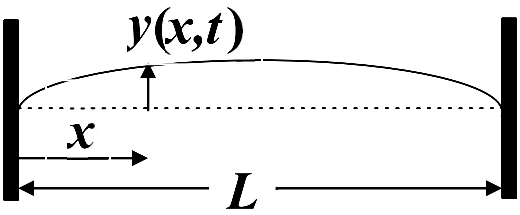


図 4-24　両端が固定された長さ L の弦

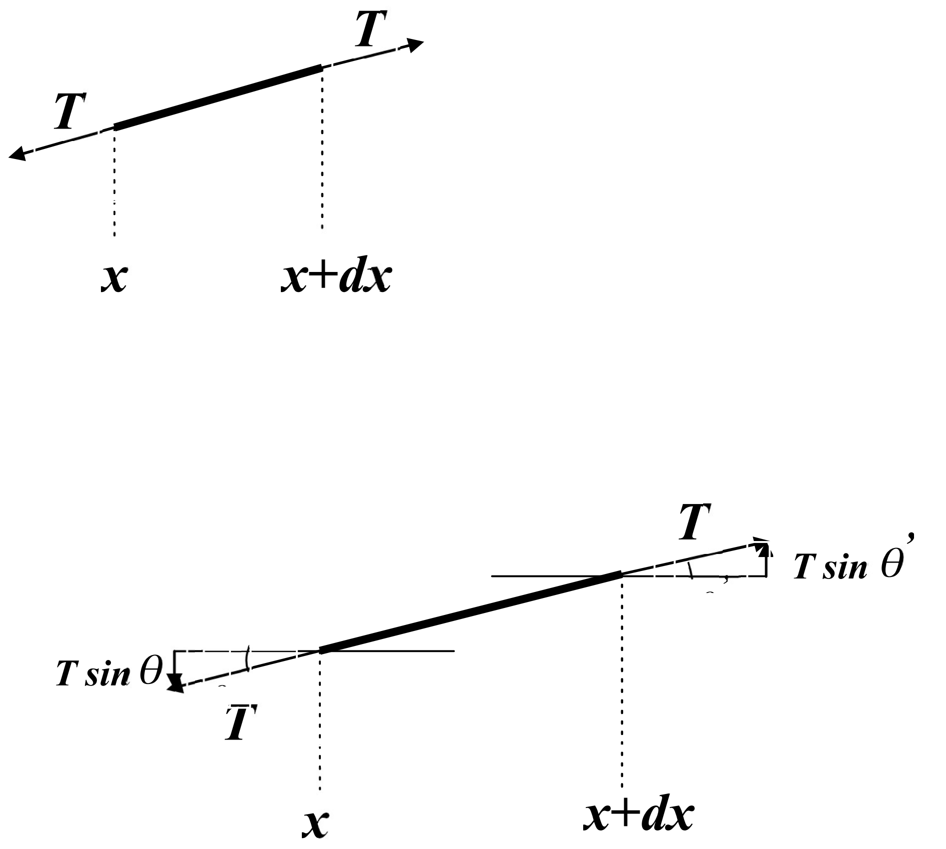


図 4-25　弦の一部、無限小切片

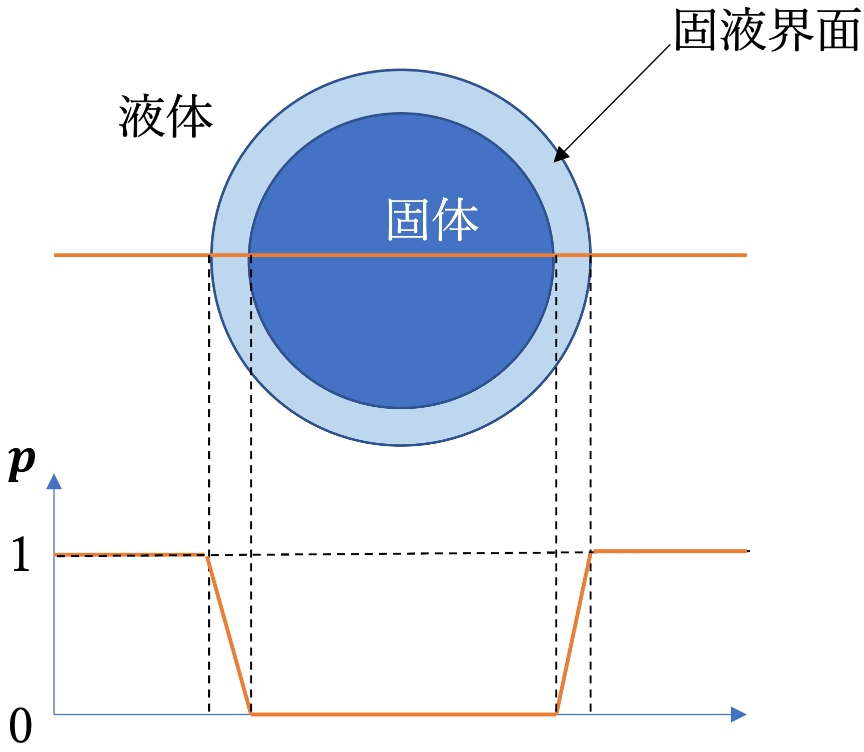


図 4−26　　フェーズフィールドの概念図

(a)

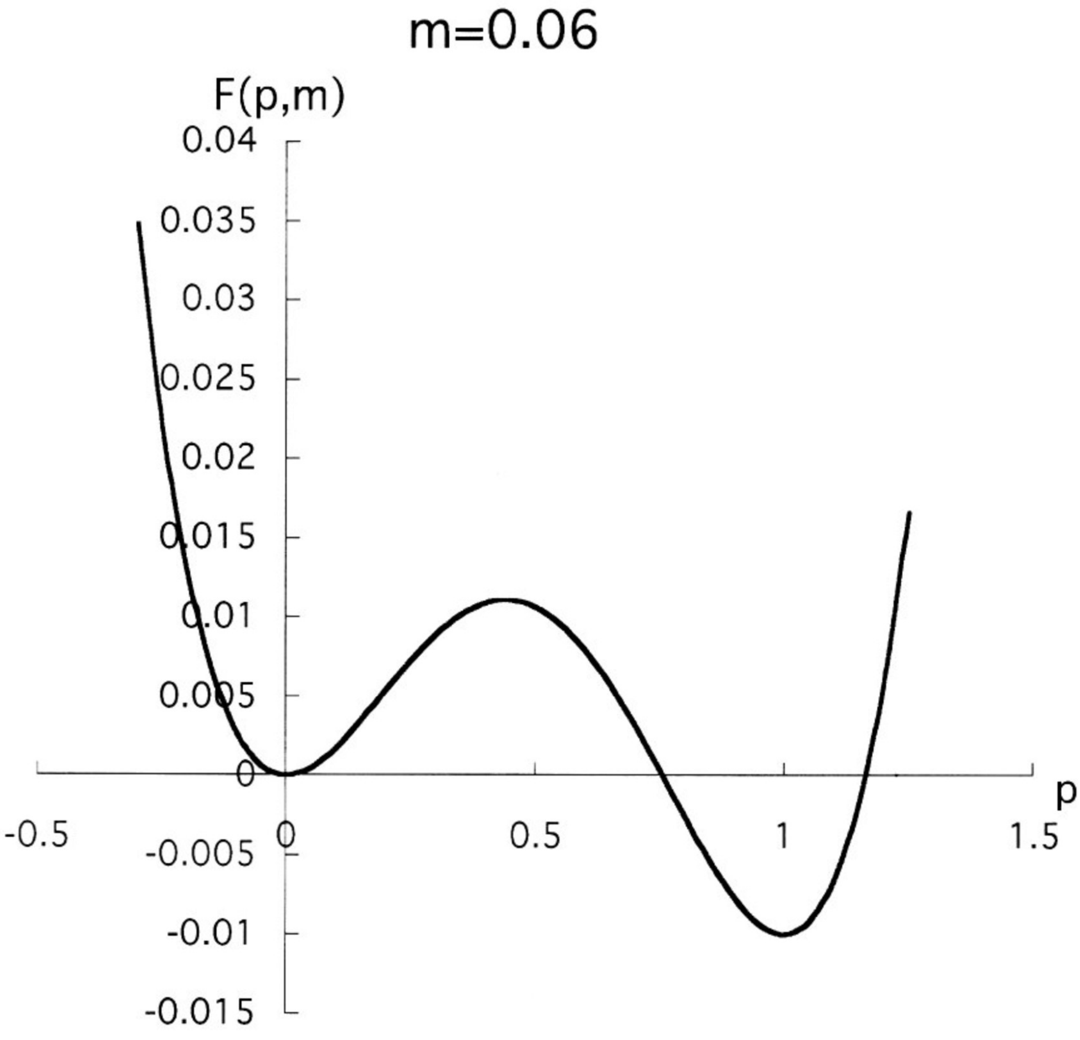

m=0.06
F(p,m)
0.04
0.035
0.03
0.025
0.02
0.015
0.01
0.005
0
-0.005
-0.01
-0.015
-0.5
0
0.5
1
1.5
p

図 4-27

(b)

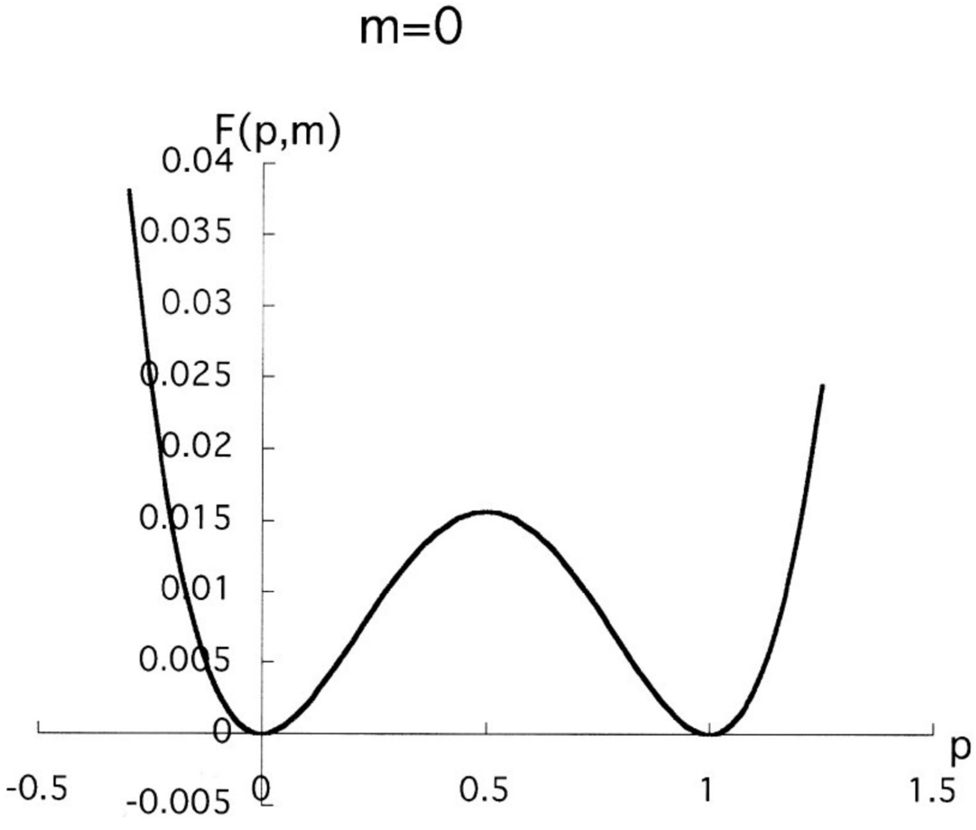


図 4-27

(c)

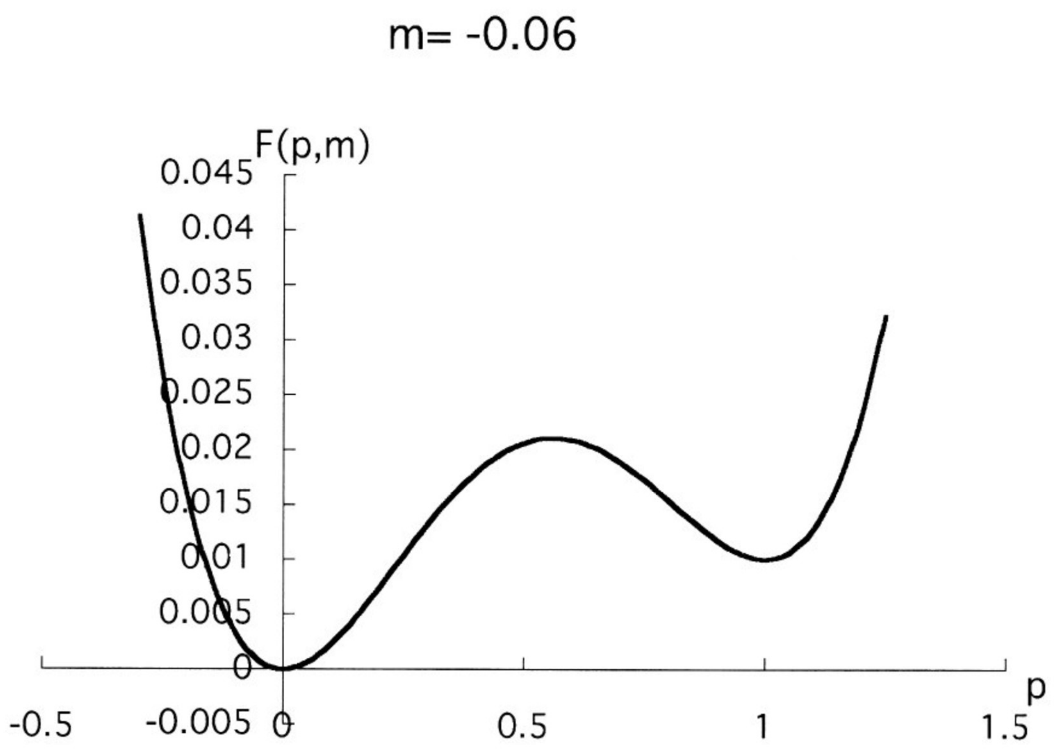


図 4-27　二重井戸ポテンシャル$F(p;m)$の概形

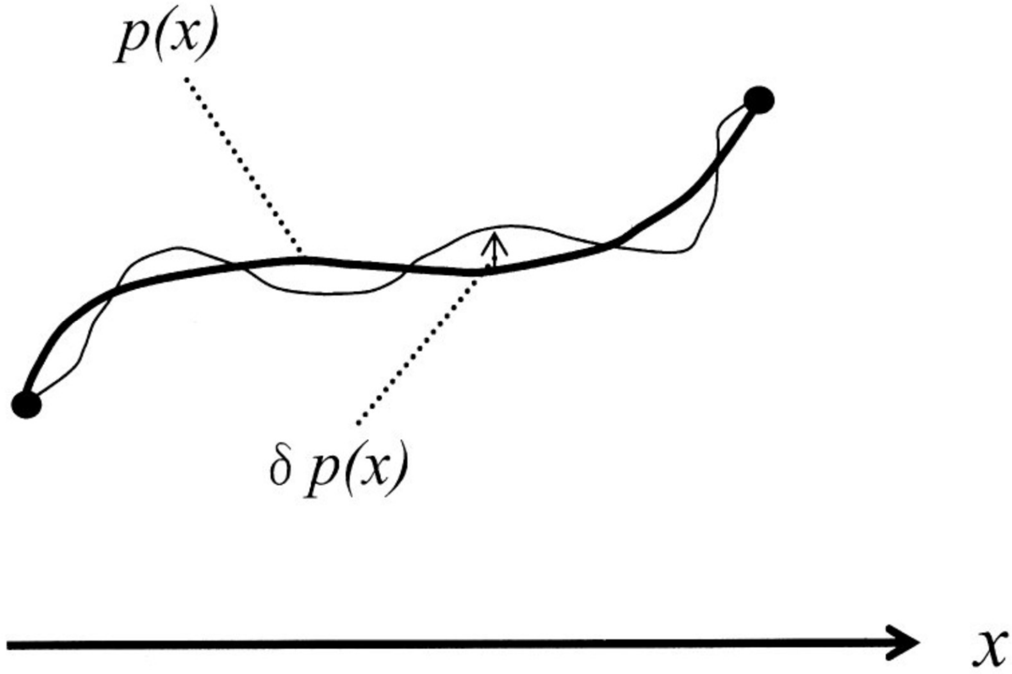


図 4-28　フェーズフィールド$p(x)$に対する変分$\delta p(x)$の模式図。$x = -\infty$, $x = +\infty$（もしくは系の端)で$\delta p(x) = 0$とする