○目　　次○

第1章　多粒子系の力学・熱力学の基礎

1.1　ニュートンの運動方程式 ……2
1.1.1　慣性系における運動方程式 ……2
1.1.2　エネルギーの保存と角運動量の保存 ……2
1.1.3　加速度系での運動方程式 ……3
1.1.4　質点系と剛体の運動方程式 ……3
1.1.5　ニュートンの方程式の不便さ ……3
1.2　ラグランジュの方程式 ……5
1.3　ハミルトンの方程式 ……7
1.3.1　運動方程式（正準方程式） ……7
1.3.2　変分原理とハミルトンの方程式 ……7
1.3.3　正準変換 ……8
1.3.4　対称性と保存則 ……9
1.3.5　リュウビルの定理 ……9
1.4　熱平衡状態 ……11
1.5　微視的統計量と現象論的物理量 ……12
1.5.1　ベルヌーイの式 ……12
1.5.2　ビリアルの定理 ……12

第2章　分子動力学法

2.1　分子動力学法の基礎 ……16
2.1.1　原子（分子）間ポテンシャル ……16
2.1.2　アンサンブル/巨視的条件の設定 ……36
2.1.3　運動方程式と初期条件, 境界条件 ……38
2.1.4　運動方程式の数値解法 ……43
2.1.5　原子（分子）の集団の構造特性と巨視的量の計算方法 ……53
2.1.6　拡張された分子動力学法 ……56
2.1.7　第一原理分子動力学法 ……64
2.2　材料（固体）系のシミュレーション ……70
2.2.1　初期構造の構成法 ……70
2.2.2　境界条件と荷重負荷条件の設定 ……73
2.2.3　フォノン分散曲線 ……76
2.2.4　ひずみ/応力 ……77
2.2.5　弾性定数 ……78
2.3　熱流体系のシミュレーション ……80
2.3.1　ポテンシャル関数・境界条件・初期条件の設定 ……80
2.3.2　バルク物性 ……83
2.3.3　界面・相変化 ……84
2.3.4　状態図, 超臨界とクラスタ ……89

第3章　メトロポリスモンテカルロ法

3.1　メトロポリス MC 法の基礎 ……102
3.1.1　はじめに ……102
3.1.2　メトロポリス MC 法の原理 ……102
3.1.3　メトロポリス MC 計算プログラム例 ……104
3.1.4　カノニカルアンサンブル MC 法 ……104
3.1.5　定温定圧アンサンブル MC 法 ……107
3.1.6　グランドカノニカルアンサンブル MC 法 ……107
3.1.7　ミクロカノニカルアンサンブル MC 法 ……109
3.1.8　Brownian Dynamics 法 ……109
3.1.9　疑似乱数の生成 ……110
3.2　相平衡状態のモンテカルロシミュレーション ……112
3.2.1　相平衡状態 ……112
3.2.2　相平衡の成立条件 ……112
3.2.3　CEMC 法による相平衡状態の実現 ……112
3.2.4　その他の MC 法 ……116
3.2.5　ギブスアンサンブル MC 法 ……117
3.3　自由エネルギーとエントロピー ……120
3.3.1　各種の自由エネルギー ……120
3.3.2　パラメータ積分による自由エネルギー評価 ……120
3.3.3　粒子挿入法による化学ポテンシャル評価 ……121
3.3.4　分布関数の利用 ……123
3.3.5　サンプリング効率の向上のために ……125

第4章　直接シミュレーションモンテカルロ法

4.1　DSMC 法の基礎 ……130
4.1.1　はじめに ……130
4.1.2　DSMC 法の計算手順の概要 ……130
4.1.3　DSMC 法の特徴 ……130
4.1.4　例題の概略 ……131
4.1.5　特定分布の乱数発生 ……132
4.1.6　関数副プログラム ……133
4.1.7　DSMC 計算で使用する配列変数 ……133
4.1.8　例題（超音速自由噴流）プログラムの開始 ……133
4.1.9　流れ場のセル分割 ……134
4.1.10　セル内分子数とシミュレーション分子の重み係数 ……135

4.1.11 分子モデル（VHS 分子と VSS 分子）-衝突計算その 1 ……135
4.1.12 分子間衝突の計算-衝突計算その 2 ……137
4.1.13 流入境界からの分子の流入 ……138
4.1.14 分子の物理空間（流れ場）内の移動 ……139
4.1.15 分子の所属セル算出と参照配列上での分子の並べ替え ……142
4.1.16 分子間衝突のプログラム-衝突計算その 3 ……142
4.1.17 流れ場データのサンプリング ……143
4.1.18 最終データ処理 ……144
4.1.19 例題プログラムからの発展 ……144
4.1.20 超音速自由噴流の DSMC プログラム ……145
4.2 分子衝突モデル ……150
4.2.1 緒言 ……150
4.2.2 ラーセン・ボルグナッケ（Larsen-Borgnakke：LB）モデル ……150
4.2.3 ボイド（Boyd）モデル ……151
4.2.4 DMC（dynamic molecular collision）モデル ……152
4.2.5 CTC（classical trajectory calculation）-DSMC モデル ……156
4.3 境界条件（流入境界，流出境界，固体表面（面分子干渉）） ……157
4.3.1 流入境界，流出境界 ……157
4.3.2 固体表面（面分子干渉） ……158
4.4 高速解法 ……161
4.4.1 並列計算機のアーキテクチャ ……161
4.4.2 SPMD モデルと MPMD モデル ……161
4.4.3 並列言語 ……161
4.4.4 プログラムの並列化の例 ……162
4.5 応用例 ……165
4.5.1 半導体工学における応用例 ……165
4.5.2 宇宙工学における応用例 ……166

第 5 章　離散粒子法

5.1 粉体・粒状体 ……172
5.1.1 粒状体モデル ……172
5.1.2 粉体・粒状体の変形とレオロジー ……173
5.1.3 粉体成形シミュレーション ……174
5.2 粒子系混相流 ……176
5.2.1 はじめに ……176
5.2.2 粒子系混相流におけるミクロ・マクロ ……176
5.2.3 流体運動の計算 ……177
5.2.4 粒子運動の計算 ……177
5.2.5 モデルパラメータ ……179
5.2.6 まとめに代えて ……180

第 6 章　格子ガス法

6.1 セル・オートマトンと計算力学 ……184
6.1.1 セル・オートマトンとは ……184
6.1.2 セル・オートマトンの特徴 ……184
6.1.3 セル・オートマトンの応用 ……185
6.2 格子ガス法による流れ解析 ……186
6.2.1 格子ガスオートマトン ……186
6.2.2 格子ボルツマン法 ……188
6.2.3 2 相格子ボルツマンモデル ……189
6.2.4 格子ガス法へのコメント ……190