

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	4.2.3 ボイド (Boyd) モデル	151
4.1.12 分子間衝突の計算-衝突計算その 2	137	4.2.4 DMC (dynamic molecular collision) モデル	152
4.1.13 流入境界からの分子の流入	138	4.2.5 CTC (classical trajectory calculation)-DSMC モデル	156
4.1.14 分子の物理空間 (流れ場) 内の移動	139	4.3 境界条件 (流入境界, 流出境界, 固体表面 (面分子干渉))	157
4.1.15 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	4.3.1 流入境界, 流出境界	157
4.1.16 分子間衝突のプログラム-衝突計算その 3	142	4.3.2 固体表面 (面分子干渉)	158
4.1.17 流れ場データのサンプリング	143	4.4 高速解法	161
4.1.18 最終データ処理	144	4.4.1 並列計算機のアーキテクチャ	161
4.1.19 例題プログラムからの発展	144	4.4.2 SPMD モデルと MPMD モデル	161
4.1.20 超音速自由噴流の DSMC プログラム	145	4.4.3 並列言語	161
4.2 分子衝突モデル	150	4.4.4 プログラムの並列化の例	162
4.2.1 緒言	150	4.5 応用例	165
4.2.2 ラーセン・ボルグナッケ (Larsen-Borgnakke: LB) モデル	150	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	5.2.2 粒子系混相流におけるマイクロ・マクロ	176
5.1.1 粒状体モデル	172	5.2.3 流体運動の計算	177
5.1.2 粉体・粒状体の変形とレオロジー	173	5.2.4 粒子運動の計算	177
5.1.3 粉体成形シミュレーション	174	5.2.5 モデルパラメータ	179
5.2 粒子系混相流	176	5.2.6 まとめに代えて	180
5.2.1 はじめに	176		

第 6 章 格子ガス法

6.1 セル・オートマトンと計算力学	184	6.2 格子ガス法による流れ解析	186
6.1.1 セル・オートマトンとは	184	6.2.1 格子ガスオートマトン	186
6.1.2 セル・オートマトンの特徴	184	6.2.2 格子ボルツマン法	188
6.1.3 セル・オートマトンの応用	185	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