

授業科目名	材料シミュレーション基礎論	必修の区分	
単位数	2.0	開講年次	1
講師名	鷲津仁志	所属	シミュレーション学研究所
オフィス・場所		連絡先	
講義目的及び到達目標	<p>本科目の目的は、ナノスケールからの材料設計により産業に役立つシミュレーション技法の基礎を理解することである。材料にはバルクと界面とがあり、バルクに関する量子および分子計算手法は確立されつつあるが、界面に関しては研究途上といえる。電池電極、摩擦現象、生体系のように、界面における電氣的、力学的なエネルギー変換効率がシステムの性能を決定する事例は多い。このような系においては、電子、原子から分子集団にかけてのスケール間の連成により機能発現することが一般的である。本科目では、バルクおよび界面におけるマルチスケールの材料シミュレーションの方法を学習するとともに、研究開発の現場における適用事例を検討する。到達目標は、目的に応じて既存の材料シミュレーション技術を選択、活用するとともに、既存手法のない場合は物理学、化学的に現実的な新規シミュレーション手法を研究開発する下地を身につけることとする。</p>		
講義内容・授業計画	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 表面物性と接触問題（1）ヘルツ接触と粘弾性</li> <li>2. 表面物性と接触問題（2）粒子間相互作用</li> <li>3. トライボロジー（1）流体潤滑</li> <li>4. トライボロジー（2）境界潤滑</li> <li>5. 連続体シミュレーション（1）有限要素法</li> <li>6. 連続体シミュレーション（2）格子ボルツマン法</li> <li>7. 連続体シミュレーション（3）均質化法</li> <li>8. 連続体シミュレーション（4）フェーズフィールド法</li> <li>9. 粒子シミュレーション（1）粉体の物理</li> <li>10. 粒子シミュレーション（2）離散要素法</li> <li>11. 粒子シミュレーション（3）粒子 (SPH) 法</li> <li>12. マルチスケール化（1）ブラウン運動と粗視化</li> <li>13. マルチスケール化（2）粒子-流体相互作用</li> <li>14. マルチスケール化（3）長距離クーロン系</li> <li>15. 全体のまとめ</li> </ol>		
テキスト			
参考文献	講義の中で適宜紹介する。		
成績評価の基準	学習態度と理解度により総合的に評価する。		
履修上の注意・履修要件			
地域に関する学修	該当しない。		
備考			