

授業科目名	計算物理の基礎	必修の区分	
単位数	2.0	開講年次	
講師名	鷲津仁志	所属	シミュレーション学研究科
オフィス・場所		連絡先	
講義目的及び到達目標	シミュレーション学の研究において、シミュレーションのプログラムを書き実行することは、その出発点である。本科目では、これまでシミュレーションを書いた経験のない学生を主な対象とし、簡単なシミュレーションを実行する中で、計算物理の基礎を身につけ、シミュレーション学研究の具体的なイメージを持てるようになることを目的とする。プログラムを書くためには、情報処理の基礎的な知識およびシミュレート対象の数理科学的な知識が必要となるが、その基礎についても解説する。演習には初学者にも簡易な Matlab を用いて、毎週、簡単な力学のシミュレーションのプログラムを書き、発展させていく。プリポスト処理や可視化などの基礎についても触れる。講義全体の終了時には、シミュレーションに必要な基本的な素養を一通り身につけることを目標とする。		
講義内容・授業計画	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 計算物理とは： 計算機シミュレーションの歴史と広がりについて概観する</li> <li>2. Matlab 入門： 酔歩のプログラムを書き、数値計算のプラットフォームを把握する</li> <li>3. 力学の基礎 1： 運動方程式と時間積分</li> <li>4. 力学の基礎 2： エネルギーの保存</li> <li>5. シミュレーションの基礎 1: ランジュバン動力学と確率過程</li> <li>6. シミュレーションの基礎 2: 様々な境界条件</li> <li>7. シミュレーションの基礎 3: プログラムの高速化，作業効率</li> <li>8. シミュレーションの基礎 4: 多次元系への拡張</li> <li>9. シミュレーションの基礎 5: 多粒子系への拡張</li> <li>10. 分子動力学 1： 可視化について</li> <li>11. 分子動力学 2: 初期状態の作成</li> <li>12. 分子動力学 3: 粒子間相互作用の導入</li> <li>13. 分子動力学 4: LJポテンシャルと分子間力</li> <li>14. 分子動力学 5: 物質の状態と統計力学</li> <li>15. 全体のまとめ</li> </ol>		
テキスト			
参考文献	力学および数学の関連図書 Matlab 関連図書		
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	物理学については講義の中で説明するので、事前の履修は必須としない。物理学に自信がない人ほど受けていただきたい。		
地域に関する学修	該当しない。		
備考			