

授業科目名 (英文名)	材料シミュレーション基礎論	科目区分 対象学生	
単位数	2.00	開講年次・ 学期	1年次・前期
担当教員	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	<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、界面における電気的、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シミュレーションの各種手法について概観する。そして、必要に応じて適切な手法を選択および開発するための基礎力を身につけることを目標とする。</p>		
講義内容・授業計画	<ol style="list-style-type: none"> 1. 表面物性と接触問題(1)ヘルツ接触と粘弾性 2. 表面物性と接触問題(2)粒子間相互作用 3. トライボロジック(1)流体潤滑 4. トライボロジック(2)境界潤滑 5. 連続体シミュレーション(1)有限要素法 6. 連続体シミュレーション(2)格子ボルツマン法 7. 連続体シミュレーション(3)均質化法 8. 連続体シミュレーション(4)フェースフィールド法 9. 粒子シミュレーション(1)粉体の物理 10. 粒子シミュレーション(2)離散要素法 11. 粒子シミュレーション(3)粒子 (SPH) 法 12-15. シミュレーションの現実的な問題への適用 		
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・方法	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	<p>修士課程の「実用材料系のシミュレーション」を受講していることが望ましい。</p> <p>当授業は、原則全ての授業を対面で実施する予定ですが、履修者人数によっては、新型コロナウイルス感染症対策として、履修者を複数の教室に分けて教室間をオンラインで繋ぐ方法や、対面授業と自宅でのオンライン授業を隔週実施する方法とすることがあり、自宅等でオンライン授業の受講を視聴できる通信環境(PC・タブレット等の端末やWi-Fi環境)が必要となる場合があります。最終的な授業方法は履修登録後に決定・連絡します。</p>		
実践的教育	該当しない。		
備考			