

授業科目名 (英文名)	実用材料系のシミュレーション	科目区分 対象学生	
単位数	2.00	開講年次・ 学期	1年次・後期
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>機械，電気，材料をはじめとする日本の産業において，物質の特性を理解し，より高機能なものへと工夫・発展させることは必要不可欠である。このような研究開発では，実験および理論が古くから用いられてきたが，現代ではシミュレーションを併用することは常識になりつつある。また，自動車や航空機，建築や土木など人よりも大きなものを設計する現場において連続体のシミュレーションは主要な開発手段となっているが，そうしたマクロなモデルの中にも材料特性を何らかの形で反映させなければ適切なものづくりにはならない。本講義では，これら材料シミュレーションの基本手法を習得し，課題に応じて必要な材料シミュレーション手法を選択できるようにな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. 実用材料のシミュレーション概説 2. 材料シミュレーションの階層性 3. 分子間に働く3つの相互作用 4. 分子動力学(1)概要 5. 分子動力学(2)計算の実際 6. 分子動力学(3)時間積分 7. 分子動力学(4)長距離力と拡張法 8. モンテカルロ法と統計力学 9. フラウン動力学 10. 量子化学の基礎 11. 分子軌道法 12. 密度汎関数法 13. 連続体の各種計算手法 14. 有限要素法 15. シミュレーションを用いた材料開発 		
テキスト			
参考文献	参考となる図書は適宜示す。		
成績評価の基準・方法	学生の習熟度と学習態度により，総合的に評価する。期末にレポート課題を課す。		
履修上の注意・履修要件	<p>計算科学の基礎を受講しておくことが望ましい。</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	該当する。講義中に，産業界で用いられる様々な材料シミュレーションについて紹介する。		
備考	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。