

<p>科目名：計算材料科学特論  (英文名：Advanced Computational Materials Science)  担当教員：上原拓也</p>	<p>開講学期：後期  単位数：2  開講形態：講義・演習</p>
<p>開講対象： システム情報工学専攻</p>	
<p><b>【到達目標】</b></p> <p>○微視的・材料科学的な理論に基づき，計算機シミュレーションを行うことによって，材料の巨視的な特性を予測，評価する手法を理解できる。</p> <p>○分子動力学法，モンテカルロ法，セルオートマトン法，フェーズフィールド法など，様々な手法の理論，特徴，アルゴリズム等について理解し，それらを用いたシミュレーションを実行できる。</p> <p><b>【授業概要・計画】</b></p> <p>第1～3週：数値解析の基礎</p> <p>第4～7週：様々な計算材料科学手法</p> <p>第8～11週：プログラムの作成</p> <p>第12～15週：シミュレーションの実行および結果の評価</p> <p><b>【成績評価の方法と基準】</b></p> <p>レポートにより達成度を判断する。</p> <p><b>【参考書】</b></p> <p>コンピュータ材料科学，D. Raabe 著，酒井，泉訳，森北出版（2004）.  Computational Materials Engineering, K.Janssens et al., Academic Press (2007).</p> <p><b>【担当教員の専門分野】</b></p> <p>固体力学，計算力学，材料科学</p>	