

# マテリアルシミュレーション(MA3916L1)

担当教員：坂田 利弥 准教授，竹原 宏明 講師

対象：第3学年	単位数：2.0	バイオ	環境・基盤	ナノ・機能
		限定	限定	限定

実施時期：A1A2 セメスター 水曜日 3 時限 場所：ECCS(大演習室 1)

## 講義目的

工学に多く現れる連立方程式や偏微分方程式について，マテリアルの研究開発で取り扱う題材を例としたシミュレーション演習を通じて，その基本的な解法や解の性質について理解を深める。

## 講義項目

1. 常微分方程式，連立方程式の数値的解法
2. 線形計画法による最適化
3. 偏微分方程式および初期条件と境界条件の分類
4. 偏微分方程式の代表的な数値解法：差分法（陽解法， $\theta$ 法，陰解法）
5. 1次元・2次元，定常・非定常熱伝導方程式の解法
6. マテリアル工学関連の例題演習（逐次化学反応，PID制御，材料最適選択，生産計画，電界強度分布，物質対流拡散，複合材料等）
7. Excel+マクロによる数値計算の操作

## 理解すべき事項

- ・ 常微分方程式，連立方程式の代表的解法（ルンゲクッタ法）
- ・ 偏微分方程式の代表的な数値解法（差分法の陽解法・陰解法，安定性）
- ・ 初期および境界条件の設定，数値計算上の注意点（数値誤差など）

## 関連する講義

事前履修：マテリアルズインフォマティクス、材料速度論

並行履修：薄膜プロセス工学

事後履修：マテリアル設計学

参考書（テキスト）：適宜配布

参考書（演習書）：

講義ノートのリック先：

成績評価：レポート

備考