

授業科目名	計算工学特論		
	- 数値シミュレーションで製品開発のコストダウンを：流体，振動，波動解析から化学計算まで -		
担当教員（所属）	《富山大学大学院理工学研究部（工学系）》、吉村敏章，佐藤雅弘、他 《外部講師》(株)ベストシステムズ：西 克也		
授業科目区分		授業種別	
時間割コード		対象所属	
開講日程	6月 - 8月 土曜日 1,2 限 (9:00~12:15)	対象学年	
		単位数	2 単位
連絡先（研究室、電話番号、電子メール等）	佐藤雅弘（電話 076-445-6736, E-mail: masa@eng.u-toyama.ac.jp ）		
オフィスアワー（自由質問時間）			
授業のねらいとカリキュラム上の位置付け（一般学習目標）			
近年，コンピュータの性能向上が著しい。それに伴って，製品の開発に数値シミュレーションを利用することが常識となっている。本授業では，流体力学，振動，波動，電磁気界解析から化学計算まで，その理論と使い方を基礎から解き明かす。さらに，解析可能な物理現象の拡大や，コンピュータのパワーアップの現状を探る。			
達成目標			
1) 数値解析の基礎的知識を学ぶ。 2) 数値解析法について理解し，演習によって実践力をつける 3) 量子化学計算の概要を理解し，演習によって実践力をつける。 4) 振動・波動の数値解析法について理解し，演習によって実践力をつける。 5) 最近の解析手法，シミュレーション用コンピュータの進展について，概要を知る。			
授業計画（授業の形式、スケジュール等）			
第1回(6/25)	微分方程式と数値計算と流体力学		未定
第2回(6/25)	コンピュータ操作と第1回の例題演習		未定
第3回(7/2)	電界、磁界、熱などの定常場問題の解析法		未定
第4回(7/2)	第3回の例題演習		未定
第5回(7/9)	量子化学計算の概要		吉村
第6回(7/7)	実習 パソコンを用いた半経験的分子軌道法による生成熱の計算		吉村
第7回(7/16)	実習 H P C と GAUSSIAN プログラムによる非経験的分子軌道法(ab initio 法)		吉村
第8回(7/16)	実習 ab initio 法による化学反応、IR や UV スペクトルのシミュレーション		吉村
第9回(7/23)	振動・波動のシミュレーション，講義 1		佐藤
第10回(7/23)	振動・波動のシミュレーション，講義 2		佐藤
第11回(7/30)	振動・波動のシミュレーション，実習 1		佐藤
第12回(7/30)	振動・波動のシミュレーション，実習 2		佐藤
第13回(8/6)	最近のシミュレーション技術		西
第14回(8/6)	H P C (high performance computing) の現在 1		西
第15回(8/20)	H P C (high performance computing) の現在 2		西
キーワード	コンピュータシミュレーション，流体力学，振動・波動，量子化学，半経験的分子軌道法，非経験的分子軌道法，化学結合，化学反応熱，分子構造，分子振動解析		
履修上の注意			
教科書・参考書等			
成績評価の方法			
関連科目			
リンク先 URL			
オープン・クラス		単位互換	
備考			

7	[実習] HPCとGAUSSIANプログラムによる非経験的分子軌道法(ab initio法) (吉村)	HPCでGAUSSIANプログラムを実行する準備と上記の入力データをGAUSSIAN用に変換し、実際に非経験的分子軌道法(ab initio法)によりいろいろな物質の構造最適化を行い、出力結果からdipole moment, ionization potential, 結合距離, 結合角や生成熱を読み取り、実測値との比較を行う。また電荷やフロンティア軌道を図示し、反応性指数からいろいろな試薬がどの原子に反応し易いかを予測する。
8	[実習] ab initio法による化学反応、IRやUVスペクトルのシミュレーション (吉村)	同様にいろいろな化合物の構造を最適化し、それぞれ振動解析によりIRスペクトルを予想し、またTDDFT法を用いて励起エネルギーを計算して、UVスペクトルをシミュレーションする。また化学反応をシミュレートするために反応式のそれぞれの物質を構造最適化し、エネルギー及び、振動解析から零点エネルギーを求め、また必要に応じて遷移状態の構造を最適化し、反応のエネルギー図を完成させる。
9	振動・波動のシミュレーション1 (佐藤)	以降4回の講義で、音波や固体の波動(以降、音波に対して弾性波と呼ぶ)・振動の解析を行う。特に、時間とともにどのような動きをするかを解析し、簡単なアニメーションを作ることを目的としている。この講義は、一部、電磁波の解析にも利用できる。1回目は、解析の基本となる物理式について講義する。
10	振動・波動のシミュレーション2 (佐藤)	解析手法にfinite difference time domain (FDTD)法を使う。従ってFDTD法の基礎について講義する。前回講義した物理式をどのように近似して解析するかを具体的に説明する。コンピュータに実行させる際の言語は、FORTRANを使う。大規模な計算の場合は、FORTRANが一般的に使われる。この講義では、FORTRANの基本的な規則と簡単な命令について講義する。よく知られているC言語とそう大きな違いはなく、計算に特化されているのですぐに覚えることができると思う。
11	[実習] 振動・波動のシミュレーション3 (佐藤)	以降2回、実際にプログラミングを行う。また、その解析結果から、アニメーションを作る実習を行う。今回は、音波に焦点を当てて実習を行う。1・2次元の計算モデルを設定し、入力信号の入れ方、境界条件の設定法、吸収境界(音波が跳ね返ってこない境界)の設定法、音波の伝播の様子などを、具体的な実習を通して学ぶ。
12	[実習] 振動・波動のシミュレーション4 (佐藤)	最後は、固体に衝撃を与えたときの振動の様子を解析する。前回の音波の解析と同様に、計算モデルを設定し、プログラミングを行う。音波と弾性波は、その基本物理式が異なるので、境界条件の設定法や、吸収境界の設定法に違いがある。解析結果からアニメーションを作製し、弾性波の挙動を観察する。また、FDTD法による、固体のモード解析の方法について説明する予定である。
13	最近のシミュレーション技術 (西)	シミュレーション技術は、日々進化している。解析できる分野が大きく広がっている。この講義では、最近のシミュレーション技術を概観する。
14	スーパーコンピュータ技術1 (西)	最近、スーパーコンピュータ並みの高速計算の出来るコンピュータが安価に手に入るようになった。この後2回にわたって、高速計算機の現状について概観する。1回目は、並列計算、GPU(graphics processing unit)による高速計算について解説する。
15	スーパーコンピュータ技術2 (西)	インターネットなどの広域のネットワーク上にあるコンピュータ資源を結びつけ、ひとつの複合したコンピュータシステムとしてサービスを提供する仕組みをグリッド・コンピューティングと呼ぶ。最近グリッド・コンピューティングのHPCへの応用が試みられている。この講義では、グリッド・コンピューティング技術について解説する。