

材料の数理モデリング

マルチスケール 材料シミュレーション

伊藤 公久
国吉 ニルソン
鈴木 進補
平田 秋彦
細井 厚志
山本 知之

〔共著〕

コ ロ ナ 社

まえがき

科学、工学の分野では、実験と理論をもとにした理解が基本となっているが、現代においては、それらを支える手段として計算シミュレーションが大きな役割を果たしている。特に、近年ではシミュレーション技術の発展が著しく、多くのソフトウェアが開発されており、材料科学の分野においても必須の道具の一つとなっている。材料科学の特性として、単一のスケールや現象にフォーカスした理解だけではなく、俯瞰して複数の側面から物質を眺める必要がある。本書の副題にもしているように、「マルチスケール」で物質を見ることが材料科学分野においては特に重要であり、それぞれのスケールにおける指導原理を理解したうえで、シミュレーションを行うことが要求される。多くの場合、シミュレーションを行う者自身のバックグラウンドに近い分野のみのシミュレーションに精通するだけにとどまり、ほかのスケールにおけるシミュレーションに対しては経験がない、もしくはきわめて理解が乏しくなっている。得意とする分野ではない分野のシミュレーションに挑戦するためには、そのシミュレーション技術の専門書一つずつ当たることになってしまい、新しい挑戦に対して高い障壁を感じてしまうことも多いと思われる。本書は、さまざまなスケールにおけるシミュレーションに対して、個々のスケールにおける基本の理解を目指して、1冊の書籍にまとめたものである。本書で採用した内容は、早稲田大学基幹理工学研究科材料科学専攻修士課程における必修科目「数理の材料モデリング」の講義、実習内容を中心に構築したものである。大学教養課程における数学、物理、化学を履修済みで、材料科学におけるマルチスケールでの種々のシミュレーションに対する基本を習得することを目指している学部高学年の大学生および大学院生、ならびに材料のシミュレーションを実際に行っている、またはこれから行いたいと考えている研究者、技術者を読者として想定している。

本書は6人の共同で執筆された。それぞれの章の執筆担当は第1章（平田・伊藤）、第2章（国吉）、第3章（山本）、第4章（平田）、第5章（細井）、第6章（鈴木）、第7章および第8章（伊藤）である。

なお、本書の構成および具体的な内容については、第1章に詳しく述べているので、参照いただきたい。

2026年3月

著者一同

目 次

第1章 本書の目的, 全体像

1.1 はじめに	1
1.2 各シミュレーション手法の概説	2
1.3 まとめ	4

第2章 量子化学計算

2.1 古典の波動方程式からの展開	6
2.2 水素様原子の波動関数とエネルギー	9
2.3 磁石としての電子	12
2.4 多電子原子	13
2.5 多電子・多核分子の波動関数とエネルギー	15
2.6 分子の位置エネルギーと最適構造	19
2.7 分子振動と光との相互作用	21
2.7.1 分子の振動と赤外線吸収スペクトル	21
2.7.2 分子の振動と回転による赤外線吸収スペクトルの複雑化	23
2.8 連続体の量子化学計算	25
章末問題	26

第3章 第一原理計算

3.1 第一原理計算に必要な基礎知識	27
3.1.1 結晶構造	27
3.1.2 周期系に対するシュレーディンガー方程式	34
3.1.3 電子状態密度	36
3.1.4 逆空間	37

3.1.5 結晶の電子状態の見方	39
3.1.6 第一原理計算の分類	42
3.1.7 計算手順	43
3.2 第一原理計算の実例	44
3.2.1 結晶構造の最適化	44
3.2.2 相安定性の評価	47
3.2.3 欠陥をもつ結晶の計算	48
3.2.4 圧力印加時の計算	49
3.2.5 電子状態計算	51
章末問題	54

第4章 分子動力学計算

4.1 分子動力学計算の原理	55
4.1.1 初期条件および境界条件	56
4.1.2 原子間に働く力	57
4.1.3 運動方程式の数値計算	59
4.1.4 温度および圧力の制御	61
4.1.5 計算結果の解析	65
4.2 分子動力学計算の実例	66
章末問題	70

第5章 有限要素法

5.1 有限要素法の原理	71
5.1.1 形状関数 (Nマトリックス)	72
5.1.2 変位とひずみの関係 (Bマトリックス)	73
5.1.3 応力とひずみの関係 (Dマトリックス)	74
5.1.4 要素剛性マトリックス (Kマトリックス)	77
5.1.5 全体剛性マトリックス	81
5.2 シミュレーションによる実例	85
5.2.1 解析モデル形状	86
5.2.2 要素分割および境界条件設定	86
5.2.3 応力解析	87
章末問題	89

第6章 伝熱・凝固解析

6.1 伝熱・凝固解析の計算原理	90
6.1.1 熱伝導方程式	90
6.1.2 有限差分法	93
6.1.3 境界条件	96
6.1.4 凝固潜熱補正	98
6.2 伝熱・凝固解析の実例	103
6.2.1 凝固潜熱補正を伴わない1次元熱伝導問題における温度分布変化の計算	103
6.2.2 接触熱抵抗を取り入れた計算	104
6.2.3 凝固潜熱補正を伴わない2次元熱伝導問題における温度分布変化の計算	106
6.2.4 凝固潜熱補正を伴う2次元熱伝導問題における温度分布変化の計算	107
章末問題	108

第7章 粒子法による流体運動の計算

7.1 流体運動の方程式	110
7.1.1 流体運動の記述法	110
7.1.2 連続の式	113
7.1.3 ナビエ・ストークス方程式	114
7.1.4 ニュートン流体	116
7.1.5 流体方程式の数値計算	117
7.2 粒子法の計算原理	117
7.2.1 SPH 法	117
7.2.2 SPH法による非圧縮性流体の計算	120
7.2.3 MPS 法	120
7.3 材料プロセスにおける応用例	122
7.3.1 流体の大変形計算	122
7.3.2 熱伝導方程式や化学反応速度式との連成	124
7.3.3 非ニュートン流体の計算	125
章末問題	126

第8章 状態図計算

8.1 状態図概説	127
8.1.1 2成分系状態図	128

8.1.2	3成分系状態図	130
8.1.3	化学ポテンシャル状態図	131
8.2	状態図計算の原理	131
8.2.1	ギブスエネルギーと状態図	131
8.2.2	CALPHAD 法	132
8.2.3	溶液モデルによるギブスエネルギーの計算法	133
8.2.4	熱力学データベース	136
8.3	状態図計算の実例	137
8.3.1	正則溶液モデルを用いた2元系状態図の作成	137
8.3.2	市販ソフトウェアの紹介	141
	章末問題	142
	引用・参考文献	143
	章末問題解答	147
	索引	155

第1章 本書の目的, 全体像

本章では、本書の目的や全体像を概説し、次章以降で各計算手法の詳細の説明を行う。

1.1 はじめに

工学は、人々の幸福に資するための学問であり、各種の工学理論に基づいて、どのような製品でも自由に設計することができる。しかし、自由に設計された製品を、実際にわれわれが製造できる可能性はきわめて低い。それは理論が要求する条件を現実を満たすことのできる材料が手に入らないからである。工学理論はさまざまな夢を見させてくれるにもかかわらず、設計とその実現の間には、越えるのがきわめて困難な谷が存在する。これを図1.1に示し、「材料の谷」[†]と呼ぶことにしよう。ここで、「材料」を「工学的設計条件を満たして現実の製品となりうる素材」と定義しておく。この「材料の谷」は、この世界を構成しているのが、現在われわれが知るところ118種類の元素に限られていることに起因している。現実的には超ウラン元素を除く92種類の元素を組み合わせると、「材料」を創製していくのが、材料科学の使命の一つといえよう。

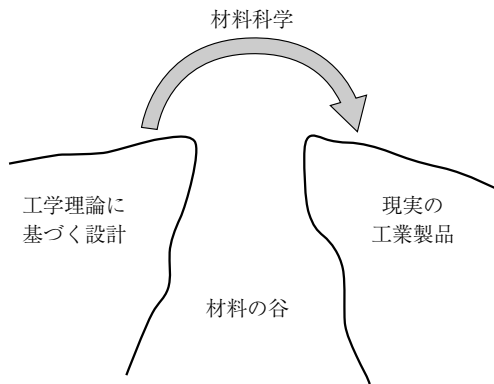


図1.1 「材料の谷」の存在

物質は原子の集合体として理解されるので、まずは個々の原子間の相互作用や結合について理解する必要があるだろう。さらに、これら結合体を集めた大きな集合体の振る舞いが重要になるだろう。つぎには、これらの集合体が合体した、さらに大きなユニットについての理解が

[†] 研究結果が製品開発に結びつかないことを表現する「死の谷」になぞらえてみた。

必要である。原子一つの大きさは0.1 nmのオーダーなので、われわれが日常で知覚できる大きさに対しては、1億倍以上の開きがある。したがって、「材料」を扱うためには、原子のサイズから積み重ねられる階層的な構造のすべての範囲にわたって、考察の対象となる「材料」を理解することが重要になる。

現実には、それぞれの集合体のスケールに応じた理論やモデルが存在し、これらを駆使して「材料」の研究を進めるのが通常である。本書では、以上の観点に基づきながら、材料科学で用いられているさまざまなシミュレーションの原理と基礎について、学んでいただくことを目的としている。

1.2 各シミュレーション手法の概説

身の回りの工業製品には、さまざまな材料が利用されており、それぞれの用途にあった特性をもつように材料自体が作られている。例えば、代表的な材料である鉄に関して、「鉄」と一言でいうことが多いが、不純物の除去、添加元素による成分調整、熱処理による組織制御、加工処理による欠陥制御など、用途に合わせて非常に複雑なプロセスを経て作られており、けっして原料である鉄鉱石そのものを使っているわけではない。これはどのような材料についても同様であり、先端材料開発においては、材料の原子から組織レベルでの制御が必須となっている。実験による試行錯誤を通じて材料を制御し、新規材料の創製を目指すことはいうまでもなく重要であるが、材料中の現象を理解し、より効率よく材料開発を行うことも大事である。近年、計算機の発達に伴い、材料における種々の現象を再現する計算機シミュレーション手法が広く利用されてきており、材料開発におけるこれらの役割もますます大きくなってきている。このような状況を鑑み、本書では、電子・原子レベルのミクロスケールから、工業製品が実際に利用されるマクロスケールまでのさまざまな計算機シミュレーション手法の詳細を順に解説する。

ここでは、次章以降に紹介する各シミュレーション手法に関して、概要を述べる。

量子化学計算（第2章）

量子化学計算とは、材料の力学的、電氣的、磁氣的性質などを決定する原子間の相互作用を理解する目的で、原子や分子における電子状態に着目した手法であり、電子の振る舞いを計算することから、量子力学に基づいた計算手法となっている。その名のとおりに、おもに化学分野で取り扱われる化学結合や化学反応を対象とし、これにより、分子の安定構造や化学反応の反応経路、分子の電荷分布などを計算することができる。原子・分子における電子の状態について、量子力学におけるシュレーディンガー方程式を解くことになるが、通常多くの電子が含まれることから、多電子系に対する近似法が開発されてきた。第2章では、原子核1個、電子1個からなる水素様原子に関する説明から入り、多電子系に対するハートリー・フォック近似など、いくつかの近似法の詳細を説明する。

第一原理計算 (第3章)

第一原理計算とは、第2章で説明する量子化学計算と同様、電子状態の計算を行う手法であり、量子力学に基づく計算となるが、おもに分子やクラスタなどの反応過程を取り扱う量子化学計算とは異なり、材料として重要な固体、特に原子が周期的配列をもつ結晶に関して取り扱うことが多い。これにより、結晶のような周期構造における電子状態を表すバンド構造や格子振動を記述するフォノン分散などの予測におもに利用される。第3章では、結晶学の基礎、周期系でのシュレーディンガー方程式、逆空間での電子状態(バンド構造)の記述などを説明し、その後多電子系のシュレーディンガー方程式を解く近似法として、密度汎関数法を用いた計算例を紹介する。

分子動力学計算 (第4章)

分子動力学計算とは、材料中に存在する多数の原子や分子のおもに動的な挙動を調べることが目的とした手法であり、一旦原子間に働くポテンシャルが決定されれば、あとは古典力学に基づいた運動方程式を解けばよい。原子間ポテンシャルは、第2章、第3章で論じられた電子状態に基づいて決定されていることが多く、実際に第一原理計算によって求められたポテンシャルも多く存在する。また、原子・分子が多数存在する場合の運動方程式は直接解けないため、差分方程式として数値的に求めることとなる。標準的な原子数はおよそ $10^4 \sim 10^6$ であり、時間スケールはおよそナノ秒からマイクロ秒であることから、バルク材料における空間・時間スケールには及ばないことに注意する必要がある。第4章では、原子間ポテンシャル、運動方程式の数値計算、結果の解析法などを説明したあと、液体からのアモルファス形成に関する計算例を示す。

有限要素法 (第5章)

第2章から第4章までは、電子・原子のようなマイクロなスケールを対象にしていた。第5章では、マクロスケールでの材料の変形や応力状態を計算することを目的とした計算手法である有限要素法を紹介する。有限要素法は、マクロな構造物に対して、三角形などの有限個の要素を使って空間を区切ることにより形状を近似し、古典力学における仮想仕事の原理を用いて各要素での変位や応力場などの計算を行うことにより、構造物の変形や破壊などのシミュレーションをおもに行うものである。第5章では、変位とひずみの関係、応力とひずみの関係に始まり、仮想仕事の原理を満たす節点変位と節点力の関係のマトリックス表示を説明し、その後シミュレーションによる実例を示す。

伝熱・凝固解析 (第6章)

第6章では、材料の液相が凝固する過程での、温度および固相率の分布の時間経過に伴う変化の計算手法である伝熱・凝固解析について説明する。このような凝固現象の理解は、特に材料製造プロセスにおいて重要となる。また、本手法の計算も、第5章の有限要素法と同様、マクロスケールに関するものとなる。基本となる方程式は熱伝導方程式であり、特に非定常熱伝導方程式では、時間経過に伴う材料の各場所での温度変化を追跡することが可能となる。第6章では、熱伝導方程式の基礎から入り、有限差分法、境界条件、凝固潜熱補正のいくつかの手法を紹介し、最後に解析の実例を示す。

粒子法計算 (第7章)

粒子法計算とは、流体の動きをシミュレートするための計算手法であり、その流体を粒子の集まりとして表現することが特徴である。第6章の伝熱・凝固解析と同様、材料製造プロセスにおいて重要な役割を果たすものであり、基本的にはマクロスケールでの計算手法となる。第7章では、流体の基礎に始まり、流体運動を記述するナビエ・ストークス方程式の説明、これを離散化して数値計算する手法であるSPH法およびMPS法の解説を行う。SPH法では空間離散化のためにカーネル近似と呼ばれる方法を採用しているのに対し、MPS法では、関数のテイラー展開に基づいた微分についての近似モデルを用いることが特徴である。章の最後に、材料プロセスにおける応用例を示す。

状態図計算 (第8章)

材料はその温度や圧力、化学組成などによって、安定に存在する相が変化する。準安定な相も含めれば、材料の組織はいくつかの相によって構成され、複雑に入り組んだものとなることが多い。状態図計算では、熱力学に基づいた計算により、熱処理による相形成、冷却過程における組織形成、材料における各相の組成や割合などの予測に利用することが可能である。対象とするスケールは、材料組織のスケールであり、具体的にはおよそサブミクロンからミリメートルである。第8章では、状態図の基礎から始まり、CALPHAD法と呼ばれる手法を中心に、状態図の原理と計算アルゴリズムについての解説を行い、その後市販ソフトウェアの紹介をする。

1.3 ま と め

本書では、前節に述べたような材料におけるさまざまなスケールにおける計算機シミュレーションの原理と実例について紹介し、読者がマルチスケールなものの見方を習得することを目的としている。

まず、量子化学計算(第2章)と第一原理計算(第3章)は電子状態計算であり、材料の構成要素である原子や分子どうしの結合の性質などに関係している。これらの手法ではシュレーディンガー方程式を基礎としており、量子力学に基づいたものとなっている。このような電子状態に関する知見は、原子や分子の動的挙動を調べる分子動力学計算(第4章)の中で、原子間ポテンシャルとして埋め込まれている。つまり、原子の動的挙動は古典力学に従うものの、原子間に働く力には量子力学の知見が取り込まれている。最近では、電子状態を計算しながら分子動力学計算を行う、第一原理分子動力学法も広く使われている。ただし、分子動力学法は原子個々の動きを計算するため、計算できる原子数は限られ、多くの場合約100 nm以下のスケールである。

一方、第5章から第8章までに紹介する手法は、基本的にマクロスケールの現象を取り扱っている。有限要素法(第5章)では、マクロ構造体の変形挙動を調べることを目的としてお

り、弾塑性力学を基礎として比較的変形量の少ない固体の変形や応力の解析などを厳密に扱うことが可能である。ここでは、古典力学における仮想仕事の原理が基礎となっている。また、伝熱・凝固解析（第6章）では、熱伝導方程式に基づき、材料の製造プロセスにおいてどのように熱が伝わるか、また液体からの冷却により材料が凝固するプロセスを予測することができる。さらに、粒子法計算（第7章）はマクロな流体を粒子の集まりで近似することにより、その流れや変形などのシミュレートナビエ・ストークス方程式を基礎として行うものであり、材料製造プロセスにおける流体の計算が可能となる。熱伝導方程式およびナビエ・ストークス方程式はどちらも物質を連続体として扱うという共通点がある。状態図計算（第8章）は熱力学を基礎として、材料の組織を形成する相の安定性を議論できるものであり、材料の製造プロセスによりどのような組織が形成されるかを予測することが可能である。

上述したように、それぞれの計算手法はその対象とする時間・空間スケールにより、異なる基礎学問に立脚していることがわかる。例えば、第2章や第3章で取り扱う電子状態の計算には量子力学が基礎となる。また、古典力学が基礎となる計算であっても、第4章では個々の原子・分子の運動を議論するが、第5章では物質を連続体として取り扱っている。第6章や第7章においても、物質を連続体として捉え、時間変化に対する挙動を微分方程式で記述している。また、第8章は物質のマクロな性質を記述する熱力学が基礎となっている。このように、それぞれのスケールや現象に応じて基礎となる学問が存在し、各現象を記述する方程式に関してさまざまな近似法を使った数値計算が行われており、本書はそれらについて簡潔にまとめたものとなる。それぞれの計算手法に関する時間スケールおよび空間スケールについて図1.2に示す。

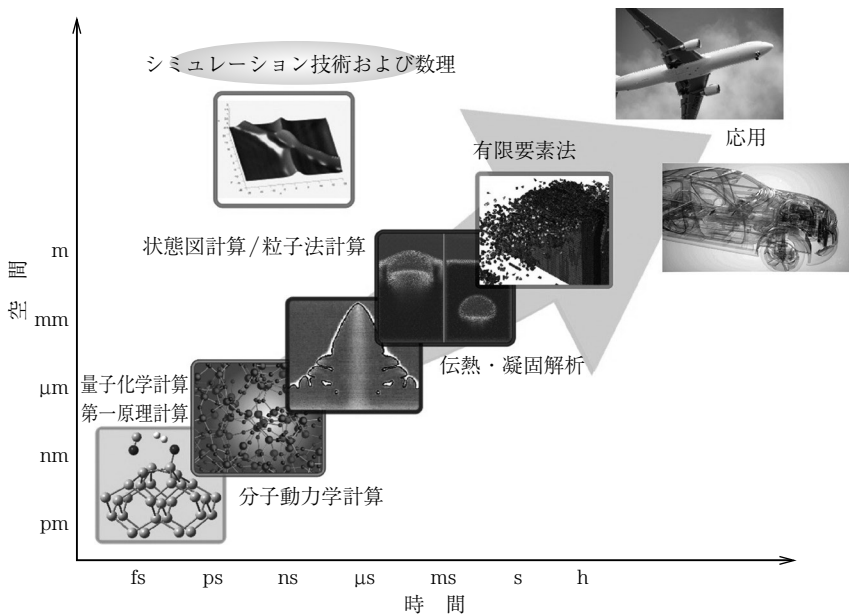


図1.2 材料シミュレーション手法の時間スケールおよび空間スケールの概要

索引

<p>【あ】</p> <p>アモルファス構造 66 アンサンブル 64</p> <p>【い】</p> <p>イオン芯 34 一般化勾配近似 43 陰的解法 94</p> <p>【え】</p> <p>エンタルピー 49 エンタルピー法 102</p> <p>【お】</p> <p>オイラー式記述 111 オイラー法 60 温度回復法 99 温度拡散係数 92</p> <p>【か】</p> <p>回転定数 24 回転量子数 23 ガウスの発散定理 79 化学的短距離秩序 68 化学ポテンシャル状態図 131 角運動量 10 可視光線 11 仮想き裂開口法 83 仮想仕事の原理 77 価電子帯 37 カーネル近似 118 カノニカル分布 62 慣性モーメント 23 間接遷移型 41</p> <p>【き】</p> <p>擬固有方程式 17 基準振動モード 21 擬塑性流体 117 基底関数 17 基底電子状態 12 擬ポテンシャル法 42 基本構造 28 基本単位格子 27 逆空間 37 吸収スペクトル 11</p>	<p>共役勾配法 45 局所密度近似 43 禁制帯 39</p> <p>【く】</p> <p>空間格子 28 クーロン引力ポテンシャル 9 クーロン積分 16 クーロン斥力ポテンシャル 13</p> <p>【け】</p> <p>結合力モデル 83 結晶系 28 結晶構造 27 原子軌道 9 厳密解 92</p> <p>【こ】</p> <p>交換積分 16 格子 27 格子点 27 剛体回転子 23 後退差分法 94 誤差関数 92 コーシーの関係式 78 固有関数 8 固有値 8 固有方程式 8</p> <p>【さ】</p> <p>最適構造 20</p> <p>【し】</p> <p>紫外線 11 磁気モーメント 12 磁気量子数 10 実質微分 113 周期境界条件 35 自由電子 34 自由電子モデル 34 縮重度 24 シュテファン・ボルツマン定数 97 主量子数 10 シュレーディンガー方程式 8 状態密度 37 振動単位 22 振動数 21</p>	<p>【す】</p> <p>水素様原子 9 スティリンジャ・ウェーバーポテンシャル 59 スーパーセル 48 スピンの多重度 12</p> <p>【せ】</p> <p>正則溶液モデル 134 赤外線 22 赤外線吸収スペクトル 23 節点 71 ゼーマン効果 12 ゼロポイントエネルギー 22 線形結合 17 前進差分法 94 選択律 24</p> <p>【そ】</p> <p>双極子モーメント 21 層流 115 速度スケージング法 61 塑性流体 116</p> <p>【た】</p> <p>体積圧縮率 49 ダイラタント流体 117 ターソフポテンシャル 59 多電子原子 14 単位格子 28 弾性定数 50</p> <p>【ち】</p> <p>調和振動子 19 直接差分法 96 直接遷移型 41</p> <p>【て】</p> <p>定常熱伝導方程式 90 定常波動関数 8 点欠陥 48 電子スピン 12 電子励起 12 伝導帯 37</p>
--	---	--

【と】	非ニュートン流体	116	【も】		
投影状態密度	ビンガム流体	116	モースポテンシャル		58
等価比熱法			【ゆ】		
【な】	【ふ】		有限差分法		93
ナビエ・ストークス方程式	フェルミエネルギー	37	【よ】		
【に】	フェルミ準位	37	要素		71
ニュートンの粘性の法則	フォック演算子	17	陽的解法		94
ニュートン流体	部分状態密度	42	【ら】		
【ね】	ブラベール格子	29	ライマン系列		11
熱伝達係数	フーリエの法則	90	ラグランジュ式記述		111
【は】	ブリュアンゾーン	38	ラグランジュ微分		113
パウリの排他原理	プロッホ関数	36	乱流		115
波数	分極連続体モデル	25	【り】		
パーチ・マナーハンの状態方程式	分子軌道	15	理想溶液		134
49	【へ】		【れ】		
ハートリー・フォック連立方程式	平面波	35	レイノルズ数		115
17	平面波基底擬ポテンシャル法	42	レオロジー		116
バネ定数	ベガール則	51	レナード・ジョーンズ		
ハミルトニアン	ヘシアン行列	21	ポテンシャル		57
ハミルトンの正準方程式	バルレ法	60	連続の式		113
19	【ほ】		【ろ】		
ハミルトンの正準方程式	ボア半径	9	ローターン・ホール方程式		18
バルマー系列	方位量子数	10			
バンドギャップ	ほぼ自由な電子モデル	34			
バンド構造	ボルン・オッペンハイマー近似	15			
【ひ】	ポロノイ多面体解析	65			
非定常熱伝導方程式	【み】				
91	密度汎関数法	42			

【A】	【M】	【S】
Andersen の方法	MO	SCF 計算
63	15	18
AO	MPS 法	SGTE
9	120	134
【C】	【N】	SPH 法
CALPHAD 法	NMR 法	117
131	12	【V】
【E】	Nosé-Hoover の方法	Vegard 則
EAM ポテンシャル	63	51
ESR 法	Nosé の方法	62
12	【P】	【W】
【I】	P 枝	WCSPH 法
ISPH 法	PCM	120
120	【R】	【Z】
【L】	R 枝	ZPE
LC	24	23
17	25	【数字】
	24	2成分系
		128
		2電子間の積分
		18

— 著者略歴 —

伊藤 公久 (いとう きみひさ)

1978年 東京大学工学部金属工学科卒業
1980年 東京大学大学院工学系研究科修士課程修了(金属工学専攻)
1983年 東京大学大学院工学系研究科博士課程修了(金属工学専攻), 工学博士
東北大学助手
1986年 Carnegie-Mellon University 博士研究員
1991年 早稲田大学助教授
1996年 早稲田大学教授
現在に至る

鈴木 進補 (すずき しんすけ)

1993年 早稲田大学理工学部機械工学科卒業
1995年 早稲田大学大学院理工学研究科修士課程修了(機械工学専攻)
1998年 早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了(機械工学専攻), 博士(工学)
Technische Universität Berlin 研究員
2005年 大阪大学助教授
2007年 大阪大学准教授
2010年 早稲田大学准教授
2013年 早稲田大学教授
現在に至る
2017年 早稲田大学研究重点教員(兼任)

細井 厚志 (ほそい あつし)

2003年 早稲田大学理工学部機械工学科卒業
2005年 早稲田大学大学院理工学研究科修士課程修了(機械工学専攻)
早稲田大学客員研究助手
2008年 早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了(機械工学専攻), 博士(工学)
名古屋大学大学院助教
2011年 The University of Sydney 訪問学者
2014年 早稲田大学講師
2016年 早稲田大学准教授
2021年 早稲田大学教授
現在に至る

国吉 ニルソン (くによし にるそん)

1984年 サンパウロ大学工学部化学工学科卒業
1988年 京都大学大学院工学研究科修士課程修了(工業化学専攻)
1992年 京都大学大学院工学研究科博士後期課程単位取得退学(工業化学専攻)
1993年 博士(工学)(京都大学)
岡山県立大学講師
2002年 大阪大学大学院専任講師
2007年 早稲田大学准教授
2009年 早稲田大学教授
現在に至る

平田 秋彦 (ひらた あきひこ)

1998年 早稲田大学理工学部材料工学科卒業
2000年 早稲田大学大学院理工学研究科修士課程修了(資源及材料工学専攻)
2003年 早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了(資源及材料工学専攻), 博士(工学)
大阪大学助教
2009年 東北大学助教
2012年 東北大学准教授
2018年 早稲田大学教授
現在に至る

山本 知之 (やまもと ともゆき)

1993年 早稲田大学理工学部材料工学科卒業
1995年 早稲田大学大学院理工学研究科修士課程修了(資源及材料工学専攻)
1997年 早稲田大学助手
1998年 早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了(資源及材料工学専攻), 博士(工学)
1999年 理化学研究所研究員
2002年 京都大学研究員
2005年 早稲田大学助教授
2007年 早稲田大学准教授
2010年 早稲田大学教授
現在に至る

材料の数理モデリング
マルチスケール材料シミュレーション
Mathematical Modeling for Materials Science

© Ito, Kunioshi, Suzuki, Hirata, Hosoi, Yamamoto 2026

2026年5月7日 初版第1刷発行

★

検印省略

著者 伊藤 公久
藤吉 ニルソン
鈴木 進補
平田 秋彦
細井 厚志
山本 知之
発行者 株式会社 コロナ社
代表者 牛来 真也
印刷所 壮光舎印刷株式会社
製本所 株式会社 グリーン


112-0011 東京都文京区千石 4-46-10
発行所 株式会社 コロナ社
CORONA PUBLISHING CO., LTD.
Tokyo Japan

振替00140-8-14844・電話(03)3941-3131(代)
ホームページ <https://www.coronasha.co.jp>

ISBN 978-4-339-06677-7 C3043 Printed in Japan

(田中)



 <出版者著作権管理機構 委託出版物>

本書の無断複製は著作権法上での例外を除き禁じられています。複製される場合は、そのつど事前に、出版者著作権管理機構(電話 03-5244-5088, FAX 03-5244-5089, e-mail: info@jcopy.or.jp)の許諾を得てください。

本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられています。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は、いかなる場合も認めていません。落丁・乱丁はお取替えいたします。