

卷頭言**解析数理特集の発刊にあたって****山崎真吾***

鉄鋼材料の開発は、金属組織や化学状態の観察・解析技術（以下、解析技術）と、材料の流動や構造、反応過程、力学状態などの数理・数値解析技術（以下、数理解析技術）の融合によって、かつてない精度と効率を実現しつつあります。鉄鋼材料開発は、使用環境における高性能を実現する成分・組織設計と、製造工程における組織制御技術の両面から取り組むべきものであり、解析技術と数理解析技術はその橋渡しを担う“翻訳機能”としての役割を果たします。市場の要求に応えるためには、ミクロ組織の構築とその制御ルートの特定が不可欠であり、これらを支える解析技術と数理解析技術の深化が求められています。

解析技術は、これまで観察が困難だった材料の微細構造や化学的な状態を可視化し、製造プロセスの最適化や新材料設計に不可欠な知見を提供します。高エネルギービームを用いた、鉄鋼製品およびその原料である鉄鉱石や石炭などの三次元構造や化学状態の直接測定、電子顕微鏡やアトムプローブを用いた鉄鋼製品の原子レベルでの三次元観察、構造解析の技術開発により、ナノメートルレベル、原子レベルでの材料組織の設計と造りこみが可能になり、より高性能な鉄鋼材料の開発・実機化が現実のものになっています。

一方、数理解析技術は、計算機の飛躍的な演算能力向上を背景に、マルチスケールでの現象の解明を可能にし、材料の挙動を理論的に支える基盤技術として進化を続けています。近年では、フェーズフィールド法によるミクロ組織形成の予測、第一原理計算、分子動力学による原子レベルの構造解析や挙動のシミュレーションなどが実用材料に適用されつつあり、鉄鋼材料の設計に新たな自由度をもたらしています。また、気体・液体・固体粒子が混在する複雑な系に対応可能な連続体モデルの開発も進み、従来よりも圧倒的に低コストで製造プロセス内部の状態や挙動をシミュレーションできるようになりました。さらに、急速な発展を続ける機械学習をはじめとするAI技術の材料解析、材料設計や設備設計への応用も進みつつあり、材料開発の革新が期待されます。

本特集では、日本製鉄(株)および日鉄テクノロジー(株)が有する解析技術と数理解析技術、ならびにその応用事例を通じて、鉄鋼材料開発の新たな可能性を展望します。本特集号が、今後の鉄鋼材料開発の深化の端緒になれば幸いです。

* 先端技術研究所長（フェロー） Ph.D