



鉄鋼におけるマルチスケール・ マルチフィジックス計算材料科学

Multiscale and Multiphysics Computational Material Science in Steel Research

会報委員会 特集企画WG

1980年代より身近になったパーソナルコンピュータ、そしてスーパーコンピュータにおける計算能力の飛躍的な拡大は、様々な材料の挙動を時空間上にビジュアル化して示すに至り、日々その能力を高めている。その結果、材料の研究、開発、そして教育への計算機シミュレーションが果たす役割は日々重要性を増しており、実験困難な条件における結果予測や観察不可能な状況の仮想的再現など、科学的理解（モデルと現象との整合）を得るためにシミュレーションは不可欠である。しかし、依然として計算能力に制約があり、工学的応用（複雑な系への適用）には、計算能力のさらなる向上が必要である。また、空間スケールや時間スケール、時間発展の性質、離散化手法などが異なる各種の計算手法を、対象とする系の特徴によりうまく使い分けることが必要である。これまで、計算対象の領域によって空間スケールの異なる手法をハイブリッドする方法（マルチ・シミュレーション）が開発されてきたが、計算方法が異なる境界領域の取り扱いに困難を有する。一方、異なる手法間で互いの結果を入力（援用）する協調的利用の発展が考えられる。

さらには、マテリアルゲノムやインフォマティクスと呼ばれるビッグデータを活用する帰納的開発手法が注目されており、その基礎となるデータベース構築において計算科学が実験と相補的に果たしうる役割にも着目したい。

上記を踏まえ、本特集は、各種の計算手法の現状とその鉄鋼材料への適用状況について解説いただくものであり、第一原理計算（析出物界面）、分子動力学（炭素拡散、水素拡散、転位と粒界の相互作用）、フェーズフィールド法（凝固・結晶成長、組織形成、変形挙動、プール沸騰）、粒子法（凝固、高炉プロセス、粉碎、粉粒体運動）、均質化法（マルチスケール有限要素モデリング）、メッシュフリー法（疲労亀裂進展）、結晶塑性、CALPHADを取り上げる。様々な立場にある研究者や技術者の方にとって有益であり、計算科学への理解と利用が進んで鉄鋼技術の発展に役立てば幸いである。