

巻頭言

Preface

国立研究開発法人物質・材料研究機構
技術開発・共用部門
部門長 出村 雅彦



マテリアル研究開発におけるデジタル革新

Digital Transformation in Materials Research and Development

気候変動対策，エネルギーの安定供給，国土強靱化，ウェルビーイングの実現など，現代社会が抱える課題は複雑かつ高度化している。これらの課題に応えるための新たな材料への期待は大きい。欲しい性能から材料・プロセスを設計する材料開発は，因果律を逆にたどる逆問題である。その設計空間は，元素の組み合わせ，プロセスの自由度を考えると広大で，効率よく最適解に辿り着くのは容易ではない。ここにデジタル革新に対する期待がある。

近年，機械学習，統計数理（以下，総称して「AI」と呼ぶ）を用いた手法が注目されている。AIによって既存のデータから有用な情報を抽出し，これに基づいて材料・プロセスを選定する。候補は実験によって検証され，その結果が新たなデータとしてAIにフィードバックされる。このようにAIによる提案と実験検証を逐次的に繰り返すことで，効率的な最適化が実現される。

材料開発における最大の制約は，データの乏しさにある。広大な設計空間に対して，準備できる実験データは限られている。このギャップを埋めるのがメカニズムに基づく物理モデルである。材料学に蓄積された理論を十分に活用し，さらに新たなメカニズム解明に基づいてモデルを精緻化していくことで，取得できる実験データが限定的であっても，現実を精度よく模倣できるようになる。例えば，熱処理による析出物の予測は，熱力学，拡散，マイクロメカニクスなどに基づいて場の自由エネルギーを定義し，これを最小化するように組織の時間発展を計算するフェーズフィールド法を活用できるだろう。析出物の状態から強度を予測するには，析出強化理論に基づく定式化が役立つはずである。組織予測モデルと特性予測モデルをつなぐことで，プロセスから構造（組織），特性を一貫してつなぐ計算ワークフローが実現する。このような統合的なアプローチは，我々が「マテリアルズインテグレーション」という概念として提案してきたものであり¹⁾，現実の模倣という観点から「材料分野におけるデジタルツイン」と捉えることも可能である。

図1にデジタルツインとリアルとの関係をまとめた。デジタルツインでは予測モデルで構成される順問題を解く計算ワークフローが構成され，AI最適化によって逆問題が解かれることになる。そして，デジタルツインから得られた最適解を実際に実験で検証していくことで現実（リアル）化していくことに

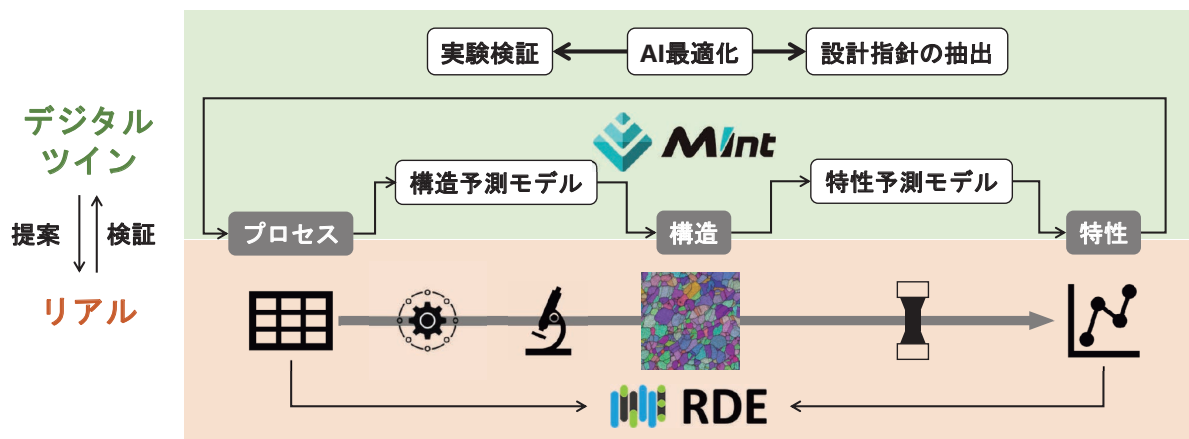


図1 材料開発におけるデジタルツインとリアルとの関係。デジタルツインでは $MInt^{2,3)}$ を，リアルでは $RDE^{4)}$ をそれぞれ活用することで効率的にデジタル化に対応できる。

なる。ちなみに、デジタルツインでは MInt²⁾ というマテリアルズインテグレーションに基づいて開発された材料設計システムを活用できる³⁾。また、リアルの実験データは RDE⁴⁾ というデータ構造化・管理システムを活用できる。いずれも物質・材料研究機構（NIMS）が主体となって開発したデジタル革新に対応するためのシステムである。

そして、デジタル革新は材料開発の効率化だけにとどまらない。デジタル化されたモデルは、製品から材料までのバリューチェーンを構成する基盤となる。バリューチェーンが丸ごとデジタルツイン化されるという未来像である。この世界においては、最終製品の価値向上に対する各モデルの貢献度が定量化され、これに応じて価値が分配されることになる。例えば、素材メーカーは製品メーカーに対して、材料の特性や二次加工に対する応答を模擬した材料モデルを提供する。製品メーカーは材料モデルを CAD/CAM に組み込み、動的に材料特性を変化させながら製品設計を最適化する。この結果として製品の価値が高まれば、貢献度に応じてモデルを提供した素材メーカーに価値の一部が還流されていくことになるだろう。高精度かつ適用範囲の広い材料モデルは製品設計の自由度向上に貢献し、価値の源泉として高く評価されることになる。

以上、マテリアルズインテグレーションから始まり、デジタルツイン、さらにはバリューチェーン全体のデジタル化に至るまで、材料開発をめぐるデジタル革新の多層的な展開について述べてきた。この中で特に材料開発のデジタル化を中心テーマとして、NIMS-三菱マテリアル情報統合型材料開発センター（本センター）は設立され、5年間にわたり先導的な取り組みがなされた。発端は、NIMSにおけるマテリアルズインテグレーションおよびデータ駆動材料研究の取り組みを評価いただいたことだったと理解している。2020年当時、材料開発のデジタル化は先進的な課題であったが、2025年現在、その重要性は疑う余地がない。

しかし、どうもそれだけでは語り尽くせない熱心さが三菱マテリアル株式会社（MMC）にあるように思えてならない。データ駆動手法、シミュレーションの高度化、先端計測、量子コンピュータ活用など、あらゆるテーマにおいて、その技術を手中のものとするという強い意志が明確に働いていた。一般的な産学連携では、企業が課題を提示し、公的研究機関がソリューションを提供するという構図が多い。しかし、本センターの取り組みはこれとは一線を画していた。MMC側の参画者は課題を提示することにとどまらず、自ら課題解決の現場に入り、そこで様々な手法が試され、確立していく様子をリアルタイムで体験した。手法を自らの技術として習得すべく、共に手を動かし、NIMS研究者と熱い議論を交わしながら、共同研究が進められていった。その足跡を、この特集号に掲載されるセンター参画者各位の記事から感じ取っていただけるものと思う。

MMCには、技術の核となる手法を貪欲に獲得し、それを内部でしっかり継承する伝統があるということなのだろう。しかし、単なる企業文化の問題ではなく、明確な経営判断がそこにはあったのではないかと推察する。材料開発のデジタル革新が、開発現場のデジタル化にとどまらず、バリューチェーン全体に及ぶ世界では、材料メーカーの価値は優れた材料モデルを提供する能力で決まるようになる。そのような世界が遠くない未来に来ることを想定した時、最大の経営資源は高度な材料モデルを構築・運用できる人材に他ならない。このような人材とは、まさに、データ駆動、シミュレーション、先端計測等といった手法を自在に駆使できる「次世代の材料研究者」である。

デジタル革新がもたらす本質的な挑戦に对应していくためには、短期的な課題解決ではなく、「人」そのものへの投資が重要であるという卓見が、本センターの取り組みに明確に表れていると私は考える。

本センターへの5年間のご支援と挑戦に対して心より感謝と敬意を表し、本稿を締めくくるものである。

引用文献

- 1) 出村雅彦, 鉄と鋼, **109**(6), 490-500 (2023); M. Demura, *ISIJ International*, **64**(3), 503-512 (2024).
- 2) S. Minamoto, T. Kadohira, K. Ito, M. Watanabe, *Materials Transactions*, **61**(11), 2067-2071 (2020); MInt, NIMS, <https://www.mintsys.jp>
- 3) S. Minamoto, K. Daimaru, M. Demura, *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*, **3**(1), 2256494 (2023).
- 4) RDE, NIMS, <https://rde.nims.go.jp>