

鋼板製造プロセスにおける材質予測制御 の現状と課題

解 説

齊 藤 良 行*

Computer Control of Mechanical Properties for Manufacture of Steel Plate — Present State and Future Problem

Yoshiyuki SAITO

1. はじめに

高強度で低温靱性に優れ、さらに溶接性の優れた鋼材を求めて長期間行われた研究の成果が制御圧延¹⁾および制御冷却²⁾技術として結実しつつある。制御圧延・制御冷却においては、鋼の組成のみならず製造条件が材質に及ぼす影響が顕著になるため、生産能率、寸法形状制御精度に加えて材質面を考慮した成分設計・プロセス設計が必要である。しかも鋼板に要求される特性は過酷化・多様化の傾向にあり、モデル圧延機による基礎研究・実機による大量生産技術の確立というステップをとる従来の研究方法では、開発に要する年月・費用の増加が問題となり、対応が困難になりつつある。一方コンピューターシミュレーションによる金属学的諸現象の予測は、熱間加工再現装置を用いた実験を併用することにより、新製品・新製造プロセス開発の有力な手段の一つとして注目を集めている^{3)~8)}。コンピューターを用いて鋼板の成分設計・プロセス設計の最適化を図るためには加熱・圧延・冷却時の組織変化を正確に予測する数式モデルの開発が不可欠である。

鋼材の材質制御のための数式モデルを開発するために考慮すべき鋼板製造プロセスにおける組織変化は、オーステナイト(γ)およびフェライト(α)の回復・再結晶、粒成長、結晶の形態変化、炭窒化物の固溶・析出・成長、さらに $\alpha \rightarrow \gamma$ 逆変態、 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態の諸現象であるこれら個々の現象については細部にわたる実験および理論的研究を基礎とした定式化が行われており、コンピューターシミュレーションに利用されている^{9)~19)}。しかし鋼板製造プロセスのように二つ以上の現象が同時に進行し、また相互作用を持つ場合についてそれぞれの現象を定式

化しようとする試みはほとんどなされていない。重回帰分析により鋼板の組成、製造条件と鋼板の機械的性質を対応させた例²⁰⁾、あるいは組織変化を純粹に経験的な方法によりモデル化し成功をおさめた例²¹⁾もあるが、これらの方法を一般化するのは困難である。こうした現状から判断してコンピューターシミュレーションにより鋼板の成分設計・製造プロセスの最適化を実現するためには基礎的な研究に立脚しつつ、適用プロセスの特徴を考慮し必要により条件の限定や仮定を行い、全プロセスにわたる組織変化を定式化する必要がある。本稿では、このような考え方にもとづいて開発した筆者らのシミュレーションモデル²²⁾の内容の紹介を通じて、鋼板製造プロセスにおける組織制御と材質予測の現状と課題について検討する。

2. コンピューターシミュレーションによる 組織制御と材質予測の現状

鋼板製造プロセスの各段階におけるプロセス制御因子と組織変化との関係を示したのが Table 1 である。加熱→圧延→冷却の各工程における組織変化は以下に示すように定式化される

2.1 加熱時における組織制御

γ 化は鋼の加工熱処理の出発点であり、 γ 化過程における組織変化を正確に予測し、最適加熱条件を選定することは重要である。 γ 化過程における組織制御を行うためには、(1) $\alpha \rightarrow \gamma$ 逆変態、(2) 炭窒化物の溶解および(3) γ 粒成長についての定式化が必要である。 $\alpha \rightarrow \gamma$ 逆変態の駆動力は熱力学計算により算出可能であり、 γ 核の成長は体拡散機構により予測できる。炭窒化物の溶解過程は炭窒化物形成元素の拡散に律速されるとし

昭和 62 年 8 月 12 日受付 (Received Aug. 12, 1987) (依頼解説)

* 川崎製鉄(株)鉄鋼研究所強度接合研究室主任研究員 工博 (Iron & Steel Research Laboratories, Kawasaki Steel Corp., 1 Kawasaki-cho Chiba 260)

Key words : steel plate ; controlled rolling ; mechanical property ; weldability ; alloy design ; process design ; computer simulation ; mathematical model ; metal structure [microstructure]; optimization.

Table 1. Process controlling factors and microstructural changes in thermomechanical treatment.

Process	Reheating	Rolling			Cooling
		Recrystallization region	Nonrecrystallization region	$\gamma \rightarrow \alpha$ twophase region	
Controlling factor	Reheating rate Reheating temperature Reheating time	Rolling temperature Reduction/pass Interpass time			Cooling start temperature Cooling rate Finish cooling temperature
Microstructural change	$\alpha \rightarrow \gamma$ phase transformation γ grain growth Dissolution of carbonitride	Recrystallization and grain growth Carbonitride precipitation	Formation of deformed structure Carbonitride precipitation	α nucleation and growth Formation of deformed structure in α	α nucleation and growth Formation of transformation structure

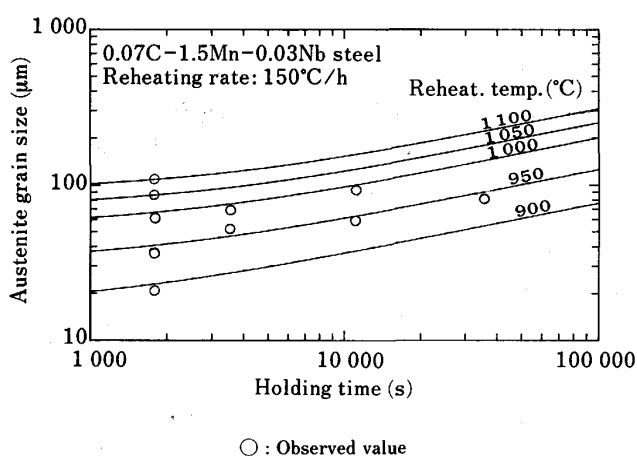


Fig. 1. Effect of reheating condition on austenite grain growth (computer simulation).

て、溶解過程を記述する拡散方程式を求めることができる。 γ 粒成長については γ 低温域加熱においては、分散した析出物の結晶粒界ピン止めによる粒成長抑制効果を²³⁾、炭窒化物が固溶する高温域加熱では Solute drag 効果を考慮することにより²⁴⁾、モデル化が可能である。コンピューターシミュレーションにより予測した加熱条件と γ 粒径との関係を実験値と比較して示したのが、Fig. 1 である。シミュレーション結果と実験結果はよく一致する。

2.2 圧延時における組織制御

圧延中の主たる組織変化は、(1) γ 高温域における再結晶による γ 粒の微細化(2)炭窒化物の析出および(3) γ 低温域におけるひずみの蓄積があげられる。

γ 高温域での圧延にともなう再結晶と粒成長のくりかえしにより γ 組織は変化する。再結晶は核形成、成長のともなう現象であり、再結晶核形成頻度、再結晶粒の成長速度を考慮した取扱いを行うのが、正確な方法であるが、鋼板圧延時の再結晶過程のように変形に対応して駆動力が導入され、核形成・成長がくりかえし起こる複雑な現象を定式化するのは容易ではない。圧延条件と再結晶挙動との対応が比較的簡単にできる実験式を用いて

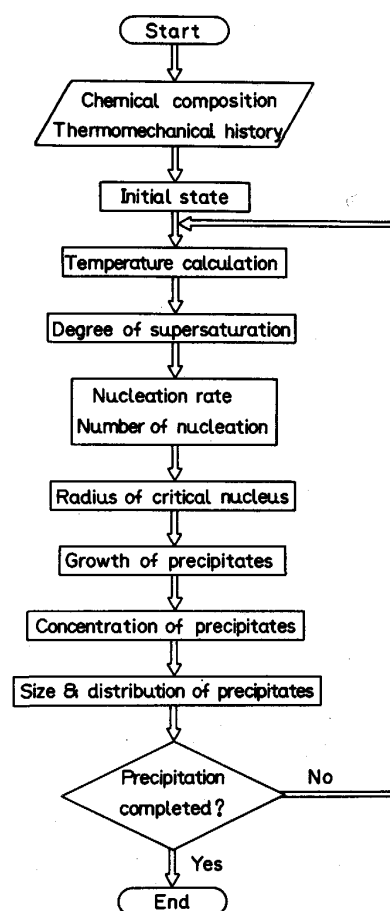


Fig. 2. Flow chart for predicting carbonitride precipitation.

シミュレーションを行うのが次善の策である。SELLARS¹⁷⁾らの実験式は上記の目的によく利用されている。SELLARS らのモデルは基本的にはひずみ、ひずみ速度、圧延温度およびパス間時間の関数で記述される数式群からなり、圧延中の再結晶率・ γ 粒径の予測が可能である。

γ の炭窒化物の析出量、析出物のサイズは再結晶挙動 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に大きな影響を及ぼす。 γ 中の炭窒化物析出

過程は以下に示す方法により予測可能である。加熱時の平衡固溶量、未固溶量を求め、さらに Ostwald 成長を考慮して、加熱時の析出物のサイズを推定する。圧延中の熱加工過程を微小時間に分割し、各ステップでの温度を計算し、過飽和度を求め、核形成頻度、成長速度、析出量を予測し、さらに析出物のサイズ分布を推定する。析出が完了するか、熱加工過程の終了まで、上記のステップをくりかえす。コンピューターシミュレーションの流れ図を Fig. 2 に示す。

炭窒化物析出量 X_p は KOLMOGOROV-JOHNSON-MEHL-AVRAMI (KJMA) の式^{9)~11)}により求められる。

$$X_p(t) = 1 - \exp \left[- \int_0^t J(t') V(t', t) dt' \right] \quad (1)$$

$J(t)$ は t における単位体積での単位時間あたりの核形成頻度、 $V(t', t)$ は t' で核形成した安定核の t における体積を表す。古典的核形成理論¹⁵⁾によれば $J(t)$ は以下の式で記述できる。

$$J(t) = N(t) \beta^* Z \exp(-\Delta G^*/kT) \exp(-\tau/t) \quad (2)$$

ここで $N(t)$ は単位体積あたりの核形成サイト数、 β^* は単位時間に臨界核に到達する原子数、 Z は Zeldvitch 因子である。また ΔG^* は臨界核形成に必要な自由エネルギー、 τ は潜伏時間、 k は Boltzmann 定数である。(2) 式中の β^* 、 Z 、 ΔG^* および τ は炭窒化物/Matrix 界面の表面エネルギー $\gamma_{\alpha\beta}$ 、炭窒化物形成元素の γ における拡散定数 D 、核形成にともなう自由エネルギー変化 ΔG_V の関数として記述される。またこれらのパラメーターは臨界核の形状にも依存する。ここで $N(t)$ 、 D 、 $\gamma_{\alpha\beta}$ は未知のパラメーターである。

$V(t', t)$ を計算するため析出物の成長速度 dR/dt を求める必要がある。炭窒化物形成元素の拡散律速のメカニズムを考慮して以下の微分方程式により dR/dt を求める

$$(C_p - C_l) \frac{dR}{dt} = D \frac{dC}{dr} \Big|_{r=R} \quad (3)$$

C_p は析出相における炭窒化物形成元素の濃度、 C_l は析出物/Matrix 界面($r=R$)での濃度を表す。 γ 中の濃度を C_M とし、濃度 $C(r, t)$ の変化を示す拡散方程式の解と(3)式により析出物半径 R は以下のように記述できる。

$$R = 2\lambda(Dt)^{1/2} \quad (4)$$

ただし λ は以下の超越方程式の解である。

$$\lambda^2 \exp(\lambda^2) [\exp(-\lambda^2) - \lambda(\pi)^{1/2} \operatorname{erfc}(\lambda)] = K/4 \quad (5)$$

ここで K は以下のように定義される。

$$K = 2(C_l - C_M)/(C_p - C_l) \quad (6)$$

未知のパラメーター、特に $\gamma_{\alpha\beta}$ の析出過程に及ぼす影響が大きい。現段階では未知パラメーターを直接測定

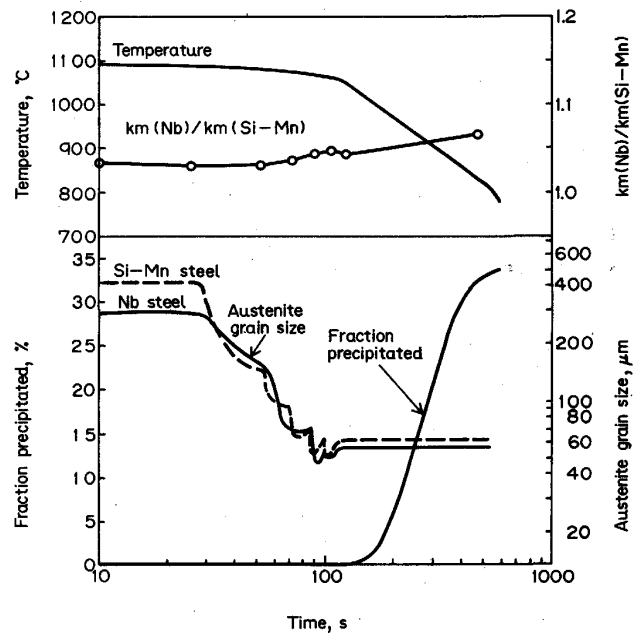


Fig. 3. Variation of austenite grain size and amount of Nb(C,N) precipitation during rolling (computer simulation).

したり理論的に計算するのは困難であるため、筆者らのモデルでは、信頼できる測定データ²⁵⁾と比較して、最も誤差が少なくなるようにパラメーターを決定するという方法を採用している²²⁾。

Nb 鋼と Si-Mn 鋼を圧延方向に平行に並べて溶接した組立てスラブを圧延した場合の γ 粒径と Nb(C,N) の析出過程をコンピューターシミュレーションにより推定した結果を Fig. 3 に示す。 γ 高温域での再結晶のくりかえしにより Nb 鋼、Si-Mn 鋼とも γ 粒径は 60 μm 程度まで微細化すること、また Nb(C,N) は高温域での圧延ではほとんど析出せず、温度降下待ちのための保持中に析出が進行し、さらに再開後の圧延により析出量が増加することがシミュレーションにより示される。Fig. 3 には Nb 鋼と Si-Mn 鋼の変形抵抗比の実測結果も示しているが、Nb(C,N) の析出と変形抵抗比の上昇が対応していることがわかる。

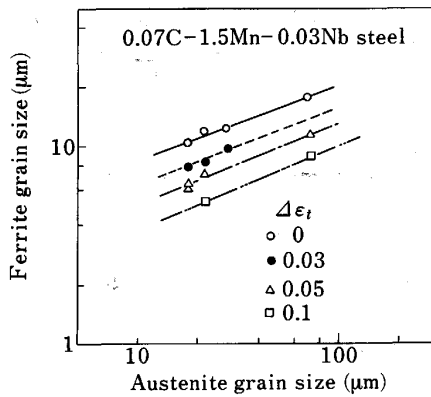
γ 低温域での圧延においては再結晶が起こりにくくなり粒内に格子欠陥が導入される。この結果を示すパラメーターとして蓄積ひずみを用いると γ 低温域圧延における組織変化のモデル化が容易となる。蓄積ひずみ $\Delta\varepsilon$ を温度 T 、前パスのひずみ、パス間時間の関数として定式化し圧延条件との対応づけが可能である。圧延中の各パスおよびパス間での $\Delta\varepsilon$ の変化は簡単な微分方程式で記述されるが²⁶⁾、変態直前の蓄積ひずみ $\Delta\varepsilon_i$ は $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に大きな影響をもっており、冷却速度 C_R 、再結晶粒径 d_γ とともに、 α 粒径制御の重要な因子の一つである。筆者らが求めた α 粒径 d_α を予測する実験式を以下に示す。

$$\ln d_\alpha = 0.92 + 0.44 \ln d_\gamma - 0.77 \ln C_R - 0.88 \tanh(10\Delta\epsilon_t) \dots\dots\dots (7)$$

Fig. 4 は C_R が 0.2°C/s の場合に、 d_α に及ぼす d_γ と $\Delta\epsilon_t$ の影響を (7) 式により計算し、実測値と比較したものである。ここに示すように $\Delta\epsilon_t$ および C_R を実用上問題ない範囲に限定すれば、簡単な式により α 粒径を精度良く推定し、オンラインでの制御も可能である。

2.3 冷却時における組織制御

圧延終了後の冷却過程における変態組織制御は、 α 変



○●△□ : Observed ferrite grain size

Fig. 4. Calculated ferrite grain size compared with observed ones.

態および成長の抑制、変態組織強化により強度・靱性のすぐれた鋼板の製造をめざす制御冷却技術の向上に欠くことができない手段である。変態挙動予測は以下の手順により可能である。化学組成より平衡変態温度 Ae_3 を求める。冷却過程を微小時間に分割し、冷却条件から各ステップでの温度を計算する。温度が Ae_3 以下の場合には各ステップで $\gamma \rightarrow$ 初析 α 変態のエネルギー、 γ と同一成分の α 生成のための自由エネルギー $\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}$ 、 γ/α 界面での γ 側と α 側の C 濃度、共析 C 濃度を計算する。炭窒化物析出過程と同様の方法により核形成頻度、成長速度を求め、KJMA の式により変態率を計算する。臨界核の形状として Pill-box を考えると核形成頻度を精度よく予測できることが知られている²⁷⁾。 α 変態にともなう残留 C 濃度を求め、上記の計算をくりかえすが、残留 C 濃度が共析 C 濃度に達したのちに、核形成が起こったときパーライト変態が開始すると考える。 $\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}$ が 0 となる温度 T_0 以下になれば γ と同一成分の変態相の生成が可能と考える。 $\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha}$ の値が一定値以下になることによりベイナイトあるいはマルテンサイト変態が可能となる。コンピューターシミュレーションの流れ図を Fig. 5 に示す。Fig. 6 は制御冷却中の変態挙動のシミュレーションの一例を示したものである。低 C-低 Mn 鋼を制御圧延し、 800°C で圧延を終了し、 760°C まで 0.25°C/s で空冷した後、それぞれ 8, 10,

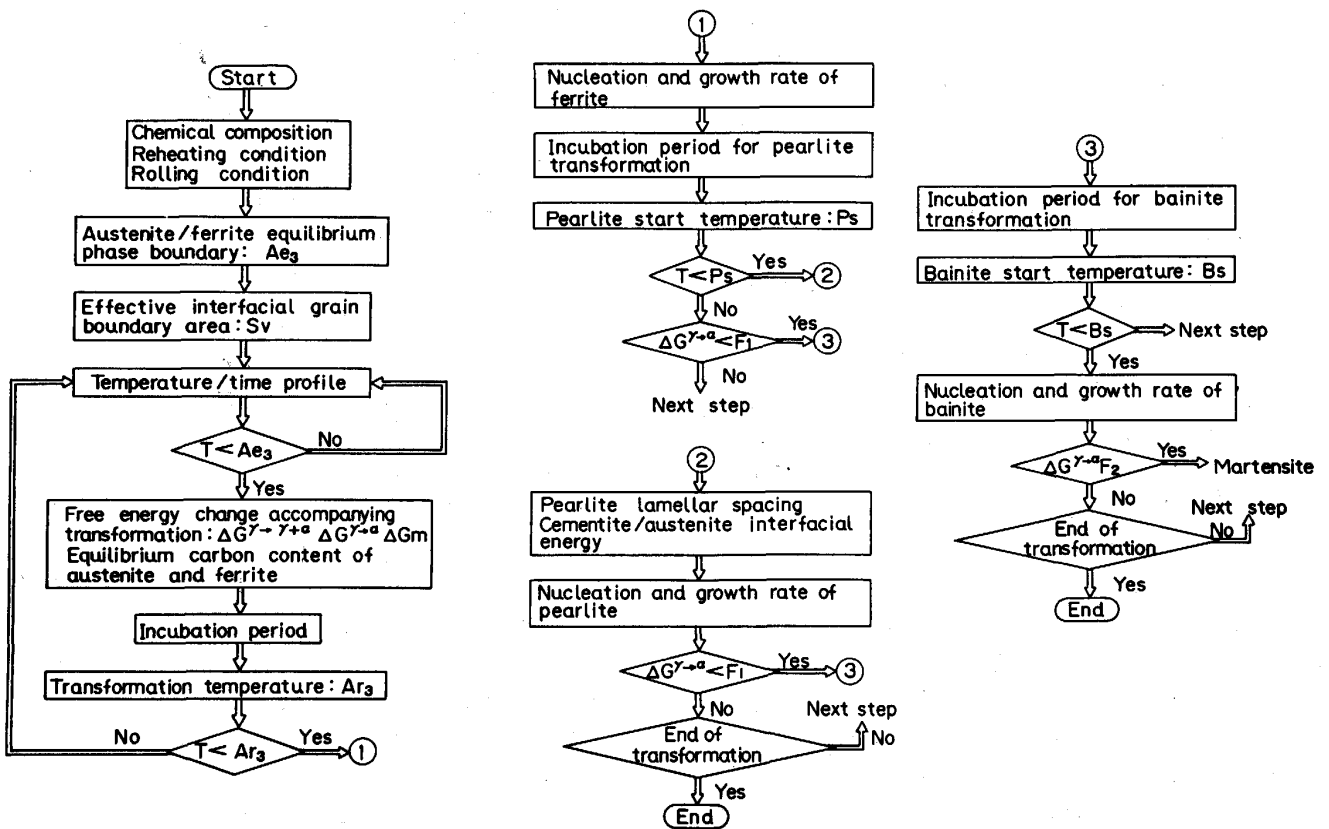


Fig. 5. Flow chart for predicting phase transformation kinetics.

12°C/s の冷却速度で強制冷却したときの初析 α 生成反応が Fig. 6 に示されているが、冷却速度の変動にともなう変態挙動の変化は小さく、事実上冷却前の熱履歴によりそれ以降の変態挙動が決定されていることをシミュレーション結果は示唆している。また Fig. 7 は Nb 鋼の第 2 相変態の冷却停止温度依存性に及ぼす制御圧延条件の影響を示しているが、第 2 相変態も制御圧延条件、すなわち冷却前の γ の状態および初析 α 反応に支配されていることが示される。このように冷却前の熱履歴も含めて実操業に近い条件での変態挙動のシミュレーションが可能であり、制御冷却条件最適化の研究への活用が期待される。

2.4 コンピューターシミュレーションで予測した組織と機械的性質との関係

コンピューターにより鋼板の機械的性質を予測・制御するためには、機械的性質と組織、さらには製造条件と

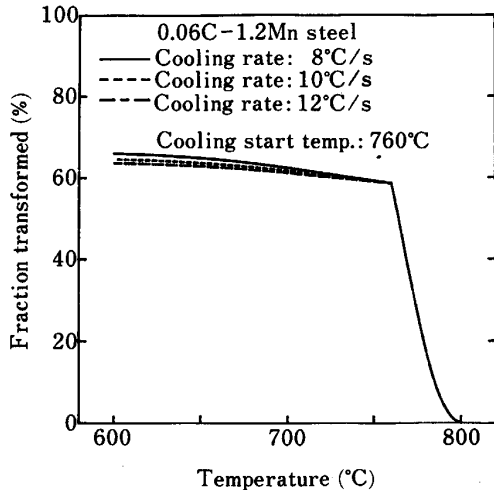


Fig. 6. Computer simulation of proeutectoid ferrite formation in low C-low Mn steel.

の関係を示す数式モデルが必要である。材質制御については圧延時の制御は靱性制御を主体とし、冷却時には強度制御に重点をおくという制御方式を採用すれば、数式モデルの開発が容易になる。

よく知られているように多結晶体の延性-脆性遷移温度 vT_{rs} は α 粒径 d_α の $-1/2$ 乗に比例して低下する。(7) 式に示すように d_α は再結晶粒径 d_γ 、変態直前の蓄積ひずみ $\Delta\epsilon_t$ 、冷却速度 C_R の関数で表現できるため、 $d_\alpha^{-1/2}$ の項は以下の α 微細化パラメーター P_{GR} に比例する。

$$P_{GR} = C_R^{0.085} d_\gamma^{0.22} \exp[0.44 \tanh(10\Delta\epsilon_t)] \dots (8)$$

Fig. 8 は γ - α 2 相域圧下率 15% 以下という条件で、加熱・圧延条件を変化させた $\Delta\epsilon_t$ 、 d_γ の異なる板厚 25 mm の制御圧延材の vT_{rs} と P_{GR} の関係を示したものである。 vT_{rs} と P_{GR} との間には比例関係が得られ、 P_{GR} の制御により要求された低温靱性を満足することができる。

制御冷却時の強度と変態組織、さらには冷却条件との

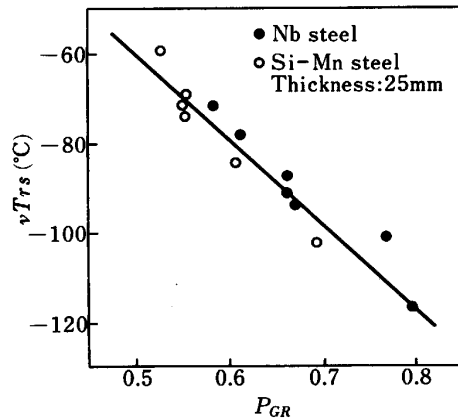


Fig. 8. Effect of ferrite grain refinement parameter P_{GR} on charpy transition temperature vT_{rs} .

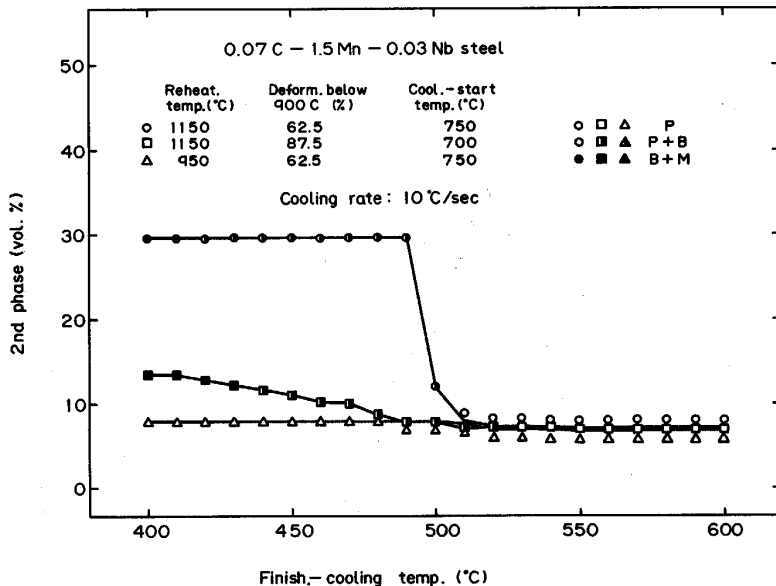


Fig. 7. Effect of controlled rolling condition on second phase transformation-finish cooling temperature relationship in Nb steel (computer simulation).

関係は以下のように定式化される。筆者らは次項で示す材質安定化のための最適化ロジックを容易にするため、鋼板の引張強度 TS を空冷相当の引張強度 $TS^{(AC)}$ と水冷による強度上昇分 ΔTS との和で表した。

$$TS = TS^{(AC)} + \Delta TS \quad \dots\dots\dots (9)$$

$TS^{(AC)}$ は化学成分、加熱・圧延条件の関数で記述できる。また筆者らが求めた変態組織分率と ΔTS との関係は以下に示す実験式で記述される。

$$\Delta TS(\text{MPa}) = -4.0(\text{MPa} \cdot \text{mm}^{-1/2}) d_\alpha^{-1/2} \Delta d_\alpha + 1.0 \Delta V_p + 2.5 V_B + 13.2 V_M \quad \dots (10)$$

ここで ΔV_p は水冷によるパーライト体積分率変化(%), V_B, V_M はそれぞれベイナイトおよびマルテンサイト体積分率(%)を表す。また Δd_α は水冷による α 粒径変化を示す。(10)式の右辺のパラメーターはすべてシミュレーションにより予測が可能であり、 ΔTS さらには TS の推定ができる。さらに(10)式の右辺が冷却条件の関数で記述できるなら、オンラインでの冷却制御が可能となる。筆者らは冷却条件と ΔTS との関係を

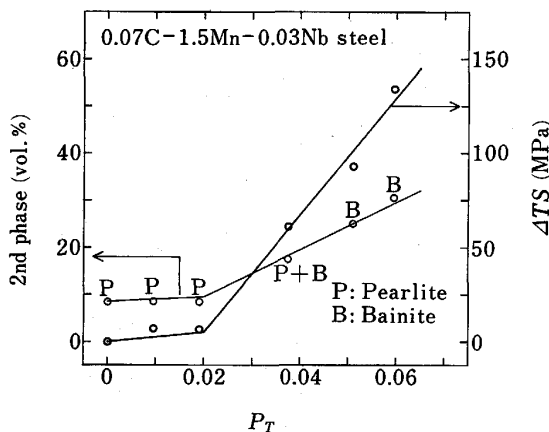


Fig. 9. Effect of control cooling parameter P_T on transformation structure and increase of tensile strength by water cooling ΔTS .

与える以下の実験式を求めた。

$$\Delta TS = a_0 P_T \quad (P_T > 0.02) \quad \dots\dots\dots (11)$$

$$P_T = a_1 C_R \exp\{-a_3(F_s - T_s)H(F_s - T_s) \tanh[a_4(B_s - T_f) + 1]\} \quad \dots\dots\dots (12)$$

ここで P_T は強制冷却の効果を示すパラメーター、 F_s, B_s はフェライトおよびベイナイト変態開始温度、 T_s, T_f は強制冷却開始および終了温度を表す。また $a_1 \sim a_4$ は化学成分に依存する定数、 $H(x)$ は Heaviside 関数である。Fig. 9 は上記のパラメーター P_T と第2相分率および ΔTS との関係を示したものである。 P_T の値が 0.02 以上においては P_T と ΔTS および第2相分率との間に直線関係が得られ、 P_T がオンラインでの制御パラメーターとして適切であることが示されている。

2.5 製造条件の最適化

目標とする材質の鋼板を安定に製造するため、 γ 組織の制御、変態組織の制御に加えて、製造条件、特に冷却条件を最適化するモデルが必要である。圧延条件の選定も重要であるが、圧延時の各パスの測定結果にもとづく修正が可能であること、設定条件からの偏差が冷却に比べて小さいことを考慮して、冷却条件の変動にともなう材質ばらつきを最小にすることが最適化の課題となる。このようなモデルの一例を紹介する。

冷却条件の変動にともなう材質ばらつきを最小にするため、冷却による材質ばらつきを以下の式で記述し、その値を最小にするための制御を行う。

$$| \text{材質ばらつき} | = a | \text{代表値の板間でのばらつき} | + b | \text{板内ばらつき} | \quad \dots\dots\dots (12)$$

ただし a, b は定数であり $a + b = 1$ を満足する。(12)式により冷却条件の変動による材質ばらつきに関して、鋼板の材質の代表値(平均値または代表点の材質)の板間のばらつきのみならず、板内の材質ばらつきもあわせて材質ばらつきが最小になるように最適化が可能となる。筆者らの最適化モデルは $a = b = 0.5$ を採用してい

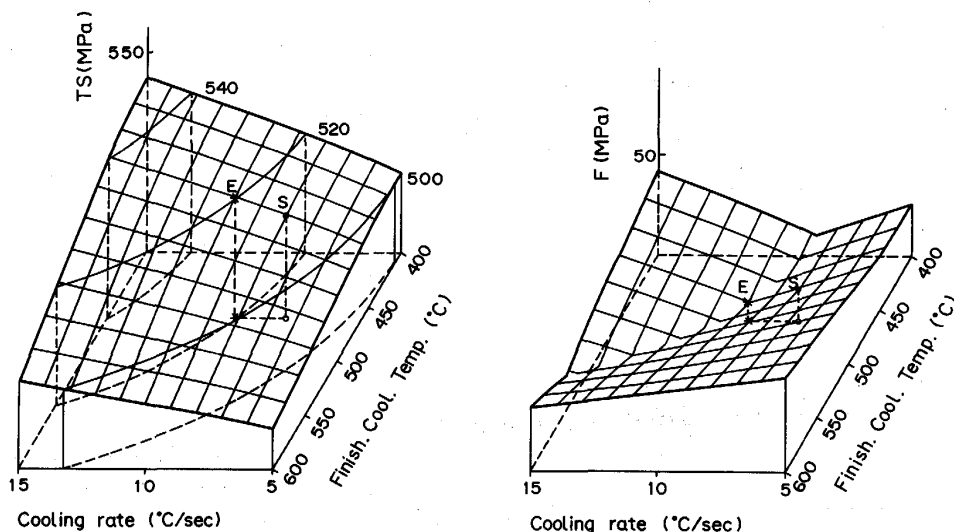


Fig. 10. Search of optimum cooling condition by steepest descent method.

るが、板間あるいは板内のばらつき、いずれかに重点をおく場合には、 a 、 b の比率を変えることにより対処可能である。

(12)式を用いた最適条件の決定については、材質ばらつき F を冷却速度 C_R および冷却停止温度 T_f 、 C_R および T_f の変動量 ΔC_R 、 ΔT_f で表し、関数 $F(C_R, T_f)$ を最小にする冷却条件を選定するという方法を筆者らは採用している。 ΔC_R および ΔT_f は C_R および T_f の線型結合で記述され、その係数が冷却設備の制御精度、冷却方法に依存するが、ハードウェアに依存するのは、これらの係数のみであり、この値を明らかにさえすれば冷却設備・冷却方法によらず、上記の最適化モデルを適用できる。

Fig. 10は最適条件決定例を示す。目標 TS を520 MPa、 TS が460 MPaとすると、水冷による目標強度上昇量は60 MPaである。Fig. 10の左側の曲面は強度と冷却条件との関係を示したもので、右側の曲面は $F(C_R, T_f)$ と冷却条件との関係を示しているが、 F 曲面の谷底にあたる C_R 、 T_f が最適条件を与える。ここに示した例では最急傾斜法²⁸⁾により最適条件の探索を行い、初期値を $C_R=8^\circ\text{C/s}$ 、 $T_f=460^\circ\text{C}$ として、4回の探索の後、最適値($C_R=10^\circ\text{C/s}$ 、 $T_f=460^\circ\text{C}$)を得ている。この場合も含め、数多くの成分系で広範囲の条件でシミュレーションを行い、高々10回の探索により最適値が見つけれられること、制御用計算機の負担も小さく、圧延終了から冷却までの短い時間で計算可能であることを筆者らは明らかにした²²⁾。

3. コンピューターシミュレーションの対象

鋼板製造のプロセスにおいてコンピューターシミュレーションによる成分設計および製造条件の最適化の対象となる項目は以下のとおりである。

- (1) 制御圧延・制御冷却プロセスのオンライン材質制御
- (2) 鋼板の成分およびプロセス設計の効率化
- (3) 新製品・新製造プロセスの開発
- (4) 加熱・圧延および冷却設備の仕様検討

以下各項目についてのコンピューターシミュレーションの現状と課題について検討する。

項目(1)のオンライン材質制御においては、オフラインのシミュレーションである項目(2)~(4)と異なり、高速性が要求される。オンライン制御に必要な線型の式からなる数式群の形式を決定するため、注目しているプロセスの加工熱処理の範囲で温度、圧下率等の制御変数の影響をオフラインでの詳細なシミュレーションより定式化する。そして実操業におけるデータ集録により予測式の係数を微修正し、精度向上を達成する。さらに変形抵抗のように実操業時に測定可能であり、また組織変化に密接に対応する特性値をオンラインで測定し、制

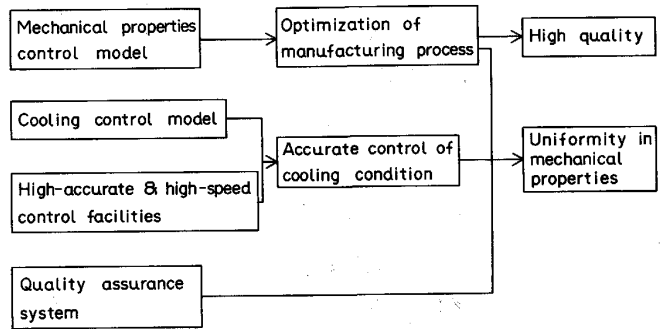


Fig. 11. Block diagram for computer control system for mechanical properties control.

御に反映させることにより、材質の安定化が可能となる。Fig. 11に示すのは制御冷却における自動制御システムの一例であり、材質制御のための最適化モデルは、温度予測モデルおよび高速高精度DDC(Direct Digital Control)システムとの組合せにより、高品質かつ均質な材料の安定生産に寄与するところが大きい。

項目(2)は目標となる材料特性が与えられた場合に鋼板の組成、製造条件を決定する場合の問題である。過去の製造記録の内挿あるいは外挿を行い、条件によっては試圧延を実施することにより、成分設計、製造条件の決定を行っていた従来の方法にかわってコンピューターシミュレーションを利用する。シミュレーションで利用する数式モデルは前履歴依存性を考慮しているため、目標性能から直接に組成、製造条件の決定はできず、間接的な手法となるが、オフラインでのシミュレーションにより組成と製造条件の機械的性質への影響を明らかにし、最適組成、最適製造条件を決定することができる。材質安定性のみならず、生産能率の向上、生産コストの削減も最適化の重要課題であり、これらの要因をも考慮した最適化モデルの開発は、今後の課題である。

項目(3)の新製品・新プロセスの開発に関しては、熱間加工再現装置とモデル圧延・冷却装置を使用する実験室シミュレーション、実操業設備における試作という手順を経るのが従来の方法である。コンピューターシミュレーション法は実験室シミュレーションと相補的な関係にあり、これら二つの方法を併用することにより、開発期間の短縮・実験費用の削減、実験設備の能力に起因する実験範囲の制限の解消などの効果がある。しかし現状のコンピューターシミュレーションの精度、適用範囲を考慮すると、全面的には実験省略には至らない。この点は将来の課題である。

項目(4)の加熱・圧延および冷却設備の仕様検討についてこれまでほとんど行われることのなかつた材質面からの能力検討を、コンピューターシミュレーションは可能にする。項目(3)における新製品・新プロセスの開発についても現行設備の能力制限を超えた範囲で材質

面の検討ができることはもちろん、性能面からみた最適な設備仕様の検討ができる。また材質の安定性に関してもシミュレーションにより制御設備の許容範囲を算出できるので必要以上にオーバースペックにならず投資額をおさえることができる。

4. お わ り に

コンピューターによる鋼の組織制御、材質予測の研究は対象、方法とも多岐にわたっており、その内容を概説することは筆者の能力の及ばないところであり、本稿では筆者らの研究の周辺に限ってシミュレーションモデルの一端を紹介した。従って本稿の内容はかなり片寄ったものとなつたが、コンピューターシミュレーションによる成分設計、プロセス設計の最適化の考え方についてはご理解いただけたと思う。本稿を終えるにあたり、今後の課題について検討し、今後のこの分野の発展に期待したい。

本稿で紹介したモデルを含めて、シミュレーションモデルは熱力学を基礎とし、変態・炭窒化物析出挙動等を古典的核形成理論により定式化している。しかしモデルの一部は経験式で構成されているのが現状である。この部分を物理的基礎のはつきりしたモデルにおきかえることにより、詳細な材質設計検討のためのシミュレーションが可能なレベルに到達し、モデルの適用範囲の拡大、精度向上が期待される。

また現状のモデルで取扱い可能な組織変化は平均結晶粒径、再結晶率、析出量、変態率といったマクロな変化であるが、結晶粒径分布、析出物サイズ分布、変態生成物の微細構造のような材質設計上重要な組織因子についてのシミュレーションは今後の課題である。

上記の目的を達成するためには、相互作用パラメーター炭窒化物形成エネルギー等の熱力学データ、界面エネルギー、拡散定数等の核形成・成長の動力学の計算に必要な物理量等の基本データの充実が必要である。また組織因子の時空間的配置の予測については近年発展の著しい一次相転移のダイナミックスの研究²⁹⁾、計算幾何学の活用³⁰⁾の成果が待たれる。

文 献

- 1) T. TANAKA: *Int. Met. Rev.*, **26** (1981), p. 185
- 2) K. TSUKADA, K. MATSUMOTO, K. HIRABE and K. TAKASHIGE: *Iron Steelmaker*, **9** (1982), p. 21
- 3) 熱間加工のシミュレーションとオーステナイトの変態 (日本鉄鋼協会編) (1985)
- 4) Y. SAITO, M. TANAKA, T. SEKINE and H. NISHIZAKI: *Proc. of Internl. Conf. on HSLA Steel* (1985) [Univ. of Wollongong, Wollongong]
- 5) 矢田 浩: 塑性と加工, **28** (1987), p. 413
- 6) 江坂一彬, 脇田淳一, 高橋 学, 河野 浩, 原田慎三: 製鉄研究, **321** (1986), p. 92
- 7) P. CHOQUET, A. LEBON and Ch. PERDIX: 7 th Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys, Montreal (1985), p. 1025
- 8) E. ANELLI, M. GHERSI, M. MASCANZONI, M. PAOLICCI, A. APRILE, A. DEVITO and F. DEMITRI: 同上, p. 1031
- 9) A. N. KOLMOGOROV: *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Mater.*, **1** (1937), p. 355
- 10) W. A. JOHNSON and R. F. MEHL: *Trans. AIME*, **135** (1939), p. 416
- 11) M. AVRAMI: *J. Chem. Phys.*, **7** (1939), p. 1103, **8** (1940), p. 212, **9** (1941), p. 177
- 12) M. HILLERT: *Acta Metall.*, **13** (1965), p. 227
- 13) M. HILLERT: *Metall. Trans. A*, **6** (1975), p. 5
- 14) H. I. AARONSON: *Phase Transformation* (1970), p. 219 [ASM]
- 15) H. I. AARONSON and J. K. LEE: *Lecture on the Theory of Phase Transformation* (1975), p. 82 [TMS-AIME]
- 16) J. S. KARKALDY, B. A. THOMSON and E. BAGANIS: *Hardenableability Concept with Application to Steels* (1978), p. 82 [ASM]
- 17) C. M. SELLARS and J. A. WHITEMAN: *Met. Sci.*, **13** (1979), p. 187
- 18) M. J. WEY, T. SAKUMA and T. NISHIZAWA: *Trans. JIM*, **22** (1981), p. 733
- 19) 梅本 実, 田村今男: 鉄と鋼, **68** (1982), p. 383
- 20) T. GLADMAN, D. DULIEU and I. D. McLVOR: *Proc. Microalloying 75* (1975), p. 32 [Union Carbide Corp.]
- 21) Y. SAITO, M. SAEKI, M. NISHIDA, Y. ITO, T. TANAKA and S. TAKIZAWA: *Proc. Int. Conf. on Steel Rolling* (1980), p. 1300 [ISIJ]
- 22) 齊藤良行: 文献 (3), p. 72
- 23) C. ZENER: C. SMITH: *Trans. AIME*, **175** (1948), p. 15 に引用
- 24) K. LUCKE and K. DETERT: *Acta Metall.*, **5** (1957), p. 628
- 25) H. WATANABE: Thesis, Univ. of Michigan (1975)
- 26) Y. SAITO, T. ENAMI and T. TANAKA: *Trans. Iron Steel Inst. Jpn.*, **25** (1985), p. 1146
- 27) M. ENOMOTO and H. I. AARONSON: *Metall. Trans. A*, **17** (1986), p. 1385
- 28) 西川禎一, 三宮信夫, 茨木俊秀: 最適化 (1982), p. 46 [岩波書店]
- 29) J. D. GUNTON, M. San MIGUEL and P. S. SAHNI: *Phase Transition and Critical Phenomena*, **8** (1983) [Academic Press]
- 30) *Computer Simulation of Microstructural Evolution*, ed. by D. J. SROLOVITZ (1985) [TMS-AIME]