

---

高張力鋼の制御圧延・加速冷却における組織変化のコンピュータシミュレーション  
Computer Simulation of Microstructural Changes in Controlled Rolling and Accelerated  
Cooling of High Strength Low Alloy Steel

斉藤 良行(Yoshiyuki Saito) 志賀 千晃(Chiaki Shiga)

---

要旨：

炭窒化物析出，オーステナイト( $\gamma$ )→フェライト( $\alpha$ )変態， $\gamma$ および $\alpha$ 粒径変化のモデル化を行い，制御圧延・加速冷却工程における組織変化のコンピュータシミュレーションを実施し，以下に示す結果を得た。(1)制御圧延における Nb(C,N)の析出量とサイズ分布を予測し，実験値と良く一致することを確認した。(2) $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に及ぼす制御圧延後の冷却条件の影響をシミュレートし，圧延終了後冷却開始までの熱履歴が重要であることを明らかにした。(3)加熱→圧延→冷却時における $\gamma$ および $\alpha$ 粒径を予測し，その結果に基づきシャルピー波面遷移温度を予測した。(4)加速冷却材の強度を計算により求めた組織から予測しその結果を利用し，製造条件の最適化を行った。

---

Synopsis：

Mathematical models of carbonitride dissolution and precipitation, austenite ( $\gamma$ ) to ferrite ( $\alpha$ ) phase transformation, grain coarsening, recrystallization and grain growth have developed for the purpose of executing computer simulation of microstructural changes in controlled-rolling and accelerated-cooling processes. The following results are obtained: (1) The amount and size distribution of Nb (C,N) precipitates during controlled rolling predicted by the model are in good agreement with those observed. (2) Simulation results on the effect of cooling condition after controlled rolling on  $\gamma$  to  $\alpha$  transformation indicate that the thermal cycle from the end of rolling to the start of cooling have a significant effect on the transformed structure. (3) Variation of  $\gamma$  and  $\alpha$  grain size during reheating, rolling and cooling can be predicted with good accuracy. Charpy transition temperature is predicted by the computed  $\alpha$  grain size. (4) Tensile strength of accelerated cooled steel is predicted by the computed microstructure. Optimization of the thermomechanical process is realized on the basis of the herein-described computer simulation method.

(c)JFE Steel Corporation, 2003

# 高張力鋼の制御圧延・加速冷却における組織変化の コンピュータシミュレーション\*

川崎製鉄技報  
21 (1989) 3, 195-201

## Computer Simulation of Microstructural Changes in Controlled Rolling and Accelerated Cooling of High Strength Low Alloy Steel



斉藤 良行  
Yoshiyuki Saito  
鉄鋼研究所 鋼材研究  
部強度接合研究室 主  
任研究員(課長)・工博



志賀 千晃  
Chiaki Shiga  
鉄鋼研究所 鋼材研究  
部強度接合研究室 室  
長(部長)・工博

### 1 緒 言

近年、鋼板に対する要求は過酷化・多様化の傾向にあり、また開発期間の短縮が求められている。制御圧延・制御冷却技術は、高強度で低温靱性に優れ、さらに溶接性の優れた鋼板を製造するための不可欠な手段であるが、製造工程において、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であるため、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。これまで鋼板の開発は、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採用していたが、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<sup>1-6)</sup>。コンピュータ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、圧延および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。

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( $\gamma$ )およびフェライト( $\alpha$ )の回復・再結晶、粒成長、結晶の形状変化、炭窒化物の固溶・析出・成長、さらに $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態、 $\alpha \rightarrow \gamma$ 逆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、コンピュータシミュレーションにも利用されている。しかし、これらの結果から直接、制御圧延・制御冷却プロセスのように加工熱サイクルが複雑であり、2つ以上の現象が同時

### 要旨

炭窒化物析出、オーステナイト( $\gamma$ ) $\rightarrow$ フェライト( $\alpha$ )変態、 $\gamma$ および $\alpha$ 粒径変化のモデル化を行い、制御圧延・加速冷却工程における組織変化のコンピュータシミュレーションを実施し、以下に示す結果を得た。(1) 制御圧延におけるNb(C, N)の析出量とサイズ分布を予測し、実験値とよく一致することを確認した。(2)  $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態に及ぼす制御圧延後の冷却条件の影響をシミュレートし、圧延終了後冷却開始までの熱履歴が重要であることを明らかにした。(3) 加熱 $\rightarrow$ 圧延 $\rightarrow$ 冷却時における $\gamma$ および $\alpha$ 粒径を予測し、その結果に基づきシャルピー破面遷移温度を予測した。(4) 加速冷却材の強度を計算により求めた組織から予測しその結果を利用し、製造条件の最適化を行った。

### Synopsis:

Mathematical models of carbonitride dissolution and precipitation, austenite ( $\gamma$ ) to ferrite ( $\alpha$ ) phase transformation, grain coarsening, recrystallization and grain growth have been developed for the purpose of executing computer simulation of microstructural changes in controlled-rolling and accelerated-cooling processes. The following results are obtained:

- (1) The amount and size distribution of Nb (C, N) precipitates during controlled rolling predicted by the model are in good agreement with those observed.
- (2) Simulation results on the effect of cooling condition after controlled rolling on  $\gamma$  to  $\alpha$  transformation indicate that the thermal cycle from the end of rolling to the start of cooling have a significant effect on the transformed structure.
- (3) Variation of  $\gamma$  and  $\alpha$  grain size during reheating, rolling and cooling can be predicted with good accuracy. Charpy transition temperature is predicted by the computed  $\alpha$  grain size.
- (4) Tensile strength of accelerated cooled steel is predicted by the computed microstructure. Optimization of the thermomechanical process is realized on the basis of the herein-described computer simulation method.

に進行し、また相互作用を持つ場合について、上記の金属学的諸現象を予測することは容易ではない。コンピュータシミュレーションにより鋼板の成分設計と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。以下に、このような考え方に基づいて開発した制御圧延・制御冷却プロセスにおける炭窒化物の固溶・析出、

\* 平成元年4月18日原稿受付

$\gamma \rightarrow \alpha$  変態,  $\gamma$  および  $\alpha$  粒径変化の予測モデルを説明し, とくに Nb(C, N) の歪誘起析出,  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態に及ぼす圧延後の熱履歴の影響, 直送圧延における  $\gamma$  および  $\alpha$  粒径変化についてのシミュレーション例を紹介する。

## 2 コンピュータシミュレーションモデルの概要

### 2.1 基本概念

鋼板の材質面からみて, 制御の対象とすべき重要な組織変化は (1) 炭窒化物の固溶と析出, (2)  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態および (3)  $\gamma$  および  $\alpha$  粒径変化の3つであり, コンピュータシミュレーションモデルはこれらの3つの現象を予測する簡単な数式群から構成される。

予測モデルは古典的核形成・成長理論に基づいており, 炭窒化物析出, 変態, 粒成長について数学的には共通な取り扱いを行っている。変態, 析出, 再結晶の各過程はいわゆる Avrami の式でモデル化されることが多い。すなわち, 変態を例にとれば変態率  $X_T$  の時間変化を記述する式として以下の式が用いられる。

$$X_T = 1 - \exp(-At^k)$$

$A$  と  $k$  は定数であり, 実験データ解析により決定される。上記の式は核形成頻度, 成長速度が一定であることを前提としており, また  $A$  と  $k$  は温度依存性をもつことから, 制御圧延・加速冷却のような複雑な加工熱サイクルへの適用は困難である。再加熱→圧延→冷却という加工熱サイクルにおいて時間とともに核形成速度, 成長速度が変化する現象を正確に予測するため, 以下に示す核形成頻度と成長速度の時間依存性を考慮した一般化した Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami (KJMA)<sup>7-9)</sup> の式を採用し, 炭窒化物析出量あるいは変態率  $X(t)$  を計算した。

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

ここで,  $J(t')$  は時間  $t'$  における核形成頻度であり,  $V(t', t)$  は  $t'$  で核形成した安定核の  $t$  における体積である。粒成長あるいは相変態での安定相の形成において, 界面の運動方程式は次のようになる。

$$v(\bar{a}, t) = M \cdot K(\bar{a}, t) \dots\dots\dots (2)$$

ここで,  $v(\bar{a}, t)$  は界面上の位置  $\bar{a}$  における時間  $t$  での移動速度,  $M$  は運動論的係数,  $K(\bar{a}, t)$  は  $\bar{a}$  における平均曲率を表す。 $v(\bar{a}, t)$  を求めることにより安定核の体積  $V(t', t)$  の推定が可能である。(1) 式の  $J(t)$  および (2) 式の  $M, K(\bar{a}, t)$  を以下に示すような具体的な式の形で表現することにより炭窒化物析出, 変態, 粒成長の予測が可能である<sup>10)</sup>。

### 2.2 炭窒化物析出過程予測モデル

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。析出物の形状を球対称とする。溶解時における析出物と Matrix 界面における境界条件を析出時と対比して Fig. 1 に示す。 $C_P$  は析出相における炭窒化物形成元素の濃度,  $C_I$  は析出物/Matrix 界面 ( $r=R$ ) での濃度を表す。 $\gamma$  中の濃度を  $C_M$  とする。初期の析出物の大きさを  $R_0$  とし, 拡散方程式の解を求める。炭窒化物の溶解時間  $t_D$  を記述する式として以下の式を得た。

$$t_D = (R_0/a)^2 \exp\{-2p/(1-p^2) \tan^{-1}[(1-p^2)/p^2]^{1/2}\} \dots\dots (3.1)$$

$$p = [(C_I - C_M)/2\pi(C_P - C_I)]^{1/2} \dots\dots\dots (3.2)$$

$$a = 2D_\gamma(C_I - C_M)/(C_P - C_I) \dots\dots\dots (3.3)$$

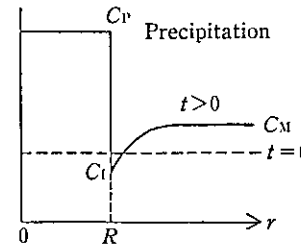
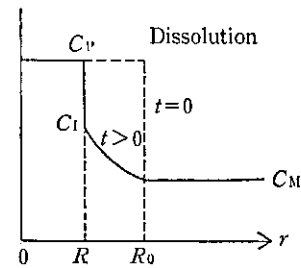


Fig. 1 Boundary condition used for computer simulation of carbonitride dissolution and precipitation

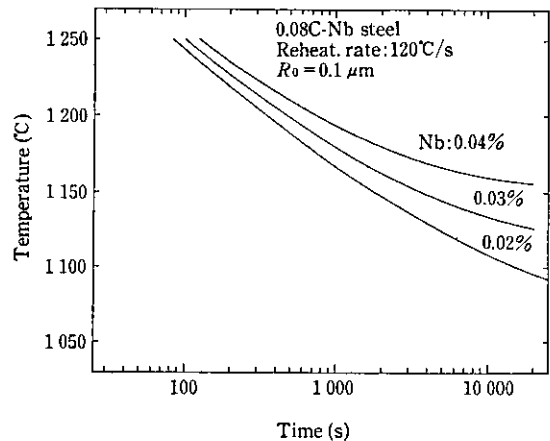


Fig. 2 Dissolution time for Nb (C, N) at reheating estimated by computer simulation

ここで,  $D_\gamma$  は炭窒化物形成元素の  $\gamma$  における拡散定数を示す。Fig. 2 は Nb 炭窒化物の溶解時間に及ぼす加熱温度と Nb 量の影響を示したものである。平衡論的には完全に固溶する温度においても, 保持時間が不十分な場合には未固溶炭窒化物が存在することがわかる。

$\gamma$  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。古典的核形成理論<sup>11)</sup> によれば核形成頻度  $J(t)$  は以下の式で記述できる。

$$J(t) = N(t) \beta^* Z \exp(-\Delta G^*/kT) \exp(-\tau/t) \dots\dots\dots (4)$$

ここで,  $N(t)$  は単位体積あたりの核形成サイト数,  $\beta^*$  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,  $\Delta G^*$  は臨界核形成に必要な自由エネルギー,  $\tau$  は潜伏時間,  $k$  は Boltzmann 定数である。(4) 式中の  $\beta^*, Z, \Delta G^*$  および  $\tau$  は以下の式により記述できる。

$$\beta^* = 16 \pi \gamma_{\alpha\beta}^2 D_\gamma X_\beta L / (a^4 \Delta G_v^2) \dots\dots\dots (5.1)$$

$$Z = V_\alpha \Delta G_v^2 / [8 \pi (kTK\gamma_{\alpha\beta})^2] \dots\dots\dots (5.2)$$

$$\Delta G^* = 16 \pi K\gamma_{\alpha\beta}^3 / (3\Delta G_v^2) \dots\dots\dots (5.3)$$

$$\tau = 8 kTK\gamma_{\alpha\beta} a^4 / (D_\gamma X_\beta V_\alpha \Delta G_v^2 L) \dots\dots\dots (5.4)$$

ここで,  $\gamma_{\alpha\beta}$  は炭窒化物/Matrix 界面の表面エネルギー,  $X_\beta$  は

炭窒化物形成元素のモル濃度、 $\Delta G_v$  は核形成にともなう自由エネルギー変化、 $V_a$  は析出相のモル体積、 $a$  は格子定数である。また、 $K$  および  $L$  は形状を表すパラメータである。 $\Delta G_v$  はマトリックス中の固溶量  $[X]$  と平衡固溶量  $[X_{eq}]$  の関数として以下の式で記述できる。

$$G_v = (kT/V_a) \ln ([X_{eq}]/[X]) \dots\dots\dots (6)$$

$J(t)$  の計算に必要な (2)~(4) 式において  $N(t)$ 、 $D_r$ 、 $r_{\alpha\beta}$  は未知のパラメータである。

$V(t, t)$  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。

$$(C_r - C_i) dR/dt = D_r [dC/dr]_{r=R} \dots\dots\dots (7)$$

濃度  $C(r, t)$  の変化を示す拡散方程式の解と (7) 式により析出物半径  $R$  は以下のように記述できる。

$$R = 2\lambda(D_r t)^{1/2} \dots\dots\dots (8)$$

ただし、 $\lambda$  は以下の超越方程式の解である。

$$\lambda \exp(\lambda^2) [\exp(-\lambda^2) - \lambda(\pi)^{1/2} \operatorname{erfc}(\lambda)] = K_p/4 \dots\dots\dots (9)$$

ここで、 $K_p$  は以下のように定義される。

$$K_p = 2(C_i - C_m)/(C_r - C_i) \dots\dots\dots (10)$$

上述のような古典的核形成・成長理論に基づく精密な取り扱いを行うことにより、はじめて炭窒化物のサイズ分布をも含めた加工熱処理時における析出挙動の予測が可能となる。このようなモデル式の特徴を生かすため、以下に示すようなロジックによりコンピュータシミュレーションを行った。

- (1) 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。
- (2) 圧延中の熱加工過程を微小時間に分割し、各時間での温度を計算し、過飽和度を求める。
- (3) 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、上記の計算をくりかえす。

制御圧延における Nb(C, N) の析出挙動のコンピュータシミュレーションを行った。シミュレーションに用いた圧延条件を Table 1 に示す。析出の Kinetics を Fig. 3 に示す。粗圧延終了後の保持中に 2 つの場合の析出挙動の差がみられる。実際に同一条件で圧延し、保持を行った後、急冷し、電解抽出法により測定した析出 Nb 量と計算値との比較を同時にプロットした。実測値と予測値はよく一致することがわかる。Fig. 4 はさらに析出物のサイズ分布の差を示したものであるが、低温まで保持した場合には微細析出物が数多くみられることは、上記の保持時間後半に析出が進行したことを意味する。

### 2.3 $\gamma \rightarrow \alpha$ 変態予測モデル

変態挙動予測は以下の手順により可能である。

- (1) 化学組成より平衡変態温度  $A_{e3}$  を求める。
- (2) 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。
- (3) 温度が  $A_{e3}$  以下の場合には各ステップで  $\gamma \rightarrow$  初析  $\alpha$  変態の自由エネルギー、 $\gamma$  と同一成分の  $\alpha$  生成のための自由エネルギー  $-\Delta G^{\gamma-\alpha}$ 、 $\gamma/\alpha$  界面での  $\gamma$  側と  $\alpha$  側の C 濃度、共析 C 濃度を計算する。
- (4) 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

Table 1 Rolling conditions used for computer simulation

|                                       | Case 1      | Case 2  |
|---------------------------------------|-------------|---------|
| Reheat. temp (°C)                     | 1 300       | 1 300   |
| Start roll. temp (°C)                 | 1 230       | 1 180   |
| Reduction (rougher) (mm)              | 177→48      | 177→48  |
| Finish. temp. of rougher rolling (°C) | 1 020       | 975     |
| Holding condition Interval time (s)   | 49.0        | 95.8    |
| Temperature (°C)                      | 1 020→1 007 | 975→934 |

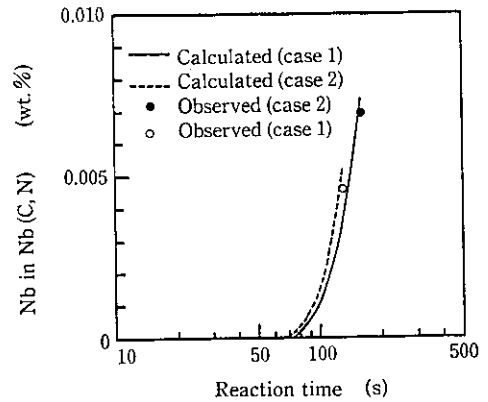


Fig. 3 Effect of rolling condition on Nb(C, N) precipitation kinetics

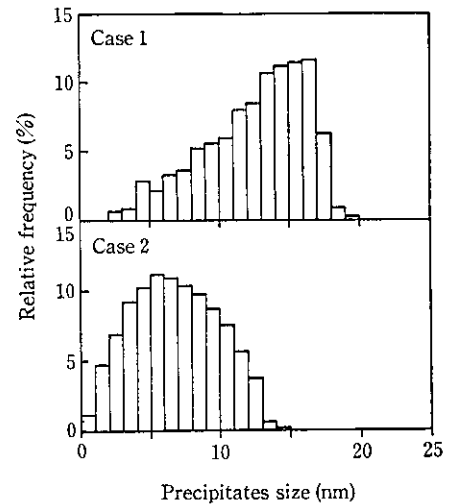


Fig. 4 Size distributions of Nb(C, N) precipitates given by computer simulation

とが知られている<sup>12)</sup>。

- (5)  $\alpha$  変態にともなう残留 C 濃度を求め、上記 (3)、(4) 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。
- (6)  $\Delta G^{\gamma-\alpha}$  が 0 となる温度  $T_0$  以下になれば  $\gamma$  と同一成分の変態相の生成が可能と考える。 $\Delta G^{\gamma-\alpha}$  の値が一定値以下になることによりペイナイトあるいはマルテンサイト変態が可能となる。核形成頻度  $J$  が定常核形成頻度  $J_s$  と潜伏時間  $\tau$  の関数として、 $J = J_s \exp(-\tau/t)$  で表されるとして、C と Mn 量の異なる 3 つの鋼について  $J_s$  と  $\tau$  を 700~800°C の温度について計算した結果を

Fig. 5 に示す。また、成長速度  $v$  と時間  $t$  を  $v=at^{1/2}$  で結び付ける parabolic rate constant  $\alpha$  の温度依存性を Fig. 6 に示す。また 800°C から 15 mm の厚板に相当する 0.5°C/s の速度で冷却した場

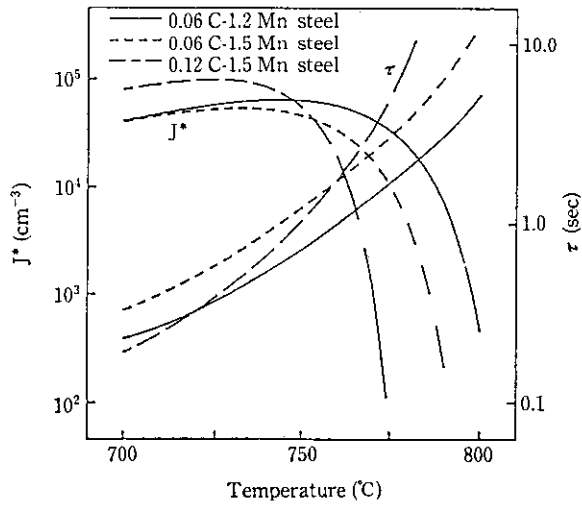


Fig. 5 Effect of C and Mn on nucleation rate and incubation time calculated by classical nucleation theory

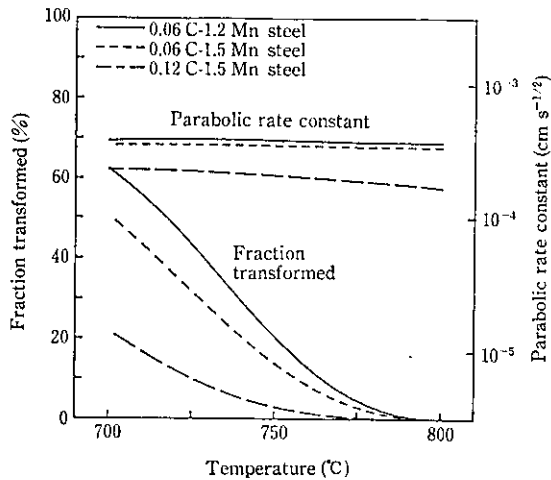


Fig. 6 Effect of C and Mn on parabolic rate constant and kinetics of phase transformation after rolling estimated by computer simulation (cooling rate: 0.5°C/s)

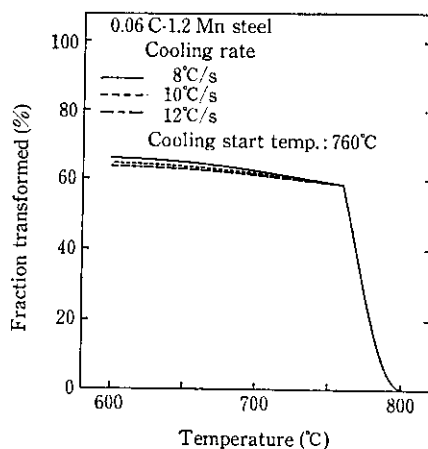


Fig. 7 Effect of cooling rate on phase transformation kinetics in low C-low Mn steel

合の変態率の変化も同時にプロットした。低 C 低 Mn 鋼では核形成、成長とも速く、変態が急速に進行することがわかる。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, 12°C/s の冷却速度で強制冷却したときの初析  $\alpha$  生成反応が Fig. 7 に示されているが、冷却速度の変動に伴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。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実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  $\gamma$  および  $\alpha$  粒径予測モデル

2.4.1 加熱時における  $\gamma$  粒成長

加熱時における  $\gamma$  粒成長については、 $\gamma$  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<sup>13)</sup>、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<sup>14)</sup>、モデル化が可能である。 $\gamma$  平均粒径  $d_r$  の変化は近似的に以下の式で表せる。

$$d/dt(d_r) = K(1/d_r - 1/d_0) \dots\dots\dots (11)$$

ここで、 $K$  は solute drag 効果を表す速度定数、 $d_0$  は結晶がピン止め力を受けながら定期的に成長する条件を与えるもので析出粒子の体積分率と半径の関数で表せる。

2.4.2  $\gamma$  の再結晶と粒成長

$\gamma$  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  $\gamma$  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り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には容易ではない。以下に示す Sellars ら<sup>15)</sup> の式に代表される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シミュレーションを行うのが次善の策である。Sellars らのモデルは基本的にはひずみ  $\epsilon$ 、ひずみ速度  $\dot{\epsilon}$ 、圧延温度  $T$  およびパス間時間  $\Delta t$  の関数で記述される数式群からなり、圧延中の再結晶率  $t_x$ 、 $\gamma$  粒径  $d_r$  の予測が可能である。再結晶粒径  $d_{SR}$  および再結晶率は以下の数式群により計算可能である。

$$t_x = C\epsilon^m d_0^n Z^p \exp(Q_{SR}/RT) \dots\dots\dots (12.1)$$

$$Z = \dot{\epsilon} \exp(Q_{HW}/RT) \dots\dots\dots (12.2)$$

$$d_{SR} = D\epsilon^{-r} d_0^u [(1/B) \ln(Z/A')]^\nu \dots\dots\dots (12.3)$$

$$d_r^{10} = d_{SR}^{10} + A\Delta t \exp(-Q_{GS}/RT) \dots\dots\dots (12.4)$$

ここで、 $d_0$  は初期  $\gamma$  粒径、 $m, n, p, r, u, A, A', B, C, D, Q_{SR}, Q_{HW}, Q_{GS}$  は成分に依存する定数である。

2.4.3 オーステナイト低温域圧延におけるひずみの蓄積と  $\alpha$  粒径予測

$\gamma$  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。この効果を示すパラメータとして蓄積ひずみを用いるとモデル化が容易となる。蓄積ひずみ  $\Delta\epsilon$  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  $\Delta\epsilon$  の変化は簡単な微分方程式で記述されるが<sup>16)</sup>、変態直前の蓄積ひずみ  $\Delta\epsilon_i$  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  $d_r$  とともに、 $\alpha$  粒径制御の重要な因子の 1 つである。 $\alpha$  粒径  $d_\alpha$  を予測する実験式を以下に示す。

$$\ln d_\alpha = 0.92 + 0.44 \ln d_r - 0.77 \ln C_R - 0.88 \tanh(10 \Delta\epsilon_i) \dots\dots\dots (13)$$

さらに、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  $\alpha$  粒径  $d_\alpha$  の  $-1/2$  乗に比例して低下する。(11) 式により  $d_\alpha$  は再結晶粒径  $d_r$ , 変態直前の蓄積ひずみ  $\Delta\epsilon_i$ , 冷却速度  $C_R$  の関数で表現できるため,  $vT_{rs}$  を以下の式で予測することができる。

$$vT_{rs} = C_0 - C_1 C_R^{0.085} d_r^{-0.22} \exp [0.44 \tanh(10 \Delta\epsilon_i)] \dots (12)$$

ここで,  $C_0$  と  $C_1$  は定数である。

上記の予測式を用いて, 通常の再加熱-圧延工程と直送圧延工程における 0.10 C-1.56 Mn-0.029 Nb の制御圧延時の変態挙動および  $\gamma$  粒径変化についてコンピュータシミュレーションを行った。直送圧延材については, 凝固直後の  $\gamma$  粒度を ASTM No. -4 とし, 凝固→冷却→熱片装入→再加熱→圧延時の  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態,  $\alpha \rightarrow \gamma$  変態,  $\gamma$  粒成長過程をシミュレートし, 圧延中および圧延後の  $\gamma$  粒径および  $\alpha$  粒径を予測した。シミュレーションの条件を Table 2 に示す。変態開始温度は約 720°C であり, 500°C においては 95% の  $\alpha$  が得られる。再加熱-圧延材と直送圧延材 (装入温度 900°C) について再結晶挙動を比較し, その結果を Table 3 に示す。直送圧延材は再結晶が遅延し, 再結晶域圧延後の  $\gamma$  粒径が 500  $\mu\text{m}$  以上の粗大粒となる。熱片装入温度と予測モデルによる再加熱時の  $\gamma$  粒径, 再結晶域圧延終了時の  $\gamma$  粒径, 圧延後の  $\gamma$  粒径との関係を Fig. 8 に示す。さらに予測  $\alpha$  粒径から推定した  $vT_{rs}$  の値を同時にプロットした。装入温度が  $A_{r1}$  以上の場合には加熱時の  $\gamma$  粒は凝固後の粗い  $\gamma$  粒そのままであり, 再結晶も起こりにくく, 圧延による  $\gamma$  粒の微細化の程度は小さいため, 鋼板の  $\alpha$  粒も粗く, 低温靱性が劣化する。 $\gamma \rightarrow \alpha$  変態を完全には経由しない 600°C 以上の温度で熱片装入した場合も同様であるが, 装入温度が 500°C 以下の場合には再加熱材と同等の微細組織, 低温靱性が得られることがシミュレーション結果から示される。

本稿のシミュレーションとはほぼ同一の成分・圧延条件を採用している鎌田らの結果<sup>16)</sup>によれば  $A_{r1}$  以上の高温装入による  $vT_{rs}$  の上昇は 10~40°C であり, シミュレーションによる上昇量 25°C とよ

Table 2 Manufacturing conditions utilized for computer simulation

|                            |                    |
|----------------------------|--------------------|
| Slab thickness             | 240 mm             |
| Plate thickness            | 25 mm              |
| Hot charging temperature   | RT and 500~1 000°C |
| Reheating temperature      | 1 150°C            |
| Rolling condition          | 15%/pass × 15 pass |
| Finish rolling temperature | 750°C              |

Table 3 Computer simulation of recrystallization and austenite grain growth in continuous casting and direct rolling process

| Rolling condition |             |                                      |            |                    | CC-DR process<br>(charging temp.: 1 000°C) |                                       |                  | Conventional process<br>(charging temp.: RT) |                                       |                  |
|-------------------|-------------|--------------------------------------|------------|--------------------|--|---------------------------------------|------------------|--|---------------------------------------|------------------|
| Pass No.          | Thick. (mm) | $\dot{\epsilon}$ ( $\text{s}^{-1}$ ) | Temp. (°C) | Interpass time (s) | Frac. of recryst. (%)                      | $\gamma$ grain size ( $\mu\text{m}$ ) | $\Delta\epsilon$ | Frac. of recryst. (%)                        | $\gamma$ grain size ( $\mu\text{m}$ ) | $\Delta\epsilon$ |
| 1                 | 204         | 3                                    | 1 100      |                    | 0  | 2 000                                 | 0.12             | 62   | 131                                   | 0.10             |
| 2                 | 173.5       | 3                                    | 1 092      | 15                 | 3  | 1 940                                 | 0.21             | 100  | 67                                    | 0                |
| 3                 | 147.4       | 3                                    | 1 081      | 15                 | 37   | 1 200                                 | 0.15             | 100  | 63                                    | 0                |
| 4                 | 125.3       | 3                                    | 1 069      | 15                 | 12   | 1 170                                 | 0.20             | 100  | 61                                    | 0                |
| 5                 | 90.5        | 3                                    | 1 057      | 15                 | 44   | 1 110                                 | 0.13             | 100  | 57                                    | 0                |
| 6                 | 76.9        | 3                                    | 1 030      | 15                 | 34   | 1 080                                 | 0.19             | 100  | 53                                    | 0                |
|                   |             |                                      | ↓<br>900   | 300                | 68   | 530                                   | 0.11             | 100  | 51                                    | 0                |
|                   |             |                                      | Holding    |                    |  |                                       |                  |  |                                       |                  |

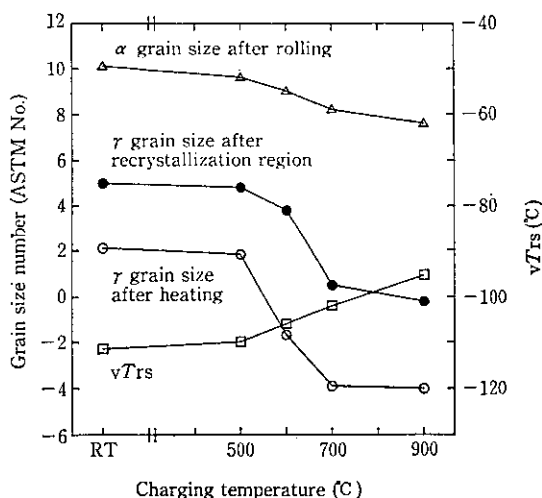


Fig. 8 Effect of charging temperature on  $\gamma$  and  $\alpha$  grain sizes and Charpy transition temperature of steel plate produced by continuous casting-direct rolling process (computer simulation)

く一致する。 $\gamma$  粒径および  $\alpha$  粒径の推定結果も実験室シミュレーション結果とよく対応する。再結晶域圧延後の直送圧延材と再加熱-圧延材の  $\gamma$  粒径の違いは ASTM No. で 5 程度,  $\alpha$  粒径の違いは 2 程度との予測結果は報告されている実験結果とよく一致する<sup>17,18)</sup>。

### 3 コンピュータシミュレーションモデルの応用

#### 3.1 コンピュータシミュレーションで予測した制御冷却材の組織と強度との関係

コンピュータ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の関係を示す数式モデルが必要である。制御冷却における強度予測コンピュータシミュレーションにより求めた組織を利用した例を示す。

制御冷却時の強度と変態組織, さらには冷却条件との関係を以下のように定式化する。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  $\Delta TS$  との和で表した。

$$TS = TS_{Ac} + \Delta TS \dots (15)$$

TS<sub>AC</sub> は化学成分, 加熱・圧延条件の関数で記述できる。また予測した変態組織分率と ΔTS との関係は以下に示す実験式で記述される。

$$\Delta TS(\text{MPa}) = -4.0(\text{MPa} \cdot \text{mm}^{1/2}) \Delta d_\alpha / d_\alpha^{-3/2} + 1.0 \Delta V_P + 2.5 V_B + 13.2 V_M \dots (16)$$

ここで, ΔV<sub>P</sub> は水冷によるパーライト体積分率化 (%), V<sub>B</sub>, V<sub>M</sub> 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<sub>α</sub> は水冷による α 粒径変化を示す。(16) 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。

冷却条件と ΔTS との関係を与える以下の実験式は以下のように記述できる。

$$\Delta TS = a_0 P_T \quad (P_T > 0.02) \dots (16.1)$$

$$P_T = a_1 C_R \exp \{ -a_2 (F_s - T_s) H (F_s - T_s) \tanh [a_4 (B_s - T_f) + 1] \} \dots (16.2)$$

ここで, P<sub>T</sub> は強制冷却の効果を示すパラメータ, F<sub>s</sub>, B<sub>s</sub> はフェライトおよびベイナイト変態開始温度, T<sub>s</sub>, T<sub>f</sub> は強制冷却開始および終了温度を表す。また a<sub>1</sub>~a<sub>4</sub> 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 P<sub>T</sub> と

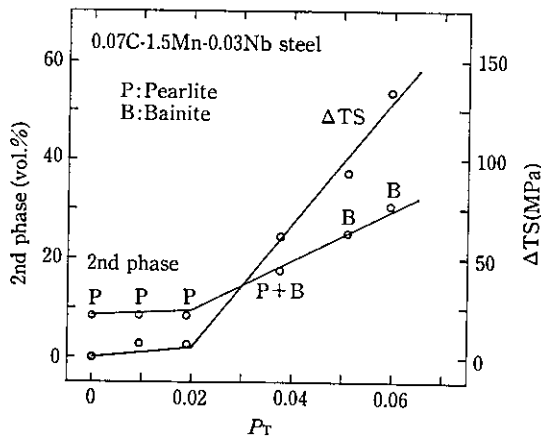


Fig. 9 Effect of control cooling parameter P<sub>T</sub> on transformation structure and increase of tensile strength by water cooling ΔTS

第2相分率および ΔTS との関係を示したものである。P<sub>T</sub> の値が 0.02 以上においては P<sub>T</sub> と ΔTS および第2相分率との間に直接関係が得られ, P<sub>T</sub> がオンラインでの制御パラメータとして適切であることが示されている。

### 3.2 製造条件の最適化

目標とする材質の鋼板を制御圧延・制御冷却により安定に製造するため, 組織の制御に加えて, 製造条件, とく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。

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。

$$|\text{材質ばらつき}| = a|\text{代表値の板間でのばらつき}| + b|\text{板内ばらつき}| \dots (18)$$

ただし, a, b は定数であり a+b=1 を満足する。(18) 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。本最適化モデルは a=b=0.5 を採用しているが, 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<sub>R</sub> および冷却停止温度 T<sub>f</sub>, C<sub>R</sub> および T<sub>f</sub> の変動量 ΔC<sub>R</sub>, ΔT<sub>f</sub> で表し, 関数 F(C<sub>R</sub>, T<sub>f</sub>) 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<sub>R</sub> および ΔT<sub>f</sub> は C<sub>R</sub> および T<sub>f</sub> 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<sub>AC</sub> 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<sub>R</sub>, T<sub>f</sub>) と冷却条件との関係を示しているが,

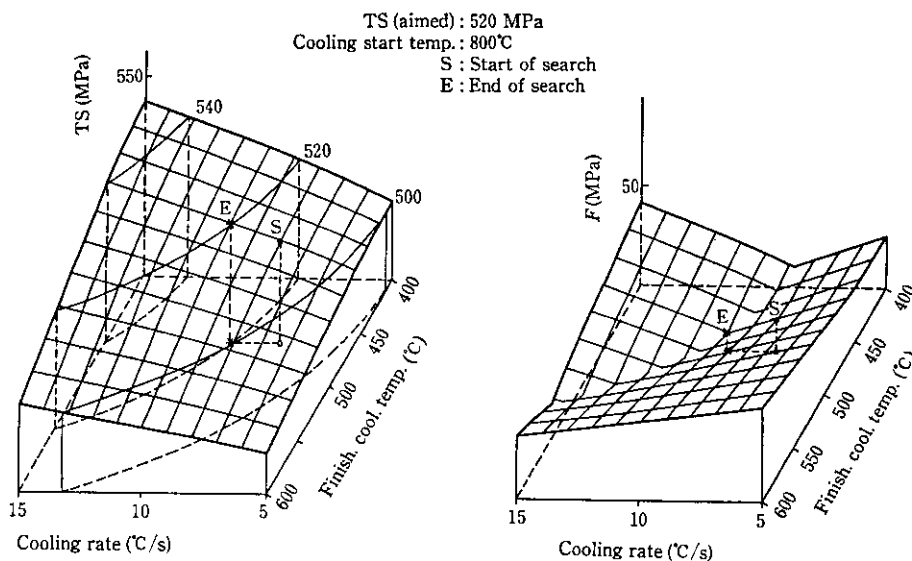


Fig. 10 Search of optimum cooling condition by steepest descent method

$F$  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<sup>19)</sup>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、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、たかだか10回の探索により最適値が見つけれられることから、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。

## 5 結 言

コンピュータ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いる。本稿では制御圧延・制御冷却に限ってシミュレーションモデルの一端を紹介した。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っ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となり、モデルの適用範囲拡大、精度向上が期待される。

また現状のモデルで取り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スーパーコンピュータを駆使することにより今後の発展が期待できる。

上記の目的を達成するためには、相互作用パラメータ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・成長の動力学的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<sup>20)</sup>、計算幾何学の活用<sup>21)</sup>の成果が待たれる。

## 参 考 文 献

- 1) 日本鉄鋼協会熱延プロセス冶金研究委員会: 「熱間加工のシミュレーションとオーステナイトの変態」, (1985)
- 2) Y. Saito, M. Tanaka, T. Sekine, and H. Nishizaki: Proc. of Internl. Conf. on HSLA Steel, (1985), Univ. of Wollongong, Wollongong
- 3) 矢田 浩: 塑性と加工, 28 (1987) 316, 413
- 4) 江坂一彬, 臨田淳一, 高橋 学, 河野 浩, 原田慎三: 製鉄研究, 321 (1986), 92
- 5) P. Choquet, A. LeBon, and Ch. Perdix: 7th Internl. Conf. on Strength of Metals and Alloys, Montreal, (1985), 1025
- 6) E. Anelli, M. Ghersi, M. Mascanzoni, M. Paolucci, A. Aprile, A. DeVito, and F. DeMitri: *ibid.*, 1031
- 7) A. N. Kolmogorov: *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Mat.*, 1 (1937), 355
- 8) W. A. Johnson and R. F. Mehl: *Trans. AIME*, 135 (1939), 416
- 9) M. Avrami: *J. Chem. Phys.*, 7 (1939) 12, 1103
- 10) S. M. Allen and J. W. Cahn: *Acta Metall.*, 27 (1979) 6, 1085
- 11) H. I. Aaronson and J. K. Lee: "Lecture on the Theory of Phase Transformation", (1975), 82, [TMS-AIME]
- 12) M. Enomoto and H. I. Aaronson: *Metall. Trans.* 8, 17A (1986), 1385
- 13) C. Zener: quoted by C. Smith: *Trans AIME*, 175 (1948) 1, 15
- 14) K. Lucke and K. Detert: *Acta Metall.*, 5 (1957) 11, 628
- 15) C. M. Sellars and J. A. Whiteman: *Metal Sci.*, 13 (1979) 3 and 4, 187
- 16) Y. Saito, T. Enami, and T. Tanaka: *Trans ISIJ*, 25 (1985), 11, 1146
- 17) 村田正彦, 為広 博, 土生隆一: 鉄と鋼, 72 (1986) 11, A219
- 18) 鎌田芳彦, 橋本 保: 鉄と鋼, 72 (1986) 11, A223
- 19) 西川緯一, 三宮信夫, 茨木俊秀: 「最適化」, (1982), 46, [岩波書店]
- 20) J. D. Gunton, M. San Miguel, and P. S. Sahni: "Phase Transition and Critical Phenomena", vol. 8, (1983), [Academic Press]
- 21) D. J. Srolovitz(ed.): "Computer Simulation of Microstructural Evolution", (1985), [TMS-AIME]