

技術解説

鉄鋼業の基盤としての数理科学

Development of Mathematical Science in Steel Industry

山村和人* Kazuto YAMAMURA
 松崎真六 Shinroku MATSUZAKI
 藤健彦 Takehiko TOH
 山田 亘 Wataru YAMADA
 中川 淳一 Junichi NAKAGAWA

1. はじめに

計算機の高速度と大容量化は、ミニコンピュータの登場した1970年代から着実に指数関数的に向上を果たしており、直近では、神戸に10PFLOPSもの計算速度を持つ最先端スーパーコンピュータ“京”が出現した。コストパフォーマンスも数年で10倍のペースで向上しており、産業界においても大学研究機関の先端マシンを利用したり、最先端の100~1000分の1程度の高速度計算機を個別に保有、利用する企業が増えてきた。製鉄技術は、その特徴として、①鉄鋼材料のマクロな機械特性や機能特性はそのミクロ組織に大きく依存、②製造設備は、大型かつ高温、反応系で実験、計測が困難、③マルチスケール、マルチフェイズ、マルチフィジクス、を有しており、比較的早い時期から計算機による現象解析、材料設計やプロセスシミュレーションを実施してきた(図1参照)。

本説では、近年の計算ハード・ソフトウェアの発展に伴い高度化した製鉄技術の数値解析事例の一部と、全く新しい試みとして新日本製鐵が進めている、数学の工学的利用技術の一部を紹介する。

2. 構造解析

2.1 新日本製鐵における構造解析の歩み

構造体を離散化して解析する手法として、現在、最も一

般的かつ広い分野で使われている有限要素法(以下FEM)は、1950年代に登場し、固体力学の変分原理に基づいた近似解法として発展、1960年代後半より、非線形構造問題へ、さらに非構造問題への拡張がなされ、この間、多くの汎用コードが登場した。新日本製鐵では1970年代よりFEMへの取り組みを開始、汎用コードも導入し、現在では、ミクロな現象解明からエンジニアリングに至る殆どの分野で利用している。

一方、緒言に述べたような特徴を有する製鉄技術の構造問題に 대응するには、汎用コードだけでは限界があり、プロセス現象と設備とを結びつける現象オリエンティッドな数理モデルを開発、応用している。

ここでは、構造体の損傷や劣化、機能限界を支配する現象のメカニズム解明、新しいプロセスおよびそれを実現する設備のシーズ提案や最適化に資する数値構造解析技術と応用例をいくつか紹介する。

2.2 煉瓦積構造体(不連続構造体)解析技術

鉄鋼業では高温プロセスを中心に、耐火物(煉瓦や不定形)を扱った構造体が多い。とりわけ、煉瓦積み構造体のような多体の接触がからむ問題では、目地開き、ラチェット変形、割れ、倒壊といった損傷メカニズムの解明、それらを防止するための構造(形状や積み方、目地・だば構造等)や伝熱機構等の最適設計のニーズは極めて高い。

これら不連続体構造の解析は、固体力学の中でも計算の難しい領域であり、様々な解析法が提案され、実際の問題への適用、評価がなされてきている。

新日本製鐵では川井らの開発した剛体ばねモデル(RBSM: Rigid Bodies-Spring Model)²⁾をベースに、煉瓦特有の目地やだばの特性を加味した煉瓦積み構造体解析プログラムNS-Brickを開発した。RBSMは、微小変形理論に基づく一般化された離散化極限解析手法であり、要素を剛体と仮定し、要素境界面上に設けたばねによって要素内の仕事ではなく表面力のエネルギーを評価する方法であり、すべりを含む効率的な極限解析が可能である。

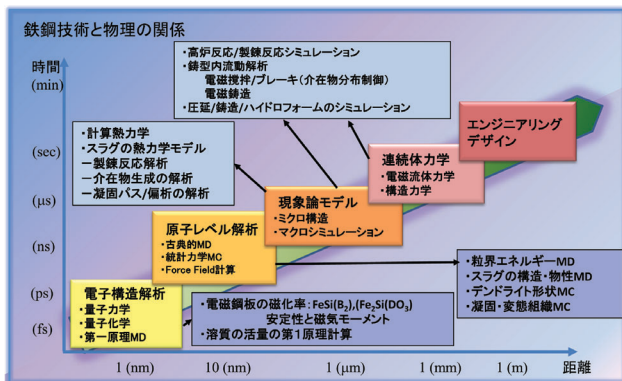
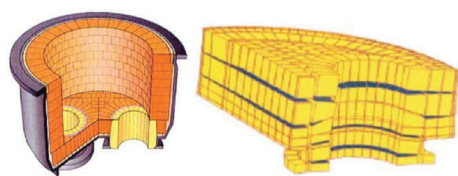
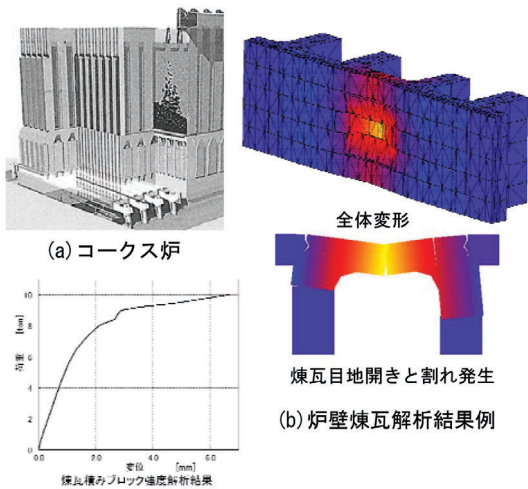


図1 鉄鋼技術のマルチスケール、マルチフィジクス性¹⁾

* プロセス研究開発センター プロセス技術部 主幹研究員 千葉県富津市新富20-1 〒293-8511



(a)RH 構造 (b)煉瓦の浮き上がり解析結果
図2 NS-Brick(RBSM)による解析例



(a) コークス炉 (b) 全体変形
煉瓦目地開きと割れ発生 (c) 荷重～変位曲線
図3 新NS-Brick(HPM)による解析例

本手法を用いた例として、真空脱ガス設備 (RH) における下部槽の長寿命化を実現する最適構造を検討するために、損傷原因となっている煉瓦浮き上がり現象を解明したものを図2に示す。

ところで、本手法は要素が剛体であるため、要素内のひずみや応力状況を把握することはできず、構造の変形や亀裂の進展の取り扱いには限界がある。煉瓦積み構造の限界耐力評価には、崩壊に至る前の部分的な破壊や変形が問題になり、RBSMでは挙動が十分に評価できない。

そこで、変位法だけでなく、応力法も加味した混合型の仮想仕事の原理をもとに、竹内らが開発したハイブリッド型ペナルティ法 (HPM: Hybrid-type Penalty Method)³⁾を用いた新煉瓦積み構造体解析プログラム NS-Brick II を開発した。HPMは、線形変位場を仮定して離散化極限解析を行うもので、剛体変位とひずみをパラメータとし、Lagrangeの未定乗数が物理的には表面力を意味することから、RBSMのばねと同様な概念を導入し、ばね定数としてペナルティ関数を用いる方法である。

本手法を用いた例として、コークス炉煉瓦壁の破壊荷重の推定を行ったものを図3に示す。図中 (b) は煉瓦中央部に荷重を負荷した場合の変形と荷重点を通る水平断面での目地開きと割れの状況、(c) は負荷荷重—変位の関係を示しており、負荷とともに強度が低下する過程が計算できている。

2.3 連続鋳造凝固シェル構造解析技術

連続鋳造プロセスにおいて、凝固シェル(溶鋼が凝固し

て固相になった部分)の成長挙動を把握することは、プロセスの安定性と高生産性を実現するための最重要課題である。従来の凝固シェル構造解析のほとんどは、座標系を鋳片の単位切片に固定した非定常的方法⁴⁾を用いている。この方法は、時間を追って周辺の境界条件を変更しながら温度や応力を計算する方法であるが、鋳造方向の温度勾配や応力勾配を考慮出来ない。

こうした問題に対し、粘塑性挙動を考慮し、また圧延解析に用いられる剛塑性解析と同様に、空間固定座標系の下で、速度場で解析する方法が提案された⁵⁾。しかしこのモデルは一般化平面歪みを仮定した2次元モデルであり、実際の鋳片に発生する割れ等を表現するには不十分であった。そこで、鋳型内において凝固シェル厚は鋳片サイズに比較し十分薄いこと、またシェル厚方向の温度分布も比較的単純な分布形状で表現出来ることに着目し、シェル要素を用いた定式化を行うことで、物質移動・凝固を含む相変態・熱収縮・粘塑性挙動まで考慮した3次元有限要素解析モデルを開発した。計算手順を図4に示す。

開発した凝固シェル変形解析モデルにより、鋳型形状の凝固に及ぼす影響を解析し、鋳型形状最適化、特に鋳型短辺テーパ(傾き)形状の最適化を行った。短辺のテーパ形状により凝固シェルと短辺銅板の間のギャップ(空隙、あるいは流入したパウダーで充填されている)生成の状況が変化する。図5 (b)に示すように、右側の1段テーパ短辺では、初期の鋳片熱収縮量がテーパ量より大きくなり、シェルと鋳型の間に大きなギャップが生成する。そのためコーナー部近傍の凝固成長が遅れ、鋳型の下端でのシェル厚が薄くなり、割れやブレイクアウト(シェルが破れて溶鋼が漏れるトラブル)が発生しやすくなる。この問題を解決するために、マルチテーパ短辺等が提案され適用されてきた。図5 (b)の左側がマルチテーパ短辺で、上部のテーパが下部に対して大きくなっている。このため初期凝固に

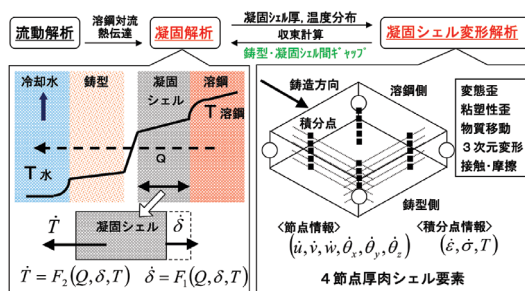


図4 凝固シェル変形解析モデル

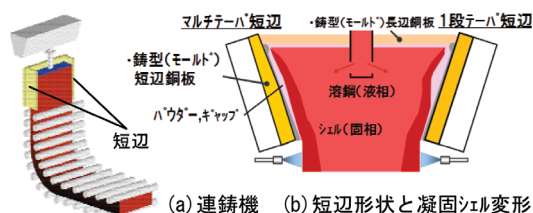
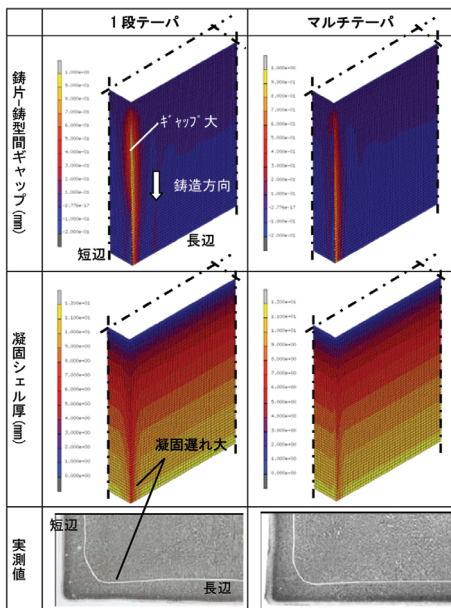


図5 鋳型短辺形状と凝固シェル変形

表1 マルチテーパ効果の評価



よる熱収縮量にテーパ量が近くなり、ギャップの生成が抑制され凝固遅れが起りにくくなる。

テーパ形状の凝固シェル成長に及ぼす影響を、開発したモデルで定量評価した例を表1に示す。マルチテーパ適用によりコーナー部近傍のギャップ量が低減して凝固が均一化する現象を計算と実測で確認した。これにより、モデルの有効性を確認、最適なテーパ形状を設計し実機適用した。その結果コーナー部近傍の凝固シェル厚の均一度が1段テーパより増加し、安定・高速 casting を実現した。

2.4 通板ダイナミック構造解析

薄板の連続焼鈍ラインや酸洗、表面処理等の連続処理設備において、鋼板の広幅化、薄手化、あるいは軟質化などの製品の多様化により、また、ユーザーの品質要求の厳格化に伴って、高品質、高生産性を確保するための安定通板技術が重要となっている。

これら鋼板連続処理設備において、鋼板はロール上あるいはロール間を移動しながら、代表的には、連続処理用加熱炉、各種冷却設備、酸洗やめっき処理の液中を通過する。ここで鋼板には、ロールと板の接触、熱履歴、ガスや液体の流体力、電磁力等の様々な影響力が及び、結果として、C反りや耳波、しわ(座屈)のような形状異常、蛇行、フラッターリング等の現象が発生する。

新日本製鐵では、これらのメカニズム解明とともに設備の最適化のために、連続処理ラインを統一的に、かつ非定常に検討できるダイナミックモデルを開発している。

一般的に連続処理ライン、特に炉内ロールには糸巻効果によるセンタリングによって蛇行を防止するためのクラウン(ロール中央部半径が端部より大きい)が設けられているが、張力や板温との関係によってはしわの発生原因となるため、最適設計が必要である。

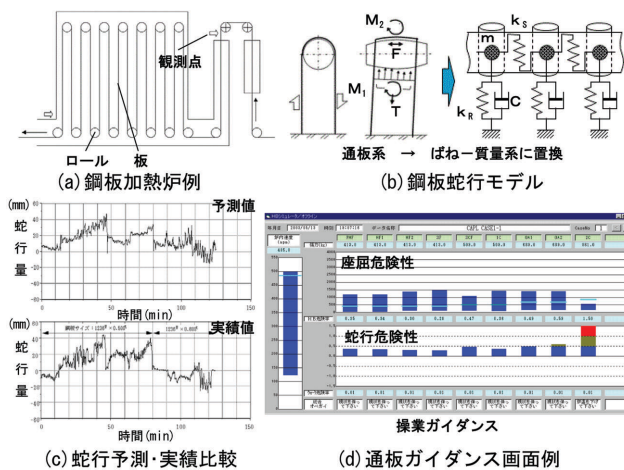


図6 通板ダイナミックモデルと応用例

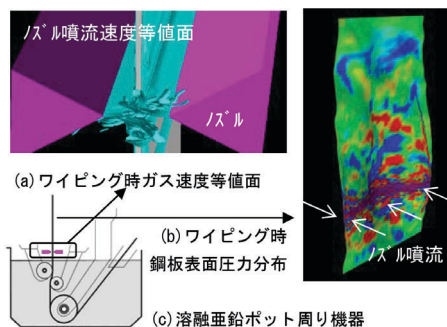


図7 溶融亜鉛めっきラインワイピング解析例

図6は一例として蛇行モデルとその予測およびオンラインでの通板ガイダンスに用いている状況を示す。蛇行モデルは通板速度とロール幅方向の鋼板移送速度の関係が一次遅れ系であることを利用し、等価なばね-ダッシュポット系で表現している。本システムでは、座屈理論に基づいてしわの発生限界も予測できる⁶⁾。本システムを用いてロールクラウンの最適設計も行っている。

流体力負荷時の通板モデルとして連続溶融亜鉛めっき工程を例に示す。同工程では、溶融亜鉛浴内に鋼板を通し、鋼板表面に溶融亜鉛を付着させ、浴面上のエアノズルで付着した溶融亜鉛を掻き落とし(ワイピング)、めっき厚みを調整している。

図7にワイピングの解析例を示す。物理的には、通板エッジ部の対向衝突噴流を伴う薄板の加振という流体-構造連成現象であり、さらに通板に随伴した液体の薄膜が噴流で掻き落とされるという激しい2相流現象である。これらの現象を解明するため、流体-構造連成解析により定量的に理解することを進めている。これらによって最適なノズル構造やロール配置等の最適化を行っている。

2.5 構造解析の今後の展望

プロセスと設備相互の最適化の意味では、今後はさらにマルチフィジクス、マルチフェイズ、マルチスケール、マルチボディといった複雑な問題への対応が増加するものと思われる。これらニーズに対し、構造解析は大局的には、

粒子法ベースの手法と、連続体力学ベースの手法2つの方向で展開するものと見ている。前者はSPH, PFEM等、後者はHPM, XFEM等が代表的なものであるが、計算機負荷や解析精度上の課題によって一長一短があり、目的に合わせた最適な手法の選択が極めて重要である。新日本製鐵では、今後も目的オリエンティッドな数理モデルの研究開発、実用化を進めていく。

3. 流体解析

3.1 高炉のDEMモデル

高炉とは、“鉄鉱石とコークス（装入物）を炉頂から装入し、高炉の下部に設置された複数のノズル（羽口）から送風された約1200℃の高温の空気でコークスを燃焼させ、発生した高温の還元ガス（主としてCOガス）で炉内の鉄鉱石を昇温、還元、溶解する反応器”である。羽口で発生した約2000℃の還元ガスは、装入物を加熱しつつ鉄鉱石を還元し、200℃程度の温度となって炉頂から排出される。この時、炉内での熱交換、還元効率、装入物の入れかたや充填状況そのものに左右される。また、装入物の充填状況は、炉の上部（塊状帯）では粒径分布や嵩密度などの物性値で決まるが炉の下部では、融着帯や炉芯の状況によって左右される。

したがって、高炉の機能を最大限に活用するためには、炉下部から上昇する高温のガスを効果的に上昇させ、還元と熱交換の効率を最大にすること、また、粉体の炉下部への降下を順調に行うことが重要である。このことは、高炉で還元材として使用される炭素源の低減にもつながる。このためには、高炉での固体ガス流れの解明が重要であることはいままでもない。このため、現在は従来の連続体モデルではなく、離散的な取り扱いによるモデルが盛んになってきている。

新日本製鐵でもそのような観点から、DEM (Distinct Element Method)^{7,8)}モデルを用いた固体流れモデルを開発してきた。装入物分布に関しては、偏析の解析を主体とした一次元DEMモデル、原燃料の装入を主体とした二次元DEMモデル、三次元DEMモデルを開発してきた。また、炉内の推定については、3次元のDEMモデルを九州工業大学と共同で開発してきた。

3.2 装入物分布DEMモデル

図8は、開発の初期のペルレス装入装置のシミュレーション結果である。計算機能力の不足もあり、数千個の粒子を扱い、シュートの旋回もなしであった。

その後、モデルを3次元にまで拡張し、現在ではサージホッパーから装入まで、ほぼ実炉のスペックを満たすモデルの開発が進んでいる（図9参照）。また1/3スケールの大型の実験装置を用いて検証も進めている。

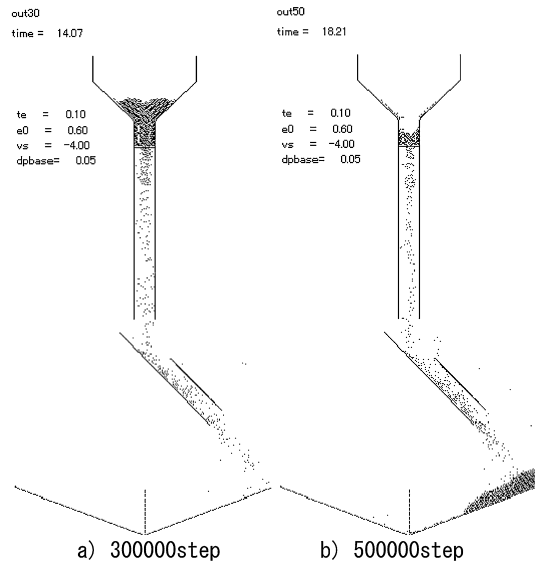


図8 二次元DEMモデルによる装入物のホッパーへの堆積過程と、排出過程の計算例⁹⁾

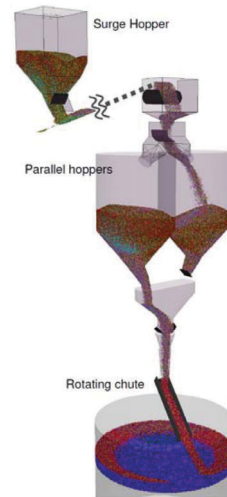


図9 三次元DEMモデルによる装入物のホッパーへの堆積過程と、排出過程の計算例¹⁰⁾

3.3 高炉内のガス固体流れモデル

高炉内のガス固体モデルについても、2次元から開発を進めてきた。図10は、レースウェイ近傍の粒子の挙動を2次元的に計算したものである。

また、図11、図12は付着物や棚つりを起こした場合の空隙率分布や差圧分布を計算することにより、炉内の固体流れやガス流れの変動を解明しようとした試みである。

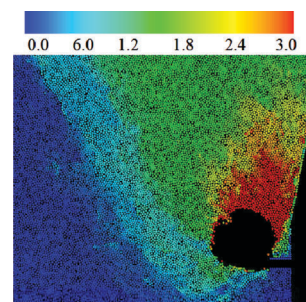
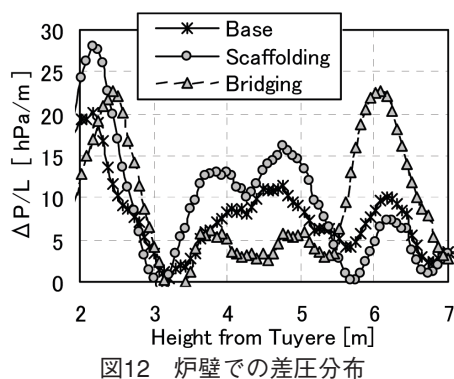
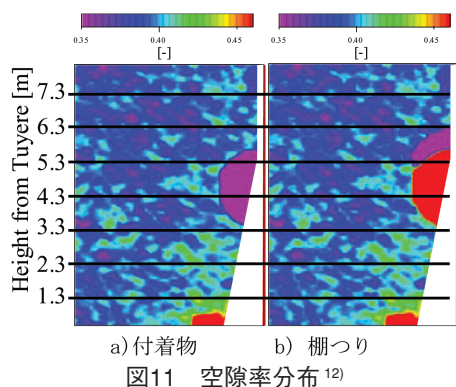


図10 レースウェイ近傍でのコークス充填状況と粒子速度¹¹⁾



3.4 地球シミュレータを活用したDEMモデル^{13,14)}

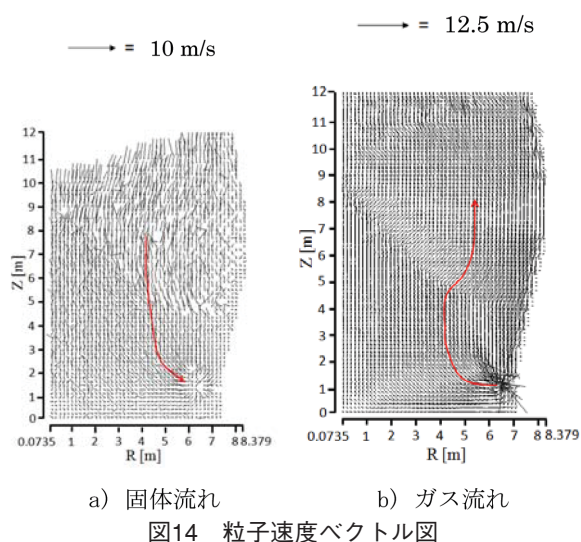
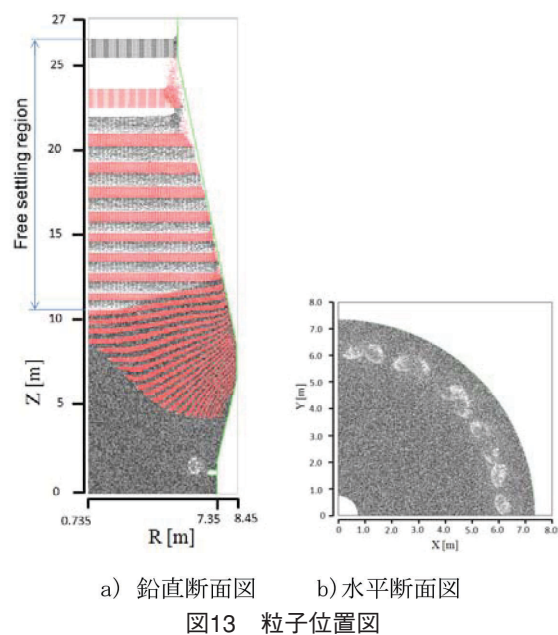
DEMモデルは、固体流れを解明する上で非常に強力な武器となりつつあるが、粒子1個1個の接触等を判定するため、計算粒子の増加により指数関数的に計算時間が増加する。この課題を解決するため、独立行政法人海洋研究開発機構（Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology：JAMSTEC）の所有するいわゆる地球シミュレータを用いて、モデルの大規模化、高速化のための検討を行った。

5000m³クラスの実高炉を模擬したモデルで、円周方向は1/4（90度分）、高さ方向は全てを含む領域においてコークスと鉄鉱石を層状に配置して、沈降開始とともに10本の羽口から速度250m/sで airflow を吹き込み、層状に配置されて沈降する粒子群と相互干渉し形成される実高炉内の不均質な混相流のシミュレーションをおこなった。利用ノード数は16ノード、気流計算の接点数は約300万、計算粒子数は約1200万個であった。

計算結果を図13、図14に示す。炉内での粒子の充填状況やガス固体流れが、実機スケールで計算可能となりつつあることがわかる。

高速化については、今後とも残された課題である。

新日本製鐵では、DEMを活用した高炉のモデルを開発しており、様々な成果が出つつある。しかしながら実機規模の高炉の炉内の推定や予測に使用するためには、数億個の粒子をシミュレーションすることが必要であり、更なる計算規模の大型化、高速化が必須となると考える。



3.5 連続鋳造工程におけるマルチスケール・マルチフィジクス現象と数値解析

連続鋳造工程では、プロセスの代表長さは数m、凝固組織は数 μm から数100 μm 、非金属介在物、気泡数 μm ～数mm、時間スケールは数10分～数時間に対して凝固は数msとなっており、時空間上でマルチスケール問題となっている。また、層流から数10万のRe数となる乱流状態の広範囲の流動を中心として、熱と溶質の移流拡散、ガス、スラグ、メタルの混相流、自由界面と移動界面、化学反応と凝固、変態等の相変化、非金属介在物の生成・移流拡散と凝集体、電磁場による流動制御やプラズマ加熱等に伴う電磁流体现象、鋳片の弾塑性クリープ現象等々、マルチフィジクス問題となっている。これらの問題を完全に捉えることは困難であるが、各種の現象を準定常的に連成して捉えることは可能となっている。本稿では、連続鋳における流動現象と非金属介在物・気泡挙動のシミュレーション技術の概要と応用例を紹介する。

(1) 解析対象

2次精錬後の溶鋼が入った取鍋は、連続铸造工程に移送され、ターレットにより前鍋から後鍋に交換される。その間連続铸造は継続され、鑄型に溶鋼を供給するタンディッシュ内の溶鋼は交換中に湯面レベルは下降し、後鍋開孔と共に上昇し、所定のレベルに達して準定常状態となる。この間の現象は自由表面や混相流を伴うもので非常に複雑である。非金属介在物品質について言えば、鑄造時間全体を通じて、取鍋内に浮遊するアルミナ系非金属介在物はタンディッシュに流入し続ける。前鍋終了時には溶鋼上部に層をなす溶融スラグが溶鋼と共にタンディッシュ内に流入し、スラグ系非金属介在物を形成すると共に、鋼中のアルミニウムにより一部還元され、アルミナ系非金属介在物を生成する現象も起こす。特にアルミナ系の非金属介在物は数 μm 径のものが凝集してクラスター化する。特に有害なものは数 $10\mu\text{m}$ 以上のものである（解析手法の詳細については、文献15）～19）参照）。

(2) 解析結果

図15に連成モデルの解析例を流動と温度について示す。図16は取鍋交換後のアルミナ系非金属介在物の濃度分布を直径 $1\mu\text{m}$ と $100\mu\text{m}$ について示したもので、前期湯落ち部での再酸化による $1\mu\text{m}$ 径非金属介在物濃度上昇と凝集体による $100\mu\text{m}$ 径非金属介在物濃度上昇を表現している。このような取鍋交換部の非金属介在物は取鍋からのスラグ流出量の低減やタンディッシュ内での湯面レベル調整等の操業調整で低位に抑えるように工夫されるが、鑄型への流入は完全には避けられず、鑄型内での浮上分離も重要な技術となる。このための技術として均一電磁ブレーキがある²⁰⁾。

本技術は、鑄型内への注入ノズル吐出口位置に鑄造幅方向に均一な直流磁場を鑄型厚み方向に与え、注入流に逆向

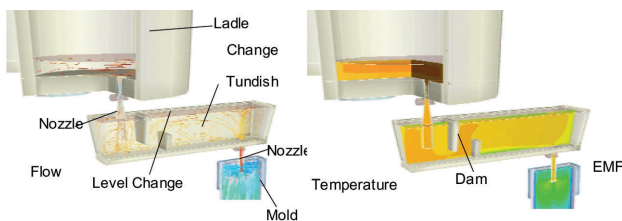


図15 取鍋交換直前の流動と温度分布例

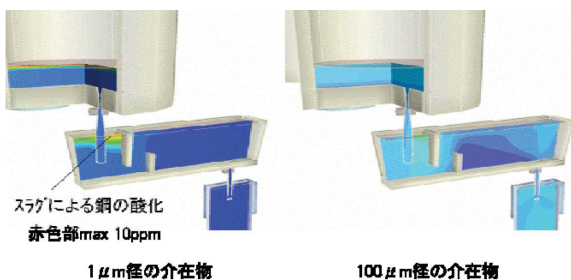


図16 取鍋交換直前の非金属介在物濃度例

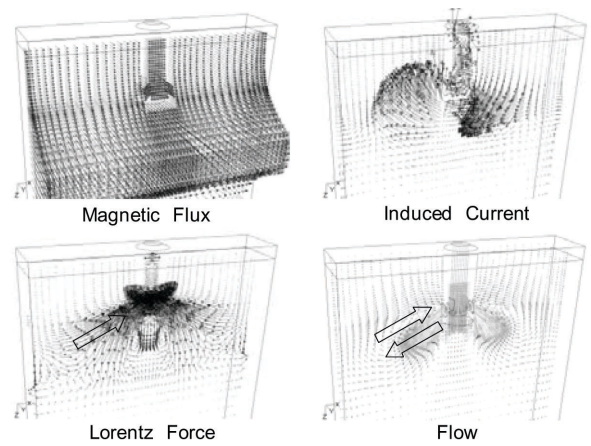


図17 電磁ブレーキLMF(Level Magnetic Field)使用時の電磁流体解析結果

きの電磁力を発生させて流速を低下させ、注入流が連続鑄造ストランド内深くに侵入することを抑えるもので、鑄型内の非金属介在物浮上に寄与する。図17は前記のポテンシャル法との連成解析を使用して解析した結果であり、均一電磁ブレーキ適用時の磁束密度、誘導電流、電磁力分布を示す²¹⁾。本技術の適用により、非金属介在物欠陥の抑制効果が得られると共に、生産性の向上が図られる。なお、電磁ブレーキを使用すると流動場を経て凝固が変化し、鑄片の鑄型内変形も変わることが予想される。有限体積法による変形連成解析の試み²²⁾により、凝固シェルの鑄型周方向の均一効果が示され、鑄片形状の平坦化も示される²³⁾。

(3) 溶鋼流動解析の今後

有限体積法によるマルチスケール・マルチフィジックス解析手法を構築し、連連鑄操業における準定常的な流動と物理化学諸量の時系列変化の解析を可能とした。これにより非定常部の品質挙動の解析評価や対策の効果推算が可能となっている。今後の研究課題として、ハイパフォーマンスコンピューティング技術の進展を活用して、小さな時間刻みを要求する自由表面と混相流の厳密モデルの適用、さらには取鍋スラグの巻き込みによるスラグ系非金属介在物形成、ノズル内発生アルゴンガス気泡の粒径分布²⁴⁾など、一部のサンプリングデータと解析的理論から導かれた経験的かつ厳密な測定が困難な境界条件を、微視的なモデル解析により直接数値的に求めることが数値解析側から期待される。また、連続鑄造は流動と凝固組織形成、鑄片変形が複雑に相互作用する系であり、その高速かつ安定した連成解析手法の構築が研究課題として挙げられる。

4. ミクロスケール計算材料科学

4.1 新日本製鐵におけるミクロ計算材料科学の応用

鉄鋼材料のマクロな機械特性や機能特性はそのミクロ組織に大きく依存している。合金状態図は、材料設計において、狙ったミクロ組織を得るための最適な合金組成やプロセス条件の指針を与える“地図”であり、重要な役割を

持っている。新日本製鐵は、早くから CALPHAD (CALculation of PHase Diagram) に注目し、SOLGASMIX²⁵⁾ や Thermo-Calc²⁶⁾等の熱力学平衡解析ソフトウェアや熱力学データベースの導入と実用材料および実プロセス解析への応用を行ってきた²⁷⁾。さらに溶質元素の拡散や偏析或いは精錬化学反応の速度論を局所平衡解析と連結して、熱力学現象やプロセスそのものをシミュレーションする取り組みも、“計算熱力学”と称して進めてきた²⁷⁾。

一方で、近年の鋼材特性に対する要求の厳格化に対応するためには、電子状態のマイクロレベルの解析まで遡り、物質や材料の本質的な特性を理解することがますます重要となってきた。

我々は、計算機の高性能化に伴って定量性や信頼性が高まってきている電子レベルの“第一原理計算解析手法”を鉄鋼材料解析へ応用してこれらのニーズに応えるとともに、将来的には、原子レベルやメソレベル解析手法と組み合わせるマルチスケール計算材料科学の手法構築を行って、材料特性を深く理解する上であらゆる面で実験をサポートする体制を整えたいと考えている。以下、このようなマイクロ解析の実例を紹介する。

4.2 材料のマイクロシミュレーション技術の紹介

(1) 鋼材の電子・原子構造シミュレーション

最初の例は、第1原理計算を軸にした結晶粒界の水素量予測技術である。近年鋼材の高強度化ニーズはますます高まっているが、自動車用鋼板に用いられる1 GPaを越す超高張力鋼のような高強度鋼では、水素脆化が適用範囲拡大のネックの1つになっており、脆化の原因となる粒界の水素捕捉量を把握して制御する技術が必要となっている。鋼材に侵入した水素は、粒界以外にも、転位や原子空孔等の格子欠陥や炭化物等の析出物にも捕捉される上に、水素が非常に速く拡散するため、粒界に捕捉された水素量を正確に予測することは困難であった。我々は、国家プロジェクト“980MPa級継手の水素侵入による低温割れの解明、信頼性確保のための予測技術手法の開発”²⁸⁾の一環として、第1原理計算をベースとした計算と実験の両面から α 鉄中の粒界を含む各種欠陥への水素捕捉エネルギーの評価と α 鉄中の水素の拡散と各種欠陥への捕捉現象の動的挙動計算モデルの構築を行い、粒界に捕捉された水素の定量的予測技術を開発している。

図18は α 鉄中のTiC整合析出物の各捕捉サイトでの水素捕捉エネルギーを計算した結果である。この結果より、水素は従来考えられていた整合歪場よりも整合界面やTiC中のC空孔での捕捉エネルギーが大きいことが分かったが、3D-AP (3Dimensional Atom Probe) での観察により、実際に整合界面での捕捉が支配的であることが確認されている²⁹⁾。TiCの他にVCやセメントタイトについて計算された水素捕捉エネルギーについても TDS (Thermal Desorp-

tion Spectrum) などの実験データと整合する結果が得られている。図19は転位が高密度 ($10^{15}/\text{m}^2$) で存在する結晶粒径 $10 \mu\text{m}$ の α 鉄中に侵入した水素 (2 ppm) の最終的な各欠陥位置での存在量を上記計算結果などを元に計算した結果を示している。このように、実験的にも評価困難であった結晶粒界上の水素量が定量的に把握できれば、別途実験的に求められる割れ限界水素量との比較により水素脆化の有無が予測できる。マイクロ解析から出発して、水素脆化というマクロ特性の予測まで繋がったマルチスケール解析の好適例といえる。

第1原理計算から鋼材の特性の本質を理解したもう1つの例として、 γ 結晶粒界の強度に及ぼすS偏析の影響をシミュレーションした結果を示す。Sの粒界偏析は粒界の強度を顕著に低下させ、 casting割れや熱間加工割れを誘発するが、母材の低温靱性を向上させる元素としてよく用いられるNiを添加した鋼材では、このSによる粒界脆化現象が促進されることが知られている³⁰⁾。Ni添加鋼のSによる粒界脆化の本質的な原因を理解する目的で、Ni添加有無での粒界の強度をSの原子間結合力に注目して第1原理計算により解析を行った。

図20に示すような γ 鉄中の $\Sigma 9(221)[110]$ 粒界に対して、NiとSが粒界に共存するモデル構造を考え、粒界を引き離れた時の結合エネルギーを算出し、Ni無しの場合と比較した。図21に示すように、NiとSが共存する方が粒界を引き離れた表面を形成するに要するエネルギーが小さいことが判り、粒界近傍においてNiがSと共存することによって粒界割れを促進するという実現象と一致する結果が得られた。詳細な電子構造解析から、この原因は、Niの存在によってS原子同士の反結合軌道に相当する3p電子状態が占有されたため、S原子同士が反発し、結合力を弱めたためと理解できた。

以上の2例はいずれも粒界偏析にかかわる現象の解析例

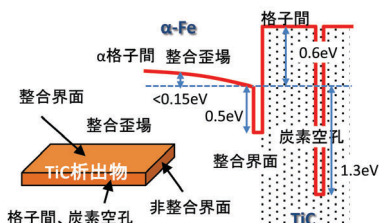


図18 α 鉄中のTiC析出物での水素捕捉エネルギー

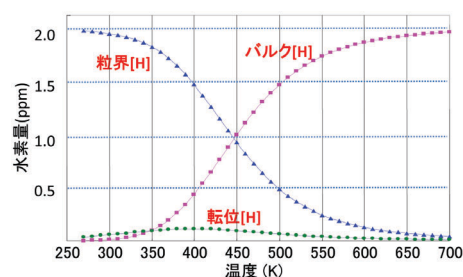


図19 α 鉄中のHの存在位置と量(熱平衡計算結果)

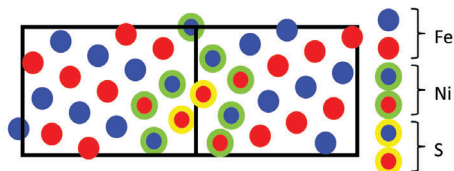
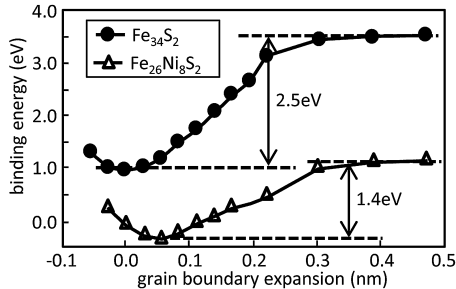
図20 γ 粒界のNi, S共偏析モデル

図21 粒界の結合エネルギーのNi有無による差

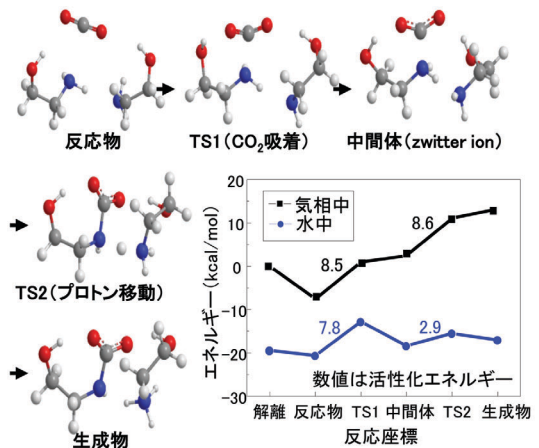
であった。粒界に関する諸現象は実験的な解析が困難なことから、今後とも電子構造解析等のミクロ計算手法が活躍できる有望なフィールドであると考えているが、そのほかにも、溶質の相互作用エネルギーや析出物の形成エネルギー等の物性値の算出を試みており、このように求められた物性値をメソレベルの組織解析シミュレーションやCALPHADの相解析の熱力学データソースとして用いることにより、マルチスケール材料計算科学の適用範囲拡大を進めている。

(2) 量子化学シミュレーションの環境対応研究への展開

環境問題への技術的な取り組みは、工場から発生する環境負荷物質の特定や分解、除去、温室効果ガスの分離回収、化石燃料代替エネルギーの探索など、その多くが化学の課題である。計算化学は、原子、分子からナノスケール物質を対象とするシミュレーション手法の総称であり、コンピュータ性能のめざましい進歩とともに、今日では化学、製薬、電子分野等において必要不可欠なツールとなっている。計算化学手法の内、量子力学に基づく計算を量子化学シミュレーションと呼ぶが、我々は様々な環境問題の解決に向け、その活用を積極的に進めている。

近年、CCS (CO₂ Capture and Storage) は地球温暖化対策の有望技術として注目されており、製鉄所の高炉ガスや発電所の燃焼排ガスからCO₂を分離回収する大規模プロセスには、アミン水溶液を吸収液とした化学吸収法が実用化の可能性が高い。この分野でも複数の研究機関が量子化学計算による反応機構の解析を行っているが、水溶液中の反応であるため、溶媒効果を適切に考慮することが精度面のかぎとなる。

我々は、密度汎関数法をベースに、連続誘電体モデルにより溶媒の分極効果を考慮した計算手法を用いることにより、この課題に取り組んでいる³¹⁾。図22は、その手法を

図22 CO₂吸収反応の反応過程におけるエネルギーの変化

用いてモノエタノールアミンがCO₂と結合し、カルバメートアニオンを生成する反応を解析した例であり、遷移状態(TS1, TS2)等の反応経路上の分子構造と、対応するポテンシャルエネルギーを示す。図より、気相中と水中のエネルギーを比較すると、この反応が溶媒の影響を強く受けていることが分かる。特に、溶媒和によってTS2が大きく安定化するため、2段目の活性化エネルギーは大幅に低下し、その結果、水中では1段目の反応が律速となり、実験による示唆とも一致する結果が得られた。現在、ここで述べたような反応計算を、高性能CO₂吸収液の開発に活用している。

化学を基軸とする環境問題への技術的取り組みにおいて、量子化学計算による分子物性や化学反応の解析・予測技術が果たす役割は今後益々重要になると予想され、我々も最先端の量子化学理論を取り入れながら、環境問題の解決と持続可能社会の実現に貢献していきたい。

5. 数学の工学利用技術

鉄づくりは固体、液体、気体を常温、常圧から高温、高圧までさまざまな状態で扱うなど製造条件が複雑に絡み合い、これまで現場の経験則や過去のデータから推測した暗黙知によって制御してきた現象も多い。その中で新日本製鐵は数学を利用することで、原理原則に基づいた現象の本質的解明が可能となることを見出し、数学者と鉄鋼研究者の知恵を集結した新しい産学連携の形態を模索発展させてきた。従来の工学を基盤にした研究開発スタイルに、数学という現象表現の新しい切口を導入し、鉄づくり現場の課題解決に挑戦している(図23)。

例えば、図24は高炉炉低耐火物の伝熱逆問題解析の例を示している。逆問題とは、直接計測することができない現象の間接的な観測結果から、その根本となる原因や要因を突き止める数学的手法である。ここでは、耐火物に埋め込まれた熱電対の温度計測値から、熱伝導方程式を使って、通常では計測困難であった耐火物の内面の温度や熱伝達係数を逆算する手法を開発した。この技術により、温度

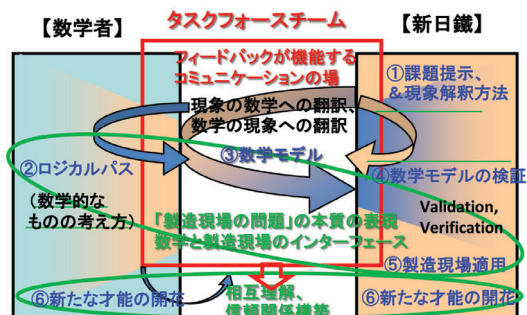


図23 数学者と新日本製鐵研究者との連携の考え方

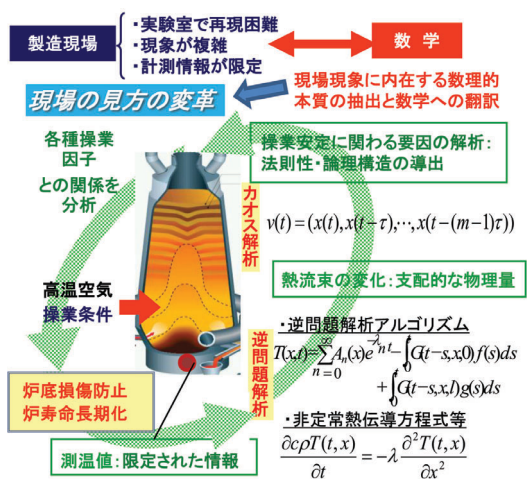


図24 高炉の熱伝導逆問題解析の考え方

が異常に急上昇する直前に炉内部の温度が頻繁に上下していることが初めて捉えられた。このような炉内現象の可視化が実現したことにより、炉内での異常な温度変化の原因を定量的に把握できるようになり、炉内の温度変化を制御できるようになって、実際に高炉の安定操業につながった。

逆問題解析に限らず、制御・最適化、データマイニング、可視化と図形認識など、鉄鋼の製造現場の課題に適用可能な数学利用技術は数多く存在する。我々は、図23に示したような数学をコアにした発展的、双方向的な産学連携を実現することにより、数学が持つ普遍性によって多くの産業現場で直面する多様な課題が一気に解決される可能性があると考え、数学の工学利用技術の推進を行っている。

6. まとめ

鉄鋼製造技術開発において活用している数理科学応用例として、構造解析、流体解析、計算材料科学、数学、の各分野の近年実行された解析を中心に紹介した。いずれも鉄鋼の特徴である伝熱現象等も包含したマルチフィジクスでもあり、解析目的に応じ、現象取扱の緩和を含んだ当該分野独自のアプローチを行っている。

事例が示すように、急速な計算機能力の向上により、適用範囲が限られていた粒子離散法が、現実問題の解決手段として利用され始めているとともに、従来の解析では不十

分であった解析精度も向上し、解析領域の拡大、非定常性の重視、ミクロシミュレーションに基づく鋼材設計等、計算規模も大幅に拡大していることが判る。鉄鋼業界は、製造プロセス解析を最も古くから積極的に取り組んできたにも拘らず、解析対象の複雑性、検証の困難さからハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) の進歩に利用技術が必ずしも十分追従できていなかったと思われる。今後は、益々大型化、高度化する計算機能力を研究開発の強力な武器にすべく、プログラムの高効率並列化技術やスーパーコンピュータを効果的に活用するための技術開発、さらにこれまで出来ていなかった鉄鋼製造独特の複雑現象解析のための計算コードとその解析基盤を拡大する数学利用技術の開発を進めていきたい。

参考文献

- 1) 松宮徹:鉄と鉄鋼がわかる本. p.85
- 2) Kawai, T.: J. of the Society of Naval Architects of Japan. 114, 1867-193 (1977)
- 3) 竹内則雄, 草深守人, 武田洋, 佐藤一雄, 川井忠彦:土木学会構造工学論文集. 46A, 261-270 (2000)
- 4) Thomas, B.G., Samarasekera, I.V., Brimacombe, J.K.: Met. Trans. 18B, 131 (1987)
- 5) 鈴木規之, 菊地彪:新日鉄技報. (342), 23-27 (1991)
- 6) 王志剛, 井上達雄:日本機械学会論文集 (A). 53(492), 1739 (1987)
- 7) Cundall, P.A., Strack, O.D.L.: Geotechnique. 29 (1), 47 (1979)
- 8) 粉体工学会編:粉体シミュレーション入門. 東京, 産業図書(株), 1998
- 9) 松崎真六, 田口善弘:CAMP-ISIJ. 13, 138 (2000)
- 10) 三尾浩, 門脇正具, 松崎真六, 国友和也:CAMP-ISIJ. 24, 111 (2011)
- 11) 門脇正具, 松崎真六, 国友和也:CAMP-ISIJ. 22, 193 (2009)
- 12) 門脇正具, 松崎真六, 国友和也:CAMP-ISIJ. 22, 869 (2009)
- 13) Yuu, S., Umekage, T., Matsuzaki, S., Kadowaki, M., Kunitomo, K.: ISIJ Int. 50, 962 (2010)
- 14) 平成20年度先端研究施設共用イノベーション創出事業【産業戦略利用】“地球シミュレータ産業戦略利用プログラム”利用成果報告書 (http://www.jamstec.go.jp/es/jp/project/sangyou_report/H20_NSC_jp.pdf)
- 15) Wilcox, D.C.: Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries, Inc., La Canada, California, 1998
- 16) Fujisaki, K., Sawada, K., Ueyama, T., Okazawa, K., Toh, T., Takeuchi, E.: Proc. Int. Symposium on Electromagnetic Processing of Materials. 272 (1994)
- 17) Harada, H., Toh, T., Ishii, T., Kaneko, K., Takeuchi, E.: ISIJ Int. 41, 1236 (2001)
- 18) Javurek, M., Gittler, P., Rössler, R., Kaufmann, B., Preßlinger, H.: Steel Research Int. 76, 64 (2005)

- 19) Maréchal, L., El-Kaddah, N., Menet, P.: Light Metals, The Minerals. Metals and Materials Society, 1993, p.907
- 20) Zeze, M., Harada, H., Takeuchi, E., Ishii, T.: Iron and Steelmaker. 20, 53 (1993)
- 21) Toh, T., Takeuchi, E., Matsumiya, T.: Proc EPM 2006. ISIJ, Sendai, 2006, p.21
- 22) Teskeredzic, A., Demirdzic, I., Muzaferija, S.: Numerical Heat Transfer. Part B. 42, 437 (2002)
- 23) Toh, T., Yamamura, K., Takeuchi, E.: Proc. CFD2009, 2009
- 24) Toh, T., Hasegawa, H., Harada, H.: ISIJ-Int. 41, 1245 (2001)
- 25) Eriksson G.: Chemica Scripta. 8, 1072 (1975)
- 26) Sundman B.: CALPHAD 9. 1985, p.153
- 27) 山田 亘, 松宮 徹: 新日鉄技報. (342), 38 (1991)
- 28) 鉄鋼材料の革新的高強度・高機能化基盤研究開発第1回シンポジウム. 2009
- 29) Takahashi, J., Kawakami, K., Kobayashi, Y., Tarui, T.: Scripta Material. 63, 261 (2010)
- 30) Mostefa, L.B., Saindrenan, G., Solignac, M., Colin, J.P.: Acta Metall. Mater. 39, 3111 (1991)
- 31) Yamada, H., Matsuzaki, Y., Higashii, T., Kazama S.: J. Phys. Chem. A 115, 3079 (2011)



山村和人 Kazuto YAMAMURA
プロセス研究開発センター プロセス技術部
主幹研究員
千葉県富津市新富 20-1 〒293-8511



山田 亘 Wataru YAMADA
先端技術研究所 数理科学研究部長



松崎真六 Shinroku MATSUZAKI
プロセス研究開発センター
製鉄研究開発部 主幹研究員 工博



中川淳一 Junichi NAKAGAWA
先端技術研究所 数理科学研究部
主幹研究員



藤 健彦 Takehiko THO
先端技術研究所 数理科学研究部
主幹研究員 工博

執筆協力



村上英樹 Hideki MURAKAMI
プロセス研究開発センター
プロセス技術部長 Ph.D.



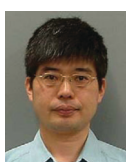
三尾 浩 Hiroshi MIO
プロセス研究開発センター
製鉄研究開発部 研究員 工博



山崎伯公 Norimasa YAMASAKI
設備・保全技術センター 機械技術部
機械技術研究グループリーダー



門脇正具 Masatomo KADOWAKI
プロセス研究開発センター
製鉄研究開発部 研究員



山田義博 Yoshihiro YAMADA
設備・保全技術センター 機械技術部
機械技術研究グループ 主任研究員 工博