

(解説)

鉄鋼材料の材質予測シミュレーション技術

難波茂信

技術開発本部・材料研究所

Microstructure Evolution Simulation Technology for Hot Rolled Steels

Shigenobu Nanba

Computer simulation models which can predict microstructural evolution during and after hot rolling have been developed over the past ten years. In this report, the features of such developed simulation models are reviewed. Microstructure evolution simulation using mathematical models, based on metallurgical principles, is used in all the models reviewed. These models are highly accurate in predicting microstructural phenomena such as ferrite fraction, grain size and decarburizing depth. Mechanical properties and the surface quality of hot rolled products can be much more effectively controlled with these highly sophisticated models.

まえがき = 鉄鋼材料の材質予測シミュレーション技術は幅広い概念であるが、本稿では、熱間圧延鋼材の組織変化と特性予測をシミュレーションする技術を取扱うこととする。

熱間圧延プロセスにおいて、鋼中では加熱、繰返しの圧延、冷却の過程で、逆変態、析出物の固溶・析出、回復・再結晶、/ 変態などが起こり、表面では酸化物形成と離脱、脱炭などの現象が起こっている。鋼中の金属学的現象は、強度・伸びなどの材料の基本的な性質に大きな影響を及ぼし、表面の現象は、表面品質に大きな影響を与えるために、それらの現象をシミュレートし、制御することは、高品質かつ特性が安定した熱間圧延鋼材を提供するという点から不可欠な技術となっている。この技術は、1980年代後半から日本の鉄鋼メーカーを中心に盛んに研究されてきた¹⁾。これは、金属学の基礎理論とコンピュータの発達により、熱間圧延及びその後の冷却中の金属組織変化について、基礎理論を取入れたモデルを使っても短時間で計算ができるようになったためである。

熱間圧延プロセスで起こる金属学的現象のシミュレーションを行うためには、圧延中の温度、歪み、歪み速度なども必要となるが、この技術についても膨大な研究開発がなされ、コンピュータの進歩と相まって比較的短時間で必要な数値が得られるようになってきている。本特集号で、すでに解説がなされているためにここでは触れないこととした²⁾。

本稿では、これまでに開発されてきた熱間圧延鋼材の材質予測シミュレーション技術の中でも、鋼中の組織変化シミュレーションと脱炭シミュレーション技術について当社モデルの特徴を中心に解説する。

1. 鋼中の組織変化シミュレーション技術

1.1 概要

図1に熱間圧延中の組織変化シミュレーションの基本的な計算フローを示す。基本的には、圧延条件からオーステナイトの結晶粒径、残留歪みを計算するオーステナイト組織予測モデル、そのオーステナイトが圧延を終え

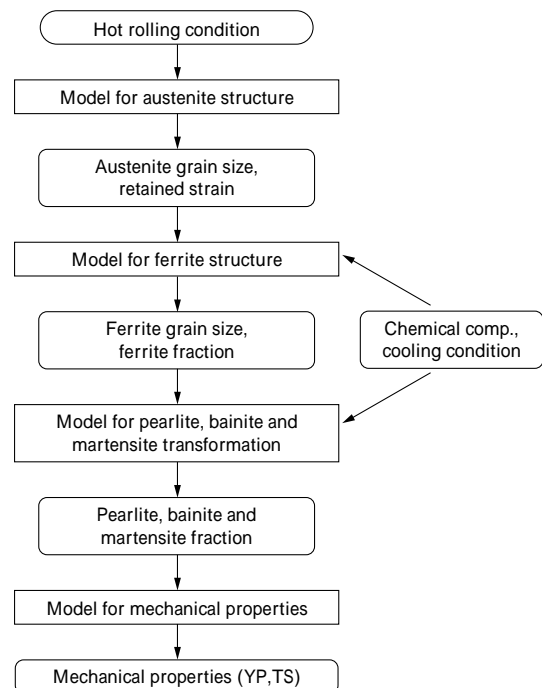


図1 熱間圧延工程での組織変化シミュレーションの概念図
Fig. 1 Schematic diagram of microstructural evolution simulation during hot rolling

て冷却される過程でオーステナイトからフェライト及び第2相(パーライト、ベイナイト、マルテンサイト)に変態する過程をシミュレーションする相変態モデル、さらにその後に機械的性質を予測するモデルが続いている。

当社のシミュレーションモデルの特徴は、熱間圧延中に起こる冶金現象に対して、基礎的な金属学的モデルを作りあげ、経験式をなるべく少なくしている点にある。次にそれぞれのモデルについて説明する。

1.2 オーステナイト回復・再結晶シミュレーション

本モデルにおいては、熱間圧延条件からオーステナイトの回復・再結晶及び粒成長のシミュレーションを行う。計算の基本となる式については、瀬沼らのモデル³⁾を一部修正して用いている。当社のモデルでは、さらに不均一性を考慮することでシミュレーションの予測精度を向上させている⁴⁾。

図2に多パス圧延におけるオーステナイト中の組織変化を模式的に示した。最初の加工後の回復・再結晶が不均一に進行する、あるいは完全に終了しないで次パスの加工が加わる場合がある。その場合は未再結晶粒が次パスでより高い転位密度となり、優先的に再結晶し、1パス目で再結晶していた部分は2パス目では再結晶せず、高い転位密度を持った加工組織となる可能性が高いと考えられる。

このような影響を考慮するために、100 ~ 1000の要素分割モデルを採用し、各要素のオーステナイト組織を変化させることでオーステナイトの不均一性を表現することとした。最終パスが終了した後に、オーステナイト粒径、転位密度から計算される残留歪みを平均化して、次のフェライト変態モデルに引継いでいる。

このモデルが開発される前には、圧延パスごとにオーステナイトの結晶粒径、残留歪みを平均化していたために、未再結晶粒が生じやすい条件では多パス圧延時のオーステナイト結晶粒径と残留歪みの予測精度が低いという問題があったが、本モデルを採用することでオーステナイト状態の予測精度を大幅に向上させることができた(図3)。

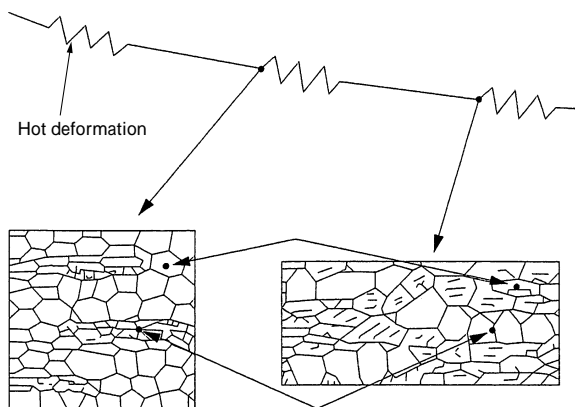


図2 多パス熱間圧延中のオーステナイト組織変化の模式図
Fig. 2 Schematic illustration showing microstructural change during multi-pass hot rolling

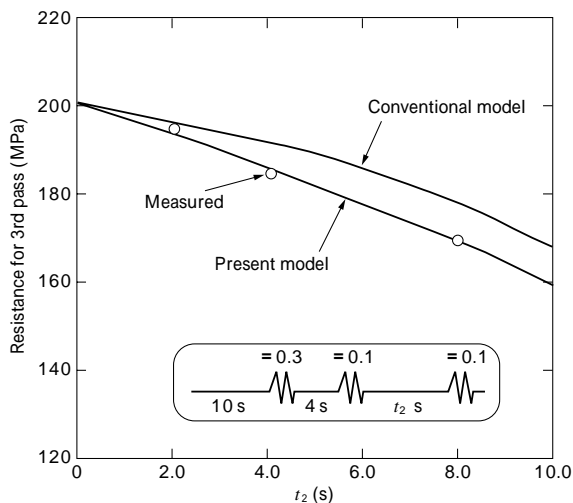


図3 3パス加工時の熱間変形抵抗に及ぼす保持時間の影響(本モデルと従来モデルの比較)
Fig. 3 Influence of inter-pass time between second and third pass of deformation on hot deformation resistance of third pass (Comparison between present model and conventional one)

1.3 相変態シミュレーション

熱間圧延鋼材ではフェライト、パーライト、ベイナイト、マルテンサイトの変態が起こるが、ここでは主たる構成相であるフェライトの相変態モデルについて説明する。基本的には他の相のモデルも同様である⁵⁾。

フェライト変態のシミュレーションには梅本らによって導き出された変態速度式を用いた⁵⁾。その数式は以下のように式(1)~(5)で表現される。

・フェライト変態率 X

$$\left. \begin{aligned} X &= \left\{ \frac{C - C_0}{C - C_0} \right\} [1 - \exp A] \\ A &= -2S \left(\frac{C - C_0}{C - C} \right) \sqrt{t \cdot B} \\ B &= \int_0^1 (1 - \exp\{-4.5 \cdot I \cdot t^2(1 - 2x^2 + x^4)\}) dx \end{aligned} \right\} \dots\dots(1)$$

・フェライト粒径 D

$$D = \frac{2x}{(3n \cdot S)^{1/3}} \dots\dots(2)$$

・単位粒界面積あたりのフェライト粒数 n

$$n = I \cdot \int_0^1 \exp\{-4.5 \cdot I \cdot t^2(1 - 2x^2 + x^4)\} dx \dots\dots(3)$$

・単位粒界面積あたりの核生成速度 I

$$I = k_1 \frac{D_C(1 - C)}{\sqrt{T}} \exp\left(-\frac{Q}{G^2 \cdot T}\right) \dots\dots(4)$$

・パラボリック成長速度定数

$$= k_2 \sqrt{\frac{D_C(C - C_0)^2}{(C_0 - C)(C - C)}} \dots\dots(5)$$

ここで、

- S : 単位体積あたりの 粒界面積
- C : フェライト/オーステナイト界面のオーステナイト側の炭素濃度
- C : フェライト/オーステナイト界面のフェライト側の炭素濃度
- C_0 : 母相の炭素濃度
- x : 最大フェライトで規格化した積分変数
- t : 変態時間
- n : 単位粒界面積あたりのフェライト粒数
- D_C : 炭素の拡散係数
- T : 絶対温度
- Q : 核生成の活性化エネルギー
- G : フェライト核生成の駆動力
- k_1, k_2 : 数値係数

である。

従来は、式(4),(5)中の数値係数の設定が困難で本シミュレーションモデルを用いた精度の良い変態シミュレーションモデルはなかった。当社では、粒径、残留歪み、組成などが明らかな材料にて、フェライトの等温変態実験を行い、フェライトの変態率と結晶粒径を式(1),(2)に代入し、収束計算から核生成速度 I 及びパラボリック成長速度定数を決定し、式(4),(5)中の数値係数を決定した。従来は、変態率を予測するときに用いた核生成速度では、結晶粒径が予測できないなどの問題点があったが、このモデルによって精度良く 変態がシミュレーションできるようになった。

また、この手法を使えば Nb などのマイクロアロイを

添加した場合の相変態挙動も比較的簡単にシミュレーションすることができるようになり、式(4)、(5)の炭素の拡散係数である D_c を式(6)のように Nb 濃度依存項を持たせた D_{CM} とすることで良い精度でシミュレーションできることがわかっている⁶⁾。

$$D_{CM} = D_c \cdot \exp(k_3 \cdot [\text{mass\%Nb}]) \dots\dots\dots(6)$$

図4には、等温変態時のフェライト変態率と結晶粒径の経時変化シミュレーションと実験を比較したものを、図5には連続冷却時について同様の比較をした例を示す。どちらも良い精度で予測できていることがわかる。

第2相モデルは、上述のフェライト変態モデルで求め

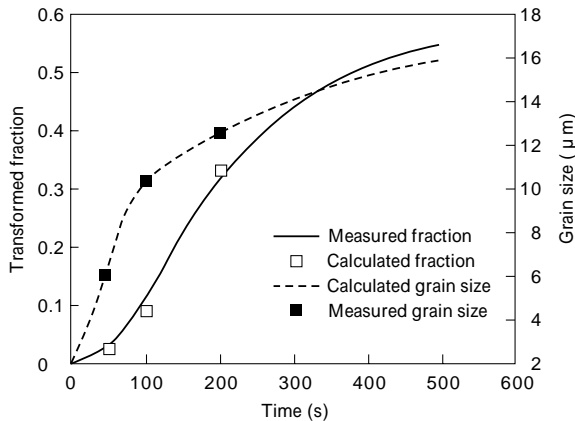


図4 等温変態でのフェライト分率及び粒径変化の実験値及び計算値の比較

Fig. 4 Comparison between experimental change of ferrite fraction and grain size and calculated ones during isothermal transformation

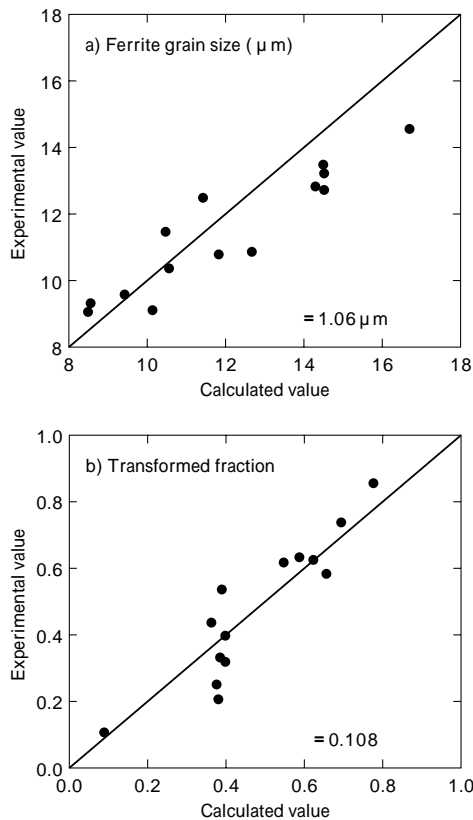


図5 連続冷却時のフェライト粒径、フェライト分率の実験値及び計算値の比較

Fig. 5 Comparison of simulated values and experimental values of ferrite grain size and transformed fraction in case of continuous cooling

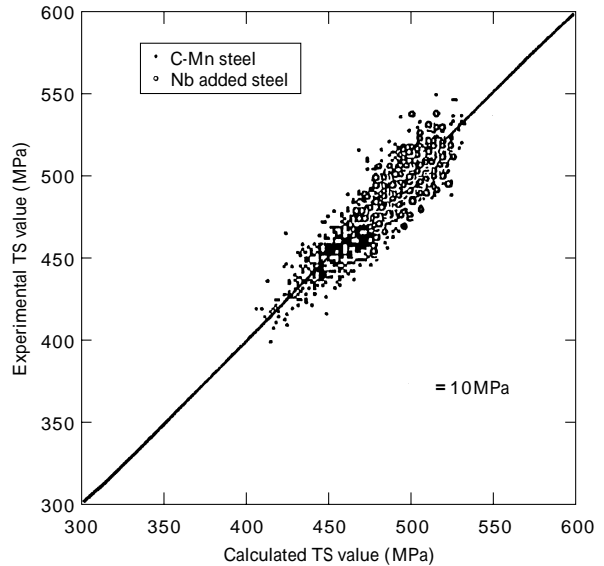


図6 C-Mn 及び Nb 添加鋼における引張強度の計算値と実験値の比較

Fig. 6 Comparison of calculated values and experimental values of tensile strength of C-Mn and Nb bearing steels

たフェライト変態終了後のオーステナイト分率とその組成をもとに圧延条件を考慮して、パーライト、ベイナイト分率とその平均変態温度を求めている。

これらのモデルによって得られた金属組織と引張強度を回帰して C-Mn 鋼及び Nb 添加鋼の熱間圧延材にて引張強度を予測した例を図6に示す。基礎実験によって得られた変態シミュレーションモデルで予測された金属組織から、実機圧延材の機械的性質が十分な精度で予測できている。

2. 表面脱炭シミュレーション技術

中・高炭素鋼の場合には、熱間圧延プロセスにて表面からの脱炭が顕著におこり表面品質の問題を起すことがある。脱炭が最も起こりにくい条件を見出すために精度良く脱炭現象をシミュレーションできる技術が必要となる。

まず、脱炭深さは、Smith の提案した式(7)を使って計算することにした⁸⁾。

$$X_d = \int \sqrt{\frac{6C_b \cdot D_c}{3C_1 - 2C_b}} dt^{-1/2} \dots\dots\dots(7)$$

ここで、

- X_d : 脱炭深さ
- C_b : その温度でのフェライトのC固溶限
- D_c : 炭素の拡散係数
- C_1 : 初期炭素濃度
- t : 時間

である。

熱間圧延中でも、経過時間で変化する温度での C_b , D_c , C_1 を使って微小時間ごとに数値積分していけば、トータルの脱炭深さがシミュレーションできることになる。また、 C_b 及び C_1 は組成によって変化するが、これは熱力学計算から各温度での平衡組成を与えることで計算できる。

このシミュレーションモデルによって、計算された脱

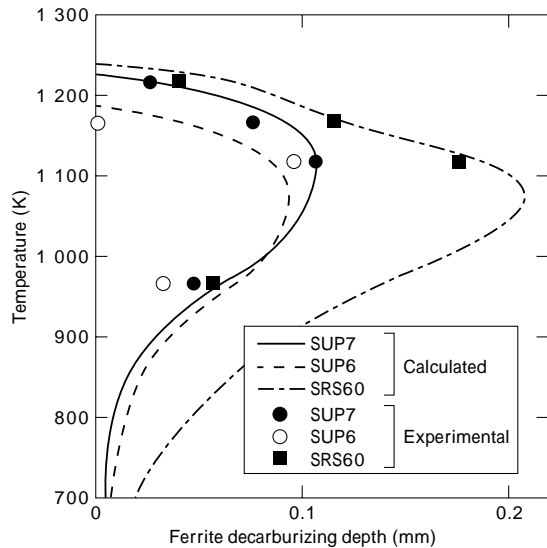


図7 100分の等温保持後の脱炭深さの計算値と実験値の比較
 Fig. 7 Comparison of simulated and experimental decarburizing depth after 100 minutes isothermal holding

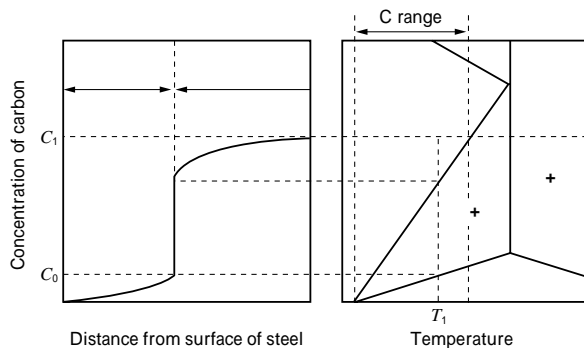


図8 断崖型のC濃度プロファイルを示す場合の脱炭挙動シミュレーションの模式図
 Fig. 8 Schematic figure of carbon profile simulation in case of sharp concentration gap taking place

炭深さの予測値と実験値の比較を図7に示す。実験値と計算値は良い一致を示している。また、このシミュレーションモデルから、フェライト中の炭素の固溶限が大きい温度が最も脱炭を進行させる条件であることもわかる。

このシミュレーションモデルの特徴は、中高炭素鋼材にしばしばみられる表面からの炭素濃度プロファイルが断崖型になる現象もシミュレーションすることが可能なことである(図8)。

3. シミュレーションの活用例と今後の課題

3.1 シミュレーションの活用例

これまでに開発されてきたシミュレーションモデルは、熱間圧延鋼材の成分設計、プロセス設計の基礎検討に使われている。特に、脱炭シミュレーションでは鋼材表面の脱炭を最小化するプロセス設計を机上検討することが可能である。

3.2 今後の課題

熱間圧延鋼材の組織変化については、基礎理論に立脚したシミュレーションが精度良くできるようになりつつあるが、金属組織から力学特性を精度良く予測するシミュレーション技術がなく、回帰式を使わざるを得ないのが現状である。しかしながら、この分野においてもコンピュータ活用の進歩はめざましく、金属組織中の微小な変形挙動を考慮したマクロな変形シミュレーションが可能となりつつある⁹⁾。これらのシミュレーション技術も取り入れ、成分・工程設計をより高精度かつ迅速に行えるようにするのが今後の課題である。

また、製品にとっては表面品質も重要であり、脱炭問題に限らず、より広い範囲の表面問題にも取り組む必要がある。

むすび = 熱間圧延鋼材の組織変化と脱炭現象に関して、当社が開発したシミュレーション技術をまとめて紹介した。これらシミュレーションにより、高品質な製品作りと製品開発の効率化をさらに押し進めていきたい。

参考文献

- 1) 例えば、日本鉄鋼協会、「鉄鋼材料の計算機支援による組織制御」 平衡論から速度論まで、(2000)
- 2) 前田恭志：R&D 神戸製鋼技報，Vol.51, No.3(2001)，p.9.
- 3) 瀬沼武秀ほか：鉄と鋼，Vol.70, No.8(1984)，p.2112.
- 4) G. Anan et al.：ISIJ int. Vol.32, No.4(1992)，p.261.
- 5) M. Umemoto et al.：ISIJ int. Vol.32, No.4 (1992)，p.306.
- 6) 難波茂信ほか：R&D神戸製鋼技報，Vol.47, No.1(1997)，P.8.
- 7) Nomura et al.：ISIJ int. Vol.40, No.9(2000)，p.619.
- 8) P. Smith：Trans. Metall. Soc. AIME, Vol.224(1962)，p.1052.
- 9) S. Kohlhoff et al.：Phil. Mag. A, Vol.64, No.6(1991)，p.851.