熱処理シミュレーションのための材料特性データベースの構築[†]

塑性工学部門委員会材料データベース研究分科会

Material Database for Simulation of Metallo-Thermo-Mechanical Field

by

Sub-committee on Material Database under the Committee on Engineering Plasticity

Key words : Material properties, Database, Heat treatment, Steel, High temperature, Phase transformation

1 緒 言

強度や耐磨耗性を要求される機械部品に対して、焼入れ・焼もどしは、もっとも一般的な強化手法として用いられる。しかし、焼入れには、残留ひずみの問題が常に内在しており、熱処理条件の変更や部材形状の変化にともなって、しばしばこの問題が顕在化する。このような場合、試行錯誤的に試作・実験を繰返すことによって、焼入れひずみを低減する条件の検討がなされている。その開発期間とコストを削減することへの期待から、熱処理シミュレーションに対するニーズが近年ますます高まってきた¹⁾。

鋼の焼入れおよび浸炭焼入れなどの熱処理過程に生じる温度、応力・ひずみおよび組織の変化は相互に影響しあう。このような連成効果を考慮した数値シミュレーションについて過去 20 年間に研究が積重ねられ、^{2)~7)} 理論的体系はほぼ完成された。また近年ではいくつかの商用コードが販売されるにいたっている。^{4)~13)} これらのシミュレーションツールは、低ひずみ化のための適正な部品形状、材料、焼入れプロセスなどを探求するために有効である。しかし、焼入れ過程のシミュレーションは決して簡単なものではない。その理由の一つに、シミュレーションには、膨大な材料データを必要とすることがあげられる。例えば、上述した連成効果を取込むために、応力-ひずみ関係は広い温度範囲において必要であるし、また金属の各相、組成ごとにと与えられなくてはならない。一つの材料のシミュレーションに必要なすべての材料定数を測定するために、膨大な費用がかかることも珍しいことではない。このような費用的な問題に加えて、材料データをシミュレーションコードのデータ形式に変換することも、熟練と技能を要する。

このような背景から日本材料学会塑性工学部門委員会においては 1995 年に材料データベース研究分科会を設置し、脚注に示す委員を中心にして熱処理シミュレーションのための材料データベースの構築を行ってきた。^{*1} 開発した材料データベースは、等温変態と連続冷却変態線図、熱伝導率、比熱、温度と伸びの関係、弾性および塑性領域における応力-ひずみ関係、弾性係数などを数値データとして含んでいる。データベースのプラットホー

ムは商用の表計算ソフトであり、そのマクロ言語を用いて、成分と鋼材名からのデータの検索機能を実現した。本論文では開発したデータベース“MATEQ”(= MATErial database for Quenching)の構造と登録データの種類、データの登録形式などについて報告する。

なお、本データベースは平成 14 年度初めには、一般に公開頒布の予定である。

2 材料データベースの概要

2.1 データベースの構造

データベースを構築する上での方針を以下の 4 点に絞った。

- (1) 一般的なソフトウェアの上で実行できること、あるいは低価格でデータベースのためのシステムが導入できること。
- (2) データの登録、管理が簡単に行えること。
- (3) 他のデータベースへのデータの移植が可能なこと。
- (4) 第 1 段階として、熱処理に用いられる金属材料を主な対象にすること。

これらの方針にしたがって、データベースは商用の表計算ソフト Microsoft(R) Excel を用いて構築し、パーソナルコンピュータ上で動作するシステムを開発することに決定した。

開発したデータベースは大きく二つの部分に分けられる。一つは、検索エンジンを搭載した主要部であり、もう一つは、材料データを測定した試験片の情報、例えば化学成分、形状、熱履歴などと測定データを数値データとして記録したデータファイル群である。主要部とデータファイルは別々のファイルとして管理され、Fig. 1 に

*1 材料データベース (MATEQ) の構築作業グループの委員は次の通りである (順不同)。

井上達雄 (主査、京都大学)、岡村一男 (幹事:住友金属工業(株))、P.Ding (日本 MSC)、有本享三 (株)ヤマナカボーキン、生田浩之 (日立造船(株))、生田文昭 (高周波熱錬(株))、石川宣仁 (古河電気工業(株))、上原拓也 (京都大学)、梅崎敦 (株)ユーイーエス・ソフトウェア・アジア、河原 充 (CAE コンサルタント)、巨 東英 (埼玉工業大学)、小嶋亜紀 (川崎重工(株))、七野勇人 (株)コマツ製作所、高町恭行 (新日本製鐵(株))、堤 一之 (株)神戸製鋼所、中崎一之 (滋賀職業能力開発促進センター)、福村 勝 (日本鋼管(株))、福本学 (住友金属工業(株))、鮎谷清司 (日本バーカライジング(株))、室谷慎一 (ヤマハ発動機(株))、両角克之 (日本イーエスアイ(株))、山崎義昭 (株)CRC 総合研究所)、山本憲司 (住友金属工業(株))

示すディレクトリおよびファイル構造を構成している。データベースのホームディレクトリの下に、等温変態 (IT) 線図と連続冷却変態 (CCT) 線図に関する IT-CCT、熱伝導率に関する CONDUCT、比熱に関する SHEAT、温度と伸びの関係に関する EXPAN、応力-ひずみ関係のための S-S、弾性定数に関する ELAST の各サブディレクトリがデータファイル格納のために設けられている。データファイルは材料定数別に各々の材料について作成されており、一つのデータファイルには一つの材料のデータが含まれる。規格が同じであっても化学成分が異なる場合には、データファイルは別々に作成されている。主要部ならびにデータファイルともに商用の表計算ソフトである Excel を用いて作成されている。

の検索画面の、計3種類の画面にアクセスすることができる。検索機能については後で詳しく述べる。これらの3種の画面はそれぞれ Excel のワークシートで構成されている。主要部には、ユーザーがアクセス可能なこれらの3種のシートの他に、6種の隠されたシートが含まれる。これらの6種のシートは、Fig. 1 に示した6種類の材料定数に対応するデータ管理用のシートである。それぞれのデータ管理用シートには、各サブディレクトリに含まれるデータの材料名、化学成分とこれを収めたデータファイル名の3つの情報が記述されている。新たに材料データを追加する場合には、この管理シートの中にこれらの3つの情報を追加し、データファイルに対応する材料定数のサブディレクトリに追加すればよい。

このデータベースでは、鋼材名を用いた検索と鋼材の化学成分を用いた検索との2種類の検索機能を備えており、それぞれが異なる検索画面で機能する。これらの検索機能はExcelのvisual basicを用いたプログラミングで実現した。したがって、本材料データベースを使用する上で必要になるアプリケーションソフトウェアはExcelのみである。検索画面の例をFig. 2およびFig. 3に示す。

Fig. 2 は SCM420 鋼のデータ検索の例を示している。ドロップダウンメニューを使うか、入力セルに直接書き込むことで検索する鋼材名を指定し、Name Search ボタンをクリックすると検索が実行される。変態線図と S-S カーブに関しては、2 つの異なる SCM420 材料から採取した試験片によるデータが、温度-伸び線図と弾性定数に関しては 1 種類の材料のデータが、登録されていることを Fig. 2 は示している。ドロップダウンメニューを使って、データファイル番号を選択することでデータファイルパスが表示される。Fig. 2 では、変態線図に関して 2 つあるデータファイルの内の 1 番目のデータファイル

Direct Input for Steel Name														
Name	SCM420													
Search	ID Number of data	174												
	SCM420													
Table of search results														
IT.CCT	Input Steel Name	Number of hit data		2		36		Hyper Link of Data file						
	SCM420	Data ID Number		1				itcct/SCM420-CC1.xls						
	ID Number of data													
T C	Input Steel Name	Number of hit data						Hyper Link of Data file						
	SCM420	Data ID Number												
	ID Number of data													
Thermal Conductivity														
S H	Input Steel Name	Number of hit data						Hyper Link of Data file						
	SCM420	Data ID Number												
	ID Number of data													
Specific Heat														
Therm. Ex.	Input Steel Name	Number of hit data		1		14		Hyper Link of Data file						
	SCM420	Data ID Number		1				expan/SCM420.xls						
	ID Number of data													
S-S Curve	Input Steel Name	Number of hit data		2		20		Hyper Link of Data file						
	SCM420	Data ID Number		2				s-s/SM-SCM420.xls						
	ID Number of data													
Stress-Strain Curve														

Fig. 2. Screen image for search of data file from name of steels.

Comp.Search		C	Si	Mn	P	S	Ni	Cr	Mo	Cu	V	Al	Nb	B	Ti	N	W	Co	Ratio of tolerance
mean value	0.2								0.25										0.1
tolerance	0.02	0	0	0	0	0	0	0	0.025	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

How to use this search engine

Table of search results		C	Si	Mn	P	S	Ni	Cr	Mo	Cu	V	Al	Nb	B	Ti	N	W	Co	
IT,CCT	Hits of componer	8	0	0	0	0	0	0	0	10	0	0	0	0	0	0	0	0	
	Hits of all comp.	2	36																
	Data ID Number	2	Hyper Link of Data file itcct\SCM420-CCT.xls																
Thermal Conductivity	Hits of componer	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	Hits of all comp.	0																	
	Data ID Number		Hyper Link of Data file																
Specific Heat	Hits of componer	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	Hits of all comp.	0																	
	Data ID Number		Hyper Link of Data file																
Thermal Expansion	Hits of componer	4	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	0	
	Hits of all comp.	1	14																
	Data ID Number	1	Hyper Link of Data file expan\SCM420.xls																
Stress-Strain Curve	Hits of componer	15	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0	0	0	0	0	
	Hits of all comp.	2	20																
	Data ID Number	1	Hyper Link of Data file s-s\SM-SCM420.xls																

Fig. 3. Screen image for search of data file from chemical compositions of steels.

が選択されており、そのデータファイル名が itcctSCM420-CCT.xls であることが示されている。このファイルのパス名は、ハイパーリンクによって実際のファイルと結び付けられており、ユーザーはファイル名をクリックすることでデータファイルを直ちに呼び出すことができる。変態線図から弾性定数までの全材料特性を同時に検索することも、各々の材料特性を個別に検索することも可能である。

Fig. 3 は成分検索画面の一部を示している。化学成分値とその誤差範囲を mass% 単位で入力することで、データファイルの検索を行う。鋼材名検索の場合と同様に、全材料特性データの同時検索と個別検索が可能である。ドロップダウンメニューとファイルパスのハイパーリンクを用いたデータファイルの呼出し機能も鋼材名検索と同様である。検索においてすべての化学成分を入力する必要はなく、入力しない化学成分は検索条件から除外される。この例では C と Mo を検索対象として指定している。検索結果は、たとえば、変態線図では、C が検索範囲 (0.18% から 0.22%) にあるデータが 8 ファイル、Mo が検索範囲 (0.225% から 0.275%) にあるデータが 10 ファイル存在し、このうち、C と Mo がともに検索範囲にあるデータが 2 ファイルあることを示している。この材料データベースには JIS の規格外の材料も含まれるため、このような材料のデータ検索には、成分検索が便利である。さらに成分検索機能によって、特定の成分に関してのみ値が異なる材料のデータファイルを抽出することが可能になる。たとえば炭素濃度について、検索値と誤差に大きな値を指定し、その他の成分について規格値と小さな誤差範囲を指定することによって、炭素濃度のみが異なるデータファイルを抽出することができる。この機能は浸炭焼入れシミュレーションにおいて、材料特性の炭素濃度依存性を調べる場合に非常に有効である。

3 登録した材料特性データ

3.1 データの記述形態

すべての材料特性データはデータファイル中に、数値データとして記録した。データファイルは、複数のワークシートを含む Excel のブックの形式をしており、この中には、試験片の情報を記述した試験片情報シートと、材料特性データを記録した複数のデータシートが収められている。データは、測定結果や参照した文献などの元データが数値の場合にはその値を、元データがグラフである場合には、デジタイザーで読み取って数値化した値を登録してある。なお、これらのデータは、この作業に協力した機関が採取した実験結果、データ集、論文などから引用したものなどがあるが、それらの出典は試験片情報シートに明示してある。

データシートの例として、SCM420 鋼の応力-ひずみ関係のデータシートの一部を Fig. 4 に、S45C 鋼の連続

Fig. 4. Data sheet of stress-strain curve of SCM420 steel.

冷却変態 (CCT) 線図の例を Fig. 5 にそれぞれ示す。すべてのデータシートは、数値データに加えて Excel の機能を使用して作成したグラフを含んでいる。応力-ひずみ関係に関しては Fig. 4 からわかるように、数パーセントまでのひずみ範囲について応力とひずみの値を保存している。CCT 線図においては、変態開始、終了線とそれぞれにおける変態相の体積率、最終的な硬さ等が記録されている。

本データベースでは、元データをできるだけ忠実に記録することにし、データの修正や補正は行わないことにした。このため Fig. 4 に示した例のように、応力-ひずみ関係は、試験機の剛性に依存する上降伏点を表示しているものや、上降伏点と下降伏点の間で不安定な挙動を示すため、そのままではシミュレーションに使用できないという場合もある。したがってシミュレーションにあたっては何らかのデータの修正が必要になる場合がある。

データが電子的に数値で記録されていることの一つの利点は、データの数値演算処理が簡単に行えることである。たとえば、相変態速度のモデル化において、等温変態や連続冷却変態の開始および終了時刻を、温度や冷却速度の関数として近似することが多い。このような場合

Fig. 5. CCT diagram in the data sheet of phase transformation data of S45C steel.

の近似曲線は、表計算ソフトウェアの機能を用いて簡単に得ることができる。さらに、異なる材料間でのデータの比較や数値演算処理、グラフの合成なども可能である。SCM420 鋼とその炭素濃度を変化させた鋼材の CCT 線図を重ね合わせて表示した例を Fig. 6 に示す。浸炭焼入れシミュレーションにおいては、相変態の開始、終了線に及ぼす炭素濃度の影響をモデル化する必要があるが、数値化されたデータはこのようなモデルの作成にも大いに役立つものと考えられる。

3・2 登録データの種類とデータ量

本データベースに含まれるデータ数を Table I に示す。ここで、データシリーズと名付けた単位でデータ数を計上した。CCT 線図や IT 線図のような変態線図では、1枚の線図に含まれるすべての情報を 1 データシリーズと定義した。比熱や熱伝導率、弾性率温度-伸び線図などは、これらの材料定数と温度との関係を表す 1 曲線を 1 データシリーズとし、応力-ひずみ関係については、応力-ひずみ線図 1 本を 1 データシリーズと定義した。Table I において、Other Steel の分類に含まれる鋼種

Fig. 6. CCT diagram of SMC420 steel containing different carbon content.

Table I. Classification of data series included in the data base.

(In notation A/B, A describes number of data series, B describes number of steel grades)

Grouping of steel	Steel for Machine Structural Use	Tool Steel, Spring Steel, & Bearing Steel	Stainless Steel & Heat Resisting Steel	Other Steel	Total
Symbol of Steel Grade in JIS	SXXC, SMn, SCr, SCM, SNC, SNCM	SK, SKH, SKD, SKS, SKT, SUP, SUJ,	SUS, SUH		
CCT	39/26	22/13	0/0	23/19	84/58
TTT	36/27	22/15	4/4	6/4	68/50
Heat Conductivity	14/10	6/6	23/17	55/51	98/84
Specific Heat	11/11	1/1	15/12	35/33	62/57
Thermal Expansion	23/14	0/0	12/11	46/44	81/69
S-S Curve	359/20	33/3	150/4	492/32	1034/59
Elastic Modulus	19/16	4/4	8/8	15/13	46/41

は、JIS の規格外の炭素鋼や低および高合金鋼、鋳鋼やアルミニウム合金などである。なお、表中にはそれぞれの材料特性についてのデータシリーズ数とその材料特性が登録されている鋼種の数を示してある。

データ数は機械構造用炭素鋼ならびに合金鋼が最も多く、次いでその他に分類した鋼、合金に関するものが多い。また、材料特性別では応力-ひずみ関係が最も豊富であり、全 59 鋼種について 1000 本以上の応力-ひずみ曲線が含まれている。1 鋼種あたり平均で 17 本の応力-ひずみ曲線を含むことになるが、これは試験温度やひずみ速度毎のデータを含むためである。データベースに含まれる鋼種の数、弾性定数を除く材料特性において 50-80 種類である。

Table II には、一般に広く用いられている材料に関して、この材料データベースにおける材料特性の登録の有無を示した。●印は本データベース中にデータが登録されていることを、○印はその材料のデータは含まれていないが、代替が可能と考えられる材料のデータが存在することを示している。残念ながら、現在のところ、すべての材料について、熱処理シミュレーションに必要な材料特性が完備されているわけではない。炭素鋼に関しては、いくつかの材料特性においてデータが欠落しているものの、他の材料のデータで欠落部分を補うことが可能であるが、低合金鋼については、とくに熱物性材料定数

ならびに弾性定数は不足している材料が多く、今後のデータの補充が望まれる。一方、オーステナイト系ステンレス鋼に関しては、鋼種は限られるものの、機械的材料特性、熱物性材料特性ともに完備されているものが多い。

4 結 言

熱処理プロセスにおける金属組織-温度-応力場のシミュレーションのために必要な材料特性データを集積したデータベースを塑性工学部門委員会の分科会活動を通して新たに構築し、本稿ではそのデータベースの構造と機能、含まれるデータの種類の、数量について紹介した。このデータベースは安価に構築、導入できることを条件としたので、パーソナルコンピュータ上で稼動する商用の表計算ソフトウェアを用いて構築した。したがって、データベースとしての機能は豊富ではないものの、データの検索と呼出し、データの追加削除などが容易であることなど、データベースに必要な最低限の機能は備えている。

構築した材料データベースには、応力-ひずみ曲線で 1000 本以上、他の材料特性で 50-100 のデータシリーズが含まれている。しかしながら、各々の材料についてシミュレーションに必要なすべての材料特性を網羅しているわけではないので、このデータベースを利用しても、これらの不足データの補充が必要である。さらに将来的には、変態塑性に関するデータの蓄積が今後の課

Table II. Data consistency in the data base.

(The mark ● denotes the data exist in the database, and ○ is the data substitutable by other existing data)

JIS Steel Grade		TTT	CCT	Thermal Conductivity	Specific Heat	Thermal Expansion	Stress-Strain curve	Elastic Modulus
	S10C	●		●	●	●	○	●
	S15C		●	○	●	○	●	●
	S25C		○	○	●	●	●	○
	S38C	●	●	○	●	○	○	○
	S45C	●	●	●	○	○	●	●
	S50C	●		○	●	○	●	●
	S58C	●		○	○	●	○	●
	SCM415			●	●	●	●	●
	SCM420	●	●	●	●	●	●	●
	SCM430	●	●	●	●	●	●	●
	SCM440	●	●	●	●	●	●	●
	SCr415	●	●				●	
	SCr420					●	●	
	SCr430	●	●	●	●	●	●	
	SCr440	●	●			●	●	
	SCr460					●	●	
	SCr480					●	●	
	SMn438	●	●					
	SNC815	●	●				●	●
	SNCM420	●		●	●	●	●	●
	SK3	●	●	●	○			●
	SKD6	●	●	●	●		●	
	SKD61		●				●	
	SUS304			●	●	●	●	●
	SUS316			●	●	●	●	●
	SUS321			●	●	●	●	●
	SUS347			●	●	●		●
	SUS430			●			●	

題として残されている。

冒頭にも述べたように、近年、熱処理シミュレーション用の商用コードが普及しつつある。しかし、いかに優れたシミュレーションコードを用いても、その結果は用いる材料特性と境界条件に依存することは明白である。本分科会で開発した材料データベースは改良すべき点をいくつか抱えているものの、熱処理シミュレーションのための材料データベースとして、従来払われてきた労力を軽減できるものと信じている。

参 考 文 献

- 1) W. Dawling, T. Pattok, B. L. Ferguson, D. Shick, Y. Helen Gu and M. Howes, Proc. 2nd Int. Conf. on Quenching and Control of Distortion, 349 (1996).
- 2) T. Inoue and B. Raniecki, J. Mech. Phys. Solids, **26**, 187 (1978).
- 3) T. Inoue, S. Nagaki, T. Kishino and M. Monkawa, Ingenieur-Archiv., **50**, 315 (1981).
- 4) T. Inoue, K. Arimoto and D.Y. Ju, Proc. 1st Int. Conf. on Quenching and Control of Distortion, 205 (1992).
- 5) K. Okamura and H. Kawashima, Proc. 32nd Japan Cong. Materials Research, 323 (1989).
- 6) F. Ikuta, K. Arimoto and T. Inoue, Proc. 2nd Int. Conf. on Quenching and Control of Distortion, 259 (1996).
- 7) 山中 茂, 坂之上隆行, 吉井聡一, 井上達雄, 材料, **48**, 733 (1999).
- 8) T. Inoue, K. Arimoto and D. Y. Ju, "Residual Stress III : Science and Technology I", p.226 (1992) Elsevier.
- 9) K. Okamura and H. Kawashima, "Residual Stress III : Science and Technology I", p.214 (1992) Elsevier.
- 10) 七野勇人, 長坂悦敬, 高橋知之, KOMATSU TECHNICAL REPORT, **39**, 46 (1993).
- 11) K. Arimoto, G. Li, A. Arvind and W. T. Wu, Proc. 18th Heat Treating Conf., 23 (1998).
- 12) Th. Georges, Ch. Hackmair, H. M. Mayer, A. Pyzalla and H. Porzner, PUCA'99, 291 (1999).
- 13) B. L. Ferguson, A. Freborg and G. J. Petrus, Advanced Materials & Process, **158**, H31 (2000).