



Computer Modeling of Materials Properties & Behavior

Version 4.1 概要

株式会社ユーイーエス・ソフトウェア・アジア

〒251-0057 神奈川県藤沢市城南 5-5-3
電話: 0466(34)0562 Website: <http://www.usi-asia.com/> E-mail: jmatpro@usi-asia.com

1. JMatPro

JMatPro は、英国 Sente Software 社により開発された、金属合金の物理的、熱力学的物性値および機械的物性値をその化学成分より計算するソフトウェアで、金属部品の製造を担当しているエンジニア(応力解析、鋳造、鍛造、焼入れ)が活用し易い様配慮されています。

計算手法は、多元系合金の平衡状態図については、十分に確立された CALPHAD 法を用いており、凝固計算については、Scheil-Guliver モデルを適用しており、その精度は実験結果に極めて近い結果を出しております。さらに、各相に対して理論式、経験式、実験データから物性値を計算し、求められた相分率を元に混合則を用い全体の物性値を求めています。



2. 対応合金及び成分

アルミ合金	Ca, Cr, Cu, Fe, La, Mg, Mn, Ni, Sc, Si, Sr, Ti, V, Zn, Zr, B, C, H, Co, Sn, Pb
マグネシウム合金	Al, Cu, Fe, Mn, Si, Ca, Ce, La, Nd, Zn, Zr, Y
鋳鉄	Al, Ni, Ti, Mo, Cr, Cu, Mg, Mn, Nb, Si, Ta, V, C, N, P, S
鋼合金(高速度鋼、低合金高張力鋼)	Al, Cr, Cu, Co, Mn, Mo, Nb, Ni, O, Si, Ta, Ti, V, W, B, C, N, P, S
ステンレス鋼	Al, Co, Cr, Cu, Mn, Mo, Nb, Ni, O, Si, Ti, V, W, C, N, P, S
Ni基超耐熱合金	Al, Co, Cr, Cu, Fe, Hf, Mn, Mo, Nb, O, Re, Ru, Si, Ta, Ti, W, Zr, B, C, N
NiFe基超耐熱合金	Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mn, Mo, Nb, Si, Ta, Ti, W, B, C, N
Ni単結晶	Al, Co, Cr, Hf, Mo, Nb, Re, Ru, Si, Ta, Ti, W, B, C
チタン合金	Al, Cr, Cu, Fe, H, Mo, Nb, Ni, Re, Ru, Si, Sn, Ta, V, Zr, C, O, N, B
ハンダ	Sn, Ag, Al, Au, Bi, Cu, In, Ni, Pb, Sb, Zn
ジルコニウム合金	Zr, Cr, Fe, Hf, Nb, Ni, Si, Sn, C, H, N

3. JMatPro の計算方法

JmatPro は、熱力学平衡計算を元に各種物性値を計算しています。熱力学的データから平衡状態図を計算する手法は、CALPHAD (Computer Calculation of Phase Diagram) 法を用いており、その始まりは、米国 L.Kaufman の提唱によって 1973 年に結成された研究グループからです。

3.1 CALPHAD 法による平衡状態図の計算

平衡状態は、各相の Gibbs の自由エネルギー G が最小になるような混合状態を計算することにより求められます。正則溶体近似では、多元系の Gibbs エネルギーは、下記のように表されます。

$$G_m = \sum_i x_i G_i^0 + RT \sum_i x_i \log_e x_i + \sum_i \sum_{j>i} x_i x_j \sum_v \Omega_v (x_i - x_j)^v$$

ここで、1 項目は、純成分の Gibbs エネルギーであり、2 項目は純正分のエントロピー、3 項目は二元系の相互作用パラメータです。この式から、多元系の Gibbs の自由エネルギーを計算するのに考慮するパラメータは、純成分の Gibbs エネルギーと二元系の相互作用パラメータが判れば計算できることになります。

熱力学データベースには、温度依存の Gibbs エネルギーと元素間の相互作用項(過剰 Gibbs エネルギー)が記述され、正則溶体近似等により実合金の Gibbs エネルギーを求めます。

3.2 Scheil-Guliver モデルによる凝固計算

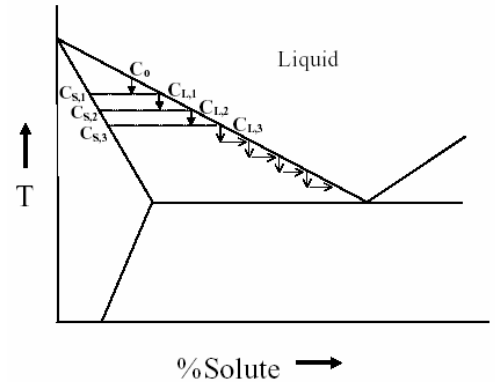
凝固計算は、Scheil-Guliver モデルを用いることにより求められ、複雑な凝固過程、凝固中の金属間化合物の相変化も高い精度で予測できます。Scheil の式は下記で表せます。

$$f_s = 1 - \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_L} \right)^{\left[\frac{1}{k-1} \right]}$$

ここで、
 f_s : 凝固率、 T_L : 平衡状態の液相線温度、 T_f : 平衡状態の固相線温度
 k : 平衡にある 2 相の溶質元素の濃度比(平衡分配係数)

Scheilの式は、多元系の合金で平衡分配係数(k)が、温度、成分構成に依存しているなら、数学的な手法では解くことが出来ません。また、Scheilの式はデンドライト凝固についてのみ適切であり、アルミ合金、マグネ合金のような共晶合金には適用できません。しかしながら、熱力学的モデリング手法であるScheil-Guliverモデルを使うことにより、これらの問題を解決することが出来ます。

Scheil-Guliverモデルによる凝固の物理的に起こる過程は、次のように考えることができます。組成 C_0 の液相が、その液相線温度よりわずかに低い T_1 まで冷却される。その液相から、組成 C_{S1} の固相が晶出し、液相の組成は C_{L1} に変化する。しかしさらに低温の T_2 まで冷やされても、最初に晶出した固相は、逆拡散がほとんど起こらないため、その組成を変化させることができず、実質的に隔離されます。そこで局所的平衡が達成され、組成 C_{L1} の液相は組成 C_{L2} の液相に変化し、組成 C_{S2} の固相が元の固相(組成 C_{S1})の上に晶出する。この過程は、冷却中に連続的に起こり、 k (平衡分配係数) <1 の場合、デンドライトの中心部において溶質原子濃度が低くなり、液相中の溶質濃度は、凝固の進行とともにますます高くなる。そしてついには、液相の組成は共晶組成となり、最終的にこの共晶反応により凝固する。第二相中での逆拡散が起こらないと仮定すると、第二相のどのような出現も容易に考慮できます。そのため最終の共晶凝固を含むすべての相変態が説明できます。



Scheil-Guliver モデルの限界は逆拡散の考慮ですが、それが少なければ無視することが出来ます。実際に、800 以上の合金につき凝固率の実験と計算結果に付き比較し、良い結果を得ています。また、Scheil-Guliver モデルの弱点である鋼の C と N の急速な拡散については、Scheil-Guliver モデルを拡張したモデルを開発し、組み込んであります。

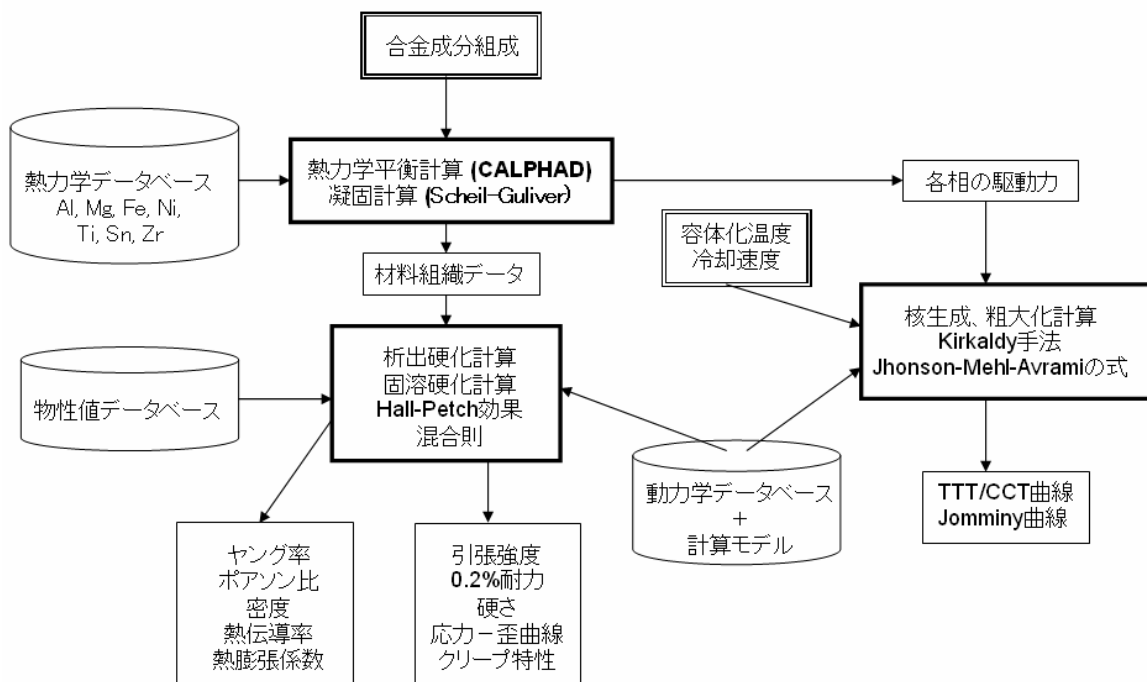
3.3 JMatPro の物性値計算方法

物性値の計算は、各相に対し各種理論式、経験式、実験データを元に、再現性の高いモデルを構築し算出し、熱力学的平衡計算より求められた温度依存の相分率より混合則を用いて各種物性値を計算する。混合則の式を下記に示す。

$$P = \sum_i x_i P_i^0 + \sum_i \sum_{j>i} x_i x_j \sum_v \Omega_v (x_i - x_j)^v$$

ここで、 P_i^0 は各相の純成分の物性値であり、 $\sum_v \Omega_v$ は各相間の相互作用パラメータ、 x_i, x_j は要素iとjのモル率

下記に計算手順の概略図を示す。

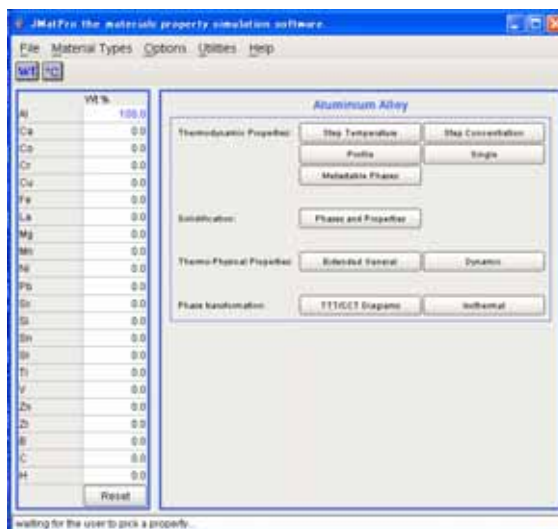


参考文献 :

1. MODELLING OF THE THERMO-PHYSICAL AND PHYSICAL PROPERTIES FOR SOLIDIFICATION OF AL-ALLOYS
N.Saunders(Thermotech), X.Li(Sente Software), A.P.Miodownik(Thermotech) and J.-P.Schillé(Sente Software)
2. The Application of Calculated Phase Equilibria to Multi-Component Aluminum Alloys
N.Saunders(Thermotech), 和訳:伊藤吾郎(茨城大学工学部機械工学科)
3. THERMO-PHYSICAL AND PHYSICAL PROPERTIES FOR USE IN SOLIDIFICATION MODELLING OF MULTI-COMPONENT ALLOYS
N.Saunders(Thermotech), Z. Guo(Sente Software), A.P.Miodownik(Thermotech) and J.-P.Schillé(Sente Software)

4. 入力画面

JMatPro の入力は非常に簡単です。下図の様に計算したい合金データベースを選択、合金組成を入力し、計算メニューを選択するだけです。



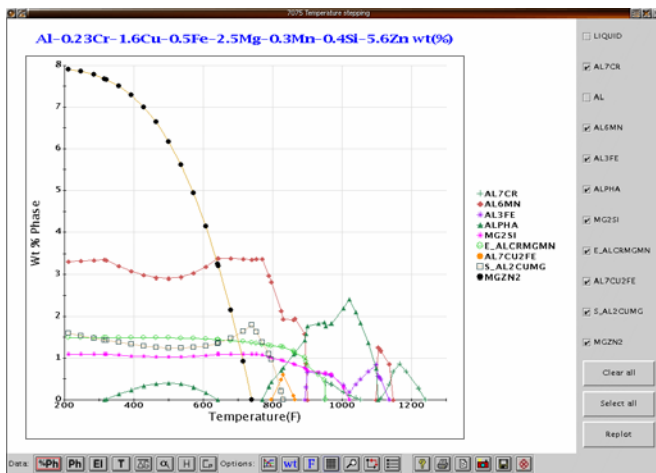
5. JMatPro の計算内容

5.1 安定 / 準安定平衡状態図の計算 (Stable and metastable phase equilibria calculation)

安定 / 準安定平衡状態図の計算は、JMatPro の核になる計算で EQLib と呼ばれるソルバーで計算されます。この計算はすべての合金に対応しています。

Step temperature and Step Concentration

指定した温度範囲 (Step temperature)、あるいは指定した温度 (Step Concentration) での計算安定 / 準安定平衡状態図を計算します。



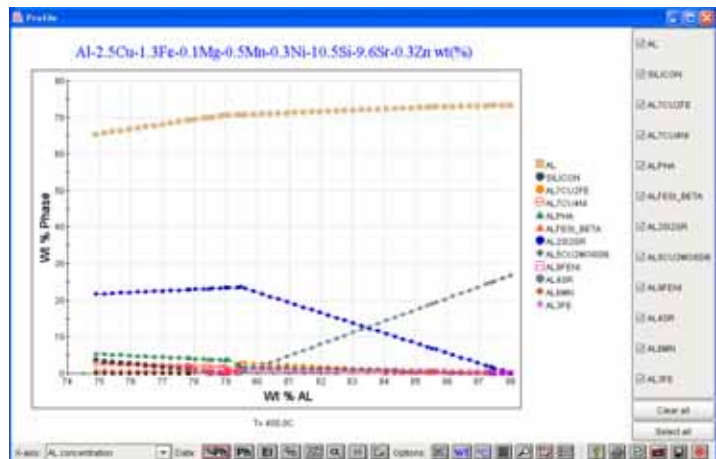
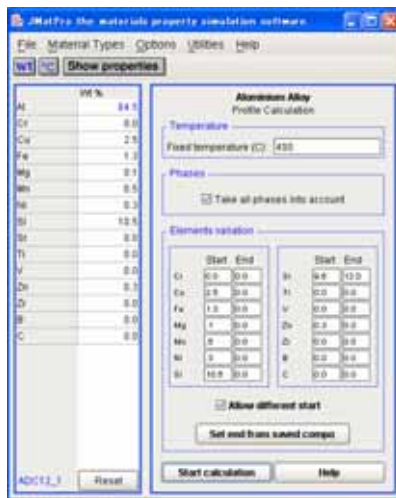
Temperature stepping: example of Al alloy 7075



Concentration stepping: example of Al alloy 339-1

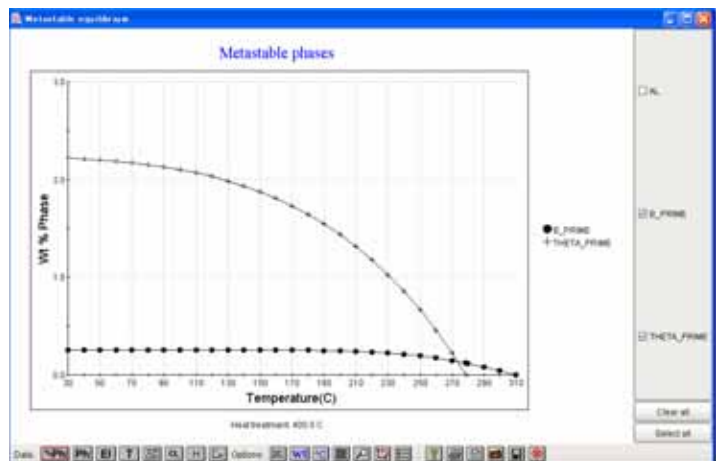
Profiling/Coating

指定した温度で、化学成分の範囲を指定し、安定 / 準安定平衡状態図を計算します。



準安定相 (Metastable phases)

Al に関し、準安定相 (Metastable phases) の計算を行います。



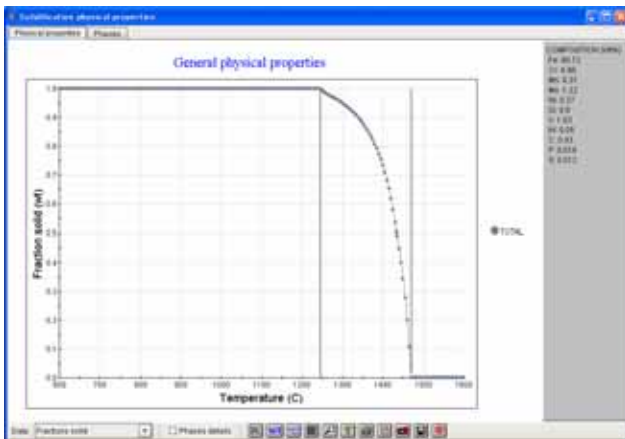
3.2 凝固過程計算 (Solidification Calculations)

JMatProのScheil-Gulliverモデルによる熱力学ソルバーにより、複雑な凝固過程や凝固中の金属間化合物間の相変化も高い精度で計算されます。鋼については、早期のCおよびN拡散が考慮され、修正されます。

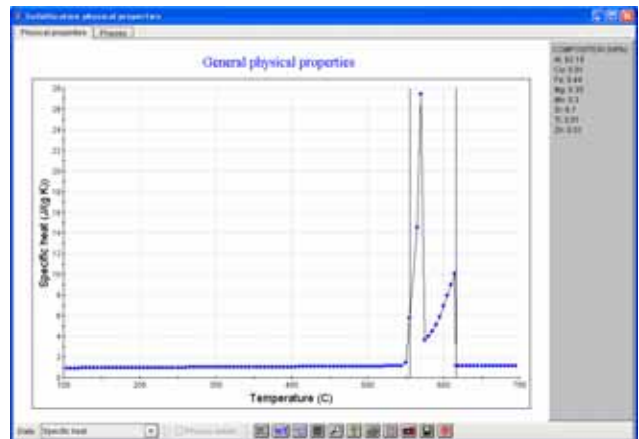
Scheil-Gulliverにより、形成された固体相について、固相率、エンタルピー、比熱、潜熱が計算されます。さらに物理特性計算モジュールにリンクされ、密度、熱膨張係数、体積変化、熱伝導率、電気伝導率、電気抵抗、液体の粘性、液体の拡散係数、ヤング係数、ポアソン比、体積弾性係数、せん断係数が計算されます。この計算は、すべての合金で可能です。ヤング係数、せん断係数に関しては歪速度による係数の緩和も考慮できます。

Fraction solid	固相率	Young's modulus	ヤング係数 (歪速度考慮)
Fraction liquid	液相率	Bulk modulus	体積弾性係数
Density	密度	Shear modulus	せん断係数 (歪速度考慮)
Molar volume	モラー体積率	Poisson's ratio	ポアソン比
Volume change	体積変化率	Liquid viscosity	液体の粘性
Thermal expansion coeff	熱膨張係数	Liquid diffusivity	液体の拡散係数
Thermal conductivity	熱伝導率	Enthalpy	エンタルピー
Electrical resistivity	電気抵抗	Specific heat	比熱
Electrical conductivity	電気伝導率	Latent heat	潜熱

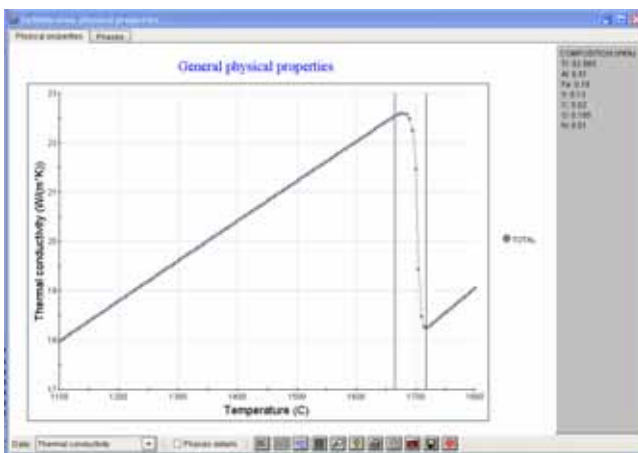
熱力学的、物理学的物性値一覧



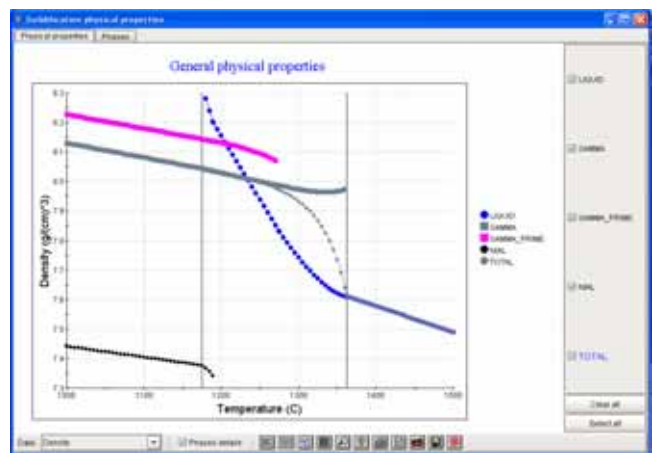
Fraction solid vs. temp. – Steel SKD61



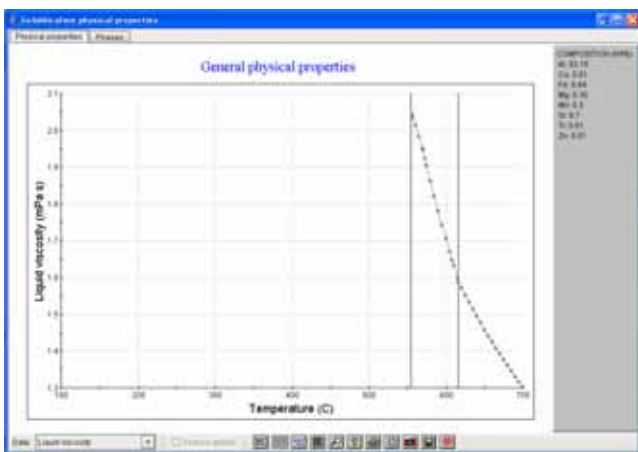
Specific heat vs. temp. – Al AC4C



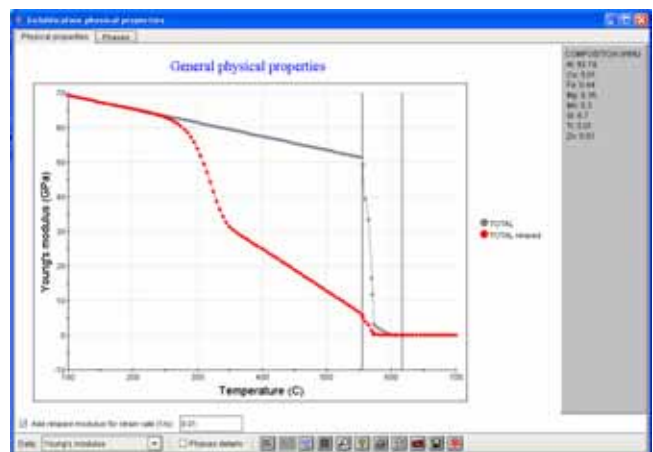
Thermal conductivity vs. temp. - Ti alloy



Density vs. temp. - Ni super alloy single crystal AM1



Liquid Viscosity vs. temp – Al AC4C



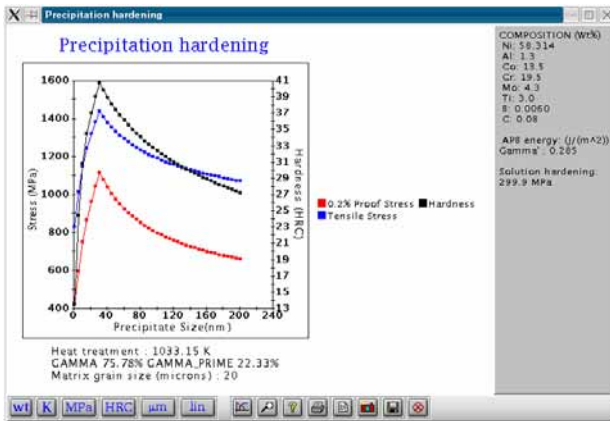
Young's Modulus vs. temp – Al AC4C

ここで、Densityの例では、凝固過程の詳細が示されています。凝固は、主として非常に少量のガンマを備えたガンマ過程にあり、液体密度の構成要素毎の変化がはっきり見られます。また、Young's Modulusの例は、歪速度 (1/100) による緩和も同時に表示されています。

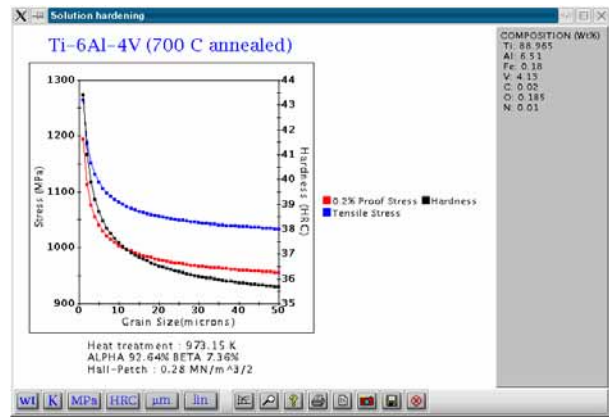
3.3 機械的物性値の計算 (Mechanical Properties)

JMatPro では、下記の機械的物性値を計算できますが、現状、General Steel、ステンレス鋼、Ni基超耐熱合金、NiFe基超耐熱合金、チタン合金のみです。計算は、歪速度を固定して温度依存あるいは温度を固定して歪速度依存が選択できます。

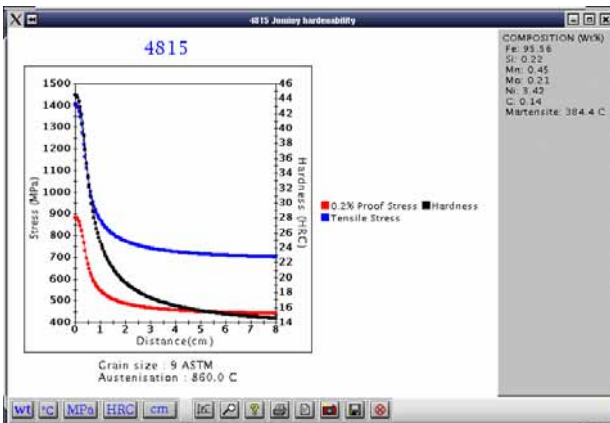
- ・ 0.2 耐力、引っ張り応力、硬度及びこれらの 2 つの物性値より残りのものを計算するユーティリティ
- ・ 応力 - ひずみ曲線
- ・ Ni 合金に対するクリープ



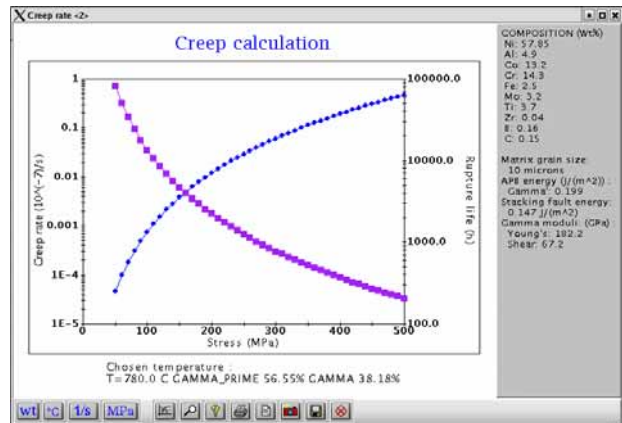
Precipitation hardening – Wasp alloy



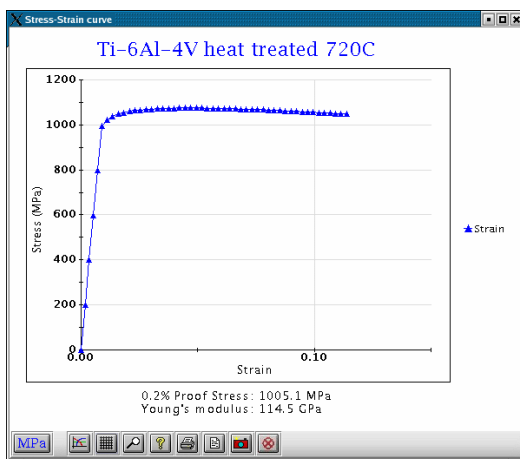
Solution hardening - Ti alloy



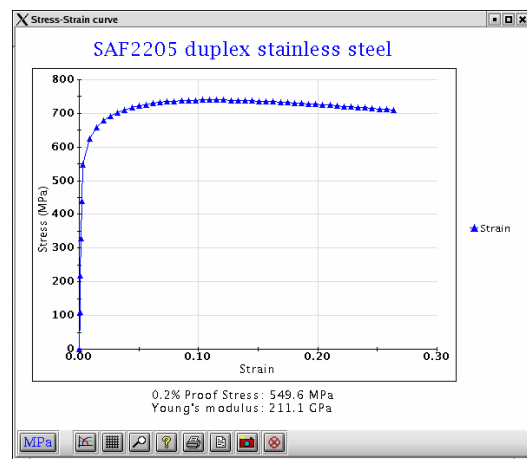
Jominy hardenability - HSLA steel



Creep - Ni based superalloy



Stress-strain curve - Ti alloy



Stress-strain curve - duplex stainless steel

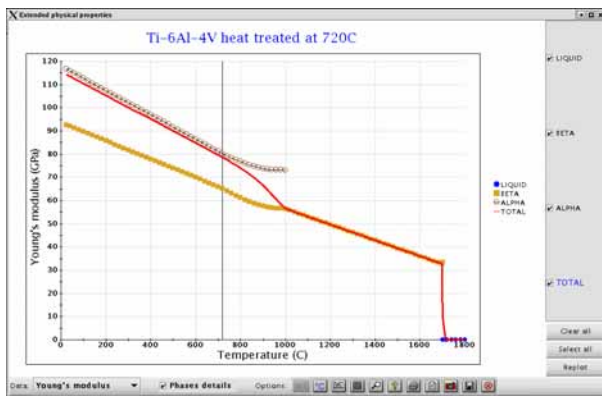
- 注) ・ ジョミニー硬度は、二相合金に対しても計算できます。
 ・ Ni 合金の Gamma'または Gamma''強度は、両方とも計算できます。

3.4 焼入れ合金に対する物理的、熱力学的物性値の計算 (Physical and thermo-physical properties of a heat-treated alloy)

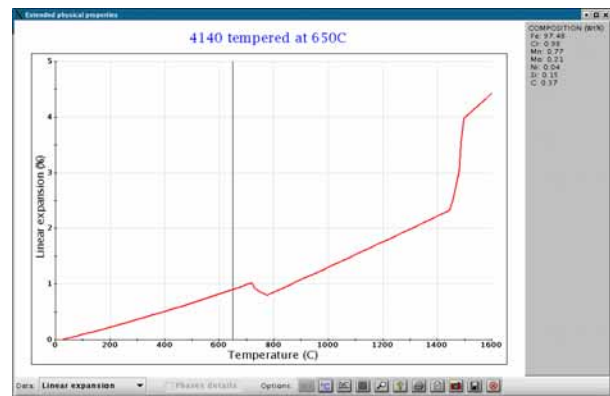
物理的物性値、液体の過程を含む全体の温度範囲に関して計算することができます。計算は、(1)固体の状態を熱処理を指定するまたは、(2)凝固の過程をも考慮することが出来ます。これは、流体解析で使用される液相での密度、熱疲労を計算するための膨張係数の差、Ni合金の組成を決定するgamma/gamma' mismatchをも計算可能なことを意味します。

凝固過程計算(Solidification Calculations)と異なるのは、熱処理温度を入力し、その温度以下については、相の割合が固定されているとみなされて計算されます。

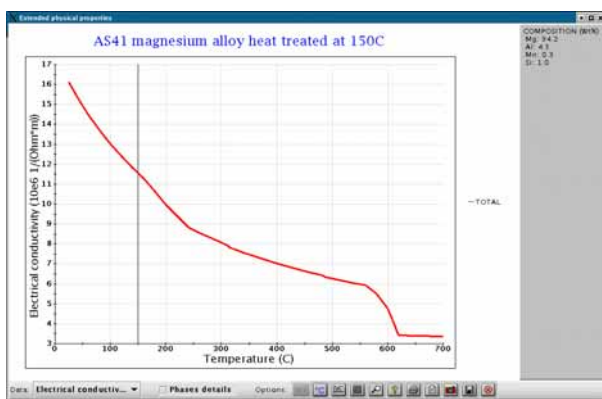
潜熱、比熱、エンタルピー、密度、熱膨張係数(線形の拡張)、体積変化、熱伝導率、電気伝導率、電気抵抗、液体の粘性/拡散係数、ポアソン比、ヤング係数、体積弾性係数、せん断係数。



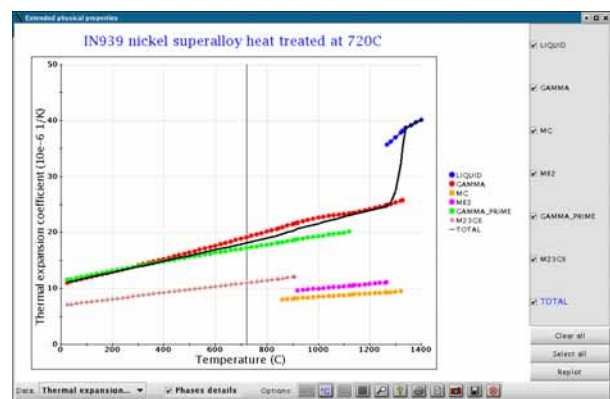
Young's modulus - Ti alloy



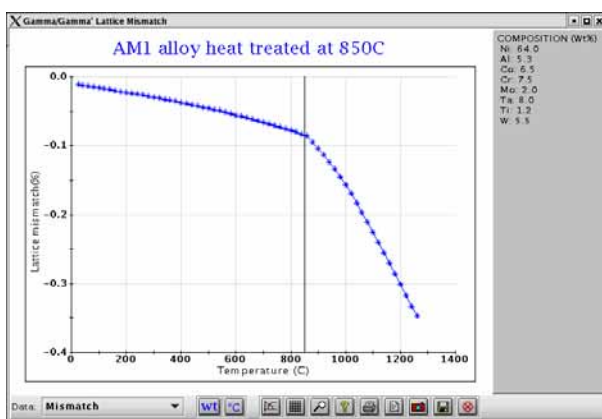
Linear expansion - HSLA steel



Electrical conductivity - Mg alloy



Thermal expansion - Ni-based superalloy



Gamma/gamma' mismatch - Ni-based superalloy

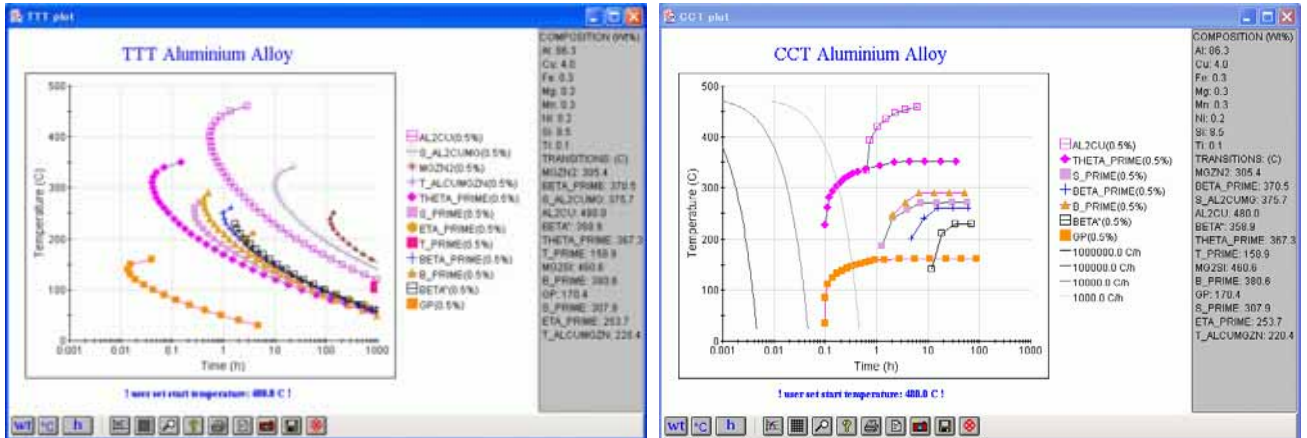
左の例は、Ni AM1単結晶合金のgamma/gamma' mismatchの例で、2つの状態が示されています。温度が850C以下では、gamma/gamma'構造が凍結され (frozen in)、変化することができません。そのときのミスマッチは、室温におけるミスフィット量とその二相の熱膨張係数に管理されます。

温度が850C以上になると、gammaとgamma'の量および構成は、凍結が解除され平衡値が変わるため、計算が出来るようになります。そして、高温までの拡張された格子不適合変化率 (an enhanced rate of change of lattice misfit) が計算できます。高温域での変化率は、室温でのものより小さくなり、実験とも良くあっています。

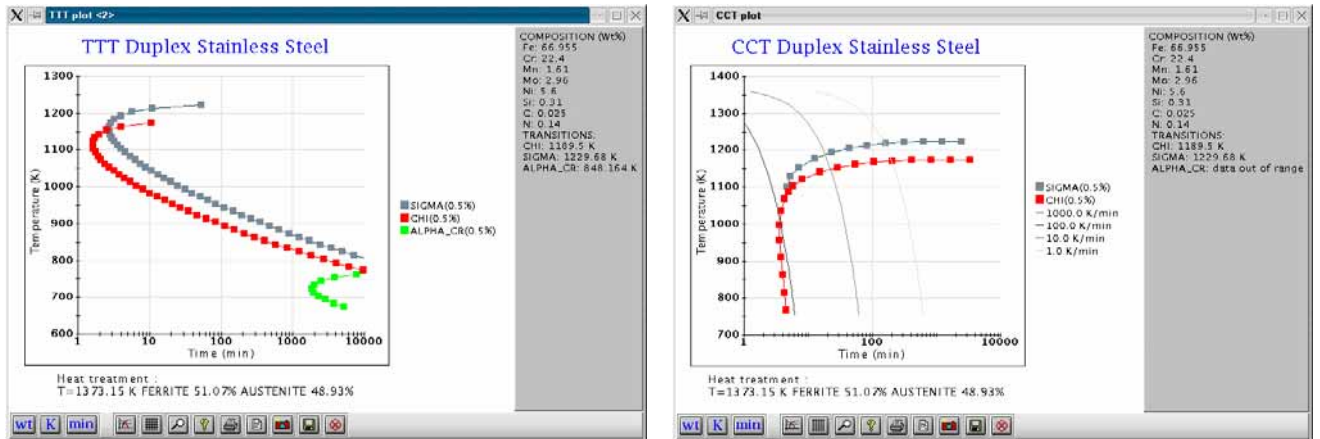
3.5 相変態(Phase Transformations)

JMatPro は様々なタイプの相変態を計算することができます。

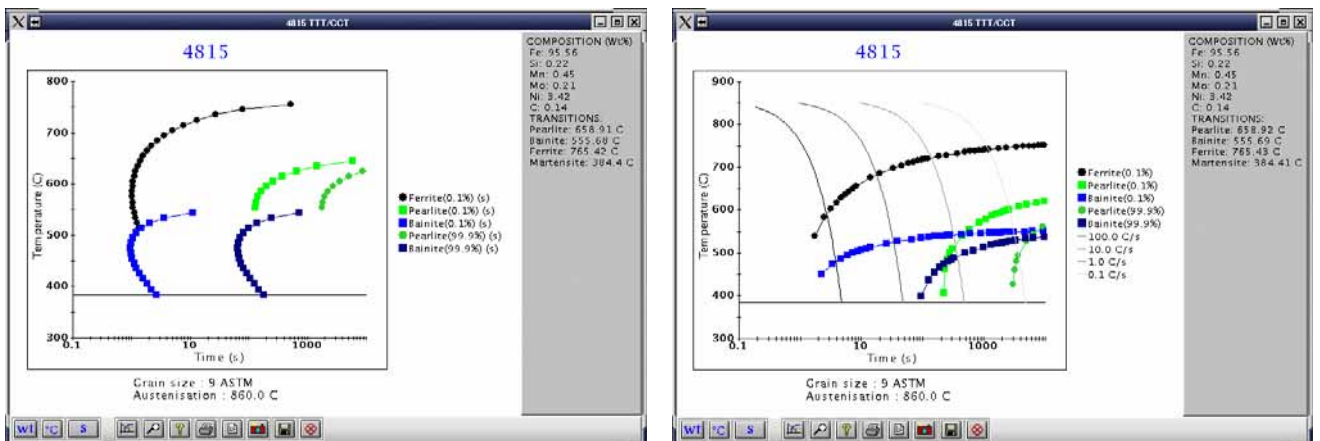
- Al, Cast Iron, General Steel, Stainless Steel, Ti およびNi合金については、TTTおよびCCTを計算することができます。
- Ni合金については、Gamma' and Gamma''についても計算可能です。
- General Steel, Stainless Steelについては、マルテンサイト温度を計算することができます。



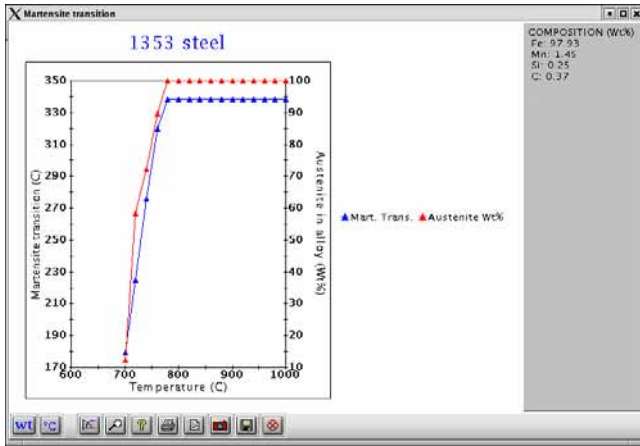
Aluminum Alloy AC4B TTT and CCT diagram



SAF 2205 Duplex Stainless Steel TTT and CCT diagram



4815 HSLA steel TTT and CCT diagram

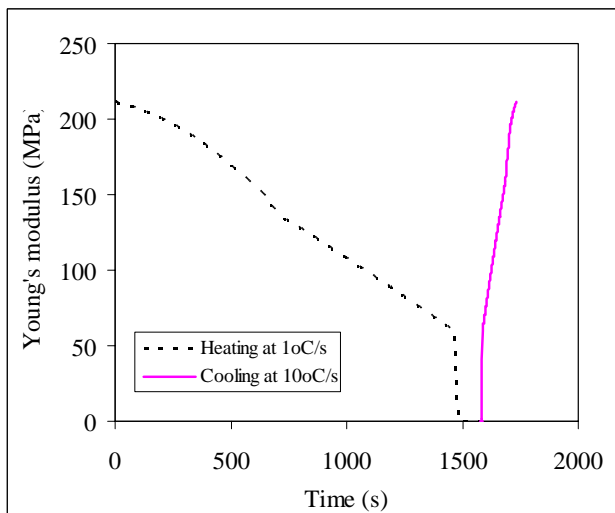
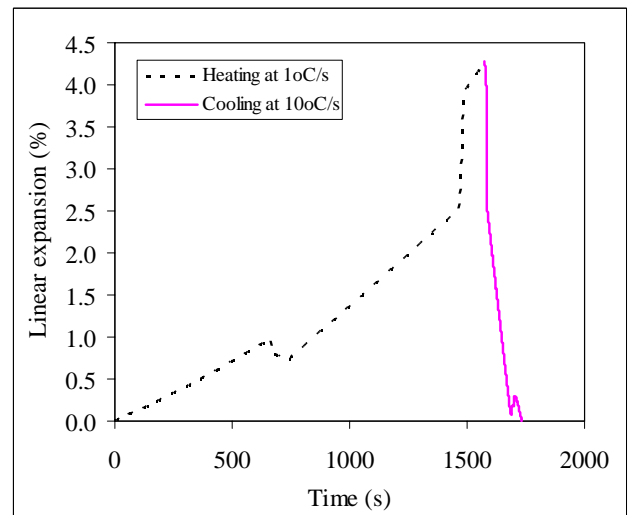
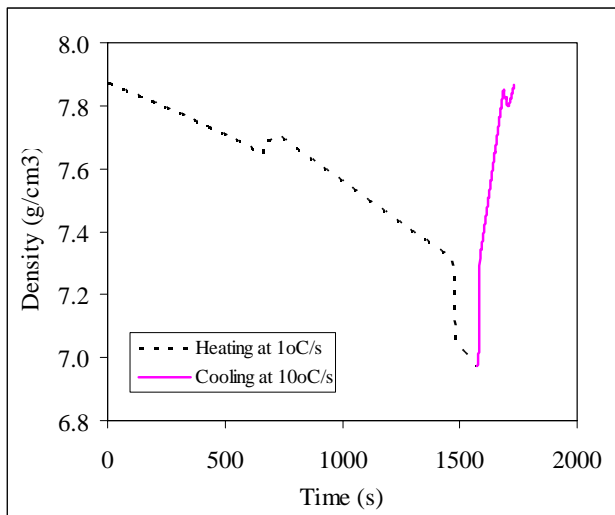


右図は、1353 Steelのマルテンサイト計算の例です。オーステナイト中のCの増加により、二相のオーステナイト+フェライト地域のマルテンサイト推移が急激に変化することに注意してください。
従って正しいオーステナイト構成を得るためには、焼入れ温度で計算を行う必要があります。

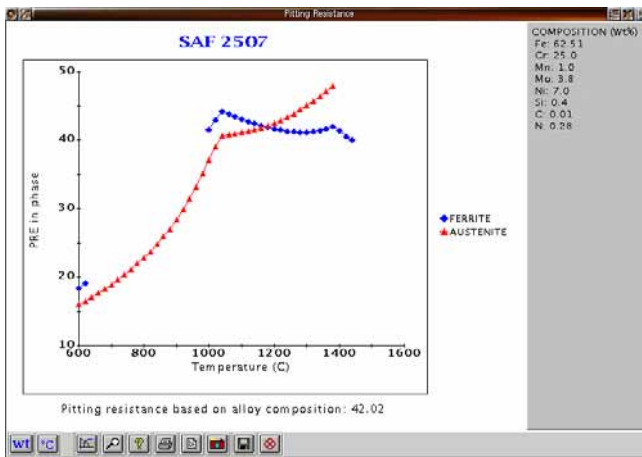
Martensite calculation for a 1353 Steel:

3.6 焼き入れ物性値(Quench Properties)

焼き入れ後の各物性値は、均一冷却と焼き入れの昇温、保持、冷却のプロセスに従ったものが計算できます。現状は、一般鋼のみです。



3.7 孔食腐食(Pitting corrosion)

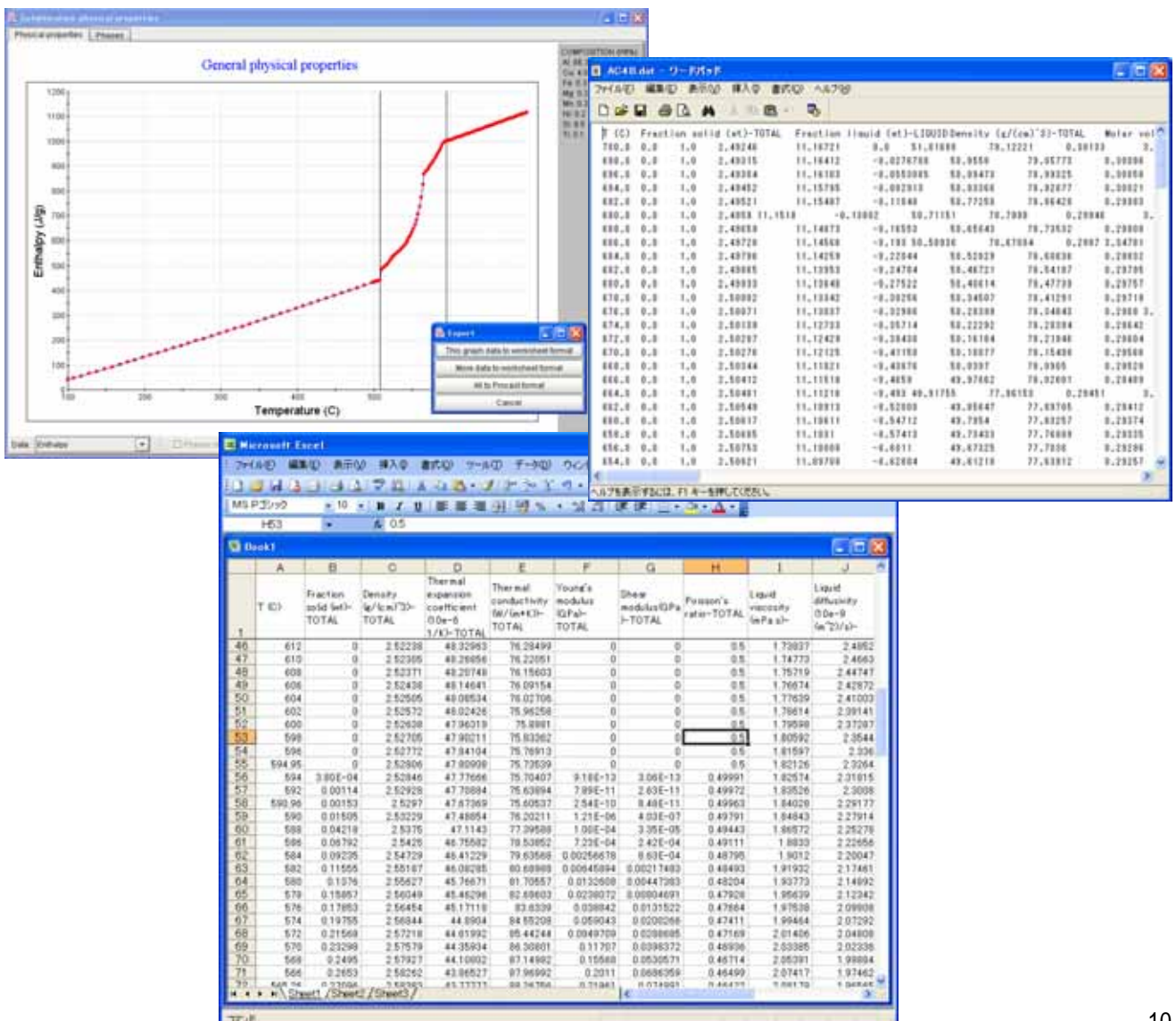


PRE - Duplex Stainless Steel

JMatProには、ステンレス鋼用にオーステナイトおよびフェライトの両方に対する孔食腐食(Pitting Resistance Equivalent :PRE)を計算するモジュールを含んでいます。Cr2Nとシグマの構成がCr、MoおよびNのような要素の相を消耗することにより、1000Cより下でPREが急落することに注意してください。

3.8 計算結果の出力

JMatPro では、計算された物性値の図および数値を出力することができます。数値については、EXCEL のフォーマットのテキストで出力されるので、後処理に便利です。



T (C)	Fraction solid (wt)-TOTAL	Density (g/cm ³)-TOTAL	Thermal expansion coefficient (0e-6 1/K)-TOTAL	Thermal conductivity (W/(m·K))-TOTAL	Young's modulus (GPa)-TOTAL	Shear modulus (GPa)-TOTAL	Poisson's ratio-TOTAL	Liquid viscosity (cP)-TOTAL	Liquid diffusivity (D ₀ -D) (m ² /s)-TOTAL	
40	612	0	2.52238	48.32993	76.28499	0	0	0.5	1.72837	2.4862
47	619	0	2.52395	48.28856	76.22951	0	0	0.5	1.74779	2.4663
48	609	0	2.52371	48.28748	76.18603	0	0	0.5	1.75719	2.44747
49	606	0	2.52438	48.14641	76.09154	0	0	0.5	1.76674	2.42872
50	604	0	2.52505	48.08534	76.02706	0	0	0.5	1.77659	2.41003
51	602	0	2.52572	48.02426	75.96258	0	0	0.5	1.78614	2.39141
52	600	0	2.52638	47.96319	75.89811	0	0	0.5	1.79598	2.37287
53	598	0	2.52705	47.90211	75.83362	0	0	0.5	1.80592	2.35444
54	596	0	2.52772	47.84104	75.76913	0	0	0.5	1.81597	2.33616
55	594.95	0	2.52839	47.80098	75.73539	0	0	0.5	1.82126	2.3204
56	594	3.80E-04	2.52846	47.77666	75.70407	9.18E-13	3.06E-13	0.49991	1.82574	2.31615
57	592	0.00114	2.52928	47.70894	75.63994	7.89E-11	2.63E-11	0.49972	1.82826	2.3098
58	590.96	0.00183	2.5297	47.67369	75.60537	2.54E-10	8.48E-11	0.49963	1.84029	2.29177
59	590	0.01505	2.53239	47.48654	76.20211	1.21E-06	4.03E-07	0.49791	1.84543	2.27914
60	589	0.04219	2.5376	47.1143	77.39569	1.06E-04	3.35E-05	0.49443	1.86872	2.25276
61	586	0.06792	2.5426	46.75582	78.53852	7.23E-04	2.42E-04	0.49111	1.8832	2.22656
62	584	0.09235	2.54729	46.41229	79.63566	0.00256678	8.63E-04	0.48795	1.9012	2.20047
63	582	0.11555	2.55187	46.08285	80.68889	0.0046894	0.00217483	0.48493	1.91932	2.17461
64	580	0.1376	2.55627	45.76671	81.70557	0.0132608	0.00447283	0.48204	1.93773	2.14892
65	579	0.15857	2.56049	45.46296	82.68603	0.0289072	0.00804691	0.47928	1.95639	2.12342
66	576	0.17853	2.56454	45.17118	83.6339	0.038842	0.0131522	0.47664	1.97508	2.09808
67	574	0.19755	2.56844	44.8904	84.55208	0.0505043	0.0200286	0.47411	1.99464	2.07292
68	572	0.21569	2.57218	44.61992	85.44244	0.0649709	0.0288685	0.47169	2.01486	2.04809
69	570	0.23299	2.57579	44.35934	86.30601	0.11797	0.0396372	0.46936	2.03585	2.02338
70	568	0.2496	2.57927	44.10892	87.14492	0.15588	0.0539571	0.46714	2.05791	1.99904
71	564	0.2653	2.58263	43.86827	87.96992	0.20311	0.0698258	0.46499	2.07471	1.97462
72	560.94	0.27064	2.58583	43.73371	88.74766	0.21981	0.074901	0.46419	2.08173	1.95002

3.9 解析ソフトとのインターフェース

応力解析、鋳造解析、鍛造解析等の解析ソフトウェアへの温度依存物性値を渡すインターフェースが組み込まれました。現時点でインターフェースが取れているのは、下記のソフトです。

- ・応力解析 : ANSYS
- ・鋳造解析 : MAGMA、 ProCAST
- ・鍛造解析 : Forge2D & 3D

JMatPro V4.1 available modules

		Al合金	Mg合金	鉄	一般鋼	ステンレス	Ti合金	Ni合金	Sn合金	Zr合金
平衡状態図	平衡状態図	●	●	●	●	●	●	●	●	●
	温度指定平衡状態図	●	●	●	●	●	●	●	●	●
	組成変化平衡状態図	●	●	●	●	●	●	●	●	●
	準平衡状態図	●								
凝固曲線		●	●	●	●	●	●	●	●	●
機械的物性値	固溶硬化					●	●	●		
	ジヨミニー曲線				●					
	0.2%耐力、引張り強さ				●	●	●	●		
	高温強度				●	●	●	●		
	応力-ひずみ曲線				●	●	●	●		
	クリープ					●		●		
物理的熱力学的物性値	凝固	●	●	●	●	●	●	●	●	●
	熱処理後物性値	●	●	●	●	●	●	●	●	●
	γ/γ'' ミスマッチ							●		
	積層欠陥エネルギー				●	●		●		
	表面張力								●	
相変態	TTT/CCT曲線	●		●	●	●	●	●		●
	熱処理条件考慮物性値				●					
	マルテンサイト変態				●	●				
	相変態エネルギー			●	●	●	●			
	等温変態	●			●		●	●		●
	冷却速度による相変態				●		●	●		●
γ/γ'' 相粗大化							●			
化学特性	耐孔食					●				