

# **Development of simulation tool for predicting distortion and residual stress in nitrided parts**

Kyozo Arimoto\*

Arimotech Ltd.,

822-10, Asonka, Kaizuka, Osaka, 597-0081, Japan

Fax: +81-72-428-0272

E-mail: [Kyozo\\_arimoto@arimotech.com](mailto:Kyozo_arimoto@arimotech.com)

\*Corresponding author

Fumiaki Ikuta

NETUREN Co., Ltd.,

7-4-10, Tamura, Hiratsuka-shi, Kanagawa, 254-0013, Japan

Fax: +81-463-55-1460

E-mail: [f-ikuta@k-neturen.co.jp](mailto:f-ikuta@k-neturen.co.jp)

Shigeru Yamanaka

Maruemu Works Co., Ltd.,

4-7-12, Nozaki, Daito, Osaka, 574-0015, Japan

Fax: +81-72-863-0166

E-mail: [yamanaka@maruemu.co.jp](mailto:yamanaka@maruemu.co.jp)

Kiyoshi Funatani

IMST Inst.,

3-3, Shogetsu-cho, Mizuho-ku, Nagoya, 467-0004, Japan

Fax: +81-72-428-0272

E-mail: [bzy03260@nifty.com](mailto:bzy03260@nifty.com)

**Abstract:** By the use of computational simulation techniques for nitriding processes, diffusion and nitride precipitation phenomena in compound layers and diffusion zones have been predicted in low alloy steels, Fe-Cr alloys, and so on. They have been also applied to examining formations of the expanded austenite in nitrided austenitic stainless steels. However, the application of the simulation approach was so far limited to the one-dimensional problems along the depth direction in simple shape specimens, since it is built on the finite difference method. In order to innovate the simulation, the

software tool based on the finite element method has been expanded for studying on arbitrary-shaped parts by using the latest models for nitriding. The tool, having the function to analyse stress and strain, contributes not only to resolving various practical problems but also to explaining the unsettled mechanisms of distortion and residual stress generations caused by nitriding. Furthermore, the models are also expected to be enhanced by considering stress and strain effects precisely. In this paper, some verification and validation examples on distortions and residual stresses relating to the expanded austenite formation in nitrided austenite stainless steels are described after clarifying the theory and implementation of the expanded simulation tool.

窒化プロセスに対して計算機シミュレーション技術を用いることで、低合金鋼, Fe-Cr 合金などにおける化合物層および拡散領域における拡散現象と窒化物析出現象が予測されてきた。また、窒化処理されたオーステナイト系ステンレス鋼における拡張オーステナイトの形成メカニズムの解析にも応用されている。しかし、適用されたシミュレーション手法は有限差分法に基づいているため、単純な形状の試料における深さ方向の一次元問題に限定されていた。シミュレーションの革新のため、有限要素法に基づくソフトウェアツールを、最新の窒化モデルを採用した任意形状の部品の解析のために拡張した。このツールは応力とひずみの解析機能を有し、実践的な問題の解決だけでなく、窒化処理によるゆがみと残留応力の発生メカニズムの解明にも貢献する。さらに、応力とひずみの効果を正確に考慮することで、モデルのさらなる改善が期待されている。本論文では、拡張されたシミュレーションツールの理論と実装を明確にした後、窒化処理されたオーステナイト系ステンレス鋼における拡張オーステナイトの生成に伴うゆがみと残留応力に関する検証と妥当性確認の例について説明する。

**Keywords:** distortion; residual stress; nitriding; expanded austenite; simulation.

**Reference** to this paper should be made as follows: Arimoto, K., Ikuta, F., Yamanaka, S. and Funatani, K. (2010) ‘Development of simulation tool for predicting distortion and residual stress in nitrided parts’, *Int. J. Microstructure and Materials Properties*, Vol. 5, Nos. 4/5, pp.386-398.

**Biographical notes:** Kyozo Arimoto is a Consultant at Arimotech Ltd. He has been working on heat treatment simulation for about 15 years and was involved in developing a commercial code that is used worldwide. He has published over 35 articles on heat treating simulation.

Fumiaki Ikuta is a General Manager of Technical Headquarters of NETUREN Co., LTD., Tokyo, Japan. He has been engaged in research on the induction heat treating technologies and working on heat treatment simulation for about 15 years.

Shigeru Yamanaka is a Director of New Product Development Department of Maruemu Works Co., Ltd., Osaka, Japan. He has been engaged in research on the metal working processes and heat treatment in precision engineering. He was involved in the study on the distortion mechanism of carburised quenching parts in 1998–2001.

Kiyoshi Funatani is a Consultant at IMST. He has approximately co-authored 20 books, and has published over 400 publications on various aspects of heat treating, quenching, surface engineering, tribology and manufacturing technologies. He is also the owner of about 50 patents in the field of heat treating, surface engineering and manufacturing technologies.

## 1 Introduction

Nitriding is conventionally applied to high precision parts because it gives rise to comparatively small distortions. In order to optimise the processes, many studies on its phenomena have been performed over the years mainly by experiments. So far, the simulation technique has been applied to low alloy steels (Sun and Bell, 1997), Fe-Cr alloys (Schacherl et al., 2004), and so on, for examining growth of compound layers and precipitation of nitrides in diffusion zones. Moreover, expanded austenite formations in nitrided austenite stainless steel have been simulated for studying its growth mechanism (Christiansen et al., 2006). On the other hand, examples of the simulation for distortions and residual stresses after nitriding were very few (Daves and Fischer, 1994; Kolozsvary, 2002).

窒化処理は、比較的ゆがみが少ないため、高精度部品に從來から広く適用されてきた。プロセスを最適化するため、長年、主に実験を通じてその現象に関する多くの研究が行われてきた。これまで、低合金鋼 (Sun and Bell, 1997)、Fe-Cr 合金 (Schacherl et al., 2004) などにおいて、拡散領域における化合物層の成長や窒化物の析出を調査するために、シミュレーション技術が適用されてきた。さらに、窒化処理されたオーステナイト系ステンレス鋼における拡張オーステナイトの生成が、その成長メカニズムを研究するためにシミュレーションが実施された (Christiansen et al., 2006)。一方、窒化処理後のゆがみと残留応力のシミュレーション例は極めて少ない (Daves and Fischer, 1994; Kolozsvary, 2002)。

Since the above simulations were performed based on the finite difference method on the nitrogen diffusion accompanying the precipitation of nitrides, their uses were limited to one-dimensional problems along the depth direction in simple shape specimens. For extending applications to arbitrary-shaped parts based on the finite element method, MUSIMAP, the multi-physical simulation tool for manufacturing chains and life cycles of parts, has been expanded in our research by using the latest models for nitriding. This tool makes it possible to predict not only nitrogen concentrations and nitride

amounts but also residual stresses and distortions, and then it contributes to solve various practical problems and explain the mechanism of the nitriding phenomena. Also, MUSIMAP will serve as a platform for developing enhanced models with stress and strain dependencies, additional analysis functions for the multi-component diffusion, etc. in the course of nitriding processes.

上記のシミュレーションは、窒化物の析出に伴う窒素拡散を有限差分法に基づいて実施したため、その適用範囲は単純な形状の試料における深さ方向の一次元問題に限定されていた。有限要素法に基づくことで任意形状の部品へとその適用範囲を拡張するため、本研究では、MUSIMAP（部品の製造工程とライフサイクルを統合したマルチフィジックスシミュレーションツール）を窒化処理の最新モデルを採用した。このツールは、窒素濃度や窒化物の量だけでなく、残留応力やゆがみを予測することが可能となることで、多様な実践的問題の解決や窒化現象のメカニズムの解明に貢献する。さらに、MUSIMAP は、窒化プロセスにおける応力・ひずみ依存性を持つ高度なモデル、多成分拡散に関する追加解析機能などの開発のためのプラットフォームとしての活用が期待できることになる。

In this paper, the theory of this simulation tool and also its implementation by the finite element method are clarified. Furthermore, simulated results on expanded austenite generations, distortions, and residual stresses in nitrided austenite stainless steels are described for clarifying some functions of this tool.

本論文では、このシミュレーションツールの理論および有限要素法によるその実装について説明する。さらに、このツールの機能の一部を明らかにするため、窒化処理されたオーステナイト系ステンレス鋼における拡張オーステナイトの生成、ゆがみ、および残留応力のシミュレーション結果について述べる。

## 2 Theory of nitriding simulation

### 2.1 Diffusion equation

Nitrogen diffusion phenomena accompanying nitride precipitations in steels can be expressed by the partial differential equation on the nitrogen concentration  $C$  (Crank, 1975):

鋼中の窒化物析出を伴う窒素拡散現象は、窒素濃度  $C$  に関する偏微分方程式 (Crank, 1975) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \frac{\partial C^p}{\partial t} \quad (1)$$

where  $D$  is the diffusion coefficient of nitrogen. The coefficient generally depends on kinds of phase produced, temperature and nitrogen concentration during nitriding. The term  $\partial C^p / \partial t$  in equation (1) is

the concentration change rate of nitrogen absorbed from matrix by nitride precipitations per unit volume, which will be derived from precipitation models described in the following section.

によって表すことができる。  $D$  は窒素の拡散率であり、一般的に窒化処理中に生成される相の種類、温度、および窒素濃度に依存する。式(1)における項  $\partial C^p/\partial t$  は、窒化物の析出によってマトリックスから吸収される窒素に対する濃度の変化率であり、単位体積当たりの値である。この値は、以下の節で説明する析出モデルから導出される。

A boundary condition is expressed by the equation regarding the surface flux  $J_s$  (Rozendaal et al., 1983; Grabke, 1994):

境界条件は、表面流束  $J_s$  に関する式 (Rozendaal ら, 1983; Grabke, 1994) :

$$J_s = \beta_c (C_g - C_s) \quad (2)$$

where  $\beta_c$  is referred to as the mass transfer or reaction rate coefficient, and  $C_g$  is nitrogen concentration in steels in equilibrium with the gas atmosphere.  $C_s$  represents actual nitrogen concentration at the surface of the parts.

で表される。ここで、 $\beta_c$  は物質移動係数または反応速度係数と呼ばれ、 $C_g$  はガス雰囲気と平衡状態にある鋼中の窒素濃度を表す。 $C_s$  は部品の表面における実際の窒素濃度を示す。

## 2.2 Model for nitride precipitation

Nitriding simulation uses the model that expresses the nitride precipitation in a diffusion zone. The chemical reaction generating nitride  $M_xN_y$  is described as follows:

窒化シミュレーションでは、拡散領域における窒化物の析出を表現するモデルを使用する。窒化物  $M_xN_y$  を生成する化学反応は、化学式：



where  $M$  and  $N$  are a specific element and nitrogen in steels, respectively, while  $x$  and  $y$  represent stoichiometric coefficients. The equilibrium of the above reaction can be expressed by using the product (Pearson and Ende, 1953):

で記述される。ここに、 $M$  と  $N$  はそれぞれ鋼中の特定の元素と窒素、そして  $x$  と  $y$  は化学量論的係数を表す。上記の反応の平衡は、積 (Pearson and Ende, 1953) :

$$K_{M_xN_y} = [M]^x [N]^y \quad (4)$$

where  $[M]$  and  $[N]$  are concentrations corresponding to a specific element  $M$  and nitrogen  $N$  in steels, respectively. The product of concentrations in equation (4) is called the solubility product.

で表すことができる。 $[M]$  と  $[N]$  は、それぞれ鋼中の特定元素  $M$  と窒素  $N$  の濃度を表

す。式 (4) における濃度の積は溶解度積と呼ばれる。

The above model of solubility product was applied to the evaluation of the precipitation behaviour of nitride VN for studying the strain-ageing (Pearson and Ende, 1953). In more recent years, the same model was used for simulating the precipitation behaviour of compounds during carburising of nickel based alloys based on the finite difference method (Bongartz et al., 1989). This approach was expanded to the studies on the nitride precipitation in diffusion zones (Sun and Bell, 1997; Schacherl et al., 2004) and also the growth of expanded austenite (Christiansen et al., 2006). The trapping of nitrogen atoms in the expanded austenite is modelled by using the solubility product, although this is not a chemical reaction.

上記の溶解度積モデルは、窒化物 VN のひずみ時効 (Pearson and Ende, 1953) における析出挙動の評価に適用された。近年では、同じモデルが、ニッケル基合金の炭化処理中の化合物の析出挙動に対する有限差分法に基づくシミュレーション (Bongartz et al., 1989) にも用いられた。このアプローチは、拡散域における窒化物の析出 (Sun and Bell, 1997 ; Schacherl et al., 2004) および拡張オーステナイトの成長 (Christiansen et al., 2006) の研究のために適用された。拡張オーステナイト中の窒素原子の捕捉は化学反応ではないが、溶解度積を用いてモデル化されている。

## 2.3 Distortion and stress/strain

Local volume expansions arise in the region where nitrogen atoms diffuse, and also compound layers and nitride precipitations are formed. As a result, elastic, plastic and creep deformations are induced microscopically in nitrided parts. Also, gradual temperature changes in processes produce small thermal expansions in parts locally. The microscopic distortions are interpreted as strains macroscopically in continuum mechanics, which are classified into elastic, thermal, plastic, creep, phase transformation, etc., corresponding to their origins.

窒素原子の拡散する領域には化合物層や窒化物の析出が形成され、そこには局所的な体積膨張が生じる。その結果、窒化処理された部品の微小な領域において、弾性変形、塑性変形、クリープ変形が誘起される。また、プロセス中の緩やかな温度変化により、部品の局所的な領域では小さな熱膨張が生じる。これらの微視的なゆがみは、連続体力学におけるマクロ的な量であるひずみと見なされ、その起源に応じて弾性、熱、塑性、クリープ、相変態などのひずみに分類される。

At any point in a part during nitriding, total strain  $\epsilon_{ij}$  produced at the time  $t$  is defined as the addition of various strains, as shown:

窒化処理中の部品の任意の時点において、時刻  $t$  における全ひずみ  $\epsilon_{ij}$  は、以下の通り、さまざまなひずみの総和として定義される：

$${}^t\epsilon_{ij} = {}^t\epsilon_{ij}^E + {}^t\epsilon_{ij}^{TH} + {}^t\epsilon_{ij}^D + {}^t\epsilon_{ij}^{TR} + {}^t\epsilon_{ij}^P + {}^t\epsilon_{ij}^{TP} + {}^t\epsilon_{ij}^C \quad (5)$$

where  ${}^t\epsilon_{ij}^E$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^{TH}$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^D$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^{TR}$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^P$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^{TP}$  and  ${}^t\epsilon_{ij}^C$  are the elastic, thermal, diffusion, phase transformation, plastic, transformation plastic and creep strains, respectively. The diffusion strain  ${}^t\epsilon_{ij}^D$  is defined as a term for describing the lattice expansion due to diffused atoms macroscopically in this study. Equation (5) is based on the assumption that displacements and strains are infinitesimally small (Arimoto et al., 2006).

ここに、 ${}^t\epsilon_{ij}^E$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^{TH}$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^D$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^{TR}$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^P$ ,  ${}^t\epsilon_{ij}^{TP}$  および  ${}^t\epsilon_{ij}^C$  は、それぞれ弾性、熱、拡散、相転移、塑性、変態塑性、およびクリープのひずみである。拡散ひずみは、本研究では、拡散した原子による格子膨張をマクロに記述する量として定義する。式(5)は、変位とひずみが無限小であるという仮定に基づいている (Arimoto et al., 2006)。

The strains in the right-hand side of equation (5), except the elastic strain, are obtained by time integration from an initial state to the time  $t$ , as follows:

式(5)の右辺のひずみ（弾性ひずみを除く）は、初期状態から時間  $t$  までの時間積分により次のように求まる：

$${}^t\epsilon_{ij}^K = \int_0^t \dot{\epsilon}_{ij}^K d\tau, \quad K = TH, D, TR, P, TP \text{ and } C \quad (6)$$

So far, some researches on nitriding simulation considering creep and transformation plastic strains were reported (Daves and Fischer, 1994; Kolozsvary, 2002).

これまで、クリープと変態塑性のひずみを考慮した窒化シミュレーションの研究が数例報告されている (Daves and Fischer, 1994; Kolozsvary, 2002)。

### 3 Implementation by finite element method

The finite element method has been developed to numerically solve the partial differential equations which describe physical phenomena, including the diffusion, heat transfer, stress/strain behaviours (Bathe, 1996). For example, the method derives the unsteady and nonlinear equilibrium equation in the matrix and vector notations from the diffusion equation of equation (1) based on the configurations at time  $t$  and  $t + \Delta t$ :

有限要素法は、拡散、伝熱、応力/ひずみの挙動などの物理現象が記述された偏微分方程式を数値的に解くために開発された (Bathe, 1996)。この方法は、たとえば、式 (1) の拡散方程式から、時間  $t$  と  $t + \Delta t$  における状況に基づいて、行列とベクトル表記で表される非定常かつ非線形の平衡方程式：

$$\mathbf{D}^{t+\Delta t} \dot{\mathbf{C}} + {}^t\mathbf{K}\mathbf{C} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{Q} - {}^t\mathbf{F} \quad (7)$$

where  $\mathbf{D}$ : diffusion capacity matrix,  ${}^t\mathbf{K}$ : diffusion matrix,  ${}^{t+\Delta t}\mathbf{Q}$ : diffusion flow vector,  ${}^t\mathbf{F}$ : diffusion flow vector equivalent to the element flows,  ${}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{C}}$ : concentration rate vector,  $\mathbf{C}$ : increments of concentration from  $t$  to  $t + \Delta t$ . The effects of the term  $\partial C^p / \partial t$  in equation (1), which relate to nitride precipitations, are included in the diffusion flow vector  ${}^{t+\Delta t}\mathbf{Q}$ .

を導出する。ここで、 $\mathbf{D}$ : 拡散容量行列,  ${}^t\mathbf{K}$ : 拡散行列,  ${}^{t+\Delta t}\mathbf{Q}$ : 拡散流ベクトル,  ${}^t\mathbf{F}$ : 要素流に相当する拡散流ベクトル,  ${}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{C}}$ : 濃度変化率ベクトル,  $\mathbf{C}$ :  $t$  から  $t + \Delta t$  までの濃度変化量である。式(1)における  $\partial C^p / \partial t$  項の効果 (窒化物析出に関連する) は, 拡散流ベクトル  ${}^{t+\Delta t}\mathbf{Q}$  に含まれている。

Regarding heat transfer and stress/strain behaviours, similar equilibrium equations to equation (7) are adopted, where the forms of matrix and vector correspond to temperature and displacement, respectively.

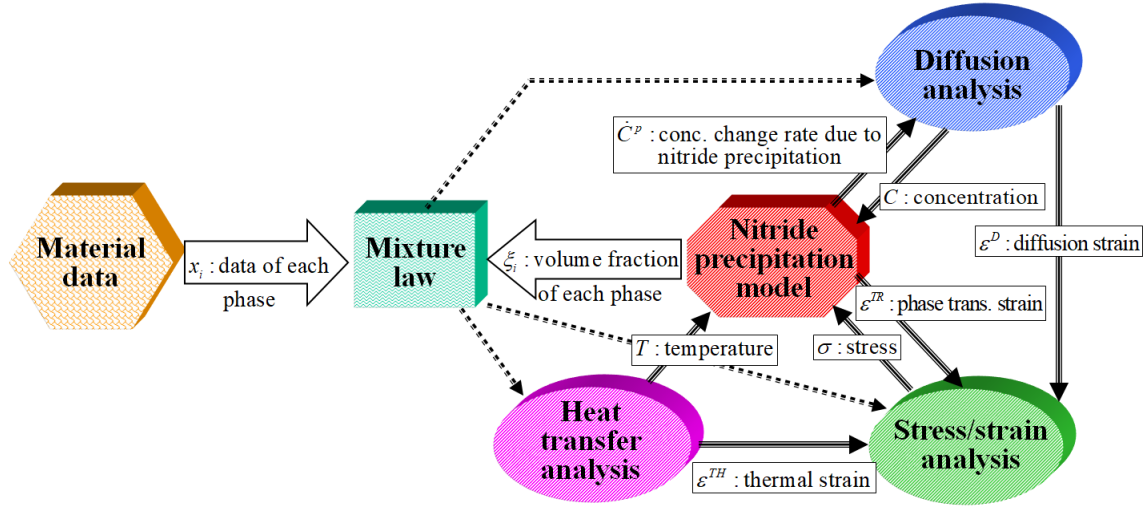
伝熱および応力/ひずみの挙動に関しては, 式(7)と類似の平衡式が採用され, 行列とベクトルの形式はそれぞれ温度と変位に対応している。

MUSIMAP simulates nitriding processes as schematically illustrated in Figure 1, by using diffusion, heat transfer, and stress/strain analysis modules with exchanging mutual information, including various types of strain, temperature, concentration, stresses, etc. Nitride precipitations and compound layer growths are predicted based on the current condition of phenomena. By applying the mixture law, characteristics data concerning diffusion, heat transfer and stress/strain behaviour are estimated simultaneously based on the predicted volume fractions and also inherent data of each nitride and phase.

MUSIMAP は, 図 1 に模式的に示されるように, 拡散, 伝熱, および応力/ひずみ解析モジュールを組み合わせ, 相互に情報 (各種のひずみ, 温度, 濃度, 応力など) を交換しながら窒化プロセスのシミュレーションを実施する。窒化物の析出と化合物層の成長は, 現在の現象の状態に基づいて予測される。複合則を適用することで, 拡散, 伝熱, および応力/ひずみ挙動に関する特性データが予測された体積分率と各窒化物および相の固有データに基づいて同時に推定される。

Figure 1 System of nitriding simulation





## 4 Verification and validation of simulation tool

### 4.1 Nitrogen concentration in nitrided austenite stainless steels

Christiansen et al. measured and simulated distributions of nitrogen concentration in AISI 316 stainless steel specimens after gas nitriding at 718 K for 22 h (Christiansen et al., 2006). The measurement of nitrogen concentration profile was reported only in the case under the nitriding potential  $K_N = 1.41$ . Their simulation was executed by a programme based on the finite difference method incorporating the solubility product model for describing the trapped nitrogen atoms.

Christiansen ら (2006) は、718 K で 22 時間ガス窒化処理を施した AISI 316 ステンレス鋼試料における窒素濃度分布を測定し、この現象に対してシミュレーションを行った (Christiansen et al., 2006). 窒素濃度プロファイルの測定結果は、窒化ポテンシャル  $K_N = 1.41$  の場合のみ報告されている。彼らのシミュレーションは、捕捉窒素原子のために溶解度積モデルを適用した有限差分法に基づくプログラムで実施された。

In this study, the experimental and simulated results by Christiansen et al. were used for verifying and validating some functions of MUSIMAP. The region of the specimen from the surface to 0.04 mm in depth was modelled by 80 two-dimensional finite elements with the same size. The surface concentration was assumed to change with time to the equilibrium value as specified by Christiansen et al. Also the same diffusion coefficient of nitrogen as Christiansen et al. was used for this simulation, which depends strongly on the nitrogen concentration.

本研究では、Christiansen らによる実験結果とシミュレーション結果を用い、MUSIMAP のいくつかの機能についての検証と妥当性確認を実施した。試料の表面から 0.04 mm の深さまでの領域は、同サイズの 2 次元有限要素 (80 個) でモデル化さ

れた。表面濃度は、Christiansen らによって指定されたように、平衡値に向かって時間とともに変化すると仮定した。また、このシミュレーションでは、Christiansen らと同じ窒素の拡散率（窒素濃度に強く依存する）を使用した。

Figure 2 shows simulated distributions of nitrogen concentration by MUSIMAP and Christiansen et al. under the three stages of nitriding potential  $K_N$ , 0.293, 2.49 and  $\infty$ , as referred to as N1, N2 and N3, respectively. Also, the measured profile at  $K_N = 1.41$  is depicted. The concentration  $y_N$  is the fraction of sites in the interstitial sub-lattice, which are occupied by nitrogen atoms. Our simulated concentration distributions are specified as the legend symbols, ‘M’ and ‘M + I’, which correspond to only mobile: ‘M’ and the addition of mobile and immobile: ‘I’ nitrogen atoms, respectively. ‘M + I’ curves correspond to the simulated results by Christiansen et al. Concentration changes of mobile and immobile nitrogen atoms simulated by MUSIMAP under the N3 condition are depicted in Figure 3 separately for clarifying the generation of their profiles.

図 2 は、窒化ポテンシャル  $K_N$  が 0.293, 2.49, および  $\infty$ （それぞれ N1, N2, N3 と表記）の 3 段階の場合に対し、MUSIMAP と Christiansen らによる窒素濃度分布のシミュレーション結果を示している。また、 $K_N = 1.41$  における測定で得た分布も示されている。濃度  $y_N$  は、格子間副格子内に窒素原子が占めるサイトの割合である。MUSIMAP シミュレーションの濃度分布結果に指定された凡例記号‘M’と‘M + I’は、それぞれ、移動可能な窒素原子（‘M’）のみと、移動可能と移動不可能な窒素原子（‘I’）の合計を表す。‘M + I’の曲線は Christiansen らによるシミュレーション結果に対応する。N3 条件下で MUSIMAP によりシミュレーションされた移動性と非移動性の窒素原子の濃度変化は、プロファイルの生成を明確にするため、図 3 では別々に示されている。

Figure 2 Nitrogen concentration distributions

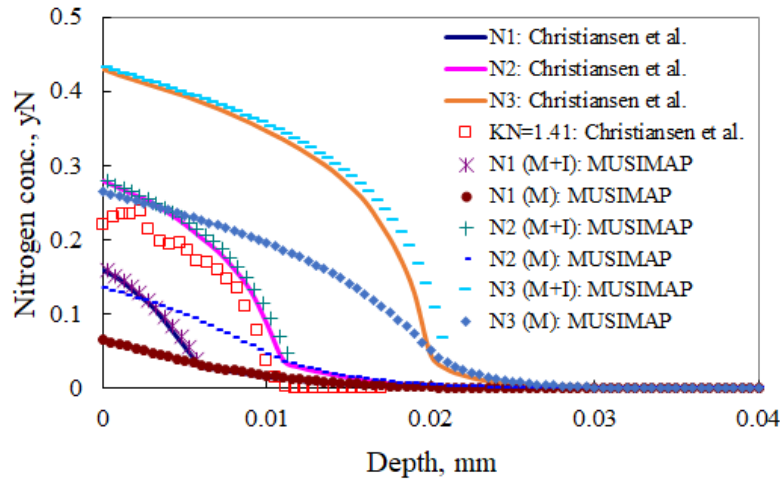
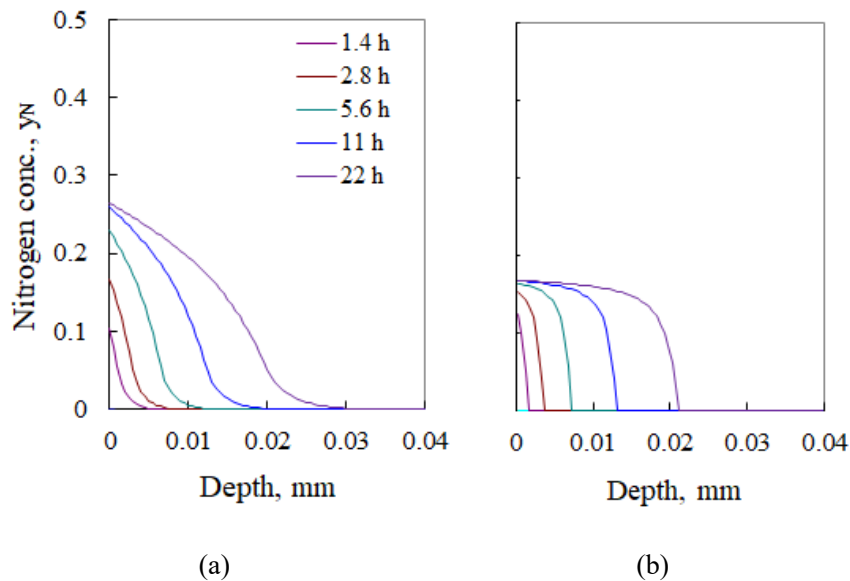


Figure 3 Nitrogen concentration changes (a) mobile nitrogen (b) immobile nitrogen



## 4.2 Residual stress distributions in nitrided austenite stainless steel plates

Christiansen and Somers measured residual stress distributions in gas nitrided disks, 13 mm in diameter and 2 mm in thickness, made from the AISI 316 stainless steel (Christiansen and Somers, 2004). Nitriding was performed at 718K for 22 h under the same conditions of nitriding potentials, as N1, N2 and N3, specified in the previous section. Stress distributions along the depth direction were measured by X-ray at the surfaces after removing its layer serially by diamond paste polishing.

Christiansen と Somers は、AISI 316 ステンレス鋼から製作された直径 13mm、厚さ 2mm の円板のガス窒化後における残留応力分布を測定した(Christiansen と Somers, 2004). 窒化処理は、前節で指定された窒化ポテンシャル (N1, N2, N3) と同じ条件下で、718K で 22 時間行われた。深さ方向の応力分布は、X 線により、ダイヤモンドペースト研磨によって層を順次除去した表面において測定された。

The above nitriding processes were simulated by MUSIMAP for its verifications and validations. The finite element model was created using 99 elements for the two-dimensional generalised plane strain problem, which was arranged to the one half of the thickness in the disk. Finer mesh divisions were set at the region producing the expanded austenite. The temperature of the model was changed uniformly in a cycle between room temperature and 718 K. The same type of diffusion conditions as described in the previous section were adopted in this simulation.

上記の窒化処理プロセスは、その検証と妥当性確認のため MUSIMAP でシミュレーションされた。有限要素モデルとしては、2次元一般化平面ひずみ問題に対する 99

要素が円板の 1/2 厚さに対して配置された。拡張オーステナイトが生成する領域には、より細かいメッシュ分割が設定された。モデルの温度は、室温と 718 K の間での 1 サイクルの均一変化であった。このシミュレーションでは、前節で説明したのものと同様の拡散条件が採用された。

Although elastic, plastic, and creep phenomena are able to be taken into account during the simulation, a few material characteristics data of the expanded austenite had been published. In this simulation, therefore, Young's modulus and Poisson's ratio were extracted from ordinary stainless steel (Date, 1969). The diffusion expansion coefficient of the expanded austenite was set to 0.164 mm/mm/yN based on the lattice constant depending on the site fraction of nitrogen sublattice of AISI 316 at 718 K (Christiansen and Somers, 2006).

弾性、塑性、およびクリープ現象はこのシミュレーションにおいて考慮可能であるが、拡張オーステナイトの材料特性データはほとんど公表されていない。したがって、シミュレーションでは、ヤング率とポアソン比は通常のステンレス鋼の値 (Date, 1969) に基づいて設定した。拡張オーステナイトの拡散膨張係数は、AISI 316 の窒素副格子サイト分率に依存する格子定数 (Christiansen and Somers, 2006) に基づき、718 K における値として 0.164 mm/mm/yN を用いた。

In this simulation, creep phenomena were expressed using the Norton's equation:

このシミュレーションでは、クリープ現象を Norton の式：

$$\dot{\epsilon}^C = k\sigma^n \quad (8)$$

where the parameters  $k$  and  $n$  were set to  $2 \times 10^{-18}$  and 3.05, respectively, under using MPa for the unit of stress by trial and error. Plastic behaviours during nitriding were not considered in this modelling, because of the simplicity.

を用いて表現した。パラメータ  $k$  と  $n$  については、応力の単位として MPa を使用し、試行錯誤によりそれぞれ  $2 \times 10^{-18}$  と 3.05 を用いた。このモデル化では、単純化のため、窒化処理中の塑性挙動は考慮されていない。

Figure 4 shows residual stress distributions along the depth direction, which were obtained by MUSIMAP, with the measured results by Christiansen and Somers. The stress value corresponds to the component perpendicular to the depth direction. Hypothetical simulated results not considered with creep effects are included in Figure 4 for reference. Simulated stress distributions with creep effects show a similar tendency to the measurements by Christiansen and Somers, while higher compressive stresses are depicted near the surface in the cases without creep. In addition, simulated total, elastic, diffusion and creep strain distributions after nitriding under the condition N2 and N3 are shown in Figure 5. It is clear that the distribution of elastic strain, which has a similar tendency to stress as shown in Figure 4, is expressed by adding diffusion strain and creep strain, based on the

equilibrium condition expressed by equation (5), because the total strain is a small horizontal line. This shows how the residual stress distributions are affected by the diffusion and creep strains.

図 4 では、深さ方向の残留応力分布として Christiansen と Somers の測定結果と MUSIMAP により得られたものを対比している。応力値は深さ方向に対して垂直な成分に対応している。図 4 には、クリープ効果を考慮しない仮想的なシミュレーションの結果を参考のために含めている。クリープ効果を考慮したシミュレーション応力分布は、Christiansen と Somers の測定結果と類似した傾向を示している。しかし、クリープを考慮しない場合には、表面付近においてより高い圧縮応力が発生する。さらに、図 5 には、N2 および N3 の条件下での窒化処理後の全ひずみ、弾性ひずみ、拡散ひずみ、およびクリープひずみの分布が示されている。図 4 で示された応力との類似した傾向を示す弾性ひずみ分布は、式(5)で表される平衡条件に基づき、拡散ひずみとクリープひずみの分布を加算することで得られる。これは、全ひずみがほぼ水平に近い線となるためである。これにより、残留応力分布が拡散ひずみとクリープひずみによってどのように影響を受けるのかが示されたことになる。

Figure 4 Residual stress distributions

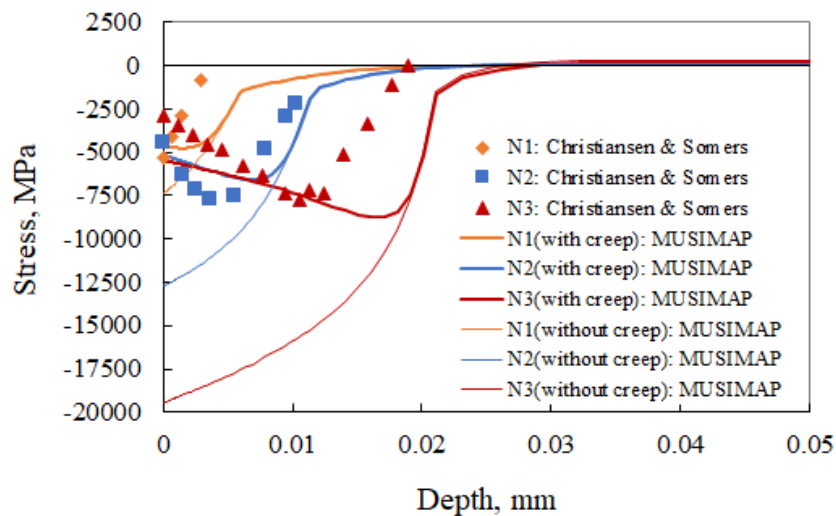
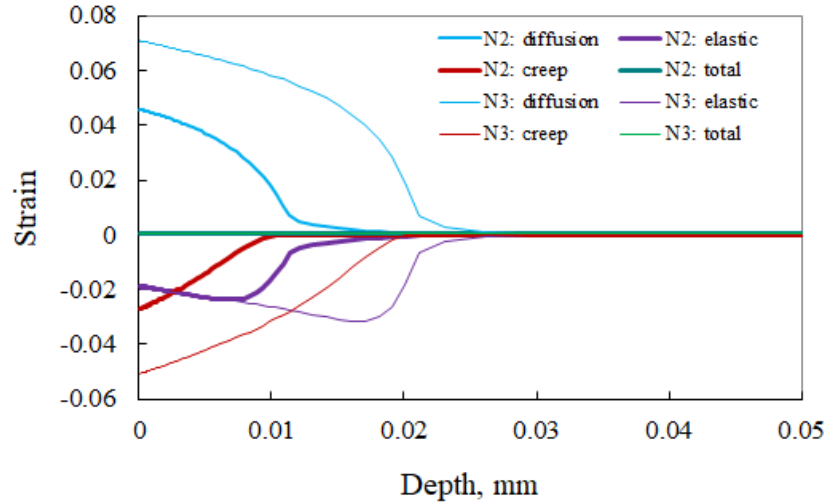


Figure 5 Strain distributions



### 4.3 Plate bending during low-energy implantation with nitrogen

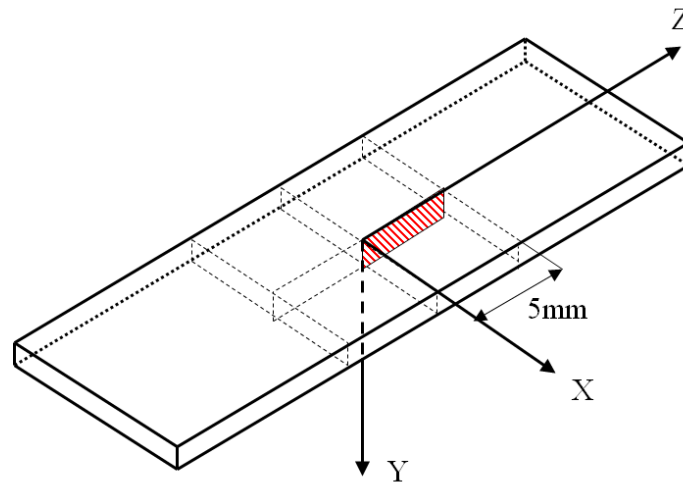
Sienz et al. performed in situ measurements of bending in the stainless steel plate, which was nitrided by the low-energy implantation with nitrogen from one side of the plate (Sienz et al., 2002). Plate specimens,  $10 \times 30 \text{ mm}^2$  in size and 1 mm in thickness, were prepared from the X5CrNi18.10 stainless steel, containing 18 mass% Cr and 10 mass% Ni. The radius of curvature due to bending of the plate was measured during nitriding for 63 min at 673 K and also until 90 min after stopping nitrogen bombardment. The nitrogen distribution along the depth direction of the specimen was investigated after nitriding for 63 min.

Sienz ら (2002) は、ステンレス鋼板の一面から窒素を低エネルギーイオン注入することにより、この試料における曲りの in situ 測定を実施した (Sienz et al., 2002)。試料は、18 mass% の Cr と 10 mass% の Ni を含む X5CrNi18.10 ステンレス鋼から、 $10 \times 30 \text{ mm}^2$  のサイズと 1 mm の厚さで作成された。板の曲りの曲率半径は、673 K で 63 min 間の窒化処理中および窒素注入を停止後 90 min 間まで測定された。窒化処理 63 min 後、試料の深さ方向における窒素の分布を調べた。

The above experiment was simulated by MUSIMAP for its verifications and validations. The hatched two-dimensional region in the plate specimen, 5 mm in length, as shown in Figure 6, was modelled by 495 generalised plane strain elements, which was created by the 99 and five divisions in the Y and Z directions, respectively. The surface part of the region, where expanded austenite was produced, was divided finer by elements in the Y direction. A boundary condition for the nitrogen diffusion was specified to only the surface,  $Y=0$ . The nodes in the model along the Y axis were restrained in the Z direction because of symmetry.

上記の実験に対しては、その検証と妥当性確認のために MUSIMAP によるシミュレーションが実施された。図 6 に示されるように、板試料のハッチングされた 2 次元領域（長さ 5 mm）が、Y 方向と Z 方向にそれぞれ 99 分割と 5 分割することで作成された 495 個の一般化平面ひずみ要素でモデル化された。拡張オーステナイトが生成された領域の表面部分は、要素の Y 方向がより細かく分割された。窒素拡散の境界条件は、表面 ( $Y=0$ ) にのみ指定された。モデル内の Y 軸に沿った節点の Z 方向を拘束し、対称条件を導出した。

Figure 6 Analysing region of plate



The same technique shown in the foregoing sections was used for describing the phenomena of both the nitrogen diffusion and expanded austenite formation, although the boundary condition of the implantation was not the same as the gas nitriding. Stress/strain characteristic data was set in the same way as the previous section, except for the referenced temperature is 673 K and the creep parameter  $n$  is 3.7 that was set by trial and error.

前節で示した手法を用いて、以下では窒素拡散と拡張オーステナイト形成の現象の両方について記述した。なお、注入の境界条件はガス窒化の場合とは異なる。応力/ひずみ特性データは前節と同様に設定したが、参照温度は 673 K とし、クリープパラメータ  $n$  は試行錯誤により 3.7 に設定した。

Figure 7 represents the simulated distribution changes of nitrogen concentration during the experiment by MUSIMAP, and the measured results at 63 min by Sienz et al., along the Y axis. A discrepancy is appeared between simulated and measured profiles, because of few condition data. The nitrogen concentration at 90 min shows a redistribution induced by stopping nitrogen bombardment.

図 7 は、実験中の窒素濃度分布の変化に対する MUSIMAP のシミュレーション結

果と、Sienz らによる 63 min 時点の測定結果を、Y 軸に沿って示したものである。シミュレーション結果と測定結果の間に乖離が生じているのは、条件データの不足が原因である。90 min 時点の窒素濃度は、窒素の注入を停止したことによる再分布の状況を示している。

Figure 7 Nitrogen concentration distribution changes

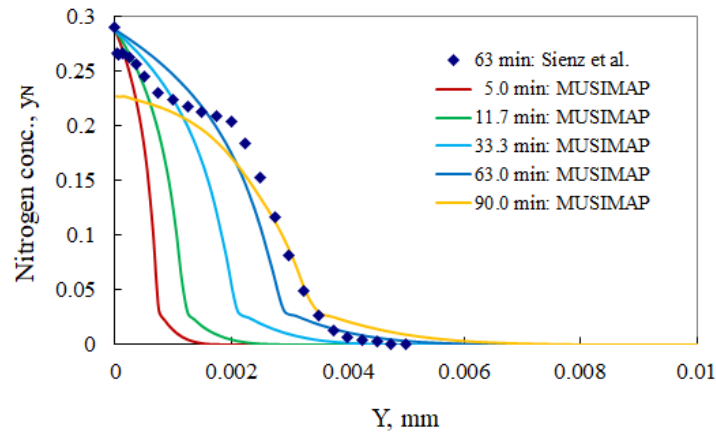
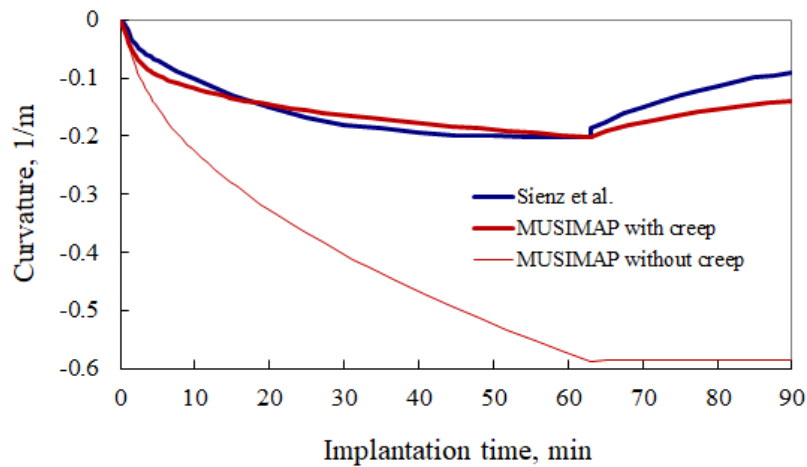


Figure 8 Curvature changes



Bending curvature changes in the specimen simulated by considering with and without creep effects are compared to experiments as shown in Figure 8. A curvature value can be calculated from the gradient of a total strain slope as described later. The curvature change considered with creep show a similar tendency to the experimental result. On the other hand, the curvature without creep is increased more significantly in absolute value and is kept at the horizontal level after stopping nitrogen bombardment.

図 8 には、シミュレーションにおけるクリープ効果の考慮の有無による試料の曲



率の変化が実験結果と比較されている。曲率値は、後述するように全ひずみの勾配から計算することができる。クリープ効果を考慮した曲率変化は、実験結果と類似の傾向を示す。一方、クリープ効果を考慮しない曲率は、絶対値においてより大きく増加し、窒素注入を停止した後も水平レベルを維持する。

Figure 9 depicts distribution changes of the normal stress in the Z direction along the Y axis, which were obtained by considering with creep effects. The compressive stress near the surface is decreased in absolute value, while the width of its range is increased as time progresses. Distribution changes of elastic, diffusion, creep and total strains in the Z direction along the Y axis are plotted as shown in Figure 10 for explaining the generation of the stress and bending. Strains have to satisfy the equilibrium condition expressed as equation (5), and also total strain has to keep a linear distribution during bending as shown in Figure 10 (d), because of long object. A gradient of a total strain slope is proportional to a curvature of bending based on the geometric consideration.

図 9 は、クリープ効果を考慮して得られた Y 軸に沿った垂直応力（Z 方向）分布の変化を示している。圧縮応力は、表面付近で時間経過とともに絶対値が減少するが、その範囲幅は増加する。Y 軸に沿った弾性ひずみ、拡散ひずみ、クリープひずみ、および全ひずみ（Z 方向）分布の変化が、応力と曲げの発生メカニズムを説明するために図 10 に示されている。ひずみは式(5)に示す平衡条件を満たす必要があり、また、試料は長尺物体であるため、全ひずみは曲がりの途中で線形分布を維持する必要がある（図 10(d)参照）。全ひずみの勾配は、幾何学的な考察により、曲りの曲率に比例する。

Figure 9 Simulated stress distribution changes

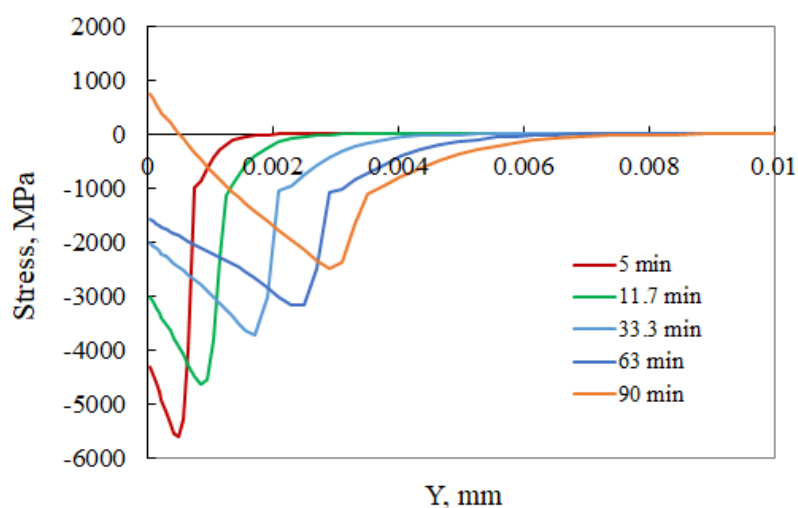
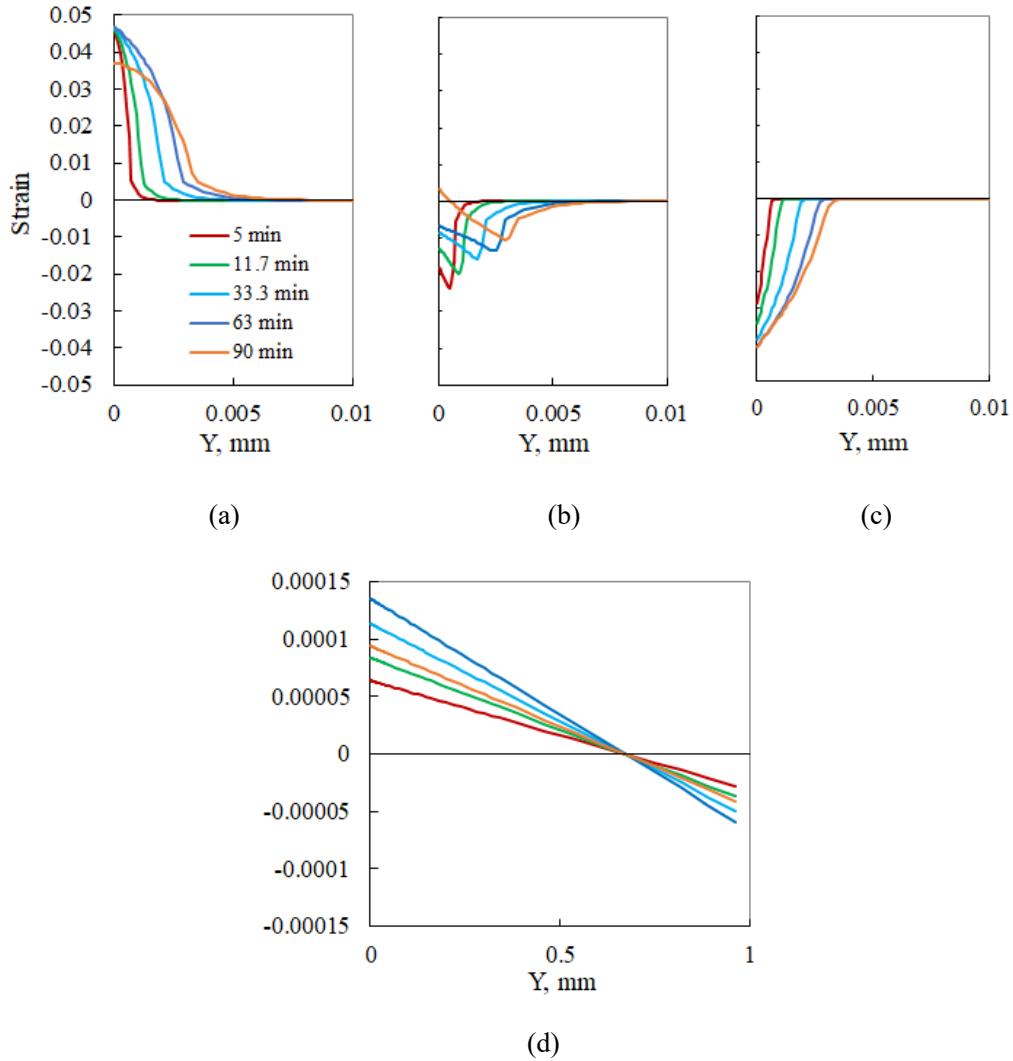


Figure 10 Simulated strain distribution changes (a) diffusion (b) elastic (c) creep (d) total



Distribution changes of elastic strain shown in Figure 10 (b) have a similar tendency to stress shown in Figure 9. Therefore, the behaviour of stress can be clarified by elastic strain changes, which are expressed by adding the diffusion strain and creep strain, based on the equilibrium condition expressed by equation (5), because the total strain is small. The decrease of curvature in absolute value from 63 to 90 min corresponds to the drop of a total strain gradient as shown in Figure 10 (d). This can be explained from increasing the width of the negative creep strain region as shown in Figure 10 (c) between 63 and 90 min.

図 10 (b) に示す弾性ひずみの分布の変化は、図 9 に示した応力の変化と類似した傾向を持つ。したがって、式 (5) の平衡条件に基づき、拡散ひずみとクリープひずみの加算で得られる弾性ひずみ（これは、全ひずみが小さいことで得られる）の変化により、応力の挙動を明らかにすることができる。曲率の絶対値の減少（63 min から

90 min) は、図 10 (d) に示される全ひずみ勾配の低下に対応している。これは、図 10 (c) に示されるように、63 min から 90 min の間に負のクリープひずみ領域の幅が増加したことによるものである。

## 5 Conclusions

The simulation tool MUSIMAP based on the finite element method has been expanded for analysing nitriding processes, and applied to the diffusion and stress/strain phenomena in nitrided austenitic stainless steels for the purpose of its verifications and validations. Obtained results from this research are summarised as follows:

窒化プロセス解析のために拡張された有限要素法に基づくシミュレーションツール MUSIMAP は、その検証と妥当性確認のために窒化処理中のオーステナイト系ステンレス鋼における拡散および応力/ひずみ現象に適用された。本研究で得られた結果を以下に要約する：

- the solubility product model, which was incorporated successfully in the finite difference method for the diffusion analysis, has come to be available in the software based on the finite element method

拡散解析のための有限差分法に成功裏に組み込まれていた溶解度積モデルが、有限要素法に基づくソフトウェアでも利用可能となった

- the distortion simulation for nitrided complex shaped parts, which has never been achieved by the finite difference method, has become possible

これまで有限差分法では実現できなかった窒化処理された複雑形状部品のゆがみシミュレーションが可能になった

- phenomena on distortions and residual stresses in nitrided stainless steels have been simulated, although few material characteristics data on the expanded austenite have been reported

ステンレス鋼の窒化におけるゆがみと残留応力現象のシミュレーションが、拡張オーステナイトに関する材料特性データがほとんど報告されていない状況で実施された

- an approach to explain the origin of distortion and residual stress in nitrided parts was shown by using the simulate results.

窒化部品のゆがみと残留応力のメカニズムをシミュレーション結果から説明するためのアプローチが示された。

MUSIMAP can be used not only for applying to practical problems but also explaining behaviours of nitriding processes. For example, phenomena which simultaneously arise in the compound layers and diffusion zones will be simulated with flexible modelling based on the finite element method.

MUSIMAP は、実践的な問題への適用だけでなく、窒化プロセスの挙動を説明するためにも使用できる。たとえば、化合物層と拡散層で同時に発生する現象のシミュレーションも、有限要素法に基づく柔軟なモデル化によって可能になるものと考ええる。

## References

- Arimoto, K., Horino, T., Ikuta, F., Jin, C., Tamura S. and Narazaki, M. (2006) 'Explanation of the origin of distortion and residual stress in water quenched cylinders using computer simulation', *Journal of ASTM International*, Vol. 3, Paper ID: JAI14204.
- Bathe, K.J. (1996) *Finite Element Procedures*, Prentice Hall.
- Bongartz, K., Quadackers, W.J., Schulten, R. and Nickel, H. (1989) 'A mathematical model describing carburization in multielement alloy systems', *Metall. Trans.*, Vol. 20A, pp.1021–1028.
- Christiansen, T. and Somers, M.A.J. (2004) 'Simultaneous determination of stress and composition profiles in expanded austenite obtained by low temperature gaseous thermochemical treatment of AISI 316', *Low Temperature Surface Hardening of Stainless Steel*, Ph.D. Thesis by Christiansen, T., Technical University of Denmark, pp.217–245.
- Christiansen, T. and Somers, M.A.J. (2006) 'Controlled dissolution of colossal quantities of nitrogen in stainless steel', *Metall. and Mater. Trans. A*, Vol. 37, pp.675–682.
- Christiansen, T., Dahl, K.V. and Somers, M.A.J. (2006) 'Simulation of nitrogen concentration depth profiles in low temperature nitrided stainless steel', *Defect and Diffusion Forum*, Vols. 258–260, pp.378–382.
- Crank, J. (1975) *The Mathematics of Diffusion*, 2nd ed., Clarendon Press.
- Date, E.H.F. (1969) 'Elastic properties of steels', *JISI*, Vol. 207, pp.988–991.
- Daves, W. and Fischer, F.D. (1994) 'Finite element simulation of the development of residual stresses during nitriding under consideration of the micromechanical and metallurgical processes', *Material Science Forum*, Vols. 163–165, pp.713–718.
- Grabke, H. J. (1994) 'Kinetics of gas – solid interactions', *Mater. Sci. Forum*, Vol. 154, pp.69–85.
- Kolozsvary, Z. (2002) 'Residual stresses in nitriding', in Totten, G.E., Howes, M. and Inoue, T. (Eds.): *Handbook of Residual Stress and Deformation of Steel*, ASM International, pp.209–219.
- Pearson, J. and Ende, U.J.C. (1953) 'The thermodynamics of metal nitrides and of nitrogen in iron and steel', *JISI*, September, pp.52–58.
- Rozendaal, H.C.F., Mittemeijer, E.J., Colijn P.F. and van der Schaaf, P.J. (1983) 'The development of nitrogen concentration profiles on nitriding iron', *Met. Trans. A.*, Vol. 14A, pp.395–399.
- Schacherl, R.E., Graat P.C.J. and Mittemeijer, E.J. (2004) 'The nitriding kinetics of iron–chromium alloys, the role of excess nitrogen: experiments and modelling', *Metall. and Mater. Trans.*, Vol. 35A, pp.3387–3398.

- Sienz, S., Mandl, S. and Rauschenbach, B. (2002) 'In situ stress measurements during low-energy nitriding of stainless steel', *Surface & Coatings Technology*, Vol. 156, pp.185–189.
- Sun, Y. and Bell, T. (1997) 'A numerical model of plasma nitriding of low alloy steels', *Materials Science and Engineering*, Vol. A224, pp.33–47.