

## JMatPro를 이용한 공정해석에서의 물성계산

이경훈<sup>1</sup>· 강경필<sup>#</sup>

### Calculation of Material Properties with JMatPro for the Process Simulation

Kyunghoon Lee, Gyeongpil Kang

#### Abstract

Process simulation requires accurate and reliable data for a wide variety of material properties, ranging from thermal conductivity to flow stress curves. Traditionally such data are gathered from experimental sources, which has significant disadvantages in that not all of the required data is readily available, it may be from various sources that are themselves inconsistent, measurement of high temperature properties is expensive, and furthermore the properties can be sensitive to microstructure as well as to alloy composition. This article describes the development of a new multi-platform software program called *JMatPro*, which is based on CALPHAD methodology, for calculating the properties and behavior of multi-component alloys. A feature of the *JMatPro* is that the calculations are based on sound physical principles rather than purely statistical methods. Thus, many of the shortcomings of methods such as regression analysis can be overcome.

**Key Words:** JMatPro, Process Simulation, Material Properties, CALPHAD

#### 1. 서 론

물성 데이터는 유한요소법/유한차분법을 이용한 공정해석에 있어 중요한 입력값이다. 공정해석에 필요한 물성 데이터는 열전도도와 열용량 같은 열물성, 탄성/소성영역에서의 기계적 성질, TTT/CCT 곡선 등을 포함한다. 이러한 물성은 상온에서는 측정이 용이하지만, 고온에서는 정확히 측정하기도 어렵고 고가인 실험장비의 가용성 여부도 문제된다. Thermo-Calc 등 CALPHAD 방법론에 기반한 열역학 계산프로그램은 최근에는 컴퓨터의 비약적인 발전에 따라 수십 개의 합금원소, 수십 개의 상에 대한 계산이 가능한 단계에 이르렀으나, 엔지니어/연구원들이 필요한 물성을 직접적으로 구해주지는 못하고, 추가적인 실험에 의하거나 경험에 기반한 정성적인 예측이 가능할 뿐이다. 이러한 재료 물성 확보의 어려움

을 극복하고 공정해석을 위한 신뢰성 있고 경제적이며 쉽게 계산이 가능하도록, 기존 열역학계산 프로그램의 영역을 확장하는 컴퓨터에 기반한 물성계산 프로그램으로 *JMatPro* 가 탄생하였다[1].

개발 역사를 살펴보면 Alstom Tech., Rolls-Royes, Siemens Westinghouse Power Corporation, United Technologies Research Center 등 유수의 회사와 기관이 컨소시엄을 이루어 물성 모델링에 대한 프로젝트를 성공적으로 수행하였고, *JMatPro* 는 그 결과물로서 영국에 근거지를 둔 Sente Software 사 (<http://www.sentesoftware.co.uk>)에서 상업적 상품으로 출시된 것이다. *JMatPro* 는 다원계 합금을 대상으로 하며, 평형/비평형 구조를 예측하기 위한 열역학적 데이터베이스 구축을 시작으로 하여 다양한 물리적/역학적 물성(physical and mechanical properties)을 계산할 수 있는 소프트웨어로 확장되었고, 통계적 방법이 아닌 물리적 원리에 근거한 프로그램이라 할 수 있다.

1. 주) 마케팅랩

# 교신저자: 주) 마케팅랩, E-mail: kkpil@deform.co.kr

## 2. JMatPro를 통한 물성계산

### 2.1 안정/준안정 평형상태의 계산

안정/준안정 상평형을 정확히 계산하는 것은 물성에 대한 모델식을 세우는데 있어 가장 중요한 요소중 하나이다. 기본 접근 원리를 설명하자면 관심있는 상들에 대한 열역학적 성질들이 수치적으로 정의되고, 기브스 자유 에너지(Gibbs free energy)의 최소화를 통해 상평형을 계산할 수 있게 된다[2]. JMatPro는 H.L. Lukas(MPI Stuttgart)에 의해 개발된 PMLFKT라는 열역학 계산 엔진을 확장한 EQLib라는 엔진으로 계산을 수행한다.

결과로는 온도별/원소농도별 상분율, 기브스에너지, 엔탈피, 엔트로피 등 열역학적 물성을 볼 수 있다.

### 2.2 응고과정계산

주조공정의 전산모사를 위해서는 고상분율, 엔탈피 변화, 열전도도, 밀도, 비열 등이 필요하며 모두 온도에 대한 함수로 주어져야 하지만, 다원합금계에 있어서는 실험을 통해 정확한 물성을 얻는 데는 많은 어려움이 있다.

JMatPro는 열역학적 계산 결과를 이용하여, 다원합금계에 대해서도 적용이 가능한 물성계산 모델식을 포함하고 있다. 기본적으로 고상에서는 역확산(back diffusion)이 발생하지 않는 것으로 가정하는 Scheil-Gulliver 모델을 사용하며, Fe 합금에서는 고상에서도 C, N의 확산이 이루어지도록 수정된 모델을 사용하고 있어 빠른 계산이 가능하다 [3].

### 2.3 물리적/열물리적 물성치 계산

물성 계산은 상평형을 계산하는 방법과 유사한 형태로 이루어진다. 식 1은 다원합금계의 임의의 상에 대한 물성을 구하는 방법을 나타낸다.

$$P = \sum_i x_i P_i^0 + \sum_i \sum_{j>i} x_i x_j \sum_v \Omega_{ij}^v (x_i - x_j)^v \quad (1)$$

여기서  $P$ 는 상의 물성,  $P_i^0$ 는 순수한 원소의 물성,  $\Omega_{ij}^v$ 는 이원상관계수(binary interaction parameter)이고,  $x_i, x_j$ 는 각 원소의 몰분율을 나타낸다.  $P_i^0$ 와  $\Omega_{ij}^v$ 는 온도에 따라 달라진다[4].

각 상의 물성이 계산된 이후에는, 열역학 계산 결과인 상분율에 따라 혼합법칙(mixture rule)을 적용하여 전체로서의 물성이 계산된다.

### 2.4 상변태 계산

TTT/CCT 선도에 대한 정보는 열처리공정에 있어 중요한 요소이나 다원합금에 대해서는 조성성분의 미세한 변화와 결정립의 크기 등에 민감하게 선도가 바뀌기 때문에 실험적으로는 일반적으로 사용되는 선도를 결정하는 것이 거의 불가능하다. 이러한 난점을 극복하기 위해 다양한 모델식이 제안되었으나, 재질이나 조성범위에 있어 매우 제한적인 영역에서만 사용할 수 있었다.

JMatPro에서 TTT/CCT 선도 계산은 Kirkaldy 모델[5]을, 마텐사이트 변태온도에 대해서는 Andrew의 식[6]을 기본으로 하며, 다원소 합금에 대해서도 신뢰성 있는 결과를 제시할 수 있도록 모델식의 수정과 데이터베이스 작성 작업이 이루어졌다 [7]. 선도를 결정하는 과정을 보면 우선적으로 각각의 상에 대한 변태온도 계산, 각 상의 조성, 구동력(driving force) 등이 JMatPro 자체 내에서 계산되거나 데이터베이스에서 정보를 가져온다. 이를 수정된 Kirkaldy 식에 입력하여 온도와 시간에 따른 변태량을 계산하게 되고 이를 통해 선도를 얻게 된다.

TTT/CCT 선도에 대한 계산이 가능해짐으로써 퀼칭(quenching)시의 상변태와 물성의 변화도 예측할 수 있게 되었다. 냉각속도에 따라 상변태 메커니즘이 변화하는 것을 확인할 수 있고, 재질 전체로서의 물성뿐 아니라 각 상에 대한 물성 즉, 각 상의 항복강도, 탄성계수, 열전도도, 열용량, 밀도, 엔탈피 변화, 조미니 경도 등의 계산도 가능하다 [8].

### 2.5 기계적 물성치 계산

고온에서의 기계적 물성, 특히 유동응력에 대한 정보는 성형공정에 있어 중요한 요소이다. 온도 및 변형률 속도에 따라 그리고 결정립의 크기에 따라 달라지는 유동응력을 실험적으로 구하는 것은 많은 비용이 요구된다. JMatPro에는 고용체 경화, Hall-Petch 관계식, 그리고 Ni 계 초합금 등에는 석출경화에 대한 모델식이 포함되어 기계적 성질이 고려되고 있다. 일반적으로 고온에서의 거동은 변형률속도에 민감한 크립에 의해 좌우되는데, JMatPro에는 상온에서의 강도가 점진적으로 감소하는 영역과 크립에 의해 영향을 받는 영역이 통합되어 고려됨으로써 시험결과와 유사한 결과를 산출하고 있다.

### 3. 물성 계산 예제

동일한 스펙의 재질(예: 316L)이면서도 문헌과 문헌 또는 실험간에도 일관되지 않는 물성값을 가지는 경우가 있다. 이는 근본적으로 스펙에서 지정된 범위내에서 조성의 차이가 있기 때문인 경우가 많다. Fig. 1은 ADC12에 대해 지정된 조성 범위에서 각 원소의 최대치(HS)와 최소치(LS)를 취한 경우 JMatPro를 통해 계산한 고상분율(fraction solid transformed)을 보여주고 있다. 560 °C 근처에서 HS 합금은 고상분율이 40%가 안되지만 LS 합금은 80%가 넘게 나타나고 있다[9]. 이러한 물성값의 차이를 가지고 응고해석을 하는 경우 결함이 발생할 가능성이 높은 열점(Hot spot)의 분포가 달라지게 된다.

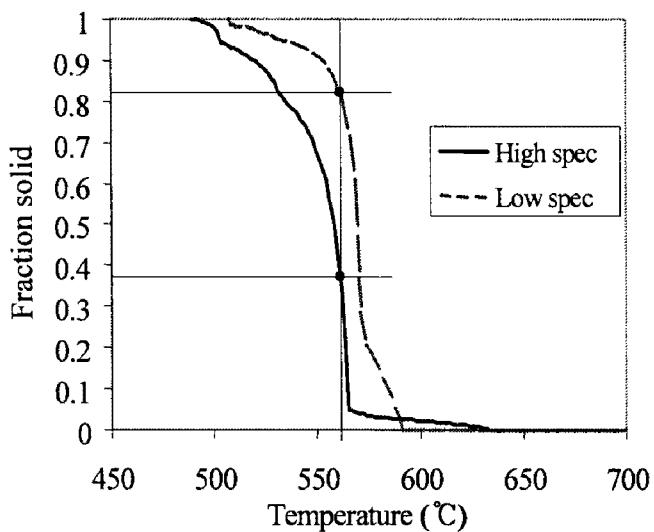


Fig. 1 Comparison of fraction solid between high and low specification of ADC12 aluminum alloy.

온도를 상승시키며 인장/압축 시험시 변형율속도가 크리프율(creep rate)보다 같거나 낮은 경우에는 크립에 의해 항복이 일어나게 된다. Fig. 2 는 고용체 합금(Nimonic 75)과  $\gamma'$ 에 의한 석출경화가 일어나는 합금(Nimonic 105)을 비교하여 보여주고 있다. JMatPro 의 계산결과는 급격히 연화가 시작되는 지점을 정확히 예측할 수 있음을 보여주고 있다. 또한 Nimonic 105 의 경우 크립이 지배하는 영역에서는  $\gamma'$ 이 점진적으로 제거됨으로써 연화되며, 1025 도 이상에서는  $\gamma$ 상만이 존재하는 고용체가 됨을 보여주고 있다[4].

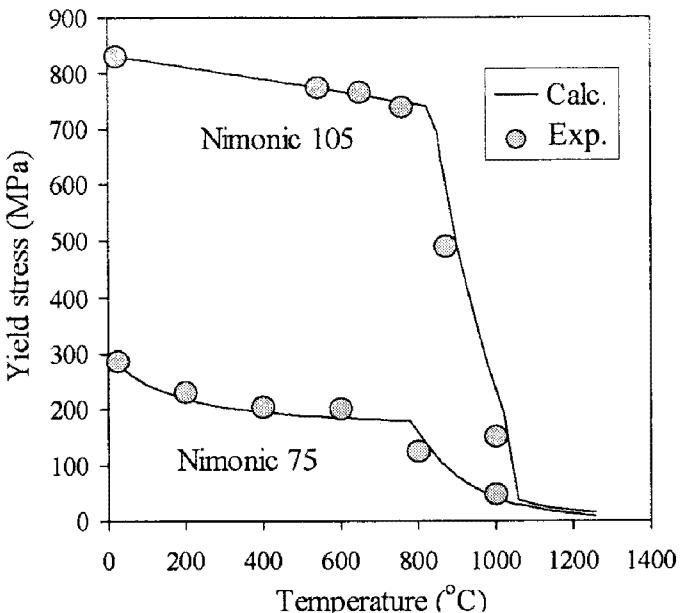


Fig. 2 Comparison of yield stress between experiment and calculation for Nimonic 75 and 105 as a function of temperature

Fig. 3은 여러 종류의 Ti 합금에 대해 유동응력에 대한 실험결과와 계산결과를 비교하여 보여주고 있다.

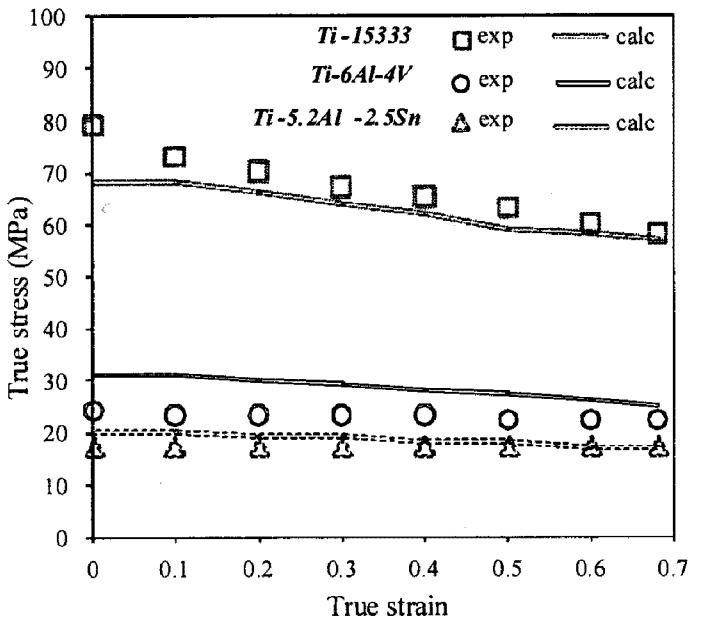
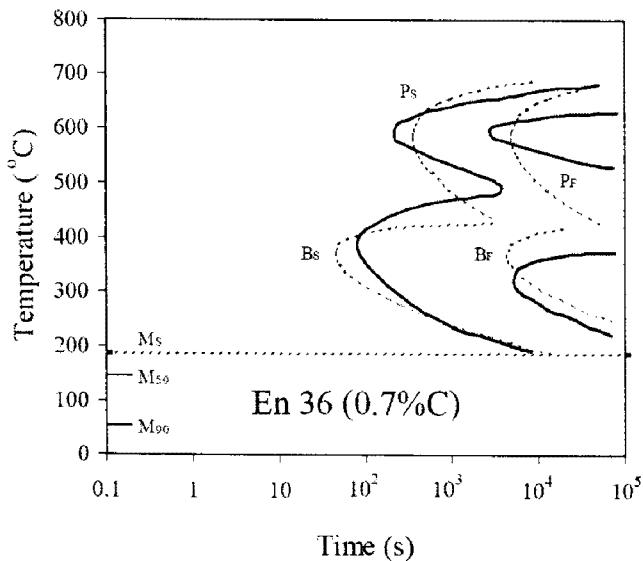


Fig. 3 Comparison of stress/strain curves between experiment and calculation for various Ti-alloys at 1093°C and  $d\varepsilon/dt = 0.1$

니켈크롬계 스틸인 En 36 의 경우 TTT 선도에 대한 실험결과[10]와 계산결과를 Fig. 4 에 비교하였다.



**Fig. 4 Comparison between experimental[10] (bold lines) and calculated TTT diagram(dashed lines) for a En36 carburised composition Fe-0.7C-0.35Mn-0.16Si-3.24Ni-0.96Cr-0.06Mo**

#### 4. 결 론

JMatPro 는 순수한 통계적 방법이 아니라 CALPHAD 법에 기반한 물성계산 소프트웨어로서 다원합금재료를 대상으로 하며, 다음과 같은 특징을 가지고 있다.

(1) 온도/조성에 따른 상분율 계산과 열역학적 성질을 계산한다.

(2) 응고과정, 퀘칭시의 여러 물성 즉, 고상분율, 점도, 열전도도, 밀도, 열용량, 확산계수, 탄성계수, 항복강도 등을 계산하고, 조미니 경도를 예측할 수 있다.

(3) 상변태와 관련하여 TTT/CCT 선도를 계산 할 수 있다.

(4) 고온에서의 기계적 성질과 관련하여, 크립, 고온강도 및 변형율속도/온도에 따른 유동응력곡선을 계산한다.

(5) 적용 가능한 재질은 Al 합금, Zr 합금, Mg 합금, Fe 합금, Ti 합금, Ni 계 초합금(superalloy), Solder 합금이 있다.

#### 참 고 문 헌

- [1] N. Saunders, Z. Guo, X. Li, A. P. Miodownik and J.-Ph. Schillé, 2003, Using JMatPro to Model Materials Properties and Behavior, *JOM* Dec. 2003, pp. 60~65
- [2] N. Saunders, Modelling of Phase Equilibria in Ti-alloys, 1996, *Titanium '95: Science and Technology* (Institute of Materials, London 1996), p. 2167
- [3] N. Saunders, X. Li, A. P. Miodownik and J.-Ph. Schillé, 2003, Modelling of the Thermo-Physical and Physical Properties Relevant to Solidification, *Advanced Solidification processes X* eds: D. Stefanescu, J.A. Warren, M.R. Jolly and M.J.M Krane, TMS Warrendale PA, pp. 669~676
- [4] N. Saunders, 2004, X. Li, A. P. Miodownik and J.-Ph. Schillé, Modelling the materials properties and behaviour of Ni-based superalloys, *Superalloys 2004*, pp.849~858
- [5] J.S. KIRKALDY and D.VENUGOPALAN, 1984, *Phase Transformations in Ferrous Alloys*, eds. A.R. MARDER and J.I. GOLDSTEIN, AIME, p. 125
- [6] K.W. Andrews, 1965, *J. Iron & Steel. Inst.*, 183, p. 721
- [7] N. Saunders and A.P. Miodownik, 1998, *CALPHAD – Calculation of Phase Diagrams*, *Pergamon Materials Series vol.1*, ed. R.W. Cahn (Oxford: Elsevier Science, 1998)
- [8] Z. Guo, J.-Ph. Schillé, N. Saunders and A. P. Miodownik, 2005, Modelling materials properties leading to the prediction of distortion during heat treatment of steels for automotive applications, *The 2nd International Conference on Heat Treatment and Surface Engineering in Automotive Applications*
- [9] Z. Guo, N. Saunders, A. P. Miodownik and J.-Ph. Schillé, 2005, Modelling Of Materials Properties And Behaviour Critical To Casting Simulation *Materials Science and Engineering A*, pp. 465~469
- [10] The Iron and Steel Institute, 1956, *Atlas of Isothermal Transformation Diagrams of BS En Steels*, Special report No.56