

■■■■■■■■■■
技術資料
■■■■■■■■■■

응고조직의 전산모사

홍준표 · 신윤희 · 朱鳴芳

Computer Simulation of Solidification Structures

Chun-Pyo Hong, Yun-Ho Shin and Mingfang Zhu

1. 서 론

응고조직의 예측은 상변태, 결정학, 성장속도론 등이 복합적으로 연관되어 있는 학문 분야이며, 주조품의 성능 예측에 유용한 도구로서 기술적으로도 매우 중요한 분야이다. 그림 1과 같이, 주조조직은 수축공, 균열, 거시편석 등을 포함하는 거시조직과 주상정, 등축정, 수지상정, 미시편석 등을 포함하는 미시조직으로 크게 구분할 수 있으며, 이 중에서도 수지상정의 성장은 주조조직과 주조품의 기계적 특성에 직접적으로 관련되는 주조합금의 중요한 응고현상 중에 하나이다. 그럼에도 불구하고, 수지상정 성장이 가지는 복잡성 때문에, 아직도 충분히 규명되지 못하고 있으며, 앞으로 보다 많은 연구가 요구되는 분야이다.

지난 십수년간, 이러한 수지상 성장을 해석하기 위해 실험적인 연구는 물론 많은 해석적 모델과 수치적 모델들이 개발되었다. 실험적인 연구 중에서는 Glicksman 등에 의해 이루어진 투명한 재료에서 수지상 형상을 관찰한 것이 대표적이다[1,2]. 해석적인 모델로는 KGT 모델과 LKT 모델과 같은 수지상의 성장 속도론에 관련된 연구들을 예로 들 수 있다[3,4]. 수지상 형상과 미시편석의 양상을 모사하기 위한 PFM(phase field method), spline mathematics approaches와 같은 결정론적인 기법(deterministic techniques)[5-9], 그리고 수지상정의 발생과 성장을 모사하기 위한 MC(Monte Carlo)법과 CA(Cellular Automata)법과 같은 확률론적/추계학적 기법(probabilistic/stochastic techniques) [10-13] 등이 여기에 포함된다. 일반적으로, PFM은 주

로 미시적인 수지상의 형상을 해석하는데 적용하고 있으며, 주조조직과 같은 결정립 조직을 예측하기 위해서는 CAFE법[14-24], CA-FD법[25-26], CA-FVM법[27-33]과 같이 거시적인 열전달 해석법과 CA 기법을 연계한 방법들을 적용하였다.

최근 Ditley[34-36] 등은 MCA(Modified Cellular Automata)법을 이용하여 수지상의 형상을 모사하였으며, Nastac[37-41] 등도 역시 MCA법으로 수지상의 형상을 포함하여 응고조직을 모사하였다. 이들 연구들은 계면 장력에 의한 Gibbs-Thomson 효과와 용질확산을 CA 기법과 연계하여 수지상의 형상과 수지상을 포함하는 주조조직의 모사에 적용하였다. 따라서, 그림 2와 같이, MCA법은 기존의 CA 기법을 개량해 그 적용범위를 확장한 방법이라 할 수 있다.

그러나, 기존의 MCA법들은 PFM법에 비해 계산시간이 현저히 짧다는 장점에도 불구하고, 그 엄밀성에서 제약이 많다는 단점이 있다. 따라서, 본 연구진에서는 기존의 MCA법을 더욱 개선하여 보다 세밀한 계산이

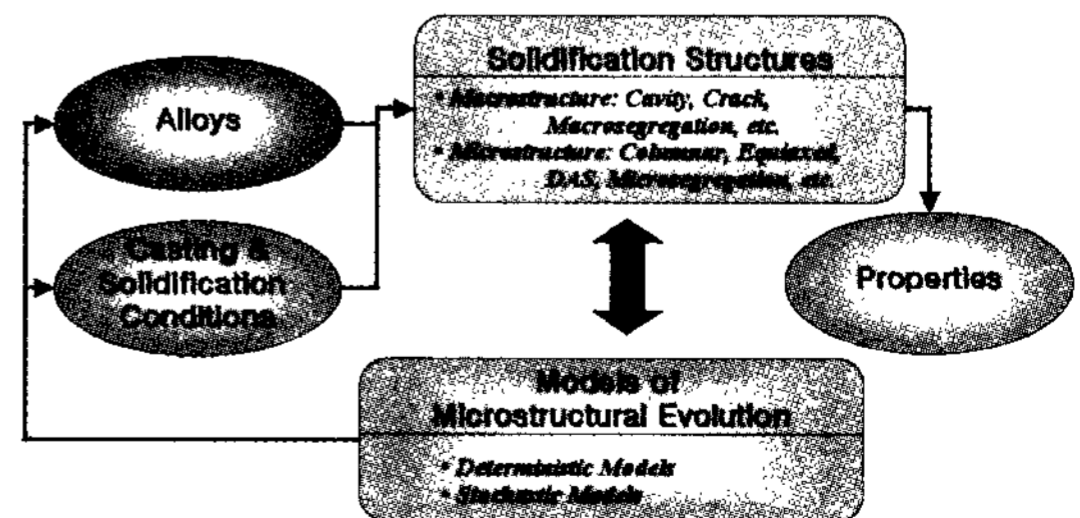


그림 1. 응고조직 예측의 필요성

연세대학교 전산응용재료공정연구센터(Center for Computer-Aided Materials Processing (CAMP), Yonsei University)
"본 기술자료는 2000년도 하계기술강연대회에서 발표된 내용임"

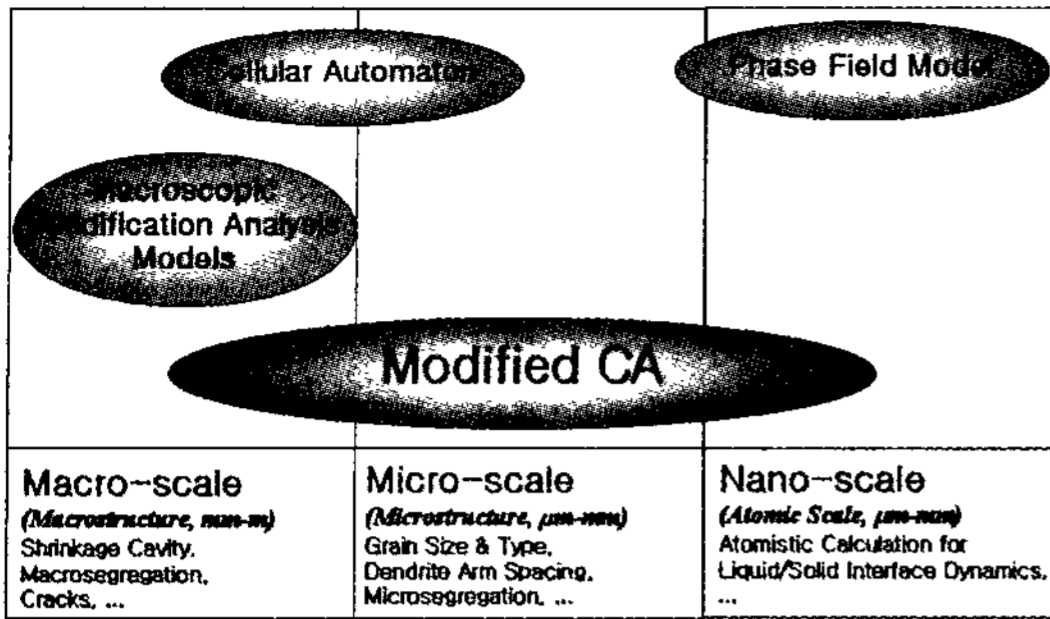


그림 2. 주조/응고 조직 예측 모델의 적용 범위

가능한 MCA법을 개발하였다. 본 MCA법은 KGT 모델 혹은 LKT 모델 등과 같은 성장속도론에 기반을 두고있으며, 간단하면서도 효과적으로 계면곡률을 반영하고 있다. 또한, 엔탈피법과 연속체 모델을 기반으로 응고과정을 포함한 열전달은 물론 용질의 확산을 해석한다

2. Modified CA법

그림 3과 같이 MCA법은 CA법을 개량한 것으로, 고상률을 포함한 용질 확산은 물론 이웃 셀과의 기하학적 관계, 고상 변태가 진행되는 방향 등을 보다 정확히 고려하고 있다. 따라서, 수치상정의 계산과 같이 보다 미세적인 영역까지 CA법의 적용범위를 확장할 수 있다. 본 연구진에서 개발한 MCA법의 구체적인 내용은 다음과 같다.

(1) 온도장과 농도장의 계산 (Calculation of the Temperature and Concentration fields)

고상과 액상의 비열이 상수라면, 열전달의 기본 방정식은 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$\frac{\partial CT}{\partial t} = \nabla^2(kT) \quad (1)$$

$$H = CT$$

여기서, C는 단위부피당 비열(volumetric specific heat), k는 열전도도이며, T는 보정된 온도이다. 이 온도는 다음과 같이 정의한다.

$$T = T - T^0 \quad (3)$$

$$T^0 T_f^p - \frac{\Delta H_f^p}{C_L - C_S} \quad (4)$$

이때, T_f^p 는 순금속의 용점, ΔH_f^p 는 순금속의 응고 잠열, 그리로 T^0 는 기준온도이다.

고상과 액상의 활동도계수가 상수라면, 화학적 활동도(chemical activity, a)를 고려하여 용질확산의 지배방정식을 열전달과 같은 형태로 정리할 수 있다.

$$\frac{\partial Ma}{\partial t} = \nabla^2(D'a) \quad (5)$$

여기서 M은 비용질(specific solute), D'는 보정된 확산계수이다. 비용질과 보정된 확산계수는 다음과 같이 정의한다.

$$X = Ma \quad (6)$$

$$D' = MD \quad (7)$$

이러한 용질 확산 해석법을 이용할 경우, 기존의 MCA법과는 달리, 계면요소에서 별도로 액상 농도를 구할 필요가 없다. 본 MCA법은 고상과 액상 그리고 계면 요소에서 같은 지배방정식에 의해 전달현상을 해석하고, 다음과 같이 연속체 모델에 의해 단위부피당 비열이나 비용질을 보정하고 있다.

$$M = f^S M_S + (1 - f^S) M_L \quad (8)$$

$$C = f^S C_S + (1 - f^S) C_L \quad (9)$$

여기서 f^S 는 고상률이다.

(2) Time step의 계산(Calculation of the Time Step)

양적해법의 안정성(stability of the explicit method)과 결정 성장속도의 최대값(maximum crystal growth velocity, v_{max})을 고려하여 다음과 같이 time step(Δt)

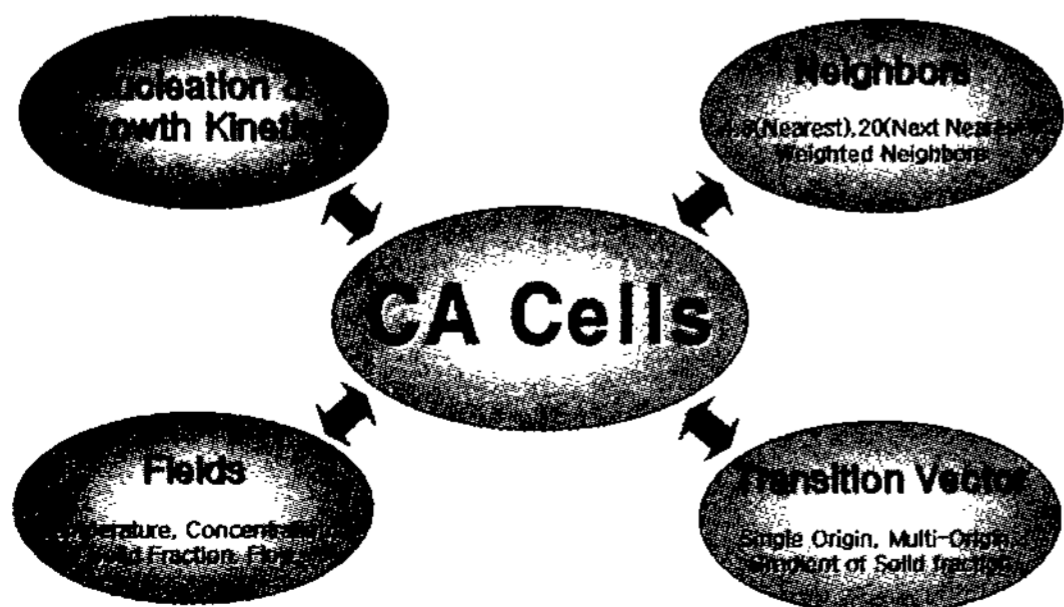


그림 3 Modified CA 법의 개념

을 구하였다.

$$\Delta t = \frac{1}{5} \min\left(\frac{l_c}{2v_{max}}, \frac{l_c^2}{D_L}, \frac{l_c^2}{D_S}\right) \quad (10)$$

이때, l_c 는 CA 격자의 크기이다. 이 식은 농도장 (concentration field)을 양적으로 계산할 경우 고려해야 하는 안정조건뿐만 아니라, 양적인 고액 계면 추적 방법을 적용할 경우 고려해야 하는 조건(변태가 일어난 모든 요소에 고액 계면이 계산과정에서 한번 이상 머물러야 한다.)을 만족시킨다.

(3) 고액 계면의 곡률 계산(Calculation of the S/L Interface Curvature)

이웃하는 8개의 인접요소를 고려하여, 평균 계면 곡률(mean interface curvature) 다음과 같이 정의 하였다.

$$\kappa_{i,j} = \frac{\sqrt{\pi}}{l_c} \left(\frac{3(1 + f_{i,j}^S) + \sum_{m=-1}^1 \sum_{n=-1}^1 f_{i+m,j+n}^S}{5} \right) \quad (11)$$

이 식은 Dilthey와 Nastac이 제안한 식보다 간단한 형태이며 고려하고 있는 이웃요소의 수도 적지만, 주어진 셀의 고상률에 따라 계면곡률이 0이되는 평균 고상률(이웃 요소들의 고상률과 평균한 값)이 달라지는 격자의 기하학적 특성을 잘 반영하고 있다.

(4) 결정성장방위 계산 (Calculation of the Crystal Growth Direction)

그림 4와 같이, 기존의 CA법은 하나의 결정은 하나의 원점으로부터 성장 벡터를 구하고 있다. 따라서, 수지상 성장을 하는 결정의 기본 모양은 정사각형이며, 편석에 의해 일차 가치를 모사할 수는 있지만, 2차 이상의 가치는 모사할 수 없다. 그러나, 액상에 인접한 고상 모든 고상 셀을 원점으로 하거나 Nastac과 Dilthey와 같이 고상률의 구배로부터 성장벡터를 계산한다면, 2차 이상의 수지상 가치를 모사할 수 있다. 고상률의 구배로부터는 다음과 같이 성장방위를 구할 수 있다.

$$\vec{n} = (n^x, n^y) = -\nabla f^S \quad (12)$$

(5) 이방성의 계산(Calculation of the Anisotropy)

결정성장방위와 우선성장방위를 고려하여 결정 성장 속도가 다음과 같이 주어진다 가정하였다.

$$v = v_{tip}(1 - \delta(1 - \cos(4(\psi - \theta)))) \quad (13)$$

이때, ψ 는 우선성장방위각(angle of preferred orientation) θ 는 결정성장방위각(angle of crystal growth direction) 을 의미한다.

3. 자유 수지상 형상의 모사 (Simulation of Free Dendrite Morphology)

그림 5는 균열조건(isothermal condition)에서 자유 수지상정(free dendrite)의 형상을 모사한 이다. 결정성장방위는 고상률의 구배로부터 구하였고, 우선 성장방위를 기준으로 하는 결정 성장속도의 이방성을 고려하

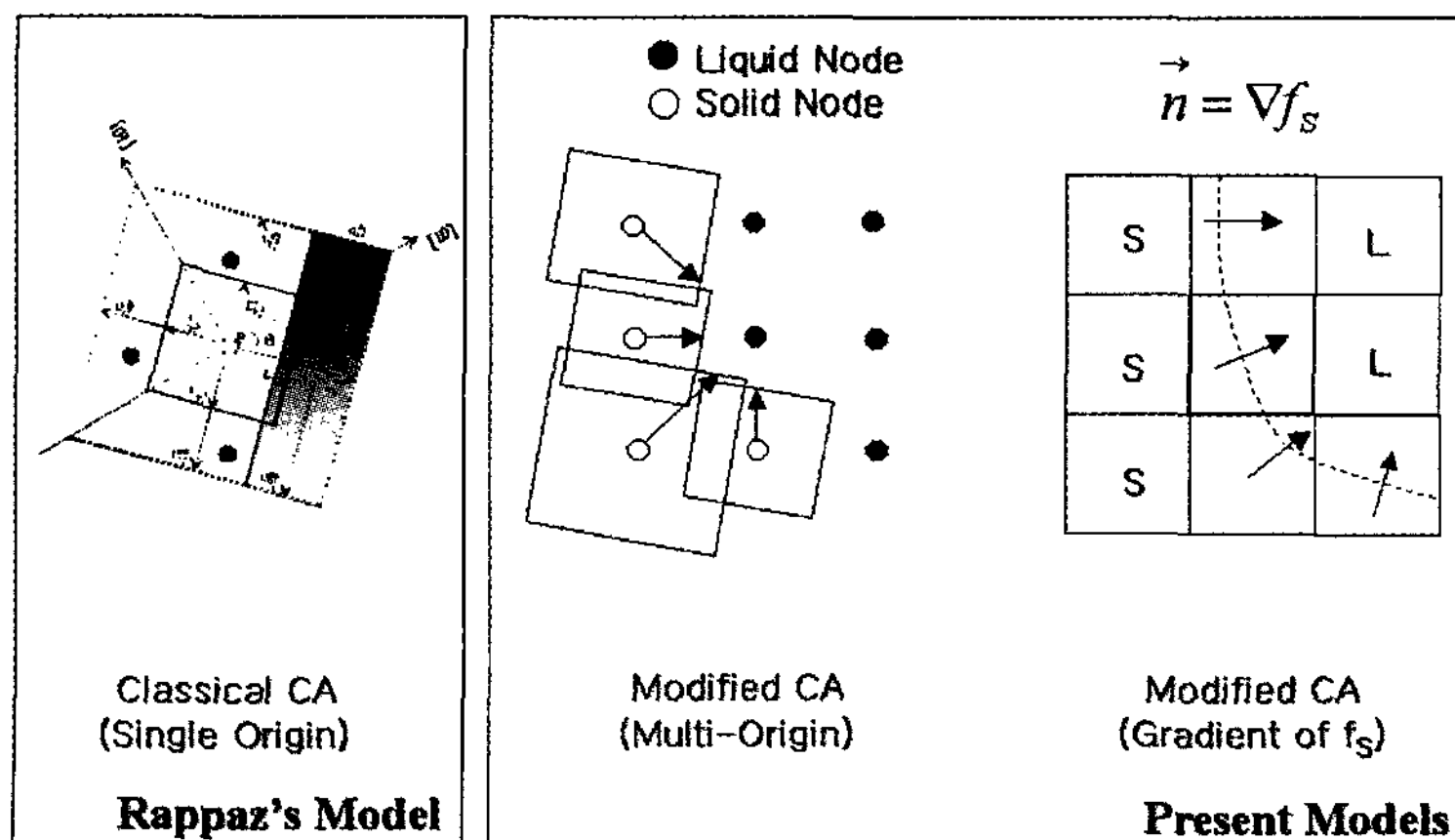


그림 4. 결정립 성장 방위

였다. 또한, 고/액 계면의 곡률을 계산하여 Gibbs-Thomson 효과를 반영하였다. 그리고, 결정성장속도는 LKT 모델에 기반을 두고 계산하였다.

그림 5와 같은 결과를 얻는데 필요한 계산시간이 30 분 정도로 PFM법보다 매우 빠르면서도, 2차 수지상 가지의 조대화나 수지상 주위의 용질분포가 잘 묘사되고 있는 것을 알 수 있다. 물론, 극미세한 수지상의 경우, 보다 엄격한 모델을 적용하고 있는 PFM이 유리하겠지만, 엔탈피법이나 연속체모델 등 수치적 안정성이 높은 방법들을 채택하고 있는 본 MCA법은 용질의 미시편석과 유동등이 관련될 경우 PFM 혹은 기존의 MCA법보다 효과적일 것으로 판단된다.

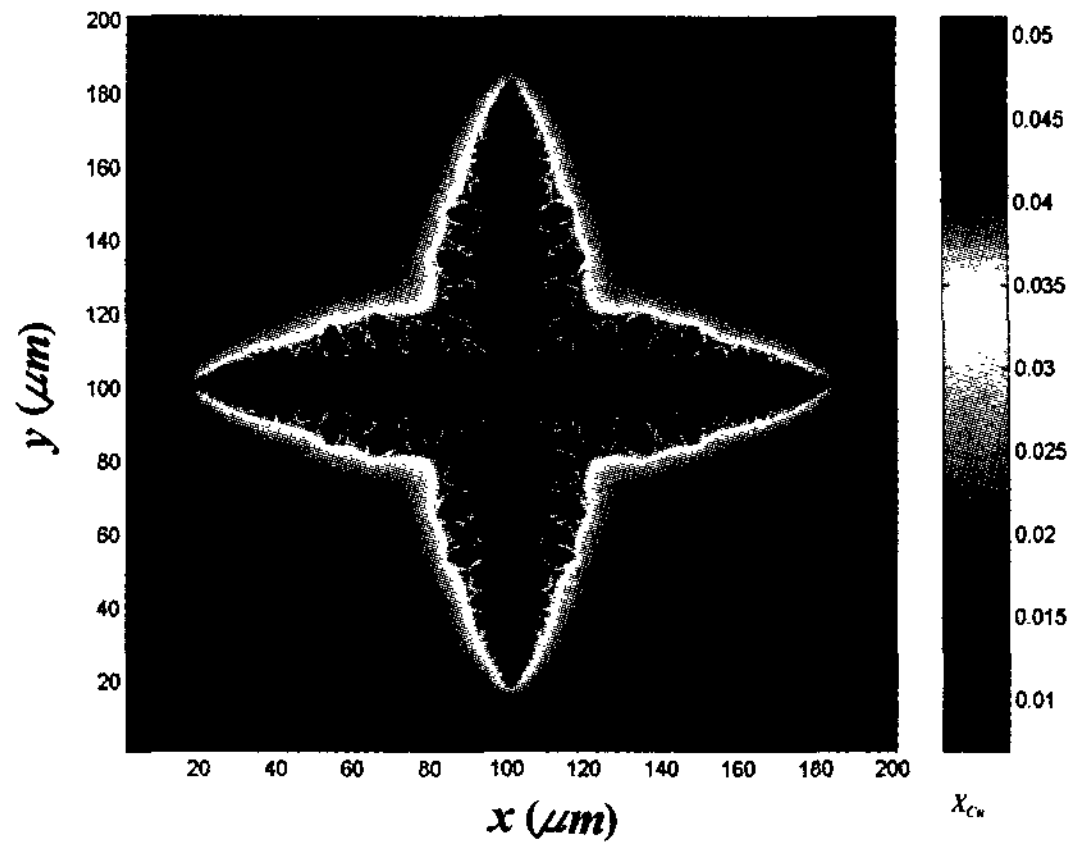


그림 5. 균열 자유 수지상 (Al-2 wt%Cu, $\Delta T=10^\circ\text{C}$, $200 \times 200 \mu\text{m}^2$)

4. 응고조직의 모사 (Simulation of Solidification Structure)

그림 6은 정방형 주물의 응고조직을 전산모사 한 것이다. 액상에 인접한 모든 고상 셀을 원점으로 하여 결정성장방위를 추적하였고, 결정성장속도는 KGT모델에 기반을 두고 계산하였다. 이 그림으로부터, 기존의 CA법이 주상정과 등축정 등의 일반적인 응고 조직을 모사하는데 비해, 본 MCA법은 수지상정을 포함하는 응고조직 예측이 가능함을 알 수 있다. 또한, 액상 내

핵생성에 의해 형성되는 수지상을 모사할 수 있다. 따라서, 수지상의 간격이나 미시편석등을 해석하여 주조품의 물성을 예측하는데 본 MCA법이 적합할 것으로 생각된다.

5. 결 론

본 MCA법은 용질의 미시편석과 계면곡률의 효과를 포함한 결정 성장 모사가 가능하다. 또한, 기존의

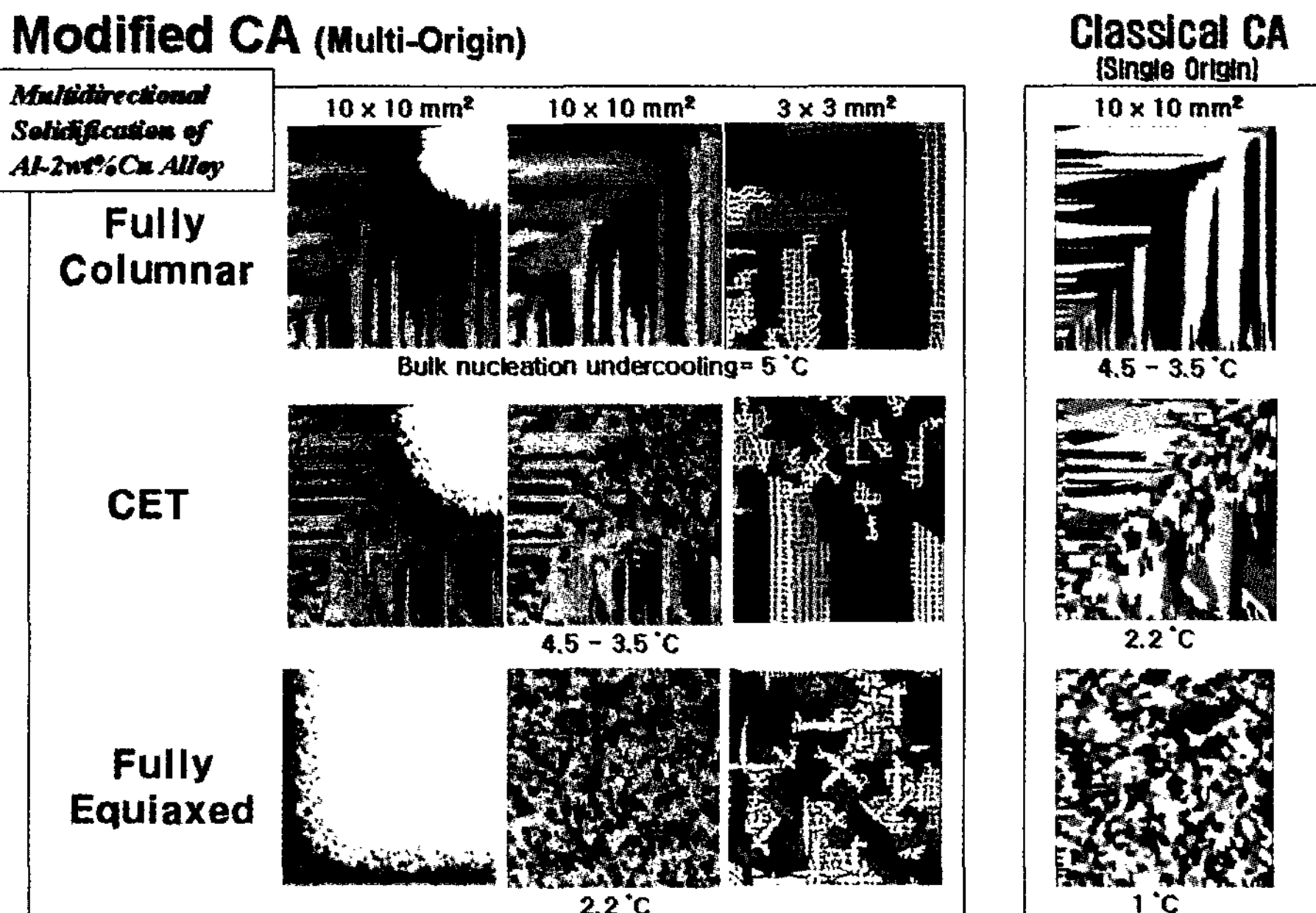


그림 6. 정방형 주물의 응고조직

PFM으로 모사하였던 수지상 형상을 보다 짧은 계산시간에 해석할 수 있으므로, 수지상 성장에 대한 기본적인 연구에 유용하다고 판단된다. 물론, 극미세한 수지상 성장에 대한 해석은 엄격한 이론을 적용하고 있는 PFM법이 유리할 것이다. 그러나, 용질 확산과 유동을 포함한 수지상 성장은 수치적 안정성이 상대적으로 높은 본 MCA법으로 해석하는 것이 보다 효과적일 것으로 판단된다. 또한, CA법 혹은 기존의 MCA법보다 세밀한 결정립 형상을 모사할 수 있으므로, 주조공정에 따른 응고조직과 주조품의 물성 예측에 적합한 방법이라 생각된다.

참고문헌

- [1] M.E. Glicksman, E. Winsa, R.C. Hahn, T.A. Lograsso, S.H. Tirmizi and M.E. Selleck: Metall. Trans. A, 18A(1987) 1945
- [2] M.A. Chopra, M.E. Glicksman and M.B. Singh: Metall. Trans. A, 19A(1988) 3087.
- [3] J. Lipton, M.E. Glicksman and W. Kurz: Metall. Trans. A, 18A(1987) 341.
- [4] W. Kurz and D.J. Fisher: Fundamentals of Solidification, 3rd ed., Trans Tech Publications, Switzerland (1989)
- [5] A.A. Wheeler, W.J. Boettinger and G.B. McFadden: Phys. Rev. A, 45(1992) 7424
- [6] A.A. Wheeler, B.T. Murray and R.J. Schaefer: Physica. D, 66(1993) 243
- [7] S.L. Wang et al.: Physica. D, 69(1993) 189
- [8] J.A. Warren and W.J. Boettinger: Acta Met., 43 (1995) 689
- [9] S.G. Kim, W.T. Kim and T. Suzuki: Physical Review E, 60(1999) 7186
- [10] J. Srolovitz, G.S. Grest and M.P. Anderson: Acta Met., 34(1986) 1833
- [11] J.A. Spittle and S.R. Brown: Acta Met., 37(1989) 1803
- [12] B. Radhakrishnan and I.R. Gobel: Acta Met., 39(1991) 2135
- [13] G.S. Grest, M.P. Anderson and D.J. Srolovitz: Phys. Rev. B, 38(1988) 4752
- [14] Ch.A. Gandin and M. Rappaz: Acta Mat., 45(1997) 2187
- [15] Ch.A. Gandin and M. Rappaz: Acta Met., 42(1994), 2233
- [16] Ch.A. Gandin, M. Rappaz and R. Tintillier: Met. Trans. A, 25A(1994) 629
- [17] Ch.A. Gandin, M. Rappaz and R. Tintillier, Met. Trans. A, 24A(1993) 467
- [18] Ch.A. Gandin, M. Rappaz, D. West and B.L. Adams: Met. Trans. A, 26A(1995) 1543
- [19] Ch.A. Gandin, R.J. Schaefer and M. Rappaz: Acta Mat., 44(1996) 3339
- [20] Ch.A. Gandin, T. Jalanti and M. Rappaz, Proceedings of the Modeling of Casting, Welding and Advance Solidification Processes-VIII, Eds. B.G. Thomas and C. Beckermann, TMS, San Diego, California, (1998) 363.
- [21] M Rappaz, Ch. Charbon and R. Sasikumar: Acta Met. Mat. 42 (1994) 2365-74
- [22] M. Rappaz and Ch.A. Gandin: Acta Met., 41(1993) 345
- [23] M. Rappaz and Ph. Thevoz: Acta Met., 35(1987) 2929
- [24] Ph. Thevoz, J.L. Desbiolles and M. Rappaz: Metall. Trans. 20(1989) 311
- [25] S.G.R. Brown, T. Williams and J.A. Spittle: Acta Met., 42(1994) 2893
- [26] R. Sasikumar and R. Sreenivasan: Acta Met. 42(1994) 2381
- [27] J.Y. Ahn and C.P. Hong, Proceedings of Modeling of Casting and Solidification Processes 1995, Eds. E. Niyama and H. Kodama, Hitachi, (1995) 107
- [28] J.Y. Ahn, K.Y. Lee, S.M. Lee and C.P. Hong, Proceedings of the Conf. On Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes, TMS, Warrendale, PA (1995), p. 687
- [29] K.Y. Lee and C.P. Hong: ISIJ Int., 35(1996), p. 637
- [30] Y.H. Chang, S.M. Lee, K.Y. Lee and C.P. Hong: Proc. 3rd Pacific Rim Int. Conf. on Modeling of Casting and Solidification Processes, Eds. B.C. Liu and T. Jing, International Academic Publishers, Beijing, (1996) 216
- [31] I.S. Cho and C.P. Hong: ISIJ Int., 37(1997) 38
- [32] Y.S. Chang, S.M. Lee, K.Y. Lee and C.P. Hong: ISIJ Int., 38(1998) 97
- [33] S.Y. Lee, S.M. Lee and C.P. Hong: ISIJ Int., 40(2000) 48
- [34] U. Diltthey and V. Pavlik, Proceedings of the Modeling of Casting: Welding and Advance Solidification Processes-VIII, Eds. B.G. Thomas and C. Beckermann, TMS, San Diego, California, (1998) 589.
- [35] U. Diltthey, V. Pavlik and T. Reichel: Mathematical Modeling of Weld Phenomena 3, Eds. H. Cerjak and H.K.D.H. Bhadeshia, The Institute of Materials, London, (1997) 85
- [36] U. Diltthey, T. Reichel and V. Pavlik: Mathematical Modeling of Weld Phenomena 3, Eds. H. Cerjak and H.K.D.H. Bhadeshia, The Institute of Materials, London, (1997) 106
- [37] L. Nastac and D.M. Stefanescu: AFS Trans. (1996) 425.
- [38] L. Nastac and D.M. Stefanescu: Met Trans. A, 27A(1996) 4061
- [39] L. Nastac and D.M. Stefanescu: Met Trans. A, 27A(1996) 4075
- [40] L. Nastac and D.M. Stefanescu: Met Trans. A, 28A(1997) 1582
- [41] L. Nastac: Proceedings of Modeling of Casting and Solidification Processes 1999, Eds. C.P. Hong, J.K. Choi and D.H. Kim, Seoul, (1999) 31