

■■■■■■■■■■  
**論 文**  
 ■■■■■■■■■■

## Cellular Automaton 법을 이용한 주물의 응고조직 시뮬레이션에의 적용

조인성<sup>†</sup> · Itsuo Ohnaka<sup>\*</sup>

### Application of Solifidification Grain Structure Simulation for the Casting by Cellular Automaton Method

In-Sung Cho<sup>†</sup> and Itsuo Ohnaka<sup>\*</sup>

#### Abstract

Computer simulation of the solidification grain structure was applied to the casting process by using CA-DFDM. The Direct Finite Difference Method (DFDM) for temperature field calculation and latent heat treatment was coupled with Cellular Automaton (CA) method for the grain growth. 2-dimensional simulation of the solidification grain structures and calculation of the concentration fields were carried out and the calculated concentration distributions were compared with exact solution. Castings having complex geometries such as turbine blades were applied for 3-dimensional CA-DFDM. Effects of grain selector and mold extraction speed on the solidification grain structures in the turbine blade were examined.

(Received January 18, 2001)

#### 1. 서 론

응고조직의 예측은 주조품의 품질을 예측하고 설계하는 가장 중요한 분야이다. 응고조직의 모델링에는 크게 세 가지의 연구분야로 나누어지는데, 해석 기법에 확률적 모델을 도입하는가 아니면 물리적 현상 이론을 도입하는가에 따라서 Deterministic model, Probablistic model, Stochastic model 세가지로 나뉜다. Table 1에 기존의 응고조직 모델링의 연구에 대한 특징을 나타내었다.

Phase field modeling로 대표되는 Deterministic model은 가장 정확한 수치적인 계산이 가능하다는 장점은 있으나, 계산영역이 상당히 작아야 하며 계산시간이 오래 걸리고, 응고조직내 grain의 성장 방향을 정의할 수 없어 응고시 경쟁성장을 예측할 수 없다는 단점이 있다. Probablistic model은 grain의 성장 방향을 정의하여 조직성장 예측이 가능하나, Probablistic model은 물리적인 time step을 정의하는 것이 불가능하여 물리적인 의미가 상실된다[9]. 그러나 Stochastic

model은 이 두 가지 모델의 장점을 취하여 새로 개발된 방법으로서 응고시 경쟁성장의 수치 모델링이 가능하며, grain의 성장예측시 물리적인 모델등을 사용함으로써 복잡한 형상, 특히 터빈 블레이드 같은 주물의 응고조직 예측이 가능하다.

Stochastic model로는 Cellular Automaton법이 가장 많이 연구되어 왔으며, 이중 Gandin등이 발표한 조직성장 알고리즘이 주로 사용되어 오고 있다. 그러나 그들이 사용한 방법은 열전달 계산시 FEM을 사용하므로 실 3차원 시뮬레이션 적용시 meshing 시간이 많이 걸려 상대적으로 계산시간이 많이 소요된다는 단점이 있다. 그러므로 meshing이 간편하고 시간이 적게 걸리는 FDM mesh를 사용하는 것이 실 주물 계산을 빠르게 할 수 있다. 한편 FDM과 CA를 접목한 조직예측 프로그램은 간단한 형상만이 적용되었으며, 실제 복잡한 주물형상의 응고조직 예측에 대한 연구는 없다. 또한 조직성장 예측에서의 농도계산에 대한 계산으로는 홍준표[12], Nastac[5]등의 연구가 있었으나, 아직까지 해석적 해와의 비교가 불분명한 상태이다.

연세대학교 철강연구소(Research Institute of Iron and Steel Technology, Yonsei University)

<sup>\*</sup>Professor, Department of Adaptive Machine Systems, Faculty of Engineering, Osaka University, Japan

<sup>†</sup>E-mail : ischo@rist.re.kr

Table 1. Comparison of grain growth model

Method	Growth model	Microsegregation model	Growth Kinetics	Interface Tracking.	Fs and Latent Heat Cal.	Remarks
Wang and Beckermann[1]	Deterministic	Diffusion Equation	KGT, LKT	Columnar front, Iterative Cal.	Macroscopical solid fraction	Heavy calculation of iterative procedure
Zhu and Smith[2]	Probabilistic	None	Thermodynamic model	Probabilistic	No. of cells solidified	Monte Carlo
Brown and Spittle[3]	Probabilistic	None	Arbitrary rules	Probabilistic	None	Monte Carlo, Lack of physical meaning
Rappaz[4]	Stochastic	Scheil	KGT	Decentered square algorithm Dendrite Tip	Cell size solid fraction introduction	
Nastac and Stefanescu[5]	Stochastic	Diffusion Equation	KGT and Spherical Growth dendrite tip coarsening	Dendrite Tip Plus capture probabilistic	Ratio of solid and liquid cell in a macroelement	More accurate calculation than Rappaz, but CA size is very small
Charbon[6]	Stochastic	None	Jackson and Hunt relation		Geometrical solid fraction calculation	Only equiaxed crystal Calculation
Phase Field Model[7]	Deterministic	Diffusion Equation	Phase field mobility	Phase function	Heat equation	Cell size must be nanoscale
Hong[8]	Stochastic	Scheil	KGT	Multiple orientation method	Cell size solid fraction introduction	

따라서 본 연구에서는 FDM법과 조직성장예측 알고리즘인 CA법을 결합하여 복잡한 형상의 주물의 3차원 응고조직성장 예측 프로그램을 개발하고 이를 turbine blade모양의 주물에 적용 하고자 하였으며, 2차원 응고조직 예측 프로그램에 농도 수치식 계산을 결합시켜 농도장 계산을 행하였다.

## 2. 물리적 모델

금속의 응고과정은 액상금속에서 부터의 핵생성과 그 핵생성의 성장에 의해서 이루어지며, 금속의조직은 이 두가지 현상의 일정한 조건에 대하여 그 형태를 달리 하게 된다. 핵생성에 대한 모델링은 여러가지가 있으며, 본 연구에서는 Rappaz등이 제안한 과냉도에 따른 불균일 핵생성 속도식을 사용하였다. 이 식은 다음 식 (1)과 같이 표시된다[9].

$$\frac{\partial N}{\partial(\Delta T)} = \frac{n_{max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \exp\left[\frac{(\Delta T - \Delta T_N)^2}{2(\Delta T_{\sigma})^2}\right] \quad (1)$$

여기서 N은 핵생성수,  $\Delta T$ 는 과냉도,  $n_{max}$ 는 핵생성 밀도,  $\Delta T_N$ 은 평균 핵생성과냉도,  $\Delta T_{\sigma}$ 는 표준편차이다. 핵이 생성된 후의 수지상 침단의 성장 모델은 KGT

모델 [10]을 사용하였으며, 2원계 합금인 경우, KGT 모델은 다음과 같은 식으로 전개가 가능하다.

$$v = \frac{mc_0(1-k)D}{\pi^2\Gamma((1-k)\Omega - 1)} [Iv(\Omega)]^2 \quad (2)$$

여기서  $v$ 는 수지상침단의 속도,  $c_0$ 은 합금의 초기농도,  $m$ 은 액상선 기울기,  $k$ 는 용질 분배계수,  $D$ 는 확산계수,  $\Gamma$ 는 계면에너지,  $Iv(\Omega)$ 는 과포화도  $\Omega$ 에 대한 Ivantsov function이다. 본 연구에서는 수지상 침단의 속도계산을 위하여 (2)식을 이용하여 과냉도에 대한 수지상 침단의 속도를 구하고 이를 내삽하여 (3)식과 같은 형태로 사용하였다.

$$v(\Delta T_{tip}) = a(\Delta T_{tip})^2 + b(\Delta T_{tip})^3 \quad (3)$$

여기서  $\Delta T_{tip}$ 은 수지상 침단에서의 과냉도이다.

## 3. 수치해석방법

CA법을 이용한 응고조직의 예측에는 그림 1과 같은 두가지의 mesh system이 도입되며 macromesh system 과 submesh system 두가지로 나뉜다. 그림 1에는 2차원인 경우를 도시하였다. 본 연구에서의 Macromesh는 non-uniform mesh를 이용하였다. 한편 submesh의 경

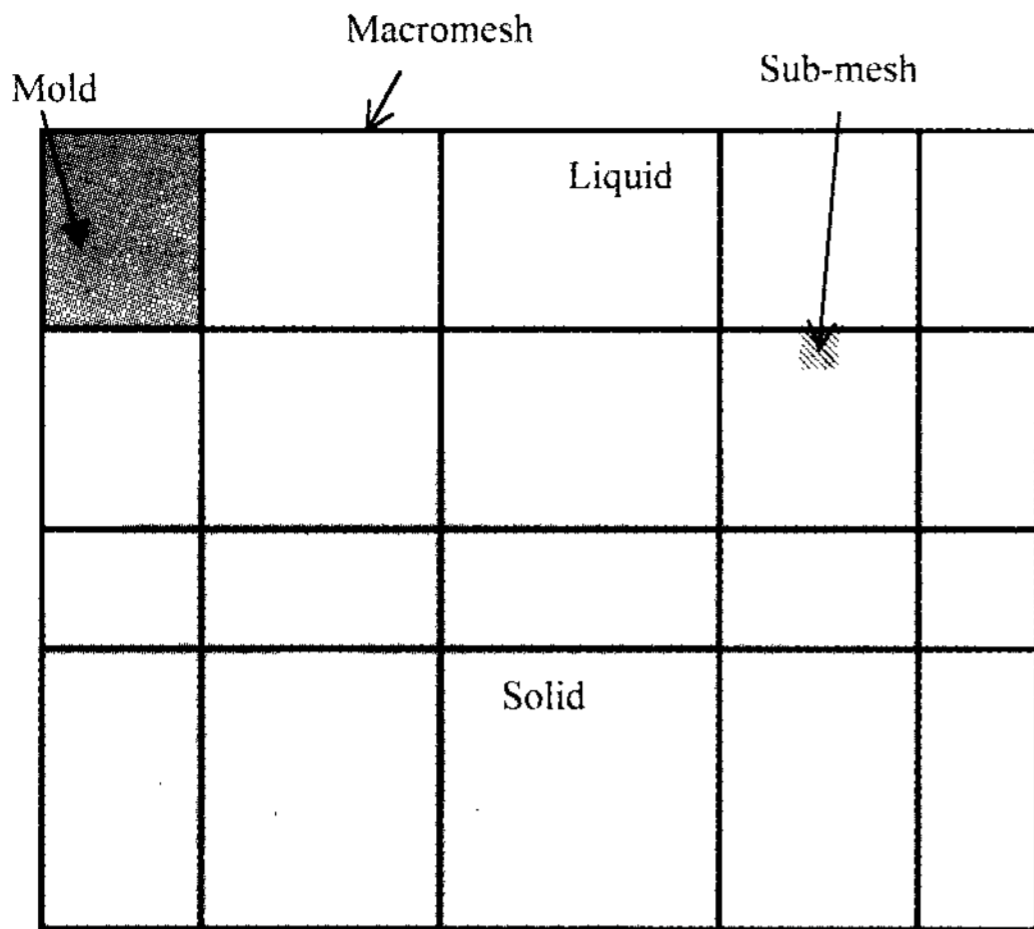


Fig. 1. Schematic diagram of the mesh structure.

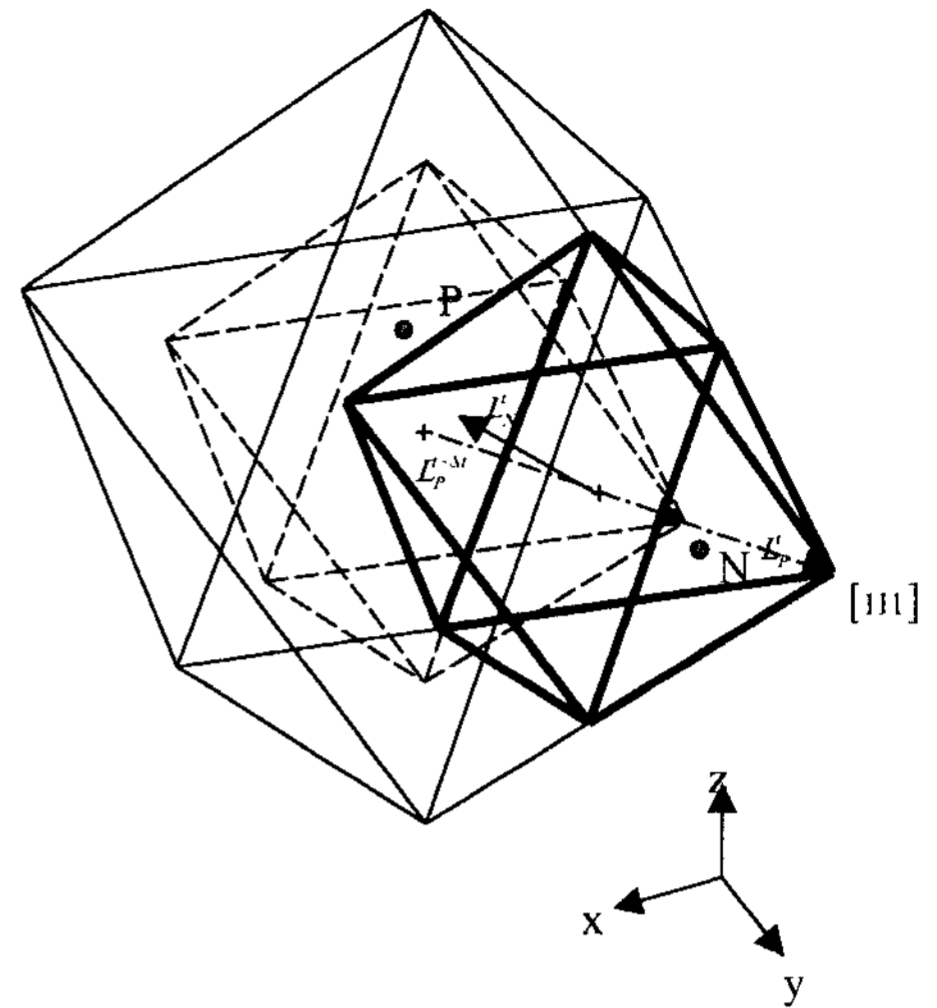


Fig. 4. 3-D Growth algorithm.

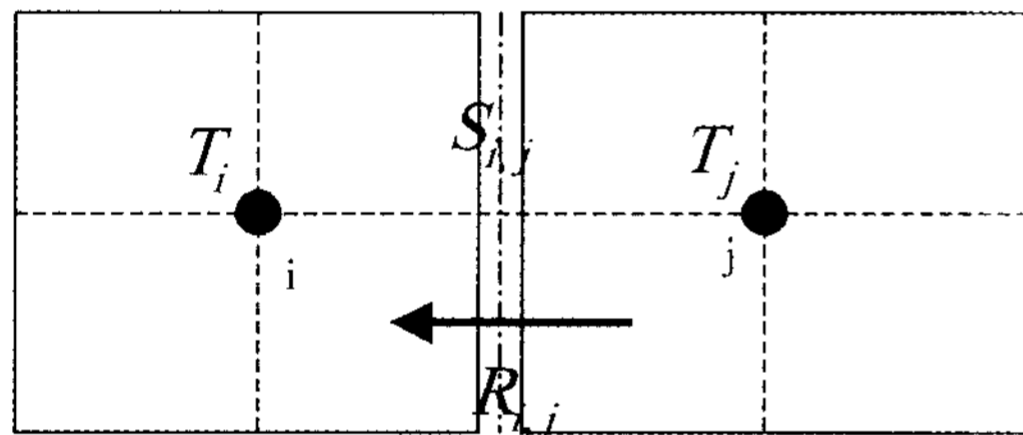


Fig. 2. Schematic diagram showing the DFDM mesh.

우에는 2차원인 경우 정사각형, 3차원인 경우 가로 세로 높이가 일정한 cubic 형태의 mesh가 사용된다. 이때 macromesh에서는 열전달 해석 및 응고잠열 계산을 실시하여 온도장을 구하고, 이 온도장의 정보는 submesh

측으로 전달되어 이 온도에 따라 핵생성 및 응고조직의 성장을 계산하게 된다. 한편 macromesh에서 응고 잠열을 고려하지 않은 온도장을 구하고, 이 온도장을 submesh측으로 전송후 여기서 응고조직 성장 및 잠열 계산을 행하는 방법도 소개되고 있으나, 이 방법을 적용할 경우 계산 시간이 상당히 길어지는 단점이 있으므로 본 연구에서는 전자의 방법을 채택하였다.

### 3.1 온도장 및 응고잠열의 계산

온도장 및 응고잠열의 계산에는 macromesh에서 DFDM (Direct Finite Difference Method)을 이용하였으며 식(1)의 열수지 방정식을 사용하였다[11].

$$(\rho C_p VT^{t+\Delta t})_i = (\rho C_p VT^t)_i + \sum_j \frac{S_{i,j}}{R_j} (T_j^t - T_i^t) \Delta t + \rho L \frac{\Delta f_s}{\Delta t} \quad (4)$$

여기서  $\rho$ 는 밀도,  $C_p$ 는 비열,  $V$ 는 Fig. 2에서 보는 바와 같이  $i$ 번째 macromesh의 체적,  $R$ 은 열저항,  $S_{i,j}$ 는  $i$ 번째 macromesh와 그 이웃한 macromesh ( $j$  요소)의 표면적,  $\Delta t$ 는 계산 time step,  $L$ 은 응고잠열이다. 응고잠열의 처리는 scheit응고를 따르는 온도 회복법을 사용하였다.

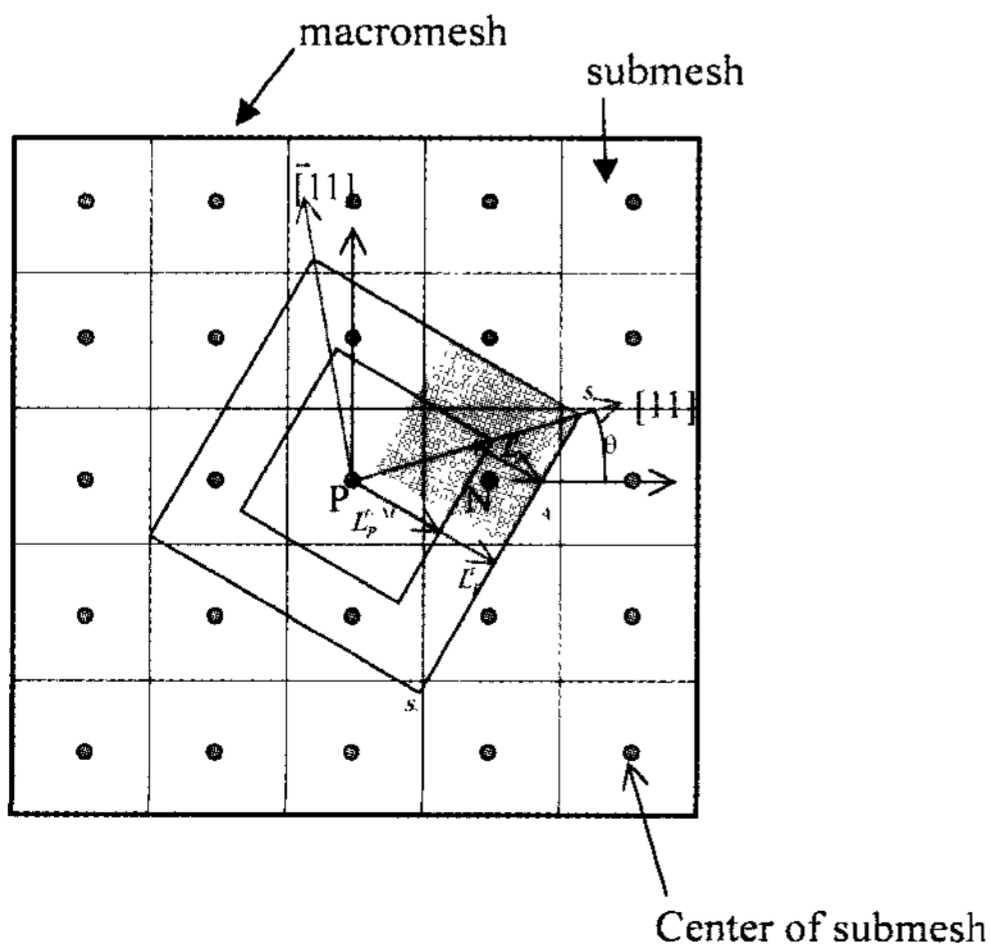


Fig. 3. 2-D Growth algorithm.

### 3.2 조직성장 알고리즘

본 연구에서는 조직성장 예측을 위하여 Gandin[4]등

이 개발한 Decentered Square Algorithm을 사용하였다. 이때 grain 성장은 그림 3에서 보는바와 같이 2차원인 경우 4각형으로, 그림 4와 같이 3차원인 경우는 8면체로 성장한다고 가정한다. 계산 초기에는 모든 submesh의 상태는 액상이며, 하나의 핵이 submesh P에 생성되면 submesh P는 액상에서 고상으로 그 상태를 바꾸게 된다. 이때 우선성장 방위의 방향이 난수발생을 통해 결정되게 된다. 이 때 핵은 grain으로 성장을 하게 되며, 이 grain의 크기는  $L_p$ 의 값으로 나타낸다. 또한 계속되는 grain의 크기는 다음 식으로 나타낼 수 있다.

$$L_p^t = L_p^{t-\Delta t} + v(\Delta T_{tip}) \cdot \Delta t \quad (5)$$

여기서  $v(\Delta T_{tip})$ 은 식(3)에 의하여 구하여지는 수지상 침단의 속도이다. Grain이 4각형의 형상으로 계속 성장하게 되어 4각형의 한 변이 이웃하고 있는 submesh N의 중심을 지나게 되면, submesh N은 액상에서 고상으로 그 상태가 변하게 된다.

3차원인 경우에도 같은 방식으로 submesh N의 중심이 submesh P로부터 성장하는 8면체의 한 면의 내부에 위치하게 되면, 고상으로 그 상태가 바뀌게 된다.

### 3.3 농도장의 계산

농도계산에 CA알고리즘을 적용하기 위하여, 본 연구에서는 식(5)와 같은 농도장 계산식을 개발 하였으며, 이를 2차원에 대하여 적용하였다. 이때의 가정은 고상에서의 확산은 무시하고, 액상에서의 확산만을 고려하였다. 농도장의 계산은 micromesh에서 이루어졌으며 다음의 식을 사용하였다.

$$(C_L V_m)_i^{t+\Delta t} = (C_L V_m)_i^t + \sum_j \frac{C_j^t - C_i^t}{\Delta l_j} + \sum_k V_m (C_L^* - C_s^*)_k \beta_c \quad (6)$$

여기서  $C_L$ 은 액상측 농도,  $V_m$ 은 submesh의 체적,  $D$ 는 확산계수,  $S$ 는 submesh의 표면적,  $C_L^*$ 과  $C_s^*$ 는 각각 고액계면에서의 액상농도와 고상농도이고,  $\Delta t$ 는 계산 time step이다. 또한  $\beta_c$ 는 조직성장 알고리즘에 의해 성장된 어떤 하나의 submesh가 액상에서 고상으로 변화할 때 1의 값을 가지며, 그 이외의 경우에는 0의 값을 갖는 변수이다.

### 3.4 복잡한 주물형상에의 적용

형상 입력 프로그램으로는 열 유동 및 응고해석 패키지인 JSCAST를 이용하였으며, JSCAST에서 나온 형상데이터를 프로그램에 입력, 조직성장 예측을 하였다. Mesh의 구조는 그림 1과 같이 주물부분에의 macromesh를 일정 간격으로 나누고 submesh를 자동으로 생성하였다.

## 4. 결과 및 고찰

### 4.1 2차원 응고조직 시뮬레이션 및 농도계산

그림 5는 2개의 서로 다른 orientation을 가진 grain을 나타내고 있다. 해석 전 영역에 걸쳐 동일한 과냉도 구간에 있다고 가정할 때, grain들의 성장속도는 모두 일치하여야 한다. 그림에서 보는 바와 같이 방향성이 다른 2개의 grain에서 같은 크기로 grain이 성장함을 알 수 있었다.

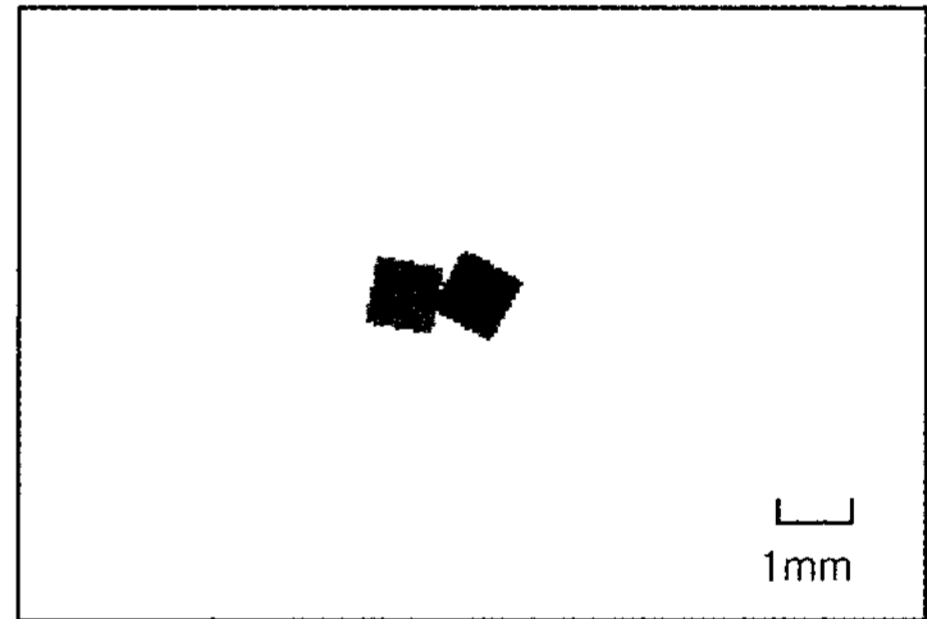


Fig. 5. Two grain growth with different orientations.

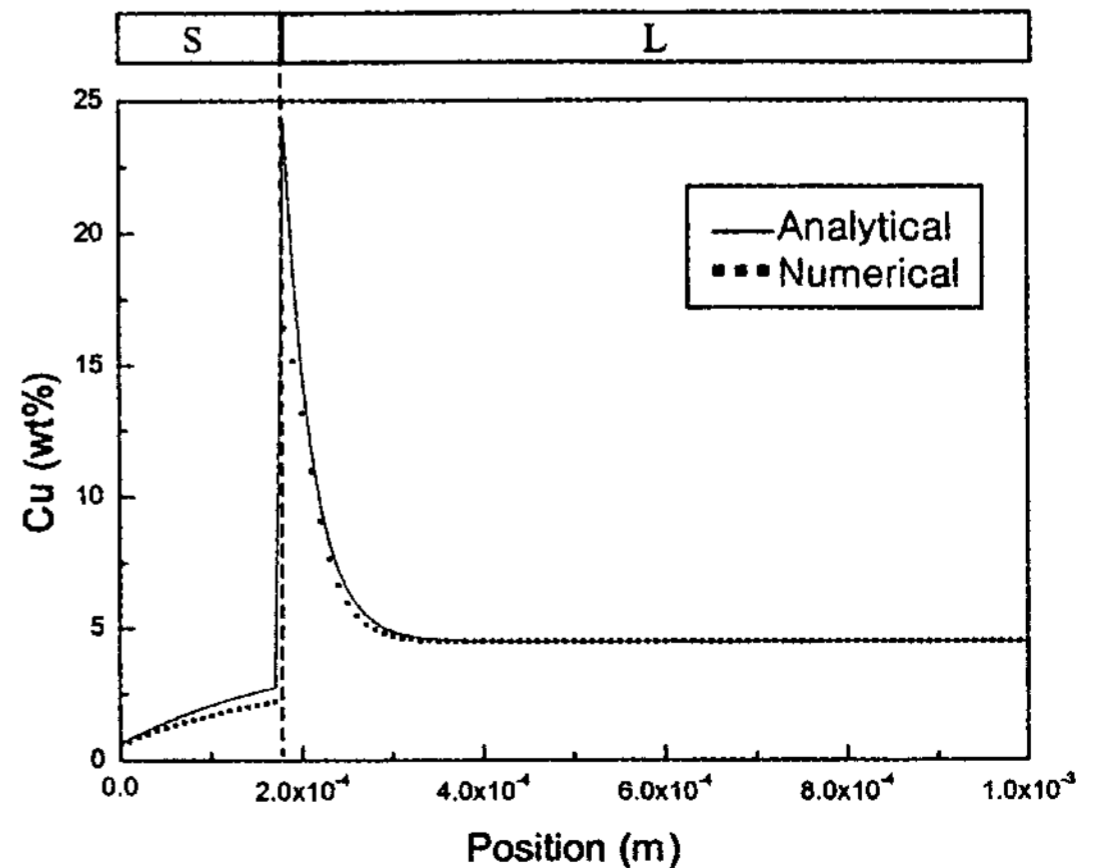


Fig. 6. 1-dimensional Cu solute distribution of the Al-4.5wt%Cu alloy during directional solidification.

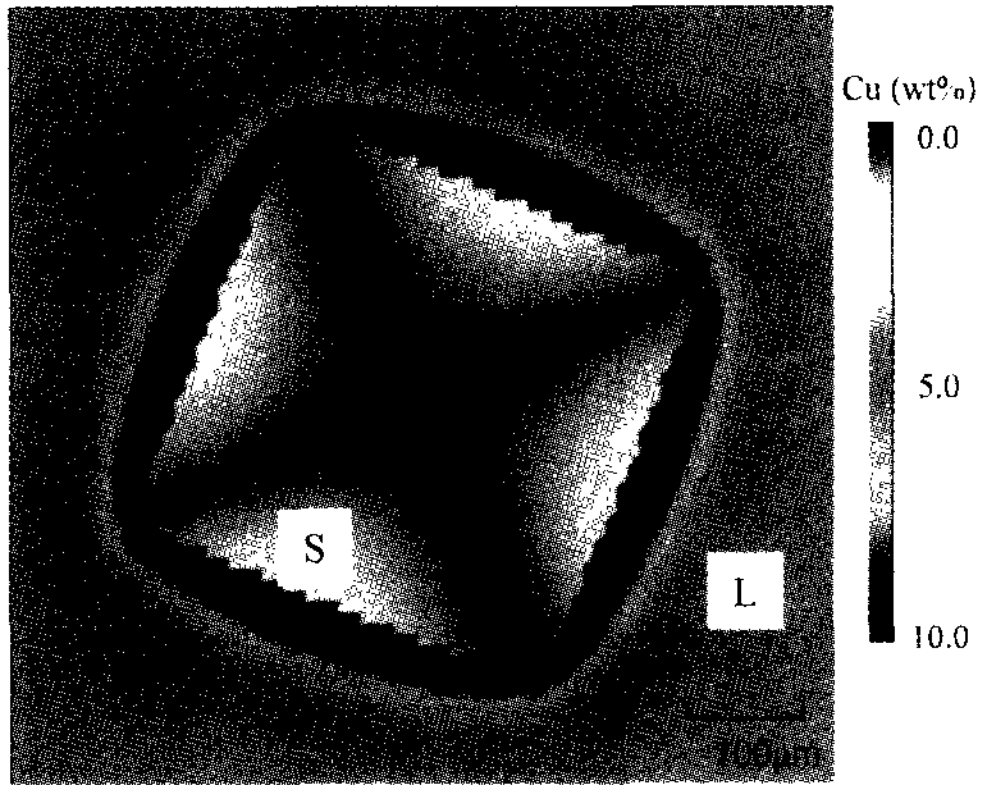


Fig. 7. 2-Dimensional solute distribution of the the Al-4.5wt%Cu alloy during directional solidification.

그림 6은 식(5)에 의한 Al-4.5wt%Cu 합금에서의 농도장의 1차원 수치해석 결과이며, 점선으로 표시된 부분이 고액 계면을 나타내고 있다. 고액 계면 부분에서 용질의 방출이 일어남을 볼 수 있다. 본 연구의 수치해석해와 scheil식의 엄밀해와 비교하기 위하여 성장속도를 일정하게 하여 계산하였으며, 수치해석해와 엄밀해가 아주 잘 일치함을 알 수 있었다. 따라서 본 연구의 농도계산이 응고조직과 농도 계산을 병행하기에 무리가 없음을 알 수 있었다. 또한 본 방법은 submesh내에 고상율의 계산없이 농도장을 계산할 수 있어, 고상율 변수에 대한 컴퓨터 메모리 영역을 절약할 수 있고, 고상율을 따로 계산하지 않으므로 고상율을 포함하여 계산하는 경우보다 계산속도가 빠르게 되리라 생각된다. 그림 7은 1개의 grain에 대한 Al-4.5wt%Cu합금의 2차원 농도장 해석의 결과이다. 사각형으로 가정한 grain 외부로 Cu용질이 배출되는 것을 볼 수 있다. 또한 이 농도장의 해석은 3차원으로 쉽게 확장이 가능하다.

4.2 3차원 응고조직 시뮬레이션

그림 8은 본 연구에서 사용된 알고리즘을 이용하여 1개의 grain을 성장시킨 결과이다. 해석영역내에서의 과냉도를 일정하게 유지시켜 모든 우선성장 방위의 성장속도는 모두 일정하며, grain은 정 8면체로 성장하고 있음을 볼 수 있다.

그림 9는 본 3차원 알고리즘을 이용하여 turbine blade형상의 주물을 방향성 주조한 결과를 나타내고 있다. 본 해석에 사용된 합금은 Al-4.5wt%Cu이다. 그림

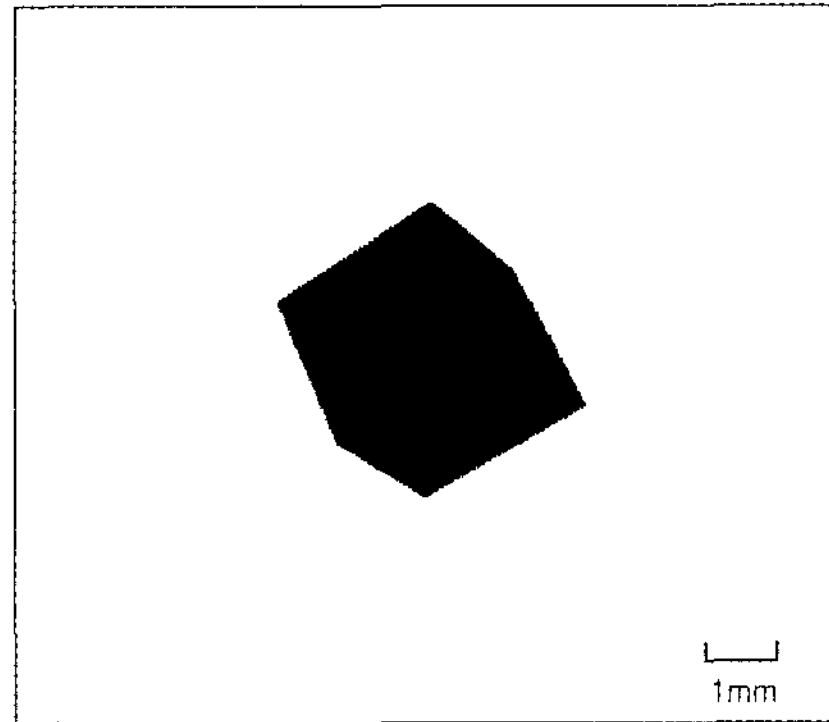


Fig. 8. 3-Dimensional grain growth by using CA algorithm.

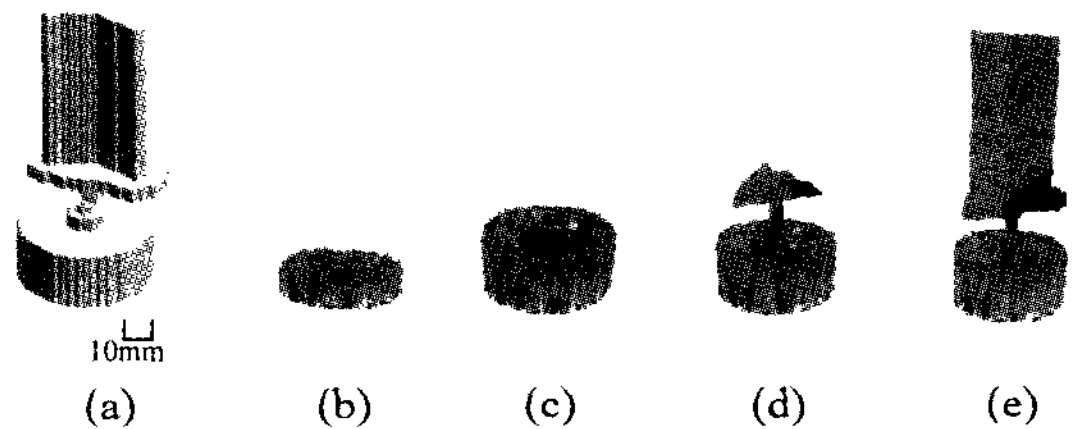


Fig. 9. (a) Macromesh structure of turbine blade and (b)~(f) solidification sequence of the turbine blade during directional solidification.

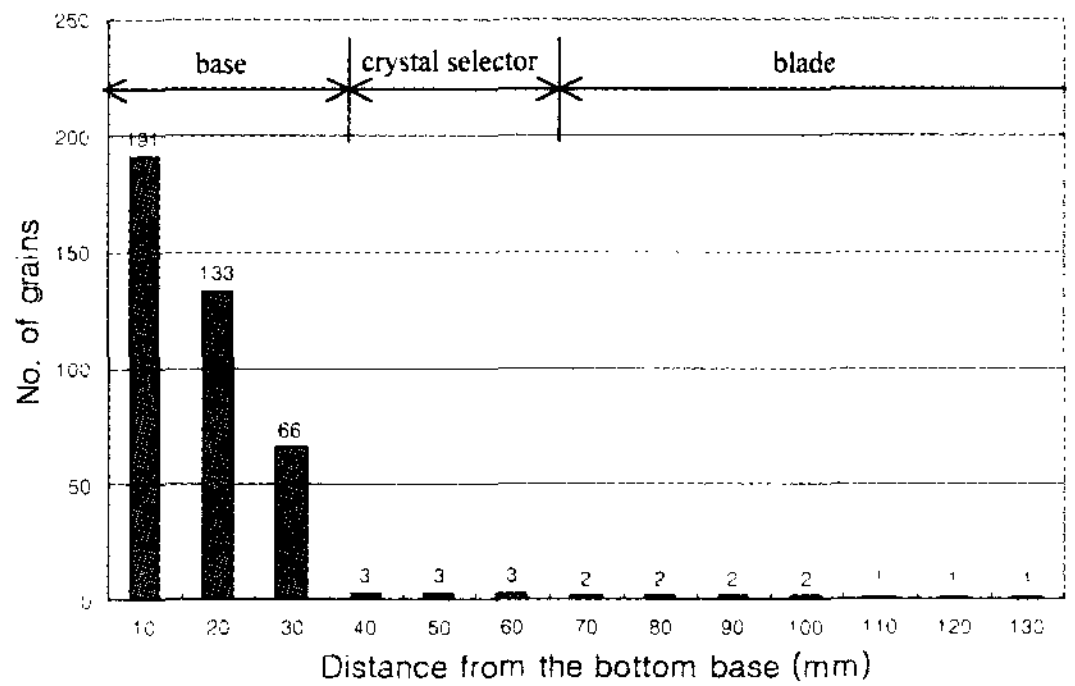


Fig. 10. No. of grains with distance from the bottom base.

9(a)는 JSCAST에 의하여 형성된 주물의 형상 data를 나타내고 있으며, 그림 9(b)~9(f)는 시간에 따른 응고 과정을 나타내고 있다. 이때 사용된 macromesh의 수는 17222개이며, submesh수는 310880개, 계산시간은 IBM Pentium III 600 MHz에서 2시간 20분이 소요되었다.

그림 10은 주물 하단으로부터 10 mm 간격으로 절단하여 절단면에서의 grain의 개수를 표시하였다. 하부 base부분에서 위쪽으로 올라갈수록 grain의 수는 감소

하는 경향을 나타내고 있으며, crystal selector 시작점 부터는 3개, blade부분에서의 grain 수는 2개에서 1개로 감소하였다.

그림 9와 10에서 보는 바와 같이, 하단의 base에서 많은 핵들이 생성되어 이들이 성장하여 chill zone을 형성하는 것을 볼 수 있으며, 그 후 경쟁성장에 의하여 위의 grain의 개수가 차츰 감소되고, 이들이 지그재그형태의 grain selector를 거치는 단계에서 많은 grain들이 성장을 멈추어 grain selector를 지난 후에는 2개의 grain만이 성장하는 것을 볼 수 있다. 이 2개의 grain은 blade의 하단부까지 같이 성장하다가 하나의 grain이 다른 grain에 의하여 잠식되고, blade 상단부에서는 단결정의 blade가 형성되는 것을 볼 수 있다.

그림 11은 turbine blade형상의 주물을 가열로부터의 주형인출속도를 다르게 하여 방향성 구조한 결과를 나타내고 있다. 그림 11(a)는 인출속도가 빠른 경우 (60 mm/min, 1 mm/sec), 11(b)는 인출속도가 느린 경우(0.6 mm/min, 0.01 mm/sec)이다. 11(a)의 경우 A로 표시되는 부분에서 주상정-등축정 천이가 일어남을 알 수 있었다. 이 이유는 빠른 냉각에 의하여 주상정 수지상 첨단 앞부분의 과냉 액상의 온도가 등축정 핵생성을 일으킬 만한 온도보다 낮게 되어 등축정이 형성되고, 이에 의하여 주상정의 성장을 방해하기 때문이다. 그러나 11(b)의 경우는 인출속도가 느려 용탕의 냉각이 느리고, 주상정 수지상 첨단 부분에서의 과냉 액상의 온도가 핵생성 온도보다 항상 크게 되는 조건이 이루어지리라 생각된다. 따라서, 등축정 핵이 형성이 되지 않아 주상정은 방해없이 계속 성장하게 된다고 사료된다. Turbine blade 같이 단결정 제품을 요구하는

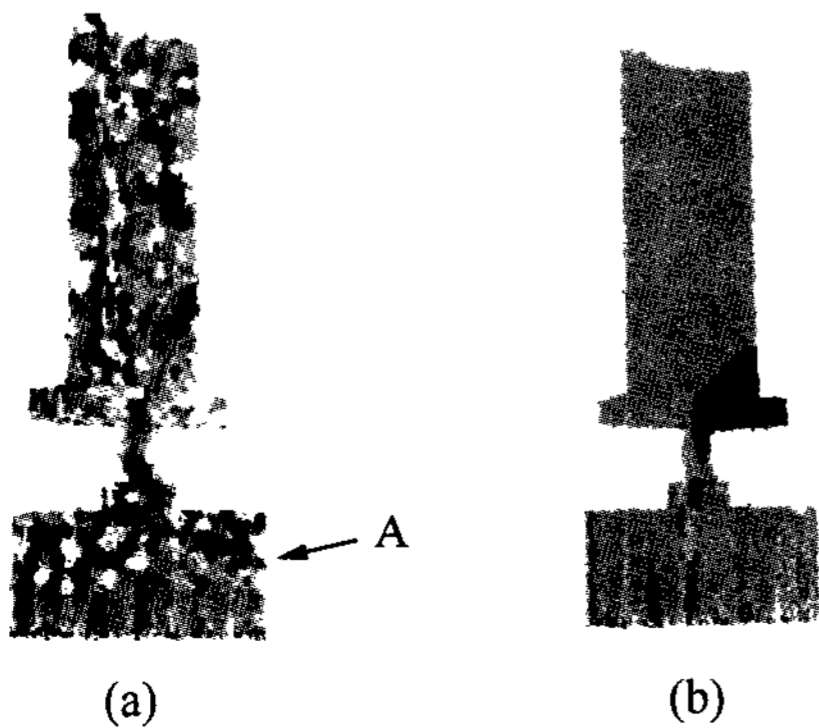


Fig. 11. Solidification grain structures showing (a) columnar and equiaxed structures and (b) only columnar structures.

경우에는, 주형의 거칠기 및 합금의 순도 문제등 다른 요인들도 있을 수 있으나, 인출속도를 느리게 하여 수지상 첨단 앞의 액상온도를 핵생성이 일어나지 않는 온도 이상으로 유지하는 것이 필요하다. 단, 생산성 문제를 고려한다면, 인출속도를 느리게 하는 것은 한계가 있으며, 본 해석방법을 이용하여 적절한 인출속도 및 노내의 온도구배등 조업조건을 산출해 낼 수 있다.

### 5. 요약

본 연구에서는 FDM법과 CA법을 결합하여 주물의 응고조직성장 예측 프로그램을 개발하였다. 새로운 농도장 분포 알고리즘을 개발하고, 이 결과를 1차원 해석해와 비교하였으며, 이를 2차원 응고조직 및 농도계산에 적용하였다.

3차원 응고조직 예측 해석연구를 통하여 복잡한 형상의 주물에 적용 하였으며, turbine blade형상의 응고조직 시뮬레이션을 통하여 인출속도가 응고조직에 미치는 영향에 대하여 조사하였고, 원하는 구조조업변수를 본 시뮬레이션에 의하여 결정할 수 있으리라 생각된다.

### 후 기

이 논문은 한국과학재단의 해외 Post-doc. 연수지원비에 의하여 연구되었음

### 참 고 문 헌

- [1] C. Y. Wang and C. Beckermann : Metall. & Mater. Trans. 25A (1994) 1081
- [2] P. Zhu and W. Smith : Acta Metall. 40 (1992) 683
- [3] S. G. R. Brown and J. A. Spittle : Mater. Sci. Technol. 5 (1989) 362
- [4] Ch. -A. Gandin, J. -L. Desbiolles, and Ph. Thevoz : Metall. Mater. Trans. 30A (1999) 3153
- [5] L. Nastac and D. M. Stefanescu : Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. 5 (1997) 391
- [6] Ch. Charbon and R. LeSar : Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 5 (1997) 53
- [7] T. Suzuki, S. G. Kim and W. T. Kim : Proc. of Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification and Casting, Osaka, Japan, ISIJ (1999) 21
- [8] C. P. Hong : J. Korean Foundryman's Society, 20 (2000) 285
- [9] I. S. Cho and C. P. Hong : ISIJ Int., 37 (1997) 1098

- 
- [10] W. Kurz and D. J. Fisher : Fundamentals of Solidification, Trans Tech Publication (1985)
- [11] I. Ohnaka : Computer Analysis in Heat Transfer and Solidification, Maruzen, (1986)
- [12] S. Y. Lee, S. M. Lee and C. P. Hong : ISIJ Int., 40 (2000) 48.
- [13] M. C. Flemings : Solidification Processing, McGraw Hill, (1974)
- [14] D. M. Stefanescu : ISIJ Int., 35 (1995) 637
- [15] L. Nastac and D. M. Stefanescu : Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 5 (1997) 391
- [16] S. H. Cho, T. Okane, and T. Umeda : Proc. of Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification and Casting, Osaka, Japan, ISIJ (1999) 49