

반응고 재료에서 점성을 고려한 고상입자의 거동예측을 위한 수치모사 해석

권기영¹, 강충길[#]

Dynamic Simulation of Solid Particle Considering Change by Viscosity in Rheology Material

K. Y. Kwon, C. G. Kang

(Received September 22, 2008)

Abstract

It was reported that the semi-solid forming process has many advantages over the conventional forming process, such as a long die life, good mechanical properties and energy savings. It is very important, however, to control liquid segregation to gain mechanical property improvement of materials. During forming process, rheology material has complex characteristics, thixotropic behavior. Also, difference of velocity between solid and liquid in the semi-solid state material makes a liquid segregation and specific stress variation. Therefore, it is difficult for a numerical simulation of the rheology process to be performed. General plastic or fluid dynamic analysis is not suitable for the behavior of rheology material. The behavior and stress of solid particle in the rheology material during forging process is affected by viscosity, temperature and solid fraction. In this study, compression experiments of aluminum alloy were performed under each other tool shape which is rectangle shape(square array), rectangle shape(hexagonal array), and free shape tool. In addition, the dynamics behavior compare with Okano equation to power law model which is viscosity equation.

Key Words : Potential Dynamic Motion, Solid Fraction, Rheology Material, Viscosity Equation

1. 서론

공업재료에 이용되고 있는 물질들은 고체상태에서 변형하여 복잡한 형상으로 소성변형을 하여 각종 전기/전자부품, 자동차, 및 항공기 부품의 개발에 응용하고 있다. 또한 주조공정과 같은 액상 공정(Liquid Metal Forming Process)은 소재를 완전히 용해한 후 원하는 형상의 캐비티를 가진 금형 내부에 주입하여 각종 산업용 부품을 재조하고 있다. 기존의 주조 공정은 환경오염과 부품의 기계적 성질의 저하 등을 유발하고, 단조 공정은 최종

부품을 생산하기까지 공정횟수의 증가, 정밀 정형성의 한계성 및 금형 수명 단축 때문에 환경친화형 생산이 불가능하다. 최근 경량화 소재의 정밀 정형기술로써 결정립 제어 경계영역 소재의 주조 기술과 레오로지 소재의 단조기술이 학계 및 산업계에서 관심의 대상이 되고 있다[1~3]. 반응고 공정은 고체상태와 액체상태가 공존하는 영역에서 제품을 제조하는 특수 공정으로써 재료 경량화로 인한 에너지 경감 차원에서 세계 각국에서 반응고 공정을 이용한 다이캐스팅 공정, 단조공정 및 압연공정 등에 응용이 크게 기대되고 있다.

1. 권기영 부산대학교 하이브리드소재솔루션 협동과정
교신저자: 강충길 부산대학교 기계공학부,
E-mail:cgkang@pusan.ac.kr

반응용 공정은 부품을 제조할 때 소재의 상태는 고체와 액체가 공존하며 액체 내에 존재하는 고체입자의 크기는 20~80 μm 정도의 원형 및 타원형상으로써 성형시 고상입자의 편석 제어가 필수적이다.

현재 세계적으로 성형 중 반고체 재료 내에 있는 고상입자의 편석 제어를 위하여 실험적으로 많은 연구가 진행 중이다[4~5]. 특히 성형 중 액상율이 50%이상인 경우는 성형중 고상입자와 액상입자의 편석현상이 심각하여 기계적 성질의 불균일을 초래하고 있다[6].

성형 중 고상입자와 액상입자의 편석을 제어하고 예측할 수 있는 이론적 해석방법이 제시되지 못하고 있다. 또한 이러한 고상과 액상의 거시적인 분리현상을 예측할 수 있는 레오로지(Rheology)이론을 레오로지 재료의 성형에 적용하여 고상입자와 액상 입자의 분리현상을 고려한 해석이 이루어 지지 못하고 있다. 최근에 컴퓨터를 이용한 전산 모사에 의해 유동과 응고과정의 정량적인 해석이 가능해졌고 고상과 액상의 미시적인 분리현상을 예측할 수 있는 레오로지 이론에 응용할 수 있게 되었다. 본 연구에서는 압축 실험 시 액상 편석을 제어하기 위해 분자동역학(Molecular Dynamics)을 이용하여 고상입자들의 거동을 예측해보고자 하였다. 최근에 연구가 활발히 진행중인 분자동역학에 관한 연구는 1950년대 후반 Alder와 Wainwright에 의해 시작되었다[7~8]. 그 이후 LLNL(Lawrence Livermore National Laboratories)에서 다이아몬드 공구로 구리(Cu) 소재를 나노 단위로 절삭하는 해석을 수행하였다[9~11]. LLNL의 Belack은 embedded-atom method를 사용하여 2차원과 3차원으로 구리와 실리콘(Si)를 절삭하는 연구를 수행하였다. LLNL의 연구결과를 이용하여 Ikawa[12~15], Shimada[16]와 Inamura[17~20]등이 분자동역학을 실제 나노 단위의 절삭에 응용하기 시작하였다. 이상에서 제시한 방법은 고체 상태에서 NANO level의 크기를 가진 원자 및 분자를 대상으로 수치 해석을 수행하여 재료의 변형 메커니즘을 규명하고 있다. 이들의 해석방법을 반응용재료에 직접 적용할 수 없으며 특히 액체 속에 크기가 20~80 μm 의 고체입자가 혼합되어 있는 경우 레오로지 특성을 고려하여 해석하여야 한다. 현재까지 대부분의 연구내용은 고체 재료내에 있는 입자의 크기를 수 나노크기로 가정하여 포텐셜 함수로 정의하여 입자의 거

동을 해석하고 있다. 그러나 반응용재료는 입자의 크기가 20~80 μm 이고 그 형태가 구형, 타원형 등으로 다양하다. 또한 고체입자가 액체 금속내에 존재하기 때문에 고체입자가 이동할 때는 중력, 부력 및 항력 등을 받는다. 이러한 현상을 규명하기 위하여 새로운 포텐셜의 정의가 필요하다. 컴퓨터 기술의 비약적인 발전과 분자동역학 테크닉의 발전에 따라 마이크로 레벨로 적용될 것으로 사료된다.

일반적인 소성역학이나 유체역학적인 해석은 레오로지 재료의 거동을 모사하는데 적합하지 않다. 따라서 본 연구에서는 액상과 고상이 동시에 존재하는 레오로지 소재가 변형할 때 점성의 변화를 고려하여 고상입자의 거동을 예측하는 새로운 이론과 해석방법을 제시하고자 한다. 점성식의 변화가 성형하중에 미치는 영향을 파악하며, 압축 성형시 입자의 압축율과 반경방향의 변화율등을 실험과 이론을 통하여 본 해석의 타당성을 검증하였다.

2. 입자운동역학의 원리

2.1 포텐셜 함수

분자동역학은 원자를 원자핵만의 질점계로 가정하고 입자간의 포텐셜을 이용하여 입자간력을 구하고, 뉴턴 역학을 적용하여 수치적분을 통해 위치벡터와 속도벡터를 구하며 이 값으로부터 각종 데이터 해석을 통하여 원하는 물리량을 구하는 해석 방법이다.

분자동역학에서는 각 입자간에 작용하는 힘을 구하기 위해서 입자간 상호작용 포텐셜에너지 ϕ 를 가정한다. Fig. 1은 두 개의 입자 사이에 작용하는 포텐셜 에너지를 나타내었다.

여기서 m_1, m_2 는 각각 분자의 질량을 나타내며, 초기위치좌표: $r_1(x_1, y_1), r_2(x_2, y_2)$, 초기 속도좌표: $(V_1, \theta_1), (V_2, \theta_2)$, 두 분자 사이의 거리: r_{ij} 를 나타낸다.

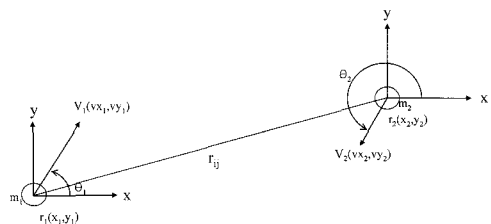


Fig. 1 The motion of two particles on two dimensional plane

해석하고자 하는 계의 전체 입자수를 N 이라고 하면 계의 전체 포텐셜에너지는 일반적으로 식(1)과 같이 표시된다.

$$\phi = \sum_i^N \phi(r_i) + \sum_i^N \sum_{j>i}^N \phi(r_{ij}) + \sum_i^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j>i}^N \phi(r_{ijk}) + \dots \quad (1)$$

식 (1)에서 r_{ij} 는 입자 i 와 j 사이의 거리를 나타내고 r_{ijk} 는 i, j, k 사이의 거리를 나타낸다.우변 첫 번째 항은 외부장에 의한 포텐셜을 나타내는데 입자들이 중력장이나 전기장하에 존재하는 경우에 작용하는 포텐셜의 크기를 나타낸다. 우변 두 번째 항은 쌍으로 이루어진 입자들 사이에 상호 작용하는 포텐셜로 두 입자간 포텐셜을 의미한다. 세 번째 항은 세 개의 입자가 한 쌍을 이룰 때 작용하는 세 입자간 포텐셜을 나타낸다. 일반적으로 세 입자간 포텐셜과 그 이상의 포텐셜은 전체 계에 미치는 영향이 극히 적으므로 일반적으로 분자동력학에서 무시된다. 또한 중력장이나 전기장의 영향을 무시 할수 있다면 계 전체의 포텐셜 에너지는 식(2)와 같이 나타낼 수 있다.

$$\phi = \sum_i^N \sum_{j>i}^N \phi(r_{ij}) \quad (2)$$

원자핵만의 포텐셜에 대한 타당성을 확인하였으므로 위의 식을 뉴턴역학에 적용하기 위해 식 (3)과 같이 입자간거리 r_{ij} 로 포텐셜 함수를 편미분하면 입자 i 에 작용하는 힘을 구할 수 있다.

$$F_i = - \sum_{j=1(j \neq i)}^N \nabla_i \phi(r_{ij}) \quad (3)$$

분자동력학은 계를 이루는 물질에 따라서 포텐셜 함수를 달리한다. 반데르 발스(Van der Waals)력에 의해 결합되는 가스(gas) 입자들의 경우에 레나드존스(Lennard-Jones)포텐셜이 사용되고, 금속과 같이 공유결합(covalent bonding)에 의해 결합된 입자들의 경우에는 모스 포텐셜(Morse potential)이 사용된다[21]. 본 연구에서는 레오로지 소재의 거동을 해석하기 위해 콜로이드학에서 널리 사용되는 Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek(DLVO) 모델을 사용 하였다[22~23]. 포텐셜 ϕ_o 는 인력성분 ϕ_A 와 척력성분 ϕ_R 의 합이다.

$$\phi_o = \phi_A + \phi_R \quad (4)$$

$$\phi_A = -\frac{a_1}{12\pi r^2}$$

$$\phi_R = 2\pi a_2 r_{ij} \exp(-a_3 r)$$

여기서 $a_1 \sim a_3$ 은 소재에 따른 포텐셜함수이다. 포텐셜함수 ϕ_o 의 전형적인 그래프는 Fig. 2 에 나타나 있다.

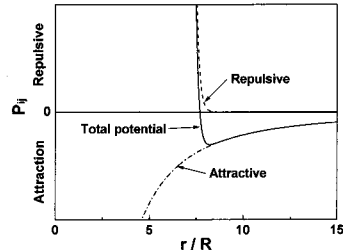


Fig. 2 Typical diagram of Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek(DLVO) inter-particle potential

그러나 반응용재료 내에서는 고체입자의 크기가 20~80 μ m 로써 식(4)에서 보여주는 포텐셜함수 ϕ_o 에 영향을 미친다. 또한 고상을 입자의 크기 및 입자의 형태들이 ϕ_o 에 영향을 미치기 때문에 이들의 인자를 고려한 새로운 Potential 의 정의가 필요하다. 따라서 본 연구에서는 고체입자의 크기 및 형태를 고려함과 동시에 액체금속 내에서 고체입자가 이동할 때 재료의 물성 및 저항력을 고려하여 Potential Function 정의하였다.

2.2 단일 구형 입자에 작용하는 힘

반고체 재료 내에 반경 r 을 가진 하나의 고체상의 입자가 점성유체 내에서 움직이는 것을 생각해 보면 중력, 부력, 항력이 고상 입자에 작용한다. 항력은 구와 가까운 유체의 유동이나 마찰에 의한 구의 움직임에 저항하는 힘들의 합이다. Stokes 는 정상, 평형 상태의 비압축성 유동에서 정지 상태의 구의 항력에 대해 다음과 같이 계산하였다.

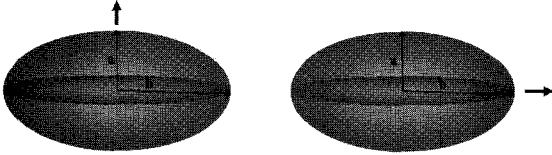
$$F_o = -cv = -(6\pi\eta r)v \quad (5)$$

여기서, η 는 액상의 점성계수, v 는 구의 이동 속도이고, C 는 기하학적인 계수이며 r 은 입자의 반경, 구형 입자들의 표면형상에 의해 계산되었다. 반응용 재료를 압축실험을 할 때, 고상의 입자가 타원형의 입자로 변할 수 있게 된다. 따라서

타원형의 입자에 대해서 항력 F_a 는 다음과 같다.

$$F_a = -cvK' = -(6\pi\eta av)K' \quad (6)$$

여기서 a 는 타원에서 단축의 길이이며, K' 은 형상 계수이다.



(a) Minor axis motion (b) Major axis motion

Fig. 3 Motions of oblate ellipsoids of solid particle in a viscous fluid

Fig. 3 에서 보여주는 바와 같이 액체 금속내에 존재하는 고체입자의 타원형상을 나타내는 형상 계수를 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$K' = \frac{\frac{4}{3}(B^2 - 1)}{\left[\frac{B(B^2 - 2)}{(B^2 - 1)^{1/2}} \tan^{-1}(B^2 - 1)^{1/2} \right] + B} \quad \left(B = \frac{b}{a} \right) \quad (7)$$

$$K' = \frac{\frac{8}{3}(B^2 - 1)}{\left[\frac{B(3B^2 - 2)}{(B^2 - 1)^{1/2}} \tan^{-1}(B^2 - 1)^{1/2} \right] + B} \quad \left(B = \frac{b}{a} \right) \quad (8)$$

식(7)은 타원이 Fig. 3(a)와 같이 단축 방향으로 운동할 때 사용되며, 식(8)는 Fig. 3(b)의 경우와 같이 장축 방향으로 운동할 때 사용된다.

위에 언급된 세가지 힘들 외에 온도에 영향을 받는 힘 F_e 를 고려할 수 있으며, 그 식은 다음과 같다.

$$F_e = G^{RAN} \left[\frac{2ck_B T}{\Delta t} \right]^{1/2} \quad (9)$$

여기서 G^{RAN} 는 통계적 랜덤 함수, k_B 는 Boltzmann 상수($1.38e^{-23}$ J/K), T 는 계의 온도, Δt 는 시간증분을 나타내고 있다. 일차원에서 고상 입자에 대한 운동방정식은 아래의 Langevin 식에 의해 표현된다.

$$m \frac{dv}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2} = F_a + F_T \quad (10)$$

합력 F_T 는 아래와 같이 표현된다.

$$F_T = mg - V\rho g + F_e \quad (11)$$

여기서, V 는 고상 입자가 차지하는 부피이고, m 은 고상 입자의 질량이다.

본 연구에서는 식(4)에서 언급한 DLVO 포텐셜 함수를 이용하여 입자간 거리 r_{ij} 의 함수로 표시하는 상호작용에 의해서 개개의 입자에 작용하는 힘 ϕ_o 와 고체 입자에 작용하는 힘을 표시하는 식(10)를 이용하여 반응용재료의 포텐셜함수 ϕ_r 는 다음과 같이 정의한다.

$$\phi_r = \phi_o + F_a + F_T \quad (12)$$

2.3 수치해석기법

식(10)를 수치해석으로 풀기 위해서 분자동력학에서 사용되는 Verlet 알고리즘을 이용하였다. Stokes 의 항력과 같은 속도에 선형적으로 의존성을 가지는 힘들을 계산하기 위해 변형된 알고리즘을 사용하였다. $t + \Delta t$ 에 대해 속도와 위치를 계산하기 위해서 테일러 급수를 전개하였다.

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \left(\frac{dx}{dt} \right)_t \Delta t + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2x}{dt^2} \right)_t \Delta t^2 + \dots \quad (13)$$

$$x(t - \Delta t) = x(t) - \left(\frac{dx}{dt} \right)_t \Delta t + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2x}{dt^2} \right)_t \Delta t^2 - \dots \quad (14)$$

식(12)와 식(13)을 이용해 속도에 대한 식으로 나타내면 아래와 같이 된다.

$$v(t) = \left(\frac{dx}{dt} \right)_t = \frac{x(t + \Delta t) - x(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (15)$$

힘은 속도에 의존하기 때문에 시간 $t + \Delta t$ 에서 위치는 시간 t 에서의 속도에 의존하게 된다. 이 속도는 $t + \Delta t$ 에 대한 식을 필요로 한다.

만약

$$a(t) = \frac{F(t)}{m} = b - c'v(t) \quad (16)$$

라 하면, 기하학계수 c , 입자의 질량 m , 중력가속도 g , 입자의 부피 V 와 밀도 ρ 를 사용한 다음식을 간단하게 변형가능하다.

$$b = g - \frac{1}{m} \left\{ V\rho g + G^{RAN} \left[\frac{2ck_B T}{\Delta t} \right]^{1/2} \right\} \quad (17)$$

$$c' = \frac{c}{m} \quad (18)$$

이를 대입하여 반복적으로 식을 풀고 인수분해 하면 다음과 같다.

$$x(t + \Delta t) = \frac{2x(t) - x(t - \Delta t) \left(1 + \frac{c'\Delta t}{2}\right) + b\Delta t^2}{\left(\frac{1 + c'\Delta t}{2}\right)} \quad (19)$$

$$v(t) = \frac{x(t + \Delta t) - x(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (20)$$

식(19)와 식(20)을 통해서 시간증분 Δt 후의 입자의 속도와 위치를 결정할 수 있다. 그러나 수치적분을 위해서 입자들의 초기 위치와 속도가 요구된다. 입자의 초기 위치는 해석 대상 물질의 원자구조에 기초하여 값이 정해진다. 따라서 본 연구에서는 반응용재료의 특성을 고려하여 고체입자의 초기 위치는 고상율을 고려하여 직사각형 배열과 육각형 배열로 가정하여 해석을 수행하였다. 초기 속도는 계 중심의 속도가 0 이 되도록 맥스웰 분산을 이용하여 초기화하였다.

2.4 점성식

식(12)에서 제안하는 레오로지 소재의 Potential 함수 ϕ_r 를 구하기 위하여 점성식 η 를 정의하여야 한다. 레오로지 소재의 점성은 많은 연구자에 의하여 발표되어 있다. 그러나 현재까지 가장 널리 알려져 있고, 소재의 성분, 냉각속도 및 shear rate 등이 고려된 Okano[24]식과 Power Law model[25]을 이용하여 고상입자의 거동을 파악하였다. 해석결과의 타당성을 검증하기 위하여 본 연구에서 수행한 압축실험에 의하여 점성식을 도출하여 계산을 수행 하였다.

Okano 가 제안한 레오로지 재료에 대한 점성식은 식(21)와 같다.

$$\eta = \eta_{La} \left[1 + \frac{\alpha \rho_m C^{1/3} \dot{\gamma}^{-4/3}}{2 \left(\frac{1}{f_s} - \frac{1}{0.72 - \beta C^{1/3} \dot{\gamma}^{-1/3}} \right)} \right] \quad (21)$$

$$(f_s < 0.72 - \beta C^{1/3} \dot{\gamma}^{-1/3})$$

$$\alpha = 2.03 \times 10^2 \left(\frac{X}{100} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad \beta = 19.0 \left(\frac{X}{100} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$X = 0.6\%, \quad \eta_{La} = 0.0045 \text{ Pa}\cdot\text{sec}$$

$$C : \text{Cooling rate}, \quad \dot{\gamma} : \text{Shear rate}$$

f_s : Solid fraction, X : Si 성분의 백분율(%)

레오로지 금속의 점성은 일반적으로 전단 속도와 냉각속도에 큰 영향을 받는다. 즉, 전단속도가 증가할수록 유체의 유통저항인 점도는 감소하게 되는 Non Newtonian flow 의 의가소성 특성을 가지게 된다. 이런 관계는 아래와 같이 간단하게 표현된다.

$$\eta = K \dot{\gamma}^{n-1} \quad (22)$$

그러나 전단변형률 속도가 $200 \sim 800 \text{ sec}^{-1}$ 사이에서는 레오로지 재료의 점성은 $\eta = m f_s \dot{\gamma}^{-n}$ 을 만족하나 전단변형률이 어느 임계값을 넘으면 주어진 식을 만족하지 못한다. 따라서 임계값을 사용하고, 정상상태로 본 점성식은 다음과 같이 표현된다.

$$\begin{aligned} \eta(\dot{\gamma}, f_s) &= \eta_{\infty}(f_s) \left[1 + \left(\frac{\dot{\gamma}^*(f_s)}{\dot{\gamma}} \right)^a \right] \\ &= \eta_{\infty}(f_s) \left[1 + \left(\frac{\tau^*(f_s)}{\eta_{\infty}(f_s) \dot{\gamma}} \right)^a \right]^{\frac{a}{n}} \end{aligned} \quad (23)$$

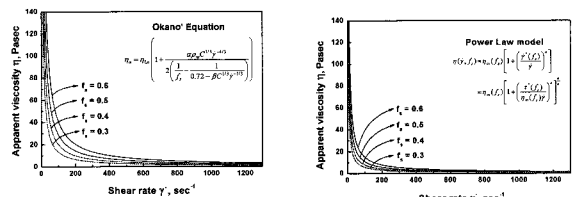
$$\eta_{\infty}(f_s) = 0.091 \exp(4.32 f_s)$$

$$\dot{\gamma}^*(f_s) = 525 \exp(2.35 f_s)$$

$$\tau^*(f_s) = 47.8 \exp(6.67 f_s)$$

$$f_s = \text{Solid fraction}$$

Fig. 4 (a), (b)는 식 (21), (23)에서 제시한 점성식을 이용하여 구한 shear rate 와 점성식의 관계를 고상율의 변화에 따라서 나타낸 것이다. Shear rate 가 100 sec^{-1} 까지는 점도가 급격히 감소함을 보여 주고 있다.



(a) Okano's viscosity

(b) Power law viscosity

Fig. 4 Apparent viscosity versus shear rate at various solid fractions

김우영[26]등은 밀폐형 다이 내에서 레오로지 소재의 압축실험을 통해 고상률과 전단변형률에 따른 점성식을 제안하였으며, 압축실험을 통하여

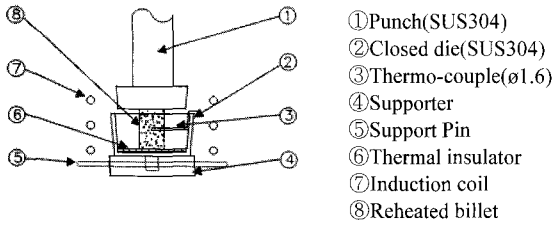


Fig. 5 Schematic diagram of die for rheology material compression experiment

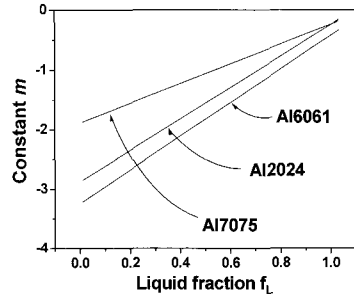


Fig. 8 The constants m at the equation ($\eta = k \dot{\gamma}^m$) of viscosity as a function of liquid fraction in wrought Al alloys (Al2024, Al6061, Al7075)

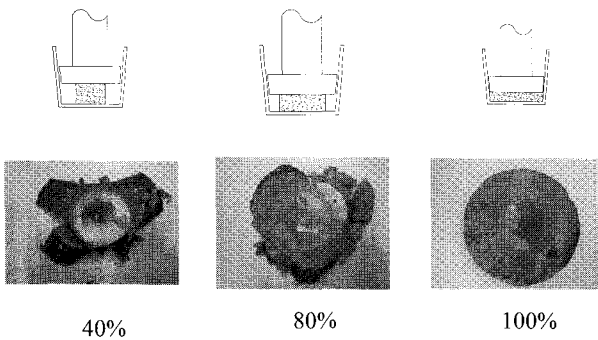


Fig. 6 Macrographs of specimens tested with same li ($V_c=0.05m/s$) for variation of compression rate (height reduction rate) in wrought aluminum quid fraction ($f_L=0.5$) and punch velocity alloy Al 7075

장비는 가압속도의 제어가 가능한 MTS 사의 장비를 이용하였으며, 시편의 초기크기는 직경×높이=30×50mm 이다. Fig. 6 에 가압에 따른 소재의 형상 변화를 나타내었다. 소재는 일정한 고상율을 가지도록 하기 위하여 코일에 의해 가열되며 상부의 펀치에 의해 가압된다. 점성은 식 (24), (25)와 같이 전단변형률에 관한 간단한 형태로 표현할 수 있으면 각 구조용 알루미늄 소재의 점성계수 K 와 m 은 Fig. 7 과 Fig. 8 에 나타내었다.

레오로지 소재는 고상률에 대해 각각 다른 점성계수를 가지므로 그에 따라 다양한 점도를 나타내게 된다. 따라서 변수 K 와 m 의 조절을 통한 각각의 고상률에 따른 점도식의 변화가 가능하다.

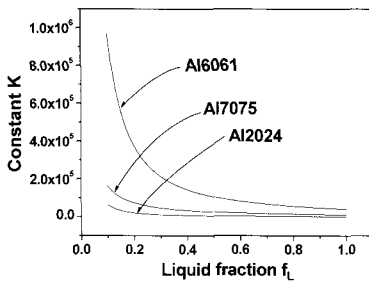


Fig. 7 The constants k at the equation ($\eta = k \dot{\gamma}^m$) of viscosity as a function of liquid fraction in wrought Al alloys (Al2024, Al6061, Al7075)

소재의 온도와 가압속도를 고려하여 점성을 구한 결과를 본 연구에 이용하였다. Fig. 5 에 실험을 위한 장치의 개요도를 나타낸 것이다.

알루미늄 Al7075 소재를 SUS304 컵내부에 설치한 후 고주파코일에 의하여 고상율을 제어한다. 고상율이 제어되면 가압을 하여 $\dot{\gamma}$ 를 사출하였다.

$$\eta = K \dot{\gamma}^m \quad (24)$$

$$\dot{\gamma} = K \frac{1}{2} \sqrt{\frac{V}{\pi h^3}} \dot{\epsilon} \quad (25)$$

여기서 $\dot{\gamma}$, V 및 h 는 strain rate, 압축속도 및 소재의 높이를 각각 나타낸다.

2.5 입자 배열

본 연구에서는 구조용 알루미늄합금 중 하나인 Al 7075 소재의 압축 실험에 대한 해석을 수행하였다. 레오로지 소재의 특성상 고체입자와 액체입자가 공존하고 있는 상태에서는 고체 입자의 형태와 배열상태에 따라서 고상률의 변화를 가져온다. 따라서 본 연구에서는 레오로지 소재의 특성을 파악하기 위하여 고상입자의 형태와 배열방법을 고려하여 고상율을 예측하는 알고리즘을 이용하였다.

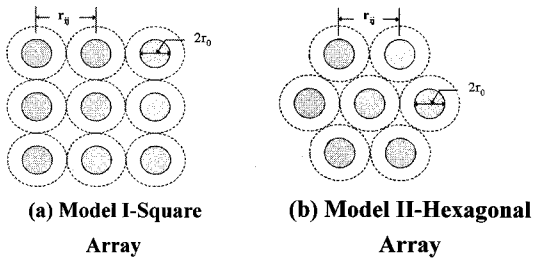


Fig. 9 Definition of microstructure of material (particle array) to obtain of solid fraction in rheology material with $f_{smax}=0.79$ and $f_{smax} = 0.9$

고상입자들의 배열형상은 Fig. 9 (a), (b)에서와 같이 금속원자의 배열방법을 이용하여 2 가지 모델로 가정하였다. 변형되는 고상입자의 배열방식에 따라 사각형과 육각형의 2 가지 모델로 가정할 수 있다. 반응용재료의 고상입자가 Fig. 9(a), (b)와 같이 배열되어 분포되어 있다고 가정하면, 고상입자가 액체금속 내에 직사각형 배열과 육각형 배열을 하고 있을 때 고상률 f_s 는 각각 다음과 같이 정의 한다.

$$f_s^{squ} = \frac{\pi}{4} \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^2 \quad (26)$$

$$f_s^{hex} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^2 \quad (27)$$

3. 해석 결과 및 고찰

3.1 해석 모델

수치해석에 사용된 점성식은 Okano 가 제안한 점성식, Power law 점성식 및 실험에서 구한 점성식을 이용하였다.

Table 1 Simulation conditions(Al 7075)

Conditions	Initial shape	Particle array	Solid Fraction	Tool velocity (m/s)
1	Rectangular	Square	0.5	0.5
2	Rectangular	Hexagonal	0.5	0.5
3	Free shape	Square	0.5	0.5

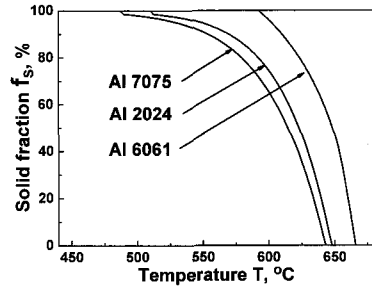
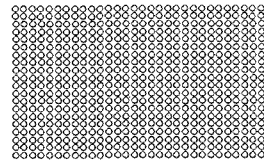
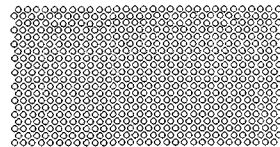


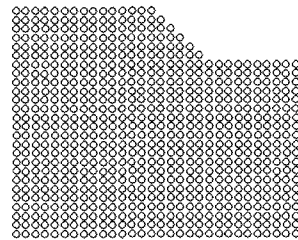
Fig.10 Liquid fraction of aluminum alloys concerned with Temperature



(a) Rectangle shape (square array)



(b) Rectangle shape (hexagonal array)



(c) Free shape tool

Fig.11 Material initial shape (a) rectangle(square array), (b) rectangle(hexagonal array), (c) free shape tool(square array)

전산모사실험에 사용된 레오로지 소재는 구조용 알루미늄의 하나인 Al7075로 초기고상입자는 단조공정이 진행되는 동안 반경이 40 μ m로 측정된 값을 이용하였다. 해석 조건 내에서 고상률 f_s 는 0.5 이다. 소재는 가로 30, 세로 20개의 입자가 배열되어 총 600개 입자로 구성되었고 임의의 공구형상에서는 사각형상 배열로 총 705개의 입자가

사용되었다.

입자의 배열과 온도에 따른 고상률에 의해 식 (26), (27)을 이용하여 초기 입자간 거리를 결정하였다. 알루미늄 소재의 온도에 따른 고상률을 Fig. 10에 나타냈다. Al7075의 경우 고상률 50%는 887K의 온도에 상응한다. 각 소재는 상부 편치에 의해서 압축이 되고 하부는 고정되어있다고 가정하였다. 자유단조를 가정하여 입자들은 좌우로 자유롭게 움직일 수 있게 하였다. 해석이 진행되는 동안 계의 온도는 일정하며 입자는 완전 탄성체로 가정하였다.

Fig. 11은 동적해석을 위하여 초기고상률의 배열상태를 나타낸 것이다. Fig. 11 (a), (b)에서 보여주는 Model I과 Model II에 해당하는 고상입자의 배열상태이며, Fig. 11 (c)는 Fig. 11 (a)의 사각형 Model에 경사진 다이를 가진 형태를 나타낸 것이다. 같은 고상률에서 초기 입자의 간격은 사각형상 배열 보다. 육각형상 배열이 약 7% 크다. 실제로 레오로지 소재내의 고상입자의 크기와 간격은 알루미늄 원자의 크기와 간격보다 100 배 이상 크므로 레오로지 입자간의 포텐셜은 입자의 유동을 방해하는 점성력에 의한 힘에 비해 미미한 것으로 나타났다. 50%압축을 실시한 후 입자간 포텐셜은 10^{-6} eV/particle의 크기인데 비하여, 점성력은 10^{-2} eV/particle로 약 10,000 배의 차이를 보였다.

3.2 해석 결과

3.2.1 Okano 점성식을 이용한 입자의 거동

Fig. 12 (a)-(c)는 Table 1에서 보여주는 condition 1~3에서 보여주는 바와 같이 압축율이 각각 20, 35, 50%에서 고상입자의 초기 model 변화에 따른 소재 내 고상 입자의 거동을 나타내었다. 압축이 진행됨에 따라서 소재의 상부에서부터 입자의 밀집이 시작되고, X축 방향으로의 구속이 없기 때문에 레오로지 고상 입자가 좌우로 빠져나가고 그 결과 소재의 좌우측 형상이 타원에 가까워지는 것을 볼 수 있었다.

입자의 크기가 동일하고 고상률이 큰 경우 전체형상의 크기가 작게되고 형상의 크기를 제외한 입자의 거동적 측면에서 고상률에 따른 차이를 발견하기 어렵다. 50% 압축후의 소재의 폭변화와 입자의 평균높이를 Table 2에 나타내었다. 소재의 폭변화 d_r , 소재의 높이변화 h_r , 입자의 평균높이 h_a 를 다음과 같이 정의하였다.

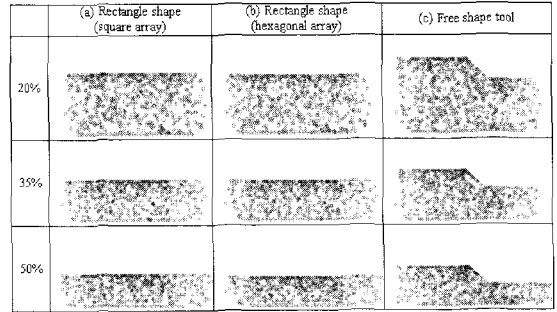


Fig.12 Simulation result of square array particles behavior during compression by condition 1-3 (Okano viscosity, $f_s = 0.5$, $v_r = 0.5$ m/s)

Table 2 Verging rate and mean height

Condition(%)	1	2	3	4
Rate of spreading out d_r	52	50	61	29
Particle mean height h_a	63	63	52	71

$$d_r = \frac{d - d_0}{d_0} \times 100(\%) \quad (28)$$

$$h_r = \frac{h - h_0}{h_0} \times 100(\%) \quad (29)$$

$$h_a = \frac{\sum_{i=1}^N h_i}{N} \times 100(\%) \quad (30)$$

여기서 d , d_0 , h , h_0 , N , h_i 는 변형 후 소재의 직경, 변형 전 초기 소재의 직경, 변형 후 소재의 높이, 초기 소재의 높이, 입자의 개수 및 입자의 높이를 각각 나타낸다.

Square array model과 Hexagonal array model에 있어서 압축율의 변화에 따라서 입자의 거동현상은 차이를 보이지 않고 있다. Fig. 12 (c)는 경사진 다이를 가진형태에서 입자의 초기 배열이 Square 배열일 때 높이 감소율의 변화에 따른 고상 입자의 거동을 나타낸 것이다. 다이 코너 부분에서 고상 입자가 응집되어 있는 것을 볼 수 있다.

Table 1의 Condition 2의 결과는 초기 입자의 배열이 Hexagonal의 경우에 입자의 X축 및 Y축 방향으로의 움직임이 Table 1의 Condition 1의 경우보다 자유롭다는 것을 알 수 있다. 초기 입자간의 거리는 육각형상의 경우가 약 7% 크게 되고, 이

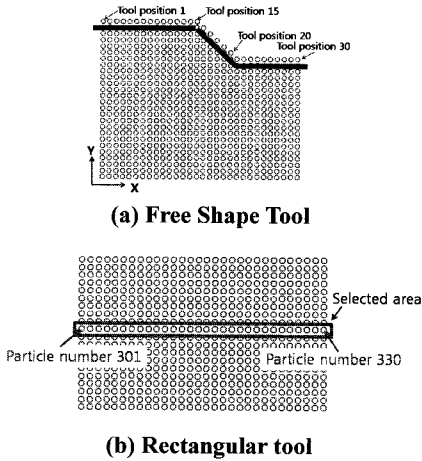


Fig.13 Position numbers on tool for getting the force data on tool according to different positions

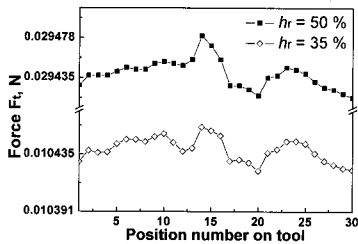


Fig.14 Force comparison on free shape tool at height reduction rate $h_r = 35\%$, $h_r = 50\%$

에 따라 입자간의 반발이 적어 좌우로 빠져나오는 양이 적다. Table. 1의 Condition 1의 경우 입자의 평균 높이 및 좌우로 빠져나간 입자의 비율이 63%, 52% 였고, Table 2의 Condition 2의 경우 평균 높이가 63%, 좌우로 빠져나간 입자의 비율 50%로 나타났다. 단조공정에서 소재의 부피가 변하지 않고 일정하고, 고상률이 변하지 않는다는 가정에 따라 소재의 초기 입자배열이 Hexagonal 일 경우 고상입자의 이동이 자유롭지 못하고 그에 반해 액상의 이동이 활발하여 액상편석이 소재 좌우측에서 Square 배열에 비해 많이 나타날 것을 예상할 수 있다.

압축이 진행됨에 따라서 공구가 받은 반력을 계산하기 위하여 공구의 위치를 Fig. 13 (a), (b)에 표시하였다.

Fig. 13 (a)는 Tool position 이 1, 15, 20, 30 위치이고 Fig 13 (b)는 Tool position 에 대응하는 입자의 번호는 301 에서 330 까지 입을 의미한다.

Fig. 13 과 Fig. 14 에서 볼 수 있는 것처럼 임의

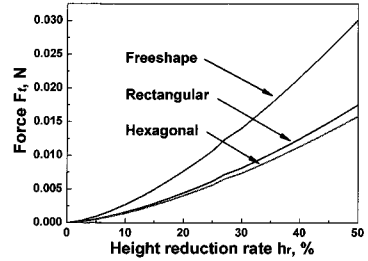


Fig.15 Force comparison according to compression rate at condition 1, 2, 3(Okano viscosity, difference of tool shape and initial particle array)

형상의 공구를 사용한 압축실험의 전산모사에서 고체 입자들이 공구의 경사면에서 고착되거나 반사되는 것이 아니라 경사를 따라 위쪽으로 이동하는 것을 확인할 수 있었다. 고상입자는 공구 경사끝단에 밀집되고 이곳에서 공구가 받는 반력이 커질 것을 예상할 수 있다. 압축이 진행됨에 따라 압축시 경사면의 좌측 끝단의 반력이 주위의 반력보다 두드러지게 높게 나타남을 확인할 수 있다. 따라서 경사끝단에서의 반력에 의한 공구의 손상이 예상된다. 반면에 우측 끝단에서는 입자의 밀집이 적어 반력이 작음을 Fig. 14 로부터 알 수 있다. 입자의 수가 적은 공구 외곽부의 반력도 낮게 나타났다.

Fig. 15 은 입자의 초기배열 및 공구의 형상 변화에 대해서 공구가 받는 힘의 차이를 관찰하기 위해 압축이 진행됨에 따라 공구가 받는 반력을 나타낸 것이다. 공구의 형상이 임의형상인 경우, 입자의 개수가 105 개 더 많고 초기 소재의 높이가 Test 1의 소재에 비해 30% 높아 동일한 압축률로 압축하였을 경우에 압축깊이가 큰 것을 고려하더라도 공구가 받는 반력이 2 배로 큼을 알 수 있다. 50% 압축시 임의형상의 공구로 압축한 경우 공구가 받는 반력은 0.0301N, 사각형상의 공구가 받는 반력은 0.0175N 으로 나타났다. 압축률이 증가할수록 반력의 차이도 증가함을 알 수 있는데, 이것은 압축에 따른 전단률의 감소에 따라 점성력이 급격히 늘어나는 것 때문이다.

3.2.2 Power Law 점성식을 이용한 입자의 거동

Fig. 16 (a)~(c)는 Table. 1 에서 주어진 Condition 1~3의 조건인 경우 압축률이 20, 35, 50%로 변형

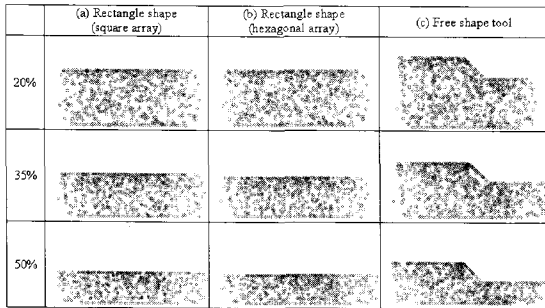


Fig.16 Simulation result of square array particles behavior during compression by Condition 1-3 (Power law, $f_s = 0.5$, $v_t = 0.5$ m/s)

Table3 Verging rate and mean height

Condition(%)	1	2	3	4
Rate of spreading out d_r	53	51	73	29
Particle mean height h_a	63	63	53	71

되었을 때 반응용소재 내 고상 입자의 거동을 나타내었다.

압축이 진행됨에 따라 소재의 상부에서부터 입자의 밀집이 시작되고, X 축 방향으로의 구속이 없기 때문에 레오로지 고상 입자가 좌우로 빠져나가고 그 결과 소재의 좌우측 형상이 타원에 가까워지는 것을 볼 수 있었다. 50% 압축후의 소재의 폭변화와 입자의 평균 높이를 Table 3 에 나타내었다.

재료내 입자의 거동 측면에서 Okano 점성식을 이용한 경우와 Power law 를 적용한 경우 차이를 발견하기가 쉽지 않다. 점성식에 의한 입자의 움직임에 확인한 차이가 없는 이유는 인접한 고상 입자간의 방해와 시뮬레이션 데이터의 샘플링 시간에 따른 것으로 보인다. 시뮬레이션 수행시 10^{-6} 초 단위로 계산하여 입자의 움직임을 거의 연속적인 동작으로 미세하게 분해하였기 때문으로 생각된다. 실제로 계산단위를 10^{-3} 이상으로 설정하면 입자의 속도가 매우 커지게 되어 소재 표면영역으로 매우 빠르게 유출되는 현상을 볼 수 있다. 그러나 계산단위의 경우 총 계산시간과 컴퓨터의 성능에 직접적인 영향을 받기 때문에 단위를 너무 작게 하는 것은 지양해야 한다.

압축이 진행됨에 따라 공구가 받는 반력을 Fig. 17 에 나타내었다. 단조공정중 반경이 수~수백 마이크로 크기인 레오로지 입자에 대해서 점성력이

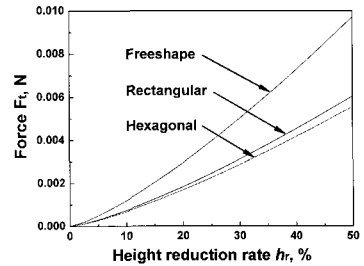


Fig. 17 Force comparison according to compression rate at Condition 1, 2, 3 (Power law, difference of tool shape and initial particle array)

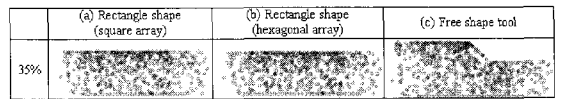


Fig.18 Simulation result particles behavior during compression by condition 1-3 (experimental viscosity, $f_s = 0.5$, $v_t = 0.5$ m/s)

Table4 Verging rate and mean height

Condition(%)	1	2	3	4
Rate of spreading out d_r	42	37	54	50
Particle mean height h_a	64	62	54	64

미치는 영향은 실제 입자간격에 의한 포텐셜에 의한 힘보다 10,000 배 이상으로 매우크다.

3.2.3 실험을 통한 점성식을 이용한 입자의 거동

레오로지 소재의 압축실험을 통해 얻어진 점성식을 이용하여 Table. 1 에서 보여주는 Condition 1~3 의 실험을 실시하였다. 압축률은 35%로 설정하였다. Fig. 18 (a)~(c)는 각 실험을 통한 소재내의 레오로지 소재내의 입자거동을 나타낸 것이다.

35% 압축후의 소재의 폭과 입자의 평균 높이를 Table 4 에 나타내었다.

Fig. 19 는 Table. 1 에서 보여주는 Condition 1~3 에서 35% 압축시 공구의 위치에 따른 반력을 나타낸 것이다. 입자가 밀집됨에 따라 반력은 증가하게 된다. 평판형 공구에 있어서는 입자의 밀집이 가장 심한 중간부에서 가장 높은 반력이 나타나고, 임의의 형상 공구에 있어서는 공구의 경사끝단에서 가장 높고 낮은 반력이 나타났다. 공구의 끝단에서 낮은 반력이 나타남을 알 수 있다.

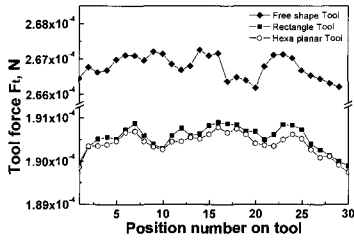


Fig.19 Tool force comparison according to tool shapes and initial particle array at $h_r = 35\%$

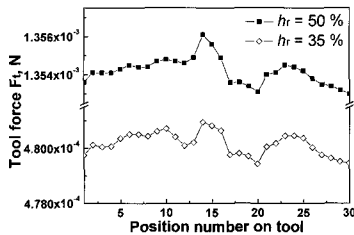


Fig. 20 Force comparison on free shape tool at height reduction rate $h_r = 35\%$, $h_r = 50\%$

Fig. 20 는 Table. 1 에서 보여주는 Condition 4 에서 압축이 진행됨에 따라 입의 형상 공구가 받는 힘이 경사의 끝단(Tool Position Number 15, 20)에 집중되는 것을 보여준다. 50% 압축시 35% 압축의 3 배의 힘이 가해지는 것을 확인할 수 있고, 이것은 압축으로 인한 액상의 소재의 팽으로의 유동과 중심부에 고상입자의 밀집으로 인해서 발생하는 것이다. 압축률이 증가함에 따라 반력의 증가율이 상승하여 결과적으로 반력은 50% 이상의 압축에서 급격히 증가한다. 따라서 정상적인 유동을 보이던 고상입자는 압축력에 의해서 순식간에 소재 표면 쪽으로 유출될 것으로 예측되며 액상편식 현상이 현저하게 증가될 것으로 예상된다.

3.2.4 점성에 따른 레오로지 소재의 압축 시뮬레이션 결과 비교

실제로 Okano, Power law 식에 따라 단조시물레이션 한 경우 입자의 거동에 있어서 큰 차이를 보이지 않았지만, 입자가 받는 힘에 대해서는 많은 차이를 보였다. 같은 조건에서 단조실험을 실시한 경우 동일한 압축에 있어서 동일한 전단 변형률을 가진다고 가정한다면 입자의 유동을 방해하는 점성력이 입자가 받는 힘의 대부분을 차지

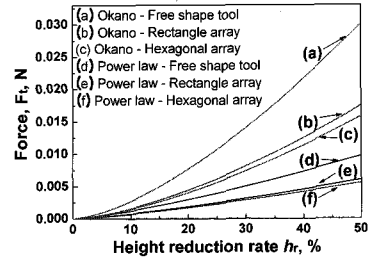


Fig.21 Tool force comparison on Okano and Power law viscosity

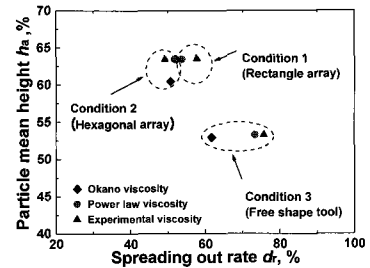


Fig.22 Verging rate and particle mean height comparison according to different viscosity at $h_r = 50\%$

할 것이다. 50% 압축시 Okano 점성을 적용한 경우 Power law 점성을 적용한 경우에 비해 공구가 받는 힘이 3 배임을 Fig. 21 에서 확인할 수 있다.

Fig. 22 는 Okano, Power law, 실험에 의한 점성식에 따른 소재 입자의 유동을 나타낸 것이다. 50% 압축후 Condition 1, 2, 3 의 결과를 토대로 비교한 결과 전체적으로 소재의 평균높이와 좌우로의 유동은 서로 반비례하는 것으로 나타났다. 각각의 실험 결과 레오로지 입자의 평균 높이의 변화는 미미한 것으로 나타났다. 소재의 점성이 큰 Okano 점성에서 입자의 유동이 가장 억제됨을 확인할 수 있다.

4. 결론

레오로지 소재의 입자 동역학 시뮬레이션을 통해 레오로지 입자의 배열, 공구의 형상, 그리고 압축속도에 따른 레오로지 고상입자의 전반적인 거동과 공구가 받는 힘, 소재 중심부에 위치한 입자가 받는 힘과 속도를 예측하였다.

(1) 고상과 액상이 공존하는 레오로지 소재의

변형거동을 예측할 수 있는 포텐셜 함수를 제안하였으며, 실험과 이론해석을 통하여 고상입자의 거동을 고려한 압축거동의 특성을 파악할 수 있는 해석 방법을 제시 하였다.

(2) Okano 점성 및 Power law 점성을 적용하여 시뮬레이션 한 결과 고상율 0.5 에서 Okano 점성을 이용한 경우에 입자에 적용하는 항력에 의해 입자의 움직임이 억제됨을 확인할 수 있었다.

(3) 입자의 크기가 일정한 경우 입자의 배열에 있어서 사각배열보다 육각배열에서의 입자의 움직임이 활발한 것을 확인하였다.

(4) 공구의 형상에 따라서 공구가 받는 힘의 차이가 나타남을 알 수 있었으며 이로 인하여 고체 입자의 밀도가 공구형상에 따라서 상이함을 알 수 있었다. 특히 경사진 공구의 경우 경사의 끝단에서 입자가 많이 밀집하게 되고 가장 큰 힘이 형성되는 것을 알 수 있다.

후 기

본 연구는 교육과학기술부/한국과학재단 국가핵심연구센터사업(R15-2006-022-02001-0)지원으로 수행되었음.

참 고 문 헌

[1] G. Chirmetta, L. Zanardi, 1996, Production of Structural Components by Thixoforming Aluminum Alloys, Proc. of the 4th Int. Conf. on Semi-Solid Processing of alloys and Composites, Sheffield, June 1996D. H. Kirkwood, P. Kapranos, Eds. Univ. of Sheffield, UK, pp. 235~244.

[2] K. P. Young, 1996, Semi-Solid Metal Forming Alloys and Composites, Nature and Properties of Semi-Solid Materials Proc. of a Symposium by the TMS Solidification Committee of the Material Design and Manufacture Division, pp. 245~266.

[3] M. C. Flemings, 1991, Behavior of Metal Alloys in the Semi-Solid State, Metallurgical Transactions A. Volume 22A, pp. 957~981.

[4] C. G. Kang, P. K. Seo, S. S. Kang, 2006, The effect of injection velocity on liquid segregation and mechanical properties in arm part fabrication by semi-solid die casting, Journal of Materials Processing Technology, 176, pp. 32~40.

[5] P. K. Seo, S. W. Youn, C. G. Kang, The effect of test specimen size and strain rate on liquid segregation deformation behavior of mushy state materials, Journal of Materials Processing Technology, Vol. 130-131 pp. 551~557

[6] W. Y. Kim, C. G. Kang, B. M. Kim, 2007, Deformation behavior of wrought aluminum alloys in incremental compression experiment with a closed die, Journal of Materials Processing Technology, 191, pp. 372~376.

[7] B. Alder, T. Wainwright, 1959, Studies in molecular dynamics I. General method, J. Chem. Phys. Vol. 31, p. 459.

[8] B. Alder, T. Wainwright, 1960, Studies in molecular dynamics II. Behavior of a small number of elastic spheres, J. Chem., Phys., Vol. 33, p. 1439.

[9] W. G. Hoover, 1986, Molecular dynamics, Int. lect. Notes Phys. Vol. 258, Springer-Verlag, Berlin, p. 13.

[10] W. G. Hoover, A. J. De Groot, C. G. Hoover, I. F. Stowers, T. Kawai, B. L. Holian, T. Boku, S. Ihara, J. Belak, 1990, Large scale elastic-plastic indentation simulations via non-equilibrium molecular dynamics, Phys. Rev. A, Vol.42(10), p. 5844.

[11] J. Belak, 1994, Nanotribology: modelling atoms when surfaces collide, in: Energy & Technology Review, Lawrence Livermore Laboratory, Livermore, CA, p. 13.

[12] N. Ikawa, S. Shimada, H. Tanaka, G. Ohmori, 1991, An atomistic analysis of nanometric chip removal as affected by tool-work interaction in diamond turning, Ann. CIRP, Vol.40(1), p. 551.

[13] S. Shimada, N. Ikawa, G. Ohmori, H. Tanaka, 1992, Molecular dynamics analysis as compared with experimental results of micromachining, Ann. CIRP, Vol.41(1), p. 117.

[14] S. Shimada, N. Ikawa, H. Tanaka, G. Ohmori, J. Uchikoshi, H. Yoshinaga, 1993, Feasibility study on ultimate accuracy in microcutting using molecular dynamics simulation, Ann. CIRP, Vol.42(1), p. 91.

[15] S. Shimada, N. Ikawa, H. Tanaka, J. Uchikoshi, 1994, Structure of micromachined surface simulated by molecular dynamics analysis, Ann. CIRP, Vol.43(1), p. 51.

[16] S. Shimada, 1995, Molecular dynamics analysis of nanometric cutting process, Int. J. Jpn. Soc. Precis.

- Eng., Vol.29(4), p. 283.
- [17] T. Inamura, H. Suzuki, N. Takezawa, 1991, Cutting experimentals in a computer using atomic models of copper crystal and a diamond tool, Int. J. Jpn. Soc. Precis. Eng., Vol.25(4), p. 259.
- [18] T. Inamura, N. Takezawa, N. Taniguchi, 1992, Atomic-scale cutting in a computer using crystal models of copper and diamond, Ann. CISP, Vol.41(1), p. 121.
- [19] T. Inamura, N. Takezawa, Y. Kumaki, 1993, Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting, Ann. CIRP, Vol.42(1), p. 79.
- [20] T. Inamura, N. Takezawa, Y. Kumaki, T. Sata, 1994, On a possible mechanism of shear deformation in nanoscale cutting, Ann. CIRP, Vol.43(1), p. 47.
- [21] W. G. Hoover, 1986, Molecular dynamics, int. lect. Notes Phys. Vol. 258, Spring-Verlag, Berlin, pp.13.
- [22] B. V. Derjagin, L. Landau, 1941, Theory of the stability of strongly charged lyophobic sols the adhesion of strongly charged particles in solutions of electrolytes, Acta Physiochem. URSS(14), pp. 633~662.
- [23] E. J. W. Verwey, J. Th. G. Overbeek, 1948, The theory of the stability of lyophobic colloids, Elsevier.
- [24] S. Okano, 1994, Research Activities in Rheo-Technology Ltd., The 3rd Int. Conf. on Semi-Solid Processing of Alloy and Composites, pp. 7~13, Tokyo, June.
- [25] H. Peng, S. P. Wang, K. K. Wang, 1994, Rheomolding-Injection Molding of Semi-Solid Metals, The 3rd Int. Conf. on Semi-Solid Processing of Alloy and Composites, pp. 191~200, Tokyo, June.
- [26] W. Y. Kim, C. G. Kang, B. M. Kim, 2007, The effect of the solid fraction on rheological behavior of wrought aluminum alloys in incremental compression experiments with a closed die, Materials Science and Engineering A, Vol. 447, pp. 1~10.