

레오로지 소재의 고상입자 변형거동 해석

권기영¹, 강충길²

Solid Particle Behavior Analysis in Rheology Material by Fortran 90

K. Y. Kwon and C. G. Kang

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. 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 eqation, Thixotropic behavior

1. 서론

레오로지 가공이란 응고시 고상과 액상이 공존하는 레오로지 상태에서 재료를 성형하는 방법이다. 레오로지 성형은 용융상태에서 금속보다 높은 점성으로 인해 유동형태가 난류로 발달하지 않는다. 또한 일반 주조작업에서 일어나는 응고에 의한 수축률이 적으며 낮은 온도에서의 작업으로 인한 금형의 열피로도를 줄일 수 있으며, 적은 하중으로도 복잡한 형상의 부품을 만들어 낼 수 있는 등의 장점 등을 지니고 있다[1]. 최근 고상과 액상의 거시적인 분리현상을 예측할 수 있는 레오로지 (Rheology)이론을 레오로지 재료에 적용하여 해석하고자 하는 연구가 시도되고 있다. 이상 유동을 고려한 레오로지 해석은 고상과 액상의 유동을 각각 해석하여 비교할 수 있는 장점이 있기 때문에 레오로지 재료의 성형공정 특성을 파악할 수 있는 장점이 있다. 최근에 컴퓨터를 이용

한 전산 모사에 의해 유동과 응고 과정의 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)[2,3]을 이용하여 고상입자들의 거동을 예측해보고자 하였다. 최근에 연구가 활발히 진행중인 분자동역학에 관한 연구는 1950년대 후반 Alder와 Wainwright에 의해 시작되었다[2]. 그 이후 분자동역학은 조직성장, 압입 마찰공학에 관한 영역으로 넓게 적용되었다[3]. 그러나, 마이크로 레벨의 해석은 현실적으로 불가능하며 수 나노 정도의 크기에 대한 해석이 대부분이다. 컴퓨터 기술의 비약적인 발전과 분자동역학 테크닉의 발전에 따라 마이크로 레벨로 적용될 것으로 사료된다.

일반적인 소성역학이나 유체역학적인 해석은 레오로지 재료의 거동을 모사하는데 적합하지 않

1. 부산대학교 기계공학부

게 된다. 그래서 자유표면의 상태와 상변태의 응고 같은 복잡한 공정들을 고려해야만 하기 때문에 레오로지 소재의 성형공정을 전사모사 하는 것은 어렵다.

본 연구에서는 분자동력학을 이용한 입자거동 해석을 이용하여 압축 실험 시 점성식의 변화에 따른 고상 입자의 거동을 예측방법을 제시하였다.

2. 본 론

2.1 포텐셜 함수

분자동력학을 계를 이루는 물질에 따라 포텐셜 함수를 달리한다. 반데르 발스력에 의해 결합되는 가스 입자들의 경우에 레나드존스포텐셜[4]이 사용되고, 금속과 같이 공유결합에 의해 결합된 입자들의 경우에는 모스 포텐셜이 사용된다[5]. 본 연구에서는 레오로지 소재의 거동을 해석하기 위해 콜로이드학에서 널리 사용되는 DLVO모형을 사용하였다[6].

$$\begin{aligned} \phi_O &= \phi_A + \phi_R \\ \phi_A &= -\frac{a_1}{12\pi r^2} \\ \phi_R &= 2\pi a_2 r_{ij} \exp(-a_3 r) \end{aligned} \quad (1)$$

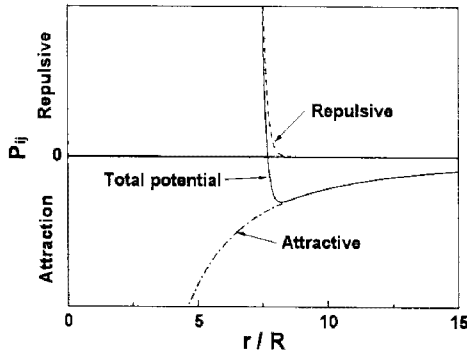


Fig. 1 Typical DLVO inter-particle potential

여기서 $a_1 \sim a_3$ 는 소재에 따른 Hamaker constant이다. 포텐셜함수 ϕ_O 의 전형적인 그래프는 Fig. 1과 같다.

본 연구에서는 식(1)에서 언급한 DLVO 함수를 이용하여 입자간 거리의 함수가 작용하는 힘 ϕ_O 와 고체입자에 작용하는 힘을 표시하는 식을 이용하여 반응용재료의 포텐셜 함수는 다음과 같이 정의한다.

$$\phi_r = \phi_O + F_a + F_T \quad (2)$$

$$F_a = (-cv)K' = -(6\pi\eta av)K' \quad (3)$$

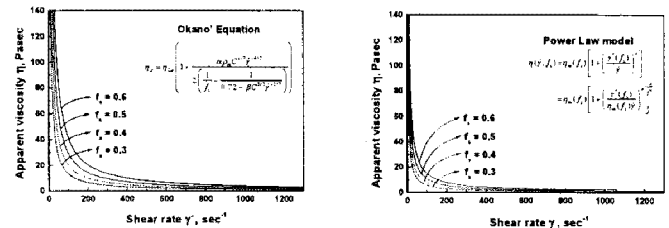
$$F_T = mg - V\rho g + F_e \quad (4)$$

여기서 F_a 는 타원형 입자에 대한 항력, F_T 는 중력(mg), 부력(vp ρ g), 통계적랜덤함수(F_e)의 합력을 나타낸다.

식 (3)에서 제안하는 고상입자의 항력을 구하기 위해 점성식(η)을 정의 하여야 한다.

연구에서는 현재까지 가장 널리 알려져 있고, 소재의 성분, 냉각속도 및 shear rate등이 고려된 Okano[7]식과 Power Law model[8]을 이용하여 고상입자의 거동을 파악 하였다.

Fig. 2는 각각의 점성식을 이용하여 구한 고상율의 변화에 따른 그래프 이다.



(a) Okano's viscosity (b) Power law viscosity

Fig. 2 Apparent viscosity versus shear rate at various solid fractions

3. 결과 및 고찰

3.1 해석모델

수치해석에 사용된 점성식은 Okano가 제안한 점성식과 Power law 점성식을 이용하였다.

Table 1 Simulation conditions

Conditions	Initial Shape	Particle array
1	Rectangular	Square
2	Rectangular	Hexagonal
3	Free shape	Square

전사모사실험에 사용된 레오로지 소재는 구조용 알루미늄의 하나인 Al7075로 초기고상 입자는 40 μ m로 측정된 값을 이용하였다. 해석조건 내에서 고상율은 0.5이며, Tool의 속도는 0.5m/s로 가정하였다.

소재는 가로 30, 세로 20개의 입자가 배열되어 총 600개 입자로 구성되었고 임의의 공구 형상에서

는 사각형상 배열로 총 705개의 입자가 사용되었다. 배열에 따른 입자 사이의 간격은 Fig. 3에 나타낸다.

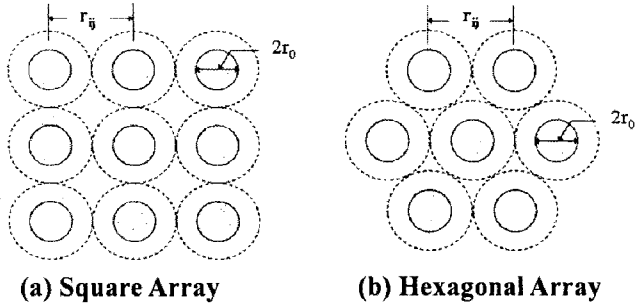


Fig. 3 Definition of microstructure of material (particle array) to obtain of solid fraction in rheology material

3.2 해석 결과

3.2.1 Okano 점성식을 이용한 입자의 거동

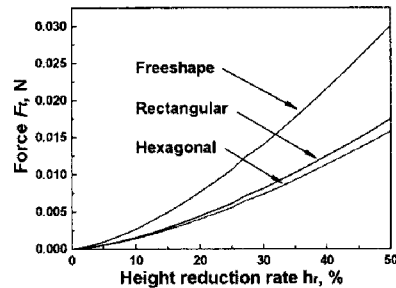
Fig. 4 (a)~(c)는 Okano 점성식을 이용하여 Table 1의 Conditions 1~3에서 압축률이 각각 20, 35, 50%에서 고상입자의 초기 model변화에 따른 소재 내 고상입자의 거동을 나타내었다. 압축이 진행됨에 따라서 소재의 상부에서부터 입자의 밀집이 시작되고, X축 방향으로의 구속이 없기 때문에 레오로지 고상입자가 좌우로 빠져나가고 그 결과 소재의 좌우측 형상이 타원에 가까워지는 것을 볼 수 있다.

	(a) Rectangle shape (square array)	(b) Rectangle shape (hexagonal array)	(c) Free shape tool
20%			
35%			
50%			

Fig. 4 Simulation result of square array particles behavior during compression by condition 1-3 (Okano viscosity, $f_s = 0.5$, $v_t = 0.5$ m/s)

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, 이에 따라 입자간의 반발이 적어 좌우로 빠져나오는 양이 적다.

Fig. 5 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 105개 더 많고 초기 소재의 높이가 Test 1의 소재에 비해 30% 높아 동일한 압축률로 압축하였을 경우에 압축깊이가 큰 것을 고려하더라도 공구가 받는 반력이 2배로 큼을 알 수 있다. 50% 압축시 임의형상의 공구로 압축한 경우 공구가 받는 반력은 0.0301 N, 사각형상의 공구가 받는 반력은 0.0175 N으로 나타났다. 압축률이 증가할수록 반력의 차이도 증가함을 알 수



있는데, 이것은 압축에 따른 전단률의 감소에 따라 점성력이 급격히 늘어나는 것 때문이다.

Fig. 5 Force comparison according to compression rate at condition 1, 2, 3 (Okano viscosity, difference of tool shape and initial particle array)

3.2.2 Power Law 점성식을 이용한 입자의 거동

Fig. 6 (a)~(c)는 Table. 1에서 주어진 Condition 1~3의 조건인 경우 압축률이 20, 35, 50%로 변형되었을 때 반응용소재 내 고상 입자의 거동을 나타내었다.

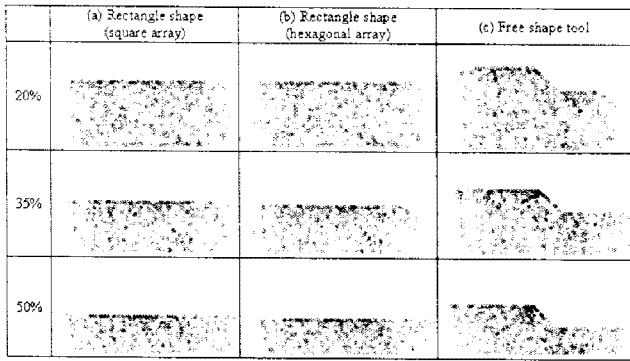


Fig. 6 Simulation result of square array particles behavior during compression by Condition 1-3 (Power law, $f_s = 0.5$, $v_s = 0.5$ m/s)

재료내 입자의 거동 측면에서 Okano 점성식을 이용한 경우와 Power law를 적용한 경우 차이를 발견하기가 쉽지 않다. 점성식에 의한 입자의 움직임에 확연한 차이가 없는 이유는 인접한 고상 입자간의 방해와 시뮬레이션 데이터의 샘플링 시간에 따른 것으로 보인다.

압축이 진행됨에 따라 공구가 받는 반력을 Fig. 7에 나타내었다. 단조공정중 반경이 수~수백 마이크로 크기인 레오로지 입자에 대해서 점성력이 미치는 영향은 실제 입자간격에 의한 포텐셜에 의한 힘보다 10,000배 이상으로 매우 크다.

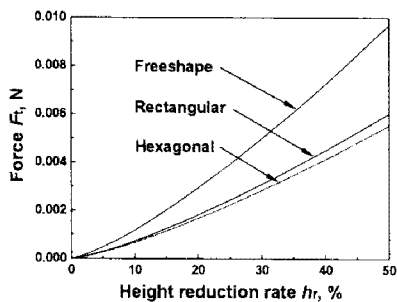


Fig. 7 Force comparison according to compression rate at condition 1, 2, 3 (Power law, difference of tool shape and initial particle array)

4. 결 론

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 제시하였다.

(2) Okano점성 및 Power law점성을 적용하여 시뮬레이션 한 결과 고상을 0.5에서 Okano점성을 이용한 경우에 입자에 적용하는 항력에 의해 입자의 움직임이 억제됨을 확인 할 수 있었다.

(3) Okano점성을 이용한 식과 Power law점성을 적용한 결과 가시적인 움직임에서는 큰 변화가 없었지만, 공구가 받는 반력에는 변화가 있음을 확인할 수 있었다.

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

후 기

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

참 고 문 헌

- [1] A. M. Mullis, Toward a microstructural model of semi-solid rheology, Proc. 5th Int. Conf. on Semi-Solid Processing of Alloys and Composites, pp.265-272, 1998.
- [2] G. Yosiyuki, Molecular dynamics and Monte Carlo computing simulation, Chap. 2, p.12, 1996.
- [3] D. C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation, Cambridge university press, Chap. 2, pp.12-41, 1995.
- [4] D. E. Kim, N. P. Suh, "Molecular dynamics investigation of two dimensional atomic scale friction", Trans. ASME, J. Tribol., Vol. 116, pp.225, 1994
- [5] W. G. Hoover, "Molecular dynamics", int. lect. Notes Phys. Vol. 258, Springer-Verlag, Berlin, pp.13, 1986
- [6] E. J. W. Verwey, J.Th.G. Overbeek, The theory of the stability of lyophobic colloids, Elsevier, 1948.
- [7] S. Okano, Research Activities in Rheo-Technology Ltd., The 3rd Int. Conf. on Semi-Solid Processing of Alloy and Composites, pp.7-13, Tokyo, June, 1994.
- [8] H. Peng, S. P. Wang, K. K. Wang, Rheomolding-Injection Molding of Semi-Solid Metals, The 3rd Int. Conf. on Semi-Solid Processing of Alloy and Composites, pp.191-200, Tokyo, June, 1994.