

## 결정소성 유한요소법을 이용한 FCC 다결정 금속의 압연 집합조직 예측

박성준\*, 조재형\*, 한홍남\*\*, 오규환\*  
재료공학부 서울대학교\*  
박판연구팀 POSCO 기술연구소\*\*

## Prediction of Rolling Texture Evolution in FCC Polycrystalline Metals Using Finite Element Method of Crystal Plasticity

S.-J. Park\*, J.-H. Cho\*, H. N. Han\*\* and K. H. Oh\*

Division of Materials Science and Engineering, Seoul National University\*  
Sheet Products and Process Research Team, Technical Research Laboratories,  
POSCO\*\*

### Abstract

The development of deformation texture in FCC polycrystalline metals during rolling was simulated by the finite element analysis using a large-deformation, elastic-plastic, rate-dependent polycrystalline model of crystal plasticity. Different plastic anisotropy due to different orientation of each crystal makes inhomogeneous deformation. Assuming plane strain compression condition, the simulation with a high rate sensitivity resulted in main component change from Dillamore at low rate sensitivity to Brass component.

**Key words** : rate-dependent polycrystalline model, finite element analysis, deformation texture, rate sensitivity

### 1. 서론

다결정 금속은 변형의 결과 결정이 재배향됨으로써 결정학적 집합조직이 발달하고, 결정학적 집합조직에 의해 다결정 금속의 탄성, 소성 거동 및 여러 물리적 성질들이 영향을 받게 된다. 다결정 금속의 변형 집합조직 발달 및 소성 거동을 예측하고자, 다양한 모델 및 방법들이 제시되었다(1~9). 이러한 모델 및 방법들은 다결정 금속의 거시적인 거동을 구하는 방법에 따라 현상학적 방법과 결정학적 방법으로 크게 분류될 수 있다. 현상학적 방법은 현상학적 항복식 및 유동 법칙을 이용하는 것으로, 성형공정을 유한요소해석하고, 각 부위의 변형이력을 얻어 변형집합조직을 예측한다(1). 결정학적 방법은 거시적인 거동을 각 결정의 미시적인 거동과 관련시켜 구하는 것으로, ① 다결정 집합체와 이를 구성하는 각 결정이 같은 응력상태를 갖는다고 가정하여 평형조건을 만족하는 Sachs모델(2)과 ② 같은 변형상태를 갖는다고 가정하여 적합조건을 만족하는 Taylor모델(3), ③ 반복계산을 통하여 적합조건과 평형조건이 모두 만족되도록 하는 Self-Consistent 모델(4-9)로 크게 분류된다.

Sachs 모델은 1~2개의 슬립계가 작동하므로 입방정 금속재료의 경우에는 적용하기 힘든 것으로 알려져 있다(10). Taylor 모델은 전체 다결정체를 구성하는 각 단결정들의 변형이 다결정체의 변형과 같다고 가정하여 각 결정의 회전량을 구하게 되며, 소성 이방성이 낮은 입방정 금속의 변형 집합조직을 예측하는데 성공적으로 사용되어 왔다. 최근, Asaro와 Needleman은 결정소성 이론과 Taylor의 가정을 이용하여 대변형, 탄소성, 속도 의존 다결정 모델을 제안하였다(11). 이러한 Taylor-type 모델을 이용한 변형 집합조직의 계산을 위해서는 다결정체의 변형에 관한 정보가 필요하며, 단순화된 변형률 상태를 가정하거나, 변형이력이 복잡할 경우 현상학적 항복식을 이용한 유한요소 해석으로부터 변형이력을 구하는 방법이 많이 사용되었다. 그러나, 단순화된 변형률 상태를 가정하는 방법은 복합적인 변형이 수반되는 성형공정에서의 변형 집합조직을 예측하기에는 한계가 있고, 현상학적 항복식을 이용한 유한요소법의 경우 집합조직으로 인한 다결정 재료의 이방성을 현상학적 항복식으로 완전하게 표현하기 어렵고, 거시적 구성방정식만 만족시키는 해를 구하므로 변화하는 집합조직이 다결정체의 변형에 미치는 영향이 고려되지 않는 단점이 있다. 최근 Kalidindi 등은 수정된 Asaro와 Needleman의 모델을 유한요소법에 적용하여, 단순화된 변형 상태만이 아닌 일반적인 변형을 해석할 수 있는 방법을 제시하였다(12). 이 방법에서는 또한 거시적 구성방정식과 각 슬립계에서의 미시적 구성방정식을 동시에 만족시키는 해를 얻으므로, 다결정체의 변형과 변형 집합조직이 서로 미치는 영향이 동시에 고려된다. 이 연구에서는 Kalidindi의 방법을 이용하여, FCC 금속의 평면변형 압축시 발달하는 집합조직을 계산하고, 변형률속도 민감도에 따른 변화를 고찰하였다.

## 2. 이론적 배경

단결정의 응력과 변형률의 관계인 구성방정식은 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\sigma^* = \mathbf{C}^E [\mathbf{E}^*] \quad (1)$$

여기서  $\mathbf{C}^E$ 는 4차 탄성강성텐서이고,  $\mathbf{E}^*$ 와  $\sigma^*$ 는 각각 탄성변형률과 탄성일 축 응력텐서이며 다음과 같이 정의된다.

$$\mathbf{E}^* \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{*T} \mathbf{F}^* - \mathbf{I}) \quad (2)$$

$$\sigma^* \equiv \mathbf{F}^{*-1} \{ (\det \mathbf{F}^*) \boldsymbol{\sigma} \} \mathbf{F}^{*-T} \quad (3)$$

여기서  $\mathbf{I}$ 와  $\boldsymbol{\sigma}$ 는 각각 2차 단위텐서와 코시 응력텐서이고,  $\mathbf{F}^*$ 는 단결정의 탄성변형구배 (elastic deformation gradient)이며, 변형구배 (deformation gradient)  $\mathbf{F}$ 와 소성변형구배 (plastic deformation gradient)  $\mathbf{F}^p$ 로부터 다음과 같이 정의된다.

$$\dot{\mathbf{F}}^* \equiv \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{p-1} \quad \text{and} \quad \det \mathbf{F}^* > 0 \quad (4)$$

소성변형구배는 소성속도구배 (plastic velocity gradient)  $\mathbf{L}^p$ 와 다음과 같은 관계를 갖는다.

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{L}^p \mathbf{F}^p \quad (5)$$

소성속도구배는 각 슬립계  $a$ 에서의 소성전단속도 (plastic shearing rate)  $\dot{\gamma}^a$ 와 Schmid 텐서  $\mathbf{m}_0^a$ 으로 다음과 같이 표현된다.

$$\mathbf{L}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{m}_0^{\alpha} \quad (6)$$

$$\mathbf{m}_0^{\alpha} \equiv \mathbf{s}_0^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_0^{\alpha} \quad (7)$$

여기서  $\mathbf{s}_0^{\alpha}$ 와  $\mathbf{n}_0^{\alpha}$ 은 각각 기준상태에서 슬립계  $\alpha$ 의 슬립방향과 슬립면에 수직인 단위벡터들이며,  $\otimes$ 는 두 벡터의 텐서적 (tensor product)을 나타낸다. 각 슬립계  $\alpha$ 에서의 소성전단속도는 분해전단응력  $\tau^{\alpha}$ 와 기준전단응력  $\tau_0^{\alpha}$ 의 함수로 표현되며, 멱수법칙 관계를 사용하였다.

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0^{\alpha} \left| \frac{\tau^{\alpha}}{\tau_0^{\alpha}} \right|^{1/m} \text{sign}(\tau^{\alpha}) \quad (8)$$

$$\tau^{\alpha} = (\mathbf{F}^{\cdot T} \mathbf{F}^{\cdot} \boldsymbol{\sigma}^{\cdot}) : \mathbf{m}_0^{\alpha} \approx \boldsymbol{\sigma}^{\cdot} : \mathbf{m}_0^{\alpha} \quad (9)$$

식 (8)에서  $\dot{\gamma}_0^{\alpha}$ 와  $m$ 은 각각 기준전단속도와 슬립의 속도민감도 (rate sensitivity)이다.

### 3. 유한요소 계산

비선형 구성모델을 사용하는 내연적 (implicit) 유한요소 프로그램에서는, 평형조건과 경계조건을 만족하도록 가상일 원리 (virtual work principle)에 따라 변위장을 계산하여 각 적분점에서 응력을 구한다. 시간  $t$ 에서의  $\mathbf{F}(t)$ ,  $\mathbf{F}^p(t)$  및  $\boldsymbol{\sigma}(t)$ 을 알고, 시간  $\tau=t+\Delta t$ 에서의  $\mathbf{F}(\tau)$ 가 주어질 때,  $\mathbf{F}^p(\tau)$ 와  $\boldsymbol{\sigma}(\tau)$ 을 구하고 각 결점의 회전을 계산하게 된다.

$\mathbf{F}^p(\tau)$ 는 식 (5)를 시간에 대해 적분하여 구하고, 근사하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^p(\tau) &= \exp\{\Delta t \mathbf{L}^p(\tau)\} \mathbf{F}^p(t) \\ &\approx \{\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{L}^p(\tau)\} \mathbf{F}^p(t) \approx \left\{ \mathbf{I} + \sum_{\alpha} \Delta \gamma^{\alpha} \mathbf{m}_0^{\alpha} \right\} \mathbf{F}^p(t) \end{aligned} \quad (10)$$

여기서  $\Delta \gamma^{\alpha}$ 는 다음과 같이  $\boldsymbol{\sigma}^{\cdot}(\tau)$ 의 함수로 정의된다.

$$\Delta \gamma^{\alpha} \equiv \dot{\gamma}^{\alpha}(\boldsymbol{\sigma}^{\cdot}(\tau) : \mathbf{m}_0^{\alpha}) \Delta t \quad (11)$$

코시응력  $\boldsymbol{\sigma}(\tau)$ 는 식 (3)에서  $\boldsymbol{\sigma}^{\cdot}(\tau)$ 로부터 구할 수 있으므로 응력  $\boldsymbol{\sigma}^{\cdot}(\tau)$ 를  $\mathbf{F}(\tau)$ 와  $\mathbf{F}^p(\tau)$ 만으로 표현하면 다음과 같다.

$$\boldsymbol{\sigma}^{\cdot}(\tau) = \mathbf{C}^E \left[ \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{F}^{p^{-1}}(\tau) \mathbf{F}^T(\tau) \mathbf{F}(\tau) \mathbf{F}^{p^{-1}}(\tau) - \mathbf{I} \right\} \right] = \mathbf{C}^E \left[ \frac{1}{2} (\mathbf{X} - \mathbf{I}) \right] \quad (12)$$

식 (10)로부터  $\mathbf{X}$ 는 다음과 같이 근사될 수 있다.

$$\mathbf{X} = \mathbf{F}^{p^{-1}}(\tau) \mathbf{F}^T(\tau) \mathbf{F}(\tau) \mathbf{F}^{p^{-1}}(\tau) \approx \mathbf{A} - \sum_{\alpha} \Delta \gamma^{\alpha} \mathbf{B}^{\alpha} \quad (13)$$

여기서

$$\mathbf{A} \equiv \mathbf{F}^{\text{p}-\text{T}}(\mathbf{t})\mathbf{F}^{\text{T}}(\tau)\mathbf{F}(\tau)\mathbf{F}^{\text{p}-1}(\mathbf{t}), \quad \mathbf{B}^{\alpha} \equiv \mathbf{A}\mathbf{m}_0^{\alpha} + \mathbf{m}_0^{\alpha}\mathbf{A} \quad (14)$$

식 (13)를 식 (12)에 대입하면, 응력  $\sigma^*(\tau)$ 는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\sigma^*(\tau) \approx \sigma^{*\text{tr}} - \sum_{\alpha} \Delta\gamma^{\alpha} \mathbf{D}^{\alpha} \quad (15)$$

여기서

$$\sigma^{*\text{tr}} \equiv \mathbf{C}^{\text{E}} \left[ \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{I}) \right], \quad \mathbf{D}^{\alpha} \equiv \mathbf{C}^{\text{E}} \left[ \frac{1}{2}(\mathbf{B}^{\alpha}) \right] \quad (16)$$

$\Delta\gamma^{\alpha}$ 이  $\sigma^*(\tau)$ 의 함수이므로 식 (15)은  $\sigma^*(\tau)$ 에 대한 비선형식이며, Newton 반복계산법을 이용하여 다음과 같이 해를 구할 수 있다.

$$\sigma_{n+1}^*(\tau) = \sigma_n^*(\tau) - \mathbf{H}_n^{-1}[\mathbf{G}_n] \quad (17)$$

여기서

$$\mathbf{H}_n \equiv \mathbf{J} + \sum_{\alpha} \mathbf{D}^{\alpha} \otimes \frac{\partial}{\partial \sigma_n^*(\tau)} \Delta\gamma^{\alpha}, \quad \mathbf{G}_n \equiv \sigma_n^*(\tau) - \sigma_n^{*\text{tr}} + \sum_{\alpha} \Delta\gamma^{\alpha} \mathbf{D}^{\alpha} \quad (18)$$

식 (17)-(18)에서  $n$ 과  $n+1$ 은 각각  $n$ 번째와  $n+1$ 번째 반복계산의 결과를 나타내며,  $\mathbf{J}$ 는 4차 단위 텐서를 나타낸다.  $\sigma^*(\tau)$ 의 초기값으로는  $\sigma^*(\mathbf{t})$ 를 사용하였다. 수렴 후에는 식 (8)과 (11)을 이용하여  $\Delta\mathbf{v}^{\alpha}$ 를 계산하고, 식 (10)로부터  $\mathbf{F}^{\text{p}}(\tau)$ 를 구한다.  $\mathbf{F}^{\text{p}}(\tau)$ 를 이용하여 식 (4)에서  $\mathbf{F}^*(\tau)$ 를 구하고 식 (3)으로부터 코시 응력 텐서를 구하게 된다. 계산과정에서  $\mathbf{F}^{\text{p}}(\tau)$ 는 근사식으로 구한 것이므로, 모든 성분들을  $\det(\mathbf{F}^{\text{p}}(\tau))$ 의 세제곱근으로 나누어  $\det(\mathbf{F}^{\text{p}}(\tau)) = 1$ 을 만족하도록 하였다. 마지막으로, 결정학적 집합조직은 다음 식에 의하여 얻어진다.

$$\mathbf{s}_{\tau}^{\alpha} = \mathbf{F}^*(\tau) \mathbf{s}_0^{\alpha}, \quad \mathbf{n}_{\tau}^{\alpha} = \mathbf{n}_0^{\alpha} \mathbf{F}^{*-1}(\tau) \quad (19)$$

내연적 유한요소 프로그램에서는 응력이 가상일 원리를 더욱 잘 만족할 수 있도록 변형장을 바꾸는 뉴턴형 반복계산법 (Newton-type iterative method)에 사용할 Jacobian 행렬을 구해야 한다. Jacobian 행렬은 수렴성에는 큰 영향을 미치나, 해의 정확성에는 영향이 없다. 이 연구에서는 Kalidindi등(12)이 사용한 교란법 (perturbation method)을 사용하여 Jacobian 행렬을 수치적으로 구하였다.

#### 4. 계산결과 및 고찰

이 연구에서는 내연적 유한요소 프로그램인 ABAQUS/Standard (Version 5.7)의 사용자 부프로그램인 UMAT을 이용하여 계산을 수행하였다. 계산에 사용된 재료의 탄성계수와 프와송비는 각각 200GPa과 0.3이었고, 각 슬립계의 기준전단응력과 기준전단속도는 같다고 가정하였으며, 각각 100MPa과 0.01sec<sup>-1</sup>의 값을 사용하였다. 변형률속도 민감도는 0.05와 0.2, 0.5를 사용하였다.

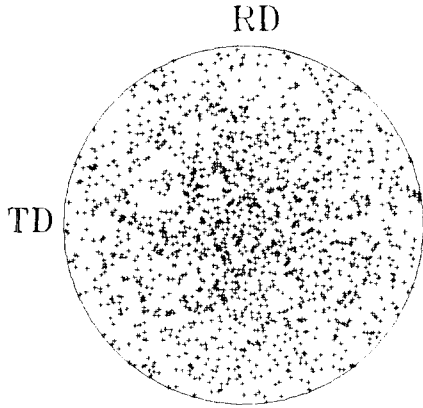


Fig. 1. (111) pole figure of initial random texture with 400 crystal.

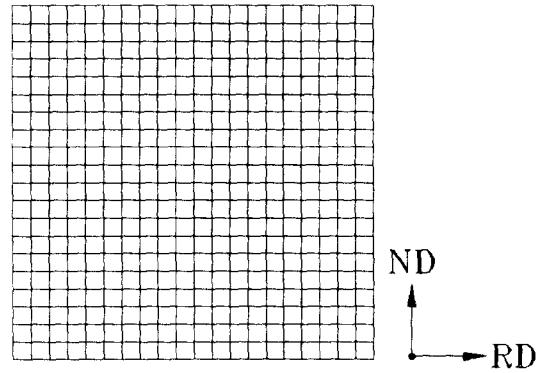


Fig. 2. Initial finite element mesh.

집합조직은 400개의 결정방위를 이용하여 나타내었으며, Fig. 1은 계산에 사용된 초기 무질서한 집합조직의 (111)극점도이다. Fig. 2는 유한요소해석에 사용된 초기요소망이며, 400개의 3차원 8절점 감차적분 (reduced integration) 요소를 사용하여, 하나의 요소가 하나의 결정에 해당하도록 방위를 부여하였다. 다결정의 변형은 평면변형압축과 단순전단의 두 가지 경우에 대하여 계산하였다.

Fig. 3 (a),(b),(c)는 각각 변형률속도 민감도를 0.05, 0.2, 0.5로 하였을 때,  $\epsilon = -1$ 로 평면변형 압축된 요소망을 보이고 있다. 각각의 요소는 서로 다른 방위를 갖는 단결정을 대표하므로, 소성이방성으로의 차이로 인하여 균일하지 않은 변형을 보인다. 전체적인 변형 거동에 미치는 변형률속도 민감도의 영향은 작음을 알 수 있다. Fig. 4 (a),(b),(c)는 각각 변형률속도 민감도를 0.05, 0.2, 0.5로 하였을 때, 평면변형 압축을 유한요소법을 이용하여 계산한 결과 얻어진 (111) 극점도를 나타낸다.

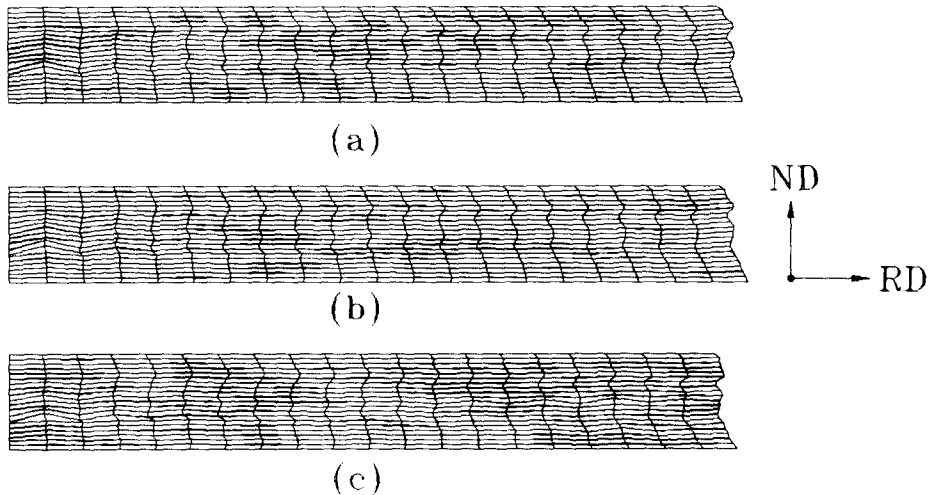
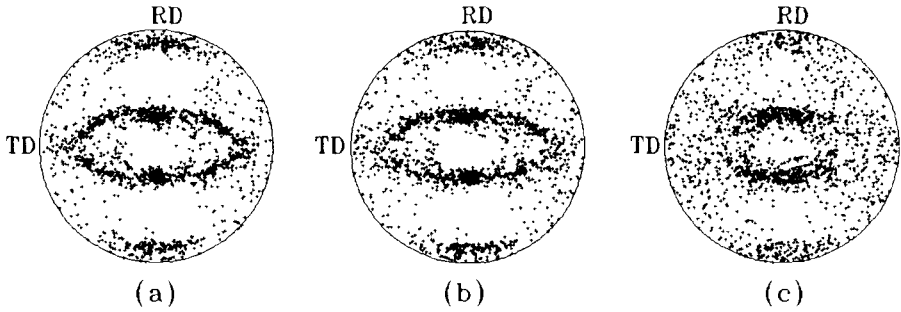
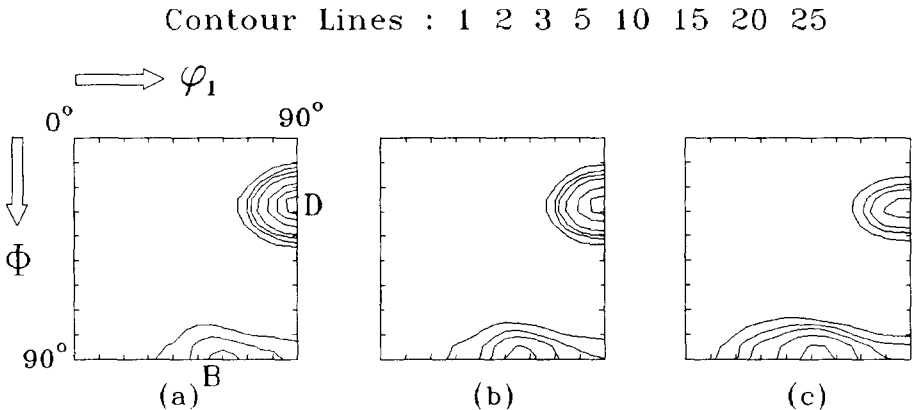


Fig. 3. Deformed mesh for plane strain compression at axial compressive strain of -1.0 (a)  $m = 0.05$ , (b)  $m = 0.2$ , (c)  $m = 0.5$ .



**Fig. 4.** (111) pole figures for plane strain compression calculated by FEM  
 (a)  $m = 0.05$ , (b)  $m = 0.2$ , (c)  $m = 0.5$ .

**Fig. 5** (a),(b),(c)는 그림 4에 나타난 결정방위를 오일러 공간으로 역투영하여 계산된 방위분포함수의  $\phi_2 = 45^\circ$  단면을 보이고 있다. 변형률속도 민감도가 작을 때는 Dillamore 성분  $\{4\ 4\ 11\} \langle 11\ 11\ 8 \rangle$ 이 강하게 발달하며, 변형률속도 민감도가 증가할수록 Dillamore 성분은 덜 발달하고, Brass 성분  $\{1\ 1\ 0\} \langle 1\ 1\ 2 \rangle$ 을 포함한  $\alpha$ 섬유 집합조직이 강해짐을 볼 수 있다. 이와 같은 경향은 Taylor의 가정을 적용한 완전구속 모델의 결과와 일치하며(13), Self-Consistent 모델의 결과에서도 관찰된다(14). **Fig. 6**과 **Fig. 7**은 각각 섬유A ( $\phi_1 = 90^\circ$ ,  $\phi = 0^\circ - 90^\circ$ ,  $\phi_2 = 45^\circ$ )와 섬유C ( $\phi_1 = 0^\circ - 90^\circ$ ,  $\phi = 90^\circ$ ,  $\phi_2 = 45^\circ$ )에 걸쳐 계산된 방위분포함수를 나타낸 것으로 변형률속도 민감도의 증가에 따라 Dillamore 성분이 약해지고 Brass 성분이 강해지는 것을 정량적으로 확인할 수 있다.



**Fig. 5.** ODF sections ( $\phi_2 = 45^\circ$ ) for plane strain compression calculated by FEM  
 (a)  $m = 0.05$ , (b)  $m = 0.2$ , (c)  $m = 0.5$ .

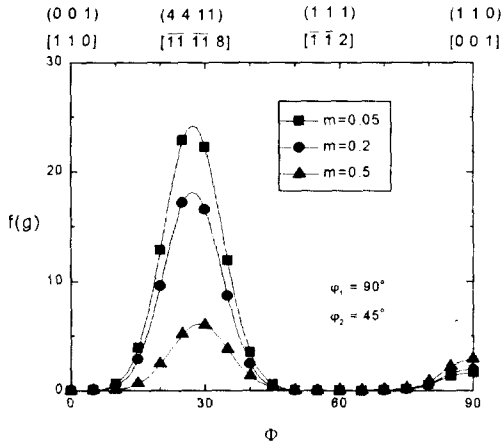


Fig. 6. Calculated orientation density for plane strain compression along with fibre A.

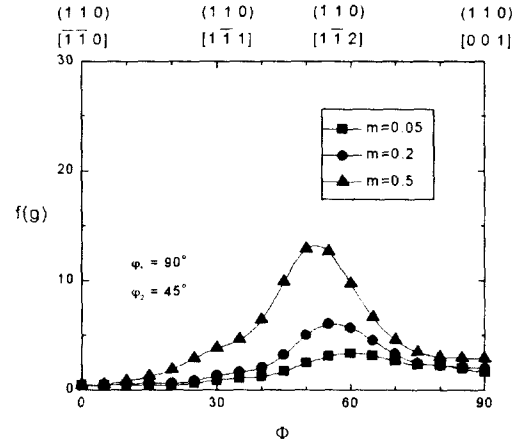


Fig. 7. Calculated orientation density for plane strain compression along with fibre C.

## 5. 요약

대변형, 탄소성, 속도 의존 다결정 모델을 이용하고, 하나의 요소가 하나의 결정을 나타내도록 하는 유한요소 계산을 통하여, FCC금속의 평면변형 압축시 발달하는 결정학적 집합조직을 계산한 결과, 다음과 같은 결과를 얻었다.

- 1) 각 단결정의 방위에 따른 소성 이방성의 차이로 인하여 불균일한 변형이 관찰되었다.
- 2) 변형률속도 민감도가 작을 때는 Dillamore 성분이 강하게 발달하고, 변형률속도 민감도가 증가할수록 Dillamore 성분이 약해지며 Brass 성분이 발달하였다.

## 참고문헌

1. S.-H. Choi, K.H. Oh, K. Chung and F. Barlat, *Metals and Materials*, vol. 4, p. 489(1998).
2. G. Sachs, *Z. Verein Deut. Ing.*, vol. 72, p. 734(1928).
3. G.I. Taylor, *J. Inst. Metals*, vol. 62, p. 307(1938).
4. E. Kröner, *Acta metall.*, vol. 9, p. 153(1961).
5. R. Hill, *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 13, p. 89(1965).
6. R. Hill, *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 13, p. 213(1965).
7. M. Berveiller and A. Zaoui, *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 26, p. 325(1979).
8. A. Molinari, G.R. Canova and S. Ahzi, *Acta metall.*, vol. 35, p. 2983(1987).
9. R. Lebensohn and C. Tomé, *Acta metall.*, vol. 41, p. 2611(1993).
10. J. Hirsch and K. Lücke, *Acta metall.*, vol. 36, p. 2883(1988).
11. R.J. Asaro and A. Needleman, *Acta metall.*, vol. 33, p. 923(1985).
12. S.R. Kalidindi, C.A. Bronkhorst and L. Anand, *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 40, p. 537(1992).
13. S.H. Choi and K.H. Oh, *Metals and Materials*, vol. 3, p. 252(1997).
14. K.H. Oh, *Metals and Materials*, vol. 5, p. 17(1999)