

## 분자동역학을 이용한 다공성 물질 건조공정 멀티스케일 시뮬레이션(1부 : 균질화법 해석)

금영탁<sup>†</sup>(한양대학교), 오진원(한양대학교 대학원), 백성민<sup>\*</sup>(한양대학교 대학원)

주제어 : 다공성 물질(Porous Materials), 멀티스케일 시뮬레이션(Multi-scale Simulation), 공극 모양(Pore Shape), 공극률(Porosity), 겔 구조(Gel Structure), 균질화법(Homogenization Method), 유한요소법(Finite Element Method)

다공성 물질을 건조하거나 습한 환경에 노출시키면 열과 수분이 외부로 전달된다. 열 및 수분 전달로 인한 온도 및 습도의 변화는 물질 체적을 변화시켜 습열 응력을 유발시킨다. 즉 다공성 제품의 품질은 외양뿐만 아니라 건조 공정 시의 온도, 수분함유량, 응력, 변형률 등의 공정변수에 크게 영향을 받는다. 최근까지도 다공성 물질의 생산 공정은 다수의 공정변수를 갖는 복합공정이기 때문에 이들의 영향을 정량적으로 평가하는 것은 매우 까다로워 현장 경험에 기초한 기술자의 노하우에 의존해 왔다. 이런 공정변수는 재료의 비균질성 및 전위, 입계, 균열, 기공과 같은 미시적인 결함과 연관되어 있기 때문에 거시적 스케일과 미시적 스케일 해석을 동시에 수행할 수 있는 멀티스케일 시뮬레이션 해석이 요구된다.

본 연구에서는 연속체적 접근법인 균질화법과 유한요소법을 사용하여 다공성 물질의 건조 공정을 해석하였다. 건조 과정 중 다공성 물질은 겔 상태이며 이 겔 재료 내에 발생하는 잔류응력과 변형 형상을 정확하게 해석하기 위해서는 재료의 공극률과 공극 모양에 따른 물성을 알아야 한다. 이를 위하여 겔 상태의 다공성 물질을 그물망 구조로 모델링하고, 재료의 탄성계수에 큰 영향을 미치는 미세 기공은 원형과 십자형 모양으로 가상하여 공극률에 따른 탄성계수를 균질화법으로 계산하였다. 이렇게 구한 공극 모양과 공극률을 고려한 재료의 물성을 사용하여 건조 공정을 유한요소법으로 시뮬레이션 해석하였다. 해석 결과, 잔류응력 분포와 변형 형상은 공극을 고려하지 않은 해석과 유사하지만 잔류응력 값은 큰 차이가 있음을 알 수 있었다. 또한 미세 기공 형상은 건조 후 최대 잔류응력에 영향을 끼침을 알 수 있었다(Fig. 1, 2 참조).

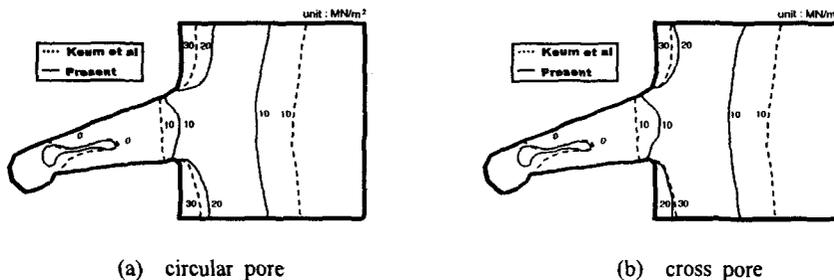


Fig. 1 Comparison of the principal stress distribution of the porous electric insulator between Keum et al and the present results after drying for 1 hour

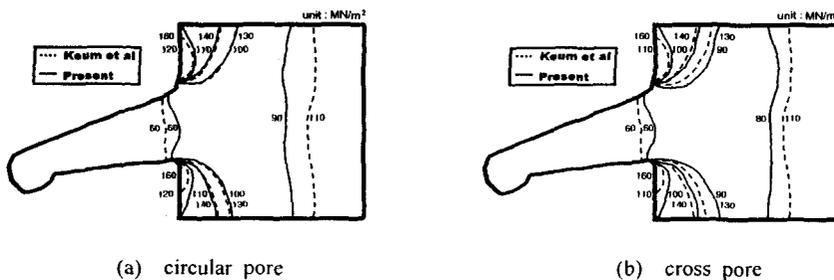


Fig. 2 Comparison of the principal stress distribution of the porous electric insulator between Keum et al and the present results after drying for 5 hour