상변태의 구속 조건을 부가하기 위한 수치 방법

양승용[†] · 구병춘[*]

Numerical method to impose constraint conditions in phase transformation

Seung-Yong Yang and Byeongchoon Goo

Key Words : Constraint condition (구속 조건), Numerical method (수치 방법), Shape memory alloy (형상기억합금)

Abstract

A numerical method was developed that imposes constraint condition on the order parameters in martensitic phase transformation. In the method, an amplitude function having values of 1 or 0 was multiplied to transformation rates. The merit of the method is that the imposition of the constraint condition is more straightforward than a method with Lagrangian multiplier and easy to implement in the tangent modulus method. The developed method is applied to three-dimensional finite element analyses of single and poly crystalline shape memory alloys.

기호설명

$(\cdot)|_t$: t 에서의 함수 값

τ_c : 임계 전단 응력

θ : 적분 상수

A: 진폭 함수

p : 형상 함수

1. 서 론

형상기억합금은 형상기억효과(shape memory effect)와 초탄성(pseudo elasticity) 등의 독특한 열 및 기계적 특성으로 인하여 지능구조물 및 의료용 재료 등으로 각광 받고 있다. 형상기억합금을 이용한 구조물의 설계 시, 재료의 기계적 거동을 수치적으로 해석할 필요가 있으나, 형상기억합금의 복잡한 기계적 특성으로 인하여 구성방정식의 개발에 어려움을 겪고 있다. 본 논문에서는 형상기억합금의 변형 거동을 유한요소법을 이용하여 모델링하기 위하여 형상기억합금의 각 상의 체적 비율 또는 상변태도에 부가되는 구속조건을 고려할 수 있는 수치적 방법을 개발하였다. 즉 마르텐사이트 상변태는 소성 변형과 달리 재료가 완전히 상변태를 한 후에는 다시 탄성거동을 나타내며 이러한 기계적 거동은 수치적으로 각 상의 체적 비율에 구속조건을 부가하여 시뮬레이션 하게 된다. Huang (1)은 이러한 구속조건을 고려하기 위하여 Lagrangian multiplier 를 이용하여 마르텐사이트 상의 체적 비율이 정해진 한계를 넘어가면 변태 속도의 반대 방향으로 강체 또는 탄성의 가상의 벽면에 의한 반발력을 부가함으로써 구속조건을 시뮬레이션 하였다. 그러나 이 방법은 수치적으로 복잡한 판단을 필요로 하며 계산의 정확성을 예측하기 힘든 면이 있다. 본 논문에서는 Lagrangian multiplier 대신 상이 생성되는 속도에 계수 항을 곱하여 그 값이 0 또는 1 이 되게 함으로써 마르텐사이트 상의 체적비에 부가되는 구속조건을 수치적으로 구현하였다. 이러한 수치계산법은 상변태도에 대한 구속 조건의 부가가 직접적이며 점소성 재료의 수치적분에 많이 이용되는 tangent modulus method (2)에 쉽게 적용할 수 있는 장점이 있다. 다음 절에서는 구속 조건을 수치적으로 어떻게 구현하는지에 대하여 설명하였고 3 차원 단

† 한국철도기술연구원
E-mail : yangsy@krri.re.kr
TEL : (031) 460-5115 FAX : (031) 460-5289

* 한국철도기술연구원

결정 및 다결정 NiTi 형상기억합금에 대하여 본 수치 방법을 이용한 유한요소해석 결과를 기술하였다.

2. 구속 조건을 고려한 수치 적분

형상기억합금은 온도 감소 또는 인장 등의 외부 하중에 의해 오스테나이트로 부터 마르텐사이트로 상변태 하게 되며, 상변태가 완전히 일어난 후에는 탄성거동을 하게 된다. 이러한 현상을 시뮬레이션 하기 위하여 수치적으로는 각 상의 체적비율 또는 변태도(order parameter)가 0 부터 1 사이의 값을 가지도록 구속 조건을 부가한다. 즉 마르텐사이트 상변태에 따른 변형률이 전단변형률 성분 만으로 이루어졌다고 가정할 경우, 존재 가능한 N 개의 마르텐사이트 상의 변태도는 각 상의 전단 변형률을 특성 변형률로 나눔으로써 얻을 수 있다.

$$\eta^\alpha = \frac{\gamma^\alpha}{\gamma_c}, \quad \alpha = 1, \cdots, N$$

특성 변형률 γ_c 는 상변태가 완전히 일어났을 때의 전단 변형률이다. 한편 오스테나이트의 변태도는 다음의 식을 이용하여 구할 수 있다.

$$\eta^0 = 1 - \sum_{\alpha=1}^{N} \eta^\alpha \tag{1}$$

마르텐사이트 및 오스테나이트의 변태도는 0 과 1 사이에 존재하여야 한다. 즉

$$\eta^\alpha \geq 0, \qquad \alpha = 1, \cdots, N$$
$$\sum_{\alpha=1}^{N} \eta^\alpha \leq 1 \tag{2}$$

점소성 재료와 같은 속도의존성을 가지는 재료에 대하여 많이 쓰이는 tangent modulus method 를 이용하여 수치 적분을 수행할 경우 위의 변태도에 대한 구속조건을 적절히 넣어줄 필요가 있다. 이를 위하여 본 논문에서는 변태 속도 식의 계수를 변태도에 의존하는 함수로 가정하였다. 즉 상변태가 일어나는 속도를 α 번째 마르텐사이트의 habit plane 에 대한 전단 응력(resolved shear stress) τ 에 비례한다고 가정하여 다음 식과 같이 나타낼 때,

$$\dot{\gamma}^\alpha = a\gamma_c(\tau - \tau_c), \quad \alpha = 1, \cdots, N \tag{3}$$

계수 a 의 값을 다음과 같은 함수로 가정하였다.

$$a = a_0 A(\dot{\gamma}^\alpha, \eta^\alpha) \cdot A(\dot{\eta}^0, \eta^0) \tag{4}$$

a_0 는 상수이고, A 는 진폭 함수로서 그 값은 다음과 같이 주어진다.

$$A(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{if } x < 0 \text{ and } y < 0 \\ 1 & \text{else} \end{cases} \tag{5}$$

위 식에서와 같이 A 의 값을 0 또는 1 로 택함으로써 식 (2)의 η^α 및 η^0 에 대한 구속 조건을 부가할 수 있게 된다. 즉 변태도의 값이 0 보다 작고 (3) 식에서 계산된 변태 속도가 음수이면 변태 속도는 0 이 된다. 다음으로 오스테나이트에 대한 구속조건을 고려하여 최종적인 변태속도를 구하게 된다. 이 과정의 수치 알고리듬을 나타내면 다음과 같다.

1. (3) 식에서 $a = 1$ 을 가정하고 α 번째 마트텐사이트 변태 속도 계산.
2. $A(\dot{\gamma}^\alpha, \eta^\alpha)$ 를 구하고 $A(\dot{\eta}^0, \eta^0) = 1$ 로 가정하여 (4)식의 a 계산.
3. 새로운 a 의 값을 이용하여 (3) 식의 α 번째 마트텐사이트 변태 속도 계산.
4. 새로운 변태 속도를 이용하여 (1) 식에서 $\dot{\eta}^0$ 를 구하고 이를 이용하여 $A(\dot{\eta}^0, \eta^0)$ 계산.
5. (4) 식에서 최종적인 a 를 구하고 (3) 식을 이용하여 최종적인 $\dot{\gamma}^\alpha$ 를 계산

A 의 값이 변태 속도에 의존하는 이유는, 만약 A 의 값이 변태도에만 의존하면 η^α 의 값이 0 과 1 사이의 구간을 한번 벗어나면 다시는 이 구간으로 돌아올 수 없는 현상을 방지하기 위한 것이다.

시간 증분 Δt 동안의 변태 변형률의 증분을 다음 식을 써서 구할 때 (단, $0 \leq \theta \leq 1$)

$$\Delta\gamma^\alpha = \Delta t\{(1-\theta)\dot{\gamma}_t^\alpha + \theta\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^\alpha\}$$

양함수 표현식을 얻기 위하여 시간 $t + \Delta t$ 에서의 값을 t 에서의 테일러 전개를 이용하여 나타내면 다음 식을 얻을 수 있다.

$$\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^\alpha = \dot{\gamma}_t^\alpha + \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^\alpha}{\partial a}\right|_t \Delta a + \left.\frac{\partial\dot{\gamma}^\alpha}{\partial\tau^\alpha}\right|_t \Delta\tau^\alpha$$

$$\Delta\gamma^\alpha = \Delta t\left\{\dot{\gamma}_t^\alpha + \theta\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^\alpha}{\partial a}\right|_t \Delta a + \theta\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^\alpha}{\partial\tau^\alpha}\right|_t \Delta\tau^\alpha\right\} \tag{6}$$

여기서 $\left.\frac{\partial\dot{\gamma}^\alpha}{\partial a}\right|_t = \gamma_c(\tau - \tau_c)|_t$ 이다.

한편 Δa 는 (4) 식으로 부터 변태도의 증분을 이용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\Delta a = a_0 \Delta A \cdot A + a_0 A \cdot \Delta A$$
$$= a_0 \frac{\partial A}{\partial \gamma^\alpha} \Delta\gamma^\alpha \cdot A + a_0 A \cdot \left(\sum_{\beta=1}^{N} \frac{\partial A}{\partial \gamma^\beta} \Delta \gamma^\beta \right)$$

위식에서 A 의 $\dot{\gamma}^\alpha$ 에 대한 미분은 무시하였다. 연쇄법칙을 이용하면

$$\frac{\partial A}{\partial \gamma^\alpha} = \frac{\partial A}{\partial \eta^\beta}\left(x, \eta^\beta\right) \frac{\partial \eta^\beta}{\partial \gamma^\alpha}$$

$$\frac{\partial A}{\partial y}(x, y) = \begin{cases} \dfrac{\partial p}{\partial y} & \text{if } x < 0 \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

미분에 사용된 함수 A 의 형태는 (5)식의 계단 형태의 함수 대신 수치 적분의 수렴성을 향상시키기 위하여 $-0.5 < y < 0.5$ 구간에서 다음과 같은 부드러운 형태의 함수를 이용하였다.

$$p(y) = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi}\sin \pi y + \frac{2}{3\pi}\sin 3\pi y + \frac{2}{5\pi}\sin 5\pi y + \frac{2}{7\pi}\sin 7\pi y + \frac{2}{9\pi}\sin 9\pi y$$

(6) 식을 $\Delta\gamma^\beta$ 에 대하여 정리하면

$$\sum_{\beta=1}^{N} \left(\begin{aligned} &\delta_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta}\theta\Delta t \frac{a_0}{\gamma_c} \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial a}\bigg|_t \frac{\partial p}{\partial \eta^\alpha} \cdot A\left(\dot{\eta}^0, \eta^0\right) \\ &+ \theta\Delta t \frac{a_0}{\gamma_c} \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial a}\bigg|_t A\left(\dot{\gamma}^\alpha, \eta^\alpha\right) \cdot \frac{\partial p}{\partial \eta^0} \end{aligned} \right) \Delta \gamma^\beta$$
$$= \Delta t \dot{\gamma}_t^\alpha + \theta \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial \tau^\alpha}\bigg|_t \Delta \tau^\alpha$$

위 식에서 $\Delta\tau^\alpha$ 는 임의의 변형률 증분 $\Delta\varepsilon_{ij}$ 와 $\Delta\gamma^\beta$ 에 의존한다 (3).

3. 유한요소해석 결과

3 차원 유한요소법을 이용하여 단결정 및 다결정 형상기억합금의 인장 거동을 해석 하였다. 계산에는 상용 프로그램 ABAQUS 를 사용하였다. Table 1 에 해석에 사용된 재료의 물성치를 나열하였다. 시간 증분 Δt 의 값은 0.0025 초 이며, 변위하중에 의한 변형률속도는 0.0001 이다. 재료 상수 a_0 의 값이 커진다면 수치적분을 위한 시간 증분의 값은 작아져야 할 것이다. Fig. 1 은 단결정 합금의 하중 부가-제거 과정 동안의 응력-시간 곡선을 나타낸다. 0 초부터 8 초 까지는 하중 부가로서 오스테나이트에서 마르텐사이트로의 상변태가 일어나며, 8 초부터 16 초 까지는 하중 제거로서 마르텐사이트에서 오스테나이트로 역방향 상변태가 일어나는 것을 보연준다. 상변태를 일으키는 인장 응력은 대략 35 MPa 정도 되는 것을 관찰할 수 있다. (3) 식에 나타나 있는 임계 응력 τ_c 는 정방향 및 역방향 상변태에 대하여 동일한 값을 가지며, 형상기억효과에서 관찰되는 히스테리시스 현상을 시뮬레이션 하기 위해서는 정방향과 역방향의 임계 응력 값이 다르게 적용될 필요가 있다.

Fig. 2 는 다결정 합금의 인장응력 및 변형률 곡선을 그린 것이다. 시편은 크기는 10 mm X 10 mm X 10 mm 이며 64 개의 유한요소로 구성되어 있다. 각 요소는 인장 축에 대하여 임의의 각도로 기울어져 있으며, 그 결과 각 요소에서의 응력-변형률 곡선은 조금 씩 다른 모양을 나타냄을 볼 수 있다. Fig. 3 은 시편 전체의 평균적인 힘-변위 곡선을 그린 것이다. 곡선으로부터 다결정 시편의 상변태 임계 응력은 대략 45 MPa 정도 되는 것을 확인 할 수 있다.

Table 1 Material parameter values

Young's modulus	47.9 GPa
Poisson's ratio	0.46
γ_c	0.13
τ_c	15 MPa
a_0	0.001 $Pa^{-1}\ sec^{-1}$
N	24

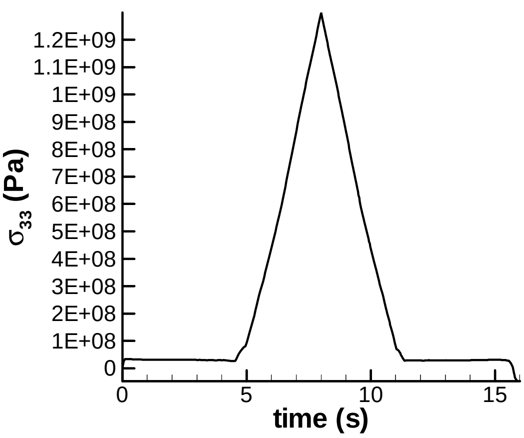

Fig. 1 Stress-time curve of single crystalline shape

memory alloy.

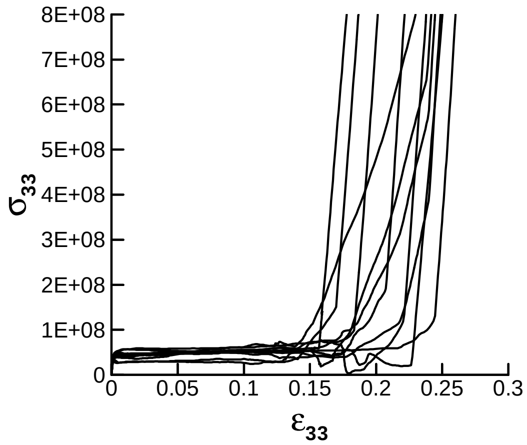

Fig. 2 Stress-strain curves of polycrystalline shape memory alloy.

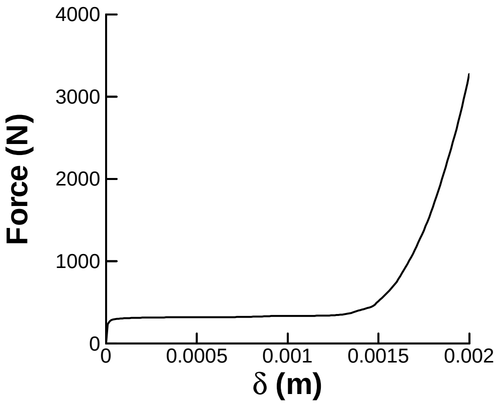

Fig. 3 Overall force-displacement curve of polycrystalline shape memory alloy.

4. 결 론

형상기억합금의 상변태 현상을 수치적으로 해석하기 위하여 각 상의 변태도에 부가되는 구속 조건을 수치적으로 고려할 수 있는 방법을 개발하였다. 본 방법의 장점은 변태도에 대한 구속 조건의 적용이 직접적이며, 기존의 수치 적분 방법인 tangent modulus method 에 적용이 간편하다는 것이다. 개발한 방법을 3 차원 유한요소법에 적용하여 단결정 및 다결정 형상기억합금의 인장 거동을 해석하였다. 계산에서 정방향 및 역방향 임계 응력의 값은 동일하며, 다양한 상변태 현상의 해석을 위하여 히스테리시스 현상을 고려할 수 있는 방법의 개발이 필요하다.

참고문헌

(1) Huang, M. and Brinson, L.C., 1998. A multivariant model for single crystal SMA behavior., J. Mech. Phy. Solids v.46, pp. 1379-1409

(2) Needleman, A., 1989. Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems., Computer Meth. Appl. Mech. Eng. v.67, pp. 69-85

(3) Asaro, R.J. and Rice, J.R., 1977. Strain localization in ductile single crystals, J. Mech. Phy. Solids v.25, , pp. 309-338