강한 연결 멀티 스케일 유한요소해석의 체적 평균법과 표면 평균법 성능 비교

Performance Comparison between Volume and Surface Average Methods in a Strongly-coupled Multi-scale Finite Element Analysis

한 동 석*
Han, Tong-Seok

요 약

대부분의 공학 재료는 다결정으로 이루어져 있으며 정확한 다결정 재료의 거동을 파악하고 예측하는 기술은 구조물의 성능을 검증하고 보장하는데 매우 중요하다. 본 연구에서는 강한 연결 멀티스케일 해석을 수행하는 중 마이크로 스케일의 거동, 특히 다결정 응력의 평균법에 대하여 연구하였다. 널리 사용되고 있는 체적평균법의 가정에 대하여 정리하고 표면평균법의 근사해로서의 정확도를 평가하였다. 랜덤(random) 한 상(phase) 분포 및 적층 상 분포 구조의 2상 다결정 미세구조를 이용하여 평균법의 성능을 비교한 결과 사용된 미세구조의 크기와 구조에 대해서 유사한 결과를 얻을 수 있었다. 그러나 소성 흐름이 큰 이방성 재료의 경우 두 평균법으로 구한 거동의 차이가 증가하여, 미세구조에 따라서는 체적평균법을 적용할 때 주의를 요구할 수 있는 가능성이 있다는 결론을 얻었다.

Keywords : 평균법, 멀티 스케일, 유한요소해석, 미세구조, 다결정 고체

1. 서 론

다결정 재료의 소성 거동을 정확히 이해하는 것은 목적하는 구조물의 성능을 보장하거나 손상을 평가하는 근본적인 기법을 제시하는 초석을 제공할 수 있다. 마이크로 해석은 전체 구조계의 일부분이므로 RVE (representative volume element) 만을 고려할 때에는 복잡한 하중을 받는 구조계의 거동을 예측할 수 없으며 연속체 혹은 구조 스케일 거동으로부터 결정되는 RVE의 경계조건을 정확히 결정할 수 없게 된다. 이러한 문제의 보완을 필요로 하는 경우에는 유한요소로 표현된 두 스케일을 동시에 강한 연결 (strongly-coupled)을 하여 해석을 수행할 수 있다 (Han and Dawson, 2007). 마이크로 스케일 해석 후의 거동을 매크로 스케일 해석에 사용하기 위해서는 마이크로 스케일 해석 결과를 평균해야 하는데 주로 체적 평균법이 널리 사용되어 오고 있다. 이 방법은 Hill (1972)이 제시한 표면 평균법의 정의로부터 유도된 것으로 가정에 따른 적용 제한 사항들이 있으나, 사용의 편의상 체적평균법을 적용하여 오고 있다. 본 연구에서는 다결정 미세구조 응력의 체적평균과 표면 평균을 사용한 강한 연결 멀티스케일 해석을 수행하고 주어진 미세구조에 대해서 그 거동을 차이를 비교 분석하였다. 멀티스케일 해석의 거대한 계산을 수행하기 위하여 병렬 계산을 시행하였고 주요 알고리듬은 Han과 Dawson (2007)에 제시되어 있다.

* 정회원 • 연세대학교 사회환경시스템공학부 조교수 tshan@yonsei.ac.kr

2. 연속체와 결정 스케일의 거동 평균방법

다결정 고체의 스케일 간의 정보교환을 위하여 Hill (1972)이 제안한 평균법의 정의가 일반적으로 받아들여져 쓰이고 있다. 그 중 마이크로 레벨의 응력의 표면 평균법의 정의는

$$\Sigma = \frac{1}{B}\int_{\partial B} \boldsymbol{x} \otimes \boldsymbol{t} d\Gamma$$

이고, 이로부터 유도되어 널리 쓰이고 있는 체적 평균법의 관계식은

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{B}\int_{\partial B} \boldsymbol{\sigma} dB$$

이다. 사용의 편의상 체적 평균법을 이용하여 매크로 스케일에서 사용되는 마이크로 스케일의 대표 응력값을 계산한다. 여기에서 B 는 도메인, ∂B 는 경계, $\boldsymbol{n}$은 경계면에 수직하는 단위 벡터이며, $\boldsymbol{t}$는 traction이고 $\boldsymbol{\sigma}$는 다결정 stress 이다. 본 연구에서 사용한 두 스케일 유한요소해석 간의 강한 연결 정보 교환 방법은 다음과 같다. 연구에 사용된 유한요소법은 velocity (displacement)에 기반한 방법이므로 가정된 velocity field에 의해서 문제의 해를 구하게 된다. 두 스케일의 연결 기법은 그림 1에서 나타내는 바와 같이 매크로 스케일의 gauss point와 마이크로 스케일의 경계면과의 정보의 교환이 주요 관심사가 된다. 우선 매크로 스케일의 gauss point에서 velocity gradient를 마이크로 스케일의 RVE 의 경계면 velocity의 형태로 지정을 하게 된다. 이러한 마이크로 스케일 velocity 경계조건 하에서 다결정의 거동을 유한요소법를 이용하여 비선형 해석을 수행하여 구한다. 마이크로 해석이 종료되면 마이크로 스케일 레벨의 거동을 평균하여 매크로 스케일의 gauss point로 결과를 보내 준다. 이때 매크로 스케일로 전달되어 매크로 스케일의 힘의 평형을 점검하는데 사용되는 마이크로 스케일의 거동은 stress와 stiffness이다. Constitutive model로부터 유한 요소 gauss point에서 stress와 stiffness를 계산하여 global equation에 사용할 때, 유한요소로 표현된 마이크로 스케일의 다결정에 존재하는 stress와 stiffness를 대표할 값을 규정하는 것이 필요하다. 이를 위하여 Hill이 제시한 평균법(표면 평균법)을 이용하여 대표값을 구하는 것이 정의에 충실하지만, 이를 구하는 것이 쉽지 않으므로 divergence theorem을 이용하여 체적 평균법(volume average)으로 변환하여 그 값을 구하게 된다. 선행 연구(Han과 Dawson, 2007)에 의하면 체적 병균법을 이용할 때에도 매크로 스케일의 거동의 수렴성에는 큰 문제없이 결과를 얻었으나 이를 Hill의 정의에 의한 표면 평균법을 사용하여 검증하고 비교 분석한 사례는 없었다. 본 연구에서는 매크로와 마이크로 스케일의 강한 연결을 실시하여 평균법에 의한 거동의 차이를 분석하였다.

체적 평균법을 사용할 수 있는 이론적 배경은 마이크로 스케일의 stress field가 적어도 한번 미분값에 대해서 연속 하다는 조건이 필요하다. 그러나 마이크로 스케일 RVE 내부에 stress field의 미분값의 불연속성을 주는 요인(예, crack, cavity 등; Calyton and McDowell, 2003)이 있을 경우에는 divergence theorem을 적용할 수 없게 되어, 엄밀하게 말하면 체적 적분법을 사용할 수 없게 된다. 모델링하는 방법에 있어서도 이러한 정의는 영향을 받게 된다. 유한 요소의 경우, 특히 linear element의 경우에는 요소 경계에서는 stress가 연속하지 않으므로 정의에 따르면 체적 평균법을 적용할 수 없다. 본 연구에서는 다결정 2상 고체의 경우에

표면 평균법을 사용하여 강한 연결 멀티 스케일 유한요소 시뮬레이션을 수행하고 체적 평균법을 사용하여 동일한 해석을 수행하여 그 차이를 비교하였다.

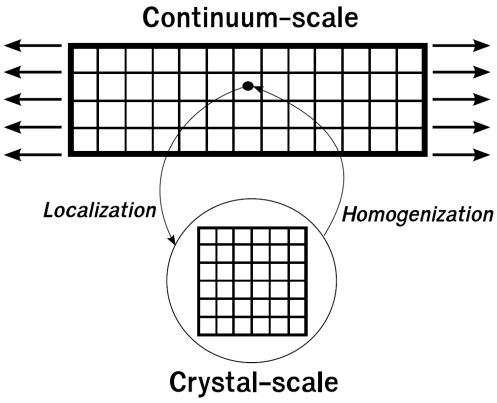

그림 1. 매크로(연속체) 스케일과 마이크로(결정) 스케일의 연결방법 모식도

3. 마이크로 스케일 거동의 체적 및 표면 평균법 결과 비교

제안된 강한 연결 멀티 스케일 기법의 성능의 확인을 위하여 두 가지 미세구조를 고려하였다. 매크로 스케일 레벨에서는 일축 인장실험 모델을 선택하였다. 이는 비교적 간단한 구조계를 통해 제안된 기법을 검증하고자 하는 이유와 본 연구 결과의 주요 적용 분야 중의 하나인 입자가속기 회절 실험으로 재료의 마이크로 거동을 확인하기 위한 실험을 모사하기 위한 이유이다. 마이크로 레벨에서는 유한요소 해석의 의미를 크게 찾을 수 있는 비교적 복잡한 미세구조를 가진 RVE를 선택하였다. 2상 다결정 고체를 선택하여 RVE의 상(phase) 분포를 변화해가며 성능을 확인하였다.

마이크로 스케일에서 상 분포의 예로 그림 2와 같이 랜덤(random)한 분포와 대각선 적층구조(diagonal layer)를 이용하여 체적 평균법과 표면 평균법의 성능을 비교 검토하였다. 매크로 스케일의 응력-변형도 거동을 각 기법에 대해서 예를 이용하여 비교분석 하였으며 그 결과를 그림 3에 제시하였다. 본 문제 제시되어 있지는 않지만, 마이크로 스케일의 거동인 lattice strain 거동 또한 비슷한 경향을 나타내었다. 그림에는 체적 평균법과 표면평균법의 거동 이외에도 마이크로 스케일의 계산을 Taylor모델을 사용한 결과도 제시하고 있다. 그림에서 볼 수 있는 바와 같이, 검증에 사용된 미세구조의 크기에 대해서는 매우 다른 상 분포를 가지고 있지만 연속체 스케일의 거동의 차이는 크게 있지 않은 것을 확인하였다. 그러나 거동의 차이는 존재하며 마이크로 스케일 RVE의 크기가 커지고 좀 더 자세한 마이크로 스케일 구조의 모델(예, 균열)이 가능하다면 거동의 차이가 더 커질 수 있을 것으로 판단되었다.

4. 결론

마이크로와 매크로 스케일을 연결하는 강한 멀티 스케일 해석 기법을 이용하여 널리 사용되는 체적평균법과 Hill이 정의한 표면평균법의 거동 특성을 비교하였다. 비교 결과 특히 유한요소법에서 근사적으로 사용하고 있

는 마이크로 스케일 응력의 체적평균은 표면 traction 평균과 비교하여 큰 차이가 없는 것으로 분석되었다. 그러나 두 평균법으로 구한 거동의 차이가 소성흐름이 큰 미세구조의 경우 증가하는 것을 볼 때 더욱 자세한 미세구조를 사용하게 되면 거동의 차이가 더욱 발생할 수 있다고 판단되었다.

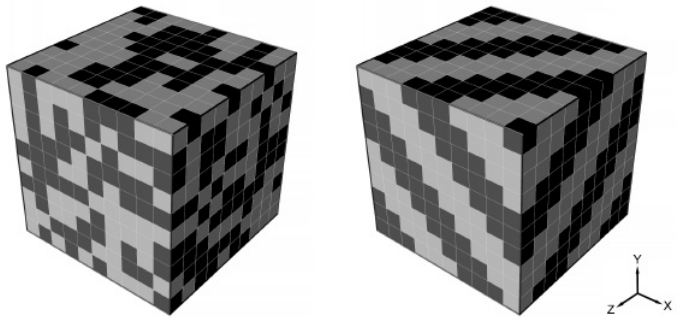

그림 2 마이크로 스케일 유한요소 격자의 상 분포의 예
(좌: Random 상 분포, 우: 대각선 상 적층 구조)

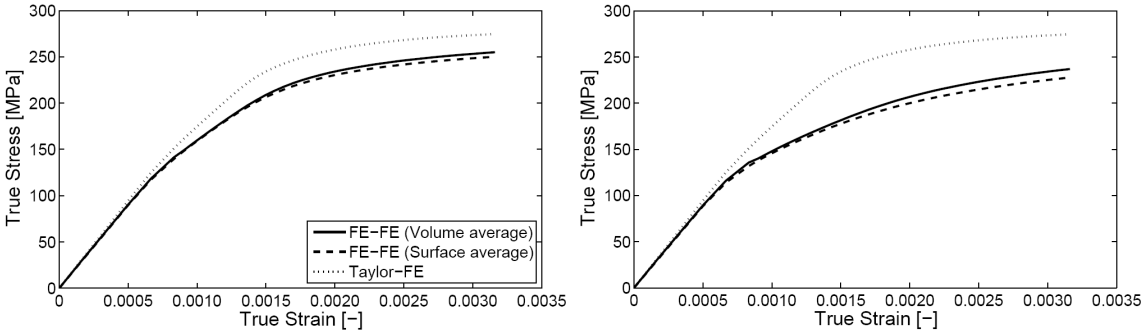

그림 3 매크로 스케일 응력-변형율 거동 비교
(좌: Random 상 분포, 우: 대각선 적층 상 구조)

감사의 글

이 연구는 2007년 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국학술진흥재단의 지원(KRF-2007-331-D00009)을 받아 수행된 연구입니다. 본 연구를 수행함에 있어 값진 토론을 해주신 Paul Dawson 교수님께 감사드립니다.

참고문헌

Clayton, J.D. and McDowell, D.L. (2003) Finite polycrystalline elastoplasticity and damage: multiscale kinematics, *International Journal of Solids and Structures*, 40, pp.5669~5688.

Han, T.-S. and Dawson, P.R. (2007) A two-scale deformation model for polycrystalline solids using a strongly-coupled finite element methodology, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196, pp.2029~2043.

Hill, R. (1972) On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain, *Royal Society of London*, A, 326, pp.131~147.