

## Multi-scale simulation of drying process for porous materials using molecular dynamics (part 1 : homogenization method)

J.W. Oh, S.M. Baik\* and Y.T. Keum\*\*.†

Department of Nano Technology, Graduate School in Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

\*Department of Precision Mechanical Engineering, Graduate School in Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

\*\*Division of Mechanical Engineering, Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

(Received June 2, 2004)

(Accepted June 14, 2004)

**Abstract** When porous materials are dried, the particles flocculate into fish-net structure in gel phase. In order to exactly analyze the stress distribution of porous materials during drying process, the elastic tensor of microscopic gel structures has to be predicted considering pore shapes as well as porosities of porous materials. The elastic characteristics of porous materials associated with porosities were predicted analyzing microscopic gel structures with circular and cross pores via homogenization method and the drying processes of the electric porous ceramic insulator were simulated using finite element method (FEM). Comparing analysis results between consideration and negligence of pores, the deformed shape and distributions of temperature and moisture were similar but the residual stress was significantly different.

**Key words** Porous materials, Drying process, Pore shape, Gel structure, Homogenization method, Multi-scale simulation

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

오진원, 백성민\*, 금영탁\*\*.†

한양대학교 일반대학원 나노공학과, 서울, 133-791

\*한양대학교 일반대학원 정밀기계공학과, 서울, 133-791

\*\*한양대학교 기계공학부, 서울, 133-791

(2004년 6월 2일 접수)

(2004년 6월 14일 심사완료)

**요 약** 다공성 물질이 건조될 때 입자는 겔 상태의 그물망 구조를 갖는다. 따라서 건조공정 중 발생하는 잔류응력을 정확하게 해석하기 위해서는 공극률과 공극형상에 따른 물성을 알아야 한다. 본 연구에서는 균질화법으로 원형과 십자형의 공극을 갖는 미시적인 겔구조로부터 공극률에 따른 재료의 탄성특성을 예측하고, 다공성 세라믹 애자의 건조공정을 유한요소 해석하였다. 해석 결과, 변형 형상과 온도, 습도 분포는 공극을 고려하지 않은 해석과 유사하지만 잔류응력 값은 큰 차이가 있음을 알 수 있었다.

### 1. 서 론

다공성 세라믹 제품의 질은 건조공정 중의 온도, 수분 함유량, 응력, 변형률 등의 기계적 특성에 큰 영향을 받기 때문에 고품질의 제품을 생산하기 위해서는 이들을 정량적으로 평가하는 것이 필요하다. 그러나 생산 공정

은 여러 가지 변수를 고려해야 하는 복합 공정이기 때문에 이들의 영향을 정량적으로 평가하는 것은 매우 어렵다. 따라서 그 동안 상당 부분 혼장 기술자의 노하우에 의존해 왔으나, 최근에는 컴퓨터 해석을 통해 제품의 공정 변수를 최적화하고 기계적인 특성을 평가하는 노력이 시도되고 있다.

다공성 물질의 탄성계수는 공극률의 영향을 크게 받는다. 또한 고체 영역간의 연결 형상뿐만 아니라 공극의 형상과 크기가 중요한 관심사이다. 탄성 특성을 예측하기 위해서는 공극률뿐만 아니라 공극형상과 관계된 미시적

Corresponding author  
Tel: +82-2-2290-0436  
Fax: +82-2-2298-6194  
E-mail: ytkeum@hanyang.ac.kr

인 구조를 해석할 수 있는 방법이 필요하다. 다공성 세라믹 재료에 대한 탄성 특성과 공극률간의 관계식을 도출하기 위하여 composite sphere method(Hashin, 1962), self-consistent method(Hill, 1965; Budiansky, 1965), differential method(Zimmerman, 1991), minimum solid area method(Rice, 1996), digital image modeling method(Garboczi, 1995; Poutet, 1996) 등의 해석적인 방법들이 연구되어 왔다.

탄성계수와 공극률과의 관계에 대한 이론적인 연구로는 Soroka(1968)와 Kalyan(1986)<sup>[1]</sup>이 다양한 gypsum system에 대한 탄성계수를 수식화하고 실험결과와 이론해를 비교하였다. 공극률과 공극의 형상을 고려한 해석적인 연구는 Bentz 등[1]<sup>[1]</sup>이 vycor glass에 대하여, Aduda와 Nyongesa[2]<sup>[2]</sup>가 다결정의 triaxial porcelain에 대하여, 그리고 Garboczi 등[3]<sup>[3]</sup>이 fontainebleau sandstone에 대하여 탄성 특성을 연구하였다. 여러 다공성 세라믹 재료의 실험적인 결과를 토대로 Ramakrishnan<sup>[4]</sup>와 Arunachalam[4]은 다양한 micromechanics의 방법으로 탄성계수를 해석하여 비교하였다. Roberts 등[5]은 effective medium theory을 사용하여 다공성 세라믹 재료의 탄성계수를 유한요소법으로 해석하고 이론적인 방법뿐만 아니라 실험결과와 비교하였다.

균질화법(homogenization method)는 전체적으로 이질적인 탄성체의 미시적 구조가 주기적으로 반복된다는 가정을 갖는 접근적인 방법이다. 이 이론을 이용하면 간단한 모델로부터 미시적인 구조의 탄성 특성을 계산할 수 있다. 1980년대에 처음 제시된 균질화법은 주로 선형적인 탄성 해석에 사용되었으나(Sanchez-Palencia, 1980; Lions, 1981), 1990년대에는 주로 복합재의 기계적 특성 해석에 사용되었다(Guedes and Kikuchi, 1990). 최근에는 탄소성 문제, 크립 문제, 파괴 전파 문제, 큰 변형 문제 그리고 비틀림 문제 등의 다양한 연구 분야에 걸쳐 균질화법이 적용되고 있다.

본 연구에서는 균질화법을 이용하여 공극률과 공극형상의 변화에 따른 다공성 물질의 탄성 특성을 계산하고, 유한요소법으로 다공성 세라믹 애자의 견조공정을 전산시뮬레이션하여 전류응력 분포와 변위 형상을 고찰하였다.

## 2. 유한요소 수식화

### 2.1. 응력장

견조공정을 시뮬레이션 하기 위한 온도-습도장 유한요소 수식화와 경계조건은 Keum 등[6]의 참고문헌에 자세히 설명되어 있다. 한편, 견조공정 해석을 위한 응력장의

유한요소식은 다음과 같다.

$$\sum_{e=1}^E ([K]\{u\} - \{F\})_e = 0 \quad (1)$$

여기서, 습열응력에 대한 강성행렬  $[K]$ 와 힘벡터  $\{F\}$ 는 각각 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$[K] = \int_R [B]^T E[B] dR \quad (2)$$

$$\{F\} = \int_R [N_u] t dR + \int_R [N_u] f dR - \int_R [B]^T \sigma'_0 dR \quad (3)$$

여기서,  $[N]$ 는 형상함수 행렬,  $[B]$ 는 구배행렬을 나타낸다. 또한, 변위  $u$ 와 변형률  $e$ 는 다음과 같이 간단히 나타낼 수 있다.

$$u = [N]\{u\} \quad (4)$$

$$e = [B]\{u\} \quad (5)$$

응력장에서 가장 기본적인 가정은 다음과 같이 변형률  $e$ 가 열과 습도뿐만 아니라 외력에 의한 변형률의 합으로 표현된다는 것이다.

$$e = \frac{1}{E} \cdot (\sigma - \sigma_0) + \alpha \Delta T + \beta \Delta W \quad (6)$$

응력장 구성방정식에서 열과 습도에 의한 효과를 초기 응력값으로 처리하면 다음과 같이 간단히 나타낼 수 있다.

$$\sigma = E \cdot e - \sigma_0 \quad (7)$$

여기서, 초기응력  $\sigma_0$ 는 다음과 같다.

$$\sigma_0 = E(\alpha \Delta T + \beta \Delta W) \quad (8)$$

식(8)에서  $E$ 는 탄성계수,  $\Delta T$ 는 온도 변화량,  $\Delta W$ 는 습도 변화량,  $\alpha$ 는 열팽창계수,  $\beta$ 는 습도팽창계수이다.

### 2.2. 균질화

다공성 성형체의 공극형상과 공극률의 변화에 따른 탄성특성을 얻기 위해서 균질화법을 도입하였다. 2차원의 탄성체가 주기적으로 반복되는 공극의 특성을 갖는 미시적 단위 구조의 집합이라고 가정한 균질화법의 구성식들은 다음과 같이 정리할 수 있다[7-9]. 거시적 좌표를  $x$ 로 정의하고 미시적 좌표를  $y$ 로 정의하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$y = x/\varepsilon \quad (9)$$

여기서,  $\varepsilon$ 는 거시적인 크기와 미시적 크기의 척도비이고 매우 작은 양의 수이다. 멀티 스케일 방법은 다음과 같

이 변위를 점근적으로 확장할 수 있다. 거시적 변위  $u_i^H$ 는 균일한 값을 갖는 변위이다. 실제 변위  $u_i$ 는 미시적 관점에서는 이질성에 따라 심하게 변화하는 값이다.  $u_i^H$ 는 미시적 구조에 따라 변화하는 변위를 말한다. 그러므로 척도비  $\epsilon$ 는 미시적 변위에 곱해진다.

$$u_i = u_i(x, y) = u_i^H(x) + \epsilon u_i^l(x, y) \quad (10)$$

응력-변형률의 구성방정식은 다음과 같이 정의된다.

$$\sigma_{ij} = E_{ijkl} e_{kl} \quad (11)$$

여기서,  $\sigma_{ij}$ 는 응력,  $e_{kl}$ 은 변형률,  $E_{ijkl}$ 는 탄성텐서이고 식(10)을 사용하면 변형률  $e_{kl}$ 는 singular perturbation 이론에 근거하여 다음과 같이 확장된다.

$$e_{kl} = \frac{\partial u_k}{\partial x_l} = \frac{\partial u_k^H}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^l}{\partial y_l} \quad (12)$$

선형탄성문제의 지배방정식은 가상변위법을 사용하여 나타내면 다음과 같이 유도된다.

$$\int_{\Omega} E_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial v_l}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma_t} t_i v_l d\Gamma \quad (13)$$

여기서,  $t_i$ 는 경계  $\Gamma_t$ 에 가해지는 외력이고,  $v_l$ 는 임의의 가상 변위이다.

평균화 원리를 사용하여 단위 구조  $Y$ 에 대한 주기함수  $f$ 의 적분을 나타내면 다음과 같다.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} f\left(\frac{x}{\epsilon}\right) d\Omega = \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} f(y) dY d\Omega \quad (14)$$

여기서,  $|Y|$ 는 단위 구조의 체적을 나타낸다. 식(13)에 식(10)을 대입하고 식(14)를 사용하여  $\epsilon \rightarrow 0$ 으로 만들면 식(15)을 얻는다.

$$\int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \left[ \int_Y E_{ijkl} \left( \frac{\partial u_k^H}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k^l}{\partial y_i} \right) \left( \frac{\partial v_l^H}{\partial x_j} + \frac{\partial v_l^l}{\partial y_j} \right) dY \right] d\Omega = \int_{\Gamma_t} t_i v_l^H d\Gamma \quad (15)$$

식(15)은 거시적 가상 변위  $v_i^H$ 와 미시적 가상 변위  $v_i^l$ 를 포함하기 때문에, 거시적 구조와 미시적 구조의 두 가지 식으로 분리해서 계산해야 한다. 전체 구조내의 미시적 구조가 주기적이고 거시적 영역이 균일하다면 다음과 같은 관계식이 성립된다.

$$u_i^l(x, y) = -\chi_i^{kl}(y) \frac{\partial u_k^H(x)}{\partial x_i} \quad (16)$$

여기서,  $\chi_i^{kl}$ 는 특성 변위이고 2차원의 문제에서 3가지 경우( $kl$ ,  $k = 1, 2$ ,  $l = 1, 2$ )를 갖는다. 식(15)에 식(16)을 대입하면, 미시적 단위 구조에서 만족하는 식(17)과 거시적 구조에서 만족하는 식(18)을 얻는다.

$$\int_Y E_{ijkl} \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} \frac{\partial v_i^l}{\partial y_j} dY = \int_Y E_{ijkl} \frac{\partial v_i^l}{\partial y_j} dY \quad (17)$$

$$\int_{\Omega} E_{ijkl}^H \frac{\partial u_k^H}{\partial x_i} \frac{\partial v_l^H}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma_t} t_i v_l^H d\Gamma \quad (18)$$

거시적 응력은 단위 구조내의 응력의 평균으로 정의되므로 거시적 응력은 다음과 같다.

$$\sigma_{ij}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y \sigma_{ij} dY \quad (19)$$

또한, 식(19)은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\sigma_{ij}^H = E_{ijkl}^H \frac{\partial u_k^H}{\partial x_i} \quad (20)$$

여기서,  $E_{ijkl}^H$ 는 균질화된 탄성텐서이고 식(11), 식(12) 그리고 식(16)을 사용하여 식(19)로부터 다음과 같이 나타낸다.

$$E_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y E_{ijkl} \left( 1 - \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_n} \right) dY \quad (21)$$

유한요소법으로 수식화하기 위하여 응력-변형률 구성방정식은 다음과 같이 정의한다.

$$\{\sigma_{ij}\} = [D_{ij}] \{e_{ij}\} \quad (22)$$

그리고 탄성행렬  $[D_{ij}]$ 는 다음과 같이 나타낸다.

$$[D_{ij}] = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{22} & 0 \\ 0 & 0 & D_{66} \end{bmatrix} = [d_1 \ d_2 \ d_3] \quad (23)$$

여기서,  $d_1$ ,  $d_2$  그리고  $d_3$ 는 탄성 행렬  $[D_{ij}]$ 의 열 벡터이다.

가상 변위  $v$ 의 변형률  $e(v)$ 와 특성 변위  $\chi$ 의 변형률  $e(\chi)$ 은 다음과 같이 정의한다.

$$e(v) = \begin{Bmatrix} \partial v_x / \partial y_1 \\ \partial v_y / \partial y_2 \\ \partial v_x / \partial y_2 + \partial v_y / \partial y_1 \end{Bmatrix}, \quad e(\chi) = \begin{Bmatrix} \partial \chi_x / \partial y_1 \\ \partial \chi_y / \partial y_2 \\ \partial \chi_x / \partial y_2 + \partial \chi_y / \partial y_1 \end{Bmatrix} \quad (24)$$

특성 변위  $\chi^{kl}$ 에서 먼저  $k = 1, l = 1$ 일 때, 특성 변위를  $\chi_1^{11}$ 과  $\chi_2^{11}$ 로 정의하고 식(23)과 식(24)를 사용하면 식(17)과 식(21)은 각각 식(25)과 식(26)으로 표현된다.

$$\int_Y e^T(v) D e(\chi) dY = \int_Y e^T(v) d_1 dY \quad (25)$$

$$D_{11}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y [D_{11} - d_1^T e(\chi)] dY \quad (26)$$

다음으로  $k=2$ ,  $l=2$ 일 때, 특성 변위를  $\chi_1^{22}$ 와  $\chi_2^{22}$ 로 나타내고  $D_{11}^H$ 와 같은 방법을 사용하면 식(27), 식(28) 그리고 식(29)을 얻는다.

$$\int_Y e^T(v) D e(\chi) dY = \int_Y e^T(v) d_2 dY \quad (27)$$

$$D_{12}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y [D_{12} - d_1^T e(\chi)] dY \quad (28)$$

$$D_{22}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y [D_{22} - d_2^T e(\chi)] dY \quad (29)$$

마지막으로  $k=1$ ,  $l=2$ 일 때, 특성 변위를  $\chi_1^{12}$ 와  $\chi_2^{12}$ 로 나타내면  $D_{11}^H$ ,  $D_{12}^H$  그리고  $D_{22}^H$ 와 같은 방법으로 다음과 같이 식(30)과 식(31)을 얻는다.

$$\int_Y e^T(v) D e(\chi) = \int_Y e^T(v) d_3 dY \quad (30)$$

$$D_{66}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y [D_{66} - d_3^T e(\chi)] dY \quad (31)$$

식(26), 식(28), 식(29) 그리고 식(31)은 균질화 해석으로 구한 탄성행렬 구성 성분들이다.

### 2.3. 공극률

다공성 물질의 공극률은 함수률과 입자의 비중과의 관계식에 의해서 계산할 수 있다[10]. 건조공정 시 다공성 세라믹의 비중  $G_s$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$G_s = \frac{\rho}{\rho_w} = \frac{\gamma}{\gamma_w} \quad (32)$$

여기서,  $\rho_w$ 는 물의 밀도,  $\gamma_w$ 는 물의 단위 무게이다. 포화도  $S$ 는 다음과 같이 나타낸다.

$$S = \frac{V_w}{V_a + V_w} = \frac{V_w}{V_v} \quad (33)$$

여기서,  $V_w$ 는 물의 체적,  $V_a$ 는 공기의 체적이다. 함수률  $m$ 은 다음과 같이 정의된다.

$$m = \frac{W_w}{W_s} \quad (34)$$

여기서,  $W_w$ 는 물의 무게이고  $W_s$ 는 고체의 무게이다. 이들은 각각 다음과 같이 표현된다.

$$W_w = \gamma_w V_w = \gamma_w e S V_s \quad (35)$$

$$W_s = \gamma_s V_s = \gamma_s G_s V_s \quad (36)$$

식(35)과 식(36)에서 함수률  $m$ 은 다음과 같이 나타내진다.

$$m = \frac{e S}{G_s} \quad (37)$$

공극률  $n$ 은 식(37)에서 계산된 공극비  $e$ 로부터 다음의 관계식에서 얻어진다.

$$e = \frac{V_v}{V_s} \quad (38)$$

$$n = \frac{V_v}{V} \quad (39)$$

$$e = \frac{V_v}{V_s} = \frac{V_v}{(1-n)V} = \frac{nV}{(1-n)V} = \frac{n}{1-n} \quad (40)$$

여기서,  $V_s$ 는 고체의 부피이다. 따라서 식(37)과 식(40)로부터 공극률  $n$ 은  $m$ ,  $S$ ,  $G_s$ 의 함수임을 알 수 있다.

### 3. 시뮬레이션 모델링

다공성 세라믹은 입자군에 의한 그물망 형상의 구조를 갖는다. 균질화 해석을 위하여 입자군 구조의 단위 셀(cell)을 공극률과 공극형상에 따라 각각 모델링하였다. Fig. 1은 공극 또는 입자군의 형상이 원형인 단위 셀들을 유한요소로 모델링한 것이다. 본 연구에서는 미시적 입자 단위 셀이 원형 공극이나 십자형 공극을 갖는다고 가정하였다.

한편, 마이크로 스케일의 입자군 단위 셀은 나노 스케일의 겔구조로 구성되며[11-13], 이 겔구조는 공극률에 따라 Fig. 2와 같은 겔 단위 셀로 모델링하였다.

본 연구에서는 고체의 비중  $G_s$ 는 일정한 값으로 계산되고 공극은 공기가 전혀 없이 물로만 가득 차 있는 것으로 가정하였다. 따라서 공극률  $n$ 은 함수률  $m$ 만으로 계산되었다. 또한, 건조 수축 모델[14]에 따라 성형체가 건조될 때 내부 공극들이 차지하는 체적은 일정하게 유지되고, 겔공극이 차지하는 체적은 건조가 진행됨에 따라 수축되어 감소하는 것으로 가정하였다. 그리고 함수

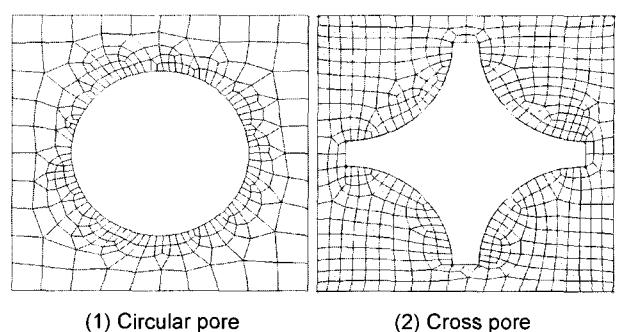


Fig. 1. Finite element model of a microscopic particle aggregate unit cell with various pore shapes.

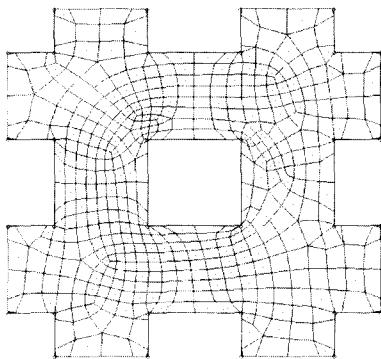


Fig. 2. Finite element model of a nanoscopic gel unit cell with a pore.

률은 공극수와 겔공극수의 합으로 정의하였다.

Fig. 1의 원형 공극과 십자형 공극의 입자 단위 셀과 Fig. 2의 겔 단위 셀들을 임의의 다양한 공극률에 따라 각각 균질화 해석하여 상대 탄성계수값( $E^H/E$ )을 구하고 이들을 공극률의 함수로 보간하였다. 건조공정 시뮬레이션 중에 사용되는 입자군 구조와 겔구조의 공극률은 함수를 통하여 결정되었고, 이 함수를 값과 대응되는 다공성 물질의 탄성계수  $E^H$ 가 보간함수를 통하여 결정하였다.

애자의 건조공정 해석을 위한 유한요소모델과 초기조건 그리고 경계조건은 Keum 등[6]의 연구와 동일하고 애자의  $G_s$ 는  $2.6 \text{ g/cm}^3$ 으로 하였다.

#### 4. 애자 건조공정 시뮬레이션

Fig. 3은 입자군 단위 셀을 균질화 해석하여 구한 다공성 물질의 공극률에 따른 상대 탄성텐서 성분 D11값이다. 균질화 해석을 통해 얻은 탄성텐서 성분인 D11과 푸아송비를 사용하여 상대 탄성계수를 계산하고 이들을 공극률 n의 함수로 보간하면 다음과 같다.

$$(E^H/E_{\text{particle}})_{\text{circle}} = 33.51n^4 - 23.06n^3 + 7.49n^2 - 2.76n + 1 \quad (41)$$

$$(E^H/E_{\text{particle}})_{\text{cross}} = 59.34n^4 - 51.32n^3 + 17.9n^2 - 4.85n + 1 \quad (42)$$

여기서,  $(E^H/E_{\text{particle}})_{\text{circle}}$ 와  $(E^H/E_{\text{particle}})_{\text{cross}}$ 는 각각 원형 공극과 십자형 공극을 갖는 다공성 물질의 상대 탄성계수,  $E_{\text{particle}}$ 은 입자군의 탄성계수이다.

Fig. 4은 균질화 해석을 통해 구한 식(41)와 식(42)의 상대 탄성계수 값을 타 연구자들의 실험 결과와 해석 결과를 비교한 것이다. Roberts 등[5]의 해석 결과와 매우 유사했으며, Gadolinia( $\text{Gd}_2\text{O}_3$ )는 원형 공극의 보간식에

서[15], Alumina( $\text{Al}_2\text{O}_3$ )는 십자형 공극의 보간식에서 [16] 비교적 잘 일치하였다. Lutetia( $\text{Lu}_2\text{O}_3$ )[17]는 낮은 공극률에서는 원형 공극의 특성을 나타내지만 공극률이 높아질수록 십자형 공극에 근접한 특성을 나타내었다.

Fig. 5은 겔공극률에 따른 겔 단위 셀을 균질화 해석하여 구한 입자군의 상대 탄성텐서 성분 D11값이다. 입자군 단위 셀에서와 같이, 상대 탄성텐서 성분 D11값과 푸아송비로부터 상대 탄성계수를 계산하고 이들을 겔공극률  $n_{\text{gel}}$ 로 보간하면 입자군의 상대 탄성계수( $E_{\text{particle}}/E$ )은 다음과 같다.

$$E_{\text{particle}}/E = \exp(-2.56n_{\text{gel}}) \quad (43)$$

함수를로부터 겔공극률과 공극률이 결정되면 겔공극률

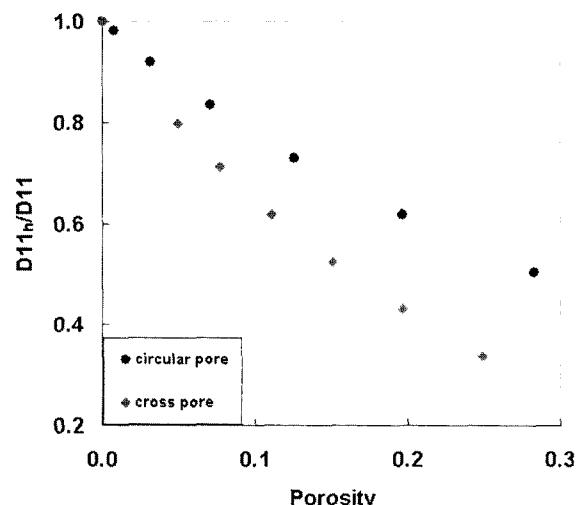


Fig. 3. Relative elastic tensor component D11 of microscopic particle aggregate unit cell associated with various porosities.

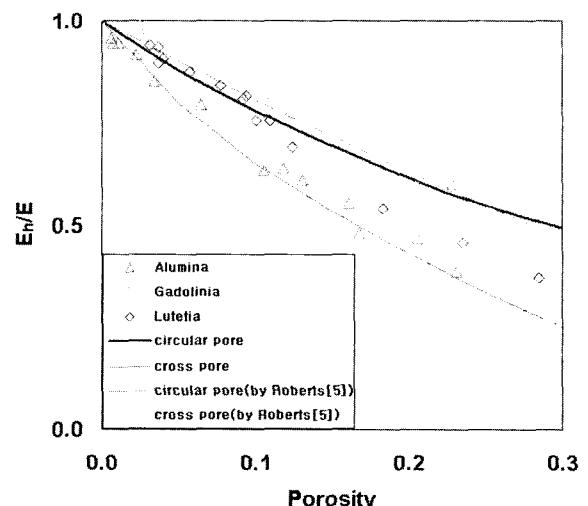


Fig. 4. Comparison of relative elastic constant among experiments and other investigator's result [5].

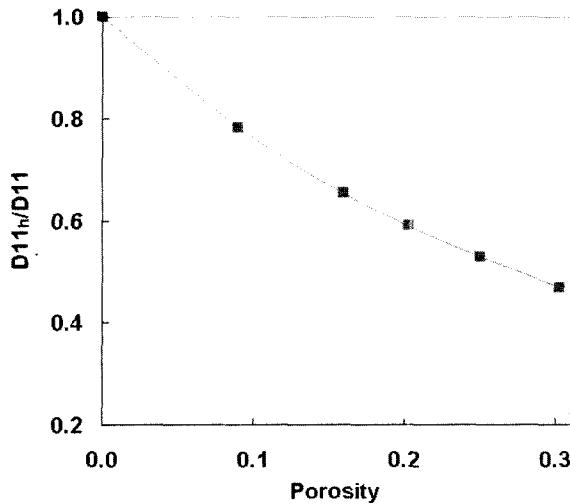


Fig. 5. Relative elastic tensor component  $D_{11n}$  of nanoscopic gel unit cell associated with various porosities.

$n_{gel}$ 에 따라 식(43)에서 계산된 입자군의 상태 탄성계수 ( $E_{particle}/E$ )와 다공성 물질의 탄성계수  $E$ 로부터 입자군의

탄성계수  $E_{particle}$ 가 계산된다. 그리고 다공성 물질의 균질화 탄성계수  $E^{H_n}$ 는 공극률  $n$ 과 식(43)에서 구한  $E_{particle}$ 을 사용하여 식(41) 또는 식(42)에서 계산된다.

애자가 건조될 때 내부의 온도 및 습도 분포는 Keum 등[6, 18]의 연구결과와 동일하나, 잔류응력 분포는 다소 다른 결과를 보여 주었다. Fig. 6과 Fig. 7은 각각 1시간과 5시간 동안 애자를 건조한 후의 잔류응력 분포이다. 1시간이 지난 후 최대 잔류응력 값은 원형 공극과 삼자형 공극을 고려한 해석 결과에서 각각  $29.1 \text{ MN/m}^2$ 와  $27 \text{ MN/m}^2$ 이었고, 공극을 고려하지 않은 해석 결과에서  $40.7 \text{ MN/m}^2$ 이었다. 5시간이 지난 후 최대 잔류응력 값은 원형 공극과 삼자형 공극을 고려한 해석 결과에서 각각  $142 \text{ MN/m}^2$ 와  $131 \text{ MN/m}^2$ 이었고, 공극을 고려하지 않은 해석 결과에서  $174 \text{ MN/m}^2$ 이었다. 공극형상과 건조 시간에 따른 최대 잔류응력 값을 Table 1에서 보여 주고 있다. 공극을 고려하지 않은 해석 결과와 비교하여, 5시간 건조 후보다 1시간 건조 후에 상대적 최대 잔류응력 값이 큰 차이를 보이는 이유는 시간이 지날수록 애자 내부의 수분 함유량이 감소하여 탄성계수 값을 증가시키기

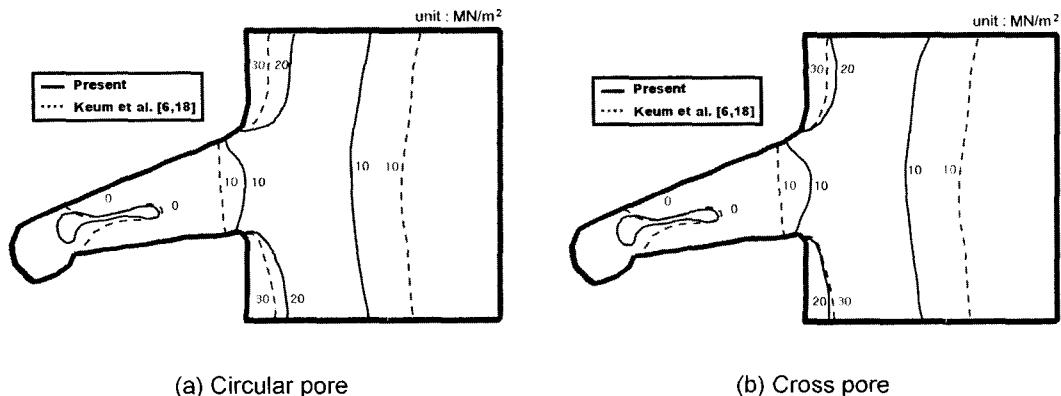


Fig. 6. Comparison of residual stress distribution of an electric porous ceramic insulator after drying for 1 hour between present result and Keum et al. result [6, 18].

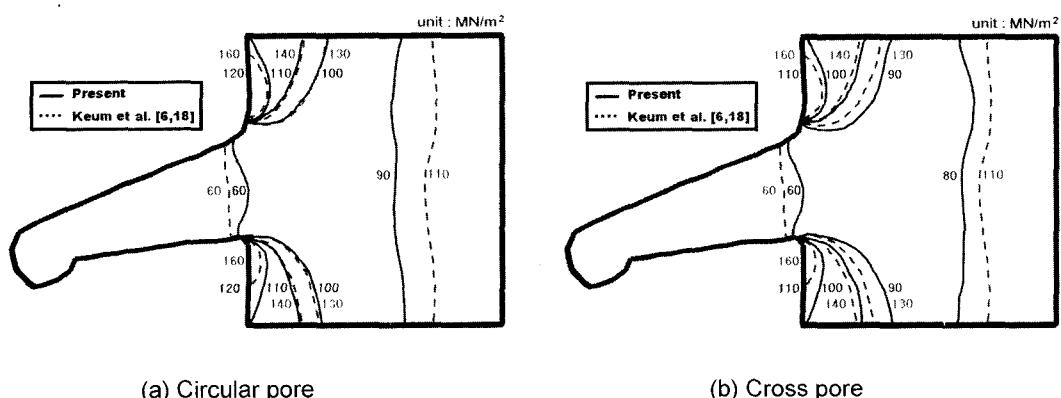


Fig. 7. Comparison of residual stress distribution of an electric porous ceramic insulator after drying for 5 hours between present result and Keum et al. result [6, 18].

Table 1  
Comparison of maximum residual stress among the cases  
considering the pore and the case neglecting the pore

drying time	considering pore		neglecting pore
	circular pore	cross pore	
1 hour	29.1 MN/m <sup>2</sup>	27 MN/m <sup>2</sup>	40.7 MN/m <sup>2</sup>
5 hour	142 MN/m <sup>2</sup>	131 MN/m <sup>2</sup>	174 MN/m <sup>2</sup>

때문인 것으로 사료된다.

Fig. 8은 1시간과 5시간이 지난 후 애자의 변형 형상을 나타낸 것이다. 변형의 정도가 작아 20배로 확대하여 나타내었다. 짙은 회색으로 표시된 부분이 초기 형상이고, 진한 회색으로 표시된 부분이 변형된 애자의 형상이다. 최대 수축 변위는 1시간 건조 후에 0.061 mm, 5시간 건조 후에 0.222 mm로 공극을 고려한 경우와 고려하지 않은 경우가 거의 같았다. 이는 건조공정 시뮬레이션에서 변위에 영향을 미치는 인자들인 열팽창계수, 습도팽창계수 그리고 온도 및 습도 변화량이 [6] 공극을 고려하지 않은 해석에서의 그들과 동일하기 때문인 것으로 사료된다.

## 5. 결 론

본 연구에서는 공극형상과 공극률을 고려하여 다공성 세라믹 제품의 건조공정을 균질화 유한요소법으로 멀티스케일 시뮬레이션하고 다음과 같은 결론을 얻었다.

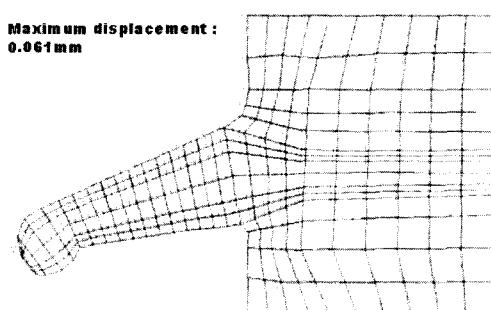
- 1) 다공성 물질의 미시적 공극형상은 건조 후에 최대 잔류응력에 영향을 미친다.
- 2) 건조 시간에 따라 감소하는 애자의 함수률이 잔류응력에 영향을 주었다.
- 3) 미시적 구조를 균질화 해석하여 구한 상태 탄성계수를 사용하면 다공성 물질건조공정을 정도 높게 시뮬레이션할 수 있다.

## 후 기

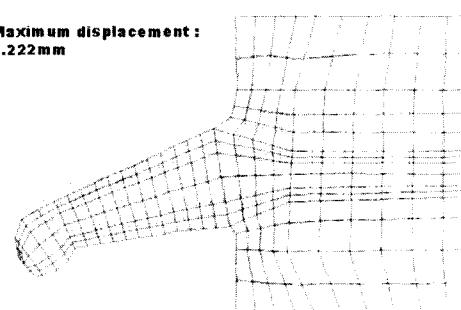
“이 논문은 2003년도 한국학술진흥재단의 지원에 의하여 연구되었음”(KRF-2003-041-D00112).

## 참 고 문 헌

- [ 1 ] D.P. Bentz, E.J. Garboczi and D.A. Quenard, “Modeling drying shrinkage in reconstructed porous materials: application to porous vycor glass”, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 6 (1998) 211.
- [ 2 ] B.O. Aduda and F.W. Nyongesa, “Role of aspect in elastic modulus-porosity relationship of triaxial porcelain”, Brit. Ceram. Trans. 99[5] (2000) 206.
- [ 3 ] C.H. Arns, M.A. Knackstedt, W.V. Pinczewski and E.J. Garboczi, “Computation of linear elastic properties from microtomographic images: Methodology and agreement between theory and experiment”, Geophysics. 67[5] (2002) 1396.
- [ 4 ] N. Ramakrishnan and V.S. Arunachalam, “Effective elastic moduli of porous ceramic materials”, J. Am. Ceram. Soc. 76[11] (1993) 2745.
- [ 5 ] A.P. Roberts and E. Garboczi, “Elastic properties of model porous ceramics”, J. Am. Ceram. Soc. 83[12] (2000) 3041.
- [ 6 ] Y.T. Keum, J.H. Jeong and K.H. Auh, “Finite-element simulation of ceramic drying processes”, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 8[4] (2000) 541.
- [ 7 ] B. Hassani and E. Hinton, “A review of homogenization and topology optimization II-analytical and numerical solution of homogenization equations”, Comput. Str. 69 (1998) 719.
- [ 8 ] N. Takano, Y. Uetsuji, Y. Kashiwagi and M. Zako, “Hierarchical modeling of textile composite materials and structures by the homogenization method”, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 7 (1999) 207.
- [ 9 ] N. Takano, M. Zako and M. Ishizono, “Multi-scale computational method for elastic bodies with global and local heterogeneity”, J. Comput.-Aided Mater. Design. 7 (2000) 111.
- [10] K. Terzaghi, R.B. Peck and G. Mesri, in “Soil mechan-



(a) After 1 hour



(b) After 5 hour

Fig. 8. Deformed shape of a electric porous ceramic insulator.

- ics in engineering practice" (Wiley, New York, 1997) p.19.
- [11] G.W. Scherer, "The theory of drying", *J. Am. Ceram. Soc.* 73[1] (1990) 3.
  - [12] C.J. Brinker and G.W. Scherer, in "Sol-gel Science : the physics and chemistry of sol-gel processing" (Academic Press, San Diego, 1990) p.518.
  - [13] M.N. Rahaman, in "Ceramic processing and sintering" (Marcel Dekker, New York, 1995) p.201.
  - [14] J.E. Funk and D.R. Dinger, in "Predictive process control of crowded particulate suspensions applied to ceramic manufacturing" (Kluwer Academic Publishers, Boston, 1994) p.457.
  - [15] F.P. Knudsen, "Dependence of mechanical strength of brittle polycrystalline specimens on porosity and grain size", *J. Am. Ceram. Soc.* 42[8] (1959) 376.
  - [16] W.R. Manning and O. Hunter, "Elastic properties of polycrystalline monoclinic  $Gd_2O_3$ ", *J. Am. Ceram. Soc.* 56[6] (1973) 327.
  - [17] O. Hunter and G.E. Graddy, "Porosity dependence of elastic properties of polycrystalline  $Lu_2O_3$ ", *J. Am. Ceram. Soc.* 59[1-2] (1976) 82.
  - [18] Y.T. Keum and K.H. Auh, "An efficient numerical method for phase changes in ceramic drying process", *J. Ceram. Proc. Res.* 3[3] (2002) 141.