

확률함수를 이용한 비균질 Ti-6Al-4V 합금의 변형 및 파손해석

김 태 원[†] · 고 은 영^{*}

(2003년 6월 18일 접수, 2004년 4월 6일 심사완료)

Deformation and Failure Analysis of Heterogeneous Microstructures of Ti-6Al-4V Alloy using Probability Functions

Tae-Won Kim, Eun-Young Ko

Key Words : Failure Analysis(파손해석), Probability Function(확률함수), Heterogeneous Microstructure(비균질 조직), Monte Carlo Simulation(몬테카를로 시뮬레이션)

Abstract

A stochastic approach has been presented for superplastic deformation of Ti-6Al-4V alloy, and probability functions are used to model the heterogeneous phase distributions. The experimentally observed spatial correlation functions are developed, and microstructural evolutions together with superplastic deformation behavior have been investigated by means of the two-point and three-point probability functions. The results have shown that the probability varies approximately linearly with separation distance, and deformation enhanced probability changes during the process. The stress-strain behavior with the evolutions of probability function can be correctly predicted by the model. The finite element implementation using Monte Carlo simulation associated with reconstructed microstructures shows that better agreement with experimental data of failure strain on the test specimen.

기호설명

f_v^α	: α 상의 체적분율	$\underline{\sigma}$: 미시적 응력
f_v^β	: β 상의 체적분율	$\bar{\sigma}$: 거시적 응력
k	: 항복응력	$\langle \underline{\sigma} \rangle$: 앙상블 평균응력
l	: 결정립 크기	$c_{ij}, n_{ij}, \alpha_{ij}, \beta_{ij}$: 2-점 확률계수
$P_{ij}(r)$: 2-점 확률함수	$\alpha_{lmn}, \beta_{glmn}, \gamma_{lmn}, \delta_{glmn}$: 3-점 확률계수
$P_{lmn}(r, r', r'')$: 3-점 확률함수	$S_{lmn}, T_{lmn}, W_{lmn}$	
R	: 내부응력	$C_1, \alpha, \alpha_1, \beta, \beta_1, \gamma, \gamma_1, \mu$: 재료상수
r	: 상간의 분리거리		
$\dot{\epsilon}^p$: 소성변형률속도		
ϕ	: 조건부 확률함수		

1. 서론

[†] 한양대학교 기계공학부
E-mail : twkim@hanyang.ac.kr
TEL : (02)2290-0421 FAX : (02)2298-4634

^{*} 한양대학교 대학원

$\alpha - \beta$ 이상(two-phase) Ti-6Al-4V 합금은 작은 유동응력(flow stress)과 큰 변형률속도 민감계수(strain rate sensitivity)로 인해 초소성 성형(superplastic forming)에 폭 넓게 사용되는 재료 중

하나이다. 초소성(superplasticity)이란 미소하중 상태의 재료가 파손되지 않은 채 거대한 신장(elongation)을 얻을 수 있는 현상을 말하며 Pearson에 의해 Bi-Sn 합금에 대한 그 특성이 처음으로 발표되었다.⁽¹⁾ 초소성 특성을 이해함에 따라 necking(necking)에 자유로운 연신을 이루기 위한 연구들이 실제 산업공정에 적용되기 시작하였고, 특히 항공우주, 자동차, 선박, 철도차량 등의 운송수단과 의료 및 전자장비 등 다양한 분야에 걸쳐 폭넓은 연구가 수행되어 왔다. 초소성 성형을 이용한 설계 및 생산 공정의 발전은 경제적 측면에서 보다 절감된 비용 효과와 재료의 무게 감량에 따른 효율 향상이 특히 항공우주산업에 주 관심 대상이 되었고, 이에 따라 엔진 내부의 터빈, 압축기 등의 익형 제작과 관련하여 티타늄합금, Ti-6Al-4V 등에 많은 연구가 이루어져 왔다.⁽²⁾

초소성 설계 및 최적화 기법은 이른바 성형모사를 통해 모의 해석할 수 있으며 온도, 압력, 변형률, 변형률속도 등과 함께 소재 및 다이의 기하학적인 형상을 변수로 한 설계와 공정해석 등이 가능하게 되었다. 한편 초소성 거동을 위한 많은 성형모델이 제시되었음에도 불구하고 실제적으로 이러한 모델들은 초소성 거동 중 미시조직(microstructure)의 발전(evolution)이 기계적 변형거동에 미치는 영향을 복합적으로 고려하지 않았으며 따라서 티타늄 합금의 경우 비균질 조직(heterogeneous microstructure)과 연관된 불균일 변형(inhomogeneous deformation)이 수반되는 파손의 예측을 정확히 할 수 없었다. 일반적으로 α - β 티타늄 합금은 조직을 구성하는 상 분율, 분포 및 결정립 크기 등과 같은 비균질 미시재료 특성에 따른 불균일 변형에 의해 파손이 발생하는 것으로 알려져 있으며 이와 관련한 기계적 변형거동 또한 실험적·이론적으로 다양하게 연구되었다.^(2,7) 미시적 관점에서의 재료특성 분석에 있어 통계적인 물성값은 분포함수(distribution function) 등으로 묘사할 수 있으며 이때 빈도함수(frequency function)는 임의 재료의 직경을 갖는 결정립 수 또는 상 분포 등으로 나타낼 수 있다.⁽⁸⁾ 이러한 조직 내부의 결정립 크기 및 분포특성과 관련한 거동해석은 Ghosh 및 Raj⁽⁹⁾ 등에 의해 간단한 분포함수 형태로 묘사되기도 하였으나 미시조직의 특성과 기계적 변형이 연관된 일반화된 이론으로는 발전할 수 없었다. 또한 한정된 미시재료 분석을 통해 얻어진 거시적-기계적 물성값은 해당 시편 자체에 국한되는 것으로서 전체 재료에 일반화하여 적용하기에는 여러 가지 제약조건이 따르게 된다. 이러한 문제점을 보완하기 위하여 다양한 형태의 통계적 재료 모델링 기법이 제시되었으며,^(10,11) 특히 변형에 따른 비균질 재료의 분포특성과 이를 바탕으로 한 기계적 거동 해석에 있어서 Corson^(12,13) 및 Garmestani^(14,15) 등의 연구결과는 상관함수

(correlation function)를 이용하여 이상 재료의 유효 물성치를 예측하는 데 적절한 방법으로 사용되고 있다.

통계적 모델에서 확률 밀도의 모멘트로 표현되는 상관함수는 확률함수를 이용하여 근사적으로 표현할 수 있다.⁽¹⁶⁾ 특히 변형에 따른 공간 상관함수는 비균질 재료 모형을 나타내는 효과적인 기법으로 사용되고 있으며 이를 위해서는 명확한 미시재료 특성을 표현하기 위한 상의 크기 및 분포, 형상, 체적분율 등이 변형에 따라 정확하게 측정되어야 한다. 일반적으로 체적분율은 미시구조 분석에서 손쉽게 측정될 수 있는 값으로, 이때 상관함수는 이와 같은 체적분율의 향으로 나타낼 수 있다.⁽¹⁵⁾ 한편 변형이 진행됨에 따라 변화하는 비균질 상 분포는 2-점 확률함수 및 3-점 확률함수 등으로 표현 가능함이 Corson에 의해 확인되었으며 Garmestnai 등은 다결정재료 및 복합재료에 대해 Corson의 이론 및 유한변형 해석을 응용하여 확률함수의 발전과 기계적 유효 물성치를 예측하였다. 최근에 이르러 Torquato,⁽¹⁷⁾ Saito,⁽¹⁸⁾ Lee⁽¹⁹⁾ 등은 몬테카를로 시뮬레이션(Monte Carlo simulation, MCS)을 활용하여 재료의 초기 미시구조를 바탕으로 변형에 따른 형상의 변화를 재구성할 수 있는 확률론적 기법을 제안하였으며 복합재료 및 이상 재료의 미시구조 진전을 변형거동과 함께 예측할 수 있게 하였다.

본 연구는 Ti-6Al-4V 티타늄 합금의 초소성 변형거동 해석과 관련하여 미시역학 및 통계적 기법을 이용하여 비균질 재료의 변화에 따른 불균일 변형 및 파손 해석을 수행하였다. 실험적으로 측정된 상 분포, 상 체적분율 및 결정립 분포 등의 미시적 재료특성을 바탕으로 2-점 확률함수와 3-점 확률함수를 설정할 수 있었고 이를 이용하여 상관함수를 계산하고 나아가 변형에 따른 거시적 응력과 변형률을 예측하였다. 또한 미시구조의 재구성 및 발전 예측 방법으로 몬테카를로 기법을 활용하였으며 이를 유한요소 모델에 적용하여 초소성 인장 실험에 대한 재료변형 및 파손 예측을 보다 정밀하게 수행하였다.

2. 초소성 변형거동과 확률함수

2.1 초소성 변형거동

초소성 재료의 변형거동에 관한 구성방정식(constitutive equations)이 Zhou와 Dunne⁽³⁾에 의해 제시되었으며, 단축하중 상태에서의 응력-변형률, 응력-변형률속도, 변형률속도 민감계수 등과 재료의 미시구조의 변화에 관한 실험 및 해석 모델이 Kim과 Dunne⁽⁴⁾에 의해서 연구되었다.

고온 변형은 확산과정(diffusion process)로 묘사할 수 있으며 작은 응력상태에서는 부과된 변형률 속

도와 응력의 관계를 선형적으로 표현할 수 있는 반면, 큰 응력상태 하에서는 전위크리프(dislocation creep)에 따라 응력-변형률속도 관계가 비선형으로 주어진다.⁽²⁰⁾ 일반적으로 초소성 변형기구는 다음과 같은 세 가지의 과정, 즉 확산 크리프(diffusion creep), 결정립계의 미끄러짐(grain boundary sliding) 그리고 전위 크리프(dislocation creep)으로 구분할 수 있다.⁽²¹⁾ 이상과 같은 변형기구는 초소성 변형 과정 동안 복합적으로 연관되어 있으며 소성변형, 결정립 성장 및 강화기구(hardening mechanism) 등과 함께 구성방정식에 적절하게 고려되어야 한다. 전 변형과정 동안, 부과되는 변형률속도와 유동응력에 상응하는 확산과 전위 크리프 영향이 모두 고려된 소성변형률속도(plastic strain rate)는 다음과 같이 표현할 수 있으며⁽⁴⁾

$$\dot{\epsilon}^p = \frac{\alpha}{l^\gamma} \sinh \beta(\sigma - R - k) \quad (1)$$

여기서, $\dot{\epsilon}^p$ 는 소성변형률속도, l 은 결정립 크기, R 은 내부응력(internal stress), k 는 항복응력(yield stress), 그리고, α , β 및 γ 는 재료상수들이다. 한편 강화과정의 모사를 위해 소성변형률과 선형적인 관계가 있는 내부응력 R 이 사용되었으며 광의(long-range)의 응력장 하에서 외부로부터의 전위 발생에 따른 효과를 모사하기 위하여, 강화와 회복(recovery)이 조합된 변형기구로서 다음과 같이 정의된다.⁽⁴⁾

$$\dot{R} = (C_1 - \gamma_1 R) \dot{\epsilon}^p \quad (2)$$

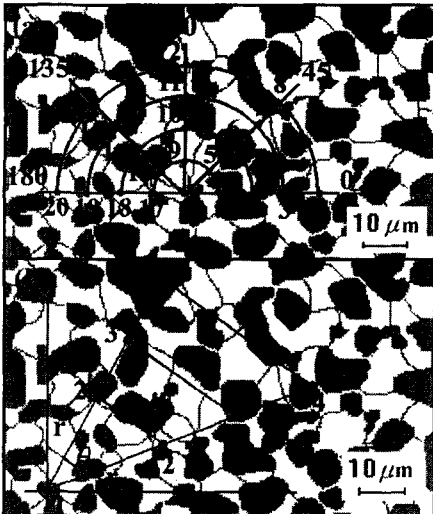


Fig. 1 Diagrams showing a unit grid-point cell in the digital image of two-phase Ti-6Al-4V for (a) 2-point probability function, and (b) 3-point probability function

여기서, C_1 및 γ_1 은 각각 재료상수이며, 이 때, 첫 번째 항은 강화과정을 두 번째 항은 회복과정을 나타낸다. 앞서 언급한 바와 같이 고온에서의 변형은 결정립 성장을 동반하며 이는 온도 만에 의한 정적(static) 성장과 변형에 따라 수반되는 동적(dynamic) 성장의 합으로 표현할 수 있다.⁽²³⁾ 초소성 재료에 있어 유동응력은 결정립 크기가 증가됨에 따라 증가되며 변형에 수반되는 결정립 크기의 증가는 결국 변형률 강화(strain hardening)를 유도한다. 따라서 결정립과 관련된 조직의 진전식(evolution equation)은 다음과 같이 나타낼 수 있다.⁽⁴⁾

$$\dot{l} = \left(\frac{\alpha_1}{l^\mu}\right) + \beta_1 \dot{\epsilon}^p \quad (3)$$

사용된 계수 α_1 , β_1 및 μ 역시 재료상수이며 첫 번째 항은 정적 성장을 두 번째 항은 동적 성장을 나타낸다. 구성방정식 (1)-(3)에 사용된 재료상수 결정을 위해 최소자승법을 이용한 다단계 최적화 기법이 개발되었으며 실험적으로 측정된 결과와 계산값을 비교하여 각 온도에서의 최적 재료상수를 선정할 수 있었다.⁽⁴⁾ 미시구조의 상 분포가 통계적으로 등방성이고 α - β 이상구조에 대한 체적분율이 비슷한 값을 취할 경우 평균 상의 크기는 결정립 크기와 같은 것으로 가정할 수 있으며,⁽²⁴⁾ 따라서 이를 바탕으로 미시재료의 각 상에 대한 응력은 상술한 구성방정식의 수치적분을 통해 계산할 수 있게 된다.

2.2 비균질 재료와 확률함수

비균질 재료의 미시구조 변화에 따른 기계적 특

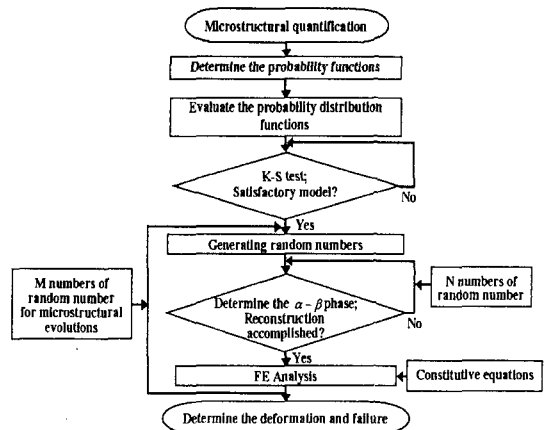


Fig. 2 Flow diagram showing the procedure of determination of phase distributions and failure strain

성(i.e., 응력-변형률 관계)을 예측하기 위해서는 미시-거시적 해석이 통합된 적합한 재료 변형거동 모형이 요구된다. 이를 위해 본 연구는 거시적 평균으로 각 상의 분포와 크기를 반영한 앙상블(ensemble) 값을 사용하였으며, 이는 미시구조 내에서 각 상이 존재하는 개수 및 분포와 관련된 값으로, 조건부 확률함수(conditional probability function)를 이용하여 임의 상 분포에 따른 응력을 다음과 같이 계산할 수 있다. 2-점 조건부 확률함수를 이용할 경우 각 상의 분포에 따른 앙상블 응력은 아래와 같이 표현할 수 있으며,⁽¹⁴⁾

$$\langle \sigma \rangle_{h_k} = \int \phi(r_1 \in h \wedge r_2 \in h_k) \sigma dh \quad (4)$$

3-점 조건부 확률함수의 경우는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\langle \sigma \rangle_{h_l} = \int \phi(r' \in h_n \wedge r \in h_m \wedge h_l) \sigma dh \quad (5)$$

여기서 2-점 조건부 확률함수 $\phi(r_1 \in h \wedge r_2 \in h_k)$ 는 임의의 분리거리 r_2 에서의 상태(i.e., phase)가 h_k 일 경우, 분리거리 r_1 만큼 떨어진 지점에서의 상태가 h 일 조건부 확률을 의미하며, 3-점 조건부 확률함수 $\phi(r' \in h_n \wedge r \in h_m \wedge h_l)$ 는 임의의 한 점 l 에서의 상태가 h_l 이고 분리거리 r 및 r' 만큼 떨어진 점에서의 상태는 각각 h_m 및 h_n 일 확률을 나타낸다. 이때 2-점 확률함수에서의 k 및 3-점 확률함수에서의 l, m, n 은 각각 이상을 의미하

는 1 과 2 의 값을 갖는다. 한편 3-점 조건부 확률함수는 다음과 같이 2-점 조건부 확률함수 ϕ_1' 과 ϕ_2' 의 합으로 표현이 가능하다.

$$\phi(r' \in h_n | r \in h_m, h_l) = \phi_1'(r' \in h_n | r \in h_m, h_l) + \phi_2'(r' \in h_n | r \in h_m, h_l) \quad (6)$$

임의의 지점에서 측정된 확률값은 재료의 상 분율과 동일하게 고려될 수 있으며 따라서 조건부 확률 ϕ 는 다음과 같이 절대확률(absolute probability)과 체적분율의 항으로 표현할 수 있다.

$$\phi(r_1 \in h_j \wedge r_2 \in h_i) = P_{ij} / V_i \quad (7)$$

$$\phi(r' \in h_n \wedge r \in h_m \wedge h_l) = P_{lmn} / V_l \quad (8)$$

여기서 P_{ij}, P_{lmn} 는 각각 2-점 및 3-점 절대확률을 의미한다. $\alpha - \beta$ 이상 구조를 갖는 Ti-6Al-4V 합금의 거시적 응력은 식 (4), (5)의 앙상블 평균으로 표현된 응력을 이용하여 따라서 아래와 같은 식으로 계산할 수 있으며,

$$\bar{\sigma} = f(h_1) \langle \sigma \rangle_{h_1} + f(h_2) \langle \sigma \rangle_{h_2} \quad (9)$$

이때 $f(h)$ 는 각상의 체적분율 f_v^α 및 f_v^β 와 동일하다.

Table 1 Probability parameters for the 2-point probability functions of Ti-6Al-4V at 900°C

	f_v^α	f_v^β	c_{11}	n_{11}	c_{12}	n_{12}	c_{22}	n_{22}
Initial	0.49	0.51	2.363	0.034	3.864	0.033	2.412	0.002
$1 \times 10^{-3} s^{-1}$	0.52	0.48	1.750	0.058	2.602	0.107	1.502	0.121
$1 \times 10^{-4} s^{-1}$	0.55	0.45	1.738	0.051	2.388	0.112	1.873	0.197

Table 2 Probability parameters for the 3-point probability functions of Ti-6Al-4V at 900°C

P_{lmn}	α_{lmn}	β_{1mn}	β_{2mn}	β_{3mn}	δ_{1mn}	δ_{2mn}	δ_{3mn}	γ_{lmn}	S_{lmn}	T_{lmn}	W_{lmn}
P_{111}	0.118	0.122	0.122	0.122	0.005	0.005	0.005	-0.010	$1.750 r^{0.942}$	$8.590 (rr')^{-7.590}$	$0.934 [r^{1.137} (r'')^{0.799} (r''')^{0.160}]$
P_{112}	0.122	0.127	-0.122	-0.122	-0.005	-0.005	-0.005	0.500	$1.750 r^{0.942}$	$4.688 (rr')^{-3.688}$	$0.001 [r^{1.584} (r'')^{0.853} (r''')^{1.271}]$
P_{121}	0.122	-0.122	0.127	-0.122	-0.005	-0.005	-0.005	0.500	$2.602 r^{0.890}$	$-0.100 (rr')^{1.100}$	$0.001 [r^{1.584} (r'')^{0.853} (r''')^{1.271}]$
P_{122}	0.127	-0.127	-0.127	0.122	0.005	0.005	0.005	-0.010	$2.602 r^{0.890}$	$0.234 (rr')^{0.766}$	$0.934 [r^{1.137} (r'')^{0.799} (r''')^{0.160}]$
P_{211}	0.122	-0.122	-0.122	0.127	-0.005	-0.005	-0.005	0.500	$2.602 r^{0.890}$	$-0.100 (rr')^{1.100}$	$0.001 [r^{1.584} (r'')^{0.853} (r''')^{1.271}]$
P_{212}	0.127	-0.127	0.122	-0.127	0.005	0.005	0.005	-0.010	$1.502 r^{0.879}$	$4.688 (rr')^{-3.688}$	$0.934 [r^{1.137} (r'')^{0.799} (r''')^{0.160}]$
P_{221}	0.127	0.122	-0.127	-0.127	0.005	0.005	0.005	-0.010	$2.602 r^{0.890}$	$0.234 (rr')^{0.766}$	$0.934 [r^{1.137} (r'')^{0.799} (r''')^{0.160}]$
P_{222}	0.133	0.127	0.127	0.127	-0.005	-0.005	-0.005	0.010	$1.502 r^{0.879}$	$4.135 (rr')^{-3.135}$	$0.011 [r^{7.471} (r'')^{-5.942} (r''')^{1.925}]$

3. 통계적 분석과 재료파손

3.1 확률함수 측정방법

Ti-6Al-4V 합금에 대한 비균질 미시구조의 상 분포에 따른 불균일성을 정확하게 표현할 수 있는 2-점 확률함수와 3-점 확률함수를 결정하기 위해 다음과 같이 각각의 확률값을 측정하였다. 분석에 사용된 재료는 변형률속도 $1 \times 10^{-3}/s$ 및 $1 \times 10^{-4}/s$ 조건으로 각각 초소성 인장 실험을 수행하여 파손된 시편과, 역시 동일한 온도 $900^\circ C$ 조건에서 30 분 동안 열처리한 초기 시편이며 이들을 이용하여 변형 전, 후의 조직 변화가 비교 연구되었다. 우선 2-점 확률함수의 경우, 측정 방향에 따라 등방성과 이방성을 갖는다고 각각 가정하였고, 등방성으로 가정한 경우 하중 방향에 관계없이 한 점에서 상대 분리거리 r 만큼 떨어진 지점의 상을 동심원을 따라 연속하여 측정하였으며, 이방성 가정은, 하중 방향을 0° , 이에 수직하는 방향을 90° , 이들 두 방향의 사잇각을 각각 45° , 135° 로 나누어 측정하였다. Fig. 1(a)는 이와 같은 가정에 따른 측정방법을 나타내고 있다. 아울러 3-점 확률함수의 경우는 Fig. 1(b)와 같이 한 점을 기준으로 임의의 각도 θ 에 대한 상대 분리거리 r 과 r' 만큼 떨어진 나머지 두 점에서의 상을 그림과 같은 번호 순으로 측정하였다(i.e., 1-2-2', 1-3-3').

3.2.2-점 확률함수

절대확률, P_{ij} 를 계산하기 위해 다음과 같이 이상 구조에 대한 2-점 확률함수를 지수 형태로 가정하였으며,⁽¹²⁾

$$P_{ij}(r) = \alpha_{ij} + \beta_{ij} \exp(-c_{ij} r^{n_{ij}}) \quad (10)$$

여기서 $P_{ij}(r)$ 은 임의의 한 점의 상태가 i 일 경우, 분리거리 r 만큼 떨어진 점이 j 상일 확률을 의미하며 전술한 바와 같이 이상 재료에 있어 i, j 는 1 또는 2 의 값을 갖는다. 또한 α_{ij} 및 β_{ij} 는 극한 조건(limiting condition)⁽¹²⁾에 의해 결정되는 값으로

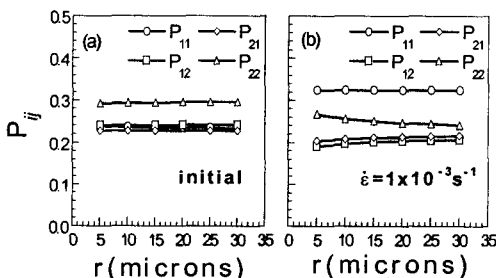


Fig. 3 Variations of probability with separation distance using 2-point probability function for (a) initial, and (b) deformed microstructure

상의 체적분율, f_v^α 및 f_v^β 로 표현되며, c_{ij} 와 n_{ij} 는 미시구조의 상 크기와 상 분포의 확률적 정보를 나타내는 상수로써 이들은 각각 측정한 확률값에 최적화기법을 적용하여 결정할 수 있다. Table 1 은 이와 같은 미시구조의 측정을 통해 결정된 2-점 확률함수의 통계적 상수를 나타낸다.

3.3 3-점 확률함수

비균질 재료에 대한 상 분포 해석과 관련하여 2-점 확률함수와 함께 아래와 같은 지수 형태로 가정된 3-점 확률함수를 사용하였으며,⁽¹²⁾

$$P_{lmn}(r, r', r'') = \alpha_{lmn} + \sum_{g=1}^3 \beta_{glmn} \exp[S_{lmn}(r)] + \sum_{g=1}^3 \delta_{glmn} \exp[T_{lmn}(rr')] + \gamma_{lmn} \exp[W_{lmn}(rr'r'')] \quad (11)$$

이때 $P_{lmn}(r, r', r'')$ 는 임의의 한 점 l 의 상태가 i 또는 j 상일 경우, 임의의 각도 θ 와 분리거리 r 및 r' 만큼 떨어진 두 점 m 과 n 의 상태가 i 또는 j 상일 확률을 의미하며, $r'' = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta}$ 의 기하학적 관계를 가지게 된다. 또한 $\alpha_{lmn}, \beta_{glmn}, \delta_{glmn}, \gamma_{lmn}$ 는 체적분율과 극한조건⁽¹²⁾으로 결정되는 통계적 재료상수이며, $S_{lmn}, T_{lmn}, W_{lmn}$ 은 2-점 확률함수 $P_{ij}(r)$ 와 최적화기법으로 결정되는 상수들이다. 한편 확률함수 계산을 위해 사용된 거리, r, r', r'' 는 2-점 및 3-점 확률함수 모두 상대거리를 사용하여 무차원화 하였다. Table 2 는 이와 같은 미시구조의 측정을 통해 결정된 3-점 확률함수에 사용된 상수를 나타낸다.

3.4 재료파손 예측

변형에 따른 미시구조의 변화와 재료의 파손을 예측하기 위하여 몬테카를로 기법을 사용하였으며 초기 측정된 미시구조를 바탕으로 부과된 변형률

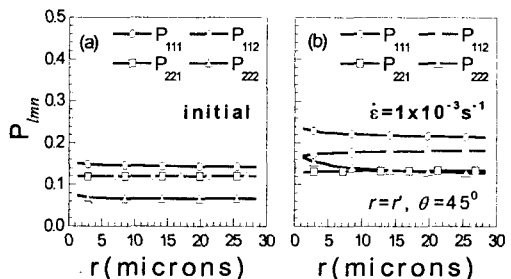


Fig. 4 Variations of probability with separation distance using 3-point probability function for (a) initial, and (b) deformed microstructure

속도에 대한 미시구조의 상 분포를 변형과 함께 재구성하였다. 우선 2-점 및 3-점 확률값을 측정하여 확률값의 수렴성을 판단하였고 이때 구한 확률값의 평균과 분산을 이용하여 상 분포를 보다 정확하게 표현할 수 있는 확률분포를 가정할 수 있었다. 이를 위해 상용 Weibull++ 6.0 을 이용하여 분포의 상관도를 계산하였고 Kolmogorv-Smirnov test⁽²⁵⁾를 수행하여 누적 확률값에 따른 분포의 적합성을 확인하였다. Fig. 2 는 몬테카를로 시뮬레이션을 활용한 미시구조의 상 결정 순서를 나타내고 있다. 변형이 진행됨에 따라 각 단계별로 상 분포를 재구성하였으며 실험적으로 측정된 미시조직의 분포특성으로부터 결정된 2-점 및 3-점 확률함수를 이용하여 임의 변형률 상태의 상 분포를 재구성하기 위해 단계별로 추출한 난수는 약 1000 개를 사용하였다. 한편 Ti-6Al-4V 합금의 경우 분리거리 $r = 30\mu\text{m}$ 지점에서 각각의 확률값이 충분히 수렴됨을 확인하였으며 정규분포를 이용하여 추출된 난수는 상대적으로 적은 수가 사용되었음에도 불구하고 분포특성 모사를 위해 적절함을 알 수 있었다.

4. 결과 및 고찰

변형 전 Ti-6Al-4V 합금의 α - β 상에 대한 체적분율은 0.49:0.51이며 변형률속도, $1 \times 10^{-3}/\text{s}$ 및 $1 \times 10^{-4}/\text{s}$ 조건으로 초소성 인장 실험을 수행하여 파손된 후는 각각 0.52:0.48과 0.55:0.45로 측정되었다.⁽²⁶⁾ 변형 전, 후의 미시구조를 통계적으로 등방성과 이방성으로 가정하여 측정된 재료상수를 이용하여 확률값을 계산한 결과, 변형에 따른 각각의 값이 거의 일치함을 알 수 있었고 따라서 Ti-6Al-4V 합금은 초소성 변형거동 과정 동안 통계적으로 등방성으로 가정할 수 있음을 확인하였다.

Fig. 3 및 Fig. 4는 각각 2-점 및 3-점 확률함수의 분리거리에 따른 확률값의 변화를 보이고 있다. 두 경우 모두 일반적으로 상대거리에 따라 선형적인 확률값의 변화를 나타내고 있으나 특히

P_{11} 과 P_{22} 및 P_{111} 과 P_{222} 의 경우 변형에 대해 확률값의 차이가 상당히 달라짐을 알 수 있다. 이는 변형률에 따른 확률값의 변화를 보이고 있는 Fig. 5 및 Fig. 6에서도 동일하게 나타나고 있으며 따라서 제시된 확률함수를 이용한 계산 결과가 변형이 진행됨에 따라 α 상의 체적분율이 증가되고 있는 실험값과 일치함을 알 수 있다. 재료 변형에 대한 거시적 상태의 응력 또한 확률값의 측정으로부터 결정된 2-점 확률함수 및 3-점 확률함수를 이용하여 예측할 수 있었으며 이를 위하여 상용 유한요소해석 프로그램인 ABAQUS와 UMAT을 사용하였다. Fig. 7에서 보듯이 2-점 및 3-점 확률함수를 이용한 계산결과가 실험값과 모두 잘 일치하는 것을 알 수 있으며 이와 같은 결과로부터 α - β 이상 Ti-6Al-4V 합금의 경우 확률계수의 수가 상대적으로 적고 계산이 용이한 2-점 확률함수를 사용하는 것이 보다 효율적임을 알 수 있다. 한편 이상 분포에 따른 미시구조가 통계적으로 등방성이며 균질하다고 가정할 경우 2-점 확률함수가 보다 효과적임을 알 수 있으나 변형에 대한 이방성의 고려 및 이상구조에 대한 기하학적 통계적 특성이 다를 경우, 상 분포 확률을 측정하기 위해 임의의 3-점 간의 상대 분리거리와 각도 θ 를 모두 고려한 3-점 확률함수가 보다 정확한 미시구조의 통계적 정보를 제공할 수 있음을 예상할 수 있다.

몬테카를로 시뮬레이션을 이용하여 재료의 상을 결정하는 방법은 실험적으로 측정된 확률값을 이용하여 추출한 난수를 직접 상 분포 결정에 반영할 수 있으므로 분포에 대한 정확성을 더욱 향상시킬 수 있다. 본 연구에서는 이 같은 몬테카를로 기법에 의해 재구성된 미시구조를 유한요소 해석에 적용하여 파손 변형률을 예측하였다. 변형률속도 $1 \times 10^{-3}/\text{s}$ 및 $1 \times 10^{-4}/\text{s}$ 조건에서 초소성 인장 실험에 의한 파손 변형률은 1.55와 1.72로 측정되었으며 확률론적 특성이 고려되지 않은 임의의 상 분포를 유한요소 해석을 위해 적용한 경우, 파손 변형률이 각각 1.17과 1.81로 예측되었다.⁽⁴⁾ 한편 몬테카를로 기법을

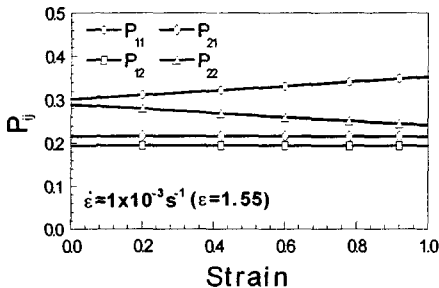


Fig. 5 Evolutions of probability with strain for Ti-6Al-4V at 900°C using 2-point probability function

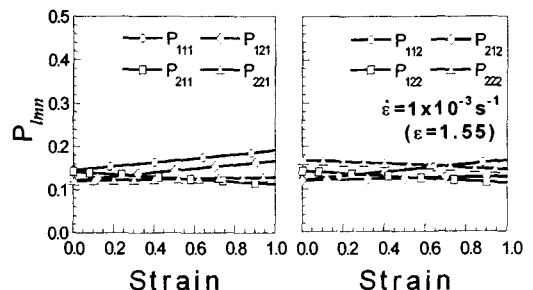


Fig. 6 Evolutions of probability with strain for Ti-6Al-4V at 900°C using 3-point probability function

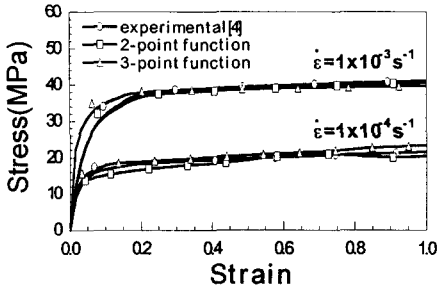


Fig. 7 Comparison of the stress-strain curves using the 2-point and 3-point probability functions with experimental data

Table 3 Comparisons between experimental and predicted failure strains for Ti-6Al-4V at 900°C

$\dot{\epsilon}$	experiment ⁽⁴⁾	random simulation ⁽⁴⁾	MCS
$1 \times 10^{-3} s^{-1}$	1.55	1.17	1.57
$1 \times 10^{-4} s^{-1}$	1.72	1.81	1.76

이용하여 상 분포를 결정하고 파손 변형률을 구한 결과 동일한 조건에서 1.57과 1.76으로 계산되었으며 이들의 결과는 Table 3과 같다. 비균질 재료에 대한 확률함수의 적용 결과, 변형에 따른 조직의 변화를 보다 정밀하게 모사할 수 있었으며 따라서 파손 변형률을 비롯한 기계적 거동 예측을 더욱 정확히 할 수 있음을 알 수 있다. Fig. 8은 실제 시편에서 몬테카를로 시뮬레이션을 이용하여 재구성한 상 분포를 바탕으로 유한요소 해석한 변형에 따른 평균 상 크기 분포의 변화를 나타내고 있다. 이로서 제시된 확률함수를 이용한 통계적 모델은 변형에 따라 변화하는 미시재료의 국부적 변화과정을 적절히 모사할 수 있음을 볼 수 있으며 따라서 보다 향상된 변형거동 및 파손해석이 가능함을 알 수 있다.

5. 결론

Ti-6Al-4V 합금의 비균질 조직에 따른 불균일 변형에 의한 파손해석과 관련하여 확률함수를 이용한 미시역학적 모델이 제시되었으며 이와 같은 모델을 이용하여 초기 상 크기 및 분포에 따른 변형과 조직의 발전 및 기계적 거동 특성을 예측할 수 있었다.

통계적 미시구조 특성을 거시적 물리량으로 표현하기 위해 앙상블 평균과 2-점 및 3-점 확률함수를 이용하였고 이를 바탕으로 상관함수를 결정하였다. 또한 부과된 변형률속도에 의한 재료의 파손 변형률은 몬테카를로 시뮬레이션을 통해 재구성된 상 크기와 분포 및 이를 적용한

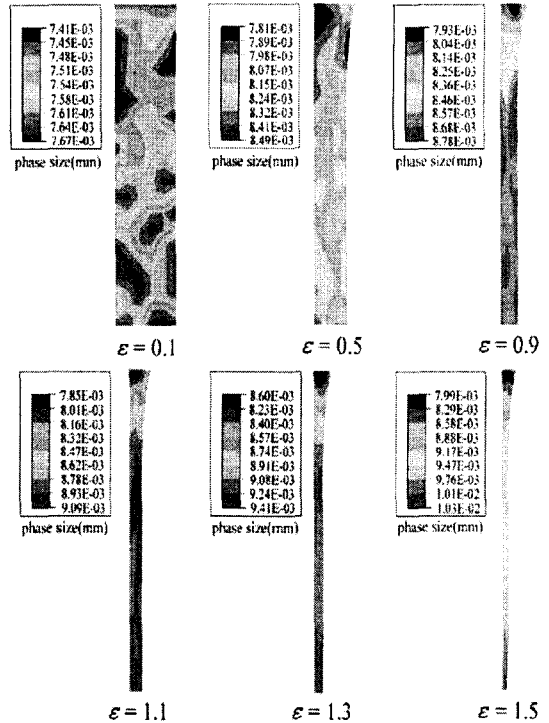


Fig. 8 Predicted spatial variation of mean phase size in a quarter of the test-piece gauge length

유한요소 해석에 의해 예측할 수 있었다. 변형 전, 후의 미시구조를 등방성과 이방성으로 각각 가정하여 확률값을 측정하여 계산한 결과, 초소성 변형거동에 따른 Ti-6Al-4V 합금은 통계적으로 등방성으로 가정할 수 있음을 확인하였다. 한편 2-점 및 3-점 확률함수를 상관함수로 하여 예측한 거시적 응력-변형률을 비교 분석한 결과, 2-점 확률 함수가 보다 적은 수의 확률계수와 간단한 계산 단계가 소요됨을 알 수 있었고 따라서 상대적으로 효율적이라 할 수 있다. 몬테카를로 시뮬레이션을 이용하여 예측한 파손 변형률은 확률분포를 고려하지 않은 임의 상 분포 적용에 따른 계산 결과보다 매우 향상된 1.57과 1.76으로 부과된 변형률속도에 따라 각각 계산되었으며 이로서 확률론적 기법을 바탕으로 한 재료 모델링 기법이, 특히 변형과 함께 수반되는 비균질 미시구조의 변화와 미시-거시적 특성을 적합하게 모사할 수 있음을 확인하였다.

후기

본 연구는 산업자원부 지정 한양대학교 신뢰성분석연구센터 사업의 지원을 받아 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Johnson, R.H., 1970, "Superplasticity," *Met. Rev.* 15 pp. 115~134.
- (2) Winkler, P.-J., 1990, *Superplasticity in use: A Critical Review of its Status, Trends and Limits, Superplasticity in Metals, Ceramics and Intermetallic Symp.*, California, USA, pp. 123~126.
- (3) Zhou, M. and Duane, F.P.E., 1996, "Mechanisms-based Constitutive Equations for the Superplastic Behavior of a Titanium Alloy," *J. of strain Analysis*, Vol.31, pp.65~73.
- (4) Kim, T.W. and Dunne, F.P.E., 1999, "Inhomogeneous Deformation and Failure in Superplasticity," *Proc. R. Soc. Lond.* Vol. 455, pp. 719~735.
- (5) Cheong, B.H., Lin, J. and Ball, A.A., 2003, "Modelling the Effects of Grain-size Gradients on Necking in Superplastic Forming," *J. Mater. Pro. Technol.*, Vol. 119, pp. 316~365.
- (6) Jae Do Kwon, Yong Tak Bae and Sung Jong Choi, "The Evaluation of Mechanical Properties on the Changes of Microstructure for Titanium Alloy(Ti-6Al-4V)," *Trans. of the KSME, A*, Vol. 26, No. 4, pp. 609~616.
- (7) Hoon-Chul Yang and Ki-Tae Kim, "Densification Behavior of Ti-6Al-4V Powder Compacts by Hot Isostatic Pressing," *Trans. of the KSME A*, Vol. 24, No. 2, pp. 394~402.
- (8) Shi, L. and Northwood, D.O., 1995, "Grain Size Effect Evolution in High Temperature Creep and Superplastic Deformation of Polycrystalline Materials," *Mater. Sci. Forum*, Vol. 189, pp. 335~340.
- (9) Gosh, A.K. and Raj, R., 1986, "A Model for the Evolution of Grain Size Distribution During Superplastic Deformation," *Acta. Met. Mater.*, Vol 34, No. 3, pp. 447~456.
- (10) Zhang, X.Z. and Knott, J.F., 2000, "The Statistical Modelling of Brittle Fracture in Homogeneous and Heterogeneous Steel Microstructures," *Acta Mater.*, Vol. 48, pp. 2135~2146.
- (11) Todinov, M.T., 2001, "Statistical Modelling the Scatter of Properties from Sampling of Inhomogeneous Materials," *Com. Mater. Sci.*, Vol. 21, pp. 436~451.
- (12) Corson, P.B., 1974, "Correlation Functions for Predicting Properties of Heterogeneous Materials II. Empirical Construction of Spatial Correlation Functions for Two-Phase Solids," *J. Appl. Phys.*, Vol. 45, No. 7, pp. 3165~3170.
- (13) Corson, P.B., 1974, "Correlation Functions for Predicting Properties of Heterogeneous Materials III. Effective Elastic Moduli of Two-Phase solids," *J. Appl. Phys.*, Vol. 45, No. 7, pp. 3171~3179.
- (14) Lin, S., Garmestani, H. and Adams, B., 2000, "Statistical Evolution of Probability Functions in an Inelastically Deforming Two-Phase Medium," *Int. J. Solids. Struct.*, 37, pp. 423~434.
- (15) Lin, S. and Garmestani, H., 2000, "Statistical Continuum Mechanics Analysis of an Elastic Two-Isotropic-Phase Composite Material," *Comps. Part B*, Vol. 31, pp. 39~46.
- (16) Kröner, E., 1971, *Statistical Continuum Mechanics*, Wien, New York, pp. 21~31.
- (17) Torquato, S. and Sheehan, N., 2001, "Generating Microstructures with Specified Correlation Function," *J. Appl. Phys.*, Vol. 89, No. 1, pp. 53~60.
- (18) Saito, Y., 1997, "The Monte Carlo Simulation of Microstructural Evolution in Metal," *Mater. Sci. Eng. A*, 233, pp.114~124.
- (19) Lee, H.N., Ryoo, H.S. and Hwang, S.K., 2000, "Monte Carlo Simulation of Microstructure Evolution Based on Grain Boundary Character Distribution," *Mater. Sci. Eng. A*, 281, pp. 176~188.
- (20) Gosh, A.K. and Hamilton, C.H., 1979, "Mechanical Behavior and Hardening Characteristics of a Superplastic Ti-6Al-4V Alloy," *Met. Trans. A.*, Vol.10A, pp.699~706.
- (21) Nieh, T.G., Wadsworth, J. and Sherby, O.D., 1997, *Superplasticity in Metals and Ceramics*, Cambridge University Press, Cambridge, pp. 32~49.
- (22) Lemaitre, L. and Chaboche, J.-L., 1990, *Mechanics of Solid Materials*, Cambridge University Press, Cambridge, pp. 176~235.
- (23) Baudelet, B. and Suery, M., 1998, "Plastic stability and Strain to Fracture during Superplastic Deformation," *Superplasticity and Superplastic Forming*(Ed. C.H. Hamilton, N.E. Paton), Proc. Int. Conf., Washington, USA, pp. 135~148.
- (24) Majorell, A., Srivatsa, S. and Picu, R.C., 2002, "Mechanical Behavior of Ti-6Al-4V at High and Moderate Temperatures-Part I: Experimental Results," *Mater. Sci. Eng. A*, Vol. 326, pp. 306~316.
- (25) Haldar, A. and Mahadevan, S., 2000, *Probability, Reliability and Statistical Methods in Engineering Design*, John Wiley & Sons, New-York, pp. 114~117.
- (26) Kim, T.W., 2001, "Heterogeneous Microstructure of Ti-6Al-4V and its Effect on Superplastic Deformation," *Scripta Mater.*, Vol. 45, pp. 923~929.