

확률 분포 함수의 지수 곡선 접합을 이용한 RVE 적합성 평가

Evaluation of RVE Suitability Based on Exponential Curve Fitting of a Probability Distribution Function

정상엽* · 윤태섭** · 한동석***

Chung, Sang-Yeop · Yun, Tae Sup · Han, Tong-Seok

Abstract

The phase distribution in a multi-phase material strongly affects its material properties. Therefore, a proper method to describe the phase distribution of a material is needed. In this research, probability distribution functions, two-point correlation and lineal-path functions, are used to represent the probabilistic phase distributions of a material. The probability distribution function is calculated using a numerical method and is described as an analytical form via exponential curve fitting with three parameters. Application of analytical form of probability distribution function is investigated using two-phase polycrystalline solids and soil samples. It is confirmed that the probability distribution functions can be represented as an exponential form using curve fitting which helps identifying the applicability of a representative volume element(RVE).

Keywords : two-phase materials, probability distribution functions, curve fitting, exponential function, virtual material samples

요 지

2가지 이상의 재료로 구성된 다상(multi-phase) 재료는 상 분포에 따라 재료 특성이 다르기 때문에, 상 분포를 묘사할 수 있는 적절한 방법이 필요하다. 본 연구에서는 확률 분포 함수 two-point correlation function과 lineal-path function을 사용하여 재료 내부의 상 분포 상태를 확률적으로 묘사하였다. 수치 계산 방법으로 계산되는 확률 분포 함수를 3개의 매개 변수를 사용한 곡선 접합(curve fitting)을 이용하여 수식으로 표현하고, 적용성을 살펴보기 위하여 2상 합금 미세구조 가상 시편과 지반 모델 시편을 사용하였다. 이를 통해, 확률 분포 함수는 곡선 접합을 이용하여 지수 형태의 수식으로 표현이 가능하며, 이는 시편의 RVE로서의 활용 가능성을 판단하는데 사용될 수 있음을 확인하였다.

핵심용어 : 2상 재료, 확률 분포 함수, 곡선 접합, 지수 함수, 가상 재료 시편

1. 서 론

2가지 이상의 재료로 구성된 다상 재료는 구성 재료의 특성 및 상 분포 상태에 의해 전체 재료 특성이 달라진다. 다상 다결정 재료는 동일한 상의 부피비를 갖는 경우에도 상 분포의 차이에 의해 재료의 특성 및 거동이 큰 차이를 나타낸다(이영일 등, 1999; Torquato, 2002; Tewari 등, 2004; Han 등, 2005; Chung 등, 2010). 지반 재료의 경우에도, 같은 공극률을 갖는 재료라 할지라도 상의 공간적 분포에 따라 확률적 분포도가 다르게 평가되며, 그에 따른 상이한 물리적 거동을 보인다. 따라서 다상 재료의 특성을 연구하는데 있어서 상 분포를 묘사할 수 있는 적절한 방법은 반드시 필요하다.

재료의 상 분포 특성을 파악할 수 있는 다양한 방법들 가운데, contiguity(Underwood, 1970; Han 등, 2005)는 재료

의 상 군집(phase clustering)정도를 스칼라로 표현함으로써, 재료 내부의 상 분포의 연결성 등을 시각화하는데 유용하게 사용될 수 있다(Han 등, 2005; Chung 등, 2010). 또 다른 방법으로는 재료 내부에 위치한 점과 선분이 제시하는 상 분포 상태를 낮은 차수(low-order)의 확률 분포 형태로 표현하는 two-point correlation function(Torquato, 2002; Gokhale 등, 2005)과 lineal-path function(Lu 등, 1992; Coker 등, 1995; Singh 등, 2008)이 있다.

본 연구에서는 재료의 상 분포 특성을 파악하기 위해서 확률 분포 함수 two-point correlation function(Gokhale 등, 2005)과 lineal-path function(Coker 등, 1995; Torquato, 2002)을 사용하였다. 이 두 함수는 재료 내부에 상 분포 상태를 확률적으로 묘사할 수 있을 뿐 아니라, 미세구조 재구성 등의 응용 연구에도 적용이 가능하다(Torquato, 2002; Chung 등 2010). 기존 연구에서는 two-point correlation

*정회원 · 연세대학교 토목환경공학과 박사과정 (E-mail : sychung@yonsei.ac.kr)

**정회원 · 연세대학교 토목환경공학과 조교수 · 공학박사 (E-mail : taesup@yonsei.ac.kr)

***교신저자 · 연세대학교 토목환경공학과 조교수 · 공학박사 (E-mail : tshan@yonsei.ac.kr)

function은 재료의 통계적 정보와 수식을 이용하는 지수 (exponential) 형태의 함수로 간단하게 표현될 수 있지만, lineal-path function을 묘사하기 위해서는 수치(numerical) 계산 방법이 이용되는 것을 확인하였다(Chung 등 2010). 본 논문에서 언급되는 수치 계산 방법은, 수식을 이용하는 형태가 아닌, 컴퓨터를 이용하여 시편으로부터 포인트 샘플링 등을 통하여 직접적으로 시편의 정보를 얻는 방법을 의미한다. Lineal-path function도 two-point correlation function과 마찬가지로 간단한 지수 형태의 함수로 표현은 가능하지만, 2차원 이상에서는 정확한 정보를 포함하는 수식 형태로 표현하기 어렵다고 보고되었다(Torquato, 2002). 수식(analytical) 형태의 확률 분포 함수는 간단한 통계 정보를 이용하여 효율적으로 결과를 얻을 수 있지만, 수치 계산 방법을 이용한 확률 분포 함수는 수식을 이용한 방법에 비해 계산량이 월등히 많다는 단점이 있다. 본 연구에서는 수치 계산 방법을 이용해 표현된 lineal-path function을 3개의 매개 변수(parameter)를 이용한 곡선 적합(curve fitting)을 사용하여 지수 형태의 함수로 표현하고 그 활용성을 살펴보았다. 수치 계산을 사용한 경우와 곡선 적합을 이용해 표현된 lineal-path function의 적용성을 살펴보기 위하여, 서로 다른 상 균질 크기를 갖는 다양한 2상 합금 미세구조 가상 시편과 packing 알고리즘을 사용하여 제작한 지반 입자 모델 시편을 예로 사용하였다. 다양한 시편에 대한 확률 분포 함수의 결과를 살펴봄으로써, 확률 분포 함수의 곡선 적합을 이용한 수식화의 적합성에 대하여 판단하고, 각 함수의 특성과 재료의 물성치의 연관성을 살펴보았다. 또한 확률 분포 함수의 곡선 적합을 사용하여 시편이 재료가 가진 통계학적 의미를 표현할 수 있는 최소한의 부피를 가진 요소를 의미하는 RVE(representative volume element)로서 고려될 수 있는 지에 대한 판단 가능성을 살펴보았다. RVE는 재료, 혹은 분석의 고려 대상으로서 의미를 갖는 최소한의 부피 단위를 나타낸다(Kelly 등, 2000, 그림 1). RVE로서 고려되지 못하는 시편은 특정한 재료에 대한 대표성을 가지고 있지 않기 때문에 해당 시편에 대한 분석 결과가 재료의 특성을 파악하는데 의미를 가진다고 볼 수 없다. 따라서 시편이 RVE로 고려되는 것은 재료 해석에 있어서 매우 중요한 사항이다. 본 연구에서는 대상 시편이 RVE로서 활용될 수 있는지를 판단할 수 있는 기준으로서 곡선 적합을 사용하여 그 활용성을 확인하였다.

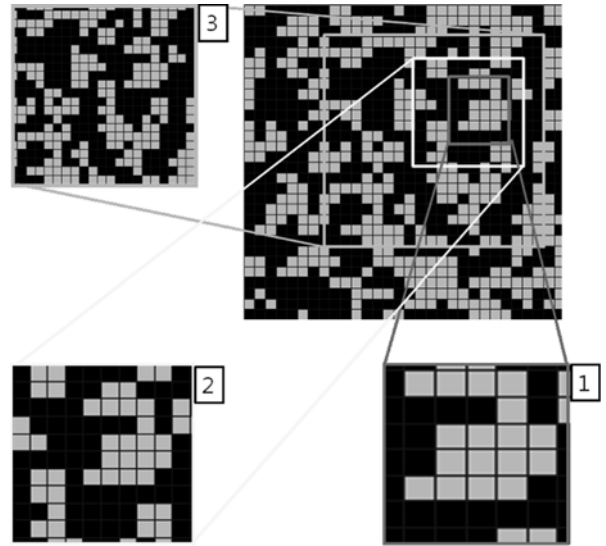


그림 1. RVE에 대한 개념도(주 : 그림에서 1번과 2번 윈도우로 표시된 부분은 특정 재료의 균질 위주로 구성되었기 때문에 대표성을 지니지 못하여 RVE로 고려되기 어렵다. 하지만 3번 윈도우로 표시된 부분은 전체 재료의 구성 비율과 형태가 유사하여 재료의 RVE로 채택될 수 있다)

2. 확률 분포 함수

2.1 Two-point correlation function

다상 재료에서 상의 공간적 분포는 재료의 특성에 영향을 준다(Torquato, 2002; Tewari 등, 2004; Han 등, 2005). 따라서 상 분포를 파악하기 위해서 상 분포를 묘사할 수 있는 적절한 방법이 필요하다. Two-point correlation function, P_{ij} 는 재료 내부에 위치한 임의의 두 점이 나타내는 정보를 바탕으로 재료의 상 분포 상태를 표현하는 확률 분포 함수로써, 두 점이 i 와 j 상에 위치할 확률을 의미한다(그림 2(a)). 2상 재료의 경우, $P_{ij}(r)$ 에서 i (또는 j)는 1 또는 2가 된다. r 은 양 끝점 사이의 거리를 의미한다. Two-point correlation function은 양 끝 점이 위치한 상의 정보만 고려하며, 두 점사이의 어떠한 정보도 포함하지 않는다. 일반적인 two-point correlation function의 극값은 다음과 같다.

$$\lim_{r \rightarrow 0} P_{ii}(r, \theta, \phi) = f_i, \quad \lim_{r \rightarrow 0} P_{ij}(r, \theta, \phi) = 0 \quad (i \neq j) \quad (1)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} P_{ii}(r, \theta, \phi) = [f_i]^2, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} P_{ij}(r, \theta, \phi) = [f_i][f_j] \quad (i \neq j) \quad (2)$$

여기서 f_i 는 상의 부피비를 의미한다. 식 (1)에 나타난 바와 같

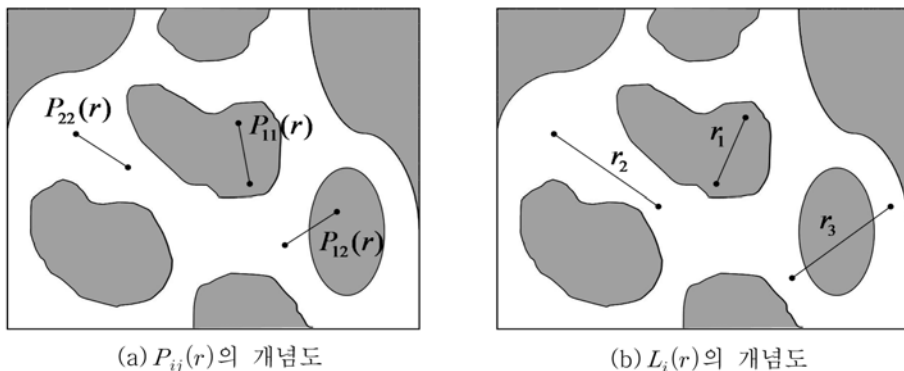


그림 2. 확률 분포 함수의 개념도 (어두운 부분 : 1번 상, 밝은 부분 : 2번 상)

이 두 점사이의 거리 r 이 0에 가까워 질 때, 두 점이 동일한 상에 위치할 확률은 상의 부피비로 수렴하고, 두 점이 서로 다른 상에 위치할 확률은 0이 된다. 반대로 r 이 증가할수록 함수 값은 식 (2)와 같이 각 상의 부피비의 곱으로 수렴한다.

Two-point correlation function은 Corson(1974)에 의해 제안된 이후, 이와 관련하여 다양한 연구가 진행되어 왔다 (Lin 등, 2000; Tewari 등, 2004; Gokhale 등, 2005). 본 연구에서는 Underwood(1970)에 나타난 입체학적(stereological) 분석을 적용하여 다음과 같이 통계적 정보를 이용하는 간단한 형태의 two-point correlation function의 식을 사용하였다(Gokhale, 2005).

$$P_{ij}(r, \theta, \phi) = f_i f_j [1 - \exp\{1 - ([P_L(\theta, \phi)]_{ij} / (2f_i f_j)) r\}] \quad (i \neq j) \quad (3)$$

$$P_{ij}(r, \theta, \phi) + P_{ij}(r, \theta, \phi) = f_i \quad (4)$$

식 (3)에서 $P_L(\theta, \phi)_{ij}$ 는 two-point correlation function을 살펴보고자 하는 방향으로 test line을 재료 내부에 위치시켰을 때, 단위 test line길이 당 $i-j$ 교차면이 만나는 교차점의 개수이다. θ 는 test line과 z 축과의 각도이고, ϕ 는 test line의 xy 평면으로의 정사영과 x 축 사이의 각도를 의미한다. 두 점이 i 상에 위치할 확률 P_{ii} 는 2상 재료의 경우 식 (3)과 (4)를 이용하여 계산된다.

2.2 Lineal-path function

Lineal-path function, $L_i(r)$ 은 길이가 r 인 임의의 선분이 상 균집에만 위치할 확률을 의미하며 특정한 방향으로의 상 분포의 연결성을 확인할 수 있다. 그림 2(b)를 살펴보면, r_1 과 r_2 의 경우에는 선분 전체가 각각 1과 2상의 균집에 위치하고 있기 때문에 lineal-path의 고려 대상이 되지만, r_3 의 경우에는 선분이 서로 다른 상에 걸쳐서 위치하고 있기 때문에 고려 대상이 되지 않는다. 일반적인 lineal-path function의 극값은 다음과 같다.

$$\lim_{r \rightarrow 0} L_i(r) = f_i \quad (5)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} L_i(r) = 0 \quad (6)$$

본 연구에서는 Coker 등(1995)에 의하여 제안된 방법을 이용하여 lineal-path function을 계산하였다. 이는, 임의의 점을 재료 내부에 위치시켜서 그 점을 기준으로 선분의 길이를 증가시키면서 선분이 지나가는 위치의 상 정보를 분석하고, 이러한 과정을 반복하는 수치(numerical) 계산 방법을 사용한다. 선분의 양 끝점 정보만을 이용하는 two-point correlation function과는 달리, lineal-path function은 선분이 위치한 곳의 정보를 모두 고려하기 때문에 상 분포의 연속성에 대한 파악이 가능하다. 따라서, 서로 다른 형태의 정보를 포함하고 있는 two-point correlation과 lineal-path function을 동시에 사용하면 보다 정확한 상 분포의 특성을 파악할 수 있다(Torquato, 2002).

3. 확률 분포 함수의 곡선 접합

3.1 곡선 접합의 과정

확률 분포 함수의 결과를 표현하는 방법은 크게 수식

(analytical) 계산 방법과 수치(numerical) 계산 방법으로 구분될 수 있다. 앞서 살펴본 two-point correlation function은 수식 계산 방법의 예로, 통계적인 정보만을 이용하여 간단하게 결과를 얻을 수 있다. 반면에 Coker(1995)에서 사용한 lineal-path function의 수치 계산 방법의 경우, 반복적인 계산 과정에서 계산량이 수식 계산에 비해 월등히 증가한다. 따라서 확률 분포 함수를 사용하여 일관적이고 효율적으로 결과를 얻기 위해서는 통계 정보와 상관관계를 가진 수식 계산 방법의 사용이 효과적인 것을 판단할 수 있다. Two-point correlation function과 달리, lineal-path function을 지수 함수 등을 사용하여 정확한 수식으로 표현하고 적용하는 것은 2차원 이상의 모델에서는 어렵다는 것이 Torquato (2002)와 Singh 등(2008)의 연구를 통해 나타나 있다.

본 연구에서는 수치 계산 방법을 통해 계산되는 lineal-path function의 수식으로서의 표현 가능성을 살펴보기 위해서 지수 함수 곡선 접합 방법(exponential curve fitting)을 사용하였다. 곡선 접합은 기존의 자료를 분석하여 자료 간의 상관관계를 나타낼 수 있는 이상적인 수식으로 표현하는 방법을 말한다. 본 연구에서는 식 (7)에 나타난 바와 같이 3개의 매개 변수(parameter) C_1, C_2, C_3 를 사용하여 지수 함수를 표현하였다. 기존의 수치 데이터와 지수 함수의 오차를 최소화하는 최소 제곱 회귀 분석(least squares regression) 방법을 사용하여 변수를 확정하고, 확률 분포 함수를 지수 함수로 표현하였다(Heath, 2002).

$$Y^{\text{analytical}} = C_1 \exp(-C_2 r) + C_3 \quad (7)$$

여기서 $Y^{\text{analytical}}$ 은 수식 방법으로 표현된 확률 분포 함수를 의미하며, r 은 두 점사이의 거리(two-point correlation function), 또는 선분의 길이(lineal-path function)를 의미한다.

3.2 곡선 접합을 이용한 확률 분포 함수의 표현

수치 계산 및 수식 계산을 통해서 계산된 확률 분포 함수를 곡선 접합을 이용하여 지수 함수로 표현함으로써, 곡선 접합 사용의 적합성 및 lineal-path function의 수식 표현 가능성에 대하여 살펴보았다. 3.1절에서 언급한 바와 같이, Chung 등(2010)의 미세구조 재구성 연구를 통하여 수치 계산을 사용하는 것보다 수식 계산을 사용함으로써 보다 효율적으로 확률 분포 함수를 계산할 수 있음이 확인되었다. 따라서 본 연구에서는 lineal-path function의 수식으로서의 표현 및 활용 가능성을 분석함으로써, 확률 분포 함수의 계산 과정의 효율성을 높이는 방안에 대하여 살펴보았다. 그림 3은 입자 모델에 곡선 접합을 적용하여 two-point correlation function과 lineal-path function의 결과를 나타낸 것이다. 그림 3(a)는 packing 알고리즘을 적용한 모래 지반 물질을 표현한 것으로, 밝은 색으로 표현된 부분이 모래 입자를 의미하며 어두운 부분은 공극을 나타낸다(Nasilio 등, 2010). 입자 모델의 경우, 구 형태로 표현되는 183개의 모래 입자를 보다 더 정확히 묘사하기 위해 단위 정육면체를 x, y, z 각 방향을 100개로 나누어 총 1,000,000개의 복셀(voxel)로 구성하여 표현하였다.

그림 3(b)와 (c)는 1번 상으로 표현된 공극 부분에 대한 $P_{11}(r)$ 과 $L_1(r)$ 의 결과를 나타낸다. 각각의 확률 분포 함수는

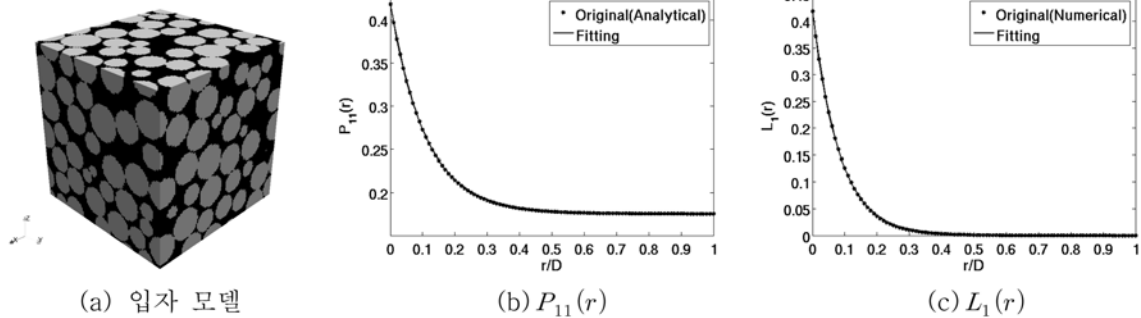


그림 3. 재료 모델과 곡선 접합을 포함한 확률 분포 함수

기존에 계산되는 방법에 추가적으로 각각 곡선 접합을 사용하여 표현한 결과도 함께 제시되어 있다. 그림 3의 (b)와 (c)를 살펴보면 직선으로 표현된 곡선 접합 결과와, 점으로 표현된 수식 계산 및 수치 계산 결과가 거의 동일한 것을 확인할 수 있다. 이를 통하여, 그림 3(a)의 입자 모델에 대한 확률 분포 함수는 곡선 접합을 이용하여 지수 함수로 표현될 수 있음을 알 수 있다. 본 연구에서는 그림 3의 입자 모델 이외에 다양한 재료 모델을 사용하여 확률 분포 함수의 적용 및 곡선 접합 결과를 살펴봄으로서, 재료 특성에 따른 확률 분포 함수의 적용 가능성을 확인하였다.

4. 결과 및 분석

4.1 다양한 재료 모델의 곡선 접합 적용 결과

다양한 재료의 상 분포 상태 및 특성을 살펴보기 위하여, 서로 다른 상 분포를 가진 2상 다결정 합금 미세구조 시편과 지반 모델 시편들이 사용되었다. 그림 4부터 7은 각각의 등방성 2상 다결정 합금 미세구조 시편(그림 (a))에 대한 $P_{11}(r)$ 과 $L_1(r)$ 의 결과이다. 2상 다결정 합금 미세구조 시편은 복셀로 구성된 단위 정육면체를 이용하여 표현하였다. 정

육면체의 각 변의 길이는 1이며, 단위길이를 x, y, z 각 방향으로 30개로 나눈 총 27,000개의 복셀로 구성되어 있다. 각 복셀은 하나의 결정을 의미하여 단위 정육면체는 총 27,000개의 결정으로 구성되어 있다. 그림에서 어두운 부분은 α 상, 밝은 부분은 β 상을 의미한다. α 와 β 상의 부피비는 모든 미세구조에서 동일($\alpha/\beta=50/50\%$)하다. 그림 4(a)부터 7(a)는 모두 임의(random)의 상 분포를 가진 불균질(heterogeneous) 등방성 재료이지만, 서로 다른 상 균집의 크기를 갖는다. 각 미세구조 시편 별로 상 균집은 단위 정육면체의 모서리 길이 1을 기준으로 최대 약 6%(미세구조 1), 15%(미세구조 2), 16%(미세구조 3), 23%(미세구조 4)의 지름을 가진 구(sphere)로 구성 되어 있다. 그림 4부터 7의 (b)와 (c)를 살펴보면, 그래프에서 점으로 표현된 기존의 수식 및 수치 계산 방법과 직선으로 표현된 곡선 맞춤을 한 결과가 거의 동일한 것을 확인할 수 있다. 즉, 2상 다결정 합금 모델에 대한 확률 분포 함수는 본 연구에서 목적으로 하는 3개의 매개 변수를 사용하는 지수 함수로의 표현이 가능한 것을 알 수 있다.

그림 8(a)는 그림 3의 입자 모델과 다른 부피비를 갖는 packing되어 있는 구로 구성된 입자 시편이다. 그림 3과 마

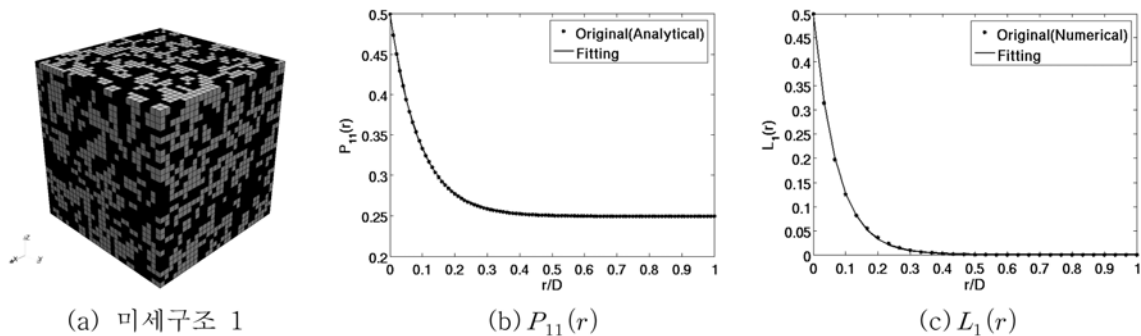


그림 4. 2상 다결정 합금 미세구조 1과 확률 분포 함수 (1번 상 : α 상(어두운 부분))

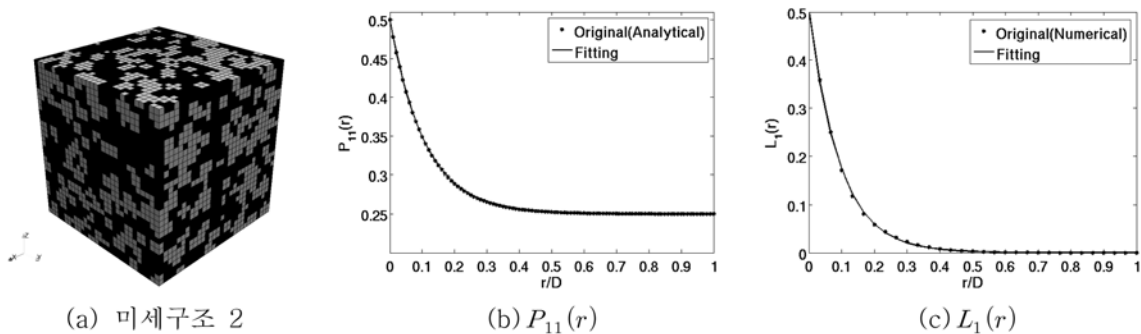
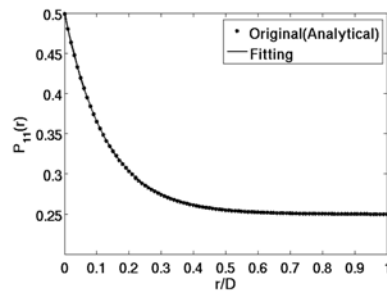


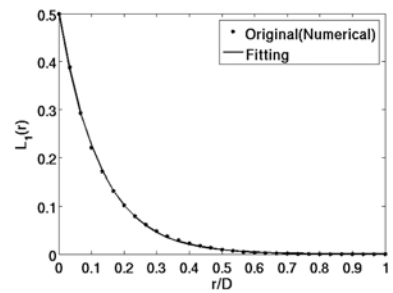
그림 5. 2상 다결정 합금 미세구조 2와 확률 분포 함수 ($\alpha/\beta=50/50\%$)



(a) 미세구조 3

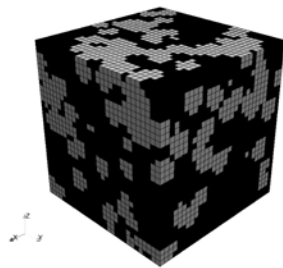


(b) $P_{11}(r)$

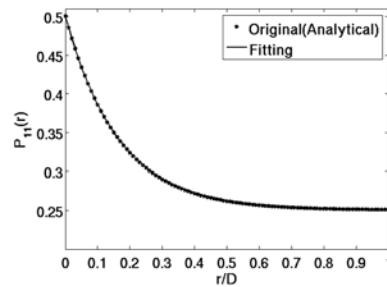


(c) $L_1(r)$

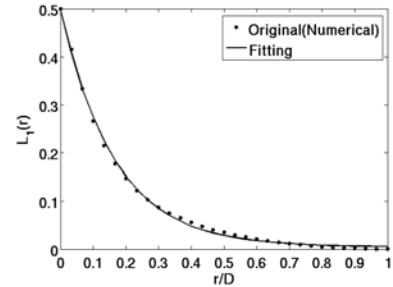
그림 6. 2상 다결정 합금 미세구조 3과 확률 분포 함수 ($\alpha/\beta=50/50\%$)



(a) 미세구조 4

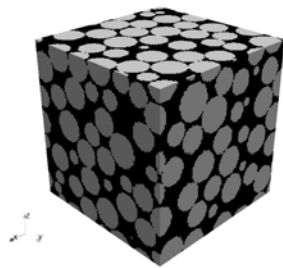


(b) $P_{11}(r)$

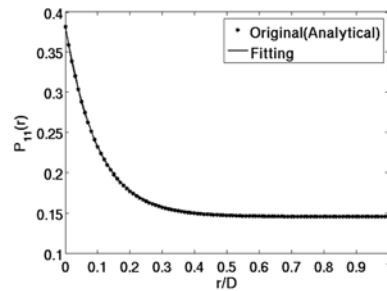


(c) $L_1(r)$

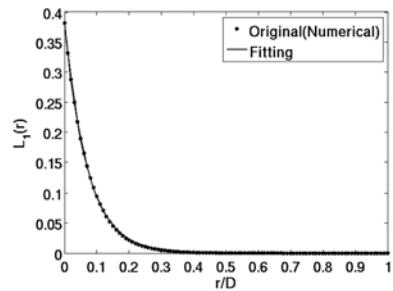
그림 7. 2상 다결정 합금 미세구조 4와 확률 분포 함수 ($\alpha/\beta=50/50\%$)



(a) 입자 시편

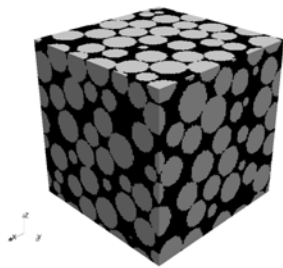


(b) $P_{11}(r)$

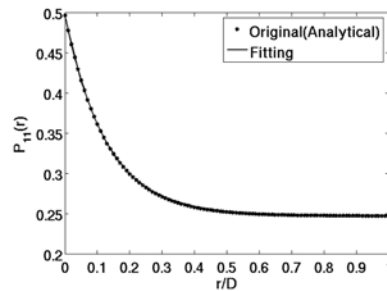


(c) $L_1(r)$

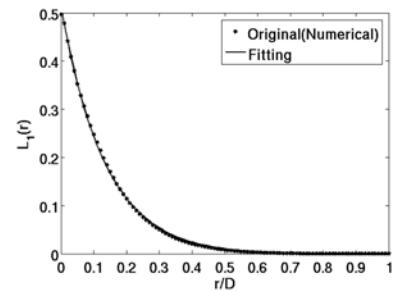
그림 8. 입자 모델 시편 (1번 상(어두운 부분)의 부피비: 35%)과 확률 분포 함수



(a) 개별 입자 제거 모델



(b) $P_{11}(r)$



(c) $L_1(r)$

그림 9. 임의의 구 입자가 제거된 시편 (1번 상의 부피비 : 50%)과 확률 분포 함수

찬가지로, 구 형태로 표현되는 입자를 보다 더 정확히 묘사하기 위해 단위 정육면체를 x , y , z 방향을 100개로 나누어 총 1,000,000개의 복셀로 구성하여 표현하였다. 그림 3(a)와 마찬가지로 어두운 부분은 공극을 나타내며, 밝은 부분은 모래 입자를 의미한다. 그림 7의 (b)와 (c)를 살펴보면 지반 시편의 경우도 2상 다결정 합금 미세구조와 마찬가지로 $P_{11}(r)$ 과 $L_1(r)$ 이 모두 기존의 계산 결과와 곡선 접합을 이용한 함수가 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다.

2상 다결정 합금 미세구조와 지반 시편의 확률 분포 함수

의 특성을 비교하기 위해서, 지반 시편의 부피비를 합금 미세구조의 부피비와 같은 50/50%로 조정하여 확률 분포 함수를 비교하였다. 부피비를 50/50%로 맞추기 위해서 공극/입자의 부피비가 35/65%인 그림 8(a)의 packing된 지반 시편으로부터 입자를 제거하여 공극의 부피비를 50%로 조정하였다. 그림 9(a)는 그림 8(a)로부터 임의로 개별 입자를 제거한 시편이고, 그림 10(a)는 그림 8(a)의 내부에 임의의 점들을 위치시켜서, 그 점이 위치한 주위의 입자 군집을 제거하여 공극의 부피비를 증가시킨 시편이다. 그림 9와 10의

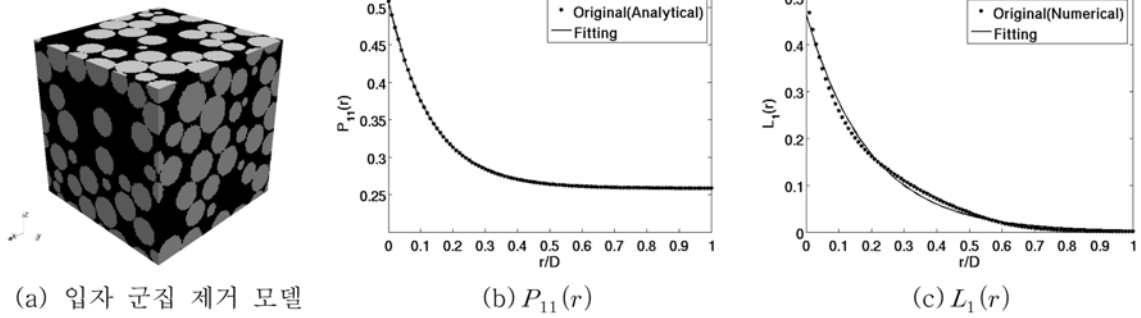


그림 10. 구 입자 군집이 제거된 시편 (1번 상의 부피비 : 50%)과 확률 분포 함수

(b)와 (c)를 살펴보면, 그림 9의 경우에는 확률 분포 함수들의 곡선 접합 결과가 기존의 계산된 함수와 거의 동일한 것을 확인할 수 있다. 반면에 그림 10의 경우는 lineal-path function의 수치 계산의 결과와 곡선 접합의 결과가 잘 일치하지 않는다. 이는, 그림 10(a)의 시편에 대해서 수치 계산으로 얻은 lineal-path function의 r 에 따른 결과 값들 사이에 지수 함수로 표현될 수 있는 상관관계가 적음을 의미한다. Lineal-path function의 경우는 재료 모델에 따라서 곡선 접합 결과가 기존의 결과와 잘 일치하지 않는 경우가 발생하지만, two-point correlation function의 경우는 모든 재료 모델에서 수식으로부터 얻은 결과와 곡선 접합을 이용한 결과가 거의 일치한다. 이러한 결과는, 자료 간에 지수 함수 형태의 상관관계를 갖는 확률 분포 함수를 3개의 매개 변수를 사용하는 곡선 접합 방법을 이용하여 효과적으로 표현할 수 있음을 의미한다.

4.2 확률 분포 함수의 특성 및 RVE의 활용성 분석

4.1절의 결과를 통해서 곡선 접합을 이용한 확률 분포 함수의 수식 표현 가능성에 대하여 살펴보았다. Two-point correlation function의 경우, 사용한 모델과 상관없이 곡선

접합을 통해 기존의 결과와 거의 동일한 결과를 얻을 수 있음을 확인하였다. 반면에 lineal-path function은 그림 10(a) 시편의 경우에 곡선 접합을 사용한 결과와 수치 계산 결과가 잘 일치하지 않았다. Lineal-path function의 곡선 접합에서 기존의 함수와 거의 동일한 결과를 보인 다른 재료 시편과 그림 10(a) 시편의 차이는 재료 내부에 존재하는 상 군집의 크기이다. 그림 10(a)는 완전하게 packing이 되어있던 지반 시편에서 군집화를 통해 입자를 제거하였기 때문에, 재료 내부에 큰 공극의 군집이 존재한다. 기존의 결과와 곡선 접합 결과가 잘 맞는 시편들은 모두 임의의 불균질성 (random heterogeneous)을 가진 확률론적 등방성 (statistically isotropic) 재료이지만, 그림 10(a)와 같이 내부에 상의 큰 군집 (large cluster)이 존재한다면 임의의 불균질성 재료로 고려될 수 없다.

곡선 접합의 적용성과 재료의 상 군집 크기와 분포에 따른 상관관계가 있음을 보이기 위하여, 내부에 큰 군집에 분포하는 임의의 시편을 모델링하여 확률 분포 함수를 살펴보았다. 그림 11(a)는 packing된 지반 시편으로부터, 임의로 제거하는 입자의 개수를 증가시켜서 공극의 부피비를 65%로 증가시킨 모델이다. 그림 12(a)는 그림 8(a)의 시편에서

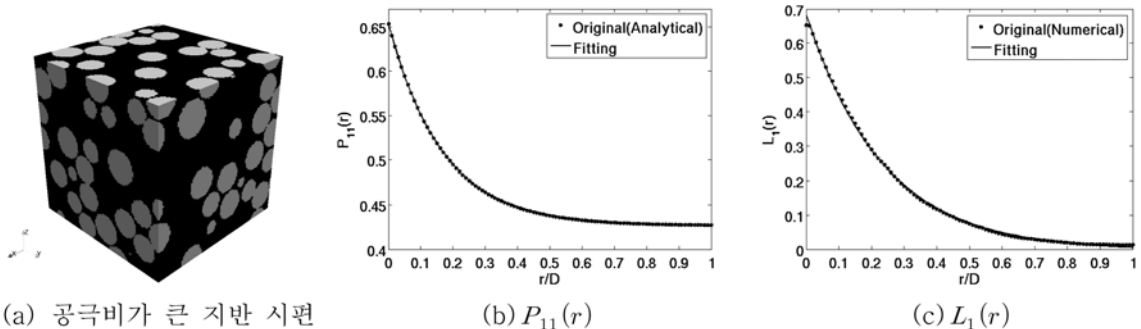


그림 11. 공극의 부피비가 증가한 지반 시편(공극의 부피비 65%)과 확률 분포 함수

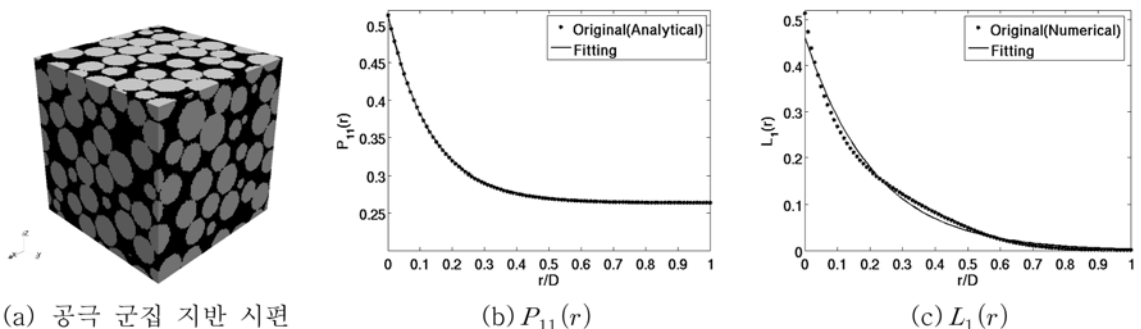


그림 12. 중앙부에 공극 군집이 존재하는 지반 시편(공극의 부피비 50%)과 확률 분포 함수

재료의 중앙부에 분포하는 입자 군집을 제거하여, 내부에 큰 공극의 군집이 존재하는 시편이다(부피비=50/50%). 그림 11의 경우 확률 분포 함수의 곡선 집합 결과가 기존의 결과와 거의 일치한다. 이는, 그림 11(a) 내부에 공극의 군집이 존재하긴 하지만, 공극의 군집이 시편 내부에 고르게 분포되어 있으므로 lineal-path function의 수치 계산 과정에서 재료 내부에 존재하는 최대 군집 크기 부근에서의 r 의 변화에 따른 $L_1(r)$ 의 급격한 변화가 발생하지 않기 때문이다. 반면에 그림 12(c)는 그림 10(c)와 유사하게 lineal-path function의 곡선 집합이 기존의 결과와 일치하지 않는다. 그림 4부터 7, 그리고 그림 10과 12의 확률 분포 함수를 살펴보면, Chung 등(2010)의 연구에서 밝혀진 바와 같이, 동일한 부피비에서 시편 내부에 큰 군집이 존재할수록, 군집이 시편 내부에 고르게 분포되어 있는 경우와 비교하여 그래프의 기울기 절대값은 감소한다. 큰 군집이 존재할수록 r 의 증가에 따른 $L_1(r)$ 의 감소하는 비율이 줄어들게 되고, 이 지수 함수의 형태를 따르지 않게 된다.

앞서 살펴보았던 입의 불균질성을 가진 재료 시편들은 확률 분포 함수가 모두 곡선 집합을 통하여 지수 함수로 표현 가능하므로 RVE로 고려될 수 있다. RVE란 재료가 가진 통계학적 의미를 표현할 수 있는 최소한의 부피를 가진 요소를 의미한다. 이러한 사실을 바탕으로 살펴보면, 그림 10(a)와 12(a) 같이 곡선 집합의 결과가 기존의 결과와 잘 맞지 않는 경우는 RVE로 고려되기에는 적합하지 않은 시편일 수 있음을 판단할 수 있다. 시편이 RVE로 고려되지 못하면 이를 이용하여 재료의 특성을 분석하는 것에 한계가 있다. 지반 재료를 예로 들면, 지반 내의 유체 흐름을 나타내는 수리전도도와 공극비의 비례 관계를 표현하는 Hazen과 Kozeny-Carman 경험식 등은 적용 대상이 RVE인 경우에만 유효하기 때문이다.

다양한 재료 모델을 통하여 확률 분포 함수와 곡선 집합의 결과를 살펴봄으로서 lineal-path function의 지수 함수로의 표현 가능성을 확인하였다. 결과를 바탕으로 정리하면, 재료가 내부에 특정 재료의 일정 크기 이상의 군집을 포함하지 않은, 입의 불균질성을 가진 재료인 경우에 한해서 lineal-path function도 two-point correlation function과 마찬가지로 지수 함수로 표현이 가능함을 확인하였다. 또한 곡선 집합의 결과와 기존 함수 결과의 일치/불일치 여부를 사용하여, 곡선 집합이 RVE를 결정하는데 있어서 판단 기준으로 사용될 수 있음을 확인하였다. 다만, 곡선 집합을 이용하여 확률 분포 함수가 지수 함수로의 표현을 통해 RVE 성립 여부에 대한 평가는 가능하지만, 재료 내의 상 분포가 물성치에 미치는 영향을 살펴보기 위해서는 추가적인 연구가 필요할 것으로 판단된다.

5. 결 론

본 연구에서는 확률 분포 함수와 곡선 집합을 사용하여 2상 재료의 특성을 파악하였다. 재료의 상 분포 특성을 파악하기 위한 방법으로서 확률 분포 함수 중 two-point correlation function과 lineal-path function을 사용하였다. Two-point correlation function과 lineal-path function을 통하여 재료 내부의 상 분포 상태를 확률적으로 묘사할 수 있음

을 확인하였다. 또한, 수치 계산 방법을 이용하여 표현되는 lineal-path function을 3개의 매개 변수를 사용한 곡선 집합을 사용하여 지수 함수 형태로 표현하고 활용성을 살펴보았다. 그 결과, 재료가 입의 불균질성인 경우에 수치 계산 결과와 곡선 집합을 한 lineal-path function의 결과가 거의 동일한 것을 확인하였다. Lineal-path function을 지수 함수로 표현하는 과정에서 재료 내부의 군집 크기와 곡선 집합의 적용성의 상관 관계를 살펴봄으로서, 재료 내부에 큰 군집이 존재할수록 해당 재료에 적용되는 lineal-path function은 지수 함수로 표현할 수 없음을 확인하였고, 곡선 집합을 사용하여 확률 분포 함수를 묘사할 수 없는 시편의 경우, RVE로 고려되기 부적합한 조건을 가지고 있음을 확인할 수 있었다.

참고문헌

- 이영일, 김영욱, 최현진, 이준근(1999) YAG상 첨가 탄화규소-질화규소 복합재료의 기계적특성, *한국세라믹학회지*, 한국세라믹학회, 제36권, 제8호, pp. 799-804.
- Chung, S.-Y. and Han, T.-S. (2010) Reconstruction of random two-phase polycrystalline solids using low-order probability functions and evaluation of mechanical behavior, *Comput. Mater. Sci., Elsevier*, Vol. 49, pp. 705-719.
- Coker, D.A. and Torquato, S. (1995) Extraction of morphological quantities from a digitized medium, *J. Appl. Phys., American Institute of Physics*, Vol. 77, pp. 6087-6099.
- Corson, P.B. (1974) Correlation functions for predicting properties of heterogeneous materials. I. experimental measurement of spatial correlation functions in multiphase solids, *J. Appl. Phys., American Institute of Physics*, Vol. 45, pp. 3159-3164.
- Gokhale, A.M., Tewari, A., and Garmestani, H. (2005) Constraint on microstructural two-point correlation functions, *Scr. Mater., Elsevier*, Vol. 53, pp. 989-993.
- Han, T.-S. and Dawson, P.R. (2005) Representation of anisotropic phase morphology, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., IOP Publishing*, Vol. 13, pp. 203-223.
- Heath, M.T. (2002) *Scientific computing*, McGraw-Hill, New York.
- Kelly, A., Groves, G., and Kidd, P. (2000) *Crystallography and crystal defects*, Wiley, Chichester.
- Lin, S., Garmestani, H., and Adams, B. (2000) The evolution of probability functions in an elastically deforming two-phase medium, *Int. J. Solids Struct., Elsevier*, Vol. 37, pp. 423-434.
- Lu, B. and Torquato, S. (1992) Lineal-path function for random heterogeneous materials, *Phys. Rev. A, American Physical Society*, Vol. 45, pp. 922-929.
- Nasilio, G.A., Kress, J., and Yun, T.S. (2010) Characterisation of conduction phenomena in soils at the particle-scale: Finite element analyses in conjunction with synthetic 3D imaging, *Comput. Geotech., Elsevier*, accepted.
- Singh, H., Gokhale, A.M., Lieberman, S.I., and Tamirisakandala, S. (2008) Image based computations of lineal path probability distributions for microstructure representation, *Mater. Sci. Eng., A Elsevier*, Vol. 474, pp. 104-111.
- Tewari, A., Gokhale, A.M., Spowart, J.E., and Miracle, D.B. (2004) Quantitative characterization of spatial clustering in three-dimensional microstructures using two-point correlation functions, *Acta Mater., Elsevier*, Vol. 52, pp. 307-319.
- Torquato, S. (2002) *Random heterogeneous materials*, Springer, New York.
- Underwood, E. (1970) *Quantitative stereology*, Addison-Wesley, Massachusetts.

(접수일: 2010.8.4/심사일: 2010.8.24/심사완료일: 2010.8.24)