

# 합성재료 물성치의 수치적 예측

## Numerical Prediction of Mechanical Properties of Composites

신 수봉<sup>1)</sup>      고 현무<sup>2)</sup>

Shin, Soobong      Koh, Hyun Moo

### Abstract

Mechanical properties of a composite mixed by components with known material properties are numerically predicted at various volume fractions rather than investigated through experiments. The properties, elastic modulus and Poisson's ratio, are estimated by minimizing the error between the static displacements computed from a model for the composite and those computed from a model of homogeneous and isotropic material. A finite element model for a composite is proposed to distribute different types of material components easily into the model depending on the volume fraction. Mechanical properties of a composite filled with solid mircospheres are predicted numerically through a sample study and the estimated results are compared with experimental results and some theories.

### 1. 서론

합성재료의 물성치는 일반적으로 실험으로 규명하고 있다. 국부적으로 심한 비선형 현상을 보이는 합성재료이지만, 거시적인 물성치를 평균응력과 평균변형도 개념을 이용하여 실험으로 구하고 제품 혹은 구조물의 설계 및 선형해석에 사용하고 있다.

본 논문에서는 고체입자를 기본재료에 혼합하여 만든 합성재료의 거시적인 물성치를 실험을 통하지 않고 유한요소 모델을 이용하여 수치적으로 예측하였다. 유한요소 모델 설정에서는 기본적으로 합성재료가 선형탄성의 영역에서 균질하고 등방성이라고 가정하였다. 제안된 방법을 이용하면 고체입자가 혼합된 합성재료의 물성치를 재료실험을 통하지 않고 예측할 수 있으며, 예측된 물성치는 제품 및 구조물의 기본설계에 용이하게 사용할 수 있을 것이다.

합성재료 물성치는 구속적 비선형 최적화기법을 적용하여 수치적으로 예측하였다. 즉, 혼합되는 물질들을 평면응력 요소를 사용하는 유한요소 모델에 체적비에 따라 분배한 후 계산한 정적변위와 균질한 물성치로 이루어진 유한요소 모델을 사용하여 구한 정적변위와의 차이를 최소화하여

1) 정회원, 서울대학교 토목공학과 연수연구원

2) 서울대학교 토목공학과 교수

최적의 물성치를 예측하였다. 변위는 일축인장의 상태를 나타낼 수 있도록 설정한 모델의 구속조건과 하중상태에서 구한 값을 사용하였으며, 유한요소 모델의 외부 자유단에서의 특정방향으로의 값들만 사용하였다. 따라서, 모든 자유도에서의 변위가 측정되지 않는 경우를 고려하도록 응답오차를 정의하였고, 그에 대한 비선형 최적화 공식들을 유도하였다. 균질·동방성으로 가정한 평면응력 요소를 사용한 유한요소 모델은 요소 수에 상관없이 동일한 물성치인 탄성계수와 포화송비를 갖게되므로 구하고자 하는 전체 모델의 미지변수의 개수는 두개로 제한하였다.

유리입자를 혼합하여 만든 합성재료에 대한 예제를 통하여 제안된 수치적 방법에 의하여 예측되는 결과를 실험결과, 이론식들, 및 Kalman 이론에 의한 결과들과 비교·검토하였다.

## 2. 합성재료 물성치의 비선형 최적화

본 논문에서는 유리입자를 혼합하여 만든 합성재료의 물성치를 예측하기 위하여 비선형 최적화기법을 적용하였다. 합성재료에 사용한 재료를 체적비에 따라 평면응력 요소에 분배한 유한요소 모델로 계산한 정적변위와 재료 특성을 균질·동방성으로 가정한 유한요소 모델로부터 계산한 변위와의 차이를 최소화하는 물성치를 예측하였다. 그러므로, 미지변수는 전체 모델에 균일한 탄성계수와 포화송비가 되며, 강성도행렬에서 이들 미지의 물성치들을 분리시켜 그 최적치를 구하였다.

하중조건은 일축인장의 경우만을 고려하고 변위는 유한요소 모델의 외부 자유단에서의 값만을 사용하였다. 따라서, 정적 응답오차  $e(\mathbf{x})(N_d \times 1)$ 은 계산된 변위 중 선택한 자유도에서의 변위에 대한 차이만을 이용하여 다음과 같이 정적평형방정식을 수정하여 정의한다<sup>7)</sup>.

$$e(\mathbf{x}) = \mathbf{QK}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{f} - \hat{\mathbf{u}} \quad (1)$$

여기서  $\mathbf{Q}(N_d \times N)$ =전체 변위벡터  $\mathbf{u}(N \times 1)$ 에서 사용하는 변위벡터  $\hat{\mathbf{u}}(N_d \times 1)$ 를  $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{Qu}$ 로 추출하는 Boolean행렬,  $\mathbf{K}(\mathbf{x})^{-1}(N \times N)$ =역강성도행렬,  $\mathbf{f}(N \times 1)$ =하중벡터이며,  $\mathbf{x}(N_p \times 1)$ =변수벡터로 본 문제에서는  $\mathbf{x} = \{E, \nu\}^T, N_p = 2$ 이다.

강성도행렬은 각 평면응력 요소에서 다음과 같이 분리시킬 수 있다.

$$\mathbf{K}_e(E, \nu) = \frac{E}{1 - \nu^2} \mathbf{G}_{e1} + \frac{E\nu}{1 - \nu^2} \mathbf{G}_{e2} \quad (2)$$

여기서  $\mathbf{K}_e$ =요소 (e)의 강성도행렬이고,  $\mathbf{G}_{ej}$ =j번째 핵심행렬로 다음과 같이 정의된다.

$$\mathbf{G}_{ej} = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{B}_e^T \mathbf{D}_j \mathbf{B}_e |J_e| t_e d\xi d\eta \quad (3)$$

여기서  $\mathbf{B}_e$ =변형도-변위 관계행렬,  $|J_e|$ =Jacobian행렬의 행렬값,  $t_e$ =요소의 두께이며, 요소 핵심행렬인  $D_1, D_2$ 는 다음과 같은 상수행렬로 각각 정의된다.

$$D_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad D_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (4)$$

이와 같이 각 요소에서 변수 분리된 요소 강성도행렬로 이루어지는 전체 구조물의 강성도행렬은 다음과 같이 비선형 변수함수와 핵심행렬로 표현될 수 있다.

$$K(E, \nu) = \sum_{p=1}^2 \sum_{e=1}^N z_p(E, \nu) G_{ep} \quad (5)$$

여기서,  $G_{ep}$  ( $N \times N$ ) = 요소 (e)의 p번째 변수에 대한 핵심행렬이며, 각 변수함수의 정의는 다음과 같다.

$$z_1(E, \nu) = \frac{E}{1 - \nu^2}, \quad z_2(E, \nu) = \frac{E\nu}{1 - \nu^2} \quad (6)$$

식 (1)로 정의되는 응답오차를 최소화하는 최적화공식은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned} \text{Minimize} \quad J(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} \| \mathbf{e}(\mathbf{x}) \|^2 \\ \text{subject to} \quad \underline{\mathbf{x}} \leq \mathbf{x} \leq \bar{\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (7)$$

여기서  $\underline{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{x}}$ 는 탄성계수와 포화송비의 하한값과 상한값들로 추정되는 물성치의 가능한 영역을 설정하는 역할을 하는 것이다. 구속적 비선형 최적화의 문제는 RQP기법<sup>1)</sup>을 적용하여 풀었다.

정의된 목적함수로부터 gradient vector  $\nabla J(\mathbf{x})$  ( $2 \times 1$ )와 Hessian matrix  $H^{GN}(\mathbf{x})$  ( $2 \times 2$ )를 구하면 다음과 같이 표현할 수 있다. 여기서 Hessian matrix는 전체행렬에서 2차 미분 부분을 제외한 Gauss-Hessian matrix부분만을 사용하여 정의하였다.

$$\begin{aligned} \nabla J(\mathbf{x}) &= \nabla \mathbf{e}(\mathbf{x})^T \mathbf{e}(\mathbf{x}) \\ H^{GN}(\mathbf{x}) &= \nabla \mathbf{e}(\mathbf{x})^T \nabla \mathbf{e}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (8)$$

여기서  $\nabla \mathbf{e}(\mathbf{x})$  ( $N_d \times 2$ )는 오차벡터의 미지변수에 대한 민감도행렬로 식 (1)로부터 다음과 같이 유도된다.

$$\nabla \mathbf{e}(\mathbf{x}) = Q K(\mathbf{x})^{-1} \frac{\partial K(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} K(\mathbf{x})^{-1} f \quad (9)$$

식 (9)에서 강성도행렬의 미지변수인 탄성계수와 포화송비에 대한 민감도행렬을 식 (5)와 식 (6)을 사용하여 표현하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial K}{\partial E} &= \frac{1}{1 - \nu^2} \sum_{e=1}^N (G_{e1} + \nu G_{e2}) \\ \frac{\partial K}{\partial \nu} &= \frac{E}{1 - \nu^2} \sum_{e=1}^N (2\nu G_{e1} + (1 + \nu^2) G_{e2}) \end{aligned} \quad (10)$$

미지변수벡터는  $k$ 번째 반복수행에서 다음 식 (11)과 같은 Least squares 문제를 풀어 방향벡터  $\mathbf{d}_k(2 \times 1)$ 를 구하고 변수를 새로운 값으로 계속 수정한다.

$$\begin{aligned} H^{GN}(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k &= \nabla J(\mathbf{x}_k) \\ \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \beta_k \mathbf{d}_k \end{aligned} \quad (11)$$

여기서 새롭게 설정된 방향으로 수정되는 크기를 정해주는 단위증분량  $\beta_k$ 는 다음의 일차원 최소화문제를 추가로 풀어서 구한다.

$$\underset{\beta_k}{\text{Minimize}} \quad J(\mathbf{x}_k + \beta_k \mathbf{d}_k) \quad (12)$$

식 (12)을 풀기 위하여 본 논문에서는 Golden-Section line search기법<sup>5)</sup>을 적용하였다.

식 (11)에서의 Least squares문제가 해를 갖기 위해서는 다음의 조건식이 만족되어야 한다.

$$N_d \geq 2 \quad (13)$$

즉 수치예측에 사용되는 측정변위의 수가 두개 이상 되어야 적절한 물성치를 추정할 수 있는 것으로 일반적으로 식 (13)은 쉽게 만족될 수 있는 조건식이다.

두 미지변수인 탄성계수와 포화송비는 그 값의 차수의 차이가 크기 때문에 최적화과정을 수행하기 전에 두 변수를 수치적으로 같은 차수가 되도록 조정을 하고 최적화과정을 마친 후 원래 차수로 환원을 하는 것이 바람직하다. 차수의 조정을 하지 않을 경우 Hessian matrix의 condition number가 커져 올바른 최적화과정의 수행이 어려워질 것이다.

### 3. 예제

제안된 방법의 효율성을 확인하기 위하여 Richard<sup>6)</sup>의 실험결과를 이용하였다. 실험은  $5.3 \sim 7.5 \times 10^{-6}$  cm 크기의 soda lime 고체입자를 Paraplex P-47이라는 polyester 기본재료에 분산시켜 만든 합성재료를 사용하였다. 인장실험 시편은  $0.635 \times 1.270$  cm 직각사각형 단면에 5 cm의 변형도 계이지를 부착시킬 수 있을 정도의 길이로 제작하였으며, 유리입자의 체적비가 전체 체적의 0%~46%사이에 있는 몇 가지 경우의 합성재료를 제작하여 실험을 하였다. 기본재료의 물성치는  $E_m = 1,724 \text{ MPa}$ ,  $\nu_m = 0.45$ 이고, 유리입자의 물성치는  $E_g = 70,330 \text{ MPa}$ ,  $\nu_g = 0.21$ 이다. 체적비에 따른 실험결과의 평균치는 그림 3에 표시하였다.

합성재료의 물성치를 예측하기 위한 유한요소 모델은 그림 1과 같이 제안하였으며, 유리입자의 체적비에 따라 안쪽 정사각형 변의 길이  $a$ 를 변화시켰다. 각 평면응력 요소의 변비(aspect ratio)가 1:1로 고정되도록 유한요소 모델을 설정하기 위하여 총  $25 \times 25 = 625$ 개의 요소와 676개의 절점을 사용한 모델을 사용하였다. 일축인장으로 인한 시편 길이의 변화와 포화송 현상을 보다 쉽게 보기 위하여 구속조건을 그림 1과 같이 설정하고 인장하중을 그림 1과 같이 작용하였다. 인장하중에 의한 신축현상을 대표적으로 나타내는 자유단에서 변에 수직한 방향으로 계산된 변위값들을 사용하여 식 (1)의 측정오차를 정의하였다.

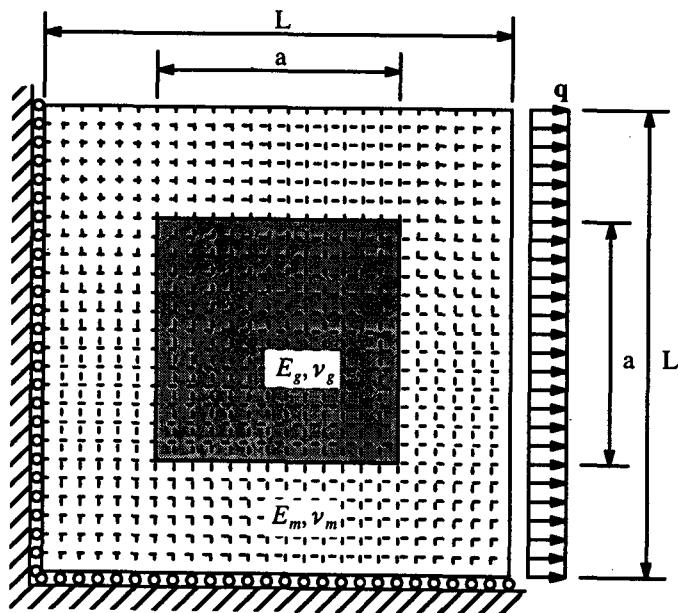


그림 1. 체적비에 따라 분배된 유리입자로 이루어진 합성재료의 물성치 예측을 위해 설정된 유한요소 모델

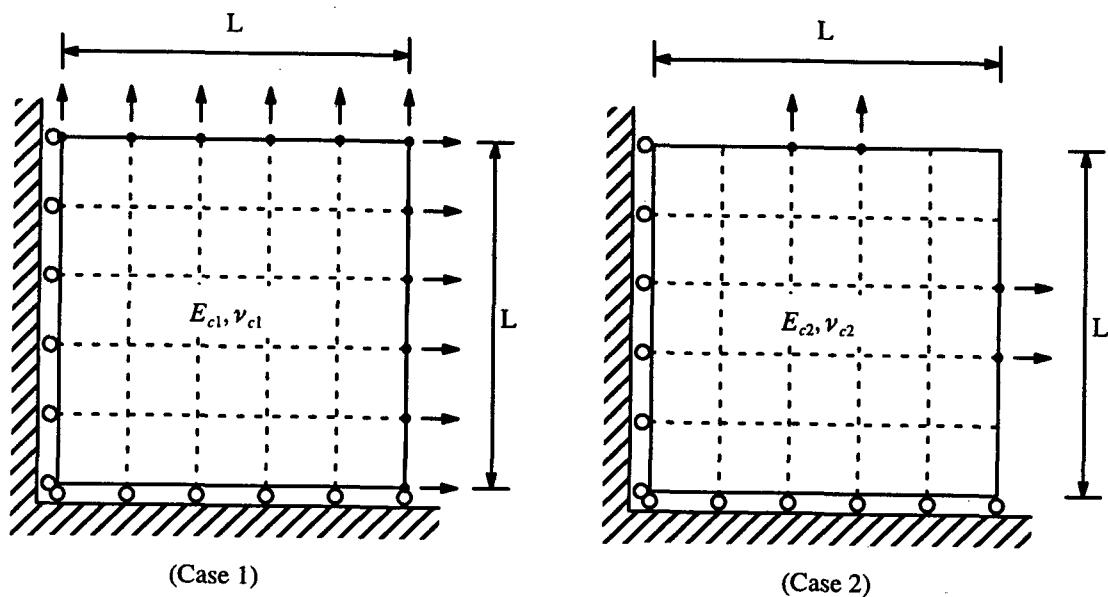


그림 2. 탄성물성치 예측에 사용한 두가지 경우의 평균변위 적용

고체입자의 체적비가 다양하게 변하는 합성재료에서의 정적변위를 구하기 위하여 그림 1과 같이 많은 개수의 평면응력 요소를 필요로 하는 모델을 설정하였으나, 거시적인 물성치의 예측에 사용될 균질·등방성의 모델에는 그림 1 보다 단순한 그림 2와 같은  $5 \times 5$  유한요소 모델을 사용하였으며 동일한 결과를 얻음을 수치실험으로 확인하였다. 즉, 정해석에서 사용한 그림 1의 모델을 그대로 사용하여 물성치를 예측할 경우에는 해석된 두 자유단의 모든 절점에서 변에 수직한 방향으로의 정적변위를 그대로 적용하였으며, 보다 단순한 모델을 사용할 경우에는 그 변위들의 평균치를 사용하였고, 각각의 모델에서 예측되는 물성치의 결과가 동일하였다. 이는 모든 요소가 동일한 물성치를 갖고 있다는 가정에서 예측될 수 있는 결과로 모델에 사용한 유한요소 수에 따른 민감도를 고려할 필요가 없음을 보여준다.

본 논문에서는 정해석 모델에서 계산된 변위로부터 두가지의 변위평균치를 사용하여 물성치를 예측하였다. 첫 번째 평균변위는 자유단의 모든 절점에서 변에 수직한 방향으로의 변위를 평균한 값이고, 두 번째 평균변위는 자유단 중앙의 1/5 영역에 있는 절점들의 일정한 변위만을 평균한 값을 사용하여  $5 \times 5$  모델의 해당 절점의 변위로 적용한 것이다. 즉 첫 번째 경우는 인장하중에 의한 평균적인 포화송 효과를 보기 위한 것이고, 두 번째 경우는 고체입자의 체적비 증가에 의한 구조체의 강성의 증가 효과를 관찰하기 위한 것이다. 각 경우에서 예측된 탄성계수와 포화송비를 실험 결과, Kalman 이론으로 구한 값<sup>2)</sup>, 이론식들과 더불어 그림 3에서 비교하였다.

그림들에서 보듯이 제안된 방법으로 구한 탄성계수와 포화송비는 모든 체적비에서 실험치보다 다소 작은 값이지만 근사하게 예측되고 있음을 관찰할 수 있다. 다만 체적비가 아주 큰 경우의 탄성계수는 제안된 방법이나 Kalman 이론에 의한 방법 모두에서 상대적으로 더욱 작은 값으로

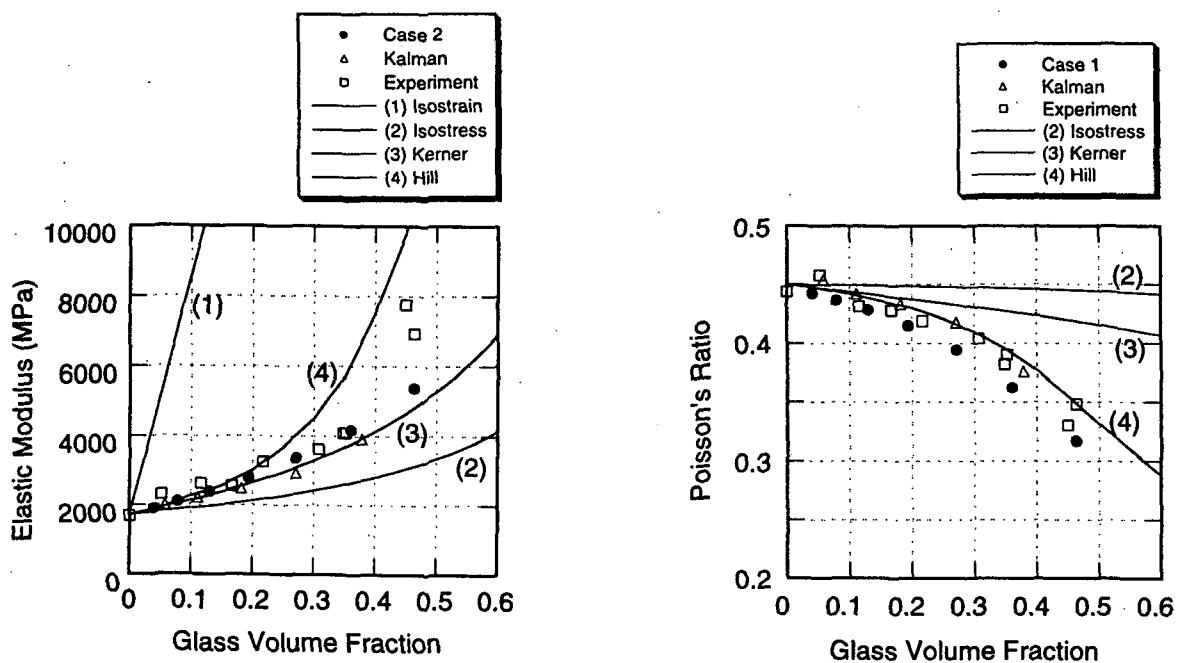


그림 3. 예측된 탄성계수 및 포화송비의 비교

예측되고 있다. 이론식들과 비교하여 보면, 실험 및 예측에 의한 탄성계수는 Kerner<sup>4)</sup>의 이론식에 보다 접근하고 있으며 포와송비는 Hill<sup>3)</sup>의 이론식에 보다 접근하고 있음을 또한 관찰할 수 있다.

Courage *et al.*<sup>2)</sup>의 Kalman 이론을 사용한 결과는 포와송비에서 실험치에 보다 근접하지만, 이 방법은 근본적으로 유한요소 모델의 설정에 문제점을 안고 있는 것으로 판단된다. 유리입자를 규칙적으로 유한요소 모델에 분포시켜 보다 정확한 합성재료의 거동을 표현하려고 시도였으나, 유리입자의 체적증가에 따라 비정상적으로 변비가 큰 평면응력 요소를 사용하게 될 수밖에 없는 문제점을 갖고 있다. 이러한 불합리한 유한요소의 사용을 배제하기 위하여는 증가된 요소 수를 사용하는 유한요소 모델을 새로이 설정해야 하지만 그것은 용이한 일이 아니며, 모델 차이에 의한 수치적인 오차 발생의 문제점도 내재하게 된다. 이러한 어려움으로 인하여 그림 3에서 보듯이 체적비가 40%보다 작은 경우까지만 예측치를 유도할 수 있었다고 사료된다.

본 연구에서 예측되는 탄성계수 및 포와송비는 모든 체적비의 경우에서 초기치에 상관없이 일정한 값들로 귀속하였으며, 그 반복수행의 횟수는 2~3회로 상당히 접근속도가 빨랐다. 탄성계수 및 포와송비의 상한 및 하한값은 물리적인 의미를 갖는 범위 내에서 유리입자의 체적비에 상관없이 고정된 값을 사용하였으며, 본 연구에서는 예측되는 물성치의 값에 영향을 미치지는 않았다.

#### 4. 결론

유리입자를 혼합하여 만든 합성재료의 물성치인 탄성계수와 포와송비를 구속적 비선형 최적화 기법을 사용하여 수치적으로 예측하는 연구를 수행하였다. 최적화기법으로 최소화시키는 목적함수는 합성재료에 대한 유한요소 모델로부터 계산한 정적변위와 균질·등방성의 모델에서 계산한 변위의 오차를 사용하여 정의하였다. 물성치의 예측에는 합성재료에 대한 모델에서 계산한 변위의 평균값을 사용하였고 보다 단순한 유한요소 모델을 사용하여서도 동일한 결과를 얻을 수 있었다.

유리입자를 혼합한 합성재료에 대한 예제에서 제안된 방법에 의한 탄성계수와 포와송비는 실험결과들보다 조금 작은 값이긴 하나 체적비에 상관없이 근사하게 예측되었다. 탄성계수는 자유단 중앙부의 일정한 변위만을 사용하였을 때 보다 실험치에 접근한 결과를 나타내었으며, 포와송비는 자유단 전면의 평균변위를 사용하여 전체적인 포와송 현상을 이용하였을 때 실험치에 근접한 결과를 보였다. 예측된 탄성계수는 Kerner<sup>4)</sup>의 이론식에 보다 접근하고 있으며, 포와송비는 Hill<sup>3)</sup>의 이론식에 접근하고 있음을 관찰할 수 있었다.

물성치를 예측하기 위하여 제안한 일축인장에 대한 유한요소 모델의 사용은 고체입자를 체적비로 혼합하여 만든 합성재료에 대하여 용이하게 적용할 수 있다. 제안된 모델은 합성재료의 국부적인 거동에 대한 해석에는 그 사용이 제한되지만, 유한요소 모델을 체적비의 변화에 따라 다시 설정할 필요가 없고 쉽게 입자를 분배할 수 있는 장점이 있다.

#### 감사의 글

본 연구는 한국과학재단의 국내 Post. Doc. 연수지원에 의해 수행되었기에 이에 감사드립니다.

### 참고문헌

1. Banan, M.-R. and K.D. Hjelmstad (1993), "Identification of structural systems from measured response," *SRS No. 579, Dept. of Civil Eng., University of Illinois at Urbana-Champaign*, May.
2. Courage, W.M.G., P.J.G. Schreurs, and J.D. Janssen (1990), "Estimation of mechanical parameter values of composites with the use of finite element and system identification techniques," *Computers & Structures*, 34(2), 231-237.
3. Hill, R. (1963), "Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles," *J. of Mech. Phys. Solids*, 11, 357-372.
4. Kerner, E.H. (1956), "The elastic and thermo-elastic properties of composite media," *Proc. Royal Society-London*, 69B, 807-813.
5. Press, W.H., B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T. Vetterling (1990), 'Numerical Recipies - The Art of Scientific Computing,' Cambridge Univ. Press.
6. Richard T.G. (1975), "The mechanical behavior of a solid microsphere filled composite," *J. Composite Materials*, 9, April, 108-113.
7. 신수봉, 고현무 (1995), "구성변수의 비선형 최적화를 통한 평면응력체의 결합 예측," *대한토목학회논문집*, 제16권 제I-4호, 7월, 473-482.