

# 시멘트 研究를 위한 컴퓨터 應用

G. Frohnsdorff and L. Struble  
National Bureau of Standards  
Gaithersburg, MD, USA

◇…… 編輯者註: 이 글은 韓·美窯業學會 學術交流의 일환으로 來韓한 美國窯業學會側이 1987년 10……◇  
◇……월 19일 雙龍洋灰(株) 東海工場에서 講演한 內容으로, 漢陽大學校 시멘트研究室에서 要約·整理……◇  
◇……한 것이다(原題: Implication of Computer-Based Simulation Models, Expert Systems, Databases,……◇  
◇……and Networks for Advancing Cement Research). ……◇

## Introduction

이 글은 시멘트 연구에 이용되는 다양한 Computer-based-system의 최근의 발전 즉, Computer models, expert systems, databases, networks에 대한 발전과 응용에 대하여 기술하였다. 이 글은 G.Frohnsdorff, J.Clifton, H.Jennings, P.Brown, L.Struble 과 J.Pommersheim이 1986년 제 8회 국제 시멘트 화학회의(NBS)에서 발표한 동일한 주제의 논문을 근거로 하고 있다.

## Back Ground

새로운 재료의 이용과 설계는 콘크리트 기술에 대한 고전적인 접근방식의 재검토를 촉구하고 있다. 더구나 콘크리트 구조물들은 종종 예상된 수명보다 더 사용되거나 본래 의도하지 않던 기능으로 사용되거나 예상한 것보다는 더 가혹한 조건에서 사용되는 경우가 있다. 그러므로 시멘트 콘크리트의 성능을 예견하는데 필요한 방법과 절차의 발전이 필요하다. 동시에 컴퓨

터의 용량과 유용성면에서의 급속한 성장은 더욱 정확하고 더욱 좋은 성능의 콘크리트를 어떻게 컴퓨터가 만들어 낼 수 있을까 하는 의문점을 야기시킨다. 이러한 의문에 대한 해답은 시멘트 연구를 계획하고 조직화 하는 여러가지 방법을 제시해 줄 수 있다.

시멘트 연구의 중요성은 다른 재료와 마찬가지로 의문점에 좌우되며 그 의문과 해답은 컴퓨터로 인해서 변화하고 있는 중이다. 역설적으로 시멘트 연구에서의 문제점은 더욱 더 콘크리트에서 시멘트 사용의 종식으로의 방향으로 나아가고 있으며 보다 근본적으로 되어가고 있다. 이것은 컴퓨터가 과학과 기술 사이를 연계시키는 것으로 사용될 수 있기 때문이다. 그러므로 과학자가 그러한 복잡한 기술적인 문제점 즉, 어떻게 콘크리트의 수명을 예상할 수 있을까 라는 문제점을 해결하려는 노력은 더 이상 비현실적인 생각이 아니다. 그런데 이러한 생각은 10년 전만 하더라도 그들의 관심과 경험에서 거리가 먼 것들이었다.

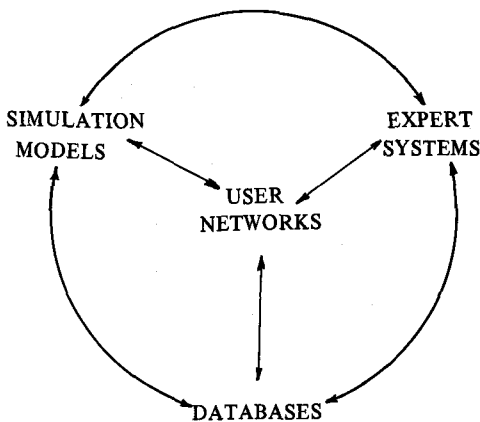
이 글의 목적은 연구의 문제점을 어떻게 하면 컴퓨터 특히 1) 물과 화학적 관계를 simulate 하는 모델 2) knowledge-based expert system

3) databases로 구성되는 computer-based knowledge system을 이용하여 해결할 수 있거나 하는 점을 제시해 준다. <그림-1>에서 knowledge system은 공동연구자와 연계되어 있는 컴퓨터 회로망을 통해 서로 보완될 수 있다. 설사 다른 지역에서 다른 연구가 행해진다 하더라도 그 연구의 일반적 접근 가능성을 부여해 줄 수 있는 NBS의 최신 조사자료를 이용할 수 있다.

## Simulation Models

초기조건이 명확히 정의되지 않고 많은 변수들로 인해 결과가 변하는 complex system의 연구에는 큰 어려움이 따른다. 그러한 시스템은 시스템과 그 내부에서 일어나는 현상을 설명해주는 computer simulation을 해봄으로써 이해할 수 있다. 그러한 모델은 수개의 직관적 가설로 보완된 과학적 원리를 기반으로 해야한다. 그런 연후에 나타나는 판제 사항을 설명할 수 있는가를 검토해야 한다. 시멘트와 콘크리트의 연구에 있어서 이러한 시도가 점점 늘고 있다.<sup>11</sup>

시멘트와 콘크리트 기술을 보다 깊이 이해하려면 시멘트 입자와 물과의 반응을 개별적으로, 총체적으로 이해할 필요가 있고 시멘트 경화체의 미세구조 연구가 병행되어야 한다. 최근 이러한 방향으로 많은 연구가 진행되어 왔지만<sup>22</sup>,



<그림-1> Schematic of a computer-based knowledge system.

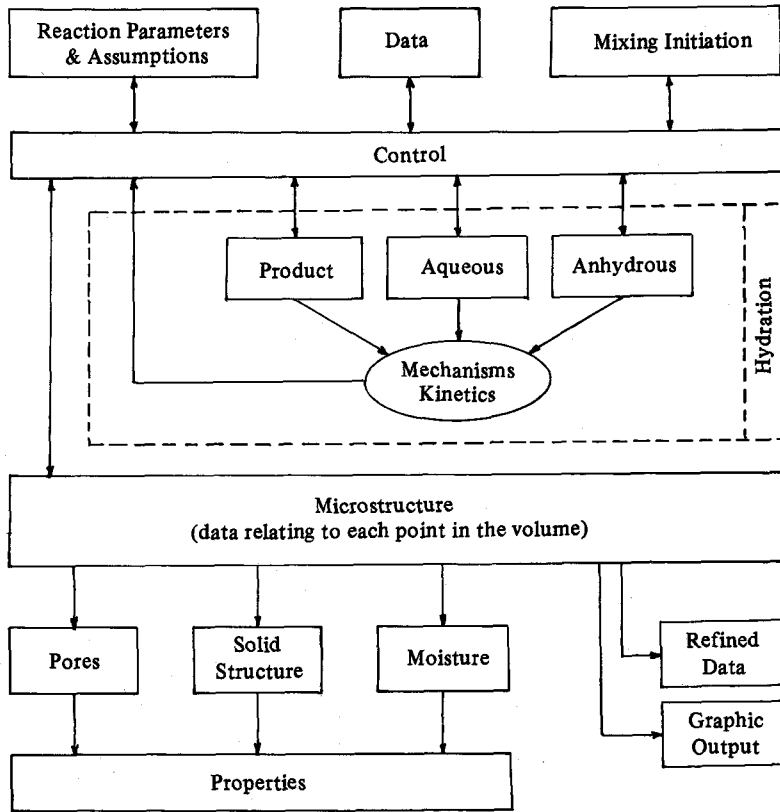
시멘트 수화의 simulation model에 대한 연구는 거의 없었다. 필자의 연구실에서는 tricalcium silicate ( $C_3S$ )입자의 수화와 <sup>34</sup> $C_3S$  페이스트<sup>35</sup>의 미세구조 형성에 대한 모델을 개발하고 있다. 이것은 다상의 시멘트가 반응하여 콘크리트 경화체 내에서 matrix를 형성할 때 일어나는 변화와 그것의 long term performance에 영향을 미치는 부차적인 반응을 설명하기 위한 macromodel<sup>11</sup>의 개발을 위한 발전적인 단계이다.

미세구조 모델<sup>35</sup>은 <그림-2>의 흐름도에 나타난  $C_3S$ 의 수화에 대한 미세구조 형성 모델을 제시해 준다. 모델은 일정부피내에서 입자들의 공간분포를 계산하는데서부터 시작된다. 자유공간은 물로 채워져 있고 예의 규칙에 따라 반응으로부터 생긴 수화물이 점진적으로 채워진다. 계산은 반응정도에 따라 시스템 내의 모든 물질을 설명해 준다. 즉 결과는 다양한 출력을 얻을 수 있는 수치 data file에 저장된다. 전형적인 출력은 단면적에서의 물질의 분포가 그래픽으로 나타나는 것이다(<그림-3>). 그러한 출력은 경화체의 단면에 대한 주사 전자 현미경 사진과 비교해 볼 수 있다. data file은 기공률, 탄성계수, 파괴성질이나 현상을 좌우하는 미세구조에 대한 정보를 담고 있다. 모델은 많은 subroutine으로 구성되어 있어서 필요하다면 쉽게 수정할 수 있다. 위와 같은 편리함과 상황에 대한 유연함이 공동연구를 가능하게 하는 것이다.

이러한 모델들은 연구자들이 모델 개발에 직접 참여하거나 시멘트 수화의 수학적 modeling에 관계하는 과학기술위원회 즉 RILEM Committee 68-MMH<sup>23</sup>와 ACI 소위원회 225.1에 참여함으로써 입력정보를 얻을 수 있다. 빈약한 연구기반으로 인해 가까운 미래에 그러한 모델들이 개발될 것 같지 않아서 관심있는 연구자들에게 모델의 이용이나 개발에 참여할 수 있는 기회가 주어져야 한다.

## Knowledge-Based Expert Systems

대부분의 화학적, 물리적 simulation model

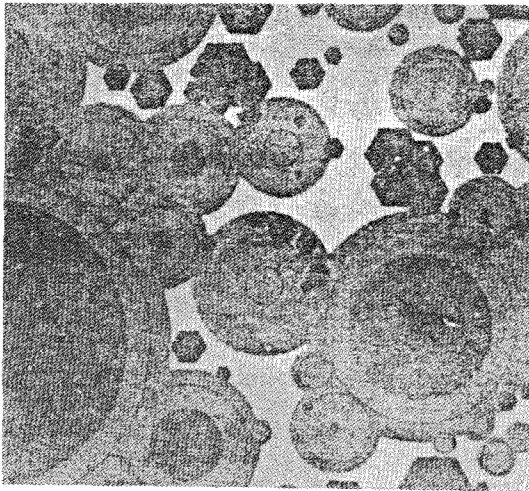


〈그림-2〉 Flow chart for a comprehensive computer simulation model of microstructure and property development of cement pastes. Most of the small boxes represent subroutines which perform operations on different aspects of the microstructure under the control of the control program. Subroutines can be changed to invoke different assumptions and processes. In using the model, the microstructure undergoes incremental small changes at a rate controlled by a kinetics subroutine. The calculated microstructure can be used to produce a graphic output or as input to calculations of bulk properties.

들이 결정론적이라는 점 때문에 실제현상을 설명하기 위해서는 확률론적인 모델 개발이 필요하다는 인식이 커지고 있다.<sup>6)</sup> 또한 많은 중요한 지식들은 전문적인 성격을 띄고 있으며 지난 20년 동안 전문적인 지식을 바탕으로 computer 프로그램을 개발하는 실용화에 주력해왔기 때문에 확률론적인 모델 개발의 필요성이 고조되고 있다. 이러한 프로그램을 knowledge-based expert system 또는 expert system 이라고

하며 의료진단과 질량분석에 이용되는 첨단분야이다.<sup>7)</sup> expert system의 개발은 어렵고 비용이 많이 들지만 잠재력은 크다.

최근 Clifton, Oltikar 와 Johnson<sup>8)</sup> 등은 내구성 콘크리트용 원료를 선택하기 위하여 원시적 expert system인 DURCON 을 개발했다. DURCON 은 상호 보완적 컴퓨터로서 특정 환경하에서 이용 가능한 콘크리트의 설계, 적당한 원료의 선택 그리고 혼합비율을 결정하는데 도움



〈그림-3〉 Graphic display of a cross-section of the calculated microstructure from a computer simulation. This cross-section is of a tricalcium silicate paste with  $w/s = 0.5$  and a 42% degree of hydration. Solid black circles represent anhydrous  $C_3S$ ; grey areas,  $C-S-H$ ; hexagons,  $CH$  crystals (calculated as spheres); and black lines, original boundaries of  $C_3S$  particles.

을 준다. 동결과 해빙, 보강철근의 부식, 화학적 침식 그리고 알칼리 골재 반응 등에 의한 내구력도 포함된다. DURCON은 ACI가 발행하는 가장 권위있는 내구성 콘크리트 책자인 미국 콘크리트 연구소의 내구성 콘크리트 안내서<sup>9)</sup>를 근거로 하고 있다. DURCON은 내구성에 관계한 ACI 위원회와 협력하여 개발되고 있으며 많은 내구력 전문가들이 그 system에 아이디어를 제공하고 검토하고 있다. 완전한 expert system이 ACI 위원회의 승인을 받아 표준으로의 성능을 인정받기를 희망한다.

expert system의 장점은 ① 전문적인 지식을 사용하기 쉽게 표현할 수 있다는 것 ② 복합적인 문제를 결정하는데 도움이 되며 ③ 부족한 지식과 연구의 필요성에 주목하게 되며 ④ 교육적 자료를 제공한다는 점이다.

NBS는 최근 시멘트의 선택과 이용에 관한 ACI 안내서에 근거하여 다른 expert system의 개발을 시작했다.<sup>10)</sup> 이경우도 NBS는 DURCON의 경우처럼 ACI 위원회(수경성 시멘트에 관계

한 ACI 225 소위원회)와 협력하여 개발하고 있다. 이것은 특정문제를 해결하는데 ACI 318처럼 편리한 실행 code를 이용하여 여러가지 콘크리트 기술을 설명하는 것이 일련의 보조 expert system으로 될 수 있는가에 대해서 의문을 남게 한다.<sup>11)</sup> 콘크리트에 대한 실행 코드나 코드에 대한 주해는 대형시스템에서 주어지는데 그 구성요소가 되는 expert system에 포함될 수 있는 것은 ① 실행조건 ② 물질의 선택 ③ 조합 디자인 ④ 기대되는 수명 ⑤ 요구되는 설계조건 ⑥ 설계상의 요구조건 ⑦ 구조적인 시스템이나 요소 ⑧ 조건의 평가 ⑨ 보호장치 ⑩ 수리절차 등이다.

## Databases

simulation model과 expert system을 유용하게 이용하기 위해서는 데이터와 다른 지식이 필요하다. 재료 또는 시스템에 관계된 수치량 같은 정보를 언급하기 위해서는 “data”라는 용어를 이용하고 text, image, data를 포함하는 정보를 언급하기 위해서는 “knowledge”라는 용어를 이용한다. “databases”는 수치 데이터뿐만 아니라 knowledge의 computer based collection을 언급하기 위해 이용하게 될 것이다. text와 image는 data보다 origin이 결여되어 있다. 하지만 결정을 하게 되는 경우에는 유용하게 사용된다. databases 설치비용은 그것의 범위와 유용성을 고려하여 결정해야 한다. 많은 knowledge는 유용하기는 하나 이용에 따른 비용이 많이 든다. 그러나 소리와 상의 기록 기술과 databases 운영체계의 발전<sup>12)</sup>은 그것들을 보다 더 쉽게 생산하고 유지함으로써 databases의 설치 및 운영에 필요한 비용을 절감할 수 있게 한다.

시멘트 과학에 대한 데이터베이스가 기여한 NBS의 예는  $C-S-H$ <sup>13,14)</sup>와  $C-A-\bar{S}-H$ <sup>15)</sup> system에 대한 상태도의 수정이다. 이 연구는 시멘트 수화에 대한 simulation model과 expert system에 필요한 기초적인 데이터를 제공한다. 상태도가 중요하지만 그것에 대한 냉정한 평가와 개선은 최근에 이르러 서서히 이루어졌다.

컴퓨터는 저장하고 재현하는 능력을 갖고 있기 때문에 그 유용성이 점차 증가하고 있다.

상태도에 참가하여 NBS는 시멘트와 콘크리트 및 콘크리트 혼합제에 관계하는 ASTM 위원회, C-1, C-9의 지원을 받고 있는 Cement and Concrete Reference Laboratory<sup>16)</sup>, CCRL에 시멘트의 물성과 실험에 관한 중요한 데이터베이스를 갖고 있다. databases는 CCRL Proficiency Sample Program<sup>17)</sup>에서 사용하는 상업용 포틀랜드 시멘트로 시험한 ASTM의 표준 결과와 많은 부분에서 중복된다. 그 데이터베이스는 ASTM 표준 시험의 결과만을 저장하고 있으며 계산된 잠재성 화합물 조성을 제외한 다른 시멘트상 조성에 대한 정보는 갖고 있지 않다. 현재의 ASTM 시험의 부족을 극복하기 위해 크링카와 시멘트의 상 분석을 수행하는 task group을 시멘트의 화학분석 소위원회 C-1.23 내에 설치해 두고 있다. 이 그룹은 X-ray 회절과 광학현미경에 의해 상분석에 대한 표준방법을 개발하고 크링카 상분석에 대한 standard reference material을 제조하는 NBS 프로젝트를 수행한다. 이 그룹의 활동은 ASTM 시험에 관계된 데이터베이스의 가치를 더욱 증가시키고 있다.

## Computer Networking

지식의 이점은 그 자체에 대한 적용이 용이하고 결과가 빠르다는 것이다. 컴퓨터를 통한 새로운 통신기술은 연구자들간에 데이터의 전달을 더욱 용이하게 하고 데이터를 검토·분배하는데 있어서 참여의 가능성을 증가시키고 있다. 통신의 용이함과 빠른 속도는 시멘트 연구자들간에 세계적 규모의 공동연구 기회를 가져올 것이다. 또한 연구를 계획하고 결과를 분배하는데 큰 협력관계를 갖게 할 것이다. 그러한 협력은 제한된 자원으로부터의 불충분한 결과들이 비교적 소규모 연구 그룹 사이에 흩어지는 것을 극복할 수 있도록 도와 시멘트 연구 발전의 집약력에 커다란 효과를 미치게 될 것이다.

연구자들이 이 기회를 잘 이용한다면 다른 실험실에서의 연구 활동들은 서로가 상호 보완적

으로 될 수 있다. 이것은 연구의 계획 단계에서 아이디어를 교환하고 데이터를 교환함으로써 이루어진다. 이러한 교류를 통하여 시멘트 연구는 Bugliavello가 정의한 hyperintelligence에 의해 특징지어지는 영역으로 진입하고 있음을 예견할 수 있다.<sup>18)</sup>

시멘트와 콘크리트 연구자들 사이의 컴퓨터 네트워크 설치의 첫 단계로 NBS는 expert system 개발에 관한 정보 교환을 위해 electronic bulletin board<sup>19)</sup>를 운영하고 있다. 이것은 전화로 서로 연결되는 퍼스널 컴퓨터를 이용하여 서로가 통신에 참여할 수 있도록 하고 있다. 이러한 방법으로 컴퓨터 회의를 할 수 있는데 참가자들은 expert system에 대한 의견을 제시하거나 개선을 요구한다. 같은 방법으로 bulletin board는 개발 또는 실제 사용을 목적으로 expert system 또는 다른 프로그램에 접목할 수 있도록 도와준다.

## Discussion

시멘트와 콘크리트의 과학과 기술에 대한 knowledge system은 실험실과 현장에서 발생하는 지식에 의존한다. 지식의 운영시스템은 사용을 용이하게 하고 가치를 증대시킨다. 그러나 이 시스템은 필요로 하는 지식이 없이는 정당화 될 수 없다. 더우기 이러한 시스템은 실험실 및 현장 연수를 통하여 새로운 정보의 공급이 지속되어야 한다.

knowledge system은 보다 더 집약되고 응집되어야 하기 때문에 연구가 더욱 더 명확하게 정의되어야 한다. 예를 들어 expert system DURCON의 개발은 알칼리-실리카 반응에 보다 더 많은 정보가 필요함을 나타낸다. 그러므로 지식을 다루는데 있어서의 진보된 방법은 결과의 중요성이 증대하고 있는 연고로 그 필요성이 증가하고 있다. 컴퓨터는 측정이 어렵고, 데이터의 저장·수정이 용이하기 때문에 이와 같은 과정에 결정적 역할을 한다. 기술의 비약적인 발전이 이루어지고 있는 현재는 이 글에서 토의된 것처럼 knowledge system의 계획 및 실행에 있어서 국제적인 공동연구를 해야 할 시

기인 것 같다.

Three based-computer system은 분리될 필요가 없고 여러가지 방법으로 서로가 연결되어야 한다. 예를 들어 현재 전문가의 지식에 크게 의존하고 있는 expert system은 simulation model을 합체할 수 있는 가능성을 갖고 있다. expert system은 매개 변수의 선택에 미리 예측되는 규칙을 적용하여 simulation model의 효율을 개선하는데 이용될 수 있다.

## Conclusion

시멘트 연구에 있어서 컴퓨터의 효과는 가속화 되고 있다. 물과 시멘트의 반응에 대한 simulation model과 시멘트, 콘크리트에 관계된 expert system은 databases와 networking 기술이 급격한 발전을 하고 있는 때에 개발되었다. 이 모두를 종합해 보면 모두가 시멘트와 콘크리트의 과학과 기술에 보다 급속한 발전을 이끄는 시멘트 연구자의 공동연구의 기회를 부여하게 될 것이다.

## REFERENCES

- 1) Frohnsdorff, G., and Clifton, J. R., A review of mathematical modeling applied to the manufacture and use of portland cements, *Cem. Res. Prog.*, 1980, pp. 279-304.
- 2) Taylor, H. F. W., and 11 others, The hydration of tricalcium silicate, Report of RILEM Committee 68-MMH, Task Group 3, *Mater. Constr. (Paris)*, v. 17, 1984, pp. 457-468.
- 3) Pommersheim, J. M., and Clifton, J. R., Mathematical modeling of tricalcium silicate hydration, *Cem. Concr. Res.*, v. 9, 1979, pp. 765-770.
- 4) Pommersheim, J. M., and Clifton, J. R., Mathematical modeling of tricalcium silicate hydration, silicate hydration, *Cem. Concr. Res.*, v. 12, 1982, pp. 765-772.
- 5) Jennings, H. M., and Johnson, S. K. Simulation of microstructure development during the hydration of a cement compound, *J. Amer. Ceram. Soc.*, v. 69, pp. 790-795.
- 6) Martin, J. W., Service life prediction from accelerated aging test results using reliability theory and life testing analysis, in Masters, L. W. (ed.), *Problems in Service Life Prediction of Building and Construction Materials*, NATO Series E, Applied Science No. 95, Martinus Nijhof, Dordrecht, Netherlands, 1985, pp. 191-211.
- 7) Duda, R., and Shortliffe, E. H., *Expert Systems Research, Science*, v. 220, No. 4594, 1983, pp. 261-268.
- 8) Clifton, J. R., Oltikar, B. C., and Johnson, S. K., Development of Durcon, an expert system for durable concrete: Part 1, NBSIR 85-3186, National Bureau of Standards, Washington, D. C., 1985.
- 9) Guide to Durable Concrete, ACI 201. 2R-77, *Manual of Concrete Practice*, v. 1, Amer. Concr. Inst., Detroit, 1985 (37 pp.).
- 10) Guide to the Selection and Use of Hydraulic Cements, ACI 225R-85, *J. Amer. Concr. Inst.*, Detroit, v. 82, 1985, pp. 901-929.
- 11) Building Code Requirements for Reinforced Concrete, ACI 318-83, *Manual of Concrete Practice*, v. 3, Detroit, 1985 (111 pp.).
- 12) Ambler, E., Engineering Property Data: A National Priority, *ASTM Standardization News*, August 1985, pp. 46-50.
- 13) Jennings, H. M., Aqueous solubility relationships for two types of calcium silicate hydrate, *J. Amer. Ceram. Soc.*, v. 69, 1986, pp. 614-618.
- 14) Brown, P. W., Franz, E., Frohnsdorff, G., and Taylor, H. F. W., Analysis of the aqueous phase during early  $C_3S$  hydration, *Cem. Concr. Res.*, v. 14, 1984, pp. 257-262.
- 15) Brown, P. W., Barret, P., et al., The hydration of tricalcium aluminate and tetracalcium aluminoferrite in the presence of calcium sulfate, *Mater. Constr. (Paris)*, materials and Structures, v. 19, No. 110, 1986, pp. 137-147.
- 16) The Cement and Concrete Reference Laboratory- A case history in collaborative standardization, *ASTM Mater. Res. Stand.*, v. 10, 1970.
- 17) Pielert, J. H., Haverfield, J. W., and Spellerberg, P. A., Application of CCRL data in the formulation of precision estimates for selected cement standards, *Cem., Concr., Aggregates*, v. 7, 1985, pp. 37-42.
- 18) Bugliavello, G., *Hyperintelligence: The Next Evolutionary Step*, *The Futurist*, v. 18, 1984, pp. 6-11.
- 19) Kaetzel, L. J., and Clifton, J. R., A bulletin board system for feedback to the DURCON expert system: NBSIR 86-3332, National Bureau of Standards, Washington, DC, 1986. ♣