

3차원 결정소성 유한요소해석을 통한 변형 집합조직 예측

정경환¹ · 김동규¹ · 임용택[#] · 이용신²

Prediction of Deformation Texture Based on a Three-Dimensional Crystal Plasticity Finite Element Method

K. H. Jung, D. K. Kim, Y. T. Im, Y. S. Lee

(Received March 20, 2012 / Revised April 9, 2012 / Accepted May 2, 2012)

Abstract

Crystallographic texture evolution during forming processes has a significant effect on the anisotropic flow behavior of crystalline material. In this study, a crystal plasticity finite element method (CPFEM), which incorporates the crystal plasticity constitutive law into a three-dimensional finite element method, was used to investigate texture evolution of a face-centered-cubic material – an aluminum alloy. A rate-dependent polycrystalline theory was fully implemented within an in-house program, CAMPform3D. Each integration point in the element was considered to be a polycrystalline aggregate consisting of a large number of grains, and the deformation of each grain in the aggregate was assumed to be the same as the macroscopic deformation of the aggregate. The texture evolution during three different deformation modes - uniaxial tension, uniaxial compression, and plane strain compression - was investigated in terms of pole figures and compared to experimental data available in the literature.

Keywords : Crystal Plasticity, Finite Element Method, Texture Evolution

1. 서 론

결정구조를 갖는 금속 소재는 소성가공을 거치면서 결정학적인 측면에서 결정립들의 방위에 의해 이방성을 띄게 된다. 즉, 무질서한 방위 분포를 갖는 수 많은 결정립들의 집합체는 등방성을 나타내는 데 반해 소성변형 중인 결정립들은 변형 모드에 따라 특정방향으로 배열하여 집합조직을 형성함으로써 소재는 이방성을 나타내게 된다.

이러한 집합조직의 발달에 따른 소재의 이방성은 제품의 기계적 성질 및 성형성에 절대적인 영향을 미치므로 원하는 치수 정밀도를 확보하기 위해서는 집합조직에 대한 제어가 필수적이다. 현

재까지는 소재의 소성거동을 예측하는 데 있어 연속체 역학에 기반을 둔 유한요소기법(finite element method, FEM)을 이용한 방법이 사용되어 왔으나, 이러한 방법은 소재의 변형 이력에 따라 발생하는 집합조직의 발달로 인한 재료의 변형 거동을 예측할 수 없다는 한계를 보인다[1~3].

본 연구에서는 소성변형 중에 발달하는 집합조직을 예측하고 이러한 집합조직의 영향이 소재의 특성에 미치는 영향을 이해하기 위해서 결정소성 이론과 연속체역학을 접목하여 3차원 결정소성 유한요소기법 (crystal plasticity FEM, CPFEM) 프로그램을 개발하였다. 기존의 결정소성 유한요소기법 관련 연구의 경우 미시적인 소성변형 기

1. 한국과학기술원 기계공학과 대학원
2. 국민대학교 기계공학과
교신저자: 한국과학기술원 기계공학과,
E-mail: ytim@kaist.ac.kr

구의 고찰에 초점을 맞추어왔으나, 본 연구에서는 실제 공정에서 관찰되는 거시적인 소성 이방성을 모사하고자 하였다. 개발된 결정소성 유한요소해석 프로그램의 신뢰성을 확보하기 위해 단순 변형 해석인 일축 인장, 일축 압축, 평면 변형 압축 등에 대한 극점도를 문헌의 실험 결과와 비교 검토하고, 단순한 변형에서의 집합조직 발달에 대한 이해를 돕고자 하였다.

2. 결정소성 수식화

결정립 내부의 슬립현상은 상온에서의 소성변형의 주요 기작으로 알려져 있다. 금속 내부의 슬립은 슬립면상에서 슬립방향으로 전단변형을 일으키며, 여러 개의 작용 슬립시스템에 일어나고 있는 전단변형의 조합으로 외부의 거시적 소성변형이 나타난다. 이러한 경우에 각 결정립들은 변형이력에 따라 처음의 방위상태로부터 우선하는 방위로 회전하게 되어 집합조직을 형성한다. 따라서 결정소성학에서의 슬립에 의한 결정학적 운동학, 슬립현상을 규명하는 구성방정식, 변형경화 및 방위변화 등과 같은 미세조직 상태의 변화에 대한 모델링이 필요하다.

2.1 단결정 운동학

본 연구에서는 탄성변형에 의한 방위변화가 무시할만 하므로 Fig. 1과 같이 단결정의 변형을 슬립에 의한 소성변형(F^P)과 결정 격자의 강체 회전(R)으로 이루진다고 가정하였다.

$$F = F^* F^P = R F^P \quad (1)$$

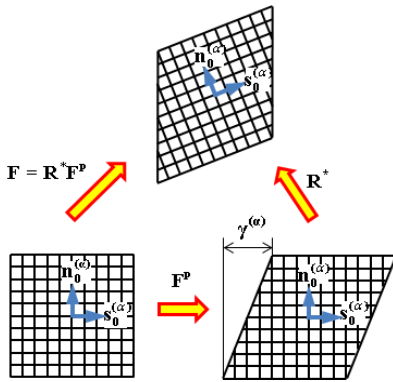


Fig. 1 Kinematics of single crystal deformation

단결정의 소성변형은 특정한 슬립면에서 특정한 슬립방향으로 발생하는 슬립현상에 기인한다. 속도구배텐서의 소성부(L^P)는 각 슬립시스템의 전단변형률속도의 조합으로 표현되는 변형률속도 텐서(D^P)와 소성 스핀텐서(Ω^P)의 합으로 이루어진다.

$$L^P = D^P + \Omega^P = \sum_{\alpha=1}^N P^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha=1}^N W^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (2)$$

윗식에서 $P^{(\alpha)}$ 와 $W^{(\alpha)}$ 는 현재 형상의 (α) 슬립시스템에서 슬립방향벡터 $s^{(\alpha)}$ 와 슬립면 법선벡터 $m^{(\alpha)}$ 로 정의된 Schmid 텐서 [4]의 대칭부와 비대칭부이다.

$$P^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \{ s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)T} + m^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)T} \} \quad (2)$$

$$W^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \{ s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)T} - m^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)T} \} \quad (3)$$

2.2 속도의존성 구성방정식

결정립의 변형률속도를 구하기 위해서 각 슬립시스템에서의 전단변형률속도와 분해전단응력 사이의 관계를 규명하는 마이크로 구성방정식 (5)을 사용하였다.

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_R^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_R^{(\alpha)}} \right|^{m-1} \quad (5)$$

윗식에서 $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ 은 (α) 슬립시스템에서의 분해전단응력 ($\tau^{(\alpha)}$)이 그 시스템의 하드니스 ($\tau_R^{(\alpha)}$)에 도달했을 때의 전단변형률속도이며, m 은 속도 민감도 지수 (rate sensitivity parameter)이다. (α) 슬립시스템에서의 분해전단응력은 결정립의 진응력 (σ_c')을 현재 형상에서의 슬립시스템에 투영하여 다음과 같이 구한다.

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma_c' \cdot P^{(\alpha)} \quad (6)$$

소성변형에 따른 변형경화를 반영하기 위해서는 슬립시스템의 변형경화를 고려하는 하드니스 물성방정식 ($\dot{\tau}_R$)이 필요하다 [1].

$$\dot{\tau}_R = H_0 \left(\frac{\tau_s(\dot{\gamma}^*) - \tau_{avg}}{\tau_s(\dot{\gamma}^*) - \tau_0} \right) \dot{\gamma}^* \quad (7)$$

Table 1 Material parameters for AA1050

| m | $\dot{\gamma}_0$ | τ_0 | τ_{s0} | H_0 | $\dot{\gamma}_s$ | m' |
|------|----------------------|-----------|-------------|-----------|-------------------------------------|-------|
| 0.05 | 1.0 s^{-1} | 23.50 MPa | 55.80 MPa | 30.41 MPa | $5.0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ | 0.005 |

$$\dot{\gamma}^* = \sum_{\alpha} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}|, \quad \tau_s(\dot{\gamma}^*) = \tau_{s0} \left| \frac{\dot{\gamma}^*}{\dot{\gamma}_s} \right|^{m'} \quad (8)$$

여기서, $\dot{\gamma}^*$ 는 모든 슬립계의 전단변형률속도 합이고, H_0 , τ_{s0} , m' , $\dot{\gamma}_s$ 는 알루미늄 1050에 대한 재료상수이며, 각각의 값은 Table 1에 주어져 있다.

2.3 결정 방위의 계산

각 결정격자의 회전속도를 나타내는 스핀텐서 (Ω)는 다음과 같이 주어진다.

$$\Omega = \dot{R}R^T + \sum_{\alpha=1}^N W^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (9)$$

현재 형상에서의 방위는 회전텐서 (R)로 표현되므로 방위각의 변화를 직접 구하는 대신 회전텐서를 적분해 나감으로써 변형 중 결정립 방위의 변화를 계산할 수 있다. 이를 위해 식 (9)를 재정렬하여 다음과 같이 새로운 회전텐서를 구할 수 있다 [6].

$$R(t + \Delta t) = \text{Exp} \left[\left(\Omega - \sum_{\alpha=1}^N W^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \Delta t \right] R(t) \quad (10)$$

2.4 결정소성 유한요소 수식화

거시적인 소성변형은 각 결정립들의 미시적인 점소성 변형의 중첩으로 나타나므로 각 결정립들에 대한 응력과 변형률속도의 관계식을 통해 예측될 수 있다. 본 연구에서는 Taylor [7]가 제시한 바와 같이 N_c 개의 모든 결정립의 변형률속도텐서는 다결정 집합체의 변형률속도텐서 ($\dot{\epsilon}$)와 동일한 것으로 가정하여 거시응력 (σ')을 얻을 수 있었다.

$$\sigma' = \frac{1}{N_c} \sum_{c=1}^{N_c} \left[\sum_{\alpha} \frac{\dot{\gamma}_0}{\tau_R^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_R^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}-1} P^{(\alpha)} \otimes P^{(\alpha)} \right] \dot{\epsilon} \quad (11)$$

식 (12)와 같은 강점소성 유한요소 수식화에 사용된 약형을 기반으로 하는 소성가공 해석프로그램인 CAMPform3D[8]을 사용하였으며, 이 때 구성방정식은 각 결정립들의 결정학적인 소성거동을 반영하기 위해 식 (11)에서와 같이 각 결정립에서의 미시적인 구성방정식으로부터 유도된 것으로 대체하였다.

$$\delta \pi = \int_V \delta \dot{\epsilon}^T \sigma' dV + \int_V K_p \delta \dot{\epsilon}_v^T \dot{\epsilon}_v dV - \int_{S_F} \delta v^T t^* dS = 0 \quad (12)$$

윗식에서 σ' 과 t^* 은 각각 편차응력과 표면력을 나타내고 K_p 은 비압축성 구속조건을 부여하기 위한 벌칙상수를 나타낸다.

$$v = v^* \text{ on } S_U$$

$$t = t^* = -m_f k_s \frac{2}{\pi} \frac{(v_r)}{|(v_r)|} \tan^{-1} \left(\frac{|(v_r)|}{\psi} \right) \text{ on } S_F \quad (13)$$

식 (13)은 결정소성 유한요소해석에서의 힘과 변위경계조건을 나타낸다. m_f 는 전단마찰계수, k_s 는 소재의 전단항복강도를 나타내며, v_r 은 금형에

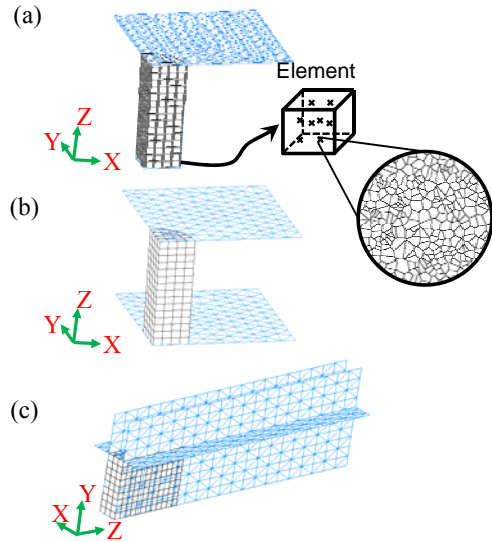


Fig. 2 FE analysis conditions for (a) uniaxial tension, (b) uniaxial compression, and (c) plane strain compression

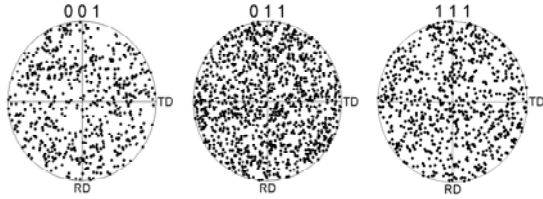


Fig. 3 Initial random texture represented by 200 different crystals

대한 소재의 상대속도, ψ 는 마찰모델을 유연화하기 위한 상수이다.

3. 결정소성 유한요소해석

속도 의존성 결정소성 모델 기반의 유한요소해석 프로그램의 신뢰도를 평가하기 위하여 단순변형에 대한 해석을 수행하였다. 변형 모드에 따른 집합조직의 발달은 $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 극점도를 통해 관찰되었으며, 세 가지 변형 모드인 일축 인장 (uniaxial tension), 일축 압축 (uniaxial compression) 및 평면 변형 압축 (plane strain compression)에 적용하였다.

해석 시에 금형과 편치는 모두 강체로 가정하였고, 소재와 금형간의 마찰상수는 $m_f = 0.12$ 를 적용하였다. 본 연구에서는 편치의 속도를 0.1mm/s로 일정하게 유지함으로써 소재의 온도변화에 대한 성형 하중의 변화가 없는 속도영역에서 해석하였다. 유한요소해석에 사용된 소재는 AA1050이며, 각각의 변형 모드에 대해 Fig. 2와 같이 적절한 경계조건이 적용되었다.

각 적분점은 다수의 결정립 집합체(polycrystalline aggregate)로 가정되어, 각각의 결정립 집합체는 200개의 결정립으로 구성되고, 변형 전의 초기 결정립 집합체는 방향성을 가지지 않는 무작위 형태의 방위분포를 갖는다고 가정하였다. Fig. 3은 등방성 소재의 초기 결정립 방위분포를 $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 극점도에 대해 나타낸 것이다. 본 연구에서 equal area 방식의 극점도를 EDAX TSL OIM (orientation image microscopy) analysis v5.31 프로그램을 사용하여 도시하였다.

3.1 일축 인장 (uniaxial tension)

시편의 초기 치수는 지름과 높이가 각각 10mm, 30mm인 원통형의 시편을 X, Y, Z축에 대하여 대칭

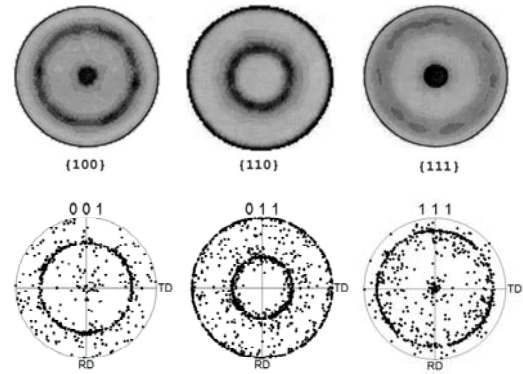


Fig. 4 Comparison between the experimental data[9] (upper) and simulated crystallographic texture (lower) for uniaxial tension to a stroke of $\epsilon_{33} = 1.0$

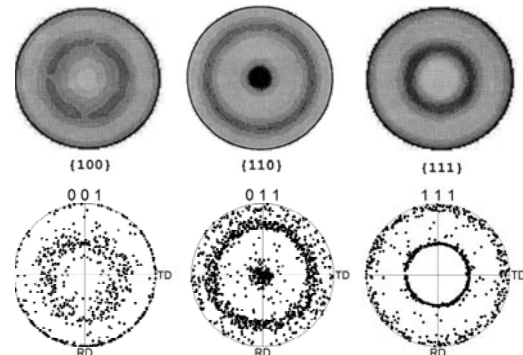


Fig. 5 Comparison between the experimental data [9] (upper) and simulated crystallographic texture (lower) for uniaxial compression to $\epsilon_{33} = -1.0$

으로 가정하여 1/8에 해당하는 형태로 해석하였다. 노드와 요소의 개수는 각각 368, 225개를 사용하였다. Z축에 수직인 면 중 대칭면을 제외한 나머지 한 면에 금형이 접촉하여 인장이 이루어지도록 해석을 수행하였다. 일축 인장은 Z축 방향에 대해 이루어졌으며, 소재를 동일한 방향으로 10 mm 만큼 인장시켰다. 초기 등방성 재료로 가정된 200개 결정립의 극점도는 $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 에 대해 문헌 상의 실험결과 [9]와 비교하였으며, Fig. 4와 같이 매우 잘 일치하는 것을 알 수 있다

3.2 일축 압축 (uniaxial compression)

노드와 요소의 개수는 일축 인장과 동일하게 사용하였으며, 시편의 초기 치수는 지름과 높이가 각각 10mm, 15mm인 원통형의 시편을 X, Y축에

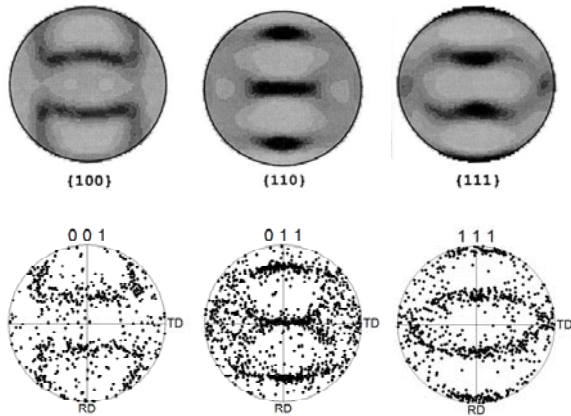


Fig. 6 Comparison between the experimental data [9] (upper) and simulated crystallographic texture (lower) for plane strain compression to $\epsilon_{22} = -0.5$

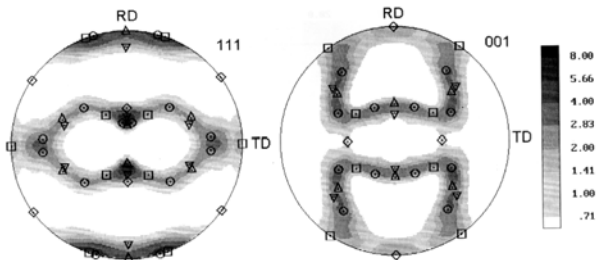


Fig. 7 (1 1 1) and (1 0 0) pole figures of copper rolled to 90% reduction, with symbols for standard components: Δ 'Copper'; ∇ 'Dillamore'; \square various 'S' components; \square 'Brass'; \diamond 'Goss' [10]

대하여 대칭으로 가정하여 1/4에 해당하는 형태로 해석하였다. -Z축 방향에 대해 10mm 만큼 일축 압축 변형에 대한 해석을 수행하였다. 시편의 초기 해석으로부터 얻어낸 세 개의 극점도가 문헌상의 실험 결과 [9]와 비교적 잘 일치하는 것을 Fig. 5에서 확인할 수 있다. 200개의 결정립들은 소재의 좌표축에 대해서 각기 다르게 회전을 하게 되어 집합조직을 형성하게 되고, 일축 압축에서의 집합조직은 일축 인장에서의 것과 확연히 다른 모습을 보여준다. 일축 인장에서는 <100>, <111> 방향이 인장축 방향에 대해 정렬하는 양상을 보여주지만, 이와 달리 일축 압축의 경우 <110> 방향이 압축 방향에 대해 정렬하게 된다.

3.3 평면 변형 압축 (plane strain compression)

평면 변형 압축의 경우, Fig. 2(c)에서와 같이 X축 방향으로 변형이 이루어질 수 없도록 구속되어 있으며 Z방향으로만 소재의 변형이 진행될 수 있도록 금형을 통해 경계조건을 부여하였다. 시편의 치수는 X, Y, Z축 방향으로 각각 1mm, 3mm, 8mm인 사각 시편을 Z축 방향에 대해 대칭으로 가정하여 Z축 방향 길이는 4mm를 사용하였으며, 해석에 이용된 노드와 요소의 개수는 각각 520, 324개로 하였다. 이 때 -Y축 방향으로 1.5 mm 만큼 변형이 이루어 지도록 하였다.

Fig. 6은 예측된 극점도와 문헌 상의 실험결과 [9]를 비교한 모습을 보여주며, 두 결과가 비교적 잘 일치함을 확인할 수 있다.

평면 변형 압축은 Fig. 7에서와 같이 일반적으로 판재 압연에서의 집합조직의 발달 모습과 유사하며, Hirsch 등 [11]은 FCC 재료의 냉간 압연에서 이상적으로 관찰되는 집합조직(ideal rolling texture)의 모습에 대해 평면 변형 압축 모드와 동일한 양상으로 간주하여 고찰한 바 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 소성가공 공정에 따른 변형 집합조직 및 이방성을 예측할 수 있는 3차원 결정소성 유한요소해석 프로그램을 개발하였다. 이를 통해 재료의 거시적 거동의 근본원인이 되는 미시적 거동을 반영함으로써 FCC 다결정체에 해당하는 알루미늄 1050을 대상으로 일축 인장, 일축 압축, 평면 변형 압축의 세 가지 변형모드에 따른 변형 집합조직을 수치적으로 예측하였고, 예측된 변형 집합조직의 <100>, <110>, <111> 극점도를 문헌의 실험 결과와 비교를 통해 개발된 프로그램의 유효성을 검증하였다. 일축 인장에서는 <100>, <111> 방향의 극점이 인장축 방향에 대해 정렬하는 양상을 보였지만, 이와 달리 일축 압축의 경우 <110> 방향의 극점이 압축 방향에 대해 정렬하는 것을 확인하였다. 평면 변형 압축에서는 판재 압연에서와 거의 유사한 집합조직이 발달함을 확인하였다.

후 기

이 연구는 POSCO의 지원을 받아 수행되었으며, 이에 감사 드립니다.

참 고 문 헌

- [1] K. Mathur, P. R. Dawson, 1989, On Modeling the Development of Crystallographic Texture in Bulk Forming Processes, *Int. J. Plast.*, Vol. 5, No. 1, pp. 67~94.
- [2] H. R. Wenk, P. Van Houtte, 2004, Texture and Anisotropy, *Rep. Prog. Phys.* Vol. 67, No. 8, pp. 1367~1428.
- [3] E. Z. Kim, Y. S. Lee, 1996, Finite Element Analysis for Steady State Forming Process of Polycrystalline Metal Including Texture Development, *Trans. Mater. Process.*, Vol. 5, No. 8, pp. 297~304.
- [4] E. Schmid, W. Boas, 1935, *Kristallplastizität*, Springer-Verlag, Germany.
- [5] J. W. Hutchinson, 1976, Bounds and Self-Consistent Estimates for Creep of Polycrystalline Materials, *Proc. R. Soc. London A*, Vol. 348, pp. 101~106.
- [6] J. C. Simo, L. Vu-Quoc, 1986, On the Dynamics in Space of Rods Undergoing Large Motions - A Geometrically Exact Approach, *Comp. Methods App. Mech. Eng.*, Vol. 58, No. 2, pp. 79~84.
- [7] G. I. Taylor, 1938, Plastic Strain in Metals, *J. Inst. Metal.*, Vol. 62, pp. 307~324.
- [8] S. Y. Kim, Y. T. Im, 2002, Three-Dimensional Finite Element Analysis of Non-Isothermal Shape Rolling, *J. Mater. Process. Tech.*, Vol. 27, No. 1, pp. 57~63.
- [9] L. Anand, 2004, Single-Crystal Elasto-Viscoplasticity : Application to Texture Evolution in Polycrystalline Metals at Large Strains, *Comp. Methods App. Mech. Eng.*, Vol. 193, No. 48-51, pp. 5359~5383.
- [10] U. F. Kocks, C. N. Tome, H. R. Wenk, 2000, Preferred Orientations in Polycrystals and their Effect on Materials Properties, Cambridge University Press, UK.
- [11] J. Hirsch, K. Lüke, 1988, Overview no. 76: Mechanism of Deformation and Development of Rolling Textures in Polycrystalline F.C.C. Metals—I. Description of Rolling Texture Development in Homogeneous CuZn Alloys, *Acta. Metal. Mater.* Vol. 36, No. 11, pp. 2863~2882.