

다결정재 소성변형의 탄소성 해석을 위한 접선강성 개발

윤종현¹, 허 훈^{1#}, 이용신²

A New Tangent Stiffness for Anisotropic Elasto-Viscoplastic Analysis of Polycrystalline Deformations

J. H. Yoon, H. Huh, Y. S. Lee

Abstract

The plastic deformation of polycrystalline materials is induced by changes of the microstructure when the loading is beyond the critical state of stress. Constitutive models for the crystal plasticity have the common objective which relates microscopic single crystals in the crystallographic texture to the macroscopic continuum point. In this paper, a new consistent tangent stiffness for the anisotropic elasto-viscoplastic analysis of polycrystalline deformation is developed, which can be used in the finite element analysis for the slip-dominated large deformation of polycrystalline materials. In order to calculate the consistent tangent stiffness, the state function is defined based on the consistency condition between the elastic and plastic stress. The rate of shearing increment($\Delta\gamma^\alpha$) is calculated with satisfying the consistency condition. The consistency condition becomes zero when the trial resolved shear stress($\tau^{\alpha*}$) becomes resolved shear stress(τ^α) at every step. Iterative method is utilized to calculate the rate of shearing increment based on the implicit backward Euler method. The consistent tangent stiffness can be formulated by differentiating the rate of shearing increment with total strain increment after the instant rate of shearing increment converges. The proposed tangent stiffness is applied to the ABAQUS/Standard by implementing in the ABAQUS/UMAT.

Key Words : Tangent stiffness, Anisotropy, Rate-dependent crystal plasticity, Polycrystal, Constitutive model

1. 서론

다결정재로 이루어진 대부분의 금속은 극심한 소성 변형을 받게 되면 일정한 방향으로 집합 조직(Texture)을 형성하여 재배열된다. 결정립들의 방위가 소성변형에 의하여 특정방향으로 배열되어 발생하는 우선 방위를 변형 집합 조직이라고 한다. 이런 변형 집합 조직은 결정학적 이방성을 유발시키므로, 성형제품의 품질이나 후속 공정에 중요한 영향을 미치게 된다. 단결정과 다결정의 변형거동을 다루는 결정소성학 모델은

성형공정 중에 발생하는 미세 결정구조의 재배열 및 변형경화를 표현하며 미시적 단결정들의 집합과 거시적 연속체의 관계를 규명하게 된다. 따라서 결정소성학 모델은 size effect가 크게 작용하는 미세 구조물의 성형해석이나 이방성이 크게 발생하는 해석에 효과적으로 적용될 수 있다.

본 논문에서는 소성변형에 따른 다결정 금속의 변형을 묘사하기 위하여 rate-dependent 결정소성학 모델을 이용하여 새로운 일관된 탄소성 접선강성(consistent tangent stiffness)을 제안한다. 탄소

1. 한국과학기술원 기계공학과

2. 국민대학교 기계 자동차 공학부

교신저자: 한국과학기술원 기계공학과, hhuh@kaist.ac.kr

성 접선강성을 계산하기 위하여 탄성과 소성의 일관성 조건(consistency condition)을 이용하여 합수를 구성하게 되며 매 해석 단계마다 시험 분해전단응력(trial resolved shear stress)이 분해전단응력(resolved shear stress)에 도달하도록 만들어 주는 전단 변형률속도 증분(rate of shearing increment, $\Delta\gamma^\alpha$)을 계산하게 된다. 수식화는 implicit backward Euler 방법을 이용하여 탄성과 소성의 일관성을 유지시킨다. 제안된 탄소성 접선강성은 ABAQUS/UMAT을 이용하여 내연적 유한요소 프로그램인 ABAQUS/Standard에 적용할 수 있다.

2. 결정 소성학

2.1 단결정 운동학

Fig. 1 에서와 같이 단결정의 변형(F)은 소성에 의한 변형(F^P)과 이를 제외한 변형(F^*)으로 나눌 수 있다. F^P 는 슬립에 의해서만 생긴 변형이며 F^* 는 탄성변형과 격자(lattice)의 회전으로 구성된다. 금속 변형의 경우 탄성을 무시할 수 있으므로 F^* 는 식 (1)과 같이 R^* 로 대체될 수 있다. 속도구배 텐서 L 은 식 (2)와 같이 변형률속도 텐서와 스핀텐서의 합으로 표현할 수 있으며 이는 각 슬립시스템의 전단 변형률속도($\dot{\gamma}^{(\alpha)}$)의 조합으로 나타낼 수 있다(4), (5). $P^{(\alpha)}$ 와 $Q^{(\alpha)}$ 는 (α) 슬립시스템에서 정의된 Schmid 텐서의 대칭부와 비대칭부를 의미한다. 소성변형에 따른 결정립들의 새로운 방위의 결정은 격자의 회전, 식 (6)을 적용하여 계산할 수 있다.

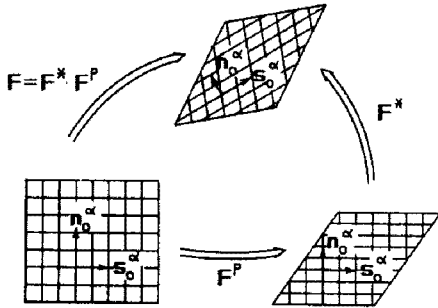


Fig. 1 Kinematics of the single crystal deformation

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

$$L = \dot{F} \cdot F^{-1} = \dot{R}^* \cdot R^{*T} + R^* \cdot \dot{F}^P \cdot (F^P)^{-1} \cdot R^{*T} \quad (2)$$

$$= \omega^L + L^P = \omega^L + \omega^P + d^P$$

$$\omega = \omega^L + \omega^P = \dot{R}^* R^{*T} + \omega^P \quad (3)$$

$$\omega^P = \frac{1}{2} (L^P - L^{PT}) = \sum_{\alpha=1}^n Q^\alpha \dot{\gamma}^\alpha \quad (4)$$

$$d^P = \frac{1}{2} (L^P + L^{PT}) = \sum_{\alpha=1}^n P^\alpha \dot{\gamma}^\alpha \quad (5)$$

$$\dot{R}^* = (\omega - \omega^P) \cdot R^* = \left(\omega - \sum_{\alpha=1}^n Q^\alpha \dot{\gamma}^\alpha \right) \cdot R^* \quad (6)$$

2.2 구성방정식

슬립 시스템에서 전단 변형률속도와 분해전단응력의 관계를 정의하기 위하여 power-law 형태의 식 (7)을 도입하였다.(Hutchinson[1976], Pan and Rice[1983] [1], Asaro and Needleman[1985] [2]) 아래 식에서 \dot{a} 은 α 슬립 시스템에서 분해전단응력이 그 시스템의 하드니스 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ 에 도달하였을 때의 전단 변형률속도이다. 분해전단응력은 결정립의 코시스트레스(σ)를 현재의 슬립시스템에 투영하여 계산한다. 또한 슬립시스템의 하드니스 발전식은 Voce 에 의하여 제안되고 Kocks 에 의하여 수정된 식(8)을 사용하였다[3].

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} \left[\frac{\tau^{(\alpha)}}{\hat{\tau}^{(\alpha)}} \right] \left[\frac{\tau^{(\alpha)}}{\hat{\tau}^{(\alpha)}} \right]^{\left(\frac{1}{m} - 1 \right)} \quad (7)$$

$$\dot{\hat{\tau}}^{(\alpha)} = \Theta_0 \left(\frac{\tau_s(\dot{\gamma}^*) - \hat{\tau}^{(\alpha)}}{\tau_s(\dot{\gamma}^*) - \tau_0} \right) \cdot \dot{\gamma}^* \quad (8)$$

$$\tau_s(\dot{\gamma}^*) = \tau_{s0} \left| \frac{\dot{\gamma}^*}{\dot{\gamma}_s} \right|^{k_0 \theta / \mu b^3 / A}, \quad \dot{\gamma}^* = \sum_{\alpha} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \quad (9)$$

3. 응력 계산 알고리즘

3.1 응력 계산 알고리즘

결정소성학 모델을 적용하여 소성 변형에 따른 다결정 금속의 거동을 해석하기 위하여 일관된 접선강성 행렬을 제안하고 이에 따른 응력 값을 계산하게 된다. 이를 위하여 주어진 전 변형률증분(total strain increment)을 탄성 부분과 소성부분으로 나누게 된다. 소성변형률 증분은 각 슬립시스템에 대한 전단 변형률속도 증분과 Schmid tensor의 곱으로 식(10)과 같이 정의된다. 본 논문에서는

식(9)와 같이 시험 분해전단응력이 분해전단응력에 도달하였을 경우를 소성이라고 간주하여 일관성 조건에 기반한 함수(f)를 구성하고 이를 만족시키는 전단 변형률속도 증분을 계산하게 된다. 전단 변형률속도 증분을 계산하기 위하여 식(11)을 테일러 전개하여 식(13)을 얻는다. 정의된 일관성 함수의 변분은 식 (13)과 같이 정의될 수 있으

$$d^p = \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^\alpha P^\alpha \quad (10)$$

$$f^\alpha = P^\alpha : \sigma - \tau^\alpha = 0 \quad (11)$$

$$f^\alpha(\sigma, \dot{\gamma}^\beta) = P^\alpha : (C^e : \varepsilon^e) - \tau^\alpha = 0 \quad (12)$$

$$f_{n+1}^\alpha = f_n^\alpha + \Delta f_n^\alpha = 0 \quad (13)$$

$$\Delta f^\alpha = \frac{\partial f^\alpha}{\partial \sigma} : \Delta \sigma + \frac{\partial f^\alpha}{\partial \dot{\gamma}^\beta} \Delta \dot{\gamma}^\beta \quad (14)$$

$$\frac{\partial f^\alpha}{\partial \sigma} = P^\alpha, \quad \Delta \sigma = C^e : \Delta \varepsilon^e \quad (15)$$

$$\frac{\partial f^\alpha}{\partial \dot{\gamma}^\beta} = \delta_{\alpha\beta} \left(-\frac{\partial \tau^\alpha}{\partial \dot{\gamma}^\beta} \right) = -\delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\partial}{\partial \dot{\gamma}^\beta} \left(\text{sgn}(\dot{\gamma}^\alpha) \cdot \hat{\tau}^\alpha (\dot{\gamma}^\alpha)^m \right) \right] \quad (16)$$

$$= -\text{sgn}(\dot{\gamma}^\alpha) \cdot m \cdot \hat{\tau}^\alpha (\dot{\gamma}^\alpha)^{m-1}$$

$$(\because \tau^\alpha = \text{sgn}(\dot{\gamma}^\alpha) \cdot \hat{\tau}^\alpha (\dot{\gamma}^\alpha)^m)$$

$$\Delta f^\alpha = P^\alpha : (C^e : \Delta \varepsilon^e) - P^\alpha : C^e : \left(\sum_{\beta=1}^n (\dot{\gamma}^\beta \Delta t) P^\beta \right) - \quad (17)$$

$$\text{sgn}(\dot{\gamma}^\alpha) \cdot m \cdot \hat{\tau}^\alpha (\dot{\gamma}^\alpha)^{m-1} \cdot d(\dot{\gamma}^\alpha)$$

$$\left(P^\alpha : (C^e : \varepsilon_n^e) - \tau_n^\alpha \right) + \left(P^\alpha : (C^e : \Delta \varepsilon^e) - P^\alpha : \left(C^e : \sum_{\beta=1}^n (\dot{\gamma}_n^\beta \Delta t) P^\beta \right) \right) \quad (18)$$

$$= \text{sgn}(\dot{\gamma}_n^\alpha) \cdot m \cdot \hat{\tau}^\alpha (\dot{\gamma}_n^\alpha)^{m-1} \cdot d(\dot{\gamma}_{n+1}^\alpha)$$

$$\dot{\gamma}_{n+1}^\alpha = \dot{\gamma}_n^\alpha + d(\dot{\gamma}_{n+1}^\alpha) \times (\Delta t) \quad (19)$$

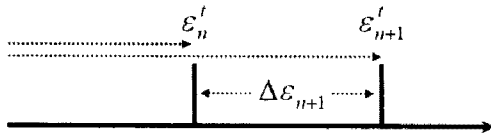


Fig. 2 Incremental strain change

며 여기에 식(15)와 (16)를 대입하여 식(17) Δf^α

를 구성한다. f^α 와 Δf^α 를 식(13)에 대입하여 식(18)을 유도하게 되며 첨자인 $n, n+1$ 은 Fig. 2 에서 정의된 단계를 의미한다. Implicit backward Euler 방법을 이용하여 $d(\Delta \gamma_{n+1}^\alpha)$ 을 계산하게 되며 식 (19)와 같이 다음 단계의 전단 변형률속도 증분을 업데이트하게 된다. 시스템은 $d(\Delta \gamma_{n+1}^\alpha)$ 이 주어진 허용한계보다 작아질 경우 수렴하게 되며 이 때 수렴된 전단 변형률속도 증분을 이용하여 소성 변형률증분과 탄성 변형률증분으로 분해할 수 있다. 이를 바탕으로 시험 분해전단응력과 분해전단 응력 비교하여 현 상태의 일관성 조건식이 만족 되는지를 판단하게 된다.

3.2 일관된 접선강성 행렬

위와 같은 반복계산 과정이 끝나면 응력을 업데이트하기 위한 일관된 접선강성 행렬을 계산한다. 일관된 접선강성 행렬은 식(20)과 같이 정의되며 전단 변형률속도 증분을 적용하여 식을 정리하면 식(21), (22) 와 같다. 연쇄법칙을 이용하여 식(23)를 정의하고 이를 식(22)에 대입하면 최종적으로 응력을 업데이트하는 일관된 접선강성 행렬인 식(24)를 계산할 수 있다. 이러한 과정이 끝나면 초기 오일러 각의 회전을 계산하여 결정구조의 발전을 계산할 수 있다(6). Fig. 3은 전체적인 응력과 오일러 각의 업데이트 과정을 그린 순서도이다.

$$\Delta \sigma = C^{ep*} : \Delta \varepsilon^e, \quad C^{ep*} = \frac{\partial \Delta \sigma}{\partial \Delta \varepsilon^e} \quad (20)$$

$$\Delta \sigma = C^e : \Delta \varepsilon^e - C^e : \left(\sum_{\alpha=1}^n \Delta \gamma^\alpha P^\alpha \right) \quad (21)$$

$$C^{ep*} = C^e - C^e : \left(\frac{\partial}{\partial \Delta \varepsilon^e} \left(\sum_{\beta=1}^n \Delta \gamma^\beta P^\beta \right) \right) \quad (22)$$

$$\frac{\partial \Delta \gamma^\beta}{\partial \Delta \varepsilon^e} = \left(\frac{\partial f^\alpha}{\partial \Delta \gamma^\beta} \right)^{-1} \left(\frac{\partial f^\alpha}{\partial \Delta \varepsilon^e} \right) = \left(-\frac{\partial \tau^\alpha}{\partial \Delta \gamma^\beta} \right)^{-1} (P^\alpha : C^e) \quad (23)$$

$$C^{ep*} = C^e - C^e : \left(\sum_{\beta=1}^n \left(\sum_{\alpha=1}^n \left(-\frac{\partial \tau^\alpha}{\partial \Delta \gamma^\beta} \right)^{-1} (P^\alpha : C^e) P^\beta \right) \right) \quad (24)$$

$$= C^e - C^e : \left(\sum_{\alpha=1}^n \left(-\frac{\partial \tau^\alpha}{\partial \Delta \gamma^\alpha} \right)^{-1} (P^\alpha : C^e) P^\alpha \right)$$

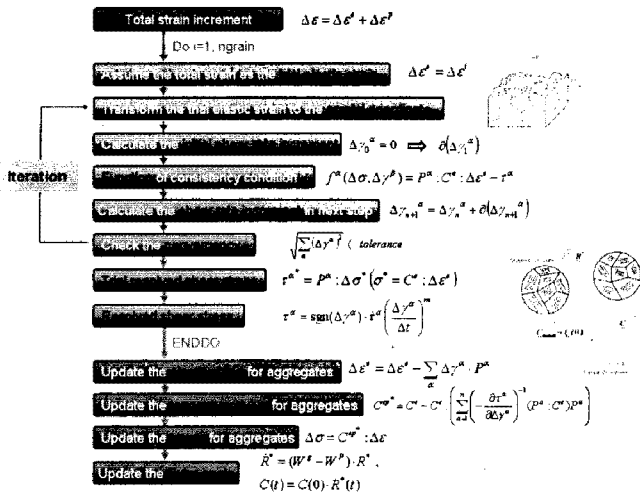


Fig. 3 Flowchart for stress update algorithm

4. 결 론

본 논문에서는 소성변형에 따른 다결정 금속의 변형을 묘사하기 위하여 rate-dependent 결정소성학 모델을 이용하여 새로운 일관된 탄소성 접선강성 (consistent tangent stiffness)을 제안하였다. 탄소성 접선강성을 계산하기 위하여 탄성과 소성의 일관성 조건을 이용하여 함수를 구성하게 되며 매 해석 단계마다 시험 분해전단응력이 분해전단응력에 도달하도록 만들어 주는 전단 변형률속도 증분을 계산하게 된다. 수식화는 implicit backward Euler 방법을 이용하여 탄성과 소성의 일관성을 유지시킨다. 반복계산 과정이 끝나면 각 전단 변형률속도 증분을 이용하여 소성변형에 따른 하드닝 발전을 계산하고 최종 변형단계에서는 오일러 각의 변화를 도출하게 된다. 제안된 탄소성 접선강성은 ABAQUS/UMAT 을 이용하여 내연적 유한 요소 프로그램인 ABAQUS/Standard 에 적용할 수 있다.

[1] J. Pan, J. R. Rice, 1983, Rate sensitivity of plastic flow and implication for yield-surface vertices, *Int. J. Solids Struct.*, Vol. 19, No. 11, pp. 973~987.

[2] R. J. Asaro, A. Needleman, 1985, Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals, *Acta metall.*, Vol. 33, No. 6, pp. 923~953.

[3] K. K. Mathur, P. R. Dawson, 1989, On modeling the development of crystallographic texture in bulk forming processes, *Int. J. Plasticity*, Vol. 5, pp. 67~94.

[4] A. M. Maniatty, P.R. Dawson, Y.S. Lee, 1992, A time integration algorithm for elasto-viscoplastic cubic crystals applied to modeling polycrystalline deformation, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. 35, pp. 1565~1588.

[5] C. Miehe, J. Schröder, 2001, A comparative study of stress update algorithms for rate-independent and rate-dependent crystal plasticity, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. 50, pp. 273~298.

[6] X. Ling, M. F. Horstemeyer, G. P. Potirniche, 2005, On the numerical implementation of 3D rate-dependent single crystal plasticity formulations, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, Vol. 63, pp. 548~568.

[7] A. M. Cuitiño, M. Ortiz, 1992, Computational modeling of single crystals, *Modelling Simul. Mater. Sci Eng.*, Vol. 1, pp. 225~263.

[8] W. Hosford, 1993, *The mechanics of crystals and textured polycrystals*, Oxford university press, New York, New York

[9] U. F. Kocks, C. N. Tomé, H. -R. Wenk, 1998, *Texture and Anisotropy*, Cambridge University Press, Cambridge.

[10] W. Gambin, 2001, *Plasticity and Textures*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Netherlands.