

분말가압 성형공정의 멀티스케일 시뮬레이션과 공정변수 최적화

심진우¹ · 심정길¹ · 김영탁[#]

Multi-scale Simulation of Powder Compaction Process and Optimization of Process Parameters

J. W. Shim, J. G. Shim, Y. T. Keum

Abstract

For modeling the non-periodic and randomly scattered powder particles, the quasi-random multi-particle array is introduced. The multi-scale process simulation, which enables to formulate a regression model with a response surface method, is performed by employing a homogenization method. The size of Al_2O_3 particle, amplitude of cyclic compaction pressure, and friction coefficient are considered as optimal process parameters. The optimal conditions of process parameters providing the highest relative density are finally found by using the grid search method.

Key Words : Powder compaction (분말 가압 성형), Homogenization method (균질화법), Process parameter optimization (공정변수 최적화), Relative density (상대밀도), Response surface method (반응표면법)

1. 서론

다결정 재료의 물리적, 기계적, 화학적 특성은 결정방위배열에 영향을 받게 되는데 이는 개별 결정립들이 결정방향에 따라 이방성을 갖기 때문이다. 따라서 다결정 재료의 분말가압 성형공정을 모델링하고 전산모사하기 위해서는 재료 미세구조와 변형거동을 정확히 파악하는 것이 중요하다.

그러나 실제 분말은 일정한 형태가 아니고, 입도 분포와 충전상태가 균일하지 못하므로 정확한 해석을 위해 분말의 임의성을 고려한 성형공정의 모델링이 필요하다. 또한 상대밀도는 제품 평가의 주요 평가 요소로서 고밀도의 제품을 얻기 위한 최적의 공정변수조건을 찾는 연구가 필요하다.

분말가압 성형공정에 대한 실험적 연구는 Wu 등[1]과 Jiang 등[2]에 의해 수행되었고, Xin 등[3]은 성형공정의 전산모사 방법을 제시하였다. Jiang 등[4]은 상대밀도에 영향을 미치는 인자로 윤활과 실험체의 종횡비, 그리고 입자 크기를 제시하였다.

본 연구에서는 먼저 분말가압 성형공정을 전산 모사하기 위하여, 임의의 초기밀도를 갖는 분말 성형체를 모델링하고, 균질화법으로 구한 등가물 성치를 멀티스케일 시뮬레이션에 도입한다. 그리고 완전 계승 계획법에 의해 선정된 실험점들의 반응치로부터 반응표면모델을 구하고 격자 탐색법으로 설계변수들의 최적조건을 구한다.

2. 성형공정 시뮬레이션

2.1 거시적 모델

Fig.1은 분말가압 공정의 장치와 분말을 2차원으로 모델링한 개략도이다. 분말가압 공정 장치는 분말에 압력을 가하기 위해 상하 운동을 하는 상형, 성형체의 모양 형성을 위해 고정되어 있는 양쪽 다이와 베이스 펀치로 구성된다.

본 연구에서는 실제 분말의 비주기성이나 임의성을 표현할 수 있는 quasi-random multi-particle array를 이용하여 분말을 모델링하였다.

1. 한양대학교 일반대학원

교신저자:한양대학교 기계공학부, ytkeum@hanyang.ac.kr

또한 가변적인 마찰계수가 상대밀도에 미치는 영향을 알아보기 위하여 분말과 분말간의 마찰계수를 다르게 적용하여 전산모사를 수행하였다.

2.2 수식화

응력장의 지배 방정식을 유한요소 수식화하면 다음과 같다.

$$\sum_{e=1}^E ([K]\{u\} - \{F\})_e = 0 \quad (1)$$

여기서 강성행렬 $[K]$ 와 힘벡터 $[F]$ 를 형상함수 N 과 구배행렬 B 를 사용하여 기술하면 다음과 같다.

$$[K] = \int_R [B]^T [E][B] dR \quad (2)$$

$$[F] = \int_R [N]^T t dR + \int_R [N]^T f dR + \int_R [B]^T \sigma'_0 dR \quad (3)$$

식(2)에서 $[E]$ 는 탄성계수 행렬로 다음절의 균질화 물성으로부터 구해진다.

2.3 미시적 물성

분말 성형체에 대한 거시규모의 정확한 해석을 위하여 균질화 이론을 도입하고 미시규모 모델의 등가물성치를 구하였다. 분말 성형체 Ω 를 주기적으로 반복되는 공극 특성을 갖는 단위구조체로 가정한 균질화법의 구성식들[5]로부터 지배방정식을 나타내면 다음과 같다.

$$\int_{\Omega} E_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial v_l}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma_i} t_i v_i d\Gamma \quad (4)$$

여기서 E_{ijkl} 는 거시적 탄성계수이고, t_i 는 경계 Γ_i 에 가해지는 외력이며, v_i 는 임의의 가상변위이다. 이것은 다시 미시적 단위구조에 대한 식(5)와 거시적 구조에 대한 식(6)으로 나누어진다[6].

$$\int_Y E_{ijmn} \frac{\partial \chi_m^k}{\partial y_n} \frac{\partial v_i^j}{\partial y_j} dY = \int_Y E_{ijkl} \frac{\partial v_i^j}{\partial y_j} dY \quad (5)$$

$$\int_{\Omega} E_{ijkl}^H \frac{\partial u_k^H}{\partial x_i} \frac{\partial v_l^H}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Gamma_i} t_i v_i^H d\Gamma \quad (6)$$

여기서 E_{ijkl}^H 는 균질화 탄성텐서이고 다음과 같다.

$$E_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y E_{ijkl} \left(1 - \frac{\partial \chi_m^k}{\partial y_n} \right) dY \quad (7)$$

기공률에 따른 균질화 탄성계수를 계산하기 위하여 분말의 기공 형상과 유사한 십자형 기공 모델의 단위구조를 균질화 해석하여 구한 상대 탄성계수 E_r 와 기공률 f 를 보간하여 다음과 같이 균질화 탄성계수 E_h 를 구하였다.

$$E_h = E_r \times e^{-4.3387f} \quad (8)$$

2.4 멀티스케일 시뮬레이션

본 연구에서는 3 개의 Al 분말입자와 3 개의 Al_2O_3 분말입자로 구성된 복합성형체를 2 차원 rod array 로 모델링하였다[1]. 분말입자들은 평면변형률 상태의 탄소성 거동 해석용 4 절점요소로 모델링되었다. 상형편치, 베이스편치, 그리고 다이는 mass element 를 사용하여 모델링한다. 유한요소 해석에서 사용된 Al 과 Al_2O_3 의 물성은 Table 1 과 같고, 적용된 경계조건으로 상형편치는 30 초에 걸쳐 최대 압력 $P=200MPa$ 을 분말에 가하고, 다이와 베이스편치는 변형이 없다고 가정하였다.

모델링된 분말가압 성형공정은 미시역학 접근법과 연속체 접근법으로 유한요소 해석한다. 미시역학 접근법에서는 탄성계수 E 값을 사용하여 해석한 결과, 상대밀도가 0.699, 0.730, 0.769, 0.804 로 증가되었다. 연속체 접근법에서는 균질화 탄성계수 E_h 를 사용하여 해석한 결과, 상대밀도가 0.748, 0.778, 0.792, 0.816 으로 증가되었다. Fig. 2 는 E 와 E_h 를 사용하여 해석한 상대밀도를 Jiang 등[2]의 실험값과 비교한 것이다. 연속체적 접근이 미시역학 접근법보다 실험값에 더 근접한 결과를 보여준다. Fig. 3 은 6 입자들의 변형형상이다.

또한 분말과 다이 사이의 마찰계수는 고정시키고 분말들 간의 마찰계수를 각각 0.4, 0.6, 0.8 로 변화시키며 해석을 수행하였다.

Table 1 Material properties of Al and Al_2O_3

Material property	Al	Al_2O_3
Mass density (ρ)	$2.12(10)^3 \text{ kg/m}^3$	$3.89(10)^3 \text{ kg/m}^3$
Yield stress (YS)	28 MPa	300 MPa
Poisson's ratio (ν)	0.345	0.22
Elastic modulus (E)	62 GPa	375 GPa
Homogenized elastic modulus (E_h)	$E_r \times e^{-4.3387f}$ GPa	$E_r \times e^{-4.3387f}$ GPa

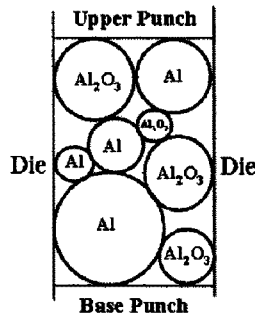


Fig. 1 2-dimensional view of powder compaction device and powders.

모든 경우에 대해 3 인자 3 수준에 의한 총 27 회
의 유한요소 해석을 수행한다. 모든 유한요소 해
석에서 0, 1, 10, 100, 1000 회 반복 가압마다 상대밀
도와 주응력을 각각 계산하고 1 회 가압과 1000
회 가압의 상대밀도 차를 반응치로 정의 한다. 얻
어진 반응치로부터 반응표면을 구하고, 반응표면
을 공정변수의 2 차 함수로 표현하여 회귀모델을
완성한다[8]. 그리고 격자 탐색법으로 최적 공정
변수값들을 찾는다.

3.1 회귀모델

반응치로부터 추정된 회귀모델 \bar{y} 는 다음과 같
다.

$$\bar{y} = Xb = b_0 + \sum_{j=1}^n b_j x_j, \quad j=1,2,\dots,N \quad (9)$$

본 연구에서는 27 경우의 유한요소 해석을 수행
하여 얻어진 반응치들을 기초로 다음과 같이 2 차
회귀 모델을 구한다.

$$\begin{aligned} \bar{y} = & 0.218137 - 0.053844x_1 + 0.054244x_2 \\ & - 0.004089x_3 - 0.017792x_1x_2 - 0.000608x_1x_3 - 0.000608x_2x_3 \\ & + 0.038789x_1^2 + 0.000156x_2^2 - 0.003311x_3^2 \end{aligned} \quad (10)$$

추정된 회귀 모델의 회귀성은 분산분석에 의한
F 검정에 의해 알 수 있다[9]. 식(10)의 회귀모델은
 F_0 값이 유의 수준 5%에서의 기각치보다 크므로
회귀성이 있는 것으로 판단된다.

3.2 최적 조건

Al_2O_3 입자의 크기가 작아 질수록(x_1 의 -1 방향)
상대밀도 변화량이 크게 증가하지만, 마찰계수가
작아짐에 따라(x_3 의 -1 방향) 나타나는 상대밀도
변화량은 크지 않음을 Fig. 4 을 통해서 알 수 있
다. 또한, Fig. 5 을 통해서 반복 가압 진폭이 작아
질 때(x_2 의 1 방면) 상대밀도의 변화량이 마찰계수
가 감소할 때(x_3 의 -1 방면) 상대밀도 변화량에비
해 큼을 알 수 있다. 따라서 Al_2O_3 입자의 크기와
반복 가압 진폭의 크기에 비해 마찰계수가 미치
는 영향이 적음을 반응표면으로부터 알 수 있다.

격자탐색법을 통해 구한 최적 조건은 Al_2O_3 의
입자크기가 22.5 μm 일 때, 압축 진폭이 75MPa 일
때, 마찰계수가 0.1103 일 때이고, 이 최적 조건에
서의 최대 상대 밀도 값은 0.9390 이다.

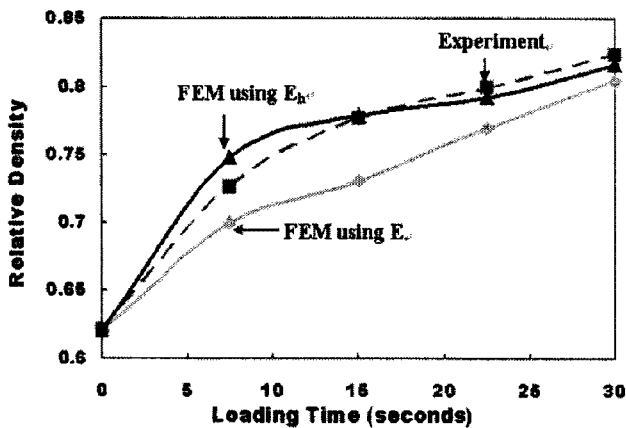


Fig. 2 Comparison of relative densities obtained from FEM analyses and experiment during the powder compaction.

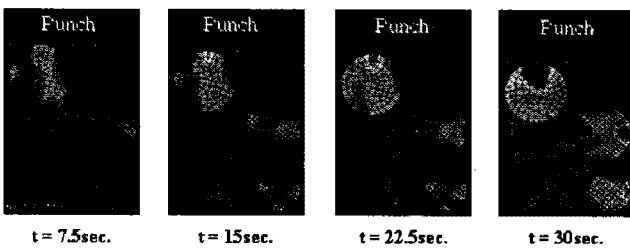


Fig. 3 Formed shapes and principal stresses of 6 particles during the powder compaction.

3. 공정변수 최적화

본 연구에서 공정변수의 최적화를 위해 먼저
 Al_2O_3 입자 크기, 반복 가압 진폭 크기, 마찰계수
를 공정설계변수로 선정하고 완전 계승계획법으
로 관심 실험영역을 설정한다[7]. 그리고 영역내의

참 고 문 헌

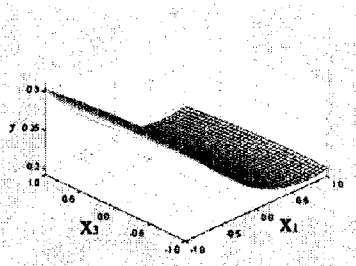


Fig. 4 Response surface model for Al_2O_3 particle size(x_1) and coefficient of friction(x_3) in the case of cyclic compaction pressure amplitude $x_2=0$.

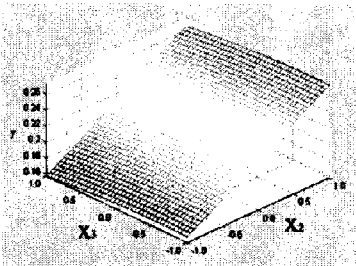


Fig. 5 Response surface model for amplitude of cyclic compaction pressure (x_2) and coefficient of friction(x_3) in the case of particle size $x_1=0$.

4. 결 론

분말가압 성형에서 공정변수에 따른 상대밀도를 예측하기 위하여 멀티스케일 모델을 전산모사하고 공정변수의 최적화를 수행하였다. 이러한 일련의 연구로부터 얻은 결론은 다음과 같다.

(1) quasi-random multi particle array 를 도입하여 분말의 비주기성과 임의의 초기밀도를 가지는 분말 성형체를 효율적으로 모델링하였다.

(2) 균질화법을 도입한 멀티스케일 시뮬레이션으로 정확히 분말가압 성형공정을 전산모사할 수 있다.

(3) Al_2O_3 입자의 크기가 작아짐에 따라, 최대압력이 일정할 때 반복 가압 진폭이 적어짐에 따라, 마찰계수가 작아짐에 따라 상대밀도가 커진다.

- [1] W. Wu, G. Jiang, R. H. Wagoner and G. S. Daehn, 2000, Experimental and Numerical Investigation of Idealized Consolidation Part 1: Static Compaction, *Acta mater*, Vol. 48, pp.4323.
- [2] G. Jiang, W. Wu, G. S. Daehn and R. H. Wagoner, 2000, Experimental and Numerical Investigation of Idealized Consolidation Part 2: Cyclic Compaction, *Acta mater*, Vol. 48, pp.4331.
- [3] X. J. Xin, P. Jayaraman, G. Jiang, R. H. Wagoner and G. S. Daehn, 2002, Explicit Finite Element Method Simulation of Consolidation of Monolithic and Composite Powders, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 33A, pp.2649.
- [4] G. Jiang, G. S. Daehn, J. J. Lannutti, Y. Fu and R. H. Wagoner, 2001, Effects of Lubrication and Aspect Ratio on the Consolidation of Metal Matrix Composite Under Cyclic Pressure, *Acta mater*, Vol. 49, pp.1417.
- [5] N. Takano, M. Zako, M. Ishizono, 2000, Multi-scale computational method for elastic bodies with global and local heterogeneity, *J. Comput.-Aided Mater. Design*, 7, pp.111~132.
- [6] Y. T. Keum, J. W. Oh, 2005, Finite element simulation of ceramic drying process considering pore shape and porosity, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Institute of Physics Publishing, 13, pp.225-237.
- [7] G. Venter, R. T. Haftka, 1998, Construction of response surface approximations for design optimization, *AIAA Journal*, Vol. 36, No. 12, pp.2242.
- [8] Box, G. E. P. and Wilson, K. B., 1951, On the Experimental Attainment of Optimum Condition, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B.*, Vol. 13, pp.1.
- [9] Wapole Ronald E, Myers Raymond H, Myers Sharon L, Ye krying, 2006, *Probability & statistics for engineers & scientists*, 8th ed, Pearson education.