

# 면심입방정 집합조직의 상계 및 하계 항복응력 계산

진두한<sup>1</sup>, 양승용<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>주식회사 타드, <sup>2</sup>한국기술교육대학교 기계공학부

## Computation of upper and lower yield stresses of textured face-centered-cubic crystals

Doo-Han Jin<sup>1</sup>, Seung-Yong Yang<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Corporation TAAD

<sup>2</sup>School of Mechanical Engineering, Korea University of Technology and Education

**요약** 금속 소재의 소성 이방성에 대한 정보는 재료의 기계적 거동을 예측하기 위한 중요한 자료이다. 다결정 금속 소재는 매우 많은 결정립으로 구성되어 있으며 각각의 결정립은 자기 다른 방향으로 정렬되어 있고, 변형 또한 상이하다. 이러한 다결정 집합조직 (texture)은 재료의 소성 이방성의 중요한 원인으로 간주되고 있다. 본 논문에서는 면심입방결정 (FCC) 금속의 정방집합구조 (cube texture {001}⟨100⟩)에 대하여 상계 (upper) 및 하계 (lower) 항복응력 (yield stress)을 계산하였다. 각각의 항복응력 계산에는 Taylor의 등변형률 (equal strain)이론과 Sachs의 등응력 (equal stress) 이론을 사용하였다. 집합조직 분포의 분산 (scattering) 정도에 따라 상계 및 하계 항복면 (yield surface)이 변화되는 경향을 계산하였다. 계산결과에 의하면 항복면은 볼록한 다면체에 가까운 형상을 나타내고 있다. 이러한 항복면을 4차 다항식을 이용하여 근사하면 실제보다 부드러운 곡면으로 표시됨을 확인하였다.

**Abstract** Information on plastic anisotropy is important in predicting the mechanical behavior of metals. Polycrystalline metals are made of many single crystals that all have different orientations and deformation behaviors. The texture of the polycrystalline metals is considered an important factor of plastic anisotropy. In this paper, the upper and lower yield stresses were computed for the {001}⟨100⟩ cube-textured FCC metals. The Taylor's uniform strain theory and Sachs' uniform stress theory were used in the calculations. The upper and lower yield surfaces were computed for various scattering angles of the orientation distribution in the texture. The computational results showed that the yield surface is close to a convex polyhedron. Fitting of the yield surface by a fourth-order polynomial gave a smoother surface.

**Keywords** : Anisotropic Plasticity, FCC, Lower Yield Stress, Texture, Upper Yield Stress

### 1. 서론

금속 판재의 소성 가공을 효율적으로 하기 위해 컴퓨터를 활용한 생산 공정의 전산 모사가 널리 사용되고 있다. 판재의 기계적 특성을 반영하고 역학적 거동을 예측하기 위하여 판재의 변형 및 응력을 계산하여야 하므로

유한요소해석법이 이용된다. 판재는 압연 과정에서 대변형이 발생하고 금속의 집합조직(texture)이 변화되어 이방성(anisotropy)을 나타내게 된다. 압연방향 (rolling direction), 횡방향 (transverse direction) 그리고 판재 수직방향 (normal direction)으로 자기 다른 항복응력이 발생하고 변형률의 발생도 자기 다르다. 이러한 현

본 논문은 2020년도 한국기술교육대학교 교수 교육연구진흥과제 지원에 의하여 연구되었음.

\*Corresponding Author : Seung-Yong Yang(Korea University of Technology and Education.)

email: ysy@koreatech.ac.kr

Received September 16, 2021

Revised October 20, 2021

Accepted January 7, 2022

Published January 31, 2022

상은 판재의 R 또는 Lankford 계수 값으로 측정된다. 판재의 소성 가공을 정확하게 예측하기 위해서는 판재의 이방성에 대한 정보가 필수적으로 필요하다.

판재의 이방성을 표현하기 위해서는 von Mises 또는 Tresca 의 등방성 항복함수 접근법을 대체하는 Hill 의 2차 항복함수[1]가 모델의 단순함을 강점으로 하여 많이 사용되고 있다. 그러나 Hill의 2차함수와 같은 저차함수는 이방성이 강하게 나타나는 금속에 대하여 예측의 정확도에 한계를 나타내게 된다. 금속의 방향에 따른 항복응력과 R 값의 변화를 충분히 나타낼 수 없는 단점이 있다. 따라서 4차 이상의 고차 항복함수가 제안되고 있다 [2,3]. 그러나 이러한 고차 항복함수도 단결정 금속이나 단결정에 근접한 금속의 이방성을 표현하기는 역부족이며, 오목함수 (concave function) 가 발생하여 유한요소해석의 발산을 초래하기도 한다.

본 연구에서는 활주면과 활주방향의 정보가 명확히 알려져있는 면심입방 (face centered cubic) 금속의 단결정 및 다결정 집합조직에 대하여 항복응력의 이방성 형상을 수치적으로 계산하였고, 시각적으로 나타내었다. 계산에는 Taylor 의 상계 항복응력 접근법과 Sachs 의 하계 항복응력 접근법[4]이 각각 사용되었으며 결과를 상호 비교하였다. 본 연구에서 결정모델에 의해 계산된 항복면을 4차 항복 함수를 사용하여 최소자승법으로 근사한 항복면과 비교함으로써 4차 항복 함수[3]로 표시된 항복면은 실제 결정모델의 항복면과 오차를 나타냄을 명확하게 보여주었다.

## 2. 본론

### 2.1 집합조직 (texture)

다결정 금속은 매우 많은 수의 결정립으로 구성되어 있으며 각각의 결정립은 고유한 결정방향을 가지고 있다. 본 연구에서는 면심입방 금속을 고려하였으며 각 결정립은 {001}⟨100⟩ 결정방향을 가지고 약간의 분산이 존재한다고 가정하였다[5]. 즉 결정의 {001} 축은 판재의 수직방향을 가리키고, ⟨100⟩축은 판재의 압연방향을 가리키고 있고, 1000개의 결정립을 고려하였으며 결정방향의 분포는 약간의 흐트러짐 또는 분산이 존재한다.

본 논문에서는 분산의 값을 0도, 5도, 10도, 15도, 20도 그리고 45도를 고려하였고 추가적으로 랜덤인 경우, 즉 등방성 금속도 고려하였다.

Lequeu 등[6]은 결정방향의 분포에 분산을 생성시키

는 방법을 제안하였다. 즉 결정립의 결정방향은 회전축과 회전각도에 의해 정의된다고 할 때

1. 먼저 회전축을 임의의 단위 벡터를 이용하여 정의한다.
  2. 회전 각도  $\theta$ 를 원하는 분산 각도에 따라 발생시킨다.
- 본 연구에서도 동일한 방법으로 결정립의 분산을 정의하였다.

Fig. 1 (a)~(f)에 분산 각도  $\theta$ 의 변화에 따른 (100) 극점도(pole figure)의 변화를 나타내었고 (f)에는 랜덤 분포를 가지는 경우의 극점도를 나타내었다.

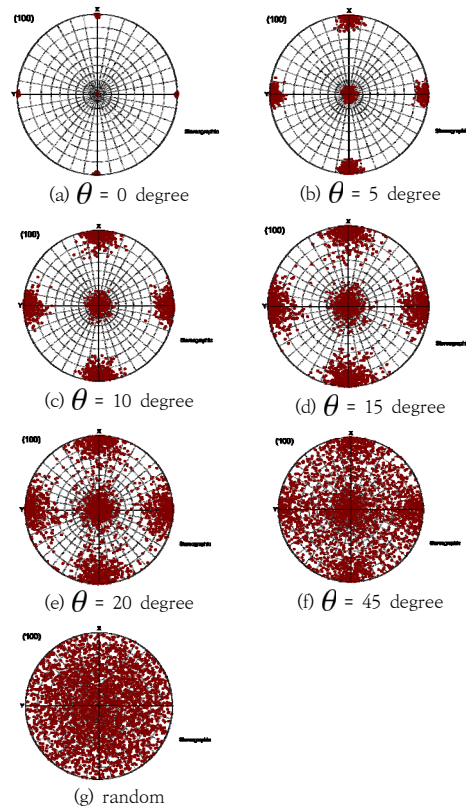


Fig. 1. (100) Pole figures of FCC polycrystals

### 2.2 상계 항복응력 (upper yield stress) 계산

본 절에서는 앞서 생성한 1000개의 결정립을 이용하여 다결정 집합조직에 대하여 상계 항복응력을 계산하고자 한다. 상계 항복응력의 계산을 위하여 Taylor에 의해 제안되었으며[7], Bishop과 Hill[8]에 의해 단순화된 등변형률 (equal strain) 가정을 이용한 항복응력을 계산하고자 한다.

다결정 금속이 외부의 하중을 받게 되면 각각의 결정

립은 결정 방향이 각기 다르므로 외부하중에 의한 응력과 결정립계의 부정합으로 인한 응력이 중첩되어 조금씩 다른 변형률을 하게 된다. 그러나 Taylor는 모든 결정립이 같은 변형을 한다고 가정하였다. 따라서 모든 결정립은 정합 (compatibility)을 유지하지만 응력의 평형은 위배되게 된다.

탄성변형을 무시할 경우, 에너지 보존 법칙에 의해 외부 하중이 한 일은 내부에서 소성변형에 의해 흩어진다 (dissipated) 일과 동등하다. 임의의 완전소성 결정 입자에 대하여 식으로 표현하면,

$$f_i \dot{u}_i = \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} = \tau_c \sum_{\alpha} \dot{\gamma}_{\alpha} \quad (1)$$

여기서  $f_i$  는 외부하중 벡터이고  $u_i$ 는 하중이 작용하는 점의 변위 벡터이고,  $\gamma_{\alpha}$  는  $\alpha$  슬립시스템의 활주량이고  $\tau_c$  는 임계 항복응력 이다. 물체 내의 소성변형률 속도는 Schmidt factor를 이용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \sum_{k=1}^5 (\dot{\gamma}_k n_i^k m_j^k) \quad (2)$$

위식에서  $n_i^k$ 와  $m_j^k$ 는 k 번째 활주면의 법선벡터와 활주벡터이다. 슬립의 3차원 소성변형률은 체적변형률이 없으므로 오직 5개의 변형률 성분만이 독립이고 따라서 5개의 슬립시스템의 합으로 분해될 수있다. Taylor의 등변형률 가정에 의해 소성변형률  $\epsilon_{ij}$ 은 모든 결정립에서 같은 값으로 주어지며 이에 따라 각 결정립에서 결정립의 방향에 따라 활성화되는 5개의 활주면과 활주량이 결정된다. 변형경화가 없는 완전 소성체를 가정하면 5개의 활주면에 대한 항복응력  $\sigma_{ij}$ 도 결정된다. 따라서 (1)식에 의하여 우변의

$$M(\dot{\epsilon}_{ij}) = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}_{\alpha} \quad (3)$$

값이 계산되고 이를 Taylor factor라고 칭한다. (1)식에서 주어진  $\dot{\epsilon}_{ij}$ 에 대하여 결정되는 하중  $f_i$ 와 응력  $\sigma_{ij}$ 는  $\dot{\epsilon}_{ij}$ 가 정합을 가정한 소성변형률이므로 소성이론의 상계하중과 상계항복응력에 해당한다.

항복곡선의 형상을 계산하기 위하여 van Houtte 등 [9]은 항복응력의 포락선(envelope) 개념을 이용하였다. 항복응력과 소성변형율을 5차원 벡터를 이용하여 나타낼 때, 식 (1)은 항복응력 벡터와 소성변형률 벡터의 내적이

Taylor factor 에 비례하며, 만약 소성변형률 벡터가 주어진 상수라면 이에 수직인 응력 평면이 정의됨을 추론할 수 있다. 이 개념을 활용하여 항복응력면은 다음의 모든 소성 변형률에 대한 최소값으로부터 정의된다.

$$Minimize \quad s = \frac{\tau_c M(\dot{\epsilon}_{ij})}{\sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}} \quad (4)$$

단, 모든 응력과 소성변형률 벡터는 그 크기가 1이다. ( $|\sigma_{ij}| = 1, |\dot{\epsilon}_{ij}| = 1$ ). 식 (4)로부터 임계항복응력  $\tau_c$ 에 대한 상대적인 항복응력 텐서의 크기  $s$ 가 구해지고 따라서 응력면 상의 응력 값  $s \sigma_{ij}$ 가 구해지게 된다. 위의 과정은 모든 상계항복응력 중에서 가장 작은 항복응력을 정의한다.

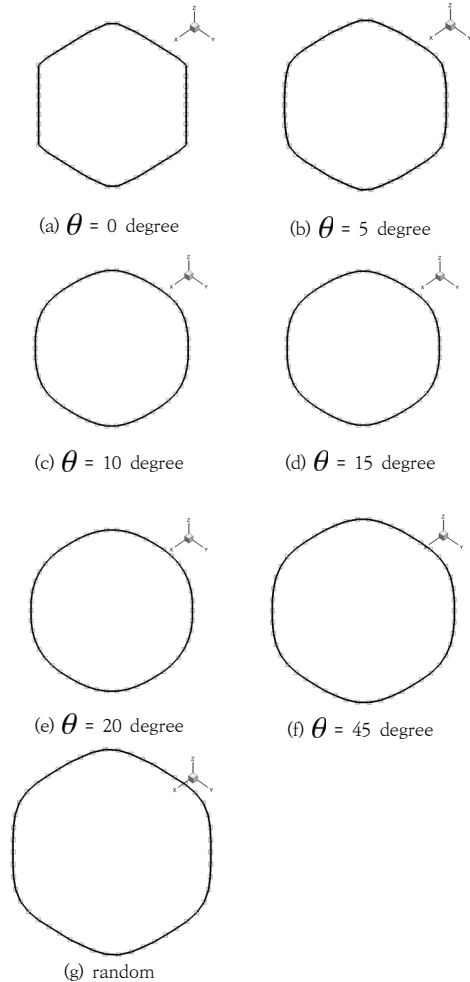


Fig. 2. Upper yield stress locus on the  $\pi$ -plane by Taylor assumption ( $\tau_{xy} = \tau_{yz} = \tau_{xz} = 0$ )

Taylor의 등변형을 가정을 이용하고 (4)식을 이용하여  $\pi$ -평면 상에서 상계항복응력 곡선을 계산하였고, 각각의 집합조직에 대하여 그 결과를 Fig. 2에 도시하였다. 그림에서  $x, y, z$ 축은 주 수직응력을 나타낸다. Fig. 2 (a)는 FCC 단결정에 해당하고 이 경우 항복곡선은 육각형의 형태를 나타낼 수 있다. 결정각도의 분산이 증가함에 따라 항복곡선은 점차 원형으로 변화하고 분산각도 20도 근방에서 원형을 나타내게 된다. 그 후 다시 육각형 형태로 변화하면서 점차 크기가 증가하고, 최종적으로 무작위 다결정일 경우 항복 곡선은 모서리가 무더진 육각형이 된다.

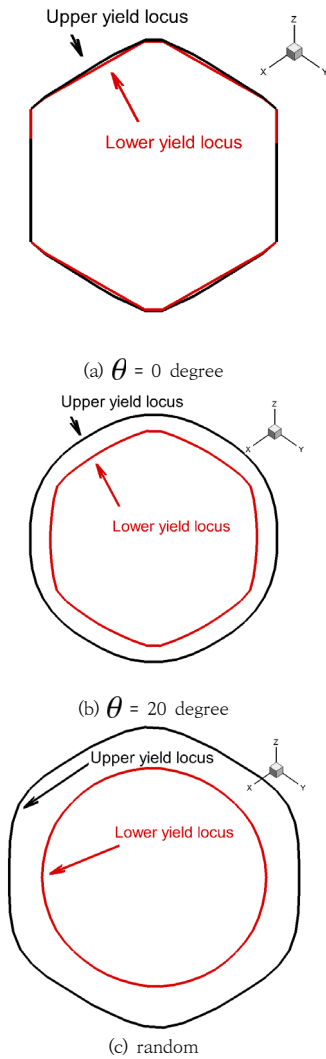


Fig. 3. Upper and lower yield stresses locus on the  $\pi$ -plane ( $\tau_{xy} = \tau_{yz} = \tau_{xz} = 0$ )

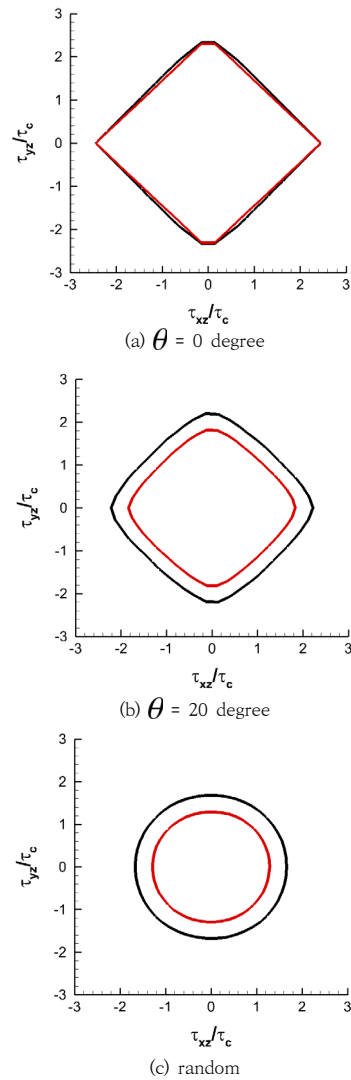


Fig. 4. Upper and lower yield stresses locus on the shear stress plane in  $(\tau_{yz}, \tau_{xz})$  space

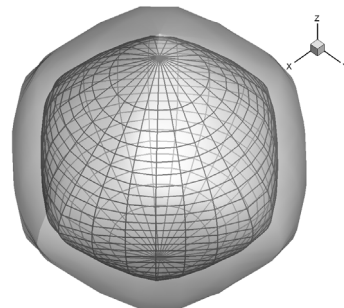


Fig. 5. 3-D upper and lower yield surfaces in  $(\tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{xz})$  space for  $\sigma_x - \sigma_z = \sigma_y - \sigma_z = 0$  with  $\theta = 20$  degree

### 2.3 하계 항복응력 (lower yield stress) 계산

다음으로는 Sachs 에 의해 제안된 등응력 (equal stress) 가정을 이용하여 다결정 금속의 항복응력을 계산하고자 한다. Sachs 는 모든 결정립자에 대하여 동일한 응력을 제안하였다. 따라서 결정립 간의 응력 평형은 만족되나 변형률은 부정합 현상을 나타낸다.

다결정 전체에 대한 소성일은 다음과 같다.

$$\dot{W} = N \dot{\epsilon}_{ij} \sigma_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^1 \sigma_{ij} + \dot{\epsilon}_{ij}^2 \sigma_{ij} + \dots \quad (5)$$

$$= (\dot{\epsilon}_{ij}^1 + \dot{\epsilon}_{ij}^2 + \dots) \sigma_{ij}$$

한 개의 결정입자 당 평균 소성일은

$$\dot{w} = \dot{\epsilon}_{ij} \sigma_{ij} = \frac{1}{N} (\dot{\epsilon}_{ij}^1 + \dot{\epsilon}_{ij}^2 + \dots) \sigma_{ij} \quad (6)$$

평균 소성 변형률 속도를 Schmidt factor를 이용해 표현하면

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\gamma} \bar{\mu}_{ij} = \frac{1}{N} (\dot{\gamma} \mu_{ij}^1 + \dot{\gamma} \mu_{ij}^2 + \dots) \quad (7)$$

여기서  $\mu_{ij}^k$ 는 k-번째 결정입자의 가장 우호적인 슬립 시스템의 Schmidt factor 이고  $\bar{\mu}_{ij}$ 는 전체 다결정의 평균 Schmidt factor이다. 따라서 결정입자 하나 당의 평균 소성일은

$$\dot{w} = \dot{\epsilon}_{ij} \sigma_{ij} = \dot{\gamma} \bar{\mu}_{ij} \sigma_{ij} \quad (8)$$

만약

$$\frac{1}{N} (\mu_{ij}^1 + \mu_{ij}^2 + \dots) \sigma_{ij} = \bar{\mu}_{ij} \sigma_{ij} < \tau_c \quad (9)$$

이라면 소성일은 0이 되고 탄성변형이 발생한다.

따라서 주어진 단위 벡터 크기의 응력 방향  $\sigma_{ij}$ 에 대하여 하계항복응력의 크기를

$$s = \frac{\tau_c}{\bar{\mu}_{ij} \sigma_{ij}} \quad (10)$$

으로 정의할 수 있다. 주어진 응력의 방향을 5차원 상의 단위벡터  $\sigma_{ij}$ 라 하고 크기를 s라고 하면 하계항복응력은  $s \sigma_{ij}$ 이다.

결정방향의 분산 각도  $\theta$ 가 0도, 20도, 무작위 각도인 경우에 대하여 하계항복응력을  $\pi$ -평면 상에서 상계 항복응력과 비교하면 Fig. 3와 같다. 각각의 경우에서 하계 항복 곡선은 상계 항복 곡선 내부에 위치함을 볼 수 있다.

한편 항복응력면을 전단응력 공간에 표시할 수도 있다. 주응력 3차원 공간 대신 전단응력 2차원 공간  $(\tau_{xz}, \tau_{yz})$ 에 항복응력 면을 표현하면 Fig. 4와 같다. 이

경우도 마찬가지로 상계응력 면 내부에 하계 항복응력 면이 존재함을 볼 수 있다. 전단응력 공간에서는 분산 각도가 증가함에 따라 항복면이 점차 원형에 접근하고 그 반경은 점차 감소함을 볼 수 있다. Fig. 5에 3차원 전단 응력 공간상에서 상계항복면과 그 내부에 존재하는 하계 항복면을 비교하였다.

### 2.4 다항식 항복함수와 비교

위에서 계산된 결정의 항복면은 Taylor 가정 또는 Sachs의 가정을 적용한 상계 또는 하계 항복응력면이다. 실제 유한요소해석에서는 이러한 항복응력을 항복함수로 전환한 2차 또는 4차의 항복함수가 사용된다. 이러한 예로는 Hill's quadratic yield function[1]과 Gotoh의 4차 항복함수가 있다[2]. 단결정 또는 그에 가까운 금속의 경우, 항복면이 Fig. 6에서 보는 바와 같이 모서리가 날 카로운 다면체를 형성한다. Fig. 6의 항복면은 Taylor 가정을 이용한 상계항복면이다. 이러한 실제 결정의 항복면을 유한요소해석에 활용하기 위하여 최소자승법 (least square method)에 의한 근사화를 거쳐 다항식 형태의 항복함수로 변환하게 된다. 본 논문에서는 Zhou 등[3]이 사용한 4차함수를 이용하였다. 이 경우 Fig. 7에서 보는 바와 같이 오목한 (concave) 부분을 가지는 부드러운 항복면이 얻어지게 된다. Fig. 7의 항복면은 Fig. 6에 보여진 결정모델의 항복면과 약간의 차이를 나타낸다. 한편 항복함수가 볼록함수가 아닌 경우 유한요소 해석에서 해가 발산하거나 불안정하게 되므로 볼록하지 않은 항복함수는 볼록화 과정 (convexification) 을 필요로 한다[10].

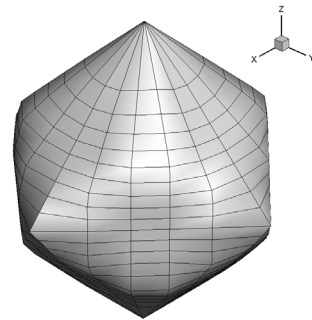


Fig. 6. 3-D yield surface in  $(\tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{xz})$  space for  $\sigma_x - \sigma_z = \sigma_y - \sigma_z = 0$  with  $\theta = 0$  degree

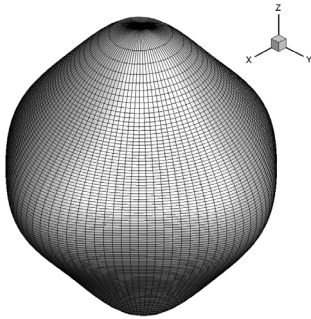


Fig. 7. Least-square fitted 3-D yield surface of Fig. 6 in  $(\tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{xz})$  space for  $\sigma_x - \sigma_z = \sigma_y - \sigma_z = 0$  with  $\theta = 0$  degree

### 3. 결론

본 연구의 결론은 다음과 같다.

1. Taylor의 이론과 Sachs의 이론을 이용하여 면심 입방 금속의 상계 및 하계 항복응력을 집합조직의 분산 정도에 대하여 예측할 수 있다.
2. 단결정에 가까운 집합조직의 항복면은 모서리가 날 카로운 다면체 형태를 나타낸다.
3. 다항식 형태의 항복함수를 이용하여 다결정 금속의 항복면을 근사할 경우 항복면은 실제 보다 모서리가 부드러워지고 오목한 (concave) 면을 가질 수 있으므로 요한요소 해석에 적용할 경우 주의가 요구된다.

### References

[1] R. Hill, *Mathematical theory of plasticity*, Oxford University Press, 1950, pp. 318-334.

[2] M. Gotoh, "A theory of plastic anisotropy based on a yield function of fourth order (plane stress state)--I, *Int. J. Mech. Sci.*, Vol. 19, pp.505-512, 1977  
DOI: [https://doi.org/10.1016/0020-7403\(77\)90043-1](https://doi.org/10.1016/0020-7403(77)90043-1)

[3] Y. Zhou, J.J. Jonas, L. Szabo, A. Makinde, M. Jain, S.R. MacEwen, "Incorporation of an anisotropic (texture-based) strain-rate potential into three-dimensional finite element simulations", *Int. J. Plasticity*, Vol. 13, pp.165-181, 1997  
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0749-6419\(97\)00006-5](https://doi.org/10.1016/S0749-6419(97)00006-5)

[4] U.F. Kocks, "Kinematics and kinetics of plasticity", *Texture and Anisotropy*, U.F Kocks, C.N. Tome, H.R. Wenk Ed. 1998, pp. 326-418.

[5] H.J. Bunge, *Texture Analysis in Material Science*.

Butterworths, 1982, pp. 42-46.

[6] Ph Lequeu, P. Gilormini, F. Montheillet, B. Bacroix, J.J. Jonas, "Yield surfaces for textured polycrystals - I. Crystallographic approach", *Acta Metall.* Vol. 35, No. 2, pp.439-451, 1987.  
DOI: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(87\)90250-1](https://doi.org/10.1016/0001-6160(87)90250-1)

[7] G.I. Taylor, "Plastic strain in metals", *J. Inst. Met.* Vol. 62, p. 307, 1938.

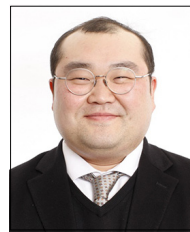
[8] J.F. Bishop, R. Hill, "A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face centred metal", *Phil Mag.* Vol. 42, pp.1298-1307, 1951  
DOI: <https://doi.org/10.1080/14786444108561385>

[9] P. Van Houtte, A. Van Bael, J. Winters, "The incorporation of texture-based yield loci into elasto-plasti finite element programs", *Textures and Microstructures*, Vol. 24, pp.255-272, 1995  
DOI: <https://doi.org/10.1155/TSM.24.255>

[10] W. Tong, M. Alharbi, "Comparative evaluation of non-associated quadratic and associated quartic plasticity models for orthotropic sheet metals", *Int. J. Solids Structures*, Vol. 128, pp.133-148, 2017  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.08.025>

진 두 한(Doohan Jin)

[정회원]



- 2005년 9월 : 한국기술교육대학교 메카트로닉스공학부 (공학사)
- 2008년 2월 : 한국기술교육대학교 메카트로닉스공학 (공학석사)
- 2018년 8월 : 한국기술교육대학교 메카트로닉스공학 (공학박사)
- 2017년 5월 ~ 현재 : 주식회사 타드 책임연구원

<관심분야>

기계공학, 기계설계, 광학

양 승 용(Seung-Yong Yang)

[정회원]



- 1994년 2월 : 서울대학교 기계설계학과 (공학석사)
- 2000년 5월 : 브라운 대학교 공학부 (공학박사)
- 2002년 5월 ~ 2006년 2월 : 한국철도기술연구원 선임연구원
- 2006년 3월 ~ 현재 : 한국기술교육대학교 기계공학부 교수

<관심분야>

소성역학, 유한요소해석