

혼합물의 응고문제에 대한 확장된 해석해

정재동* · 유호선** · 이준식***

(1997년 7월 24일 접수)

An Extended Analytical Solution for the Mixture Solidification Problem

J. D. Chung, H. Yoo and J. S. Lee

Key Words : Mixture Solidification(혼합물 응고), Analytical Solution(해석해), Segregation(편석), Volume Contraction Induced Flow(체적수축유동)

Abstract

This paper deals with an extended analytical solution for the mixture solidification problem, in which temperature is inherently coupled with the solute transport due to the presence of volume contraction induced flow. A new exact solution to the energy equation accounting for the convection effect in the melt is successfully derived, which allows the present analysis to cover a high initial superheating. Difference in properties between the solid and liquid phases is rigorously incorporated into the model equations in the solid fraction weighted form. Taking advantage of linearized correction factors, a systematic and easy-to-implement algorithm for determining the solidus and liquidus positions is introduced, which proves not only to converge stably but also to be very efficient. For a specific case, the present results show excellent agreements with the existing solution. The effect of convection in the melt becomes appreciable with increasing the initial superheating. It is revealed that variable properties in the mushy region significantly affect the solidification behaviors. The present study is also capable of resolving the interaction between microsegregation and macrosegregation.

기 호 설 명

C : 농도	m : 액상선 기울기
c : 비열	P : 계수
F : 질량플럭스	R : 계수
f : 고상분율	T : 온도
h : 엔탈피	t : 시간
k : 열전도계수	U : 무차원속도, $u/\sqrt{a_i t}$
k_p : 평형분배계수	u : 속도
L : 잠열	x : 길이방향좌표

*회원, 서울대학교 터보동력기계연구센터

**회원, 숭실대학교 기계공학과

***회원, 서울대학교 기계공학과

그리스문자

α : 열확산계수

- β : 미시편석인자
- δ : 상경계면위치
- ϕ : 대표변수
- η : 상사변수, $x/\sqrt{4\alpha t}$
- λ : 상사변환된 상경계면 위치, $\delta/\sqrt{4\alpha t}$
- ρ : 밀도
- ω : 상경계면 위치에 대한 보정치

상첨자

- \sim : 고상에 대한 액상의 물성치 비
- n : 반복과정에서 새로운 값

하첨자

- 0 : 초기치
- eut : 공정
- i : 미시적 상경계면
- l : 액상
- L : 액상선
- m : 머시
- s : 고상
- S : 고상선
- W : 벽면

1. 서 론

혼합물의 응고과정에 대한 해석은 열 및 물질전달 분야에 있어서 중요한 관심사중의 하나이며 이에 관한 다수의 연구가 수행되어 왔다. 근래에 개발된 연속체모델이나 체적평균기법과 같은 수치해석 방법은 상경계면의 성장거동, 열농도대류, 재용해, 거시편석 등 혼합물의 응고에 수반되는 거시적 특성의 정성적 예측에 유용함이 이미 확인된 바 있다.⁽¹⁾ 또한 미세조직의 형태, 결정구조내의 역확산 등 미시적 특성까지 해석에 포함시키기 위한 노력도 지속적으로 진행되고 있다.^(2, 3)

수치모델의 개발에 있어서 문제가 되는 요소 중의 하나는 결과의 정량적 검증에 필요한 적절한 기준이나 비교대상이 부족한 점이다. 발표된 실험자료는 측정상의 제약이나 실험조건 및 물성치의 불확실성으로 인하여, 가용한 해석해는 극도의 단순화로 인하여 수치해와 직접 비교가 가능한 경우는 별무하기 때문이다. 수치모델의 검증방법을 예측결과와 실제 현상의 일치도 및 정립된 모델방정식에

대한 해 자체의 타당성으로 구분할 때,⁽⁴⁾ 정밀하게 측정된 실험결과가 전제되어야 하는 전자는 유보하더라도, 적어도 후자는 엄밀하게 검토되어야 하며 제한된 경우에 대한 해석해와의 비교가 유력한 수단이다. 이때 해석해는 수치모델이 지향하는 핵심적인 특성이 어느 정도 반영된 것이어야 한다. 예를 들어 혼합물의 응고모델을 검증하기 위해서 순수물질에 대한 해석해는 무의미하며 혼합물 응고의 특징인 온도와 농도의 연계성이 고려된 해석해가 필요하다.

혼합물 응고에 대한 해석해는 복잡한 수치모델의 검증을 위한 이론적 기준으로서 유용할 뿐만 아니라 그 자체가 특정한 경우에 대한 응고특성의 예측에 적용될 수 있기 때문에 다양한 형태로 유도되어 왔다.⁽⁵⁻⁷⁾ 특히 최근에 발표된 두 연구^(4, 8)에서는 기존의 해에 내포된 문제점과 적용한계의 체계적인 보완을 시도하였다. 정재동등⁽⁸⁾은 머시내 물성치의 고상분율에 따른 변화가 고려된 상사해를 구하고 고·액상의 물성치차이가 응고거동에 상당한 영향을 미친다는 사실을 규명하였다. 상경계면의 위치를 효율적으로 결정하는 방법도 제시하였으나, 모델방정식에 대한 수치적 처리를 최소화하고자 용질의 거시적 이동을 배제하고 액상농도를 상평형관계에 의존하였다. 한편 Voller⁽⁴⁾는 머시내 열 및 농도의 연계성을 가시화하기 위하여 체적수축유동에 의한 용질의 이동이 고려된 상사해를 제시하였다. 열농도대류가 억제되는 조건하에서 방향성응고에 나타나는 체적수축유동에 의한 거시편석⁽⁹⁾을 예측할 수 있으며 근사적이지만 역확산까지 포함되었기 때문에 상당히 의미 있는 결과이다. 그러나 이 연구는 액상영역내 대류항의 무시, 고·액상간 물성치차이의 무시(밀도차 제외), 상경계면 위치결정의 비효율성 등 적지 않은 문제점을 내포하고 있다.

본 연구는 상기 두 해석의 문제점을 상호보완하고 한계를 확장함으로써 보다 완결된 또는 일반화된 형태의 해석해를 제시하는 데 목적이 있다. 기본적으로 상경계면 위치결정이 효율적인 정재동등⁽⁸⁾의 해석방법을 도입하되 체적수축유동을 추가하는 형태로 접근한다. 액상영역내 대류항과 연관된 Voller⁽⁴⁾의 근사해를 대체할 엄밀해를 추구할 것이다. 종합적으로 확장된 해석해는 다음과 같은 특징을 갖게 된다.

- (1) 온도장과 농도장의 연계
- (2) 머시내 물성치의 고상분율에 따른 변화

(3) 고·액상의 밀도차로 인한 체적수축유동의 존재

- (4) 용질의 미시적 이동(유한한 역확산)
 (5) 용질의 거시적 이동
 (6) 공정온도이하의 냉각조건

2. 해 석

2.1 모델링

해석대상은, Fig. 1에 개략적으로 도시되었듯이, 열농도대류가 없는 일차원 반무한영역에 있어서 혼합물의 비정상 응고과정이다. 초기에 균일한 농도 C_0 인 액체가 액상선 보다 ΔT 만큼 높은 온도로 유지되다가 $t > 0$ 에서 공정온도이하인 벽면온도 T_w 로 냉각되면 응고가 시작된다. 응고의 진행에 따라 시스템 내에는 고상선 및 액상선을 경계로 고체, 머시 및 액상영역이 존재하며, 해석은 상경계면의 위치, 각 영역내의 온도분포, 머시내 농도 및 고상분율의 분포를 결정하는 것이다. 이러한 문제에 해석적으로 접근하기 위하여 다음과 같은 가정을 도입하였다.

(1) 고상은 주상 수지상구조로서 벽면에 고정되어 있다.

(2) 머시내 검사체적의 ($10^{-2} \sim 10^{-3}m$ 크기) 온도와 액상농도는 균일하다.

(3) 검사체적내 미시적인 고·액상의 경계면에서는 열역학적 평형이 유지된다. 따라서 상평형선으로부터 $C_{si} = k_p C_l$ 인 관계가 성립한다.

(4) 액상선은 선형이다.

(5) 거시적 용질확산은 무시한다. 일반적인 혼합물의 Lewis수는 $10^2 \sim 10^4$ 으로서 물질확산은 열확산에 비하여 무시될 수 있다.⁽¹⁰⁾

(6) 검사체적내에서의 미시적 용질확산(역확산)은 해석적 처리가 용이한 Clyne과 Kurz⁽¹¹⁾의 모델에 의존한다.

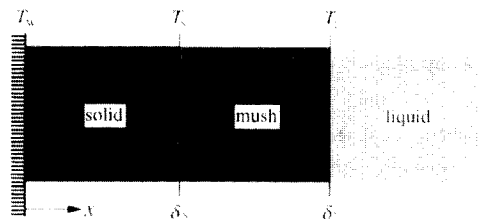


Fig. 1 Schematic of the present mixture solidification model.

(7) 머시 및 순수액상 영역에는 고·액상의 밀도차이로 인한 체적수축유동이 존재한다.

(8) 각상에 대한 물성치는 일정하지만 고·액상의 값이 일치할 필요는 없다. 따라서 머시내 물성은 다음과 같이 고상분율의 함수로 표현된다.^(6~8)

$$\phi_m = f\phi_s + (1-f)\phi_l \quad (1)$$

가정 (1)~(7)은 Voller의 연구⁽⁴⁾와 동일하며 가정 (8)은 물성치변화를 고려하기 위하여 추가되었다.

상기 가정 및 상평형관계에 근거하여 유도된 각 영역에서의 지배방정식은 아래와 같다.^(4, 8) 고상 및 액상영역의 농도는 균일하며, 머시영역에서는 체적수축유동으로 인하여 수지상간 액체 (interdendritic liquid)는 연속방정식을 만족하여야 한다.

고상영역 ($0 < x < \delta_s$)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_s \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2)$$

머시영역 ($\delta_s < x < \delta_l$)

$$\frac{\partial u}{\partial x} = (1 - \bar{\rho}) \frac{\partial f}{\partial t} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} [f\bar{\rho}\bar{c} + (1-f)] \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + \left[\bar{\rho}T(\bar{c}-1) \right. \\ \left. - \frac{L}{c_l} \bar{\rho} \right] \frac{\partial f}{\partial t} = \alpha_l \frac{\partial}{\partial x} \left[\{fk + (1-f)\} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} [(1-f) + \beta f k_p \bar{\rho}] \frac{\partial C_l}{\partial t} + u \frac{\partial C_l}{\partial x} \\ = (1 - k_p) C_l \bar{\rho} \frac{\partial f}{\partial t} \end{aligned} \quad (5)$$

$$C_l = -(T - T_m) / m \quad (6)$$

액상영역 ($\delta_l < x < \infty$)

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_l \frac{\partial T}{\partial x} = \alpha_l \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (7)$$

또한 지배방정식의 해를 구하는데 필요한 초기 및 경계조건은 다음과 같다.

$$T = T_0 \text{ at } t = 0 \quad (8)$$

$$C_l = C_0 \text{ at } t = 0 \quad (9)$$

$$\delta_s = \delta_l = 0 \text{ at } t = 0 \quad (10)$$

$$T = T_w < T_{eut} \text{ at } x = 0 \quad (11)$$

$$u = (1 - f_{eut})(1 - \bar{\rho}) \frac{d\delta_s}{dt} \text{ at } x = \delta_s \quad (12)$$

$$T = T_s \text{ at } x = \delta_s \quad (13)$$

$$k_m \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_m - k_s \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_s = F_s (h_m - h_s) \quad (14)$$

$$= -\rho_s (1 - f_{eut}) [(c_l - c_s) T_s + L] \frac{d\delta_s}{dt} \text{ at } x = \delta_s$$

$$T = T_L \text{ at } x = \delta_L \quad (15)$$

$$k_m \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_m - k_l \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_l = F_l (h_m - h_l) = 0 \quad (16)$$

at $x = \delta_L$

$$C_l = C_L \text{ at } x = \delta_L \quad (17)$$

$$T = T_0 \text{ as } x \rightarrow \infty \quad (18)$$

여기서 h 는 엔탈피로서 고·액상에 대하여 각각

$$h_s = c_s T \quad (19)$$

$$h_l = c_l T + L \quad (20)$$

로 정의된다.

식 (2)~(18)의 해를 구하는데 있어서 상경계면의 위치 $\delta_s(t)$ 및 $\delta_L(t)$ 는 각각 식 (14)와 (16)을 만족하도록 결정된다. 머시영역에 대한 농도방정식 (5)에서 좌변 제1항의 β 는 수지상고체내의 용질확산의 정도를 나타내는 미시편석인자로서 $\beta=0$ 및 1은 각각 Scheil식 및 lever rule에, $0 < \beta < 1$ 은 유한한 역확산에 대응한다.⁽¹¹⁾ 식 (6)은 상평형에 의한 액상농도와 온도의 관계이다. 액상영역의 속도는 일정하며 액상선에서의 연속조건 ($u = u_l$)으로부터 구해진다. 고상분율은 액상선에서는 연속인 반면 고상선에서는 공정이 생성되는 경우 불연속이다. 즉 고상선에서는 순수물질의 경우와 유사하게 일정한 온도를 유지하면서 공정분율 (f_{eut}) 만큼의 고체가 식 (14)와 같이 잠열을 방출하면서 응고한다. 따라서 식 (3)에 의해 고상선에서는 속도 u 도 불연속이며 그 값은 식 (12)로부터 결정된다.

2.2 상사변환

수학적으로 식 (2)~(18)의 엄밀해는 존재하지 않는다. 기존의 또는 본 연구에서 지칭하는 '해석해'는, 공식화된 편미분방정식에 대한 직접적인 수치해석을 수행하는 대신, 적절한 변수변환 등을 이용하여 가능한 한 해석적 처리를 행한 다음 얻어지는 대수방정식 또는 상미분방정식의 해를 의미한

다.^(4, 7, 8)

해석적 처리를 위하여 잘 알려진 상사변수 $\eta (= x/\sqrt{4\alpha t})$ 를 도입하여 모델방정식을 변환하였다. 고상내의 온도분포는 이미 확립되어 있다.^(4, 6-8)

$$\frac{T - T_w}{T_s - T_w} = \frac{\text{erf}(\eta/\sqrt{\bar{\alpha}})}{\text{erf}(\lambda_s/\sqrt{\bar{\alpha}})} \text{ for } 0 < \eta < \lambda_s \quad (21)$$

반면 체적수축유동이 고려된 액상내 온도분포는 발표된 바 없다. 이것이 Voller⁽⁴⁾가 초기과열이 작다는 가정 하에 식 (7) 좌변의 대류항을 무시하고 근사해를 사용한 이유로 보인다. 그러나 사실은 별다른 어려움없이 경계조건 식 (15)와 (18)을 갖는 식 (7)의 엄밀해는 다음과 같이 유도될 수 있다.

$$\frac{T - T_0}{T_L - T_0} = \frac{\text{erfc}(\eta - U_l)}{\text{erfc}(\lambda_L - U_l)} \text{ for } \lambda_L < \eta < \infty \quad (22)$$

여기서 무차원속도 U_l 은

$$U_l = u_l/\sqrt{\alpha_l t} \quad (23)$$

로 정의된다. 식 (21)과 (22)에서 변환된 상경계면의 위치 $\lambda (= \delta/\sqrt{4\alpha t})$ 및 U_l 은 아직 미정인 상태이다.

머시영역의 속도, 고상분율, 온도 및 액상농도는 상호 결합된 형태이기 때문에 상사변환을 하여도 엄밀해는 존재하지 않으며 다음과 같은 비선형 연립 상미분방정식으로 귀결될 뿐이다.

$$\frac{dU}{d\eta} + (1 - \bar{\rho}) \eta \frac{df}{d\eta} = 0 \quad (24)$$

$$\frac{dT}{d\eta} \left[\{ f\bar{k} + (1-f) \} \frac{dT}{d\eta} \right] = -2[f\bar{\rho}\bar{c} + (1-f)] \eta \frac{dT}{d\eta} + 2U \frac{dT}{d\eta} - 2 \left[\bar{\rho} T (\bar{c} - 1) - \frac{L}{c_l} \bar{\rho} \right] \eta \frac{df}{d\eta} \quad (25)$$

$$(1 - k_p) \bar{\rho} (T - T_m) \eta \frac{df}{d\eta} = \left[(1-f) + \beta f k_p \bar{\rho} \right] \eta \frac{dT}{d\eta} - U \frac{df}{d\eta} \quad (26)$$

여기서 식 (26)은 상평형관계 식 (6)을 이용하여 농도를 온도로 변수변환한 것이다. 즉 식 (24)~(26)의 해로서 $U(\eta)$, $f(\eta)$ 및 $T(\eta)$ 가 결정되면 식 (6)에서 $C(\eta)$ 를 얻을 수 있다.

상경계면의 위치를 결정하기 위하여 식 (21) 및 (22)에서 고상측 및 액상측 온도구배를 구하여 경계조건 식 (14) 및 (16)의 상사변환된 형태에 각각 대입하면 다음과 같이 정리된다.

$$\left(\frac{dT}{d\eta}\right)_{\lambda_s} = \frac{1}{f_{eut}\bar{k} + (1-f_{eut})} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi\bar{a}}} \frac{\bar{k}(T_s - T_w)}{\operatorname{erfc}(\lambda_s/\sqrt{\bar{a}})} \exp(-\lambda_s^2/\bar{a}) - 2\lambda_s\bar{\rho}(1-f_{eut}) \left\{ (1-\bar{c})T_s + \frac{L}{C_l} \right\} \right] \quad (27)$$

$$\left(\frac{dT}{d\eta}\right)_{\lambda_L} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{T_0 - T_L}{\operatorname{erfc}(\lambda_L - U_i)} \cdot \exp[-(\lambda_L - U_i)^2] \quad (28)$$

여기서 λ_s^2 및 λ_L^2 는 각각 머시층에서 접근한 고상선 및 액상선의 위치이다.

2.3 해석방법

식 (24)~(28)을 동시에 만족하는 λ_s , λ_L , U (η), $f(\eta)$ 및 $T(\eta)$ 를 구하기 위해서는 수치적 처리가 불가피하며, 그 효율성은 해석해의 존재의의를 결정하는 관건이다. 만일 식 (2)~(18)에 대한 직접적인 수치해석에 비교될 정도의 노력 및 시간이 필요하다면 해석적 접근의 의미는 퇴색될 수밖에 없다. 이러한 관점에서 전술한 Voller⁽⁴⁾의 방법은 복잡한 단계를 거치면서도 수렴이 반드시 보장되지 않는 단순한 반복법으로 보인다. 본 연구에서는 정재동 등⁽⁸⁾에 의해 전도가 지배적인 문제의 해석을 위하여 개발된 방법을 체적수축유동이 포함된 형태로 수정하여 적용하고자 한다.

해석방법의 핵심은 상경계면의 위치결정에 있다. 본 연구에서는 식 (27)과 (28)을 만족하는 상경계면의 위치를 효율적으로 결정하기 위하여 다음과 같은 선형 보정식을 사용하였다.

$$\lambda_s^2 = \lambda_s(1 + \omega_s) \quad (29)$$

$$\lambda_L^2 = \lambda_L(1 + \omega_L) \quad (30)$$

여기서 $\lambda'_L = \lambda_L - U_i$ 이다. 보정치 ω 는 식 (29)와 (30)을 각각 식 (27)과 (28)에 대입하고 Taylor급수 전개함으로써 유도된다

$$\omega_s [P_1 P_4 + 2P_2 \lambda_s^2/\bar{a} + 2P_3 \lambda_s \operatorname{erfc}(\lambda_s/\sqrt{\bar{a}}) + 2P_1 P_3 \lambda_s] = -P_4 \operatorname{erfc}(\lambda_s/\sqrt{\bar{a}}) + P_2 - 2P_3 \lambda_s \operatorname{erfc}(\lambda_s/\sqrt{\bar{a}}) \quad (31)$$

$$\omega_L \exp(-\lambda_L^2) \left[4R\lambda_L^2 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \lambda'_L \left(\frac{dT}{d\eta}\right)_{\lambda_L} \right] = 2R \exp(-\lambda_L^2) - [1 - \operatorname{erfc}(\lambda'_L)] \left(\frac{dT}{d\eta}\right)_{\lambda_L} \quad (32)$$

로부터 계산된다. 여기서 계수 P_i ($i=1, \dots, 4$) 및

R 은 각각 다음으로 정의된다.

$$P_1 = \frac{2\lambda_s}{\sqrt{\pi\bar{a}}} \exp(-\lambda_s^2/\bar{a}) \quad (33)$$

$$P_2 = \frac{2\bar{k}(T_s - T_w)}{\sqrt{\pi\bar{a}}} \exp(-\lambda_s^2/\bar{a}) \quad (34)$$

$$P_3 = \bar{\rho}(1-f_{eut}) \left[(1-\bar{c})T_s + \frac{L}{C_l} \right] \quad (35)$$

$$P_4 = [f_{eut}\bar{k} + (1-f_{eut})] \left(\frac{dT}{d\eta}\right)_{\lambda_s} \quad (36)$$

$$R = (T_0 - T_L)/\sqrt{\pi} \quad (37)$$

구체적인 해석순서를 정리하면 다음과 같다.

- (1) 상경계면 위치 λ_s 및 λ_L 을 가정한다.
- (2) 가정된 머시영역에 대하여 식 (24)~(26)의 수치해를 구한다.
- (3) 단계 (2)에서 계산된 온도구배 $\left(\frac{dT}{d\eta}\right)_{\lambda_s}$ 및 $\left(\frac{dT}{d\eta}\right)_{\lambda_L}$ 가 각각 식 (27)과 (28)을 만족하는가 확인한다.

(4) 만족하지 않으면 식 (31)과 (32)로부터 구한 ω_s 및 ω_L 을 각각 식 (29)와 (30)에 대입하여 새로운 λ_s 및 λ_L 을 결정할 후 단계 (2)~(4)를 반복한다.

- (5) 만족하면 종료한다.

이 방법은 체계적이며 적용이 용이할 뿐만 아니라 체적수축유동이 존재하는 경우에도 상경계면 위치의 초기 가정치에 무관하게 급속히 수렴한다. 참고로 하나의 경우에 대한 계산시간은 586급 PC (150MHz)에서 수초에 불과하다.

3. 결과 및 고찰

해석결과와 고찰을 위한 계산은 물성치가 잘 확립되어 해의 검증에 편리하며 실용적으로도 의미 있는 Al-Cu 합금에 대하여 수행하였다. 실제 계산에 사용된 물성치는 비교대상인 Voller⁽⁴⁾의 연구로부터 인용하였으며 Table 1에 요약하였다.

3.1 타당성 검토

본 연구의 타당성을 검토하기 위하여 Table 1에 수록되었듯이 Voller의 해⁽⁴⁾와 같은 조건인 액상의 초기과열도(ΔT)가 극히 낮으며 밀도를 제외한 모든 물성치가 일정한 경우에 대하여 결과를 비교하

Table 1 Properties of Al-Cu alloys and conditions used in the present study.

Property / Condition	Value		Unit
	solid	liquid	
c	1000	1000(960) *	J/kgK
k	100	100(180) *	W/mK
ρ	3120	2400	kg/m ³
L	4 × 10 ⁵		J/kg
T_{eut}	821.2		K
T_m	921.2		K
k_p	0.15		—
m	-340		K
T_w	621.2		K
ΔT	1.0		K
C_0	0.05		kg/kg

* Properties in parentheses are converted values based on Ref. (13).

였다. 미시적인 역확산의 양극한인 lever rule($\beta=1$) 및 Scheil식($\beta=0$)에 대하여 고·액혼합물의 농도분포를 도식한 것이 Fig. 2이다. 혼합물농도를 비교한 이유는 Voller⁽⁴⁾가 제시한 유일한 계산결과일 뿐만 아니라 체적수축유동에 의한 거시편석의 지표로서 공학적인 관심의 대상이기 때문이다. 역산확의 정도에 무관하게 양자는 완벽하게 일치한다. 이것은 모델방정식의 유도 및 해석과정에 오류가 없었음을 의미한다.

위에서 제시된 혼합물농도 \bar{C} 는 검사체적에 대한 용질보존원리에 의해

$$\bar{C} = \frac{\rho_l(1-f)C_l + \rho_s f \langle C_s \rangle}{\rho_l(1-f) + \rho_s f} \quad (38)$$

로 계산된다. 여기서 $\langle C_s \rangle$ 는 역확산이 고려된 수지상고체의 평균농도이며, Clyne과 Kurz⁽¹¹⁾의 미시편석 모델로부터 $f \langle C_s \rangle$ 는 다음식으로 표현된다.

$$\frac{d[f \langle C_s \rangle]}{d\eta} = -\frac{k_p}{m} \left[(T - T_m) \frac{df}{d\eta} + \beta f \frac{dT}{d\eta} \right] \quad (39)$$

3.2 확장된 해석해의 특징

서론에서 언급하였듯이 본 연구는 기존의 해석해를 확장하기 위하여 시도되었다. 해석과정에서 부

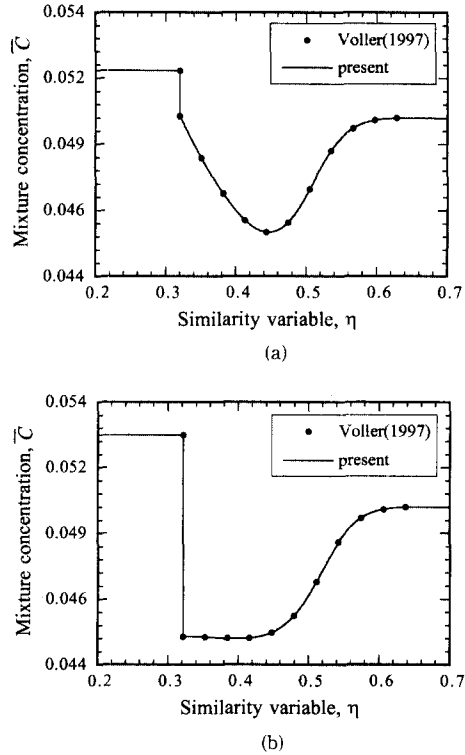


Fig. 2 Comparison of the average concentration profile between the present and available solutions under the condition of constant properties and a small initial superheating: (a) for the lever rule, (b) for the Scheil limit.

분적으로 기술된 바 있으나, 확장된 해의 특징을 보다 강조하기 위하여 발표된 연구 중에서는 가장 포괄적인 Voller⁽⁴⁾의 해와 비교고찰하기로 한다. 체적수축유동에 의한 거시편석을 고려한 점, 미시편석을 해석적인 모델에 의존한 점, 상사변환을 도입하여 상미분방정식을 유도하고 수치적 처리를 거쳐 최종해에 도달한 점 등 기본적인 접근방법은 같다. 그러나 다음의 세가지 점에 있어서는 양자 사이에 분명한 차이가 있다.

첫째, Voller⁽⁴⁾는 액상영역에 대한 에너지방정식에서 대류항을 무시하고 상사해의 유효범위를 초기 과열도가 작은 경우로 국한하였다. 또한 Al-Cu합금에 대한 수치해⁽¹²⁾와의 비교를 통하여 초기과열도가 비교적 클 때도 대류항의 기여는 별무하다고 주장하였다. 그러나, 대류항이 미치는 영향의 정도와 무관하게, 머시영역과 인접하는 액상영역에 대하여 체적수축유동을 선택적으로 고려한 점 즉 유

등을 불연속으로 해석한 것은 납득하기 곤란하다. 더욱이 본 연구에서 식 (22)로 제시되었듯이 대류항이 포함되어도 액상영역의 온도분포에 대해서는 엄밀해가 존재한다. 아마도 엄밀해의 유도에 실패하였거나 액상속도(U_l)의 포함이 액상선의 위치결정에 어떤 문제를 초래하였을 것으로 유추된다.

둘째, 표현의 편의라는 표면상의 이유로 Voller⁽⁴⁾는 밀도차를 제외한 다른 물성치의 고·액상간 차이를 고려하지 않았다. 실제로 고·액상이 공존하는 머시영역내의 물성치 변화는 혼합물 응고분야에서 관심사중의 하나였으며, 물성치의 고상분율 의존성은 이미 확립된 사실이다.^(6~8) 또한, 본 연구에서 분명하듯이, 물성치의 변화가 전반적인 해석 과정에 추가적인 어려움을 초래하지도 않는다. 그럼에도 불구하고 이를 배제한 사실상의 이유는 상경계면의 위치결정을 위한 수치적 처리와 연관되었기 때문일 가능성도 있다.

셋째, 상경계면의 위치결정을 위하여 Voller⁽⁴⁾가 개발한 복잡한 알고리즘은 비효율적이며 수렴도 불확실하다. 사실 본 저자들이 그의 알고리즘을 있는 그대로 재현하였을 때 해를 얻는 데 상당한 어려움을 경험하였다. 이에 비하여 본 연구에서 식 (29)와 (30)의 형태로 도입한 위치보정 방법은, 보정치를 얻기 위하여 식 (31) 및 (32)와 같은 다소의 연산은 필요하지만, 보다 체계적이며 안정적인 수렴을 보장한다. 상경계면의 위치는 머시내 온도, 농도, 고상분율 및 속도장과 연계되어 있기 때문에 그것의 결정방법은 혼합물 응고해석의 핵심요소이다. 즉 상경계면 위치결정을 위한 수치적 알고리즘의 효율성은 전체해석의 유용성과 직결된 중요한 문제이다. 다만 양자의 직접적인 성능비교는 프로그램 기법과도 연관된 문제이므로 곤란하다.

결과적으로 본 연구는 해의 적용범위와 해석방법에 있어서 거의 모든 기존의 해석적 연구를 포함하는 보다 일반화된 형태이다. 사실상 본 연구는 혼합물 응고문제의 해석에 있어서 열평형적분이나 상사변환과 같은 해석적 방법이 적용 가능한 한계까지 도달한 것으로 보인다.

3.3 제 인자의 영향

구체적인 계산결과로부터 전절에서 정성적으로 고찰한 내용을 정량적으로 확인하기로 한다. 먼저 초기과열도의 변화에 따라 액상영역의 대류항을 포함한 경우와 무시한 경우에 대응하는 액상선 위치

Table 2 The effect of convection in the melt on the liquidus position as a function of the initial superheating.

Superheating [K]	Liquidus position		Relative error[%]
	Including U_l	Neglecting U_l	
1	0.6256	0.6281	0.40
10	0.5633	0.5668	0.62
20	0.5376	0.5419	0.80
40	0.5044	0.5100	1.11
80	0.4594	0.4668	1.61

(λ_l)를 Table 2에서 비교하였다. 액상선 위치는 액상영역내 대류의 영향에 가장 민감한 값임에도 불구하고 양자의 차이는 그리 크지 않다. 그 이유는 미약한 체적수축유동(후술될 Fig. 4(b) 참조)과 대단히 큰 Al-Cu합금의 열전도계수로 인하여 액상영역의 열전달은 전도에 의해 주도되기 때문이다. 열전도계수가 작고 밀도차는 큰 혼합물의 경우 차이가 상당하리라 예상되나 인위적인 결과의 제시는 피하였다. 그러나 과열도에 비례하여 차이가 증가하는 Table 2의 결과는 대류의 역할을 확인하기에 충분하다. 영향의 크기와 무관하게 보다 중요한 점은 앞에서 확인된 바와 같이 해석상의 추가적인 어려움이 없음에도 대류항이 고려된 엄밀해 대신 무시된 근사해를 사용할 어떤 이유도 없다.

전도에 의해 지배되는 혼합물의 응고과정에서 머시내 물성치 변화의 영향이 현저하다는 사실은 이미 잘 알려져 있다.⁽⁸⁾ 체적수축유동이 존재할 때 그 영향을 확인하기 위하여 대포적으로 $\beta=1$ 인 경우 Table 1의 조건과 Al-Cu합금의 실제 물성치의 비 $\tilde{k}=1.8$ 및 $\tilde{c}=0.96$ ⁽¹³⁾(Table 1에서 괄호 안의 값)에 대한 계산결과를 Fig. 3에 도시하였다. 물성치 변화는 평균농도(Fig. 3(a)), 온도 및 고상분율(Fig. 3(b))의 분포 모두에 대하여 정성적인 경향은 그대로 유지하지만 정량적으로는 현저한 차이를 초래한다. 고·액상사이의 열전도계수 및 비열의 비가 크지 않음에도 나타난 이러한 결과는 물성치의 비가 매우 큰 경우(예를들어 $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ 혼합물) 더욱 현저하리라 쉽게 예상된다.⁽⁸⁾ 거시적인 물성치 변화와 미시적인 역확산은 거의 무관하므로 $\beta=0$ 인 경우에도 비슷한 경향을 보이며 결과를 별도로 제시하지는 않았다.

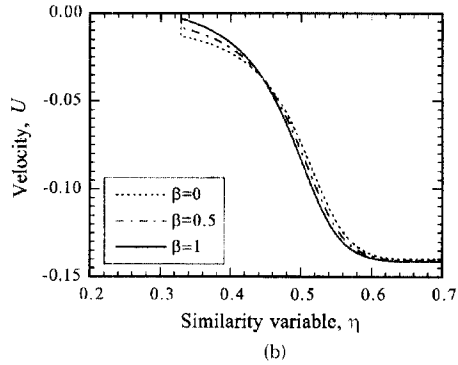
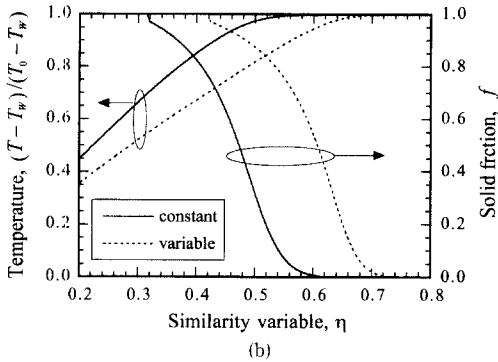
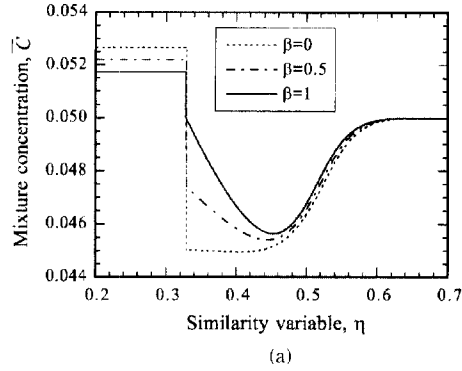
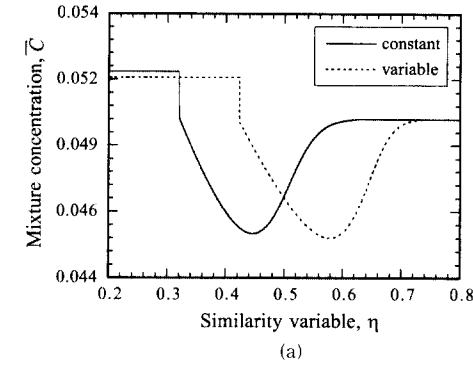


Fig. 3 The effect of variable properties for the lever rule on: (a) the average concentration profile, (b) temperature and the solid fraction profiles.

Fig. 4 The effect of microsegregation parameter on: (a) the average concentration profile (b) the liquid velocity profile.

마지막으로, 역화산의 정도에 따른 평균농도와 체적수축유동의 속도분포를 Fig.4에 도시하였다. 미시편석인자 β 의 변화에 따라 상경계면의 위치변화는 거의 없으나 거시편석은 현저한 차이를 보인다. 특히 고상선에 인접한 미시영역내의 평균농도 (\bar{C})의 차이가 큰 이유는 식 (38)에서 β 가 클수록, 액상농도(C_l)는 비슷하지만, 고상평균농도 ($\langle C_s \rangle$)는 크고 고상분율의 증가에 따라 $\langle C_s \rangle$ 의 \bar{C} 에 대한 기여가 크기 때문이다. 이러한 거시편석과 역화산의 밀접한 관계는 혼합물 응고에 있어서 유한한 역화산을 취급할 수 있는 본 연구의 유용성을 현시적으로 보여준다. 한편 수지상간 액체의 유동속도는 식 (24)에서 자명하듯이 주로 미시내 고상분율의 분포와 관련된 β 의 변화에는 둔감하다. 고상선에서 U 가 불연속인 것은 전술하였듯이 공정응고 때문이며, 액상선부근에서의 점근적인 거동 ($U \rightarrow U_l$)은 액상영역에서 $U_l=0$ 으로 취급한 Voller⁽⁴⁾의 연구에 내포된 문제점을 재확인시켜 준

다. 다만 Table 2에서 비교하였듯이 U_l 의 영향이 크지 않은 것은 계산된 조건에 대하여 U_l 의 절대값이 λ_l 에 비하여 작고 따라서 식 (22)로 표현된 액상영역내 온도분포의 변화가 별로 없기 때문이다.

4. 결 론

본 연구는 혼합물의 응고분해에 대한 기존의 해석적 접근에 도입되었던 단순화 가정을 완화함으로써 보다 확장된 또는 일반화된 해석해를 구하기 위하여 시도되었다. 유도된 해는 농도장파 연계된 온도장, 미시내 물성치의 변화, 고·액상의 밀도차로 인한 체적수축유동과 이에 따른 용질의 거시적 이동, 수지상고체내의 유한한 역화산, 공정온도이하의 냉각조건 등 혼합물 응고해석의 중요한 요소를 포괄한다.

제한된 경우에 대하여 가용한 해석해와의 비교를 통하여 본 연구의 타당성을 검증하였다. 특히 상사

변환을 적용하여 체적수축유동의 효과가 포함된 액상영역의 온도분포에 대하여 기존의 근사해를 대체할 수 있는 새로운 엄밀해를 성공적으로 유도하였다. 이에 따라 액상영역의 초기과열도가 큰 경우까지 해석해의 적용범위가 확장될 수 있다. 또한 머시내 물성치의 고상분율 의존성이 엄밀히 고려된 모델방정식을 공식화하고, 물성치 변화의 응고거동에 대한 효과가 적지 않음을 규명하였다. 선형보정을 이용하여 혼합물 응고해석에서 핵심적인 역할을 하는 상경계면 위치결정 방법을 체계화하였으며 그 수렴성이 우수함을 확인하였다. 본 모델은 간단함에도 불구하고 미시적인 역확산이 거시편식에 미치는 영향을 구체적으로 파악할 수 있는 해상력이 있다.

혼합물 응고의 기본특성이 모두 고려된 점, 완결된 해인 점, 해석방법이 효율적인 점 등으로부터 본 해석해는 일차원 응고거동의 예측에 직접 적용될 수 있음은 물론 다차원의 복잡한 수치모델의 검증과 실험결과가 부여된 조건에서 이겨낸 정도를 평가하는 이론적 기준으로 유용하리라 기대된다.

참고문헌

- (1) Beckermann, C. and Viskanta, R., 1993, "Mathematical Modeling of Transport Phenomena During Alloy Solidification," *Appl Mech Rev*, Vol. 46, pp. 1~27.
- (2) Ni, J. and Incropera, F. P., 1995, "Extension of the Continuum Model for Transport Phenomena Occurring During Metal Alloy Solidification — II. Microscopic Considerations," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, pp. 1285~1296.
- (3) Schneider, M. C. and Beckermann, C., 1995, "A Numerical Study of the Combined Effects of Microsegregation, Mushy Zone Permeability and Flow, Caused by Volume Contraction and Thermosolutal Convection, on Macrosegregation and Eutectic Formation in Binary Alloy Solidification," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, pp. 3455~3473.
- (4) Voller, V. R., 1997, "A Similarity Solution for the Solidification of a Multicomponent Alloy," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, pp. 2869~2877.
- (5) Muehlbauer, J. C., Hatcher, J. D., Lyons, D. W. and Sunderland, J. E., 1973, "Transient Heat Transfer Analysis of Alloy Solidification," *J. Heat Transfer*, Vol. 95, pp. 324~331.
- (6) Worster, M. G., 1986, "Solidification of an Alloy from a Cooled Boundary," *J. Fluid Mech.*, Vol. 167, pp. 481~501.
- (7) Braga, S. L. and Viskanta, R., 1990, "Solidification of a Binary Alloy Solution on a Cold Isothermal Surface," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 33, pp. 745~754.
- (8) 정재동 · 유호선 · 이준식 · 노승탁, 1996, "열전도에 의해 지배되는 이성분혼합물의 응고문제에 대한 해석해," 대한기계학회논문집(B), 제20권 제11호, pp. 3655~3665.
- (9) Chen, J. H. and Tsai, H. L., 1993, "Inverse Segregation for a Unidirectional Solidification of Aluminum-Copper Alloys," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, pp. 3069~3075.
- (10) Ni, J. and Beckermann, C., 1991, "A Volume-Averaged Two-Phase Model for Transport Phenomena During Solidification," *Metall. Trans. B*, Vol. 22B, pp. 349~361.
- (11) Clyne, T. W. and Kurz, W., 1981, "Solute Redistribution during Solidification with Rapid State Diffusion," *Metall. Trans. A*, Vol. 12A, pp. 965~971.
- (12) Swaminathan, C. R. and Voller, V. R., 1997, "Towards a General Numerical Scheme for Solidification Systems," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, pp. 2859~2868.
- (13) Basu, B. and Sekhar, J. A., 1989, "Modeling of Multidimensional Solidification of an Alloy," *Metall. Trans. A*, Vol. 20A, pp. 1833~1845.