

〈論 文〉

머시영역의 비등방성을 고려한 2성분혼합물의 응고과정

유 호 선*

(1992년 5월 18일 접수)

Solidification Process of a Binary Mixture with Anisotropy of the Mushy Region

Hoseon Yoo

Key Words : Mixture Solidification(혼합물응고), Mushy Region(머시영역), Anisotropic Permeability(비등방성 투과율), Double-Diffusive or Thermosolutal Convection(이중확산 또는 열농도대류), Columnar Dendritic Crystal(주상수지상정), Macrosegregation(조대편석)

Abstract

This paper deals with the anisotropy of the mushy region during solidification process of a binary mixture. A theoretical model which specifies a permeability tensor in terms of principal values is proposed. Also, the governing equations are modified into convenient forms for the numerical analysis with the existing algorithm. Some test computations are performed for solidification of aqueous ammonium chloride solution contained in a square cavity. Results show that not only the present model is capable of resolving fundamental characteristics of the transport phenomena, but also the anisotropy significantly affects the interdendritic flow structure, i.e., double-diffusive convection and macrosegregation patterns.

기 호 설 명

B	: 체적력벡터	(K_{ξ}, K_{η})	: (ξ, η) 방향 투과율주치
C	: 농도	$K^{(2)}$: 투과율텐서
c	: 비열	k	: 열전도율
Δc	: 비열차($c_l - c_s$)	k_p	: 상평형분리계수
D	: 물질확산계수	L	: 잠열 또는 용기크기
f	: 질량분율 또는 함수	p	: 압력
g	: 체적분율 또는 중력가속도	R	: 투과율비
h	: 엔탈피	T	: 온도
(i, j)	: (x, y) 방향 단위벡터	t	: 시간
K	: 평균투과율	(u, v)	: (x, y) 방향 속도성분
K_o	: 투과율계수	V	: 속도벡터
		(x, y)	: 좌표축
		β_s	: 농도팽창계수
		β_T	: 열팽창계수

*정회원, 경상대학교 기계공학과

(ξ, η)	: 주축방향
μ	: 점도
ρ	: 밀도
ϕ	: 혼합물 물리량

하첨자

e	: 공정상태
i	: 초기상태
l	: 액상
m	: 고·액혼합물
ref	: 기준상태
s	: 고상

1. 서 론

물질의 응고과정은 주조, 연속주조, 결정성장, 유리제조 등 공학적인 재료가공과정뿐 아니라 해양 결빙, 지각변동 등 자연현상과도 밀접하게 연관되어 있다. 여기에 관계되는 상변화물질의 대부분은 합금 또는 불순물혼입의 형태로 혼합물이며, 그 응고과정은 순수물질의 경우와는 상이하다. 순수물질이 분명한 상변화면을 형성하면서 일정한 온도(응점)에서 응고됨에 비하여, (비공정)혼합물의 응고에서는 상당한 온도범위에 걸쳐 2상이 공존하는 머시영역(mushy region)이 존재하고 용질의 용해도가 용매의 고·액상에 따라 달라진다. 머시영역은 액체가 포화된 다공성물질과 유사한 미세구조로서 그 내부에서 유체유동이 일어나며 인접한 순수 액체영역과 유동의 상호작용도 있다. 용해도 차이는 머시영역내에 농도구배를 발생시키므로 자연대류는 온도구배뿐 아니라 농도구배에 의해서도 발달된다. 이러한 이중확산 또는 열농도대류는 응고과정의 열 및 물질전달에 큰 영향을 미치며 그 중요성은 점차 인식되고 있다.⁽¹⁾

최근 재료가공과정과 관련하여 혼합물의 응고과정을 이론적·수치적으로 규명하기 위한 해석방법의 개발에 연구관심이 집중되고 있으며 다양한 형태의 접근이 시도되고 있다. 이 이유는 공정제어를 위하여 응고과정의 정확한 예측에 대한 지속적인 수요가 있을 뿐 아니라 응고에 수반되는 복잡한 열 및 물질전달현상을 실험적으로 관찰 또는 측정하기가 용이하지 않기 때문이기도 하다. 구체적인 예로서, 합금주물의 주요 결함인자인 성분의 불균일성 측면적은 응고과정의 천이현상에 기인하지만 용융상

태가 고온이며 불투명하기 때문에 그 원인을 실험적으로 완전히 규명하기는 거의 불가능하다. 제시된 해석방법에 의한 일부 예측결과는 합금유사혼합물(metal alloy analogs)을 이용한 실험자료와 경향은 비교적 잘 일치하지만 정량적으로는 아직 상당한 차이가 있는 실정이다.^(2,3) 불일치의 원인으로서는 모델에 도입된 단순화과정등 제 요소가 열거되고 있으며 머시영역의 방향성은 그중의 하나이다.^(2,4) 급속응고가 아닌 혼합물의 응고시 형성되는 머시영역의 결정구조는 응고초기와 말기를 제외하면 대부분 주상수지상정(columnar-dendritic crystal) 형태로서 그 미세구조 자체가 방향성을 갖고 있다. Darcy의 법칙을 적용하여 머시영역에서의 유동현상을 기술할 때, 방향성은 투과율의 비등방성으로 표시되며 투과율이 전영역에 걸쳐 천이현상에 상당한 영향을 미친다는 점을 감안하면, 비등방성이 응고특성의 변화에 기여하리라 예상할 수 있다. 따라서, 비등방성을 해석에 포함하여 그 효과를 검토 또는 적어도 해석에서 안전하게 무시될 수 있는지를 확인하는 것은 이론예측방법의 개선을 위하여 중요한 점이 분명하다. 사실 투과율의 비등방성을 보여주는 실험결과가 다수 발표되었음에도 불구하고^(5,6) 이를 이론해석에 고려한 연구는 진부하였다.

본 연구에서는 2성분혼합물의 응고과정해석에 머시영역의 비등방성을 포함시킬 수 있는 모델을 정립하고 실제계산을 수행하여 비등방성이 천이현상 및 조대편석(macrosegregation)에 미치는 영향을 보이고자 한다. 이 과정에서 기본방정식의 변형을 통한 수치해석의 효율화에 관해서도 취급할 것이다. 해석대상은 비등방성의 효과가 잘 나타날 수 있으면서 해석은 용이한 2차원 정사각형용기로 선택하였다. 대상혼합물은 실용적으로 관심있는 금속합금과 결정구조가 유사하며 물성치가 비교적 잘 확립된 염화암모늄수용액($\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$)이다. 특히 아공정염화암모늄수용액은 부력비(buoyancy factor)가 -1.4 정도로서 온도와 농도구배에 의한 부력이 크기는 비슷하지만 작용방향이 반대이기 때문에 이중확산대류의 전형적인 형태를 고찰하기에 편리한 물질이다.

2. 해 석

2.1 기본방정식

혼합물의 응고과정을 기술하는 수학적 모델은

금속재료분야에서 단순화된 형태로 시작되어^(7,8) 최근에는 상호결합된 유체유동, 열 및 물질전달을 취급할 수 있는 체계화된 형태로 발전하고 있다. 2상이 공존하는 무시영역을 기술하는 방법에 따라 연속체모델,⁽⁹⁾ 국소체적평균모델⁽¹⁰⁾ 등이 있으며 각각에 대한 접근방법, 기본특징 등은 문헌⁽⁴⁾에서 개관하고 있다. 모델에 따라 개념적인 차이는 있으나 공식화된 결과 즉 일반화된 천이방정식은 본질적으로 유사한 형태이다. 천이방정식은 아래와 같고, 액·액2상혼합물에 대한 일반화된 질량보존, 운동량보존, 열 및 물질전달식으로 구성되며 구체적인 유도과정은 문헌⁽⁹⁻¹²⁾를 참조하기 바란다. 본 연구의 경우 비등방성을 고려하기 위하여 투과율은 텐서량 $\mathbf{K}^{(2)}$ 가 된다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}_m) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{V}_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}_m \mathbf{V}_m) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{V}_m) + \rho \mathbf{B} - \frac{\mu \mathbf{V}_m}{\mathbf{K}^{(2)}} \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho h_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}_m h_m) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho C_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}_m C_m) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) \quad (4)$$

여기서, 2상혼합물에 대한 물리량 및 물성치는 다음과 같이 정의된다.

$$\phi = f_s \phi_s + f_l \phi_l \quad (\phi = \mathbf{V}_m, h_m, C_m) \quad (5)$$

$$\rho = g_s \rho_s + g_l \rho_l \quad (6)$$

$$k = g_s k_s + g_l k_l \quad (7)$$

$$\mu = \rho_l \mu_l / \rho \quad (8)$$

$$D = f_l D_l \quad (9)$$

식(1~9)는 응고된 고체가 정지상태($\mathbf{V}_s=0$)이며, 연속적이고 변형되지 않는 미세구조를 갖는다는 조건하에서 유도된 것이다. 이밖에 도입된 가정은 (i) 2차원 층류유동, (ii) 비압축성 Newton유체, (iii) 국소열역학적 평형 즉 $T = T_s = T_l$ 및 $C_s = k_p C_l$, (iv) 고상내의 거시적인 물질전달은 무시($D_s=0$), (v) 열모세관효과 무시, (vi) 미소교란(분산유속, 액체과냉 등)의 유동장에 대한 영향 무시 등이다. 식(2)의 우변 제3항은 Boussinesq근사를 도입하면

$$\rho \mathbf{B} = \rho_l g \mathbf{j} [\beta_T (T - T_{ref}) + \beta_S (C_l - C_{l, ref})] \quad (10)$$

로 표시된다. 이때 T_{ref} , $C_{l, ref}$ 는 각각 응고초기상

태를 기준으로 하였다.

질량분율과 체적분율 사이에는

$$f_s = g_s \rho_s / \rho \quad (11)$$

$$f_l = g_l \rho_l / \rho \quad (12)$$

의 관계가 있으므로, 결국 5개의 미분방정식(\mathbf{V}_m 은 2차원 벡터) 및 상평형관계로부터 결정되어야 할 종속변수는 \mathbf{V}_m , p , h_m (또는 T), C_m 및 f 이다.

2.2 방정식의 변형

일반화된 에너지방정식 식(3)은 엔탈피와 온도를 동시에 포함하고 있기 때문에, 문제의 완결(closure)을 위해서는 혼합물의 상평형선도(phase equilibrium diagram)로부터 h_m , T , f 사이에 구체적인 하나의 관계가 정의되어야 한다. 이 정의에 따라 에너지방정식의 종속변수, 식의 형태 및 해를 구하는 과정이 달라지며 주로 2종류의 개념에 의존하여 왔다. 용해잠열을 포함한 전혼합물엔탈피를 종속변수로 취하는 Bennon과 Incropera⁽¹³⁾의 방법에서는 엔탈피와 온도사이에 직접적인 관계가 없기 때문에 온도는 상평형관계로부터, 질량분율은 온도관계식으로부터 구해진다. 한편, Voller 등⁽¹⁴⁾이 제안한 방법에서는 온도에 비례하는 현열엔탈피를 종속변수로 취하기 때문에 질량분율은 상평형선도에서 결정된다. 이들 사이에 본질적인 차이는 없으나 기존의 수치해석방법⁽¹⁵⁾을 이용하기 위하여 에너지방정식을 표준형태로 변형할 때 생성항에 $\nabla \cdot \rho (h_l - h_m)$, $\mathbf{V}_m \cdot \nabla \cdot [(k/c_s) \nabla (h_s - h_m)]$ 과 같은 유사대류(convection-like) 또는 유사확산항이 나타나기 때문에 이산화가 용이하지 못할 뿐 아니라 수치해가 불안정화할 가능성이 있다.⁽¹³⁾

이러한 문제점은 엔탈피의 정의를 수정함으로써 피할 수 있다. 즉, 엔탈피를

$$h = c_l T \quad (13)$$

로 정의하면 대응하는 고상, 액상, 혼합물의 엔탈피는 각각

$$h_s = h - \Delta c T \quad (14)$$

$$h_l = h + L \quad (15)$$

$$h_m = h + f_l L - f_s \Delta c T \quad (16)$$

로 표시된다. 식(1)의 양변에 L 을 곱하여 식(16)과 함께 식(3)에 대입하면

$$\frac{\partial (\rho h_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}_m h_m) = \nabla \cdot [(k/c_l) \nabla h_m]$$

$$+ (\Delta c/c_i) \frac{\partial}{\partial t} (f_s \rho h_m) + L \frac{\partial}{\partial t} (f_s \rho) \quad (17)$$

와 같이 유사대류 및 유사확산항이 없으며 잠열의 효과가 현시적으로 표시된 식을 구할 수 있다. 여기서, 고·액상의 비열 및 잠열은 온도와 농도에 무관하다고 가정하였다. 식(17)은 $V_s=0$ 인 경우에 국한된 것이기는 하지만 연속주조를 제외한 대부분의 주조과정 해석에 편리하게 적용될 수 있다.

식(4)로 표시된 물질전달방정식은 상평형관계를 이용하기 쉽게

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho C_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V_m C_i) \\ & = \nabla \cdot (\rho D \nabla C_i) + \frac{\partial}{\partial t} [f_s \rho C_i (1 - k_p)] \end{aligned} \quad (18)$$

와 같은 표준형태로 변환된다. 응고가 완료($f_s=1$)된 영역에서는 물질전달이 없다고 가정하였기 때문에 비록 액상농도를 종속변수로 취하였지만 식(18)은 전영역에 대하여 유효하다.

2.3 투과율 모델

운동량방정식 식(2)의 투과율텐서 $\mathbf{K}^{(2)}$ 를 구체화하기 위해서는 투과율모델이 필요하다. 실험적연구에 근거하여 수지상정상이 유동방향의 주축을 일차 팔(primary arms)의 평행 및 직교방향으로 취할 때⁽⁶⁾ 일방향응고를 제외하면 일반적으로는 수지상정의 성장방향이 반드시 부여된 냉각조건이나 좌표축과 일치하지는 않는다. 본 연구에서는 수지상정이 순간 국소온도구배의 역방향으로 성장한다고 가정한다. 사실 이 가정은 응고과정동안 열 및 물질전달이 확산만에 의하여 지배될 경우 유효하다고 알려져 있으나⁽¹⁶⁾ 열농도대류가 수반될 때에도 유효한지는 미확인된 상태이다. 2차원적으로 임의의 시간에서 국소온도구배에 직교 및 평행한 방향을 (ξ, η) 라 하면(Fig. 1) (ξ, η) 는 $\mathbf{K}^{(2)}$ 의 주축과 일치한다. 순간 국소등온선을 $f(x, y)=0$, 투과율텐서의 주치(principal values)를 각각 K_ξ, K_η 라 하면 식(2) 우변의 Darcy법칙에 의한 감쇠항은

$$\frac{\mu V_m}{\mathbf{K}^{(2)}} = \frac{\mu}{(1+f'^2)} \left[\left(\frac{f'^2}{K_\xi} + \frac{1}{K_\eta} \right) u + f' \left(\frac{1}{K_\xi} - \frac{1}{K_\eta} \right) v \right] \left[f' \left(\frac{1}{K_\xi} - \frac{1}{K_\eta} \right) u + \left(\frac{f'^2}{K_\eta} + \frac{1}{K_\xi} \right) v \right] \quad (19)$$

로 표시된다. 여기서, f' 은 df/dx 이다.

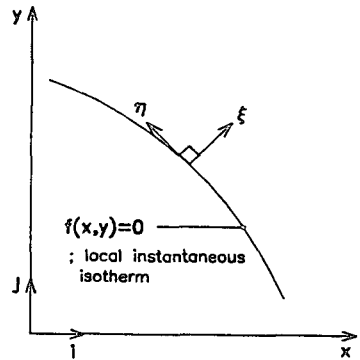


Fig. 1 Principal directions of the permeability tensor

식(19)에서 주치 K_ξ, K_η 는 실험적으로 결정되어야 하지만 가용한 실험식은 제한된 액체체적분율($0.19 < g_i < 0.66$)에 대해서만 성립한다.⁽⁶⁾ 그러나, 예를들어 초기상태 H_2O 의 농도가 0.7인 NH_4Cl-H_2O 의 경우, 전반적인 응고특성에 큰 영향을 미치는 공정응고 이전까지의 머시영역 액체체적분율은 약 0.8이상이므로 $0.8 < g_i < 1.0$ 의 범위에 대하여 실험식을 외삽, 적용하는 것은 곤란하다. 더우기 g_i 이 1에 접근할 때(투과율은 무한대로 접근) 천이현상에 미치는 영향이 현저하므로 g_i 의 전범위에 적용가능한 이론식의 도입하여야 하며, 본 연구에서는 Blake-Kozeny 경험식⁽⁷⁾

$$K = K_o [g_i^3 / (1 - g_i)^2] \quad (20)$$

을 사용한다. 여기서, 투과율계수 K_o 는 수지상정 팔간격의 함수로서 국소적인 응고조건에 의존하지만, NH_4Cl-H_2O 의 경우 상수로 취급될 수 있다.⁽¹⁷⁾ 비등방성을 고려하기 위하여 식(20)에 표시된 투과율의 대표값 K 는 주치의 기하평균이라 가정하고, 비등방성의 척도로서 투과율비 R 를 다음과 같이 도입하였다.

$$K = (K_\xi K_\eta)^{1/2} \quad (21)$$

$$R = K_\xi / K_\eta \quad (22)$$

물론 R 은 g_i 의 함수임이 분명하지만 전술하였듯이 필요한 g_i 값의 범위에 대하여 $R(g_i)$ 은 불명이므로, 실험자료를 외삽한 결과로부터 실제로 의미있는 R 값의 범위를 유추하여⁽⁶⁾ 등방성에 대응하는 1.0 및 비등방성인 0.5, 2.0을 계산을 위한 파라미터로 선정하였다. 이와 같은 방법으로 머시영역의 평균투과율은 일정하게 유지하면서 비등방성의 영향을 효과적으로 고찰할 수 있다.

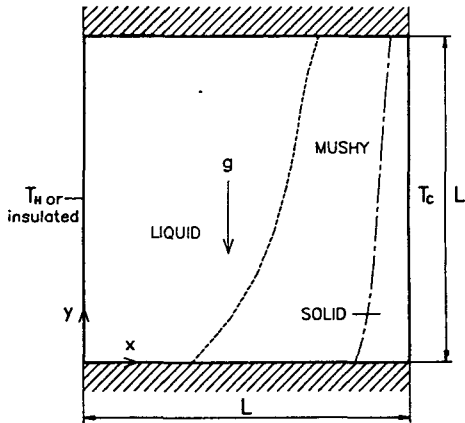


Fig. 2 Schematic diagram of the physical model

2.4 해석대상모델

구체적인 수치계산을 수행할 대상은 전술하였듯이 잘 알려진 형상으로서, (18) Fig. 2에 표시하였듯이 최초에는 과열된 염화암모늄수용액이 균일한 초

기상태 T_H , C_i 로 용기내에 충전되어 있다. 상하벽은 단열되어 있으며, 시간 $t=0$ 에서 우벽의 온도를 T_C 로 낮추면 응고가 시작된다. 냉각온도 T_C 는 공정온도 T_e 보다 낮은 온도로서 시스템에는 고체, 머시, 액체영역이 공존한다. 좌벽의 조건은 초기온도 T_H 로 유지하는 경우 및 단열하는 경우를 취급하였다. 좌벽등온인 경우 응고는 정상상태까지 진행되며 이중확산 대류에 의한 응고과정중의 천이현상을 고찰하기 편리하다. 반면, 단열인 경우는 응고 완료시까지 과정이 진행되며 결과적인 편석현상을 고찰하기 편리하다. 계산에 사용된 시스템의 제원, 응고조건, 혼합물의 물성치(7,8,17,19)는 Table 1에 요약하였다. 한편, 해석결과에 큰 영향을 미치는 NH_4Cl-H_2O 의 상평형선도는 가능한 최근의 문헌(17)에서 인용하였으며 계재는 생략하였다. 상평형에서 초기상태가 아공정혼합물이기 때문에 NH_4Cl 을 용매로, H_2O 를 용질로 취급한다. 따라서, C 는 H_2O 의 농도이다.

고정격자계를 유지하면서 계산이 가능하도록 고액상사이의 밀도변화는 없다고 가정하였다. 밀도가 일정하고 벽면이 비투과성이므로 2경우에 대한 경계조건은 다음과 같다.

Table 1 Data used in this study

Initial and boundary conditions		
L	Cavity dimension [m]	0.0476
C_i	Initial concentration of H_2O	0.70
T_H	Initial and heated wall temperature [K]	307.5
T_C	Cooled wall temperature [K]	253.15
Thermophysical properties for NH_4Cl-H_2O sytem (7,8,17,19)		
	Solid	Liquid
Density [kgm^{-3}]	1077.73	1077.73
Specific heat [$Jkg^{-1}K^{-1}$]	1870	3249
Thermal conductivity [$Wm^{-1}K^{-1}$]	2.7	0.468
Diffusivity [m^2s^{-1}]	—	1.8×10^{-9}
Viscosity [$kgm^{-1}s^{-1}$]	—	1.3×10^{-3}
Latent heat [Jkg^{-1}]	3.138×10^5	
Thermal expansion coefficient [K^{-1}]	3.8321×10^{-4}	
Solutal expansion coefficient	0.25679	
Eutectic temperature[K]	257.75	
Eutectic concentration of H_2O	0.803	
Equilibrium partition coefficient k_p	0.0	
Permeability coefficient K_0	5.556×10^{-12}	

$$u=v=0; T=T_H / \frac{\partial T}{\partial x}=0; \frac{\partial C}{\partial x}=0 \text{ along } x=0 \tag{23}$$

$$u=v=0; T=T_C; \frac{\partial C}{\partial x}=0 \text{ along } x=L \tag{24}$$

$$u=v=0; \frac{\partial T}{\partial y}=0; \frac{\partial C}{\partial y}=0 \text{ along } y=0 \text{ and } L \tag{25}$$

2.5 수치계산

천이방정식은 검사체적근사에 의한 유한차분법으로 이산화하여 잘 알려진 축차적인 SIMPLER 알고리즘으로 해를 구하였다. (15) 정사각형용기내의 응고과정에 대한 수치해석은 수차 수행되어 왔으나 (12,18,20) 최적격자계를 선정하기는 쉽지 않다. 머시영역을 구성하는 미시적인 결정의 크기는 $10^{-5} \sim 10^{-4} m$ 정도로서 영역내에서 일어나는 현상을 거시적(평균적)으로 해석하기 위한 격자수는 다수일수록 유리하지만 과도한 계산시간이 소요되므로 적절한 제한이 불가피하다. 본 연구에서는 기발표된 계

산예, 용기의 크기, 응고특성의 해상정도 등을 고려하여 50×50격자계를 사용하였으며, 유동장을 보다 정확히 해석하기 위하여 벽면부근에 격자점을 집중배치하였다.

시간간격은 응고초기의 큰 온도구배를 고려하여 0.5초로 시작한 후 0.75, 1.0초로 증가시켰으며 각 시간스텝에서 수렴조건은 질량생성의 잔류량이 1.0×10^{-8} 이하로 하였다. 이상의 조건으로 실제시간 1초 시뮬레이션에는 CDC Cyber-205 supercomputer를 사용하여 약 10~20초의 계산시간이 소요되며 좌벽등온가열의 경우 2100초, 단열의 경우 2700초에서 종료하였다. 수치계산은 좌벽등온 및 단열조건 각각 $R=0.5, 1.0, 2.0$ 에 대하여 수행하였다.

3. 계산결과 및 고찰

3.1 이중확산대류

머시영역이 비등방이라도 천이현상 자체는 기본적으로 등방인 경우와 유사하리라 기대되므로 좌벽등온조건에 있어서 $R=1.0$ 인 경우에 대하여 이중

확산대류를 현상적으로 고찰한 후 비등방성에 따른 차이를 보이기로 한다. 천이현상에 대한 계산결과로는 유선, 등온선 및 등액상농도선으로 정리하였으며, 그림에서 굵은 점선은 액체-머시영역의 경계인 액상선(liquidus line)이다. 유동형태 및 강도의 변화를 비교하기 편리하도록 유동강도가 작은 반시계방향유선(점선)은 1.5×10^{-4} , 강도가 큰 시계방향유선(실선)은 7.5×10^{-4} 간격으로 도시하였다. 또한, 10개의 등간격으로 표시된 등온선과 등액상농도선은 각각 $(T-T_c)/(T_H-T_c)$, $(C_l-C_i)/(C_e-C_i)$ 로 무차원화된 것이다.

천이현상의 기본특성은 Fig. 3에 보인 시간에 따른 유동형태의 변화에서 고찰할 수 있다. 응고초기에는 우벽을 따라 형성된 머시영역내에서 농도부력이 열부력보다 우세하기 때문에 용해도차이의 결과로 생성된 고농도(H_2O 기준)액체가 머시영역내를 상향유동하여 용기상부에 박층을 만든다. 순수액체 영역에서는 농도구배가 극히 미약하므로 가열벽과 액상선의 온도차이에 의해 시계방향 열대류가 발달된다. 이때 상층은 저온임에도 고농도로 인한 액상선온도의 강하로 응고는 진행되지 않는다. 머시영

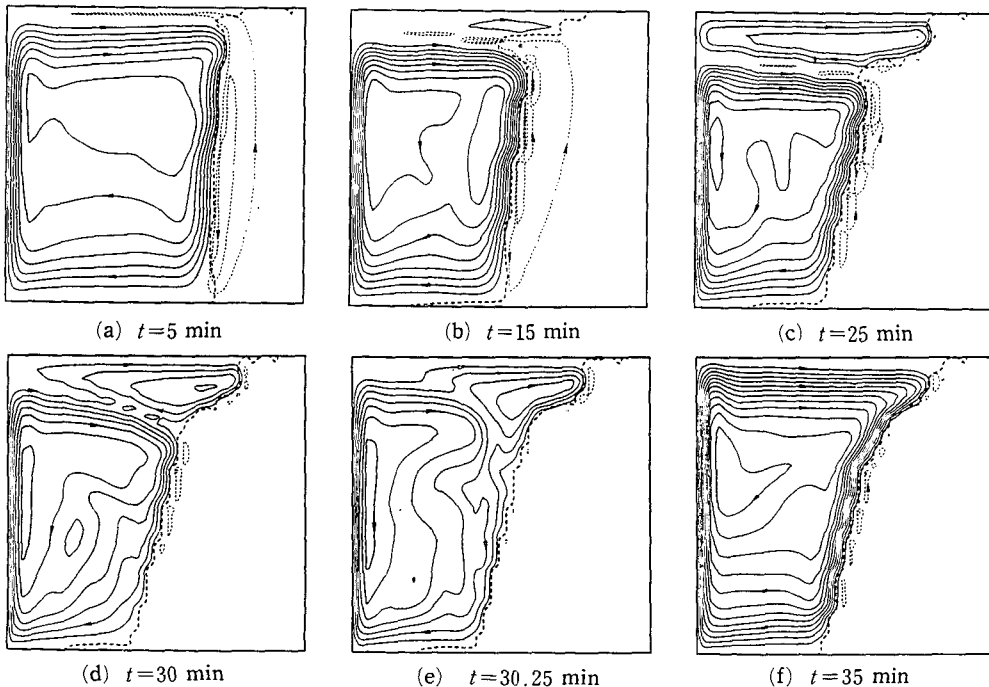


Fig. 3 Time evolution of the double-diffusive convection for the isotropic case with heated vertical wall :

역으로부터 지속적으로 고농도액체가 공급되어 상층의 수직두께는 시간에 따라 성장하며 상층저온고농도층과 고온저농도순수액체영역을 구분하는 이중확산경계면이 형성된다. 상층두께가 성장하면 상층내에도 열부력에 의한 재순환이 시작되어 온도 및 농도가 균일화됨은 물론 상층액상선을 따라 재용해가 일어난다. 시간이 경과할수록 상층으로 유입되는 수지상정사이유동은 농도구배의 감소로 크게 약화되는 반면 발달된 열대류에 의해 재용해는 가속되므로 상층의 농도는 감소한다. 한편, 하층액체와 인접 머시영역의 유동상호작용으로 하층농도는 증가하므로 상하층의 농도차이는 감소한다. 따라서, 하층 특히 가열벽에 인접한 열부력은 이중확산경계면을 지지하고 있는 농도성층력보다 우세하게 된다. 이 결과 경계면은 경사지며 점차 불안정화한다. 유동형태가 변화함에 따라 액상선을 따라 응고와 재용해는 계속되지만 정도는 미약하다. 결국 경

계면은 붕괴되고 전 액체영역은 열대류에 의해 하나의 재순환유동장화 한다.

이상과 같은 천이현상에 대한 예측결과는 비록 특정경우에 국한된 것이지만 이미 보고된 실험적 관찰과 정성적으로 잘 일치하고 있다.⁽¹⁸⁾ 특히, 이중확산대류의 발달, 경계면의 성장 및 붕괴, 유동형태의 변화추이, 재용해 등 혼합물응고의 기본특성을 충분히 보여주고 있으므로 본 모델은 비등방성의 영향규명에 적용될 수 있다고 판단된다. 구체적인 실험결과와의 비교 및 차이에 대한 검토는 문헌⁽²¹⁾에서 취급하고 있다.

3.2 천이현상에 대한 비등방성의 영향

전술하였듯이 비등방성은 투과율비 R (1.0 아닌)로써 해석에 반영된다. 대표적인 예로서 응고개시 20분후 $R=0.5, 1.0$ 및 2.0 에 대응하는 유선, 등온선, 등액상농도선을 비교(Figs. 4~6)하였다. 비

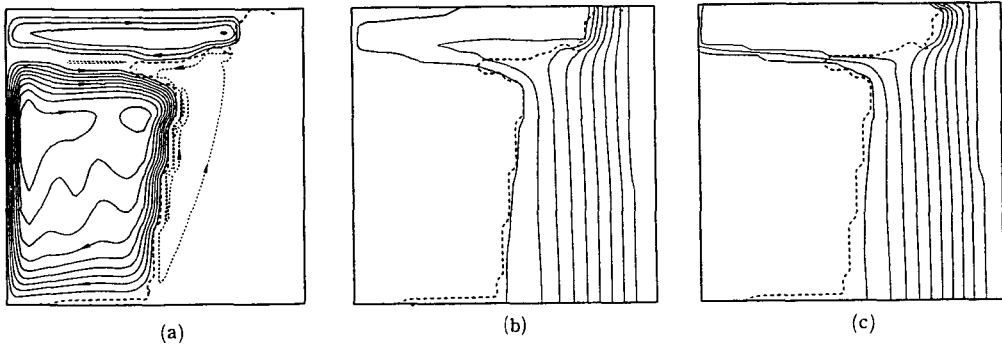


Fig. 4 Predicted results for $R=0.5$ with heated vertical wall at 20 min :

(a) streamlines (b) isotherms(equal increments) (c) liquid isocomposition-lines(equal increments)

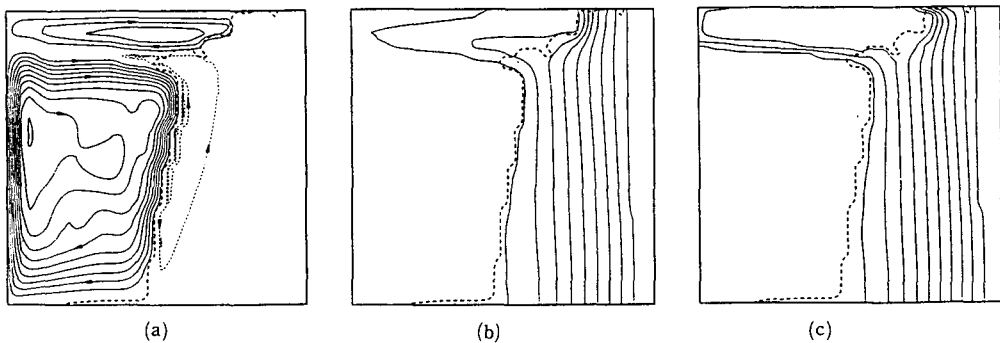


Fig. 5 Predicted results for $R=1.0$ with heated vertical wall at 20 min :

(a) streamlines (b) isotherms(equal increments) (c) liquid isocomposition-lines(equal increments)

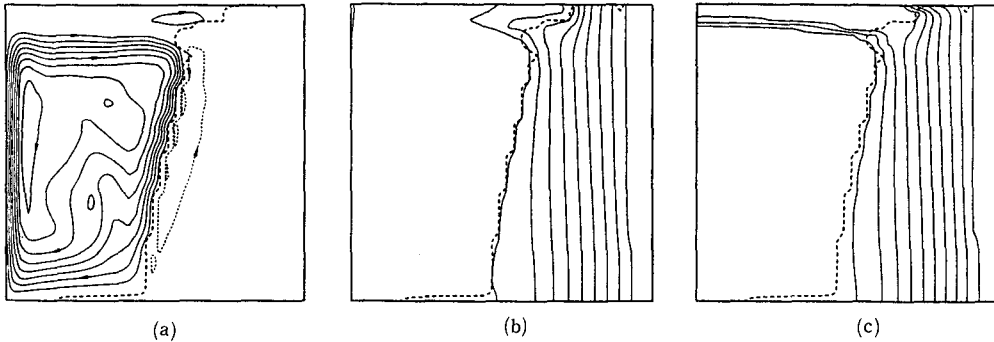


Fig. 6 Predicted results for $R=2.0$ with heated vertical wall at 20 min : (a) streamlines (b) isotherms(equal increments) (c) liquid isocomposition-lines(equal increments)

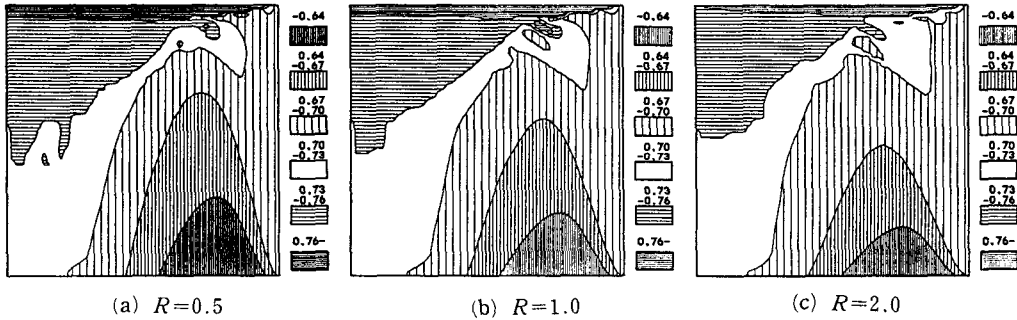


Fig. 7 Macrosegregation pattern for each case with insulated vertical wall at 45 min :

등방성은 전반적인 응고특성을 크게 변화시키는 것으로 나타났다. 즉, 투과율비가 작을수록 고농도상층의 두께가 증가하며 이에 따라 상층내의 재순환 유동도 잘 발달되고 있다. 이 결과 액상선의 형태에서 알 수 있듯이 상층부의 응고억제 또는 재용해 정도에 현저한 차이가 있게 된다. 상층의 형성은 수지상정사이 상향유동강도에 의존한다. 머시영역 내의 온도분포는 상부를 제외하면 대략 수직벽면과 평행이므로 투과율텐서의 주축은 근사적으로 좌표축과 일치하게 되며 주치 (K_x, K_y)는 (x, y)방향 투과율성분이 된다. 식(22)로부터 R 이 감소하면 K_y 가 증가하므로 수지상정사이 상향유동강도가 증대하고 결과적으로 상층성장은 촉진된다. 이 유동의 구동력은 반중력방향으로 작용하는 농도부력이므로 K_x 의 증가는 K_y 에 비하여 상향유동에 대한 영향은 상대적으로 작다.

3.3 조대편석

조대편석은 응고과정의 천이현상에 기인한 결과

로서 미세편석과는 달리 열처리 등 재료의 사후처리에 의해 개선이 불가능하다고 알려져 있으며 재료의 결함과 직결된 중요한 문제이다. 이론해석에서 조대편석은 결국 초기농도에 대한 고·액상 평균농도의 차이이며 좌벽단열조건에 대하여 비등방성의 조대편석에의 영향을 고찰하기 위하여 Fig. 7에 응고시작후 45분 경과시의 R 에 따른 평균농도를 도시하였다. 앞절에서 언급하였듯이 R 의 변화에 따라 근본적인 현상의 차이는 없다. 즉, 대략 용기의 우상에서 좌하로의 대각선 상부는 초기농도에 대하여 양의 편석, 하부는 음의 편석을 보여준다. 우벽에서부터 응고가 진행됨에 따라 머시영역 내에서 농도부력에 의해 상향유동한 고농도액체는 용기상부의 농도를 높이지만 좌벽단열로 인한 열부력의 시간에 따른 약화로 순수액체영역의 열대류가 미약하기 때문에 농도의 성층화는 그대로 유지된다. 다만, H_2O 농도 0.73이상 부분은 저온이지만 고농도로 인한 액상선온도의 강하로 현재까지 미응고된 부분이다(Fig. 8). 한편, 용기 우상부분의 불

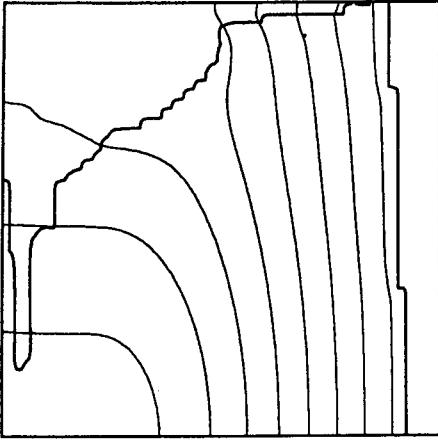


Fig. 8 Liquidus and isotherms corresponding to Fig. 7 for $R=1.0$

규칙적인 평균농도분포는 응고초기 농도부력에 의해 머시영역으로부터 상향유동하는 고농도액체의 유로일 뿐 아니라 그후 고농도에 따라 재용해가 일어나는 등 복잡한 현상에 기인한다.

비등방성의 영향은 편석의 정도로 나타났다. 투과율비 R 이 감소할수록 대각선하부 평균농도는 감소, 상부는 증가, 즉 편석은 심화된다. 또한, 초기 농도선(0.7)은 R 이 감소하면 높이는 증가, 폭은 감소한다. 이 사실로부터 대략 수직방향투과율이 커지면 전술하였듯이 농도부력에 의한 상향유동은 강화됨에 비하여, 수평방향투과율이 커지면 순수액체와 머시영역사이 유동의 상호작용이 활발해짐을 알 수 있다. 비록 투과율비의 변화에 따라 기본현상은 정성적으로 유사하지만 정량적으로 상당한 차이를 보이는 점은 주조, 결정성장과 같은 실제 재료공정의 관점에서는 매우 중요하다.

4. 결 론

이상에서 2성분혼합물의 응고과정에 있어서 머시영역의 비등방성을 고려할 수 있도록 투과율모델을 비롯한 해석방법의 하나를 제시하고 응고에 수반되는 천이현상 및 그 결과에 대한 비등방성의 영향을 고찰하였다. 먼저, 본 모델은 혼합물응고의 제 특성을 충분히 예측할 수 있는 해상력이 있음을 확인할 수 있었다. 한편, 머시영역의 투과율은 본질적으로 수지상정사이유동과 연관되므로 제한된 투과

율비의 변화가 응고과정중 천이현상 및 편석에 근본적인 차이를 초래하지는 않았지만 무시할 수 없는 정량적인 정도의 차이를 보였다. 가용한 투과율 실험자료의 불확실성이 10의 차원임을 고려하면, 본 연구에서 취급한 R 의 최대, 최소값에 대응하는 투과율주치의 비(2.0)는 크지 않음에도 불구하고 그 영향은 상당하였다. 따라서, 보다 개선된 예측을 위해서는 이론해석모델에 머시영역의 비등방성은 고려되어야 하며 이때 (비등방성) 투과율에 대한 정확한 실험자료는 필수적이다.

후 기

본 연구는 1992년도 한국과학재단 핵심전문연구과제(921-0900-001-1)의 결과로서 이에 감사의 뜻을 포함합니다.

참고문헌

- (1) Huppert, H.E., 1990, "The Fluid Mechanics of Solidification," *J. Fluid Mech.* Vol. 212, pp. 209~240.
- (2) Christenson, M.S. and Incropera, F.P., 1989, "Solidification of Aqueous Ammonium Chloride Solution in a Rectangular Cavity-II. Comparison of Predicted and Measured Results," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.32, pp. 69~79.
- (3) Neilson, D.G., Incropera, F.P. and Bennon, W.D., 1990, "Numerical Simulation of Solidification in a Horizontal Cylindrical Annulus Charged with an Aqueous Salt Solution," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 33, pp. 367~380.
- (4) Viskanta, R., 1990, "Mathematical Modeling of Transport Processes During Solidification of Binary Systems," *JSME Int. J., Series II*, Vol. 33, pp. 409~423.
- (5) Murakami, K., Shiraishi, A. and Okamoto, T., 1984, "Fluid Flow in Interdendritic Space in Cubic Alloys," *Acta Metall.*, Vol.32, pp. 1423~1428.
- (6) Poirier, D.R., 1987, "Permeability for Flow of Interdendritic Liquid in Columnar-Dendritic Alloys," *Metall. Trans.*, Vol.18B, pp. 245~255.
- (7) Asai, S. and Muchi, I., 1978, "Theoretical

- Analysis and Model Experiments on the Formulation Mechanism of Channel-Type Segregation," *Trans. ISIJ*, Vol.18, pp. 90~98.
- (8) Szekeley, J. and Jassal, A.S., 1978, "An Experimental and Analytical Study of the Solidification of a Binary Dendritic System," *Metall. Trans.*, Vol.9B, pp. 389~398.
- (9) Bennon, W.D. and Incropera, F.P., 1987, "A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems-I. Model Formulation," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.30, pp. 2161~2170.
- (10) Ganesan, S. and Poirier, D.R., 1990, "Conservation of Mass and Momentum for the Flow of Interdendritic Liquid During Solidification," *Metall. Trans.*, Vol. 21B, pp. 173~181.
- (11) Hills, R.N., Loper, D.E. and Roberts, P.H., 1983, "A Thermodynamically Consistent Model of a Mushy Zone," *Q. J1 Mech. appl. Math.*, Vol. 36, pp. 505~539.
- (12) Voller, V.R., Brent, A.D. and Prakash, C., 1989, "The Modelling of Heat, Mass, and Solute Transport in Solidification Systems," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.32, pp. 1719~1731.
- (13) Bennon, W.D. and Incropera, F.P., 1988, "Numerical Analysis of Binary Solid-Liquid Phase Change Using a Continuum Model," *Numer. Heat Transfer*, Vol.13, pp. 277~296.
- (14) Prakash, C. and Voller, V.R., 1989, "On the Numerical Solution of Continuum Mixture Model Equations Describing Binary Solid-Liquid Phase Change," *Numer. Heat Transfer*, Vol.15, pp. 171~189.
- (15) Patankar, S.V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corp.
- (16) Kurz, W. and Fisher, D.J., 1984, *Fundamentals of Solidification*, Trans Tech Publications.
- (17) Neilson, D.G. and Incropera, F.P., 1991, "Unidirectional Solidification of a Binary Alloy and the Effects of Induced Fluid Motion," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol.34, pp. 1717~1732.
- (18) Beckermann, C. and Viskanta, R., 1988, "Double-Diffusive Convection During Dendritic Solidification of a Binary Mixture," *Physico Chem. Hydrodyn.*, Vol.10, pp. 195~213.
- (19) Engel, A.H.H. and Incropera, F.P., 1989, "Solidification of Binary Mixture in a Square Cavity with a Free Surface," *Warme und Stoffubertragung*, Vol.24, pp. 279~288.
- (20) *International Critical Tables and Numerical Data*, 1928, Physics, Chemistry and Technology, Vols.3,4.
- (21) Yoo, H. and Viskanta, R., 1992, "Effect of Anisotropic Permeability on The Transport Process During Solidification of a Binary Mixture."