

.....
論 文

FDM에 의한 응고해석시 계산시간 단축을 위한 음적해법의 적용과 잠열처리방법

김태규*, 최정길**, 홍준표***, 이진형*

Reduction of Computing Time through FDM using Implicit Method and Latent Heat Treatment in Solidification Analysis

Tae-Gyu Kim*, Jung-Kil Choi**, Jun-Pyo Hong*** and Zin-Hyoung Lee*

Abstract

An implicit finite difference formulation with three methods of latent heat treatment, such as equivalent specific heat method, temperature recovery method and enthalpy method, was applied to solidification analysis. The Neumann problem was solved to compare the numerical results with the exact solution. The implicit solutions with the equivalent specific heat method and the temperature recovery method were comparatively consistent with the Neumann exact solution for smaller time steps, but its error increased with increasing time step, especially in predicting the solidification beginning time.

Although the computing time to solve energy equation using temperature recovery method was shorter than using enthalpy method, the method of releasing latent heat is not realistic and causes error.

The implicit formulation of phase change problem requires enthalpy method to treat the release of latent heat reasonably. We have modified the enthalpy formulation in such a way that the enthalpy gradient term is not needed, and as a result of this modification, the computation stability and the computing time were improved.

(Received April 23, 1993)

1. 서 론

용융 혹은 응고현상은 열의 흡수 및 방출을 수반하는 상변태(phase transformation) 문제로서 어느 한 상에서 다른 상으로 변화하는 열적특성을 가지고 있다. 이러한 특징은 서로 다른 상 사이에서 비선형 경계조건을 갖게 하여 많은 가정을 포함하지 않고는 온도분포의 엄밀해를 얻을 수 없다. 즉, 한 상과 다른 상 사이의 온도가 잠열(latent heat) 차이로 인하여 연속적이지만 부

드럽지(smooth) 않은 분포가 되므로 상변태를 수반하는 온도(혹은 온도범위) 부근에서 서로 다른 온도구배를 갖게 되어 응고해석에 대한 수학적 접근을 어렵게 하고 있다. 이런 문제점 때문에 응고현상의 해석은 다양한 근사해법과 수치해법이 시도되고 있으며, 특히 근래에 들어 컴퓨터의 급속한 발전으로 많은 수치해법이 행해져서 그 결과 상당한 성과를 거두고 있다^{1~5)}.

수치해법을 이용한 응고해석은 특별히 잠열처리방법에 많은 노력을 기울이고 있는데, 이것은

* 한국과학기술원 재료공학과(Dept. of Materials Science & Eng., KAIST)

** 생산기술연구원(KAITEC)

*** 연세대학교 금속공학과(Dept. of Metallurgical Eng., Yonsei University)

응고구간 내에서 발생하는 잠열이 응고문제 해석의 주된 변수이기 때문이다. 그러므로 잠열량의 엄정한 평가와 방출에 대한 믿을 만한 해석결과는 상변태가 수반된 문제에 있어서 필수적인 요소이다.

대표적인 잠열처리방법은 등가비열법과 온도회복법, 엔탈피법의 3가지가 있다. 그 중에서 등가비열법은 응고구간에서 발생하는 잠열을 등가비열(equivalent specific heat)로 환산하여 에너지 방정식을 푸는 방법으로 쉽게 이해되고 계산하기 편리한 이점이 있지만, 시간증분 Δt 가 너무 클 경우 한 번에 응고온도 범위를 벗어날 수 있기 때문에 잠열에 대한 고려가 무시될 수 있다. 즉, 소위 'jumping of the latent heat peak'이 큰 문제점이 된다⁵⁾.

온도회복법(temperature recovery method)은 우선 응고잠열의 방출을 고려하지 않고 열전도 해석을 한 후, 시간증분 Δt 마다 온도강하량을 구하여 아직 응고중이라면 그 요소의 온도를 응고잠열 만큼 온도를 회복시키는 방법이다. 이 방법을 양적해법(explicit method)에 적용할 경우 양호한 수치해석 결과를 얻을 수 있다^{2~6)}.

엔탈피법(enthalpy method)은 응고구간에서 비열을 온도에 관하여 적분한 엔탈피를 이용하는 방법으로 응고구간에서 비열의 급격한 변화가 있는 상변태 문제의 수치적 취급을 용이하게 할 수 있는 장점이 있다⁷⁾. 또한 엔탈피법은 상변태가 일어나는 경계에서 명확한 경계조건이 필요하지 않기 때문에 고정된 격자계(fixed grid system)에 대해서 수치적인 취급이 용이하다⁸⁾. 그러나 엔탈피법에 기초한 유한차분화는 비선형 차분화된 음적시간적분형(implicit time integration scheme) 방정식이 된다. 따라서 엔탈피법의 효율성은 차분화된 방정식을 풀기 위해서 이용되는 수치적 방법에 의존하므로 Voller 등 연구자들은 이에 대한 많은 연구를 수행하고 있다^{8~12)}.

상변태를 수반하는 비선형 에너지방정식의 수치적 해법은 source법이라 알려진 방법이 많이 연구되고 잘 알려져 있다. 이 방법은 차분화시키는 방법에 따라 source항이 각각 다른 형태로 나타나는데, source항이 어떻게 표현되든 그 항은 온도의 함수로 이루어지거나⁹⁾ 온도와 온도의 함수로 이루어져 함수의 couple이 되어 나타나므로¹⁰⁾

수렴해를 얻기 위해서 선형화, 혹은 반복법이 필요하다¹¹⁾. 특히 이 방법은 고상률(혹은 액상률)의 정확한 계산이 수치해의 정확성에 크게 영향을 미치는데, 본 연구에서는 응고구간 내에서 고상률과 온도와의 관계가 2차 관계식으로 모델링된 식으로부터 온도를 계산하고 이를 이용하여 고상률을 계산하였다.

본 연구에서는 앞서 언급한 3가지 잠열처리방법을 음적해법에 적용하여 수치계산 결과의 타당성 및 정확성을 비교 평가하며, 계산시간도 절약하고 더욱 정확한 수치해석 결과를 얻을 수 있는 잠열처리방법을 논의하고 새롭게 보완된 엔탈피법을 제시하였다. 이를 위해서 엄밀해가 존재하는 Neumann문제를 수치해석하였고, 계산시간의 비교를 위해서 1차원인 Neumann문제를 3차원으로 요소수를 늘린 계산도 수행하였다.

2. 수치해석방법

2.1 수학적 모형 (Neumann문제)

본 연구에서 계산되어 비교된 엄밀해는 다음과 같은 가정의 Neumann문제이다.

- 1) 순금속의 응고과정이다.
- 2) 각 상에서 물성치는 균일이다.
- 3) 고상과 액상의 접촉열저항은 무시한다.
- 4) 액상의 대류효과는 무시한다.
- 5) 주형과 주물계면 사이의 열저항은 무시한다.
- 6) 주형의 온도가 일정하게 유지된다.

이 가정들을 기초로 고상 및 액상에서 엄밀해는 다음과 같이 주어진다¹³⁾.

Neumann의 해는 초기조건 $t=0$ 에서 T_0 의 반무한 물체에 대하여, 표면온도($x=0$) $t=0$ 에서 갑자기 T_1 이 된다고 할 때 주물내 열전도만 고려할 경우 고상 및 액상에서 각각 온도분포를 구한 것이다. 즉, 임의의 시간 t 에서 응고계면의 위치는

$$x = 2\lambda\sqrt{a_s t} \tag{1}$$

로 표현되고, 식 (1)에서 λ 는 식 (2)로부터 구한다.

$$\frac{\exp(-\lambda^2)}{\text{erf}(\lambda)} \frac{k_L \sqrt{a_s} (T_0 - T_f) \exp(-\frac{a_s \lambda^2}{a_L})}{k_s \sqrt{a_L} \text{erfc}(\lambda \sqrt{\frac{a_s}{a_L}}) (T_f - T_1)}$$

$$= \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{c_p(T_f - T_1)} \quad (2)$$

이 두 식과 액상과 고상의 비정상 확산방정식으로부터 고상 및 액상의 온도분포는 다음과 같이 얻어진다.

$$T_s = T_1 + \frac{T_f}{\text{erf}(\lambda)} \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}}\right) \quad (3)$$

$$T_L = T_0 - \frac{(T_0 - T_f)}{\text{erfc}\left(\lambda \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_L}}\right)} \text{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_L t}}\right) \quad (4)$$

여기서 T_0 는 초기 액상온도이고, T_f 는 응고온도, T_1 는 갑자기 접한 경계의 온도, L 은 잠열, k_L , k_s 는 각각 액상 및 고상의 열전도도, α_L , α_s 는 각각 액상 및 고상의 열확산계수들이다.

본 연구에서는 수치계산의 편의를 위해 Fig. 1의 (a)로 보여진 것과 같이 Neumann문제를 한쪽 면은 온도가 일정하게 유지되고, 다른 면은 단열인 상변태를 수반하는 1차원 열전도 문제로 취급하여 계산하였다. 또한, 수치계산시간 비교를 위해서 같은 x 방향 길이에 대해 (b)와 같이 T_1 으로 주어진 경계를 제외하고 5면 모두 단열시켜 1차원 문제처럼 경계조건을 주고 y, z 축으로 각각 7개, x 축으로 20개로 요소수를 늘려서 전체 980개 요소를 갖는 Neumann문제를 수치해석하였다.

2.2 지배방정식 및 잠열처리방법

상변태를 수반하는 에너지방정식은 다음과 같다.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \rho L \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (5)$$

식 (5)와 같이 우변은 열전도항과 잠열항의 합으로 구성되고, 특히 우변의 2번째 항은 고상률이 시간에 따라 변화함을 나타내므로 상변태가 온도에 따라 일어나는 과정을 정확히 알아야 할 필요성 때문에 식 (5)를 풀기에는 상당한 어려움이 있다. 따라서 이 항을 수치적으로 처리하기 위해 모델하는 방법에 따라 수치해석의 정확성이 영향을 받게 된다. 이 항을 수치적으로 취급하기 위해서 다음과 같은 3가지 잠열처리방법이 있다.

1) 등가비열법

이 방법은 이해가 쉽고 수치적으로 차별화하기

용이한 이점이 있다. 즉, 식 (5)의 우변 2번째 항을 좌변으로 이항해서 다시 정리하면

$$\rho [c_p - L \frac{\partial f_s}{\partial T}] \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (6)$$

이 얻어진다. 식 (6)과 같이 정리한 후 $(c_p)_{\text{eff}} = c_p - L \frac{\partial f_s}{\partial T}$ 로 치환해서 식 (6)을 source항이 없는 에너지방정식으로 풀고, 응고가 시작되는 액상선 부근과 응고가 완료되는 고상선 부근에서 온도보정을 하는 방법이다⁵⁾. 그러나 일반적으로 등가비열법은 시간증분 Δt 와 공간증분 Δx_j 가 작아야 양호한 수치해석 결과를 얻을 수 있으므로, 시간증분을 크게 하기 위한 음적해법의 특성상 잠열처리를 위한 이 방법의 적용은 수치해석의 불안정성을 초래하고 물리적으로 타당하지 않은 결과를 얻을 수 있다. 따라서 계산결과의 정확성이 크게 영향을 받으므로 수치계산상의 많은 주의가 필요하다.

2) 온도회복법

온도회복법은 먼저 응고잠열의 방출을 고려하지 않고 열전도해석을 한 후, 시간증분 Δt 마다 온도강하량을 구하여 아직 응고중이라면 그 요소의 온도를 응고잠열의 방출에 의한 것만큼 회복시키는 방법이다. 따라서 시간 Δt 동안 응고잠열의 방출량 Q_s 와 고상률의 증가량 Δf_s 의 사이에는 다음과 같은 관계가 성립한다.

$$\Delta Q_s = \rho c_p V \Delta T = \rho L V \Delta f_s \quad (7)$$

식 (7)에서 고상률의 합 $\sum \Delta f_s = 1$ 이 될 때까지 온도회복을 시키게 된다^{2,6)}.

3) 엔탈피법

엔탈피법은 상변태 문제의 수치해석에 많이 이용되는 잠열처리 방법으로, 연속적으로 움직이는 상변태 경계를 각각의 절점에 따라 추적할 필요가 없기 때문에 자주 이용된다. 이 방법에서 이용되는 엔탈피는 현열(sensible heat)과 잠열의 합으로 구성되는 전체 엔탈피를 이용하는 방법⁷⁾과 현열만으로 이루어진 엔탈피를 이용하는⁹⁾ 2가지 방법으로 크게 나누어진다. 본 연구에서는 전자를 이용하는 엔탈피법을 적용한다.

앞서 언급한 바와 같이 전체 엔탈피는 기준점에서의 엔탈피 H_0 와 현열에 의한 엔탈피, 잠열에 의한 엔탈피의 합으로 구성된다. 즉,

$$H = H_0 + \int_{T_0}^T c_p dT + (1 - f_s)L \quad (8)$$

식 (8)을 온도에 대해서 미분하면 다음 식이 얻어진다.

$$\frac{\partial H}{\partial T} = c_p - L \frac{\partial f_s}{\partial T} \quad (9)$$

식 (9)를 식 (6)의 좌변에 치환하면 다음과 같다.

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (10)$$

상변태를 수반하는 에너지방정식 (5)는 현열과 잠열의 합으로 구성된 전체 엔탈피로서 식 (10)과 같이 쓸 수 있다. 식 (10)으로부터 전체 엔탈피 H를 구하고, H와 온도 T의 관계로부터 온도를 구하게 된다. 일반적으로 많이 이용되는 엔탈피와 온도의 관계는 다음과 같다⁴⁾.

$$\begin{aligned} H &= c_p T, T_s > T \\ &= c_p T + (1 - f_s)L, T_s \leq T \leq T_L \\ &= c_p T + L, T_L < T \end{aligned} \quad (11)$$

2.3 수정된 엔탈피법

식 (10)의 유한차분화는 유한요소(finite element) 혹은 제어체적(control volume)에 대하여 에너지 보존법칙을 적용하여 얻어진다. 일반적인 물리현상을 바탕으로 각각의 에너지방정식을 유도하는 이 방법은 계산하고자 하는 형상이나 좌표에 영향을 받지 않으므로 요소와 요소 사이의 에너지 보존관계가 실제현상을 보다 잘 표현할 수 있고, 수치계산에 편리하게 적용되는 이점이 있다²⁾. 이 방법을 기초로 하여 임의의 체적요소 i에 대한 음적해법을 도입한 식 (10)의 유한차분식은 다음과 같다.

$$(\rho V)_i \frac{H_i^{n+1} - H_i^n}{\Delta t} = \sum_j \frac{S_{ij}}{R_{ij}} (T_j^{n+1} - T_i^{n+1}) \quad (12)$$

여기서 ρ_i, V_i 는 체적요소 i의 밀도와 체적이 고, S_{ij} 는 인접요소 j와의 접촉면적, R_{ij} 는 j와의 열저항을 의미한다. 식 (8)에서 고상선 온도 T_s 에서의 고상의 엔탈피를 기준엔탈피 H_s 로 하면 식 (8)은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$H = H_s + \int_{T_s}^T c_p dT + (1 - f_s)L \quad (13)$$

비열 c_p 를 상수로 가정하면 식 (13)은 다음과 같

다.

$$H = (H_s - c_p T_s) + c_p T + (1 - f_s)L \quad (14)$$

식 (14)에서 임의의 체적요소의 엔탈피는 기준엔탈피항과 현열에 의한 엔탈피, 잠열의 액상물 만큼의 엔탈피의 합으로 구성됨을 보여준다. 따라서 식 (12)의 우변 두번째항 T_i^{n+1} 에 시간 level n+1에서의 엔탈피와 액상물 만큼의 잠열차에 의해 결정되는 식 (14)를 대입하여 식 (15)가 얻어진다.

$$\begin{aligned} H_i^{n+1} \left[1 + \frac{\Delta t}{(\rho c_p V)_i} \sum_j \frac{S_{ij}}{R_{ij}} \right] &= H_i^n + \frac{\Delta t}{(\rho V)_i} \\ &\sum_j \frac{S_{ij}}{R_{ij}} T_j^{n+1} + \frac{\Delta t}{(\rho c_p V)_i} (1 - f_s)L \sum_j \frac{S_{ij}}{R_{ij}} \end{aligned} \quad (15)$$

식 (14)의 상수항 $(H_s - c_p T_s)$ 는 $\frac{\Delta t}{(\rho c_p V)_i}$

$(H_s - c_p T_s) \sum_j \frac{S_{ij}}{R_{ij}}$ 의 형태로 식 (15)에서 우변 4번째 항으로 나타나지만, 각 물성치와 차분화된 요소가 결정되면 이 항 역시 상수항이 된다. 그러므로 식 (15)에서 얻어지는 새로운 엔탈피는 이 항이 합해진 값이고, 이때 온도는 식 (14)에서 구해지므로 계산된 엔탈피로부터 $(H_s - c_p T_s)$ 를 빼야 한다. 따라서 이 항은 수치계산에 있어서 어떤 기여도 하지 않으므로 본 연구에서는 수치계산의 편의상 $(H_s - c_p T_s)$ 를 0으로 하여 계산하였다. 실제로 이 항의 기여도를 알기 위해서 이 항에 해당하는 임의 값을 대입하여 계산을 수행하고, 이 항이 수치해석 결과에 기여하는 바가 없음을 확인하였다.

식 (15)는 Gauss-Seidel 반복법에 의하여 시간 level n+1에서 Sub-iteration을 통하여 임의의 체적요소 i의 엔탈피 H_i^k 를 구하고, 얻어진 엔탈피는 식 (14)로부터 고상률을 얻는데 이용된다. 이때 응고구간내의 온도와 고상률의 관계는 Scheil 식을 적용할 수도 있지만 여기서는 다음과 같은 포물선모델을 이용한다⁴⁾.

$$T = T_L - (T_L - T_s) f_s^2 \quad (16)$$

새롭게 얻어진 고상률 분포를 이용하여 식 (15)의 source항을 계산하고, 다시 엔탈피를 구하는 방법으로 계산이 수행된다. 개략적인 계산순서는 다음과 같다.

1) 시간 level n에서 엔탈피, 온도 및 고상률 분포의 초기값을 읽는다.

2) 에너지방정식 (15)로부터 H_i^{n+1} 잠정적인 값 H_i^k 를 계산한다.

3) 식 (14)로부터 액상 이상과 고상 이하의 온도를, 포물선모델 식 (16)에서 상변태구간의 온도를 각각 얻는다.

4) 엔탈피와 온도의 관계식 (14)로부터 새로운 고상률을 구한다.

$$f_i^k = 1 - \frac{H_i^k - c_p T_i^k}{L} \quad (17)$$

5) 종속변수인 엔탈피와 온도가 수렴조건을 만족하는가?

6) 5)의 조건을 만족하지 않으면 $k=k+1$ 하고 2)로부터 다시 5)가 만족할 때까지 반복한다.

7) 5)의 조건이 만족되면 $t=t+\Delta t$ 하고 다음 시간 level의 계산을 수행한다.

고상률의 함수로 구성된 source항의 계산은 여러가지 방법이 제안되어 있는데¹⁰⁾, 특히 시간 증분 Δt 에 대한 고상률의 변화량이 source항이 되는 일반적인 source법은 이 항을 현재의 온도장에 부합하도록 하는 방법이 따라 크게 두가지로 나누어 진다. 먼저 sub-iteration level $k+1$ 에서 고상률의 값을 얻기 위해서 f_s^{k+1} 에 대해 Taylor series를 이용하여 선형화한 후 차분화된 방정식을 푸는 방법과, 반복법과 relaxation을 이용하여 고상률을 계산하고 source항을 계속해서 현재의 에너지장에 부합하도록 계산하여 접근하는 방법이 그것이다. 특히 최근에 Voller와 Swaminathan(1992)이 제안한 generalenthalpy 법의 경우, 비정상 항을 source항으로 취급하고 이 항의 선형화를 통하여 에너지방정식을 푸는 방법이 소개되었다¹²⁾. Voller와 Swaminathan이 제안한 방법은 새로운 엔탈피를 얻기 위해서 엔탈피의 온도에 대한 구배와 임의의 엔탈피장에 부합하는 온도장을 얻는데 있어서 특별한 경우(예를 들어 등은 상변태 문제 혹은 엔탈피 curve가 좁은 문제 등)에 대해 다소의 수치적 보완이 필요한 단점이 있다. 그러나 본 연구에서 제시한 식 (15)와 (16), (17)은 기존의 방법보다 간단하고 수치적으로 취급하기 용이한 장점이 있으므로 상변태를 포함하는 어떤 문제에도 적용되는

장점이 있다.

본 연구에서 채택된 수렴조건은 다음과 같다.

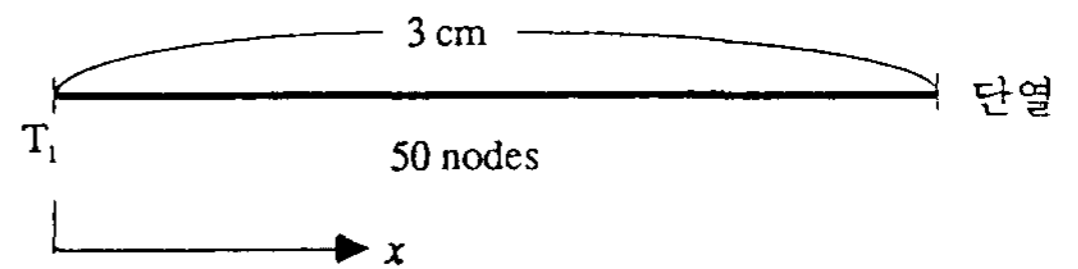
$$\text{Error} = \text{Max} \frac{|\phi_i^{k+1} - \phi_i^k|}{\text{Max} |\phi_i^k|} \leq 1 \times 10^{-4} \quad (18)$$

여기서 ϕ_i 는 각각 엔탈피와 온도를 의미한다. 본 연구에서 이용된 수치계산용 컴퓨터는 IBM PC386DX-33MHz이다.

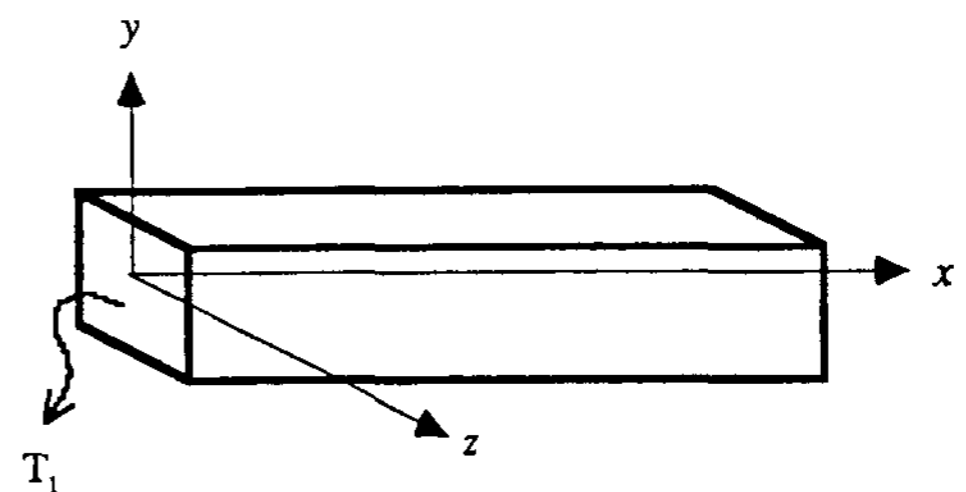
3. 결과 및 고찰

본 연구에서는 엄밀해가 존재하는 1차원 상변태 문제인 Neumann문제(Fig. 1)를 등가비열법과 온도회복법, 수정된 엔탈피법에 의해 수치해를 얻고 엄밀해와 비교하여 그 해석의 타당성을 검토하였다.

수치계산에 이용된 물성치 및 초기조건은 다음과 같다.



(a) Neumann problem for 1-dimension



(b) Neumann problem for 3-dimension

Fig. 1. Configuration of Neumann problem.

Table 1. 주물 : 탄소강

$\rho(\text{kg/m}^3)$	$C_p(\text{J/kgK})$	$k(\text{W/mK})$	$L(\text{J/kg})$
7850	655	29.8	268800

Table 2. 초기조건

T_0	T_L	T_s	T_1
1550°C	1503°C	1502°C	20°C

Table 1로 주어진 물성치는 온도변화에 관계 없이 일정한 값으로 이용되었다. 탄소강의 응고 구간은 1503~1357°C이지만 Neumann 엄밀해와 비교하기 위해 1503~1502°C에서 상변태가 일어나는 순간속의 상변태 문제로 근사시켜 계산하였다. 즉, 1°C의 응고구간이 있는 상변태 문제로 취급하였다. 이때 주물 표면의 온도를 순간적으로 20°C로 유지할 경우 순간속 응고과정의 엄밀해는 식 (3), (4)에 표에서 주어진 값들을 대입하여 얻을 수 있다.

Fig. 2는 등가비열법을 적용한 Neumann문제의 수치해석 결과를 보여준다. 그림에서 $\Delta t_{exp.}$ 는 양적해법을 적용하였을 때 요소수와 물성치가 결정되면 소위 안정조건 하에서 계산되는 시간증분으로 본 연구에서 계산된 값은 0.0207sec이다. 또한 $\Delta t_{imp.}/\Delta t_{exp.}$ 는 양적해법과 음적해법에서 채택된 시간증분의 비이다. 등가비열법은 상변태를 수반하는 에너지방정식을 source항 없이 차별화할 수 있는 편리함 때문에 널리 이용되어 왔다. 그러나 이 방법의 중요한 결점은 등가비열이 빠르게 변화하는 문제의 경우 상변태 구간에서 정확한 수치적 근사(numerical approximation)를 필요로 한다는 것이다. 따라서 본 연구에서 해석하고자 하는 Neumann문제와 같이 동온 상변태가 일어나는 문제는 해석하기 어려운 점이 있다.

즉, 상변태온도 근처에서 등가비열이 'spike peak'의 형태를 보이기 때문에 이 영역에서 잠열 효과를 유지하고 비열의 'spike peak'에 의한 오차를 막기 위해 시간증분 Δt 와 공간증분 Δx_i 가 작아야 할 필요성이 있다. 따라서 Fig. 2에서 보는 바와 같이 등가비열법을 음적해법에 적용하여 수치해석한 결과는 시간증분이 작은 경우 엄밀해와 큰 차이를 보이지 않지만, 시간증분이 양적해법에 비해 너무 클 경우 발산하는 문제점이 있다. 그러나 상변태 온도구간이 넓은 경우 어느 정도 허용될 수 있는 수치해석 결과를 얻을 수 있다¹¹⁾.

온도회복에 의한 잠열처리방법은 양적해법을 적용한 수치해석시 엄밀해와 잘 일치하는 수치해를 얻을 수 있는 방법으로 그 이론적 접근방법과 결과를 검토할 때 Fig. 3과 같이 상당한 정확성을 갖는 방법이다. 즉, 상변태가 일어나는 구간에서 응고가 일어난 고상률 증분(solid fraction increment)만큼 잠열로 인하여 온도가 회복된다는 개념을 갖는다. 그러나, 양적해법은 시간증분 Δt 를 임의로 선택할 수 없는 소위 '안정조건'을 만족해야 하기 때문에 온도회복법에 의한 수치해석은 계산시간이 너무 많이 걸리는 단점이 있다. 이런 단점 때문에 음적해법을 도입하게 되는데, 이 잠열처리방법을 그대로 적용할 경우 또 다른

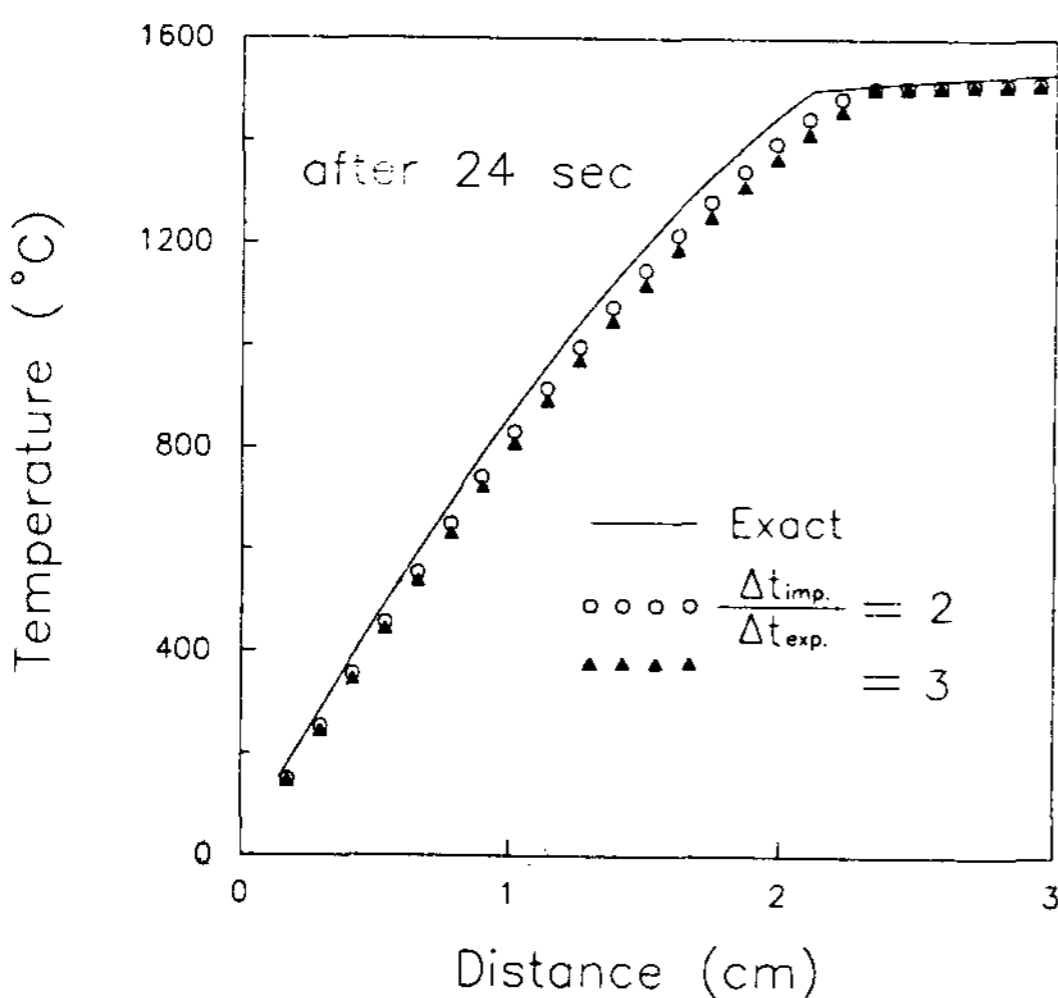


Fig. 2. Comparison of Neumann exact solution with the implicit solution by the equivalent specific heat method.

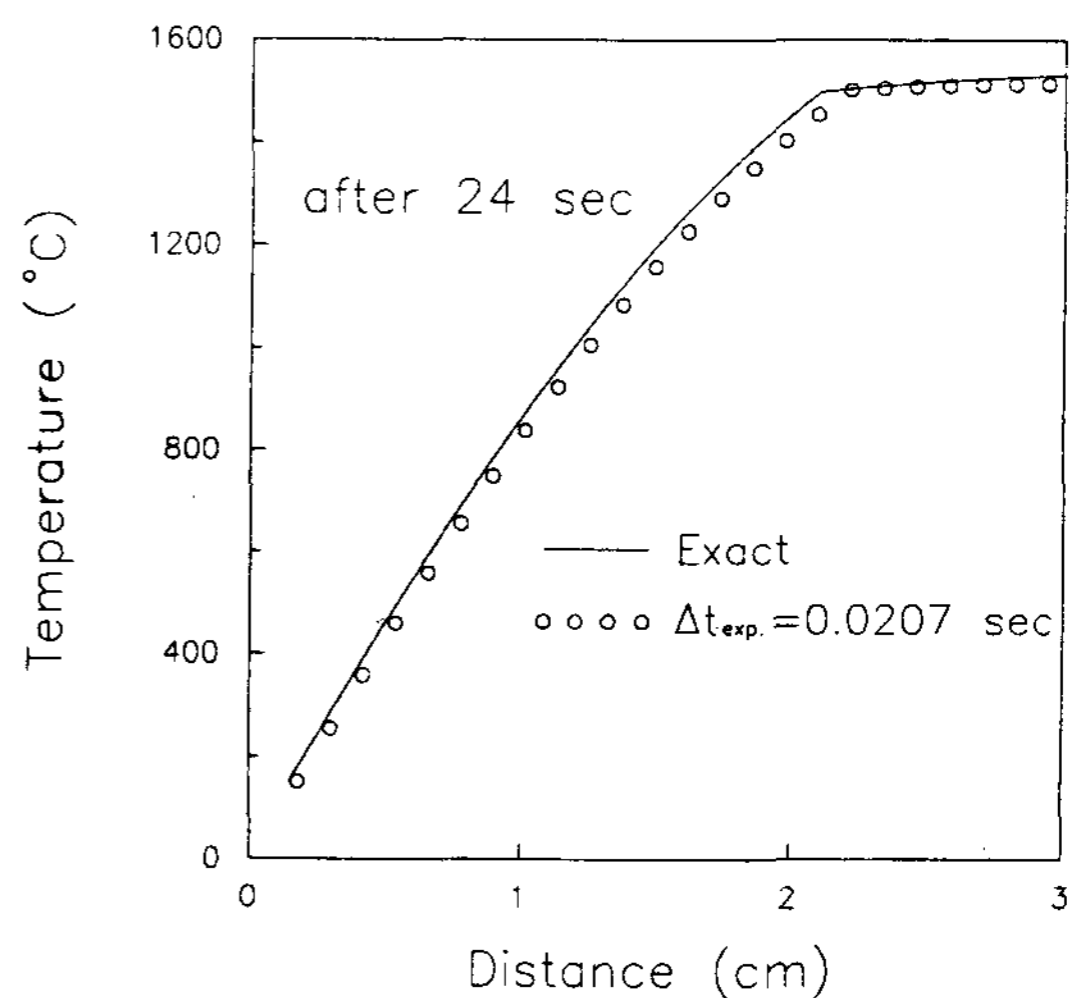


Fig. 3. Comparison of Neumann exact solution with the explicit solution by the temperature recovery method.

문제가 발생하게 된다. 즉, 온도회복법의 특성이 잠열없이 계산된 온도가 처음 액상온도를 지날 때 액상온도와 잠열없이 계산된 온도의 고상률 차이만큼 잠열로 인하여 온도가 회복하므로 시간증분이 작은 양적해법이 경우 타당한 결과를 얻을 수 있지만 음적해법은 일반적으로 크게 선택하는 시간증분 때문에 시간증분이 한번에 응고구간(혹은 온도)을 지날 경우 비정상적인 온도회복으로 인하여 온도가 잘못 예측되게 된다. Fig. 4는 이런 현상을 잘 보여주는데, 시간증분이 클수록 상변태온도 부근에서 엄밀해와 많은 오차를 보여주고 있음을 알 수 있다. 따라서 시간증분을 커서 한번에 상변태온도를 지나는 경우 그 시점의 온도가 고상률 증분만큼 회복되므로 실제 온도보다 과대평가하게 된다. 즉, 양적해법의 경우 점차적인 고상률 증가로 인한 온도회복으로 상변태 구간에서도 온도가 합리적으로 예측되지만, 음적해법과 같이 시간증분이 큰 경우 한번에 잠열이 방출되므로 이런 문제가 발생하게 된다. 다시 말해서, 양적해법의 경우 시간증분 Δt 가 안정조건내에 들어야 하므로 상변태온도 부근에서도 엄밀해와 잘 일치하는 결과를 얻을 수 있으나, 시간증분이 큰 음적해법의 경우 Δt 가 클수록 비정상적인 잠열방출로 인하여 엄밀해와 큰 차이를 보이게 된다.

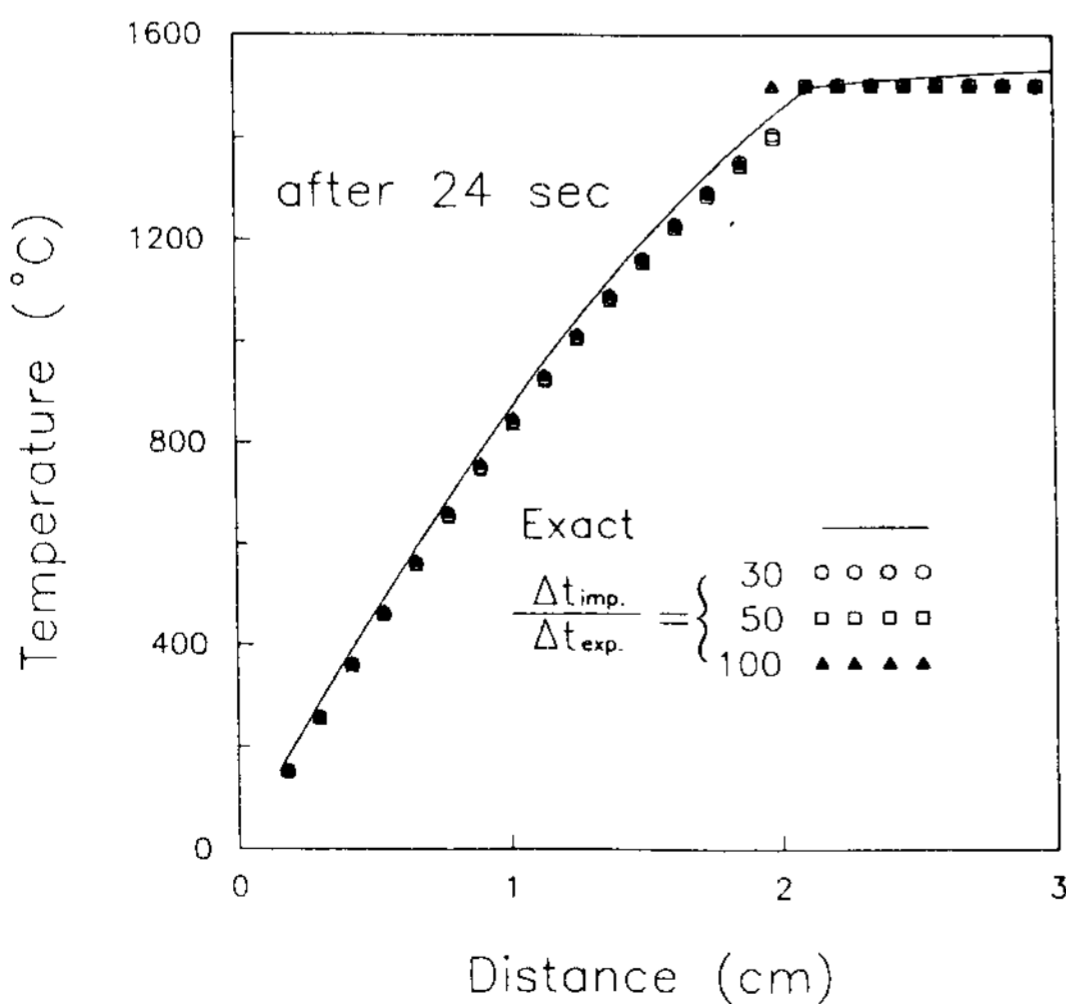


Fig. 4. Comparison of Neumann exact solution with the implicit solution by the temperature recovery

지금까지 언급한 바와 같이 앞서 두 방법을 음적해법에 그대로 적용할 경우 잠열이 방출되는 상변태 구간에서 잘못된 수치해석 결과를 보여주는데, 상변태 문제의 어려운 점은 이와같이 상변태 구간에서 잠열방출의 적절한 수치적 예측모델의 필요성이다. 그러므로 많은 연구자들은 음적해법을 적용하면서 잠열의 거동을 잘 예측할 수 있는 엔탈피법을 발전시켰다^{8~12}. 본 연구에서 수정 제안된 엔탈피법은 이들과 비슷한 방법으로써 기존의 연구와 유사하게 고상률(혹은 액상률)의 함수로 이루어진 source항을 반복법을 통하여 그에 해당하는 엔탈피장과 온도장을 계산하는 방법을 취하고 있다. 그러나 기존의 연구자들이 고상률의 변화량을 계산하는데 고상률의 구배 혹은 엔탈피의 구배, relaxation을 이용한 반복법 등을 통하여 고상률을 구하는 방법인데 반하여, 본 연구에서는 차별화된 에너지방정식 (12)를 일반적인 온도와 고상률, 엔탈피와의 관계식 (14)를 이용하여 새로운 차별화방정식 (15)로 유도하고, 이 식에서 얻어진 엔탈피, 식(14)와 모델식에서 각각 얻어진 온도를 이용하여 고상률을 구하는 방법을 채택하고 있다. 이 방법으로 계산된 수치해석 결과가 엄밀해와 Fig. 5에서 잘 비교되고 있다. 그림에서 보는 바와 같이 시간증분에 관계없이 엄밀해와 잘 일치하고 있음을 알 수 있다.

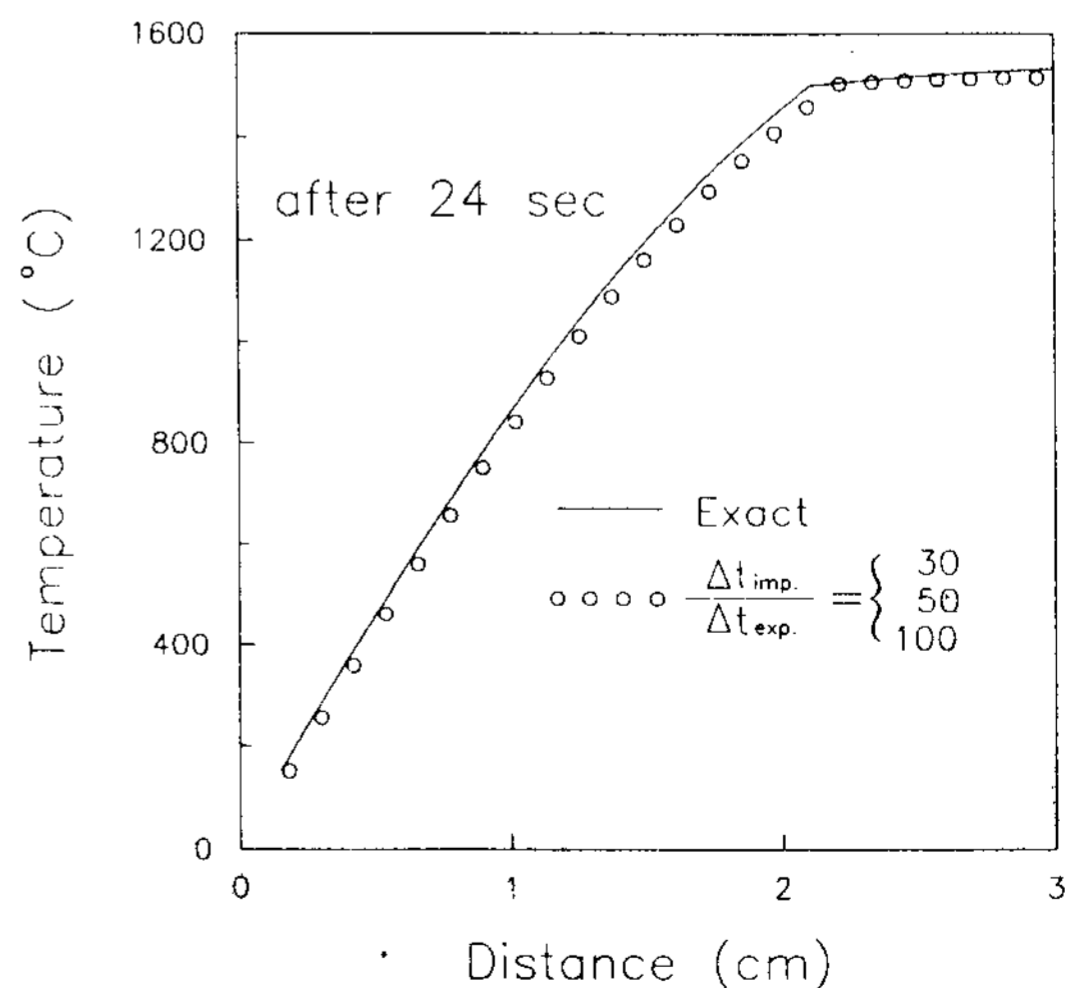


Fig. 5. Comparison of Neumann exact solution with the implicit solution by the enthalpy method.

이 결과들을 바탕으로 Fig. 1 (b)에서 보여진 3-D로 확장된 Neumann문제에 대하여 응고시작 및 완료시간과 수치계산시간을 Fig. 6, 7, 8에서 각각 비교하였다. Fig. 6은 최후 응고요소의 응고시작 시간을 나타내는 그림으로 온도회복법을 채용한 양적해법과 두 잠열처리방법에 의한 음적해법의 상대적 비교를 보여준다. 그림에서 온도회복법을 적용한 음적해법은 시간증분 Δt 에 따라 응고시작시간 예측에 많은 편차를 보여준다.

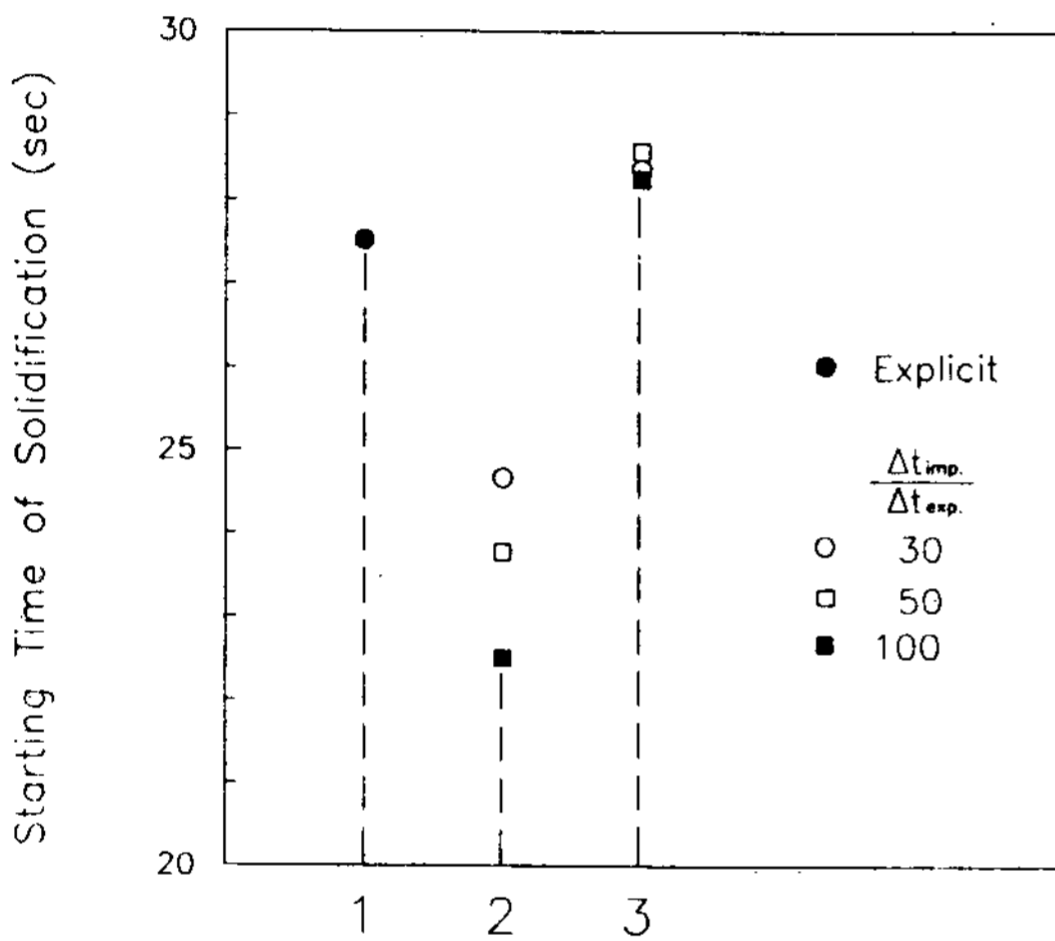


Fig. 6. Predicted time of solidification for a last solidified element.

- 1 Explicit(temp. recovery),
- 2 Implicit(temp. recovery),
- 3 Implicit(modified enthalpy)

앞서 언급한 바와 같이 시간증분이 커서 한번에 상변태온도를 지난 부분은 고상률 차가 1이 되어 그 만큼의 잠열방출에 해당하는 온도로 회복되므로 Δt 가 클 경우 온도분포가 과대평가되는 문제가 발생하게 된다. 이런 잘못된 수치해석 결과는 시간증분이 클수록 심하게 되고, 응고시작 시간을 빠르게 예측하고 있다. 시간증분 Δt 가 커서 한번에 상변태구간(혹은 온도)을 지나치는 경우 잠열효과를 제대로 예측하지 못함을 Fig. 6은 보여준다. 그러나 수정된 엔탈피법에 의한 결과는 시간증분에 무관하게 일관되는 응고시작 시간을 예측하고 있다. 상변태 구간에서 온도를 포물선모델에서 얻기 때문에 처음 상변태구간의 엔탈피로 계산되는 경우, 이때 모델식에서 얻어진

온도는 $T_L+1^\circ\text{C}$ 이고 고상률은 0이 된다(식 (16),(17)). 따라서 식 (15)는 다음 sub-iteration에서 잠열만큼의 source항이 존재하고 계속되는 sub-iteration을 통하여 이에 해당하는 엔탈피와 온도, 고상률을 구하게 되므로 온도회복법을 채용한 음적해법과 같은 비정상적인 잠열효과는 나타나지 않게 된다. 양적해법에 비해 약간의 편차가 있지만 두 계산 모두 수치해법상의 오차가 포함될 수 있으므로 이 오차정도는 허용될 수 있으리라 본다.

Fig. 7은 최후 응고요소의 응고완료 시간을 보여주는데 온도회복법이나 엔탈피법 모두 유사한 결과를 보인다. 이것은 비정상적인 잠열방출에도 불구하고 온도회복법을 적용한 음적해법이 응고완료 시간을 제대로 예측하고 있음을 보여준다. 응고시작 시점에서 온도를 과대평가하고 잠열방출을 비정상적으로 하는 문제점이 있으나, 계속되는 시간적분(time integration)을 통하여 응고완료 시간을 지체시키기 때문이다. 즉, 최후 응고요소의 응고완료 시간은 그 요소의 고상률이 1이 되는 시간이므로 응고완료 시간은 허용할 수 있는 수준으로 예측하게 된다.

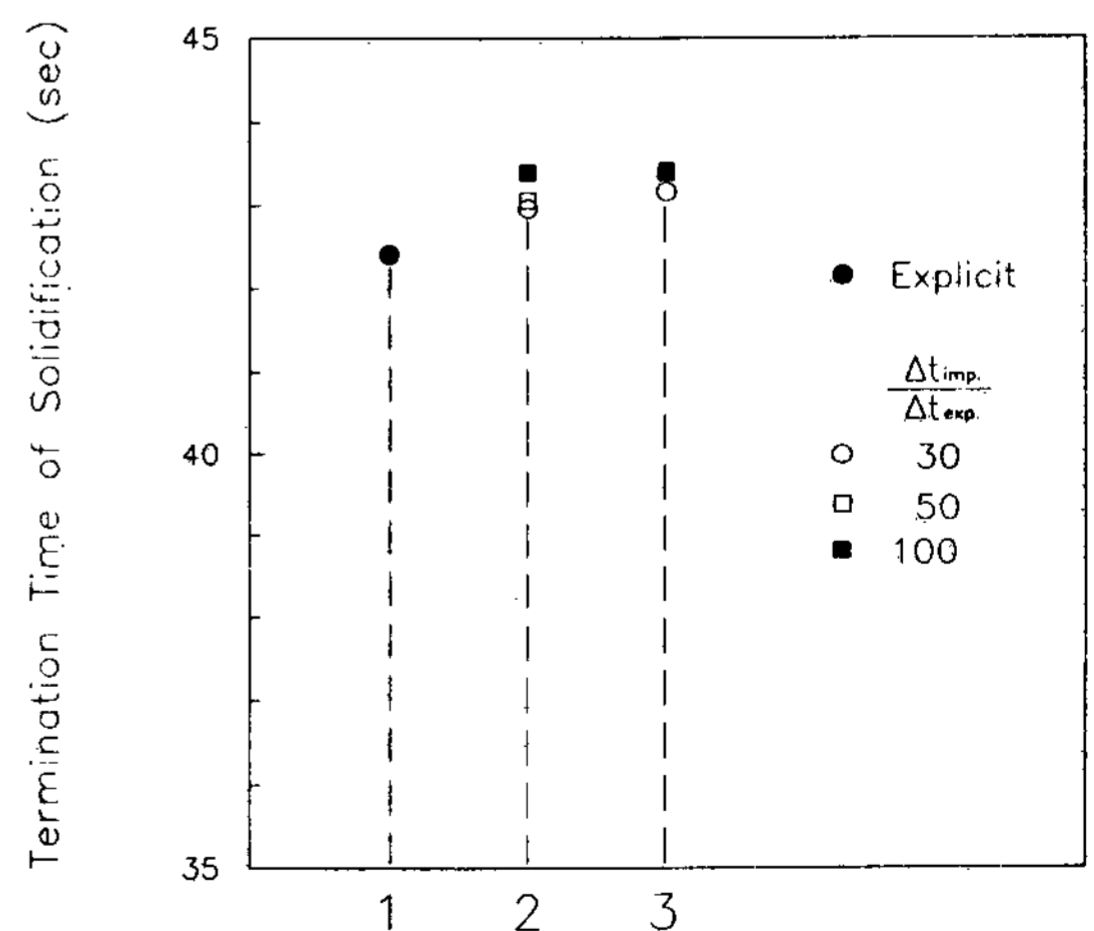


Fig. 7. Predicted finishing time of solidification for a last solidified element.

- 1 Explicit(temp. recovery),
- 2 Implicit(temp. recovery),
- 3 Implicit(modified enthalpy)

Fig. 8에서 보는 바와 같이 온도회복법에 의한 음적해법의 경우, 전체 계산시간은 더 짧지만 온도분포 및 잠열방출을 적절하게 예측했다고 볼수 없다. 그러나 잠열방출을 매 시간증분마다 제대로 예측한 수정된 엔탈피법은 그에 따른 온도장 및 엔탈피장, 고상률을 계산하기 위한 sub-iteration의 필요성 때문에 전체 계산시간이 온도회복법에 의한 것보다 다소 길어지지만 그 결과는 타당하다고 생각된다. 따라서 전체 계산시간 관점에서 볼때 온도회복법을 채용한 음적해법은 유리한 점이 있으나, 응고시작 시점에서 온도를 과대평가하는 문제가 있으므로 계산시간 절약의 이점보다 오차의 누적으로 인한 잘못된 해석결과를 얻을 염려가 있다. 그러므로 상변태를 수반하는 차분화된 비선형 에너지방정식의 수치해법에 음적해법을 적용할 경우, 잠열항의 처리에 상당한 주의와 함께 엔탈피법의 채용이 바람직하다고 판단된다.

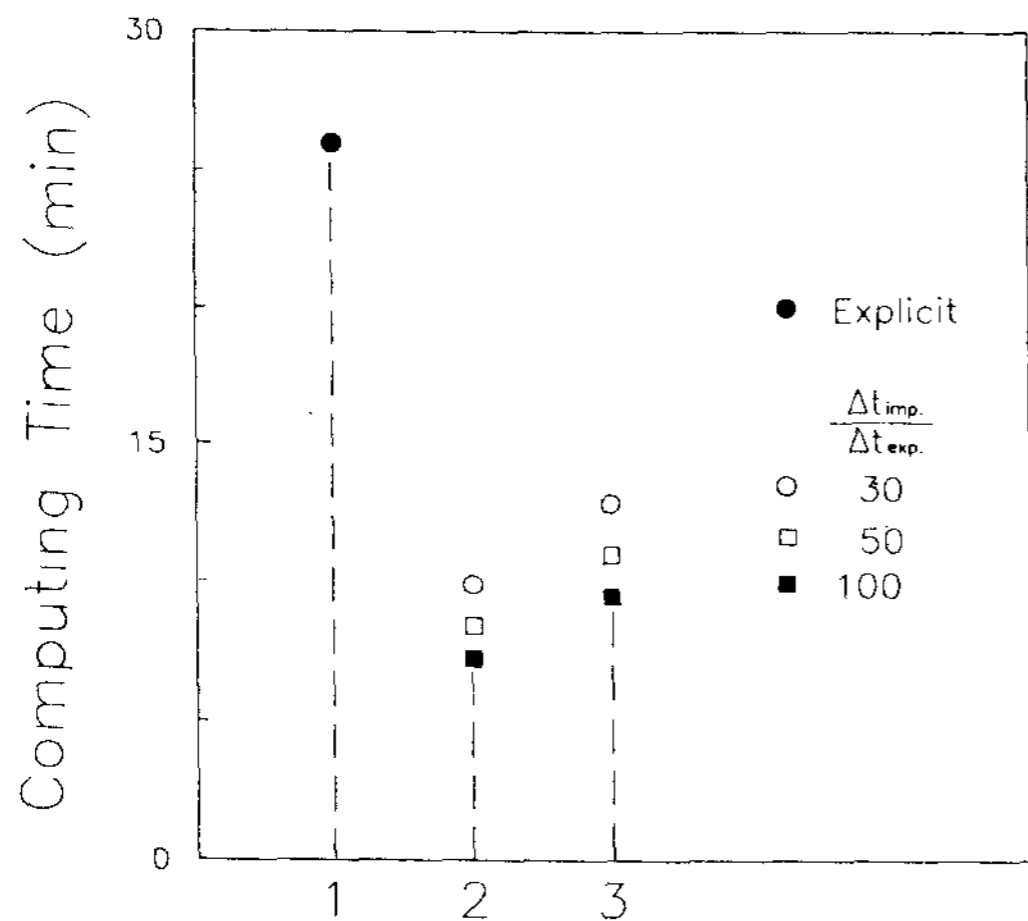


Fig. 8. Effect of calculation method and time steps on the computing time of a last solidified element.

- 1 Explicit(temp. recovery),
- 2 Implicit(temp. recovery),
- 3 Implicit(modified enthalpy)

4. 결 론

본 연구에서 얻어진 결론은 다음과 같다.
비선형 에너지방정식을 풀기 위해 음적해법을

도입하고, 잠열효과를 예측하기 위해서 등가비열법과 온도회복법, 엔탈피법을 엄밀해가 존재하는 Neumann문제에 적용하여 그 방법들의 타당성을 비교, 평가하였다. 그 결과 엔탈피법을 제외하고 시간증분에 따라 모두 엄밀해와 오차를 보였다. 특히 온도회복법을 적용한 음적해법의 경우 시간증분이 클수록 응고시작 시점에서 온도를 과대평가하고, 응고시작 시간예측에 있어서도 시간증분에 따라 편차가 있음을 보였다. 따라서 수치계산 시간을 줄이기 위해 음적해법을 도입하여 상변태 문제를 해석할 경우, 잠열효과를 적절히 예측하고 보다 정확한 해석결과를 얻기 위해서 엔탈피법의 채택이 필수적이다.

본 연구에서는 기존의 엔탈피식과 다른 방법으로 source항을 유도하고, 그 식에서 얻은 엔탈피와 엔탈피와 온도의 일반식, 모델식에서 얻은 온도와 고상률과의 관계를 이용하여 고상률을 구하는 방법을 제안하였다.

참 고 문 헌

1. W. C. Erickson, AFS Int. Cast metals J., pp. 30~41 (1980)
2. I. Ohnaka and K. Kobayashi, Trans. ISIJ, Vol.26 pp. 781~789(1980)
3. W. D. Bennon and F. P. Incropera, Int. J. Heat Mass transfer, Vol. 30 No. 10 pp. 2161~2187 (1987)
4. V. R. Voller, IMA J. Num. Anal., Vol. 5 pp. 201~214(1985)
5. Q. T. Pham, Int. J. Heat Mass transfer, Vol. 28 No. 11 pp. 2079~2084 (1985)
6. C. P. Hong, T. Umeda and Y. Kimura, metall. trans. 15B, pp. 101~107 (1984)
7. V. R. Voller and M. Cross, Int. J. Heat Mass transfer, Vol. 24 pp. 545~556 (1981)
8. V. R. Voller and C. Prakash, Int. J. Heat Mass transfer, Vol. 30 No. 8 pp. 1709~1719 (1987)
9. V. R. Voller, Num. Heat transfer, Vol. 17B pp. 155~169 (1990)
10. V. R. Voller and C. R. Swaminathan, Num. Heat transfer, Vol. 19B pp. 175~189

- (1991)
11. C. R. Swaminathan and V. R. Voller, Int. J. for Num. methods in enginrs., Vol. 30 pp. 875~898 (1990)
12. C. R. Swaminathan and V. R. Voller, Metall. trans., Vol. 23B pp. 651~664 (1992)
13. H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, 2nd ed. Clarendon press. Oxford (1959)
14. I. Ohnaka, 丸善株式會社 (1985)