

< 논 문 >

역확산을 고려한 이원합금의 비평형 수지상응고 해석

정재동* · 유호선** · 이준식***

(1996년 5월 8일 접수)

Analysis on the Non-Equilibrium Dendritic Solidification of a Binary Alloy with Back Diffusion

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

Key Words : Non-Equilibrium Solidification(비평형응고), Back Diffusion(역확산), Dendritic Solidification(수지상응고), Eutectic Fraction(공정분율)

Abstract

Micro-Macro approach is conducted for the mixture solidification to handle the closely linked phenomena of microscopic solute redistribution and macroscopic solidification behavior. For this purpose, present work combines the efficiency of mixture theory for macro part and the capability of microscopic analysis of two-phase model for micro part. The micro part of present study is verified by comparison with experiment of Al-4.9 mass% Cu alloy. The effect of back diffusion on the macroscopic variables such as temperature and liquid concentration, is appreciable. The effect, however, is considerable on the mixture concentration and eutectic fraction which are indices of macro and micro segregation, respectively. According to the diffusion time, the behavior near the cooling wall where relatively rapid solidification permits short solutal diffusion time, approaches Scheil equation limit and inner part approaches lever rule limit.

기 호 설 명

C : 농도
 \bar{C} : 평균농도
 c : 비열
 D : 물질확산계수
 f : 질량분율
 g : 체적분율
 h : 엔탈피
 h_f : 응고잠열
 h_{fv} : 단위체적당 응고잠열
 k : 열전도율
 k_p : 평형분배계수

J : 상경계면을 통과하는 용질플럭스
 l : 확산길이
 Le : Lewis수($Le = a/D$)
 m : 액상선의 평균구배
 S_v : 비상 경계면적
 T : 온도
 t : 시간
 x : 좌표

그리스문자

α : 열확산계수
 ρ : 밀도
 Γ : 상경계면을 통과하는 질량플럭스
 λ_2 : 2차 수지상가지 간격
 γ : 단위면적당 표면에너지

*회원, 서울대학교 대학원 기계공학과

**회원, 숭실대학교 기계공학과

***회원, 서울대학교 기계공학과

하첨자

0 : 초기값
cut : 공정
i : 상경계면
l : 액상
m : 머시
s : 고상
w : 벽면

상첨자

sl : 용질
sv : 용매

1. 서 론

합금의 주조시 나타나는 미시적, 거시적 조성의 불균일, 즉 편석은 주물의 재질과 직결되는 중요한 문제이다.⁽¹⁾ 전자는 응고과정동안 고상과 액상 사이의 용해도 차이에 따른 용질재분포에, 후자는 대류에 기인한다. 이러한 거동을 수학적으로 기술하고 예측하는 것은 재료공정의 개선을 위한 중요한 요소로서 이의 해석방법은 일반적으로 해석대상의 특성길이에 따라 미시적 및 거시적 모델로 구분될 수 있다. 수지상까지의 간격의 범위에 걸친 미시편석에 대한 해석은 전자에 속하며 결정의 성장속도, 결정 내부의 농도분포, 공정분율 등의 예측이 그 목적이다. 반면 후자의 경우 해석대상은 주형 크기의 차원이며 거시적인 고상, 머시, 액상영역에 걸친 열농도대류에 의한 열 및 물질전달을 해석한다.

지금까지는 각각의 영역에서 독자적으로 연구가 진행되었고 그 결과도 상당히지만 상호간의 영향을 연계하여 수행한 결과는 미미한 실정이다. 예를 들어, 미시적 모델에서는 거시적 해석의 결과로 받아 들여야 할 조건인 상경계면의 속도나 온도에 대한 조건을 임의로 가정하여 해석을 수행하고 있으며, 지금까지 개발된 대부분의 거시적 모델은 머시영역 전체에서 열역학적 평형상태로 유지된다는 가정하에 lever rule을 적용하였으므로 미시적인 비평형 응고 특성은 해석에서 무시되었다. 그러나, 실제 미시적인 용질재분포와 거시적인 응고 거동은 독립적이 아니라 상호결합되어 있기 때문에, 최근 이점이 반영된 미시적-거시적 모델의 필요성이 반복적으로 지적되고 있으며^(2~4) 구체적인 개발도 진행되

고 있다.^(5,6) 상호결합된 응고특성을 해석하기 위한 미시적-거시적 모델의 개발에 있어서 고려할 인자는 거시적 해석에서의 효율성과 미시적 측면을 고려할 수 있는 해상도일 것이다. 이 두 가지 인자는 일반적으로 배치되는 경향을 가지고 있다. 즉, 미시적 측면에서 그 해상도가 증명된 모델은 미시적-거시적 연계시 각 검사체적에서 이루어지는 미시적 해석이 또한 상당히 복잡하므로 거시적 모델의 복잡성과 소요되는 과도한 계산시간 등을 고려하면 비효율적이고, 반면에 해석의 효율성만을 지향하면 미시적 특성을 해석하기 위한 해상도가 약해질 우려가 있다.

거시적 측면의 해석에서 Bennon과 Incropera⁽⁷⁾가 제안한 연속체모델은 비교적 효율적이며 다양한 적용에^(8~11)를 통해 그 유용성을 확인받았다. 하지만 적분과정에서 상경계면에서의 미시적 상호작용이 평균화되어 사라지게 됨으로써 미시적 현상에 대한 해상도는 극히 낮다는 단점이 있다. 반면에 Beckermann과 Viskanta,⁽¹²⁾ Ganesan과 Poirier⁽¹³⁾ 등이 제안한 2상모델(two-phase model)은 미시적 측면을 고려할 수 있다는 중요한 장점에도 불구하고 고상과 액상을 독립적으로 취급하여야 하므로 풀어야 할 미지수가 2배가 되어 과도한 계산시간과 기억용량이 필요하게 될 뿐만 아니라 확산길이나 상경계형상의 모델링에 새로운 불확실성이 포함될 가능성이 크다는 단점을 지닌다. 이는 이 모델을 적용한 응용예가 그다지 많지 않다는 사실에서도 확인될 수 있다. 독립적으로 개발된 두 모델에서 거시적 측면과 미시적 측면에서 가지는 각각의 장점은 전술한 미시적-거시적 연계해석시 고려해야 할 인자를 만족하며 이는 미시적-거시적 모델의 개발을 위한 가능성 있는 출발선으로 여겨진다.

본 연구에서는 기존 거시적 모델과의 적용이 용이하고 계산이 효율적인 미시적 모델을 지향하여 거시적 현상을 다룸에 있어서 연속체모델의 효율성과 미시적 현상을 고려하기 위해 2상모델의 장점을 적절히 조합하여 미시적-거시적 해석을 수행하였다. 해석에서의 미시적 측면을 검증하기 위해 별도로 미시적 모델만을 분리하여 가용한 실험자료 및 수치계산 결과와 비교하여 그 해상도를 확인하였다. 해석의 편의상 일차원 전도문제를 대상으로 하였으며 대상물질은 물성치가 잘 확립되어 있으며 합금응고에 많이 인용되고 있는 Al-Cu합금으로 하였다.

2. 공식화

2.1 거시적 모델

거시편석에 미치는 미시적 현상의 영향을 살펴보기 위한 목적에 따라 대류가 무시된 일차원 전도문제만을 다루기로 한다. 초기에 액상선 온도보다 높은 온도로 일정한 상태이며, $t > 0$ 일 때 우측경계는 단열로 하고 좌측경계를 공정온도 이하로 냉각한다. 연속체모델에 의한 지배방정식과 초기 및 경계조건은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_m) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_m \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_m) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D f_t \frac{\partial C_t}{\partial x} \right) \quad (2)$$

$$h_m = c_l T_0 + h_f, \quad C_m = C_0 \quad \text{when } t = 0 \quad (3)$$

$$h_m = c_s T_w, \quad \frac{\partial C_m}{\partial x} = 0 \quad \text{at } x = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial h_m}{\partial x} = \frac{\partial C_m}{\partial x} = 0 \quad \text{at } x = L \quad (5)$$

여기서, h_m , C_m , k_m 은 혼합물에 대한 값으로 각각 다음과 같이 정의된다.

$$h_m = f_l h_l + f_s h_s \quad (6)$$

$$C_m = f_l C_l + f_s C_s \quad (7)$$

$$k_m = f_l k_l + f_s k_s \quad (8)$$

고정좌표계에 의한 연속체모델⁽⁷⁾을 이용하여 지배방정식 (1), (2)에서 혼합물엔탈피와 혼합물농도를 구한 후, 식 (6), (7)에서 적절한 방법으로 온도와 고상질량분율을 구할 수 있다. 몇 가지 구체적인 고상질량분율 결정방법은 문헌^(14,15)에 제시되어 있으며 그 중요성도 누차 강조되고 있다.^(14~16) 하지만 기존의 고상질량분율 결정방법은 추후 언급할 미시적 모델 중에서 평형응고만을 대상으로 한 lever rule에 국한되어 있다는 단점이 있다. 거시적 접근에서의 이러한 단점에 비해 기존의 미시적 접근에서는 혼합물의 농도와 온도에 주어진 값을 부여하여 식 (7)를 다룸으로써 거시적 현상과의 연결이 이루어지지 않는 문제점이 있다. 따라서 미시적 현상의 영향을 받는 식 (6), (7)과 거시적 현상을 지배하는 식 (1), (2)는 상호 영향을 미치므로 이를 설명하는 미시적-거시적 모델이 필요할 것이다.

대부분의 금속에서 Le수는 $10^3 \sim 10^4$ 으로 열확산은 물질확산에 비해 매우 커서 미소한 검사체적내

의 온도는 균일한 것으로 취급할 수 있다.⁽¹⁷⁾ 따라서 식 (6)에서 고상과 액상의 엔탈피는 각각 다음과 같이 온도만의 함수로 결정된다.

$$h_l = c_l T + h_f \quad (9)$$

$$h_s = c_s T \quad (10)$$

그렇지만 유한한 물질확산으로 인하여 고상과 액상의 평균농도(\bar{C}_s , \bar{C}_l)와 고상선과 액상선 온도에 대응하는 상경계면의 농도(C_{sl} , C_{li})는 일치하지 않는다. 따라서 적절한 미시적 모델링을 통하여 고상과 액상에서의 평균농도를 결정함으로써 거시적 지배방정식 (1), (2)에서 구한 혼합물엔탈피, 농도와 함께 식 (6), (7)로부터 고상질량분율을 결정하게 된다.

2.2 미시적 모델

액상의 평균농도와 상경계에서의 액상농도의 차이는 고상에서 방출된 용질이 상경계면 부근에 집적됨으로써 나타나는 조성적 과냉이 원인이다. 다만 급속응고를 제외한 일반적인 응고조건하에서 응고초기를 제외하고는 그 효과는 현저하지 않다고 알려져 있다.⁽¹¹⁾ 이에 근거하여 본 연구에서는 조성적 과냉을 무시하고 액상의 평균농도와 상경계면에서의 액상농도는 일치한다고 가정한다. 그러나, 일반적으로 고상의 평균농도와 상경계면의 고상농도는 서로 일치하지 않으며, 이에 따라 고상내에서의 역확산이 중요한 공정인자가 된다. 역확산의 영향을 고찰하기 위하여 그 정도에 따라 다음과 같은 두 가지 극한적인 경우를 취급하고 양자 사이의 유한한 역확산 문제를 추가적으로 고려하기로 한다.

첫째는 고상내에서의 물질확산이 매우 커서(역확산이 무한대) 고상내 농도구배가 존재하지 않는 경우로서 lever rule로 알려진 가정이며, 두번째는 고상에서의 역확산이 없는 경우로서 Scheil식으로 알려진 가정이다. Lever rule에 따를 경우 확산에 필요한 시간이 0이 되므로 고상과 액상의 평균농도는 온도만의 함수로 결정되고,⁽¹¹⁾ Scheil식의 경우에도 확산에 필요한 시간이 무한대가 되어 고상과 액상의 평균농도는 시간에 대한 의존성이 사라지고 온도만의 함수로 결정되게 된다.⁽¹¹⁾ 따라서 이 경우에는 식 (6), (7)에서 온도와 고상질량분율을 구하는 방법이 비교적 간단하며 이에 대한 구체적인 방법은 문헌^(14,15)에 제시되어 있다. 그러나 lever rule과 Scheil식 사이에 해당되는 역확산이 유한한 경

우 고상내 확산은 온도뿐만 아니라 시간의 함수가 되므로 식 (6), (7)로부터 온도와 고상질량분율을 구하기 위해서는 고상평균농도가 동시에 알려져 있어야 한다. 즉, 고상평균농도를 결정하기 위한 미시적 모델이 필요하다.

본 연구에서는 잘 알려진 2상모델⁽⁶⁾로부터 미시적 정보를 얻기로 한다. 각 상에서의 대류항이 무시된 지배방정식과 상경계면에서의 조건은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(g_k \rho_k C_k) = \nabla \cdot (D_k g_k \rho_k \nabla C_k) + J_k \quad k=s, l \quad (11)$$

$$\Sigma \Gamma_k = 0, \quad \Sigma J_k = 0 \quad k=s, l \quad (12)$$

여기서 Γ_k , J_k 는 각각 상경계면을 통과하는 질량플럭스와 용질플럭스이다. 상경계면에서의 용질플럭스, J_k 는 다시 다음과 같은 두 항으로 분리할 수 있다. (자세한 유도과정은 문헌 (5) 참조)

$$J_k = C_{ki} \Gamma_k + S_v \rho_k \frac{D_k}{l_i} (C_{ki} - \bar{C}_k) \quad (13)$$

식 (11)로 표현되는 고상과 액상에 대한 각각의 지배방정식을 더하고 상경계면조건(식 (12))을 이용하면 혼합물농도 방정식인 식 (2)로 환원된다는 사실에 주의할 필요가 있다. 이는 동일한 지배방정식으로부터 미시적, 거시적 처리를 수행하고 있음을 의미하고, 따라서 기존의 다른 모델들에 비해 미시적-거시적 연계가 용이할 것이다.

식 (11)로부터 고상평균농도를 구하기 위해서 하나의 검사체에 대한 고상의 농도지배방정식을 구성하면 다음과 같다. 이때 거시적 확산길이에 비해 상경계면을 통한 미시적 용질변화의 특성길이는 매우 작으므로 식 (11)의 우변 첫째항은 무시할 수 있다.⁽¹⁸⁾

$$\frac{d}{dt}(\rho_s g_s \bar{C}_s) = C_{si} \frac{d}{dt}(\rho_s g_s) + S_v \rho_s \frac{D_s}{l_s} (C_{si} - \bar{C}_s) \quad (14)$$

여기서, 고상내 미시적 확산길이 l_s 과 고상의 평균농도는 Fig. 1에 개략적으로 도시하였으며 본 연구에서는 1차근사로 아래 식으로 정의되는 확산길이를 고상과 액상에서의 확산을 해석하기로 한다.

$$l_s = \frac{C_{si} - \bar{C}_s}{-\partial C_s / \partial n}_{si} \quad (15)$$

상경계면에서의 고상농도 C_{si} 는 상평형선에서

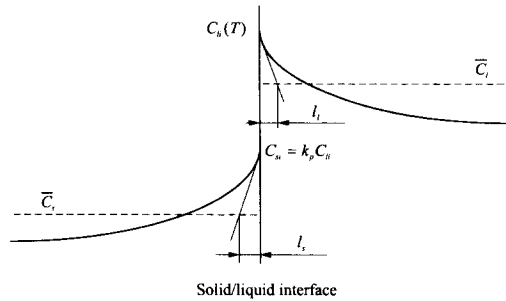


Fig. 1 Schematic illustration of species diffusion length and average phase concentration

검사체적 온도에 대응하는 고상선농도이다. 고상내 확산길이는 역확산이 존재할 때 미시편석 예측에 중요한 인자로서 본 연구에서는 실험을 통해 검증된 Ohnaka의 모델⁽¹⁹⁾에 의존하기로 한다. 포물선형 고상농도 분포를 가정하고 2차 수치상가지를 일차원 형상으로 가정할 때 고상내 확산길이와 상경계면 표면적대 체적비인 비상 경계면적(interfacial area concentration)은 각각 다음과 같이 결정된다.⁽⁵⁾

$$l_s = \frac{g_s \lambda_2}{6} \quad (16)$$

$$S_v = \frac{2}{\lambda_2} \quad (17)$$

식 (14)는 역확산이 고려된 일반적인 형태로서 고상내 용질확산의 두 극한인 lever rule 및 Scheil식을 포함하고 있음을 쉽게 확인할 수 있다.

2.3 미시적-거시적 해석

전술한 미시적 및 거시적 모델을 연계하여 역확산이 고려된 비평형응고를 해석하는 구체적인 방법은 다음과 같이 요약된다.

(1) 전 단계에서 결정된 T 와 f_s 를 이용하여 거시적 지배방정식 식 (1), (2)의 해로서 혼합물엔탈피(h_m)와 혼합물농도(C_m)를 결정한다.

(2) 상평형선도 및 식 (16), (17)로부터 C_{si} , l_s , S_v 를 구한다.

(3) 식 (14)로부터 고상의 평균농도를 구한다.

(4) 상평형선도로부터 결정된 고상과 액상의 엔탈피, 과정 (3)에서 결정된 고상의 평균농도를 이용하고 적절한 질량분율 결정방법에 따라 식 (6), (7)을 동시에 만족하는 국소온도(T)와 고상질량분율(f_s)을 결정한다.

(5) 수렴조건에 만족될 때까지 과정 (1)~(4)를 반복한다.

3. 결과 및 고찰

3.1 타당성 검토

해석에 적용한 거시적 모델에 대한 검증은 문헌 (16)에서 구체적으로 취급하였기 때문에 반복하지 않으며, 여기서는 식 (14)로 표시된 미시적 모델을 검토하기로 한다. 대상물질은 물성치가 잘 확립되어 있으며 비교가 가능한 실험⁽²⁰⁾ 및 수치해석⁽¹⁷⁾ 자료가 있는 초기농도 Al-4.9 mass% Cu인 합금으로 하였다. 냉각속도가 일정한 조건하에서 수치상응고과정을 예측한 결과를 최종응고시 공정분율을 대상으로 Fig. 2에서 비교하였다. 실험자료로부터 공정분율로의 변환은 연구자에 따라 다소 차이가 있으며 이에 관한 자세한 언급은 문헌⁽²¹⁾을 참고하기 바란다. 여기서는 문헌 (21)에서 제안한 방법을 따르기로 한다. 밀도모델은 농도에 따른 변화는 허용하되 체적은 일정하게 유지될 수 있도록 정의된 식^(21,22)을 사용하였고 수치상까지 조대화는 다른 경험식에 비해 실제 거동을 잘 반영하는 것으로 알려진 Roosz 등의 식⁽²³⁾에 의존하였다.

$$\rho = \frac{\rho^{sl}\rho^{sv}}{(1-C)\rho^{sl} + C\rho^{sv}} \quad (18)$$

$$[\lambda_2/2]^2 = 13.125 \int_0^t \frac{\gamma D_i T}{m(1-k_p)h_{fv}C_i} dt \quad (19)$$

냉각속도가 큰 경우(1700 K/s)에서 보이는 실험⁽²⁰⁾

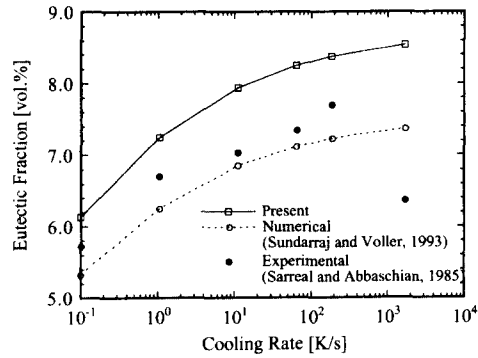


Fig. 2 Comparison of the eutectic fraction between the microscopic part of present study and available numerical analysis and experiment with respect to the cooling rate

과의 불일치는 해석 모델이 과냉효과를 포함하지 않기 때문이며 이러한 급냉시를 제외하고는 광범위한 냉각속도 범위에서 정성적으로 일치함을 확인할 수 있다. 다만 본 연구결과의 미시적 부분에 대한 평가가 비록 정교한 수치모델⁽¹⁷⁾에 비하여 정량적으로는 실험자료와 차이가 있지만 식의 형태에서 알 수 있듯이 단순화된 모델임을 감안하면 비교적 양호한 일치로 판단된다.

분명히 하여야 할 것은 본 연구에서의 미시적 부분에 대한 결과를 다른 미시적 해석결과들과 정량적인 비교를 통해 정밀도를 확인하고자 하는 시도는 지양되어야 할 것이다. 본 연구의 미시적 처리에서는 확산길이 l_0 나 비상 경계면적 S_0 의 모델링에 도입된 불확실성 때문에 기존 미시적 해석에서

Table 1 Thermophysical properties of Al-Cu alloy

Properties	Solid	Liquid
Specific heat [J/kgK]	924.0	882.0
Thermal conductivity [W/mK]	180.6	100.8
Melting temperature [°C]	660.37	
Eutectic temperature [°C]	548.0	
Eutectic concentration [mass%]	33.2	
Partition coefficient	0.17	
Density [kg/m ³]	2466.4	
Latent heat [J/kg]	3.87 × 10 ⁵	
Mass diffusion coefficient [m ² /s]	2.6 × 10 ⁻⁷ (2.6 × 10 ⁻⁹)	

의 미소 검사체적의 해석만을 위해 개발된 정교한 해석과는 차이가 있으므로 그 정밀도를 직접 비교할 수는 큰 의미가 없을 것이다. 본 연구의 목적이 적절한 수준의 정밀도로 거시적 현상과의 연계가 가능한 효율적인 미시적 모델의 개발임을 고려하면 Fig. 2에서 보여준 미시적 부분에 대한 해석결과는 충분히 거시적 현상에서 미시적 효과의 응고특성 경향을 보여줄 수 있을 것이다.

3.2 역확산의 영향

역확산의 정도(lever rule: $D_s \rightarrow \infty$, Scheil식: $D_s = 0$, $D_s = 2.6 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_s = 2.6 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$)에 따른 거시적 현상의 변화를 살펴보기 위해 길이(L) 0.02 m에서 일차원 전도문제를 Al-Cu합금에 대해 수행하였다. 초기농도의 영향을 보기 위해 고상의 용해도한계 이하인 3%와 그 이상인 10%에 대해 각각 수행하였으며, 초기온도는 공히 680.0로 일치시켰다. $t > 0$ 일 때 좌측경계를 공정온도 이하인

520.0로 하여 응고가 진행되고, 그 결과를 Fig. 3 ~ Fig. 13에 나타내었다. 계산에 사용한 물성치는 Table 1에 요약하였고 거시적인 용질확산에 따른 편석을 가시화하기 위하여 액상의 확산계수만 실제 물성치($D_l = 2.6 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$)보다 크게($D_l = 2.6 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$) 사용하였다. 본 연구에서는 거시편석에 미치는 미시적 현상의 영향을 살펴보기 위해 다른 인자와의 상호작용을 배제하고자 전도만을 다루고 있으나 실제 응고과정에서는 대류에 의한 거시적인 용질이동이 활발하므로 확산계수를 크게 함으로써 인위적으로 거시적인 용질이동을 유도한 것이다. 이는 검사체적내 용질의 유출이 존재하는 일반적인 경우에 대해 미시적-거시적 연계해석을 수행하기 위함이다.

초기농도 3%에서의 결과인 Fig. 3~Fig. 7와 초기농도 10%에서의 결과인 Fig. 12, 13은 거리에 따른 거시적 변수(온도, 액상농도, 고상분율, 혼합물 농도, 수지상 고상질량분율)의 변화추이를 나타내

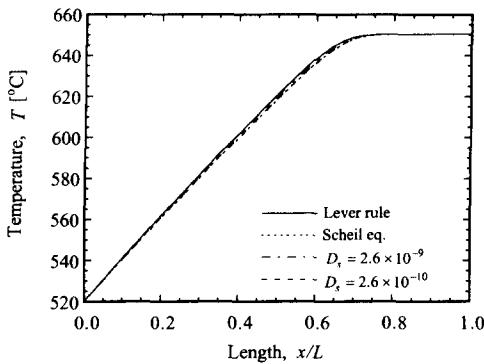


Fig. 3 The effect of solid diffusion coefficient on the temperature at $t=4\text{s}$ for $C_0=3\%$

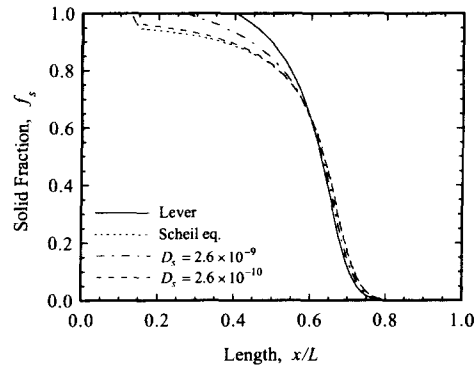


Fig. 5 The effect of solid diffusion coefficient on the solid fraction at $t=4\text{s}$ for $C_0=3\%$

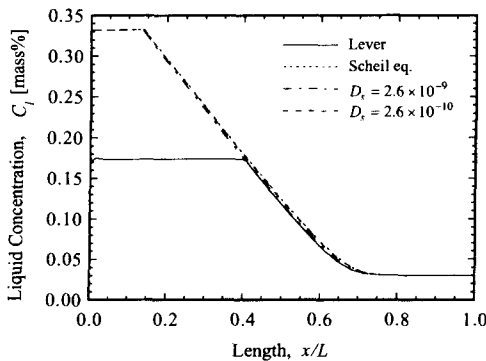


Fig. 4 The effect of solid diffusion coefficient on the liquid concentration at $t=4\text{s}$ for $C_0=3\%$

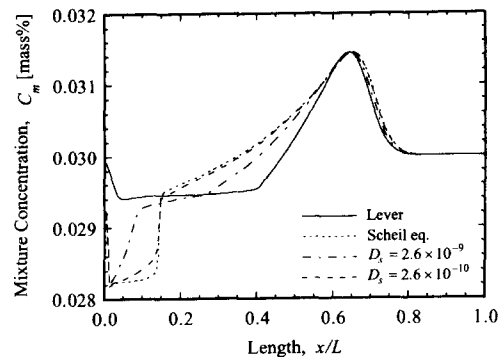


Fig. 6 The effect of solid diffusion coefficient on the mixture concentration at $t=4\text{s}$ for $C_0=3\%$

었고 Fig. 8~Fig. 11은 각 변수에 대해 각각 특정 위치($x/L=0.1083, 0.2629, 0.4691$)에서의 시간에 따른 변화추이를 나타내었다. 초기조건에 관계없이 온도나 거시적인 용질확산이 작을 경우 주로 온도에 의해 결정되는 액상농도는 역확산의 정도에 크게 의존하지 않는다. 하지만 편석의 지표가 될 수 있는 혼합물농도나 고상분율은 미시적 효과로서의 역확산 정도에 따라 극명한 차이를 보이고 있다. 고상의 확산계수가 비교적 큰 $2.6 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ 의 경우는 양 극한인 lever rule과 Scheil식 사이에서 확산을 무한대로 가정한 lever rule에 가까운 경향을 보이고 고상의 확산계수가 비교적 작은 $2.6 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 의 경우에는 확산을 무시한 Scheil식의 결과로 접근함을 살펴볼 수 있다. 특히 좌측 벽면부에서는 $D_s=2.6 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ 이나 $D_s=2.6 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 의 경우 모두 Scheil식에 접근하고 응고 중앙부에서는 양 경우 모두 lever rule쪽으로 접근함은 초기에 벽

면온도를 갑자기 떨어뜨렸을 때 좌측 벽면 부근은 급속한 응고를 경험하게 되어 용질의 입장에서 확산에 필요한 시간이 충분하지 않으므로 확산을 무시한 Scheil식의 결과로 접근하며 응고중앙부에서는 벽면에서 충분히 떨어져 있기에 비교적 긴 시간 동안 용질의 확산을 경험하므로 확산시간을 무한대로 가정한 lever rule의 결과에 접근하게 된다.

각 위치의 시간에 따른 변화경향을 Fig. 11을 통해 살펴보기로 한다. 응고벽에서 비교적 가까운 $x/L=0.1083$ 의 위치에서 초기에는 벽면 영향을 거의 받지 않다가 좌측부에서 응고시 방출되는 용질이 계속적으로 응고면 우측에 쌓이게 되나 상대적으로 확산되는 양이 작으므로 갑자기 상승하는 부분이 생기게 된다. 이후는 그 자신의 응고에 의해 이전 과정과 마찬가지로 우측에 용질을 방출하면서 동시에 좌측부로부터 용질이 유입되나 시간이 지남에 따라 유입되는 용질의 양은 방출되는 용질량에 비

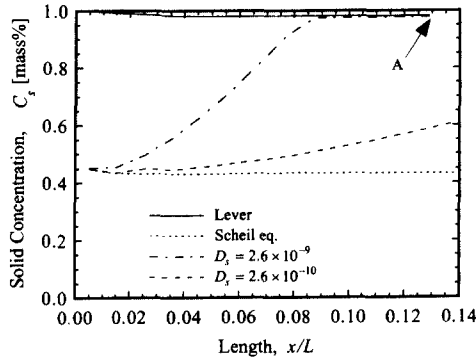


Fig. 7 The effect of solid diffusion coefficient on the solid concentration at $t=4\text{s}$ for $C_0=3\%$

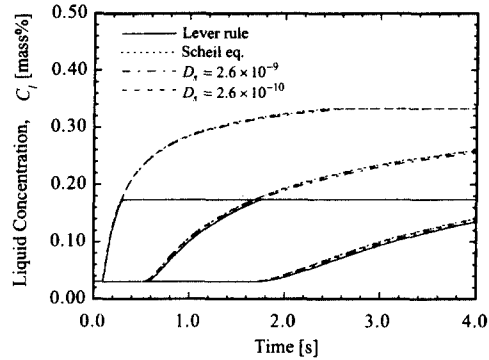


Fig. 9 The effect of solid diffusion coefficient on the liquid concentration with respect to time at $x/L=0.1083, 0.2629$ and 0.4691 for $C_0=3\%$

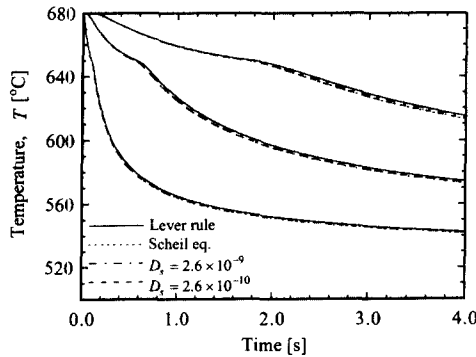


Fig. 8 The effect of solid diffusion coefficient on the temperature with respect to time at $x/L=0.1083, 0.2629$ and 0.4691 for $C_0=3\%$

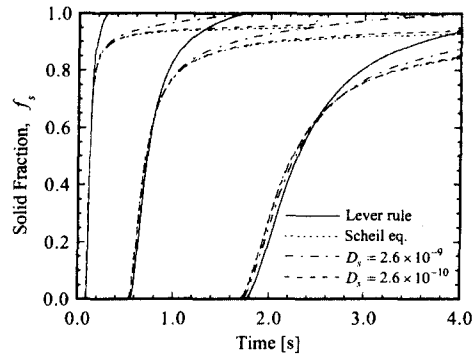


Fig. 10 The effect of solid diffusion coefficient on the solid fraction with respect to time at $x/L=0.1083, 0.2629$ and 0.4691 for $C_0=3\%$

해 줄어들게 된다. 따라서 이 두 양의 상대적인 크기에 따라 비교적 완만한 경사를 보이며 혼합물농도는 감소하게 된다. 계속적으로 응고가 진행됨에 따라 고려하고자 하는 위치의 바로 좌측 검사체적이 공정에 도달하게 되면 거시적 입장에서 고상내의 확산은 무시되므로 좌측으로부터 용질의 유입없이 자신만이 지속적으로 우측으로 용질을 방출하므로 급속히 혼합물농도는 작아지게 된다. 이후 완전히 고상으로 된 이후는 확산이 없으므로 일정한 상태로 유지된다. 이러한 경향은 벽면으로부터 비교적 멀리 떨어져 있는 $x/L=0.4691$ 의 경우에서도 마찬가지로 이 경우에는 아직 응고가 공정에 도달하기 전이므로 상기 서술에서 공정에 의한 급속한 감소가 있기 전까지의 경향만을 보이고 있다.

초기농도를 고상의 용해도한계 이하로 할 경우 고상의 확산계수가 무한대인 lever rule에 의하면 공정을 경험하지 않고 응고되므로 생성되는 고상은 모두 수지상이다. 하지만 고상의 확산계수가 작아짐에 따라 응고완료 시점이 점차로 늦어지게 되고 (Fig. 5와 Fig. 10에서 고상질량분율이 1인 위치를 살펴볼 것) 결국은 공정온도에서 응고가 완료되므로 수지상고상뿐만 아니라 공정상태의 고상이 함께 생성된다. 따라서 초기농도를 고상의 용해도한계 이상인 10%로 할 경우는 그 이하인 초기농도 3%로 할 경우보다 혼합물농도와 고상분율이 고상의 확산계수에 보다 의존함을 Fig. 6과 Fig. 12를 비교함으로써 확인할 수 있다.

응고시 생성되는 고상의 상태가 얼마만큼의 공정을 포함하고 있는가는 재질과 관련된 중요한 인자이다. 따라서 많은 미시적 해석에서 응고완료시 공정분율을 대상으로 연구가 수행되었고, 본 연구에서는 역확산의 정도에 따라 응고완료시 고상의 수지상을 초기농도로 표준화하여 Fig. 7과 Fig. 13에 나타내었다. 전술하였듯이 lever rule을 따를 경우 초기농도 3%에서는 공정이 생성되지 않고 고상의 확산계수가 작아질수록 Scheil식으로 접근하여 더 많은 공정이 생성됨을 알 수 있다. 따라서 Scheil식의 결과는 실제 공정(process)에서 과도한 미시편석을 예측하게 되고 lever rule의 결과는 실제 현상에서 보다 완화된 편석을 보이게 된다. Fig. 7의 A점은 일반적으로 거시적 용질이동이 없을 경우는 1이 될 것이나, 여기서는 대류가 무시된 관계로 실제치보다 크게 사용된 액상의 확산계수로 인한 용질확산의 결과이다. 실제로는 대류에 의한 용

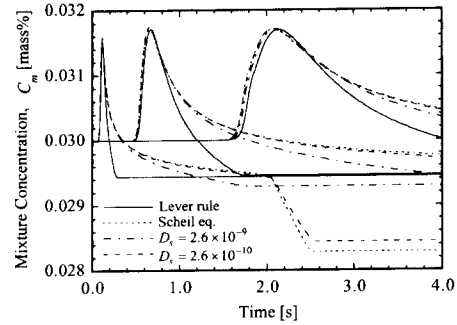


Fig. 11 The effect of solid diffusion coefficient on the mixture concentration with respect to time at $x/L=0.1083, 0.2629$ and 0.4691 for $C_0=3\%$

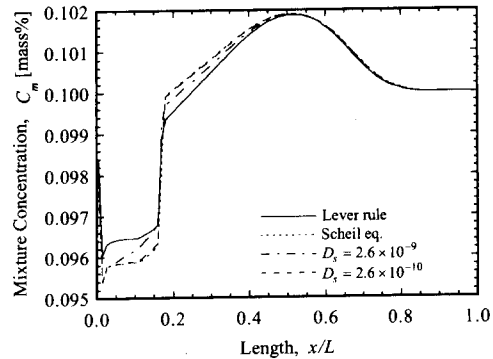


Fig. 12 The effect of solid diffusion coefficient on the mixture concentration at $t=4s$ for $C_0=10\%$

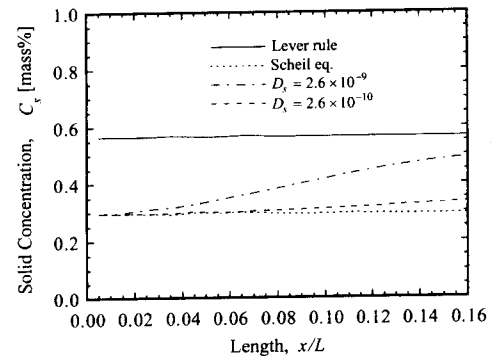


Fig. 13 The effect of solid diffusion coefficient on the solid concentration at $t=4s$ for $C_0=10\%$

질이동이 주원인이 될 것이다. Fig. 7과 Fig. 13의 각 경우에서 좌측 벽면부는 Scheil식의 결과로, 중심부는 lever rule의 결과로 접근함을 알 수 있다. 이는 응고시간과 관련하여 빠른 응고를 경험하는 좌측 벽면부는 Scheil식을 따르며 충분한 확산이

가능한 낮은 응고율을 경험하는 중심부는 lever rule에 따른다는 앞서의 논리와 같은 맥락이다.

4. 결 론

미시적인 용질재분포와 거시적인 응고거동은 상호 밀접하게 연관된 현상으로 이의 해석을 위한 미시적-거시적 모델을 Al-Cu합금을 대상으로 수행하여 거시적 현상에 대한 미시적 현상으로서의 역확산의 영향을 살펴보았다.

거시적 현상을 다룸에 있어서 그 효율성이 이미 증명된 연속체모델을 사용하였고 고상질량분율의 결정을 위해 필요한 고상평균농도는 고상내 용질보존식으로부터 미시적 정보를 구하는 미시적-거시적 연계해석을 수행하였다. 2상모델에서 적용한 고상내 용질보존식은 효율적으로 연속체모델과 연계가 가능하고 그 미시적 현상에 대한 해상도도 가용한 실험, 수치결과와 비교하여 검증하였다.

역확산의 영향을 살펴보기위해 양 극한인 lever rule과 Scheil식의 결과와 그 사이의 두 가지 확산계수에 대해 살펴볼 때 온도분포는 큰 차이가 없으나 편석의 지표가 되는 혼합물농도와 고상분율은 크게 변화함을 확인하였다. 특히 초기농도가 고상의 용해도한계 이하일 경우 그 차이가 분명해짐을 알 수 있었다. 역확산이 존재할 때 확산계수와 관계없이 벽면 부근에서는 응고가 빨리 진행되므로 용질확산이 충분히 이루어지지 않아 Scheil 극한으로 접근하게 되며 중심부에서는 응고시간이 충분히 되어 lever rule의 극한으로 접근하게 된다.

참고문헌

(1) Kurz, W. and Fisher, D. J., 1986, *Fundamentals of Solidification*, Trans Tech. Publs.
 (2) Rappaz, M., 1989, "Modeling of Microstructure Formation in Solidification Processes," *Int. Mater. Rev.*, Vol. 34, pp. 93~123.
 (3) Rappaz, M. and Voller, V. R., 1990, "Modeling of Micro-Macroseggregation in Solidification Processes," *Metall. Trans.*, Vol. 21A, pp. 749~753.
 (4) Voller, V. R., 1993, "Solidification," *Computational Methods for Free and Moving Boundary Problems in Heat and Fluid Flow*, Wrobel, L. C.

and Brebbia, C. A. ed., *Compl. Mech. Publs. and Elsevier Appl. Sci.*, pp. 189~206.
 (5) Wang, C. Y. and Beckermann, C., 1992, "A Multiphase Micro-Macroscopic Model for Solute Diffusion in Dendritic Alloy Solidification," *Micro-macro Scale Phenomena in Solidification*, Beckermann, C. et al ed., HTD-Vol. 218/AMD-Vol. 139, pp. 43~57, ASME.
 (6) Ni, J. and Incropera, F. P., 1995, "Extension of the Continuum Model for Transport Phenomena Occuring during Metal Alloy Solidification-II. Microscopic Considerations," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, pp. 1285~1296.
 (7) 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.
 (8) Bennon, W. D. and Incropera, F. P., 1987, "A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems-II. Application to Solidification in a Rectangular Cavity," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 30, pp. 2171~2187.
 (9) Neilson, D. G. and Incropera, F. P., 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.
 (10) Prescott, P. J. and Incropera, F. P., 1991, "Numerical Simulation of a Solidifying Pb-Sn Alloy: The Effects of Cooling Rate on Thermosolutal Convection and Macroseggregation," *Metal. Trans.*, B., Vol. 22, pp. 529~540.
 (11) Chiang, K. C. and Tsai, H. L., 1992, "Shrinkage-Induced Fluid Flow and Domain Change in Two-Dimensional Alloy Solidification," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 35, pp. 1763~1770.
 (12) Beckermann, C. and Viskanta, R., 1988, "Double-Diffusive Convection during Dendritic Solidification," *PhysicoChemical Hydrodyn.*, Vol. 2, pp. 195~213.
 (13) Ganesan, S. and Poirier, D. R., 1990, "Conser-

- vation of Mass and Momentum for the Flow of Interdendritic Liquid during Solidification," *Metall. Trans.*, Vol. 21B, pp. 173~181.
- (14) Bennon, W. D. and Incropera, F. P., 1988, "Numerical Analysis of Binary Solid-Liquid Phase Change using a Continuum Model," *Numerical Heat Transfer*, Vol. 13, pp. 277~296.
- (15) Prakash, C. and Voller, V., 1989, "On the Numerical Solution of Continuum Mixture Model Equations Describing Binary Solid-Liquid Phase Change," *Numerical Heat Transfer*, Vol. 15, Part B, pp. 171~189.
- (16) 정재동, 유호선, 이준식, 노승탁, 1996, "연속체모델에 의한 수치해석결과에 대한 재평가," 대한기계학회논문집 심사중.
- (17) Sundarraj, S. and Voller, V. R., 1993, "The Binary Alloy Problem in an Expanding Domain: The Microsegregation Problem," *Metall. Trans.*, Vol. 21A, pp. 260~263.
- (18) Wang, C. Y. and Beckermann, C., 1993, "A Multiphase Solute Diffusion Model for Dendritic Alloy Solidification," *Metall. Trans.*, Vol. 24A, pp. 2787~2802.
- (19) Ohnaka, I., 1986, "Mathematical Analysis of Solute Redistribution during Solidification with Diffusion in Solid Phase," *Trans ISIJ*, Vol. 26, pp. 1045~1051.
- (20) Sarreal, J. A. and Abbaschian, G. J., 1985, "The Effect of Solidification Rate on Microsegregation," *Metall Trans.*, Vol. 17A, pp. 2063~2073.
- (21) 유호선, 1994, "수직환상주형내 Al-Cu합금의 응고과정 및 냉각속도의 조대편석에 대한 영향," 대한기계학회논문집, 제18권, 제7호, pp. 1818~1832.
- (22) Voller, V. R. and Sundarraj, S., 1993, "Modeling of Microsegregation," *Mat. Sci. Technol.*, Vol. 9, pp. 474~481.
- (23) Roosz, A., Halder, E. and Exner, H. E., 1986, "Numerical Calculation of Micro-Segregation in Coarsened Dendritic Microstructures," *Mat. Sci. Technol.*, Vol. 2, pp. 1149~1155.