

체적수축유동이 있는 일차원 다원합금 응고에 대한 확장된 해석해

정재동* · 유호선** · 최만수*** · 이준식***
(1999년 8월 4일 접수)

An Extended Similarity Solution for One-Dimensional Multicomponent Alloy Solidification in the Presence of Shrinkage-Induced Flow

Jae Dong Chung, Hoseon Yoo, Mansoo Choi and Joon Sik Lee

Key Words: Multicomponent Alloy(다원합금), Solidification(응고), Similarity Solution(상사해), Microsegregation Parameter(미시편석인자), Partition Coefficient(분배계수)

Abstract

This paper deals with a generalized similarity solution for the one-dimensional solidification of ternary or higher-order multicomponent alloys. The present approach not only retains the existing features of binary systems such as temperature- solute coupling, shrinkage-induced flow, solid-liquid property differences, and finite back diffusion, but also is capable of handling a multicomponent alloy without restrictions on the partition coefficient and microsegregation parameter. For an alloy of N -solute species, governing equations in the mushy region reduce to $(N+2)$ nonlinear ordinary differential equations via similarity transformation, which are to be solved along with the closed-form solutions for the solid and liquid regions. A linearized correction scheme adopted in the solution procedure facilitates to determine the solidus and liquidus positions stably. The result for a sample ternary alloy agrees excellently with the numerical prediction as well as the reported similarity solution. Additional calculations are also presented to show the utility of this study. Finally, it is concluded that the present analysis includes the previous analytical approaches as subsets.

기호설명

A, B : 용질성분
C : 농도
c : 비열
f : 고상질량분율
k : 열전도계수
 k_p : 분배계수
L : 응고잠열

m : 액상선의 구배
 N : 용질성분의 수
 P, R : 계수
 t : 시간
 T : 온도
 T_f : 용매의 응해온도
 u : 속도
 U : 무차원 속도, $u/(a_i/t)^{1/2}$
 x : 응고방향 좌표

* 회원, 서울대학교 정밀기계설계공동연구소
E-mail : jdchung@gong.snu.ac.kr
TEL : (02)880-7545(교305) FAX : (02)887-8762

** 회원, 숭실대학교 기계공학과

*** 회원, 서울대학교 기계항공공학부

그리스문자

α : 열확산계수
 β : 미시편석인자
 δ : 상경계면 위치

- ϕ : 대표변수
- η : 상사변수, $x/(4\alpha_1 t)^{1/2}$
- λ : 변환된 상경계면 위치, $\delta/(4\alpha_1 t)^{1/2}$
- ρ : 밀도
- ω : 상경계면 위치에 대한 보정치

상첨자

- $\hat{}$: 고상/액상 물성치 비
- i : 용질성분
- n : 반복과정에서 새로운 값

하첨자

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

1. 서론

혼합물의 응고과정은 열 및 물질전달 분야에 있어서 중요한 관심사 중의 하나이며, 이에 관하여 광범위한 해석적, 수치적 및 실험적 연구가 수행되어 왔다. 연속체모델이나 체적평균기법과 같은 수치해석 방법은 상경계면의 거동, 열농도 대류, 재용해, 거시편석 등 혼합물의 응고에 수반되는 거시적 특성의 정성적 예측에 유용함이 이미 확인된 바 있다.⁽¹⁾ 또한 미세조직의 형태, 결정구조내의 역확산 등 미시적 특성을 해석에 포함시키기 위한 노력^(2,3)과 더불어 다원합금의 응고과정에 대한 예측도 시도되고 있다.⁽⁴⁻⁷⁾

수치모델의 개발에 있어서 본질적인 장애요소 가운데 하나는 결과의 정량적 검증에 필요한 적절한 기준이나 비교대상이 부족한 점이다. 사실 측정상의 제약이나 실험조건 및 물성치의 불확실성으로 인하여 발표된 실험자료 중에서 수치해와 직접 비교가 가능한 경우는 많지 않다. 예측결과와 실제 현상의 일치도 및 정립된 모델방정식에

대한 해 자체의 타당성 관점에서 수치모델을 평가할 때, 후자의 경우 제한된 조건에 대한 해석 해와의 비교는 유력한 수단이 된다. 이때 해석해는 수치모델이 지향하는 기본적인 특성을 상당한 수준까지 반영한 것이어야 한다. 예를 들어, 다원합금의 응고모델을 검증하기 위해서 순수물질에 대한 해석해는 무의미하며, 혼합물 응고의 특징인 온도와 농도의 연계성이 고려된 해석해가 필요할 것이다.

혼합물 응고에 대한 해석해는 정교한 수치모델의 검증을 위한 이론적 기준으로서 유용할 뿐만 아니라 그 자체가 특정한 경우에 대한 응고특성의 예측에 적용될 수 있기 때문에 다양한 형태로 유도되어 왔다.⁽⁸⁻¹¹⁾ 특히 최근에 발표된 두 연구^(12,13)에서는 기존의 해에 내포된 문제점과 적용한계의 체계적인 보완을 시도하였다. Voller⁽¹²⁾는 머시영역에서 온도-농도 연계성의 중요성을 보이기 위하여 체적수축유동에 의한 용질의 이동을 포함한 상사해를 제시하였다. 열농도대류가 억제된 방향성응고에서 체적수축유동에 의한 거시편석⁽¹⁴⁾을 예측할 수 있으며, 근사적이지만 미시적인 역확산까지 포함되었기 때문에 의미있는 진전임에 틀림없다. 그러나 이 연구는 액상영역 내의 대류항을 무시하였고, 밀도를 제외한 물성치의 고·액상사이 차이를 배제하였으며, 고상선 및 액상선의 위치결정을 비효율적인 방법에 의존하고 있다. 이러한 문제점을 보완한 보다 확장된 상사해가 Chung 등⁽¹³⁾의 연구주제이다. 그럼에도 불구하고 지금까지의 해석적 접근은 이원합금에 국한되어 조성이 3개 이상인 다원합금을 위한 수치모델⁽⁴⁻⁷⁾의 타당성 평가에는 적용되기 곤란하다.

다원합금의 응고에 대한 최초의 해석적 연구는 Mehrabian과 Flemings⁽¹⁵⁾에 의해 시도되었으나 초보적인 수준에 불과하다. 최근 전술한 Voller⁽¹²⁾는 이원합금에 대한 상사해를, 각 성분의 분배계수와 미시편석인자가 같은 경우에 국한하여, 삼원합금에 적용한 바 있다. 사실 위의 제한조건 하에서 하나의 용질농도는 다른 용질농도의 상수배이므로, 이 결과는 이원합금에 대한 해석만으로도 획득될 수 있다. 엄밀한 의미에서 Voller의 방법은 이원합금에만 유효한 것이다.

본 연구는 이원합금에 대한 상사해⁽¹³⁾를 보다 일반화하여 각 성분의 분배계수와 미시편석인자에 대한 제한이 없는 다원합금 응고 해석을 지향

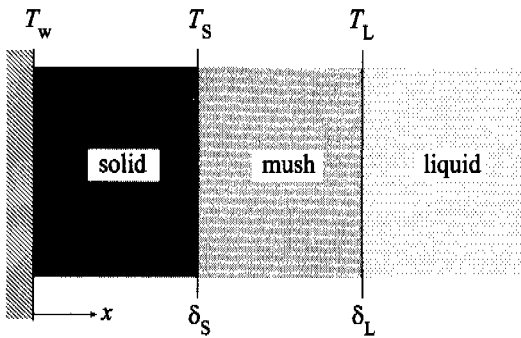


Fig. 1 Schematic of the present multicomponent alloy solidification model

한다. 원래의 상사해에 고려되었던 온도-농도 연계성, 고·액상의 물성치 차이, 체적수축유동, 역확산, 액상영역 내의 대류 등 기본적인 혼합물 응고의 특성은 그대로 유지한다. 삼원합금의 응고에 대한 알려진 수치해 및 제한된 상사해와의 비교를 통하여 본 연구결과의 타당성 및 유용성을 보이고, 각 용질성분의 분배계수와 미시편석 인자가 상이할 때 거시편석 거동을 고찰하고자 한다.

2. 해석

2.1 모델링

해석대상은 Fig. 1에 개략적으로 도시되었듯이 열농도대류가 없는 일차원 반무한 영역에서 다원합금의 비정상 방향성응고이다. 초기에 균일한 농도 C_0^i (후술될 삼원합금의 경우 $i=A, B$)인 액체가 액상선온도보다 ΔT 만큼 높은 온도로 유지되다가 $t=0$ 에서 공정온도보다 낮은 벽면온도 T_w 로 냉각되면 응고가 시작된다. 응고의 진행에 따라 시스템 내에는 고상선 및 액상선을 경계로 고상, 머시 및 액상영역이 존재한다. 해석은 상경계면의 위치, 각 영역 내의 온도분포, 머시영역 내 각 성분의 액상농도 및 고상분율의 분포를 결정하는 것이다. 이러한 문제에 해석적으로 접근하기 위하여 다음과 같은 가정을 도입하였다.

(1) 고상은 주상 수치상구조로서 벽면에 고정되어 있다.

(2) 머시영역 내 검사체적의 온도와 액상농도는 균일하다.

(3) 검사체적 내부의 미시적인 고·액 경계면에서는 열역학적 평형이 유지된다. 따라서 상평형도로부터 $C_{si}^i = k_p^i C_l^i$ 인 관계가 성립한다.

(4) 액상선은 직선으로 가정한다.

(5) 거시적 용질확산은 무시한다. 일반적인 합금의 Lewis수는 극히 크기 때문에 물질확산은 열확산에 비하여 무시될 수 있다.⁽¹⁶⁾

(6) 검사체적 내의 미시적인 용질확산(역확산)은 해석적 처리가 용이한 Clyne과 Kurz⁽¹⁷⁾의 모델에 의존한다.

(7) 머시 및 액상영역에는 고·액상의 밀도차이로 인한 체적수축(또는 팽창)유동이 존재한다.

(8) 각 상에 대한 물성치는 일정하지만 고·액상의 값이 일치할 필요는 없다. 따라서 머시영역 내의 물성치는 고상분율의 향으로 표현된다.⁽⁹⁻¹¹⁾

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

(9) 용질성분 사이의 확산은 무시한다.⁽⁶⁾

(10) 용질의 농도가 낮을 경우(dilute system) 액상온도와 용질농도 관계식은 다음으로 근사된다.^(4,5)

$$T = T_f + \sum_{i=1}^N m^i C_i^i \quad (2)$$

여기서 m^i 는 i 성분의 액상선 기울기이며 T_f 는 순수용매의 응고온도이다.

가정 (1)~(8)은 이원합금에 대한 선행연구⁽¹³⁾에서와 동일하다. 추가적인 가정 (9)는 다원합금의 해석에서 각 성분에 대한 전달방정식을 유도하는 근거가 되며, 차원해석을 통해 증명되었다.⁽⁶⁾

상기 가정 및 상평형관계에 기초하여 유도된 각 영역에서의 지배방정식은 아래와 같다.^(12,13) 고상 및 액상영역의 농도는 균일하며, 체적수축유동으로 인하여 머시영역의 수치상간 액체는 연속방정식을 만족하여야 한다.

고상영역($0 < x < \delta_s$)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_s \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3)$$

머시영역($\delta_s < x < \delta_L$)

$$\frac{\partial u}{\partial x} = (1 - \hat{\rho}) \frac{\partial f}{\partial t} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & [f\hat{\rho}\hat{c} + (1-f)] \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \\ & + \left[\hat{\rho} T (\hat{c} - 1) - \frac{L}{c_l} \hat{\rho} \right] \frac{\partial f}{\partial t} \quad (5) \\ & = a_l \frac{\partial}{\partial x} \left[(f\hat{k} + (1-f)) \frac{\partial T}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & [(1-f) + \beta^i f \hat{\rho} k_p^i] \frac{\partial C_l^i}{\partial t} + u \frac{\partial C_l^i}{\partial x} \quad (6) \\ & = (1 - k_p^i) C_l^i \hat{\rho} \frac{\partial f}{\partial t} \end{aligned}$$

액상영역 ($\delta_L < x < \infty$)

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

초기조건 및 경계조건은 다음과 같다.

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

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

$$\delta_S = \delta_L = 0 \quad \text{at } t = 0 \quad (10)$$

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

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

$$T = T_S \quad \text{at } x = \delta_S \quad (13)$$

$$\begin{aligned} & k_m \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_m - k_s \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_s \\ & = -\rho_s \frac{d\delta_S}{dt} (1 - f_{eut}) [(c_l - c_s) T + L] \quad (14) \\ & \quad \text{at } x = \delta_S \end{aligned}$$

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

$$k_m \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_m - k_l \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_l = 0 \quad \text{at } x = \delta_L \quad (16)$$

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

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

식 (2)~(18)의 해를 구하는 과정에서 상경계면의 위치 $\delta_S(t)$ 및 $\delta_L(t)$ 는 각각 식 (14)와 (16)을 만족하도록 결정되어야 한다. 머시영역에 대한 각 성분의 농도방정식 (6)에서 좌변의 β^i 는 수지상고체 내부에서 i 용질성분의 역확산 정도를 표시하는 미시편석인자로서, $\beta^i = 0$ 및 1은 각각 Scheil한계 및 lever rule에, $0 < \beta^i < 1$ 은 유한한 역확산에 대응한다.⁽¹⁷⁾ 액상영역에서의 속도는 일정하며, 액상선에서의 연속조건 ($u = u_l$)으로부터 구해진다. 고상분율은 액상선에서는 연속 ($f = 0$)인 반면 고상선에서는 공정반응이 있는 경우 불연속이다. 이때 고상선에서는 순수물질의 경우와 유사하게 일정한 온도 (T_{eut})를 유지하면서 공정분율 (f_{eut})만큼의 고체가 식 (14)와 같이 잠열을 방출하면서 응고한다. 따라서 식 (4)에 의해 고상선에서는 속도 u 도 불연속이며 그 값은 식 (12)로 주어진다.

2.2 상사변환

수학적으로 식 (2)~(18)의 엄밀해를 구하기는 곤란해 보인다. 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 의미한다.^(10,12,13)

해석적 처리를 위하여 상사변수 $\eta (= x/(4a_l t)^{1/2})$ 를 도입하여 지배방정식을 변환하였다. 이때 고상과 액상영역에서의 온도분포에 대한 상사해는 이미 확립되어 있다.^(12,13)

$$\frac{T - T_W}{T_S - T_W} = \frac{\text{erf}(\eta/\hat{a}^{1/2})}{\text{erf}(\lambda_S/\hat{a}^{1/2})} \quad \text{for } 0 < \eta < \lambda_S \quad (19)$$

$$\frac{T - T_0}{T_L - T_0} = \frac{\text{erfc}(\eta - U_l)}{\text{erfc}(\lambda_L - U_l)} \quad \text{for } \lambda_L < \eta < \infty \quad (20)$$

여기서 λ 는 변환된 상경계면의 위치이며, 무차원 속도 U_l 은

$$U_l = u_l/(a_l/t)^{1/2} \quad (21)$$

로 정의된다. 식 (20)의 유도과정은 문헌⁽¹³⁾에 구체적으로 취급되어 있다. 식 (19)와 (20)에서 상경계면 위치 λ_L 과 λ_S , 속도 U_i 은 아직 미정인 상태임을 주지하여야 한다.

머시영역에서의 속도, 고상분율, 온도 및 각 성분의 액상농도는 상호 결합되어 있으며, 상사변환에 의해 아래와 같은 비선형 연립 상미분방정식으로 귀결된다.

$$\frac{dU}{d\eta} + (1-\hat{\rho})\eta \frac{df}{d\eta} = 0 \tag{22}$$

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\eta} \left[(f\hat{k} + (1-f)) \frac{dT}{d\eta} \right] \\ &= -2[f\hat{\rho}\hat{c} + (1-f)]\eta \frac{dT}{d\eta} \\ & \quad + 2U \frac{dT}{d\eta} - 2 \left[\hat{\rho}T(\hat{c}-1) - \frac{L}{c_i}\hat{\rho} \right] \eta \frac{df}{d\eta} \end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned} & (1-k_p^i)\hat{\rho}C_i^i \eta \frac{df}{d\eta} + U \frac{dC_i^i}{d\eta} \\ &= [(1-f) + \beta^i \hat{\rho} f k_p^i] \eta \frac{dC_i^i}{d\eta} \end{aligned} \tag{24}$$

상경계면의 위치를 결정하기 위하여 식 (19) 및 (20)으로부터 고상측 및 액상측 온도구배를 구하여 경계조건 식 (14) 및 (16)의 상사변환된 형태에 각각 대입하면 다음과 같이 정리된다.

$$\begin{aligned} \left(\frac{dT}{d\eta} \right)_{\lambda_S^+} &= \frac{1}{f_{\text{eut}}\hat{k} + (1-f_{\text{eut}})} \\ & \times \left[\frac{2}{(\pi\hat{\alpha})^{1/2}} \exp(-\lambda_S^2/\hat{\alpha}) \frac{\hat{k}(T_S - T_W)}{\text{erf}(\lambda_S/\hat{\alpha}^{1/2})} \right. \\ & \quad \left. - 2\lambda_S\hat{\rho}(1-f_{\text{eut}}) \left\{ (1-\hat{c})T + \frac{L}{c_i} \right\} \right] \end{aligned} \tag{25}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{dT}{d\eta} \right)_{\lambda_L^-} &= \frac{2}{\pi^{1/2}} \frac{T_0 - T_L}{\text{erfc}(\lambda_L - U_i)} \\ & \quad \times \exp[-(\lambda_L - U_i)^2] \end{aligned} \tag{26}$$

여기서 λ_S^+ 와 λ_L^- 는 각각 머시측에서 접근한 고상선 및 액상선의 위치이다.

2.3 계산방법

식 (2)와 (22)~(26)을 동시에 만족하는 해 즉 λ_S , λ_L , $T(\eta)$, $U(\eta)$, $f(\eta)$ 및 $C_i^i(\eta)$ 를 구하기 위해서는 수치해석이 불가피하며, 그 효율성이

상사해의 의의를 결정하는 관건이다. 만일 식 (2)~(18)에 대한 직접적인 수치해석에 비교될 정도의 노력과 시간이 필요하다면 해석적 접근의 의미는 퇴색될 수밖에 없다.

계산방법의 핵심은 식 (25)와 (26)을 만족하는 상경계면의 효율적인 위치결정에 있다. 이를 위하여 본 연구에서는 이원합금에 대하여 성능이 입증된 아래의 선형보정기법^(11,13)을 다원합금의 경우로 확장하여 적용하고자 한다.

$$\lambda_S^* = \lambda_S(1 + \omega_S) \tag{27}$$

$$\lambda_L^* = \lambda_L^*(1 + \omega_L) \tag{28}$$

여기서 $\lambda_L^* = \lambda_L - U_i$ 이다. 보정치 ω 는 식 (27)과 (28)을 각각 식 (25)과 (26)에 대입하고 Taylor급수로 전개하여 유도된 아래 식에서 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} & \omega_S [P_1 P_4 + 2P_2 (\lambda_S^2/\hat{\alpha}) \\ & \quad + 2P_3 \lambda_S \text{erf}(\lambda_S/\hat{\alpha}^{1/2}) + 2P_1 P_3 \lambda_S] \\ &= P_2 - P_4 \text{erf}(\lambda_S/\hat{\alpha}^{1/2}) \\ & \quad - 2P_3 \lambda_S \text{erf}(\lambda_S/\hat{\alpha}^{1/2}) \end{aligned} \tag{29}$$

$$\begin{aligned} & \omega_L \exp(-\lambda_L^{*2}) \left[4R\lambda_L^{*2} - \frac{2\lambda_L^*}{\pi^{1/2}} \left(\frac{dT}{d\eta} \right)_{\lambda_L^-} \right] \\ &= 2R \exp(-\lambda_L^{*2}) - [1 - \text{erf}(\lambda_L^*)] \left(\frac{dT}{d\eta} \right)_{\lambda_L^-} \end{aligned} \tag{30}$$

계수 P_i ($i=1, \dots, 4$) 및 R 은 각각 다음과 같이 정의된다.

$$P_1 = \frac{2\lambda_S}{(\pi\hat{\alpha})^{1/2}} \exp(-\lambda_S^2/\hat{\alpha}) \tag{31}$$

$$P_2 = \frac{2\hat{k}(T_S - T_W)}{(\pi\hat{\alpha})^{1/2}} \exp(-\lambda_L^{*2}/\hat{\alpha}) \tag{32}$$

$$P_3 = \hat{\rho}(1-f_{\text{eut}}) [(1-\hat{c})T_S + L/c_i] \tag{33}$$

$$P_4 = [f_{\text{eut}}\hat{k} + (1-f_{\text{eut}})] \left(\frac{dT}{d\eta} \right)_{\lambda_S^+} \tag{34}$$

$$R = (T_0 - T_L)/\pi^{1/2} \tag{35}$$

계산순서를 구체적으로 정리하면 다음과 같다.

(1) 상경계면위치 λ_S 와 λ_L 를 가정한다.

(2) 가정된 머시영역에 대하여 식 (2)와 (22)-(24)의 수치해 즉 T , U , f 및 C_i^j 의 분포를 구한다.

(3) 단계 (2)에서 계산된 온도구배 $(dT/d\eta)_{\lambda_S^j}$ 와 $(dT/d\eta)_{\lambda_L}$ 가 각각 식 (25)과 (26)을 만족하는가 확인한다.

(4) 만족하지 않으면, 식 (29)과 (30)로부터 구한 ω_S 및 ω_L 을 각각 식 (27)과 (28)에 대입하여 새로운 λ_S^* 및 λ_L^{**} 을 결정한 후 단계 (2)-(4)를 반복한다.

(5) 허용오차범위 이내로 만족하면 종료한다.

상경계면보정시 (식 (27)과 (28)) 안정성을 위하여 하향이완계수가 사용되었으며 Voller⁽¹²⁾의 경우와 동일한 조건으로 비교하기 위해 머시내 검사체적은 4000개로 일치시켰다.

선형보정기법을 이용한 상기 계산방법은 다원합금에 대해서도 쉽게 적용될 수 있으며, 체적수축유동의 존재와 상경계면 위치의 초기 가정치에 무관하게 안정적으로 수렴함이 수치실험에 의해 밝혀졌다.

3. 고찰

3.1 타당성 검토

본 연구에서 확립된 상사해의 검증은 위하여

Table 1 Numerical data for a sample ternary alloy⁽¹²⁾

Property	Value	Unit
c	1000	J/kgK
k	100	W/mK
ρ_s	3120	kg/m ³
ρ_l	2400	kg/m ³
L	4×10^5	J/kg
T_{eut}	821.2	K
T_f	921.2	K
k_p^A / k_p^B	0.3/0.15	-
m^A / m^B	-340/-720	K
T_w	621.2	K
ΔT	1.0	K
C_0^A / C_0^B	0.025/0.0118	kg/kg

삼원합금의 방향성용고를 대상으로 수행된 수치해⁽⁵⁾ 및 각 용질성분의 분배계수와 미시편석인자가 동일하다는 제한조건 하에 구해진 해석해⁽¹²⁾와 비교하였다. 계산에 사용된 자료는 Voller⁽¹²⁾로부터 인용하였으며, Table 1에 요약하였다. 역확산이 없는 Scheil한계($\beta^A = \beta^B = 0$)에서 각 용질성분의 고·액혼합물 평균농도 분포를 비교한 것이 Fig. 2이다. 여기서 평균농도를 비교한 이유는 선행연구^(5,12)에서 제시된 유일한 결과일 뿐만 아니라 체적수축유동에 의한 거시편석의 척도로서 공학적인 관심의 대상이기 때문이다. 비록 특정조건에 국한되었지만, 서로 다른 접근방법에 의한 세 가지 결과 사이의 양호한 일치는 본 연구의 타당성을 보이기에 충분하다.

위에서 제시된 각 성분의 평균농도는 체적요소에 대한 용질보존원리에 따라

$$\bar{C}^i = \frac{\rho_l(1-f)C_i^j + \rho_s f \langle C_s^i \rangle}{\rho_l(1-f) + \rho_s f} \quad (36)$$

로 계산된다. 여기서 $\langle C_s^i \rangle$ 는 역확산이 존재하는 수지상고체의 평균농도이며, $f \langle C_s^i \rangle$ 는 Clyne과 Kurz⁽¹⁷⁾의 모델에 의해 다음과 같은 미분방정식의 해로 표현된다.

$$\frac{d(f \langle C_s^i \rangle)}{d\eta} = k_p^i C_i^j \frac{df}{d\eta} + \beta^i f k_p^i \frac{dC_i^j}{d\eta} \quad (37)$$

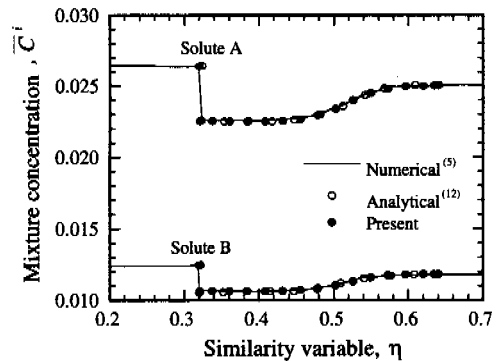


Fig. 2 Comparison of the average concentration profile with the available numerical and analytical solutions under the limited conditions of equal partition coefficients and microsegregation parameters for all solutes

3.2 본 연구의 특징

앞에서 언급하였듯이 본 연구는 기존의 상사해를 보다 일반화하기 위하여 시도되었다. 구체적인 결과의 제시에 앞서 형식상으로 나타난 본 해의 특징을 Voller⁽¹²⁾ 및 Chung 등⁽¹³⁾의 연구와의 비교를 통하여 고찰하기로 한다.

기본적인 접근방법의 틀은 유사하다. 즉 체적수축유동과 이로 인한 거시편석이 포함된 점, 미시편석을 해석적인 모델에 의존한 점, 상사변환을 통하여 상미분방정식을 유도하고 그 수치해를 구한 점 등은 세 연구에 공통적이다. 또한 액상영역 내의 유동과 고액상 불상치의 차이를 고려하고, 선형보정기법에 근거하여 상경계면의 위치를 결정하는 것은 Chung 등⁽¹³⁾과 동일하다. 그러나 다음의 두 가지 점에 있어서 본 연구는 타 연구와 본질적인 차이가 있다.

먼저, 다원합금 응고의 체계적 해석이 가능하다. 기존의 연구에서는 머시영역의 액상농도를 종속변수로 취하지 않고 상평형관계를 이용하여 온도의 함수로 변환하였다. 이 방법은 용질성분이 하나이고 온도에 따라 액상농도가 유일하게 결정되는 이원합금의 경우 유용하다. 그러나 용질성분이 2개 이상인 다원합금에서는 온도-액상농도의 관계가 식 (2)와 같이 표현되므로 다른 방법이 요구된다. 본 연구는 각 용질의 액상농도 방정식을 식 (6)과 같이 별도로 공식화하였기 때문에 용질의 수에 무관하게 일반적으로 적용될 수 있다. 구체적으로 용질이 N 개인 다원합금의 경우 (용매를 포함하여 성분이 $N+1$ 개인 합금) 식 (22)~(24)에 따라 $N+2$ 개의 연립 상미분방정식의 해를 구하면 된다. 다원합금의 응고에 대한 다양한 수치모델이 제안되고 있는 실정에 비추어⁽⁴⁻⁷⁾ 타당성 검증을 위한 최초의 기준으로서 본 연구에는 상당한 의미가 부여될 수 있다.

다음으로, 각 용질성분에 대한 제한조건이 완화된 상사해이다. 전술하였듯이, 이원합금에 대한 해석을 삼원합금으로 확장한 Voller의 시도⁽¹²⁾는 각 용질의 미시편석인자(β^i) 및 분배계수(k_p^j)가 같다는 가정 하에서만 성립한다. 어떤 형태로든 삼원합금에 대한 최초의 해석적 접근이라는 점에는 의의가 있으나, 일반적인 합금의 성질과 제한조건사이의 상당한 차이를 고려할 때 실제 적용이 가능한 경우는 거의 없어 보인다. 이에 비하여, 본 연구는 선형 액상선 (2.1절의 가정 (4))과

특정한 냉각경로 (식 (2))에 근거한 점을 제외하면 이미 보편화된 가정에 의존하였을 뿐 추가적인 구축을 받지는 않는다.

지금까지의 고찰과 Fig. 2에 나타난 결과로부터, 본 연구는 기존의 합금응고에 대한 해석적 접근을 진부분집합으로 포함하는 보다 일반화된 형태임을 확인할 수 있다.

3.3 특성인자의 효과

체적수축유동이 수반되는 합금의 방향성응고에 영향을 미치는 인자는 다수이지만, 여기서는 타 연구^(12,13)에서 취급된 것을 제외하고 관심의 대상인 미시편석인자와 분배계수에 초점을 맞추었다. 계산은 삼원합금에 대하여 Table 1의 자료를 사용하여 수행하였다. 용질 A와 B에 대하여 기준조건은 $\beta^A = \beta^B = 0$ 및 $k_p^A = k_p^B = 0.15$ 이며, Fig. 3~5는 실선으로 표시된 기준조건에 대하여 각각 A의 미시편석인자, A의 분배계수, A의 미시편석인자 및 분배계수의 변화에 따른 평균농도의 차이를 점선으로 보여준다. 여기서 하나의 용질에 대한 특성인자만을 취급한 것은 2.1절의 가정 (9)에 의해 용질사이의 상호작용을 무시하였기 때문이다. 물론 Voller의 방법⁽¹²⁾에 의존하여 Fig. 3~5의 결과를 얻는 것은 불가능하다.

용질 사이의 상호작용이 없음에도, Fig. 3~5에 공통적으로 나타났듯이, 용질 A에 대한 변화가 B의 분포에 미세한 차이를 초래하고 있다. 이것은 계산의 오차에 기인한 것이 아니라, 상호 결합된 방정식으로 인하여 용질 A의 인자변화가 머시영

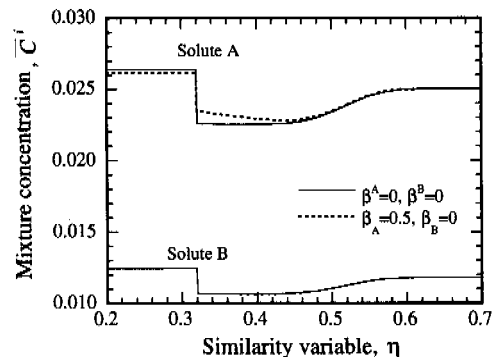


Fig. 3 The effect of the change in micro-segregation parameter of solute A on the average concentration profile of each solute

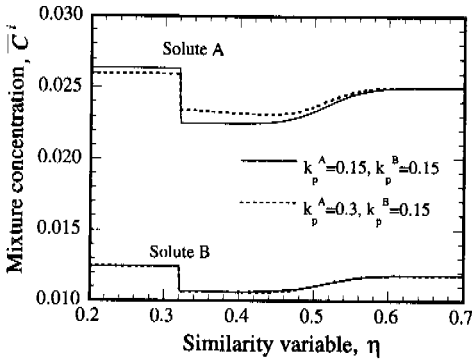


Fig. 4 The effect of the change in partition coefficient of solute A on the average concentration profile of each solute

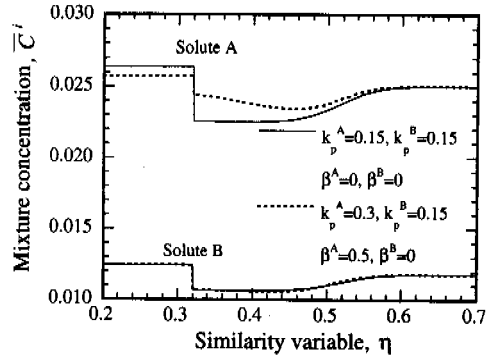


Fig. 5 The combined effect of the changes in both microsegregation and partition coefficient of solute A on the average concentration profile of each solute

역 내의 고상분율 분포 등에 영향을 미치고 연속적으로 B의 농도로 과급된 결과이다.

Fig. 3에서 미시편석인자의 증가 ($\beta^A=0.5$)가 고상 및 미시영역사이 평균농도의 차이 즉 편석을 감소시키는 방향으로 작용하는 경향은 이원합금의 경우에서 밝혀진 결과와 정성적으로 일치한다.^(12,13) 분배계수의 증가 (Fig. 4에서 $k_p^A=0.3$)의 효과도 미시편석인자 증가의 경우와 유사한 형태로 나타났다. 이미 알려져 있듯이⁽¹⁸⁾ 분배계수가 클수록 수지상고체의 평균농도가 증가하기 때문이다. 사실 이러한 결과는 전술한 $C_{si}^i = k_p^i C_i^i$ 로부터 정성적으로는 예측되지만, 정량적으로는 본 해석을 통하여 평가될 수 있다. 따라서 Fig. 5에 도시된 두 인자 모두의 증가에 따른 현저한 효과는 당연한 결과로 보인다.

미시편석인자와 분배계수의 크지 않은 변화에 대하여 Fig. 3~5에 나타난 편석의 차이는 상당한 정도이다. 특히 Fig. 5의 경우 차이는 결코 무시될 수 없다. 이런 의미에서 각 용질성분에 대하여 두 인자가 일치할 경우에만 유효한 Voller의 해석⁽¹²⁾은 다원합금의 응고거동 예측뿐만 아니라 수치모델의 검증기준으로서도 한계가 있음이 분명하다. 환언하면, 본 연구의 일반성과 유용성을 구체적으로 확인할 수 있다.

4. 결 론

다원합금의 응고거동 예측을 위한 수치모델의

타당성을 평가하는 이론적 기준으로서, 본 연구는 기존의 해석적 접근에 도입된 단순화 가정을 완화한 보다 일반화된 상사해의 도출을 시도하였다. 이를 위하여 농도-온도 연계성, 미시영역 내의 물성치 변화, 고·액 밀도차로 인한 체적수축 유동과 이에 따른 용질의 거시적 이동, 수지상고체 내의 유한한 역확산, 공정생성 등 합금응고의 기본특성을 포괄하면서도 추가적인 제한조건 없이 다원합금을 취급할 수 있는 해석방법을 지향하였다.

미시영역에 대하여 체적수축유동에 의한 각 용질성분의 액상농도 변화를 별도로 공식화하고, 질량보존 및 에너지 방정식과 함께 상사변환을 통하여 연립 상미분방정식을 유도하였다. 고상선 및 액상선의 위치를 결정하기 위하여 고상 및 액상영역에 대한 상사해와 선형보정기법을 결합한 효율적인 해석방법을 개발하였다.

대표적인 삼원합금의 방향성응고에 대하여, 기존의 수치해 및 제한된 경우에 가용한 해석해와 비교한 결과 양호한 일치를 보였으며, 이는 본 연구의 타당성을 뒷받침한다. 더욱이 별도의 제한조건 없이 다원합금의 응고과정을 체계적으로 해석할 수 있다는 점에서 본 해석은 이 분야의 기존 연구를 포함하는 일반화된 형태이다. 용질에 따라 미시편석인자와 분배계수가 다른 경우를 계산한 결과 응고거동에 상당한 변화가 초래됨을 구체적으로 확인하였다.

본 연구에서 제시된 해석방법은 다원합금의 일

차원 응고거동을 예측하는 데 직접 적용될 수 있음은 물론 복잡한 다차원 수치모델의 검증과 실험결과가 부여된 조건에서 이력된 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) Schneider, M. C. and Beckermann, C., 1995, "Formation of Macrosegregation by Multicomponent Thermosolutal Convection During the Solidification of Steel," *Metall. Trans. A*, Vol. 26A, pp. 2373~2388.
- (5) Swaminathan, C. R. and Voller, V. R., 1997, "Toward a General Numerical Scheme for Solidification Systems," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, pp. 2859~2868.
- (6) Krane, M. J. M., Incropera, F. P. and Gaskell, D. R., 1997, "Solidification of Ternary Metal Alloys-I. Model Development," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, pp. 3827~3835.
- (7) Krane, M. J. M. and Incropera, F. P., 1997, "Solidification of Ternary Metal Alloys-II. Predictions of Convective Phenomena and Solidification Behavior in Pb-Sb-Sn Alloys," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, pp. 3837~3847.
- (8) 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.
- (9) Worster, M. G., 1986, "Solidification of an Alloy from a Cooled Boundary," *J. Fluid Mech.*, Vol. 167, pp. 481~501.
- (10) 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.
- (11) Chung, J. D., Lee, J. S., Ro, S. T. and Yoo, H., 1999, "An Analytical Approach to the Conduction-Dominated Solidification of Binary Mixtures," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 42, pp. 373~377.
- (12) Voller, V. R., 1997, "A Similarity Solution for the Solidification of a Multicomponent Alloy," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, pp. 2869~2877.
- (13) Chung, J. D., Lee, J. S. and Yoo, H., 1998, "An Extended Similarity Solution for the Alloy Solidification System," *Proc. 11th IHTC*, Vol. 7, pp. 187~192.
- (14) 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.
- (15) Mehrabian, R. and Flemings, M. C., 1970, "Macrosegregation in Ternary Alloys," *Metall. Trans.*, Vol. 1, pp. 455~464.
- (16) 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.
- (17) Clyne, T. W. and Kurz, W., 1981, "Solute Redistribution during Solidification with Rapid State Diffusion," *Metallurgical Transactions A*, Vol. 12, pp. 965~971.
- (18) Kurz, W. and Fisher, D. J., 1989, *Fundamentals of Solidification*, Trans. Tech. Publications, Switzerland.