

체적수축유동이 있는 포정합금의 방향성주조에 대한 상사해

유호선*, 정재동**, 이준식†

(2000년 6월 23일 접수, 2001년 2월 13일 심사완료)

A Similarity Solution for the Directional Casting of Peritectic Alloys in the Presence of Shrinkage-Induced Flow

Hoseon Yoo, Jae Dong Chung and Joon Sik Lee

Key Words: Binary Peritectic Alloy(이원 포정합금), Directional Casting(방향성주조), Similarity Solution(상사해), Shrinkage-Induced Flow(체적수축유동)

Abstract

This paper presents a similarity solution for the directional casting of binary peritectic alloys in the presence of shrinkage-induced flow. The present model retains essential ingredients of alloy solidification, such as temperature-solute coupling, macrosegregation, solid-liquid property differences, and finite back diffusion in the primary phase. An algorithm for simultaneously determining the peritectic and liquidus positions is newly developed, which proves to be more efficient and stable than the existing scheme. Sample calculations are performed for both hypo- and hyper-peritectic compositions. The results show that the present analysis is capable of properly resolving the solidification characteristics of peritectic alloys so that it can be used for validating numerical models as a test solution.

기호설명

c	: 비열
C	: 농도
F	: 함수
g	: 액상질량분율
h	: 엔탈피
h_f	: 응고잠열
k	: 열전도계수
m	: 액상선의 구배
t	: 시간
T	: 온도
T_f	: 용매의 융해온도

u : 속도

U : 무차원 속도, $u/(\alpha_l/t)^{1/2}$

x : 응고방향 좌표

그리스문자

α	: 열확산계수 또는 α 상 고체
β	: 미시편석인자 또는 β 상 고체
δ	: 상경계면 위치
x	: 평형분배계수
ϕ	: 대표변수
η	: 상사변수, $x/(4\alpha_l t)^{1/2}$
λ	: 변환된 상경계면 위치, $\delta/(4\alpha_l t)^{1/2}$
ρ	: 밀도
ω	: 이완계수

상첨자

$^{\wedge}$: 고상/액상 물성치 비

* 회원, 숭실대학교 기계공학과

** 회원, 서울대학교 기계항공공학부

(現)세종대학교 기계공학과

+ 책임저자, 회원, 서울대학교 기계항공공학부

E-mail: jslee@gong.snu.ac.kr

TEL : (02)880-7117 FAX : (02)883-0179

j	: α , β 상을 대표
$L-$, $L+$: 액상선 좌우
n	: 반복과정에서 새로운 값
$P-$, $P+$: 포정선 좌우
α , β	: α , β 상 고체

하침자

0	: 초기값
E	: 공정
i	: 미시적 상경계면
l	: 액상
L	: 액상선
m	: 고액혼합 상태
P	: 포정
s	: 고상
S	: 고상선
W	: 벽면

1. 서 론

열 및 물질전달 분야에서 중요한 관심사 중의 하나인 합금의 응고과정은 광범위한 해석적, 수치적 또는 실험적 연구의 대상이 되어왔다. 특히 근래 수치해석 방법의 비약적 발전에 따라 합금 응고의 거시적 특성⁽¹⁾뿐만 아니라 미시적-거시적 특성^(2,3)의 예측도 가능하게 되었으며, 해석대상도 이원계로부터 다원계로 확장되고 있다.⁽³⁻⁶⁾

합금응고의 수치모델 개발에 있어서 장애요소 가운데 하나는 결과의 검증에 필요한 기준이나 비교대상이 부족한 점이다. 사실 측정에 따른 제약이나 실험조건 및 물성치의 불확실성으로 인하여 발표된 실험자료 중에서 수치해석에 직접적으로 비교가 가능한 경우는 많지 않다. 그러나 수치모델의 타당성을 예측결과와 실제현상 사이의 일치도가 아니라 정립된 방정식에 대한 해석방법의 적부라는 관점에서 평가할 때, 제한된 조건에서 성립하는 해석해는 유용한 기준임에 틀림없다.⁽⁷⁾

합금응고에 있어서 해석해는 주로 상사해를 칭한다. 상사해는 전술한 바와 같이 정교한 수치모델을 위한 시험해(test solution)로서 중요할 뿐만 아니라 단순한 형상에 대한 응고특성의 예측에 그대로 적용될 수 있기 때문에 다양한 형태로 유도되었다.⁽⁸⁻¹³⁾ 다만 지금까지의 상사해는 전적

으로 공정합금의 응고에 대한 것이다. 공정합금이 실용적으로 중요하지만, 실제 이용되는 금속 재료는 이원계만 고려하여도 Fe-C, Sn-Sb, Zn-Cu, Sn-Cd, Pb-Bi 등과 같은 다수의 포정합금을 포함한다.⁽¹⁴⁾ 포정합금의 경우 평면 상경계면을 갖는 방향성응고 특히 층상 미세조직의 생성에 대한 연구⁽¹⁵⁻¹⁷⁾는 활발히 수행되었지만, 머시영역을 갖는 응고과정에 관한 해석은 보고된 바 없다. 후술되듯이 공정합금과 포정합금의 응고과정은 상이하기 때문에 전자에 대한 해석방법을 후자에 적용할 수는 없다.

본 연구는 두 개의 목표를 지향한다. 하나는 포정합금 응고에 대한 상사해의 확립으로서 그 구체적인 접근방법을 제시하고자 한다. 다원계는 별도의 문제이므로 이원 포정합금(binary peritectic alloys)을 대상으로 취하고, 상사해가 존재할 수 있는 방향성주조에 대하여 해석을 수행한다. 공정합금의 응고에서와 유사하게 온도-농도의 연계, 머시영역에서 체적수축유동과 이에 따른 거시편석, 고액상의 물성치 차이, 수지상 초정(primary phase) 내부의 역학산 등을 모두 고려한다. 다른 하나는 합금응고의 상사해석에서 공통적으로 직면하는 상경계면 위치추적 기법의 개발이다. 머시영역을 구분하는 경계의 위치를 순차적으로 결정하던 종래의 방법^(11,12)과는 달리 동시에 결정하는 효율적인 알고리듬을 모색한다. 이것이 확립되면 이원계는 물론 보다 복잡한 다원계의 해석에 유용할 것이다.

2. 공정계와 포정계

연구의 필요성을 보다 구체적으로 보이기 위하여 공정계 및 포정계의 응고거동을 비교하기로 한다. 이원 공정계 및 포정계의 방향성응고에 대응하는 상평형선도와 개략적인 액상분율의 분포를 각각 Fig. 1 및 2에 도시하였다.

공정계에서는 Fig. 1(b)와 같이 액상선과 공정선을 경계로 액상(L), 머시($L+\alpha$) 및 고상($\alpha+\beta$)이 존재한다. 머시를 구성하는 고체는 단상(α)이고, 액체는 모두 일정한 온도(T_E)와 농도(C_E)에서 공정반응($L \rightarrow \alpha + \beta$)을 통하여 수지상초정과는 다른 공정조직으로 응고된다. 따라서 해석영역을 물리영역과 그대로 일치시킬 수 있고, Fig. 1(a)에 표시된 공정선에서 액상분율의 불연속 즉 공정분

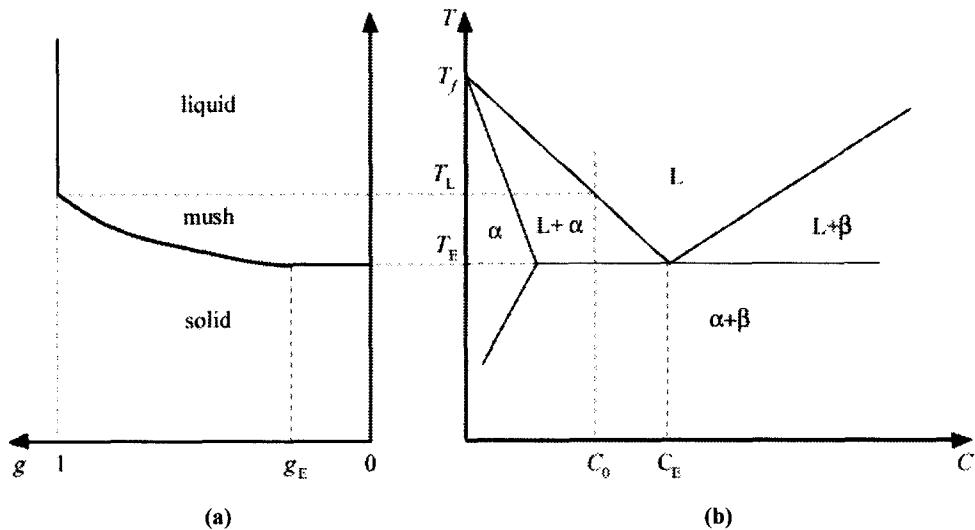


Fig. 1 Solidification of a binary eutectic alloy (a) in the liquid fraction field and (b) on the phase equilibrium diagram

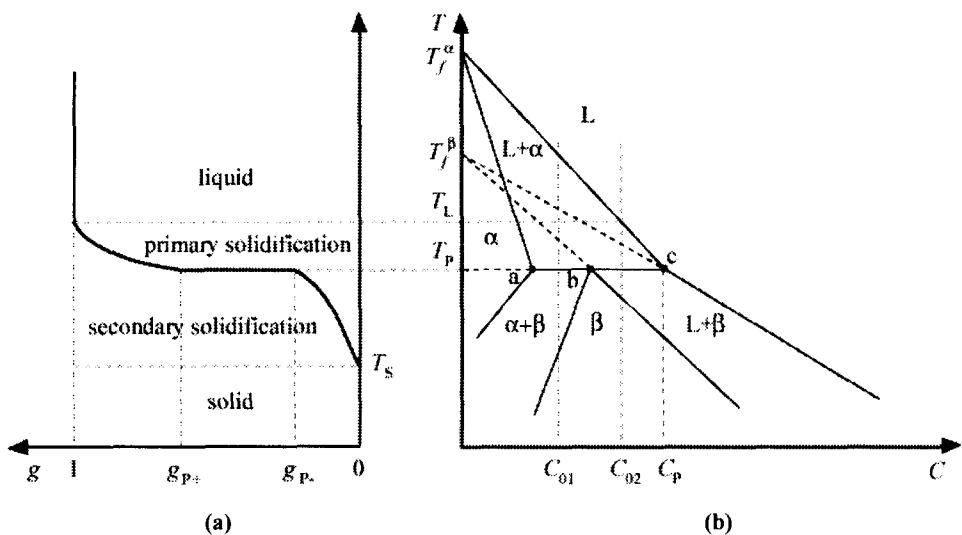


Fig. 2 Solidification of a binary peritectic alloy (a) in the liquid fraction field and (b) on the phase equilibrium diagram

율(g_E)은 해석의 결과로서 알려진다. 고상 및 액상영역에서 용질이동(농도변화)이 없으므로 머시영역에서만 온도-농도 연계 즉 상평형관계를 고려하면 된다. 더욱이 고상 및 액상영역에 대한온도분포는 액상선 및 공정선 위치의 함수로 알

려져 있기 때문에^(12,13) 해석이 상대적으로 쉽다.

포정계의 응고거동은, Fig. 2(b)의 C_{01} 과 C_{02} 으로 예시되었듯이, 초기농도가 $C_a < C_0 < C_b$ 인 야포정(hypo-peritectic)과 $C_b < C_0 < C_c$ 인 과포정(hyper-peritectic) 사이에 상당한 차이가 있다. 그러나 아

포정은 과포정의 부분집합이므로 후자의 경우만 기술한다. 과포정계에서는 액상선을 경계로 액상(L)은 구분되지만, 머시영역은 포정반응($L + \alpha \rightarrow \beta$)을 거치면서 α 상이 β 상으로 변태되므로 2개로 분리($L + \alpha$ 및 $L + \beta$)되어야 하고, 고상(β)의 경계는 용질이동이 있는 경우 미리 알 수가 없다. 이러한 응고특성에 따라 물리영역은 4개이지만 고상의 경계가 불명이므로, 해석영역은 3개 즉 액상(L), α 상 성장($L + \alpha$)에 대응하는 주응고(primary solidification) 및 β 상 성장($L + \beta$)과 고상(β)을 합한 부응고(secondary solidification)로 취할 수밖에 없다.⁽⁵⁾ 공정계와 비교할 때 액상영역은 동일하지만, Fig. 2(a)와 같이 액상분율이 주·부응고영역 모두에서 변화할 뿐만 아니라 포정선에서 액상분율의 불연속이 경계조건으로서 미리 부여되어야 하는 점(후술될 식 (25) 참조)은 상이하다. 따라서 부응고영역에서의 온도-농도 연계와 아울러 포정반응 모델이 반드시 필요하므로 해석은 보다 복잡하다. 여기서 아포정의 경우 마치 공정계의 공정선처럼 포정선에서 응고가 종료되므로 액상분율의 분포는 T_E 대신 T_P 일 뿐 Fig. 1(a)와 동일한 형태이다. 이런 의미에서 공정계와 아포정계는 해석방법을 공유한다. 아포정계는 부응고영역이 고상만으로 구성된 과포정계에 해당되므로 해석의 관점에서 포정계는 공정계를 포함한다.

상사해석에 있어서 공정계와 포정계의 공통점은 해석영역이 3개로 구분되고 내부에 존재하는 2개의 상경계면 위치를 해의 일부로서 구하는 것이다. 양자의 차이는 온도-농도 연계가 필요한 영역이 공정계는 하나(머시영역)이지만 포정계는 둘(주·부응고영역)인 점이다. 연관된 사항으로서, 공정계에서 수지상응고 종료시 액상분율(공정분율)은 해의 일부이지만, 포정계에서는 부응고 시작시 액상분율은 주응고 종료조건과 포정반응 모델로부터 결정되어야 한다. 본 연구는 포정계의 상사해석과 연관된 문제의 해결을 모색한다.

3. 상사해석

3.1 모델링

해석대상은, Fig. 3에 개략적으로 도시되었듯이, 열농도대류가 없는 일차원 반무한 영역에서 이원 과포정합금의 비정상 방향성주조이다. 여기서 반무한 정의역은 상사해가 존재하기 위한 전제조건

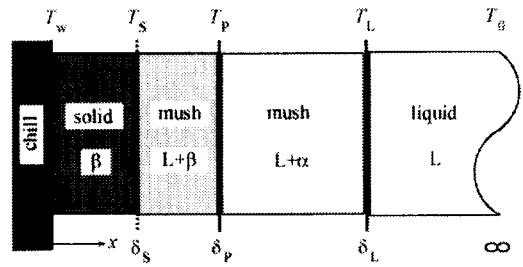


Fig. 3 Schematic of the present directional casting system

이다. 초기에 균일한 농도(C_0)인 액체가 액상온도보다 ΔT 만큼 높은 균일한 온도(T_0)로 유지되다가 $t=0$ 에서 냉금(chill)이 포정온도보다 충분히 낮은 온도($T_W < T_p$)로 냉각되면 응고가 시작된다. 응고의 진행에 따라 시스템 내에는 전술하였듯이 β 상의 고상선, 포정선 및 액상선을 경계로 β 상, ($L + \beta$)상, ($L + \alpha$)상 및 액상이 존재한다. 해석은 각 상경계면의 위치, 액상분율, 온도 및 농도분포를 결정하는 것이다.

공정계에 대한 상사해석을 참조하여 다음과 같은 단순화 가정을 도입하였다.

- (1) 고상은 변형되거나 이동하지 않는다.
- (2) 검사체적의 온도와 액상농도는 균일하다.
- (3) 미시적인 고액계면에서 열역학적 평형이 유지된다. 즉 $C_{si}^j = \chi^j C_i$ (여기서 $j = \alpha, \beta$)이다.

(4) 액상선은 선형이다.

(5) 거시적 용질확산은 무시한다.

(6) 초정(α 상)은 수지상이며 그 내부의 역확산은 해석적 처리가 용이한 Clyne과 Kurz⁽¹⁸⁾의 모델에 의존한다.

(7) 머시 및 액상영역에는 고액상의 밀도차이로 인한 체적수축(또는 팽창)유동이 존재한다.

(8) 각 상에 대한 물성치는 일정하지만 고액상의 값이 일치할 필요는 없다. 또한 머시영역 내의 물성치는 액상분율의 항으로 표현된다.

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

(9) 포정반응($L + \alpha \rightarrow \beta$)과 β 상의 성장은 평형상태에서 일어난다. 실제의 포정변태는 매우 복잡하고 실험적으로는 β 상이 α 상을 둘러싼 형태의 유핵조직을 보이지만,^(14,19) 반응속도론이 정립되지 않았기 때문에 여기서는 가장 단순한 평형응고

모델에 의존하였다.

포정생성과 성장에 연관된 가정 (9)를 제외하면, 가정 (1)~(8)은 공정계에 대한 해석적 접근^(4,11~13)에서는 보편적인 것이다.

해석은 전술한 바와 같이 액상, 주응고 및 부응고영역으로 구분하여 수행하며, 상기 가정 및 상평형관계에 기초하여 각 해석영역에서 지배방정식을 공식화하였다. 액상영역($\delta_L < x < \infty$)에서 농도의 변화는 없고, 에너지방정식은 잘 알려져 있다.^(12,13)

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

주·부응고영역 즉 $\delta_P < x < \delta_L$ 및 $0 < x < \delta_P$ 에 대한 연속 및 에너지방정식은 같고, 농도방정식도 머시를 구성하는 고체의 상이 다를 뿐 같은 형태로 유도되므로 함께 기술한다.

$$(1 - \hat{\rho}) \frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & [(1-g) \hat{\rho} \hat{c} + g] \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \\ & + [\hat{\rho}(1-\hat{c})T + \hat{\rho} h_f / c_i] \frac{\partial g}{\partial t} \\ & = \alpha_l \frac{\partial}{\partial x} \left[\{(1-g) \hat{k} + g\} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & [g + \beta^j \hat{\rho} x^j (1-g)] \frac{\partial C_l}{\partial t} + u \frac{\partial C_l}{\partial x} \\ & = -\hat{\rho}(1-x^j) C_l \frac{\partial g}{\partial t} \end{aligned} \quad (5)$$

식 (5)에서 주응고 및 부응고는 $j=\alpha$ 및 $j=\beta$ 에 각각 대응하며, 미시편석인자는 가정 (6)과 (9)에 따라 $0 \leq \beta^\alpha \leq 1$ 및 $\beta^\beta = 1$ 이다.

식 (2)~(5)를 위한 초기조건과 경계조건 중에서 현시적으로 나타나는 것은 다음과 같다.

$$T = T_0, \quad C_l = C_0, \quad \text{and} \quad \delta_P = \delta_L = 0 \quad \text{at} \quad t = 0 \quad (6-8)$$

$$T = T_w \quad \text{at} \quad x = 0 \quad (9)$$

$$T = T_p \quad \text{at} \quad x = \delta_P \quad (10)$$

$$T = T_L \quad \text{at} \quad x = \delta_L \quad (11)$$

$$T = T_0 \quad \text{as} \quad x \rightarrow \infty \quad (12)$$

$$C_l = C_0 \quad \text{for} \quad x \leq \delta_L \quad (13)$$

해석의 완결(closure)을 위해서는 속도 및 농도에 관한 조건이 추가적으로 필요하다. 식 (2)에 포함된 액상속도는 일정하며, 액상선에서의 연속조건 ($u^{L-} = u^{L+} = u_l$)으로부터 구한다. 주·부응고영역에서 속도조건과 부응고영역에서 농도조건은 각각 포정반응 모델로부터 부여된다. 또한 상경계면의 위치 $\delta_P(t)$ 및 $\delta_L(t)$ 는 액상선에서의 에너지균형

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)^{L-} - \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)^{L+} = 0 \quad (14)$$

과 포정반응에 대한 에너지균형으로부터 해의 일부로서 결정되어야 한다. 식 (14)에서 상첨자 L-와 L+는 각각 액상선($x = \delta_L$) 좌우를 나타낸다.

이와 같이 포정반응 모델은 해석에서 핵심적인 역할을 한다. 체적수축유동이 있을 때 공정반응 모델^(12,13)과의 차이는 포정반응의 경우 속도와 온도구배는 물론 농도에도 유한한 도약(jump)이 나타나는 점이다. 포정선($x = \delta_P$) 좌우를 상첨자 P-와 P+로 표기할 때 포정반응에 따른 질량, 에너지 및 용질균형은 각각 다음식으로 표현된다.

$$[(\rho_m)^{P+} - (\rho_m)^{P-}] \frac{d\delta_P}{dt} = -\rho_l (u^{P+} - u^{P-}) \quad (15)$$

$$\begin{aligned} & [(\rho_m h_m)^{P+} - (\rho_m h_m)^{P-}] \frac{d\delta_P}{dt} \\ & = \left(-\rho_l u h_l + k \frac{\partial T}{\partial x} \right)^{P+} \\ & - \left(-\rho_l u h_l + k \frac{\partial T}{\partial x} \right)^{P-} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} & [(\rho_m C_m)^{P+} - (\rho_m C_m)^{P-}] \frac{d\delta_P}{dt} \\ & = -\rho_l C_l (u^{P+} - u^{P-}) \end{aligned} \quad (17)$$

3.2 상사변환

합금응고에 대한 해석해는 공식화된 편미분방정식에 대한 직접적인 수치해 대신 적절한 변수변환 등을 이용하여 단순화된 대수방정식 또는 상미분방정식의 해를 지칭한다.⁽⁸⁻¹³⁾ 수학적으로 완결된 식 (2)~(17)에 대하여 잘 알려진 상사변수 $\eta = x/(4\alpha_l t)^{1/2}$ 를 도입하여 해석해를 모색하기로

하자.

액상영역에 대한 온도분포는 확립되어 있다.⁽¹³⁾

$$\frac{T - T_0}{T_L - T_0} = \frac{\operatorname{erfc}(\eta - U_l)}{\operatorname{erfc}(\lambda_L - U_l)} \quad \text{for } \lambda_L < \eta < \infty \quad (18)$$

여기서 무차원 상경계면 위치(λ_L)와 액상속도(U_l)는 아직 미정이다.

식 (3)~(5)를 상사변환하면 각각 아래와 같이 상미분방정식으로 귀결된다.

$$\frac{dU}{d\eta} - (1 - \hat{\rho})\eta \frac{dg}{d\eta} = 0 \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\eta} \left[\left\{ (1-g) \hat{k} + g \right\} \frac{dT}{d\eta} \right] \\ = -2 \left[(1-g) \hat{\rho} \hat{c} + g \right] \eta \frac{dT}{d\eta} \\ + 2U \frac{dT}{d\eta} + 2 \left[\hat{\rho} (\hat{c}-1) T - \hat{\rho} h_f / c_l \right] \eta \frac{dg}{d\eta} \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho} (1-x^j) (T - T_f) \frac{dg}{d\eta} \\ = [U/\eta - g - \beta^j \hat{\rho} x^j (1-g)] \frac{dT}{d\eta} \end{aligned} \quad (21)$$

여기서 식 (21)은 가정 (4) 즉

$$T = T_f + m^j C_i \quad (22)$$

를 대입하여 농도를 온도로 대치한 형태로서 액상분율에 대한 방정식으로 전환되었다.

초기 및 경계조건 (6)~(14)의 변화은 자명하기 때문에 생략하였다. 포정반응에 따른 불연속조건 (15)~(17)은 상사변환과 적절한 연산을 거치면 다음과 같이 정리된다.

$$U^{P+} - U^{P-} = \Delta g (\hat{\rho} - 1) \lambda_P \quad (23)$$

$$\begin{aligned} & [\hat{k} + (1-\hat{k})g^{P-}] \left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{P-} \\ & - [\hat{k} + (1-\hat{k})g^{P+}] \left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{P+} \\ & = 2\hat{\rho} \Delta g [(1-\hat{c})T_P + h_f / c_l] \lambda_P \end{aligned} \quad (24)$$

$$g^{P-} = \frac{(g^{P+} - x^\beta) C_P + (1-g^{P+})(C_s^a)^{P+}}{(1-x^\beta) C_P} \quad (25)$$

여기서 $\Delta g = g^{P+} - g^{P-}$ 로 정의되며, C_s^a 는 α 상 고체의 체적평균(intrinsic average)농도⁽²⁰⁾이다.

주응고영역($\lambda_P < \eta < \lambda_L$) 및 부응고영역($0 < \eta < \lambda_P$) 각각에 대한 상사방정식 (19)~(21)의 해 $T(\eta)$, $U(\eta)$ 및 $g(\eta)$ 를 경계위치 λ_P 및 λ_L 과 동시에 구하기 위해서는 수치해석이 불가피하다. 본 연구에서는 연립 미분방정식이고 경계가 미정인 점을 고려하여 고차의 Runge-Kutta방법 대신 적용이 용이한 Euler방법에 의존한다.^{(9)~(13)} 이때 주·부응고영역은 각각 4000개 검사체적으로 분할된다.

일단 온도분포 $T(\eta)$ 가 알려지면 액상농도분포 $C_i(\eta)$ 는 식 (22)로부터 결정된다. 역확산에 따른 α 상 고체의 평균농도는

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\eta} [(1-g) C_s^a] \\ = \frac{x^a}{m^a} \left[\beta^a (1-g) \frac{dT}{d\eta} - (T - T_f^a) \frac{dg}{d\eta} \right] \end{aligned} \quad (26)$$

의 해로 구해진다.⁽¹²⁾ 또한 β 상 고체의 평균농도는 평형응고이므로 $C_s^\beta = x^\beta C_i$ 이다. 거시편석의 지표인 고액혼합물의 평균농도는 쉽게 계산된다.

$$C_m = \frac{g \rho_i C_i + (1-g) \rho_s C_s^j}{g \rho_i + (1-g) \rho_s} \quad (j=a, \beta) \quad (27)$$

3.3 상경계면 위치추적 기법

합금응고에 대한 상사해석에서는, 공정계나 포정계 또는 이원계나 다원계에 무관하게, 전술한 상경계면 위치는 해의 일부를 구성한다. 상사해의 의의가 편미분방정식에 대한 직접적인 수치해석보다 간편함에 있음을 고려할 때 상경계면 위치추적 기법의 효율성을 해석의 핵심적인 요소를 구성한다. 이와 연관하여, 기존에 제시된 Voller의 알고리듬⁽¹²⁾과 선형보정법⁽¹¹⁾에서는 공통적으로 두 경계의 위치를 순차적으로 결정하기 때문에 많은 반복계산이 불가피하고 초기가정에 따라서는 발산의 가능성도 상존한다. 본 연구에서는 두 경계의 위치를 동시에 추적함으로써 수렴성과 안정성을 개선한 새로운 상경계면 위치추적 기법을 개발하고자 한다.

포정선(공정계의 경우 공정선) 및 액상선의 위치는 식 (16)에 대응하는 식 (24)와 식 (14)의 상사변환된 형태를

$$\begin{aligned} F_P(\lambda_P, \lambda_L) &= [\hat{k} + (1 - \hat{k})g^{P-}] \left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{P-} \\ &\quad - [\hat{k} + (1 - \hat{k})g^{P+}] \left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{P+} \quad (28) \\ &\quad - 2\hat{\rho}\Delta g[(1 - \hat{c})T_P + h_f/c_l]\lambda_P \end{aligned}$$

$$F_L(\lambda_P, \lambda_L) = \left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{L-} - \left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{L+} \quad (29)$$

와 같이 λ_P 와 λ_L 의 함수로 표현할 때 $F_P=0$ 과 $F_L=0$ 을 동시에 만족하도록 결정되어야 한다. 식 (28)과 (29)는 단조함수이므로 수렴이 무조건 보장되는 Newton-Raphson 알고리듬에 의존하면 쉽게 λ_P 와 λ_L 를 구할 수 있다. 다만 식 (28)과 (29)에서 식 (18)로부터 유도되는

$$\left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{P+} = \frac{2(T_0 - T_L) \exp[-(\lambda_L - U_l)^2]}{\pi^{1/2} \operatorname{erfc}(\lambda_L - U_l)} \quad (30)$$

를 제외하면 온도구배가 λ_P 와 λ_L 의 현시적인 함수로 표현될 수 없으므로 다음의 선형 근사식에 의존한다.

$$\left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{P-} \approx \frac{T_P - T_W}{\lambda_P} \quad (31)$$

$$\left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{P+} \approx \left(\frac{dT}{d\eta} \right)^{L-} \approx \frac{T_L - T_P}{\lambda_L - \lambda_P} \quad (32)$$

즉 상경계면 위치는

$$\begin{bmatrix} \lambda_P \\ \lambda_L \end{bmatrix}^n = \begin{bmatrix} \lambda_P \\ \lambda_L \end{bmatrix} - \omega \begin{bmatrix} \frac{\partial F_P}{\partial \lambda_P} & \frac{\partial F_P}{\partial \lambda_L} \\ \frac{\partial F_L}{\partial \lambda_P} & \frac{\partial F_L}{\partial \lambda_L} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} F_P \\ F_L \end{bmatrix} \quad (33)$$

와 같이 반복적으로 갱신된다. 이와 같이 근사식을 이용하면 λ_P 와 λ_L 의 갱신에 있어서 변화의 폭은 당연히 근사적이지만 적어도 변화의 방향은 타당하다. 식 (33)에 이완계수($0 < \omega \leq 1$)를 도입한 것은 변화의 폭을 보정하기 위함이다.

상기 알고리듬의 성능을 평가하기 위하여 대표적인 이원공정계에 적용하였다. 결과는 알려진 상사해⁽¹²⁾와 잘 일치하는데, 이는 접근방법이 타당함을 의미한다. 또한 유용성이 이미 확인된⁽¹¹⁾ 선형보정법과 비교할 때 계산시간이 상당히 단축(같은 조건에서 CPU시간이 7.81 s 및 6.09 s)됨

뿐만 아니라, 특히 수렴성 및 계산시간이 초기가정(후술될 3.4절의 (1)항)에 거의 무관하다. 참고로 선형보정법에서 수렴은 초기가정에 다소 민감하다. 본 연구에서 개발된 기법은 상경계면의 위치를 동시에 결정한다는 점에서 체계적이며, 수렴성의 관점에서는 안정적이고 효율적이다. 이것은 이원합금에 비하여 응고경로가 보다 복잡한 다원합금의 경우에 더욱 유용할 것이다.

3.4 계산방법 및 순서

지금까지 기술된 포정계에 대한 상사해석 과정을 체계적으로 요약하였다. 구체적인 계산방법 및 순서는 다음과 같다.

(1) 상경계면 위치 λ_P 와 λ_L 를 가정한다.

(2) 주·부응고영역 각각에 대하여 액상분율의 분포 $g(\eta)$ 를 가정한다.

(3) 액상속도 U_l 을 초기조건으로 $\lambda_P < \eta < \lambda_L$ 에 대하여 식 (19)를 후진 적분한다. 계산된 U^{P+} 를 식 (23)에 대입하여 U^{P-} 를 구하고, $0 < \eta < \lambda_P$ 에 대하여 식 (19)를 후진 적분하여 $U(\eta)$ 를 얻는다.

(4) 경계조건 (9)~(11)을 적용하여 각 영역에 대하여 식 (20)의 해 $T(\eta)$ 를 구한다.

(5) $C_s^a = x^a C_0$ 을 초기조건으로 식 (26)을 후진 적분하여 $C_s^a(\eta)$ 를 계산한다.

(6) $g^{L-} = 1$ 을 초기조건으로 $\lambda_P < \eta < \lambda_L$ 에 대하여 식 (21)을 후진 적분한다. 계산된 g^{P+} 를 식 (25)에 대입하여 g^{P-} 를 구하고, $0 < \eta < \lambda_P$ 에 대하여 식 (21)을 후진 적분하여 $g(\eta)$ 를 얻는다.

(7) 해 $T(\eta)$, $U(\eta)$ 및 $g(\eta)$ 의 변화가 없을 때 까지 단계 (3)~(6)을 반복한다.

(8) 계산된 온도구배가 $F_P=0$ 과 $F_L=0$ 을 만족하지 않으면, 식 (33)에서 λ_P 와 λ_L 를 갱신한 후 단계 (3)~(7)을 반복한다. 만족하면 반복을 종료하고 $C_l(\eta)$, $C_m(\eta)$ 등을 계산한다.

단계 (2)에서 $g(\eta)$ 는 임의로 가정할 수도 있으나, 아래와 같이 체적수축유동이 없는 경우에 대한 해석해⁽¹⁴⁾를 이용하는 것이 계산의 효율화에 기여한다.

$$g(\eta) = \frac{1 - g^*}{\lambda_L - \lambda_P} \eta + \frac{g^* \lambda_L - \lambda_P}{\lambda_L - \lambda_P} \quad \text{for } \lambda_P < \eta < \lambda_L \quad (34)$$

$$g(\eta) = g^{**} \eta / \lambda_P \quad \text{for } 0 < \eta < \lambda_P \quad (35)$$

여기서 g^* 과 g^{**} 는 각각 다음과 같이 정의된다.

$$g^* = 1 - [1 - (C_P/C_0)^{\frac{1-\beta^\alpha x^\alpha}{x^\alpha-1}}] / (1 - \beta^\alpha x^\alpha) \quad (36)$$

$$g^{**} = [(1-x^\alpha)g^* - (\chi^\beta - x^\alpha)] / (1 - \chi^\beta) \quad (37)$$

또한 단계 (3)에서 액상속도는 전 영역에 대한 질량보존을 만족시키도록 다음과 같이 계산된다.

$$U_t = (1 - \hat{\rho}) \lambda_L \left[1 - \frac{1}{\lambda_L} \left(\int_0^{\lambda_P} g d\eta + \int_{\lambda_P}^{\lambda_L} g d\eta \right) \right] \quad (38)$$

마지막으로 단계 (7)에서 $g(\eta)$ 를 계산한 다음 $0 \leq g(\eta) \leq 1$ 임을 반드시 확인하여야 한다.

4. 응용예 및 고찰

앞에서 제시된 포정합금에 대한 상사해석법의 성능을 확인하고 응고거동의 예측에 응용하기 위한 예로서 특정한 경우에 대한 계산을 수행하였다. 계산의 목적이 어떤 특성인자의 영향 규명이 아니라 해석방법의 검증에 있음을 강조한다.

이원 포정합금으로서 전술한 충상 미세조직과 무관한 Pb-Bi계를 선정하였으며,⁽¹⁵⁾ 계산에 사용된 자료^(21,22)는 Table 1에 정리하였다. 여기서 고·액상의 밀도는 체적수축유동과 이에 따른 거시편석이 일어나도록 인위적으로 조정된 값이다. 방향

Table 1 Numerical data for sample calculations

Property	Value	Unit
c	147	J/kgK
k	10	W/mK
ρ_s/ρ_l	10000/9900	kg/m ³
h_f	23000	J/kg
T_p	457	K
T_f^α/T_f^β	601/563	K
x^α/x^β	0.6667/0.8045	-
m^α/m^β	- 400/- 295	K
T_w	373	K
ΔT	10	K
C_0 hypo/hyper	0.26/0.325	kg/kg

성응고에서 대류는 충상 미세조직의 생성을 억제 하므로⁽¹⁵⁾ 체적수축유동이 존재하는 경우 Fig. 3과 같은 응고형태는 합리적인 가정이라고 판단된다. 또한 Pb-Bi계는 포정반응속도가 비교적 빠르기 때문에⁽²³⁾ 3.1절의 가정 (9)와도 부합된다. 모든 계산예에서 수지상 초정(α 상)이 미시적인 역학산의 양극한인 Scheil식과 Lever rule에 따라 성장한 결과를 함께 제시하였다.

전술하였듯이 아포정은 과포정의 제한된 경우 이므로 과포정을 대상으로 개발된 해석방법이 아포정을 포함하는지를 먼저 확인하였다. 초기농도가 Table 1에 수록된 아포정인 경우에도 아무런

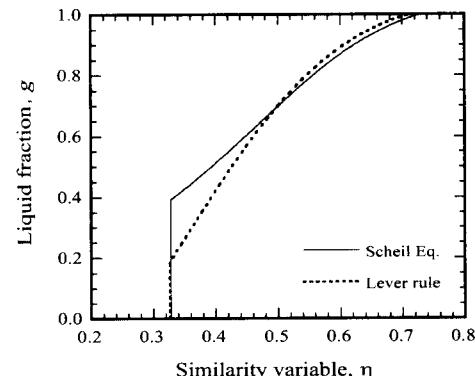


Fig. 4 Liquid fraction profile during solidification of a hypo-peritectic alloy for each of two back diffusion limits in the primary phase

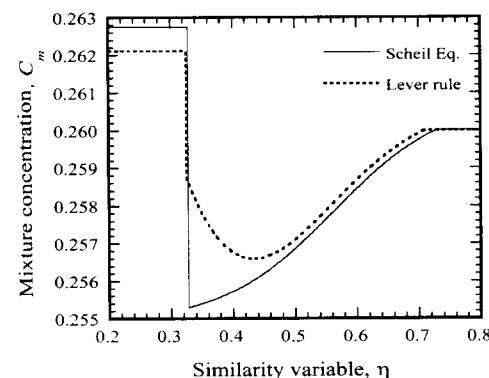


Fig. 5 Mixture concentration profile during solidification of a hypo-peritectic alloy for each of two back diffusion limits in the primary phase

문제없이 계산이 진행되었다. 또한 이 결과와 포정선을 공정선으로 대치한 가상적인 시스템에 대하여 기존의 공정계 해석방법^(12,13)을 적용한 결과는 구별이 불가능한 수준으로 일치한다. 이점은 간접적이지만 본 해석방법이 타당함을 의미한다.

위의 계산결과 중에서 응고형태를 대표하는 액상분율분포와 거시편석의 지표인 고액혼합물의 평균농도분포를 각각 Fig. 4 및 5에 도시하였다. 포정선에서 응고가 종료되기 때문에 전반적으로 공정계^(12,13)와 유사한 결과를 보인다. 후술될 과포정에 비하여 아포정의 경우 초정성장에 수반되는 역학산이 머시영역의 응고특성(Fig. 4) 및 편석(Fig. 5)에 현저한 영향을 미친다. 이것은, Fig. 2(b)의 상평형선도에서 알 수 있듯이, 초기농도가 낮을수록 주응고영역이 넓어지고 액상분율의 변화폭이 커지기 때문이다.

초기농도가 과포정인 경우(Table 1 참조)에 대하여 본 해석에서 획득 가능한 모든 자료를 Figs. 6~10에 정리하였다. 자료는 온도분포(Fig. 6), 액상분율분포(Fig. 7), 속도분포(Fig. 8), 고액혼합물 평균농도분포(Fig. 9) 및 고상농도분포(Fig. 10)를 포함한다. 온도분포를 제외한 모든 자료에서 포정합금 응고의 특징이 현시적으로 나타난다. 즉 포정선 좌우에 머시가 존재하고, 식 (15)~(17) 또는 식 (23)~(25)로 표시된 포정반응에 따른 물리량의 유한한 도약이 보인다. 또한 성격이 상이한 β 상 머시($L + \beta$)와 고상(β)을 하나로 묶어 부응고영역으로 모델링하였음에도 두 상의 경계 즉 β 상 고상선이 뚜렷이 해상된다. 따라서 해석결과

에서 4개의 물리영역은 분명히 구분된다.

앞에서 고찰한 아포정계와는 달리 과포정계의 경우 초정성장시 미시편석이 전체적인 응고거동에 미치는 영향은 크지 않다. 역학산의 정도에 따라 주응고영역에서는 약간의 차이가 나타나지만 부응고영역에서는 차이가 거의 없다. 원인은 두 가지로 분석될 수 있다. 하나는, Fig. 7에서 관찰할 수 있듯이, 초기농도가 클수록 주응고영역의 범위가 축소되고 액상분율의 변화폭이 작아지기 때문이다. 다른 하나는 포정반응의 속도가 무한하다는 가정에서 초래된 결과이다. Fig. 10에 도시되었듯이 α 상에서 미시편석에 의한 농도차이가 어느 정도 있더라도 포정반응 동안 α 상은

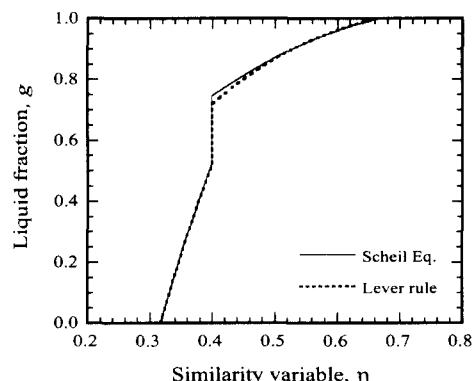


Fig. 7 Liquid fraction profile during solidification of a hyper-peritectic alloy for each of two back diffusion limits in the primary phase

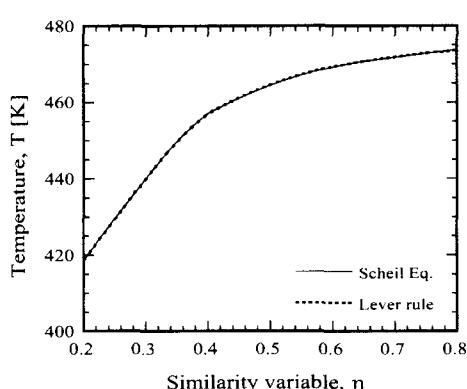


Fig. 6 Temperature profile during solidification of a hyper-peritectic alloy for each of two back diffusion limits in the primary phase

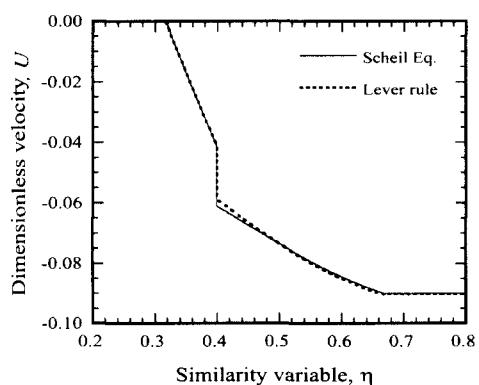


Fig. 8 Velocity profile during solidification of a hyper-peritectic alloy for each of two back diffusion limits in the primary phase

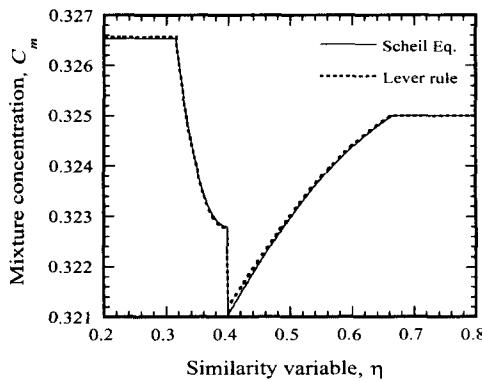


Fig. 9 Mixture concentration profile during solidification of a hyper-peritectic alloy for each of two back diffusion limits in the primary phase

모두 β 상으로 변태되기 때문에 $(L + \beta)$ 영역으로 그 영향이 전파되지 못한다. 이러한 결과는 응고 과정 동안의 전체적인 용질재분배가 포정반응속도에 의해 지배됨을 의미한다. 다만 포정반응이 평형상태에서 일어난다는 제한된 경우에 대한 해석결과에 불과하므로 용질재분배의 특성에 관하여 보다 일반화된 결론을 도출하기 위해서는 실제와 근접한 포정변태속도 및 β 상 성장속도가 반영된 후속 연구가 필요하다.

5. 결 론

합금의 응고과정에 대한 수치모델의 검증을 위한 시험해로서 이원 포정합금의 방향성주조에 대한 상사해를 취급하였다. 해석모델에는 머시영역에서의 체적수축운동과 이로 인한 거시편석뿐만 아니라 온도-농도의 연계, 고·액상의 물성치 차이, 수지상 초정 내부의 역학적 조건 등 합금응고의 기본특성이 모두 고려되었다.

포정선을 경계로 성질이 상이한 머시가 형성되는 포정계의 특징을 고려하여 해석영역을 액상, 주응고 및 부응고영역으로 구분하고, 특히 부응고영역에 대한 지배방정식을 새로이 공식화하였다. 해석의 완결을 위한 핵심요소로서 포정선에서 액상분율, 속도 및 온도구배의 불연속조건을 사용에 편리한 형태로 유도하였다. 액상선 및 포정선의 위치를 동시에 결정하는 새로운 알고리듬

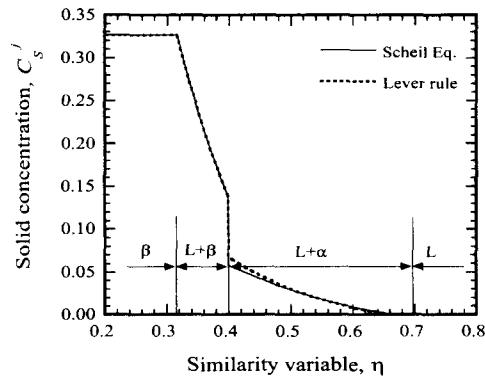


Fig. 10 Solid concentration profile during solidification of a hyper-peritectic alloy for each of two back diffusion limits in the primary phase

을 개발하고, 상사해석과 결합하여 체계화된 계산방법 및 순서를 정립하였다.

대표적인 포정합금에 대하여 수행된 계산예로부터 다음 사항을 도출할 수 있었다. 아포정합금에 대한 기존의 방법과 본 해석의 결과를 비교함으로써 본 연구를 간접적으로 검증하였다. 과포정합금에 대한 계산결과는 확립된 해석방법이 포정계의 응고거동을 해상하기에 충분함을 보여주었다. 초정에서의 미시편석이 응고과정에 미치는 영향은 합금의 초기농도에 따라 상이하며, 과포정의 경우 전체적인 용질재분배가 포정변태속도에 의해 지배되는 것으로 보인다. 상경계면 위치 추적 알고리듬은 기존의 기법에 비하여 효율적이고 안정적이어서 응고경로가 보다 복잡한 다원계의 해석에 활용될 수 있을 것이다.

후 기

이 논문은 2000년도 두뇌한국21사업에 의하여 지원되었으며 이에 감사드립니다.

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, "Formation of Macrosegregation by Multi-component Thermosolutal Convection during the Solidification of Steel," *Metall. Trans. A*, Vol. 26A, pp. 2373~2388.
- (4) 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.
- (5) 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.
- (6) 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.
- (7) Patankar, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publ., New York.
- (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) 정재동, 유호선, 이준식, 1998, "혼합물 응고 문제에 대한 확장된 해석해," 대한기계학회논문집(B), 제 22권 제 2호, pp. 184~192.
- (14) Kurz, W. and Fisher, D. J., 1989, *Fundamentals of Solidification*, Trans. Tech. Publications, Switzerland.
- (15) Trivedi, R., 1995, "Theory of Layered-Structure Formation in Peritectic Systems," *Metall. Mater. Trans. A*, Vol. 26A, pp. 1583~1590.
- (16) Zeisler-Mashl, K. L. and Lograsso T. A., 1997, "The Occurrence and Periodicity of Oscillating Peritectic Microstructures Developed during Directional Solidification," *Metall. Mater. Trans. A*, Vol. 28A, pp. 1543~1552.
- (17) Park, J.-S. and Trivedi, R., 1998, "Convection-Induced Novel Oscillating Microstructure Formation in Peritectic Systems," *J. Crystal Growth*, Vol. 187, pp. 511~515.
- (18) Clyne, T. W. and Kurz, W., 1981, "Solute Redistribution during Solidification with Rapid State Diffusion," *Metall. Trans. A*, Vol. 12A, pp. 965~971.
- (19) Ohno, A., 1976, *The Solidification of Metals*, Chijin Shokan, Japan.
- (20) 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.
- (21) Tououlkian, Y. S., Powell, R. W., Ho, C. Y. and Klemens, P. G., 1970, *Thermophysical Properties of Matter*, IFI/Plenum Press, New York/Washington.
- (22) Kaviany, M., 1998, *Principles of Heat Transfer*, Course Pack, University of Michigan.
- (23) John, D. H. and Hogan, L. M., 1987, "A Simple Prediction of the Rate of the Peritectic Transformation," *Acta Metall.*, Vol. 35, pp. 171~174.