

〈논 문〉

연속체모델에 의한 수치해석결과에 대한 재평가

정재동* · 유호선** · 이준식*** · 노승탁***

(1996년 4월 4일 접수)

Reassessment on Numerical Results by the Continuum Model

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

Key Words : Continuum Model(연속체모델), Binary Mixture(이성분 혼합물), Solidification(응고), Reassessment(검증)

Abstract

In recent years there has been increased interest in the continuum model associated with the solidification of binary mixtures. A review of the literature, however, shows that the model verification was not sufficient or only qualitative. Present work is conducted for the reassessment of continuum model on the solidification problems of binary mixtures widely used for model validation. In spite of using the same continuum model, the results do not agree well with those of Incropera and co-workers which are benchmark problems typically used for validation of binary mixture solidification. Inferring from the agreement of present results with the analytic, experimental and other model's numerical results, this discrepancy seems to be caused by numerical errors in applying continuum model developed by Incropera and co-workers, not by the model itself. Careful examination should be preceded before selecting validation problems.

기 호 설 명			
B	체적력	P	압력
C	용질의 농도	t	시간
c	비열	T	온도
D	물질확산계수	u, v	(x, y)방향의 속도
f	질량분율	u_ϵ, u_η	공변속도성분
g	체적분율	U, V	관변속도성분
h	엔탈피	x, y	직교좌표
h_ϵ, h_η	형상인자, $h_\epsilon = (x_\epsilon^2 + y_\epsilon^2)^{1/2}$, $h_\eta = (x_\eta^2 + y_\eta^2)^{1/2}$		그리스문자
J	Jacobian	α	열확산율
k	열전도율	$\alpha_\epsilon, \alpha_\eta$	기하학적 계수, $\alpha_\epsilon = h_\epsilon h_\eta^2 / J$, $\alpha_\eta = h_\eta h_\epsilon^2 / J$
K, K_0	투과율, 투과율 계수	$\beta_\epsilon, \beta_\eta$	기하학적 계수, $\beta_\epsilon = \lambda h_\eta / J$, $\beta_\eta = \lambda h_\epsilon / J$
L	잠열	β_T	열팽창계수
		β_C	물질팽창계수
		Γ	유효확산계수
		μ	점성계수
		ξ, η	변환된 좌표

*회원, 서울대학교 대학원

**회원, 숭실대학교 기계공학과

***회원, 서울대학교 기계공학과

η	상사변수 ($=x/\sqrt{4\alpha t}$)
ρ	밀도
ϕ	대표종속변수
하첨자	
i	상경계면위치
m	혼합물
l	액상
s	고상

1. 서 론

1980년대 중반 Incropera와 공동연구자들에 의해 확립된 연속체모델(continuum model)⁽¹⁾은 체적평균기법(volume-averaging technique)과 더불어 현재까지 가장 일반적으로 사용되고 있는 이성분 혼합물의 응고과정에 대한 해석방법이다. 이 모델에서는 기본적으로 고상, 머시 및 액상을 하나의 연속체로 취급하고 응고관련 물리량의 보존방정식을 공식화하였기 때문에, 혼합물의 상평형관계를 제외하면 단상에 대하여 개발된 기존의 수치해석기법이 그대로 적용될 수 있다는 장점이 있다. 이러한 연속체모델의 용이성 및 유연성을 바탕으로 다양한 형상 및 응고조건에 대하여 열농도대류, 조대편석(macroseggregation), 재용해, 고상선 및 액상선의 과도적인 위치 등 거시적인 응고특성을 정성적으로 예측한 수치해석 결과가 발표되었다.^(2~10) 이와 병행하여 모델의 해석능력 향상을 위한 후속 연구도 수행되고 있으며, 그 결과 미시적 응고특성의 반영이 미흡하다고 지적되어온 문제점도 상당부분 보완되고 있다.^(11~13)

혼합물의 응고과정 해석에 있어서 연속체모델의 유용성이 제고됨에 따라 이미 발표된 연속체모델에 의한 계산결과는 타 연구에서 그 타당성 검증을 위한 비교의 기준으로서 널리 인용되고 있다. 그러나, 여기서 간과되어 온 중요한 문제는 많은 연구자들이 연속체모델에 의한 결과를 거의 무비판적으로 수용하였다는 점이다. 새로운 모델에 의한 예측치가 연속체모델에 의한 계산결과와 정성적으로만 일치하면 새로운 모델이 타당하다는 결론을 도출하고 있다. 예를 들어, Zeng과 Faghri^(14,15)는 온도변환 모델(temperature-transforming model)과 Christenson 등⁽⁴⁾의 수치해석 및 실험결과와 비교하면서, 그들의 결과가 연속체모델에 비하여 오히

려 실험에 근접함에도 불구하고 해석결과 사이의 경향이 일치함을 강조하였을 뿐 정량적인 평가를 유보하였다. 보다 가시적인 문제는 Bennon과 Incropera⁽³⁾의 수치계산예에서 발견된다. 즉, 열전도만을 고려한 간단한 1차원 응고문제임에도 불구하고 그들의 계산결과에는 상당한 불확실성이 있음이 최근 발표된 해석해⁽¹⁶⁾와 비교하여 확인할 수 있다. 지금까지 연속체모델에 의한 계산결과는 Christenson 등,⁽⁴⁾ Neilson과 Incropera⁽⁵⁾에 의해 제한된 경우에 대하여 실험결과와 정성적인 경향만 비교되었을 뿐 정량적인 비교를 통해 그 신뢰성이 엄밀하게 검토된 바는 없다. 따라서 본 연구에서는 많은 연구에서 검증대상으로 택하고 있는 몇 가지 전형적인 이성분혼합물 응고문제에 대해 세 가지 경우((a)연속체 모델을 사용한 본 연구결과, (b)기존의 연속체모델에 의한 결과, (c)가용한 여타 연구자들의 해석해, 실험결과 그리고 다른 접근방법으로 구한 수치해)를 상호 비교함으로써 추후 연구에서 모델검증을 위한 자료로 삼고자 한다.

본 연구는, 당초 이성분 혼합물의 응고과정에 대한 신뢰성 있는 수치해석방법을 개발하기 위하여 시작되었으나, 그 과정에서 비교대상으로 취한 연속체모델의 결과가 전술한 불확실성을 내포한 사실이 발견되었기에 이를 규명하기 위하여 수행되었다. 우선적으로, 연속체모델의 질량분율 결정방법에 대한 의존성이 매우 크므로 본 연구에서 수용한 질량분율 결정방법을 알려진 몇 가지 다른 알고리즘과 비교하는 연구를 수행하였다. 이를 통해 모델의 적용에 큰 영향을 미치는 질량분율 결정방법은 전술한 불확실성의 원인이 아님을 확인하였다. 연구순서는 연속체모델에 의해 공식화된 방정식에 의존하여, 지금까지 Incropera와 공동연구자에 의해 발표된 전형적인 이성분혼합물 응고문제(경우 (b))에 대하여 같은 조건을 부여하여 재계산을 수행해 본 결과(경우 (a))와 불일치를 확인하고 이러한 불일치가 본 연구과정에서 기인한 것이 아님을 확인하기 위해 가용한 해석해, 실험 또는 여타 연구자들의 수치결과(경우 (c))와 비교하는 과정을 택하였다. 이로부터, 발견된 불확실성이 공식화 과정에 내포된 문제인지 수치해석 과정에 기인한 오류인지를 판단하기로 한다. 결과적으로, 새로운 모델의 타당성 검증을 위한 기준으로서 연속체모델에 의한 계산결과의 신뢰성이 평가될 수 있을 것이다.

2. 공식화

2.1 연속체모델

서론에서 제시된 연구목적에 부합하기 위하여 기본적으로 본 연구의 해석방법은 연속체모델에 의존하였다. 머시는 다공성물질로 취급하여 Darcy의 법칙을 적용하며 투과율은 Carman-Kozeny의 경험식에 의해 계산하였다. 에너지방정식 및 용질보존식의 종속변수는 각각 총엔탈피 및 혼합물농도로 취하고 잠열은 일정하다고 가정하였다. 이에 따른 지배방정식은 다음과 같으며 구체적인 공식화과정은 생략하였으며 문헌 (1)을 참조하기 바란다.

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{V}_m) + \nabla \cdot (\rho \vec{V}_m \vec{V}_m) = \nabla \cdot \left(\mu_t \frac{\rho}{\rho_t} \nabla \vec{V}_m \right) + \rho \vec{B} - \frac{\mu_t}{K} \frac{\rho}{\rho_t} (\vec{V}_m - \vec{V}_s) - \nabla P \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_m) + \nabla \cdot (\rho \vec{V}_m h_m) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_s} \nabla h_m \right) + \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_s} \nabla (h_s - h_m) \right) - \nabla \cdot [\rho (h_t - h_m) (\vec{V}_m - \vec{V}_s)] \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_m) + \nabla \cdot (\rho \vec{V}_m C_m) = \nabla \cdot (\rho D \nabla C_m) + \nabla \cdot (\rho D \nabla (C_t - C_m)) - \nabla \cdot [\rho (C_t - C_m) (\vec{V}_m - \vec{V}_s)] \quad (4)$$

여기서 혼합물의 물리량 및 물성치는 다음과 같이 정의되었다.

$$\phi_m = f_s \phi_s + f_t \phi_t \quad (5)$$

$$\rho_m = g_s \rho_s + g_t \rho_t \quad (6)$$

$$k_m = g_s k_s + g_t k_t \quad (7)$$

$$D = f_t D_t \quad (8)$$

$$K_x = K_y = K_0 \left[\frac{g_t^3}{(1 - g_t)^2} \right] \quad (9)$$

2.2 좌표변환

직교좌표계로 다룰 수 없는 복잡한 형상에도 일반화된 접근으로 적용이 가능하기 위해 지배방정식을 비직교좌표계로 변환하기 위하여 좌표변환

$$x = x(\xi, \eta) \quad (10)$$

$$y = y(\xi, \eta) \quad (11)$$

을 도입하면 일반화된 지배방정식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(J\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho U \phi - \frac{\alpha_\xi \Gamma}{h_\xi} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\rho V \phi - \frac{\alpha_\eta \Gamma}{h_\eta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) = JS(\xi, \eta) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\beta_\xi \Gamma}{h_\xi} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\beta_\eta \Gamma}{h_\eta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

여기서

$$U = \alpha_\xi \mu_\xi - \beta_\xi \mu_\eta \quad (13)$$

$$V = \alpha_\eta \mu_\eta - \beta_\eta \mu_\xi \quad (14)$$

$$\mu_\xi = (x_\xi u + y_\xi v) / h_\xi \quad (15)$$

$$\mu_\eta = (x_\eta u + y_\eta v) / h_\eta \quad (16)$$

이며 다른 기하학적 계수들은 기호설명에 정의되어 있다. 식 (12)에 나타난 $S(\xi, \eta)$ 는 생성항으로서 단일성분에 대해 개발된 수치해석기법을 적용하는 과정에서 주의를 요하는 항이다. 즉, 운동량방정식에서는 액상(또는 고상)의 질량분율의 함수로 표현된 생성항이 동일한 식으로 고상과 머시 그리고 액상영역을 함께 해석하는 것을 가능하게 한다. 에너지방정식과 농도방정식에서는 종속변수를 일치시키는 과정에서 생긴 유사대류(convection-like) 항과 유사확산(diffusion-like) 항이 생성항에 추가되고 이를 해석하기 위해서는 상류차분기법(upwind difference scheme)을 적용해야 함이 지적되었다.⁽³⁾

식 (10), (11)은 경계추적 이동좌표계의 좌표변환⁽¹⁷⁾과는 구분되어야 한다. 전자에서는 고상과 액상을 포괄하는 해석영역이 불변이기 때문에 좌표변환에 따른 계수는 일정함에 비하여, 후자에서는 상경계면의 이동에 따라 매시간스텝에서 고상과 액상영역 각각에 대하여 계수는 다시 계산되어야 한다.

지배방정식의 해를 구하기 위하여 검사체적근사에 의한 유한차분법⁽¹⁸⁾으로 식 (12)를 이산화하였으며 SIMPLER 알고리즘에 의존하여 수치해석하였다.

3. 해석결과의 질량분율 결정방법에 대한 의존성

이성분혼합물을 다룸에 있어서 질량분율 결정방법의 중요성은 누차 지적된 바 있다.^(3,19) 이는 머시내의 투과율모델을 주의깊게 살펴봄으로써 확인할 수 있다. 일반적으로 머시내의 투과율모델은 액체분율이 클 경우에 대한 적절한 모델이 없기 때문에⁽⁹⁾ 중간 영역의 액체분율에 대해서만 검증된 Carman

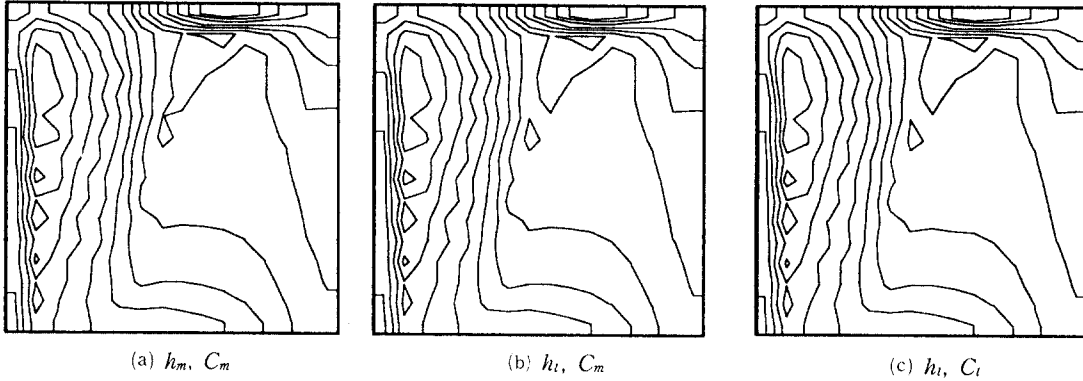


Fig. 1 Mixture concentration fields corresponding to different mass fraction evaluation method for solidification of $\text{NH}_4\text{Cl}\text{-H}_2\text{O}$ solution.

-Kozeny의 경험식 또는 이와 유사한 모델을 외삽하여 사용하고 있다. 이럴 경우 극히 미소한 질량분율의 변화에도 특히 액상선부근에서는 유동장의 감쇠효과가 증폭되므로 유동 및 열전달특성이 민감하게 영향을 받게 된다. 따라서 질량분율 결정방법은 수치해석 결과에 결정적인 영향을 미치는 중요한 요소로, 각기 다른 종속변수 형태로 표현된 결과를 비교하기 위해서는 질량분율 결정방법이 결과에 미치는 영향이 없음을 확인하는 것이 선행되어야 한다.

엔탈피와 농도를 다룸에 있어서 종속변수를 취하는 방법에 따라 질량분율 결정방법은 각기 다른 형태를 가지며 여기서는 종속변수로 총엔탈피와 혼합물농도를 택할 경우에 대해 수행된 Bennon과 Incropera⁽³⁾가 제안한 방법과 다른 알고리즘에 의한 결과를 비교하여 Fig. 1에 나타내었다. 대상은 NH_4Cl 수용액에 대해 다른 삼면은 단열시킨 상태에서 좌측 벽면을 냉각할 때 1000초가 경과한 후 혼합물농도의 분포를 나타내었다. Fig. 1(a)는 종속변수를 총엔탈피, 혼합물농도로 하여 질량분율 결정방법은 Bennon과 Incropera의 방법⁽³⁾에 의한 것이며 Fig. 1(b)는 종속변수를 액상엔탈피, 혼합물농도, Fig. 1(c)는 액상엔탈피, 액상농도로 하고 두 경우 모두 질량분율 결정방법은 Prakash와 Voller⁽¹⁹⁾가 제안한 갱신알고리즘에 의한 것이다. 정성적, 정량적으로 잘 일치하는 결과를 확인할 수 있다.

수치해석 결과에 결정적인 영향을 미치는 중요한 요소인 질량분율결정방법이 각기 다른 몇 가지 경우가 동일한 결과를 보이므로 추후 서술에서 여타

연구와의 비교시 보이는 오차는 본 연구에서 적용하고 있는 질량분율 결정방법에 기인하지는 않을 것으로 판단된다.

4. 연속체모델에 의한 계산결과 검토

4.1 검토대상

본 연구에서는 많은 연구에서 검증대상으로 택하고 있는 몇 가지 전형적인 이성분혼합물 응고문제에 대해 다음과 같은 세 가지 경우에서 동일한 응고조건에 대하여 서로 다른 해석방법에 의한 결과를 비교하였다.

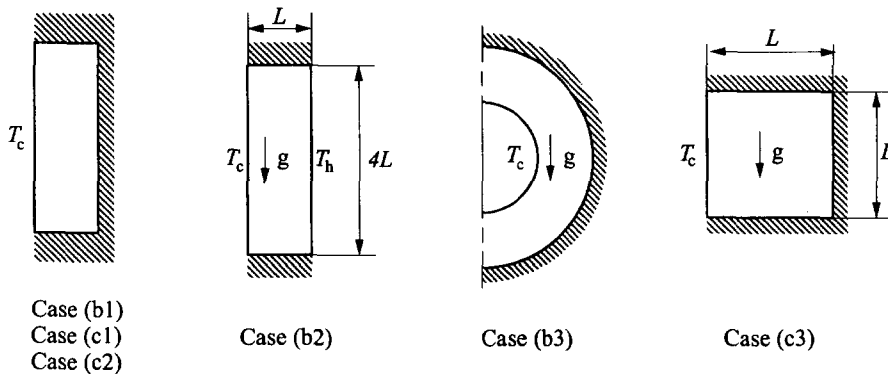
- (a) 연속체모델을 사용한 본 연구결과
- (b) 기존의 연속체모델에 의한 결과
- (c) 가용한 여타 연구자들의 해석해, 실험 그리고 다른 접근방법으로 구한 수치해

각 경우에 따른 검증대상과 연구자를 Table 1에 정리하였고 이에 대응하는 해석대상의 형상을 Fig. 2에 개략적으로 도시하였다.

여기서 Braga와 Viskanta⁽²⁰⁾는 용질확산을 무시한 반무한영역에서의 상사해이며, Worster⁽²¹⁾는 한계평형(marginal equilibrium)을 사용한 해석해이다. Prakash와 Voller⁽¹⁹⁾는 에너지방정식에서 온도를 종속변수로 하여 액상분율과 온도를 반복적으로 수정하여 계산을 수행하였고 Zeng과 Faghri⁽¹⁵⁾는 온도를 종속변수로 하였으나 온도와 농도 그리고 액상분율의 연관을 직접적으로 다룸으로써 효율을 증가시키는 온도변환모델을 사용하였다. 대상물질은 Worster의 경우는 NaNO_3 수용액, Neilson과 Incropera⁽⁵⁾의 경우는 Na_2CO_3 수용액이며 그 외는

Table 1 Computed cases for comparison between the present and previous results.

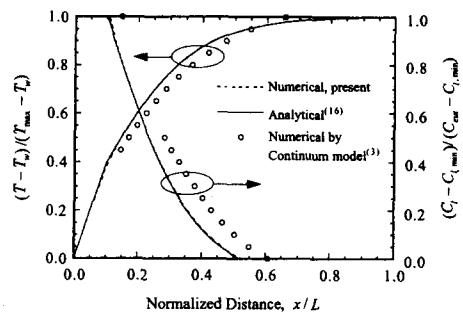
	Numerical (Continuum mode)	Numerical (Other models)	Analytical	Experimental
Case (b1)	Bennon and Incropera ⁽³⁾		Chung <i>et al.</i> ⁽¹⁶⁾	
Case (b2)	Christenson <i>et al.</i> ⁽⁴⁾	Zeng and Faghri ⁽¹⁵⁾		Christenson <i>et al.</i> ⁽⁴⁾
Case (b3)	Neilson and Incropera ⁽⁵⁾			Neilson and Incropera ⁽⁵⁾
Case (c1)			Braga and Viskanta ⁽²⁰⁾	Braga and Viskanta ⁽²⁰⁾
Case (c2)			Worster ⁽²¹⁾	
Case (c3)		Prakash and Voller ⁽¹⁹⁾ Zeng and Faghri ⁽¹⁵⁾		

**Fig. 2** Schematics of the physical models considered in the present study

공히 NH_4Cl 수용액이다. 각각의 경우에서 계산격자는 문헌에서 제시한 바와 같은 수준에서 결정하였다.

4.2 기존 연속체모델의 결과와 비교

Table 1의 Case (b1)은 전도만이 고려된 1차원 응고문제의 경우로서 문제의 단순함에도 불구하고 Fig. 3에서 보는 바와 같이 동일한 모델을 사용하여 재현한 본 연구 결과와 상당한 차이를 보이고 있다. 이러한 차이는 최근 개발된 해석해⁽¹⁶⁾와의 비교에서 극명히 확인될 수 있다. 해석해와 거의 일치하는 본 연구에서의 결과와는 달리 Bennon과 Incropera⁽³⁾의 결과는 상대적으로 더 두꺼운 머시 영역에서 액상농도와 온도가 해석해와 차이를 보이고 있다. 또한, 응고시 방출될 용질로 인해 공정점

**Fig. 3** One dimensional conduction solidification of NH_4Cl - H_2O solution.

에서 액상농도와 그 구배는 최대가 되어야 하지만 해석해나 동일한 모델로 재현한 본 연구 결과와는 달리 Bennon과 Incropera⁽³⁾에서는 액상농도의 최

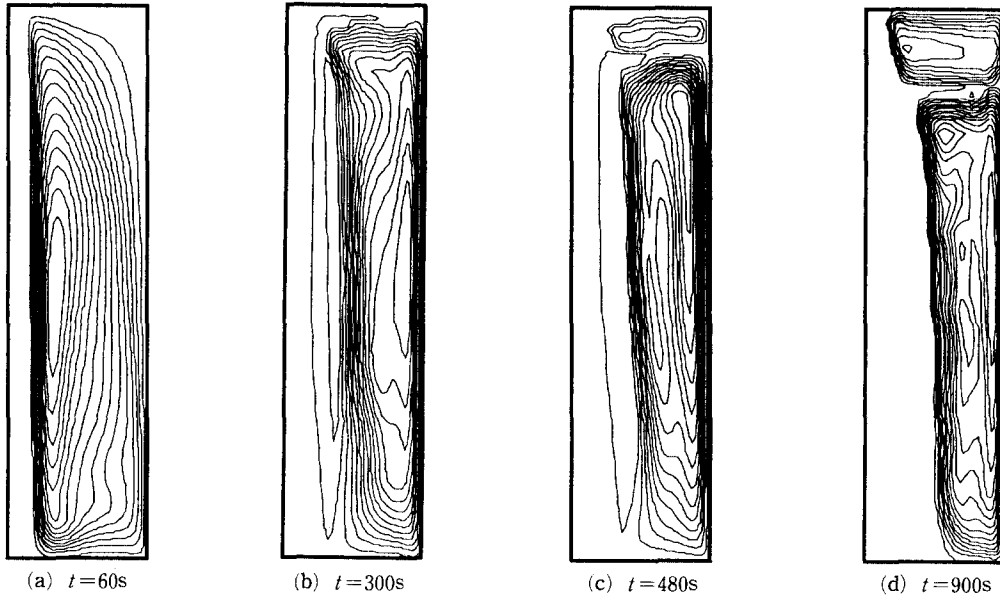


Fig. 4 Evolution of double diffusive flow pattern during solidification of $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ solution

대점이 공정선에서 떨어져 있음도 보여준다. 이와 같은 비교적 간단한 문제에서도 어떤 불확실성이 존재함을 확인할 때 이성분혼합물 응고에 대한 기존에 인용되어온 검증대상을 전면 재검토해야 할 필요성이 있을 것이다.

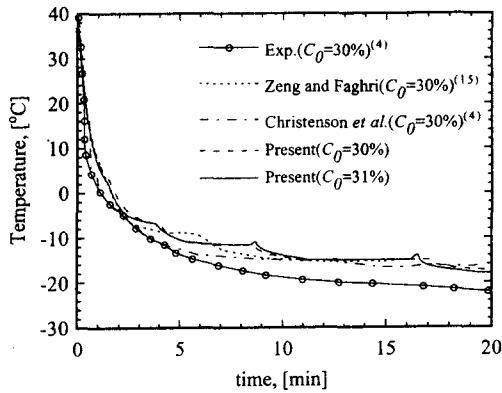
Case (b2)는 중횡비 4인 직사각형내의 응고과정으로 자연대류가 포함된 문제이다. 초기에 액상으로 채워진 직사각형내에서 윗면과 아랫면은 단열되고 우측면은 초기온도로 유지되면서 좌측면을 공정 온도 이하로 낮춰서 응고가 진행된다. 수치계산은 초기농도 30%와 31%의 두 경우에 대해 수행하였다. 그 이유는 Christenson 등⁽⁴⁾이 지정한 바와 같이 실험에서의 초기농도 설정이 불확실성을 내포하고 있기 때문이다. 같은 이유로 그들도 두 가지 초기농도에 대해 각기 수치계산을 수행하였으며 비록 1%의 차이에 불과하지만 계산결과가 초기농도에 크게 의존함을 확인하였다. Christenson 등의 결과와 마찬가지로 본 결과에서도 초기농도 30%일 경우에 실험에서 보여진 이중확산대류(double diffusive convection)가 나타나지 않았으며 초기농도를 31%로 하였을 때에야 비로서 농도대류의 영향이 나타나게 되었다. 초기농도를 31%로 하였을 때 몇 가지 시간에서의 유동함수를 Fig. 4에 나타내었다. 초기($t=60\text{s}$)에는 주로 열대류의 영향이 지배적이 되어 반시계방향으로 회전하는 유동셀이 형성되나

시간이 경과됨에 따라($t=300\text{s}$) 농도대류의 영향이 나타남을 알 수 있다. 상경계면에서 방출된 차가운 용질(이 경우는 H_2O)은 용매(NH_4Cl)에 비해 가벼워 상층부에 쌓이게 되어 가볍고 차가운 상층부와 무겁고 뜨거운 하층부간의 열확산과 농도확산의 두 가지 다른 메커니즘에 의한 이중확산대류가 생성되게 된다. 그 후 시간이 더욱 증가됨에 따라 농도대류에 의한 시계방향으로의 회전셀이 점차 발달하여 이중확산셀의 경계위치는 아래로 이동($t=480, 900\text{s}$)하게 되며 이러한 과정이 어느 정도 진행된 후 이중확산셀이 소멸되면서 농도대류에 의해 지배적인 영향을 받는 유동장이 생성된다. 이러한 일련의 과정이 Fig. 4에 잘 나타나 있다. 대응하는 결과를 Christenson 등⁽⁴⁾과 Zeng과 Faghri⁽¹⁵⁾에서 살펴보면 유사한 경향을 보임에도 불구하고 중요한 차이점이 발견된다. 이는 이중확산셀의 경계위치가 본 연구결과에서는 그들의 결과보다 늦게 생성하여 천천히 내려온다는 것이다. Christenson 등⁽⁴⁾의 Fig. 5에서 보인 바와 같이 그들의 결과는 실험과 비교하여 볼 때 너무 일찍 이중확산셀이 형성되고 일찍 소멸되는데 비해 본 연구에서 예측한 이중확산셀의 형성과 발달이 Christenson 등이나 Zeng과 Faghri⁽¹⁵⁾의 결과와 비교하여 보다 실험에 부합하는 것은 본 연구의 타당성을 증명하는 일례가 될 것이다.

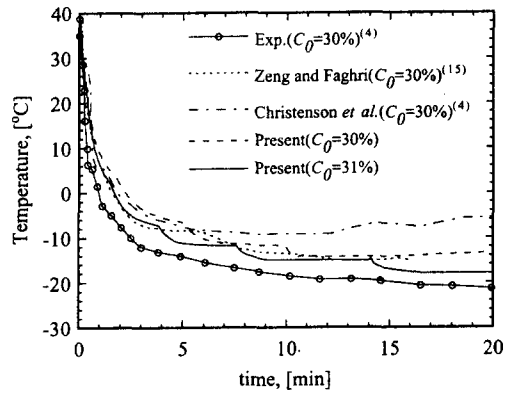
고정된 몇 개의 위치($x=2.2, 4.4, 6.6, 8.7\text{mm}$ 와

$y=45, 90\text{mm}$)에서 시간에 따른 온도변화를 초기농도 30%, 31%에 대해 구해 Zeng과 Faghri⁽¹⁵⁾와 Christenson 등⁽⁴⁾의 결과와 함께 Fig. 5, Fig. 6에

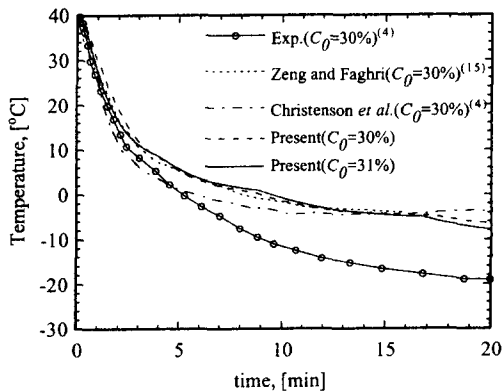
보였다. 초기농도를 30%, 31%로 할 경우 Christenson 등의 결과보다 실험에 접근하며 특히 31%로 하였을 경우는 제시된 모든 경우에서 가장



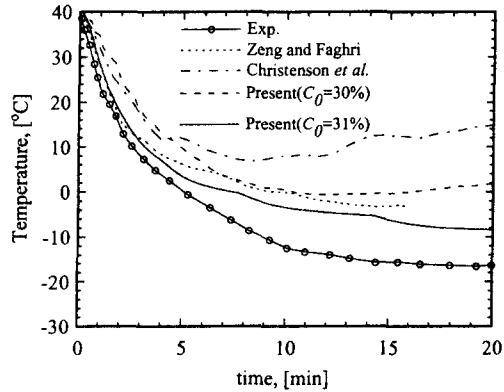
(a) $x=2.2\text{ mm}$



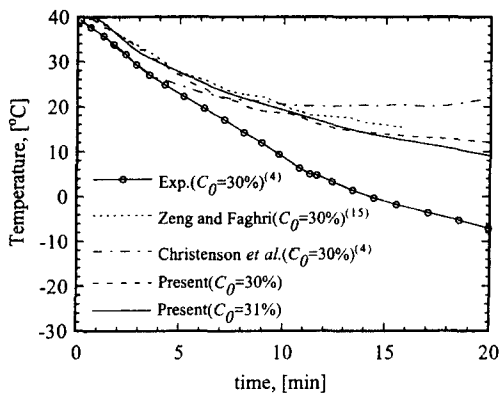
(a) $x=2.2\text{ mm}$



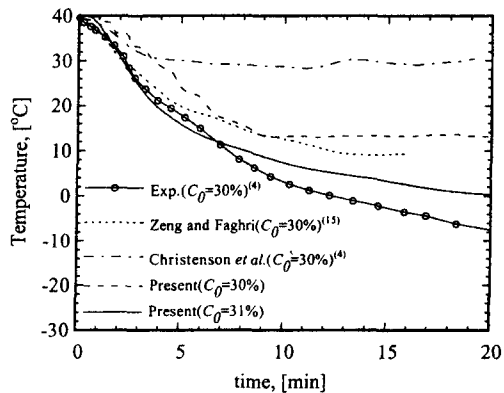
(b) $x=4.4\text{ mm}$



(b) $x=4.4\text{ mm}$



(c) $x=8.7\text{ mm}$



(c) $x=6.6\text{ mm}$

Fig. 5 Comprison of predicted and experimental temperature histories for $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ at $y=45\text{ mm}$.

Fig. 6 Comprison of predicted and experimental temperature histories for $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ at $y=90\text{ mm}$.

실험에 근접한 결과를 보인다. Fig. 5는 해석대상
의 하층부인 $y=45\text{mm}$ 에서의 결과로 이중화산대류
의 영향을 비교적 작게 받는 영역에서의 결과이다.

따라서 기존 연속체모델에서의 결과는 본 연구결과
나 Zeng과 Faghri⁽¹⁵⁾의 결과와 비교하여 큰 차이를
보이지 않는다. 하지만 이중화산대류의 영향을 직
접적으로 받고 있는 상층부인 $y=90\text{mm}$ 에서의 결
과(Fig. 6)를 살펴보면 상기 연구자들간에 큰 차이
가 있음을 알 수 있고, 특히 기존 연속체모델에 의
한 결과의 실험과의 정량적인 차이를 확인할 수 있
다. 물론 Zeng과 Faghri⁽¹⁵⁾의 결과나 본 연구결과
또한 어느 정도 실험과 일치하지 않지만 이는 많은
경우 연속체모델의 근본적인 제약으로 언급되고 있
는 모델 개발중에 도입된 가정에 의한 것으로 생각
할 수 있을 것이다. $y=90\text{mm}$ 에서도 초기농도를
30%로 할 경우는 이중화산셀이 생성되지 않아 전
혀 다른 유동장이 형성될 것이므로 Fig. 5, Fig. 6에
서 확인되듯이 실험과 부합되지 않음은 예측할 수
있는 결과일 것이다.

수치해석의 불확실성과 관련하여 시간증분, 수렴
한계 그리고 격자계의 영향의 중요성은 누차 강조
되는 사항이므로 대표적으로 대류가 포함된 경우인
Case(b2)를 대상으로 이를 살펴보았다. 시간증분

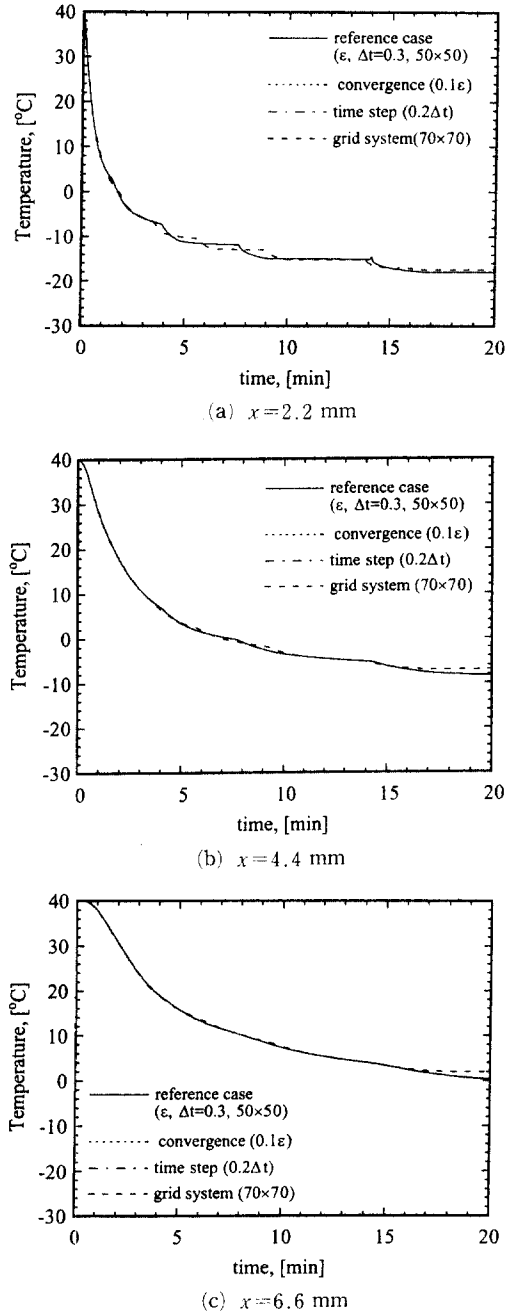


Fig. 7 Convergence criterion, time step and grid resolution test for Case (b2) of Table 1 at $y=90\text{ mm}$.

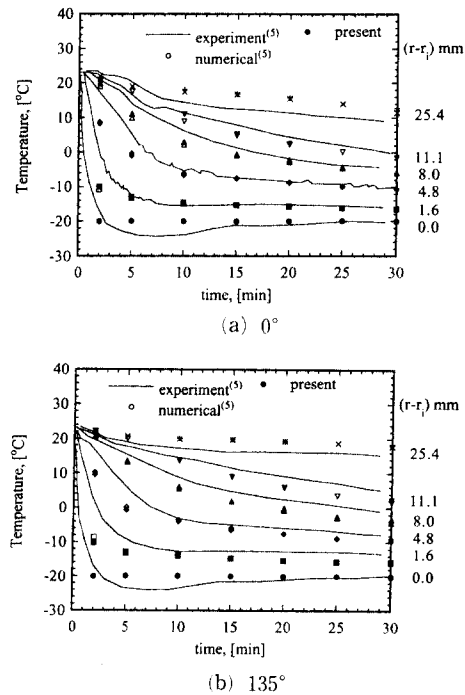


Fig. 8 Comprison of predicted and measured radial temperature distributions as a function of time.

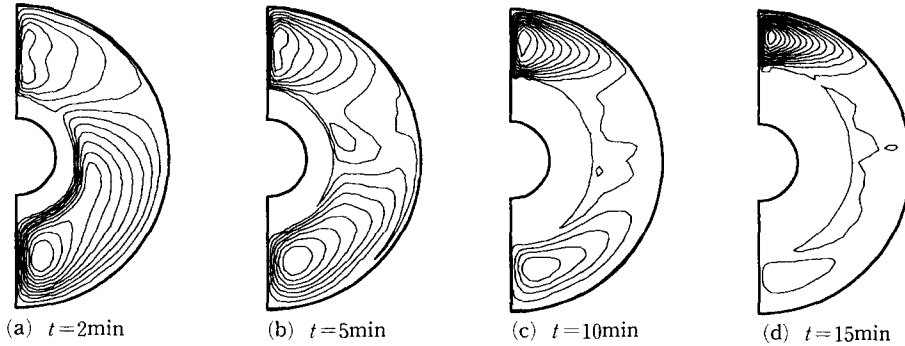


Fig. 9 Evolution of double diffusive flow pattern for $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-H}_2\text{O}$ solution in horizontal, cylindrical annulus

을 0.3초로하고 격자는 50×50 으로 할 경우를 기준으로 하여 나머지 조건은 고정시키고 시간증분을 0.06초로하여 시간증분의 영향을 살펴보고, 수렴한계를 기준에서의 경우보다 1/10으로 하여 수렴한계의 영향을 살펴보고, 마지막으로 70×70 의 격자를 사용하여 격자계의 영향을 살펴보았다. 이를 이중확산대류의 영향이 확연히 나타나는 $y=90\text{mm}$ 에서 시간에 따른 온도 변화로 Fig. 7에 나타내었다. 응고 후반부에 격자계의 영향을 일부 받는 것 외에는 전반적으로 좋은 일치를 보인다. 격자계 선정과 관련하여 혼합물 응고해석 특성상 단일성분 상변화해석과 비교하여 상대적으로 많은 계산시간이 필요함을 고려할 때 격자선정에 특별한 주의가 필요할 것이다.

Case (b3)은 초기에 액상으로 채워진 환상공간내에서 외벽은 단열되고 내벽이 공정온도 이하로 되어 응고가 진행되는 경우이다. 특히 이 경우에는 액체분율이 0.8 이상에서 공정으로 진행하고 액체분율 1근처에서 넓게 분포된 머시 영역을 가지는 NH_4Cl 수용액의 특수성을 배재하기 위해 보다 일반적인 물질로서 Na_2CO_3 수용액의 응고 문제를 대

상으로 하였다. 수치적 처리는 극좌표계를 사용한 Neilson과 Incropera⁽⁵⁾와 비교하여 본 연구에서는 Cartesian 좌표계를 일반좌표계로 변환하여 처리하였다. 시간에 따른 온도변화를 실험결과와 Neilson과 Incropera⁽⁵⁾의 수치결과와 함께 Fig. 8에 제시하였다. 0° 에서 보다 큰 차이가 나타남은 방출된 용질이 수직 대칭면을 따라 상승하여 이 부근에서 이중확산셀이 발생하기 때문이다. 몇 가지 시간단계에서의 전형적인 유동형태를 Fig. 9에, 그리고 각각에서의 유동함수의 최대값, 최소값을 Table 2에 나타내었다. Neilson과 Incropera⁽⁵⁾의 결과와 비교하여 정성적으로는 시간이 증가함에 따라 농도대류의 영향이 지배적으로 되어 25min 이후에는 이중확산셀이 소멸하고 열대류의 영향은 거의 사라지는 유사한 경향을 보이나 정량적으로는 유동함수의 최대, 최소값이 차이가 있음을 알 수 있다. 비교대상을 온도나 유동장이 아니라 농도로 하였을 때는 훨씬 가시적으로 그 차이를 확인할 수 있을 것이다. (농도비교를 위한 데이터가 문헌에 제시되어 있지 않음). 동일한 모델을 사용한 두 결과에서 보인 이러한 차이의 원인을 살펴볼 필요가 있을 것

Table 2 Comparison of the flow intensity for Case(b3) of Table 1.

t [min]	Ψ_{\min}		Ψ_{\max}	
	Present	Neilson and Incropera ⁽⁵⁾	Present	Neilson and Incropera ⁽⁵⁾
2	-0.0110	-0.0101	0.0217	0.0249
5	-0.01275	-0.00906	0.0120	0.0129
10	-0.01457	-0.00794	0.00513	0.00584
25	-0.01038	-0.00545	6.0×10^{-6}	4.4×10^{-5}
30	-0.00818	-0.00451	5.8×10^{-5}	2.6×10^{-6}

이다.

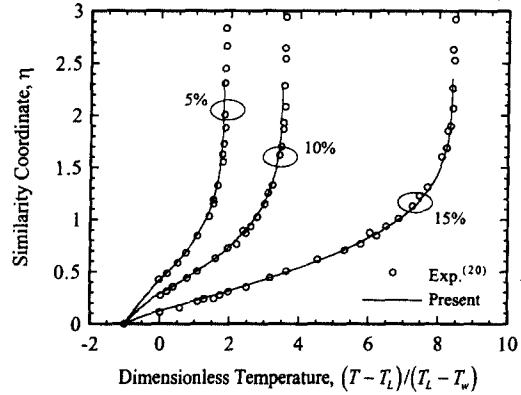
4.3 연속체모델 이외의 방법에 의한 결과와 비교

이상의 비교, 검토로부터 많은 경우 모델 타당성을 확인하기 위해 인용되는 Incropera와 공동연구자의 몇몇 결과(Case(b1), (b2), (b3))를 같은 모델로 재현하여 무시 못할 차이를 발견하였다. 이에 반해 본 연구와 비교된 여러 경우들(즉, 다른 모델을 사용한 수치결과 또는 실험결과 그리고 가용한 해석해)의 보다 근접한 결과를 확인할 수 있었다. 이는 불확실성이 공식화 과정에 내포된 문제라기 보다는 수치해석 과정에 기인한 오류로 판단되며 이를 확인하기 위해 전형적인 몇 가지 문제에 있어서 해석해, 실험 또는 다른 모델을 사용한 수치 결과를 비교하였다.

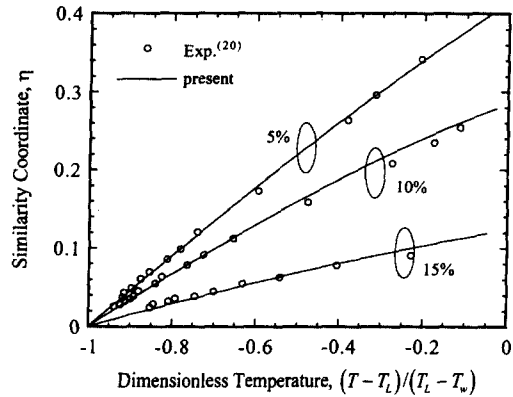
전도만을 고려한 Case(c1)의 경우는 반무한영역에서 벽면온도를 공정온도 이상으로 하여 응고시킬 때 머시의 위치와 온도분포를 해석한 것으로 Braga와 Viskanta⁽²⁰⁾의 상사해와 실험 그리고 본 연구결과를 초기농도에 따라 머시 두께를 비교하여 Table 3에 나타내었다. 이 경우 액상과 머시내의 무차원화된 온도분포를 실험과 비교하여 Fig. 10에 나타내었으며 해석해와 실험결과가 공히 정성적, 정량적으로 잘 일치함을 알 수 있다. 비교의 편의를 위하여 문헌⁽¹⁵⁾에서 제시한 변수와 크기로 변환하여 표시하였다.

Case(c2)도 반무한영역에서 벽면온도를 공정온도 이상으로 하여 응고시킬 때 전도를 해석한 것으로 이 경우는 Case(c1)과는 달리 한계평형을 가정하여 농도방정식을 함께 해석한 Worster⁽²¹⁾의 해석해와 비교하였다. 이를 온도와 액상농도에 따라 본 연구결과와 함께 Fig. 11에 제시하였으며 본 연구결과와 거의 일치하여 구분을 위해 문헌의 결과로도 표기하였다.

대류의 효과를 함께 고려하기 위해 Case(c3)에



(a) Liquid



(b) Mush

Fig. 10 Comparison of predicted and measured temperature distributions during solidification of NH₄Cl-H₂O solutions.

서는 열부력과 농도부력 영향의 상호 작용을 다음 세 가지 경우에서 살펴보았다.

Case (c3.1) $\beta_T = 4 \times 10^{-5}, \beta_C = 0$

Case (c3.2) $\beta_T = 0, \beta_C = 0.025$

Case (c3.3) $\beta_T = 4 \times 10^{-5}, \beta_C = 0.025$

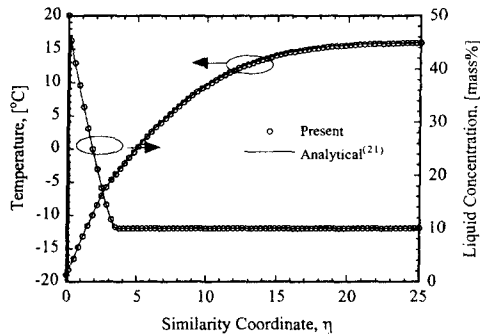
각각의 경우 완전히 응고되었을 때 ($t=6000s$) 혼

Table 3 Comparison of the mushy zone thickness for Case(c1) of Table 1.

C_0 [mass%]	t [min]	Present	Analytical (Braga and Viskanta ⁽²⁰⁾)	Experimental (Braga and Viskanta ⁽²⁰⁾)
5	500	50.8	50.5	48.0
10	540	33.8	33.2	32.0
15	540	13.3	13.2	13.0

Table 4 Comparison of the mixture concentration for Case(c3) of Table 1.

	C_{min} [mass%]			C_{max} [mass%]		
	(c3.1)	(c3.2)	(c3.3)	(c3.1)	(c3.2)	(c3.3)
Present	0.094	0.094	0.094	0.112	0.114	0.107
Prakash and Voller ⁽¹⁹⁾	0.095	0.094	0.096	0.116	0.118	0.108
Zeng and Faghri ⁽¹⁵⁾	0.094	0.096	0.094	0.109	0.110	0.105

**Fig. 11** Similarity solution of 1-D conduction solidification assuming marginal equilibrium.

합물농도를 비교하면 Table 4와 같다. 서로 다른 모델을 사용한 각각의 결과에서 본 결과는 Prakash와 Voller,⁽¹⁹⁾ Zeng과 Faghri⁽¹⁵⁾의 결과 사이에 있음을 알 수 있고 이는 본 해석방법 및 계산 결과의 타당성을 재확인하는 일례가 될 수 있을 것이다.

5. 결론

본 연구에서는 연속체모델에 의한 기존의 계산결과를 재검토하고 새로운 모델의 검증을 위한 비교기준으로서의 타당성 평가를 시도하였다. 기본방정식은 연속체모델에 의존하되 일반화된 적용을 위해 좌표변환하여 이미 발표된 다양한 경우에 대하여 재계산을 수행하고 결과를 정성적, 정량적으로 비교고찰하였다. 그 결과는 다음과 같이 요약할 수 있다.

본 연구 및 Incropera와 공동연구자의 일부 계산결과 사이에 상당한 불일치가 있음이 발견되었다. 이러한 불일치의 원인을 규명하기 위해 가용한 해석해, 실험 또는 타 모델에 의한 예측치와 본 연구의 결과를 비교할 때 잘 일치함을 확인하였으며 이로부터 연속체모델에 의한 계산결과중 일부에 오류

가 있다는 사실을 간접적으로 확인할 수 있다. 기본방정식의 변형이 없었기 때문에 이러한 오류(또는 불확실성)는 연속체모델의 공식화 과정이 아니라 계산과정에 기인한 것으로 판단된다. 따라서, 연속체모델 자체의 유용성은 충분히 인정되지만, 추후 연구에서 새로운 모델의 검증을 위하여 비교대상을 선정할 때 연속체모델에 의한 기존의 계산 결과에 대해서는 신중한 검토가 선행되어야 할 것이다.

참고 문헌

- (1) 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.
- (2) 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.
- (3) 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.
- (4) Christenson, M. S., Bennon, W. D. and Incropera, F. P., 1989, "Solidification of an 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.
- (5) 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.
- (6) 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.
- (7) Prescott, P. J. and Incropera, F. P., 1994, "Convective Transport Phenomena and Macroseggregation during Solidification of a Binary Metal Alloy : I-Numerical Predictions," *J. Heat Transfer*, Vol. 116, pp. 735~741.
- (8) 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.
- (9) Yoo, H. and Viskanta, R., 1992, "Effect of Anisotropic Permeability on the Transport Process during Solidification of a Binary Mixture," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 35, pp. 2335~2346.
- (10) 유호선, 1994, "수직환상주형내 Al-Cu 합금의 응고과정 및 냉각속도의 조대편석에 대한 영향," 대한기계학회논문집, 제18권, 제7호, pp. 1818~1832.
- (11) 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. .
- (12) Ni, J. and Incropera, F. P., 1995, "Extension of the Continuum Model for Transport Phenomena occurring during Metal Alloy Solidification -I. The Conservation Equations," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, pp. 1271~1284.
- (13) 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.
- (14) Zeng, X. and Faghri, A., 1994, "Temperature-Transforming Model for Binary Solid-Liquid Phase-Change Problems Part I: Mathematical Modeling and Numerical Methodology," *Numerical Heat Transfer*, Vol. 25, Part B, pp. 467~480.
- (15) Zeng, X. and Faghri, A., 1994, "Temperature-Transforming Model for Binary Solid-Liquid Phase-Change Problems Part II: Numerical Simulation," *Numerical Heat Transfer*, Vol. 25, Part B, pp. 481~500.
- (16) 정재동, 유호선, 이준식, 노승탁, 1996, "열전도에 의해 지배되는 이성분혼합물의 응고문제에 대한 해석해," 대한기계학회논문집 제20권 제11호, pp. 3655~3665.
- (17) Kim, C-J and Kaviany, M., 1992, "A Numerical Method for Phase-Change Problems with Convection and Diffusion," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 35, pp. 457~467.
- (18) Patankar, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation. .
- (19) 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.
- (20) Braga, S. L. and Viskanta, R., 1990. "Solidification of a Binary Solution on a Cold Isothermal Surface," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 33, pp. 745~754.
- (21) Worster, M. G., 1986, "Solidification of an Alloy from a Cooled Boundary," *J. Fluid Mech.*, Vol. 167, pp. 481~501.