

이송·확산방정식에 관한 Eulerian-Lagrangian Method의 거동해석
 Numerical Modeling of 1-D Advection-Dispersion Equation
 Using Eulerian-Lagrangian Method

서일원¹⁾, 김대근²⁾

1. 서론

최근들어 오염물질의 이송·확산방정식(advection-dispersion equation)을 풀기 위하여 많은 수치기법들이 발전되어지고 있다. 그러나 고정된 격자점을 이용하는 Eulerian 방법은 계산상의 편리함에도 불구하고 이송이 지배적인 경우에는 수치확산(numerical dispersion)과 진동(oscillation)이 증대되어서 해의 정확도가 급격히 떨어진다(이 길성 등, 1987; 전 경수 등, 1992). 이는 이송·확산방정식이 쌍곡선성(hyperbolicity)과 포물선성(parabolicity)을 동시에 가지고 있기 때문에 고정 격자점을 사용하는 Eulerian 방법에서는, 특히 이송이 지배적인 경우에, 다음 시간 단계 격자점의 정보를 계산하는 과정에서 이전 시간 단계의 격자점 정보들의 전달이 제대로 이루어지지 못하기 때문이다. 이러한 문제점을 해결하기 위하여 이송·확산방정식을 이송항과 확산항으로 분리한 후 이송항의 경우에는 특성곡선(characteristic line)을 따르는 농도의 시간에 대한 전미분을 차분화함으로써 이동방정식의 정보전달의 방향성을 반영하여 주고, 확산항의 경우에는 기존의 Eulerian 격자상에서 차분을 수행함으로써 계산의 편리함을 도모하는 Eulerian-Lagrangian Method(이하 ELM이라 명함)에 관한 연구가 활발하게 이루어지고 있다(Holly and Preissmann, 1977; Cheng et al., 1984; Toda and Holly, 1986).

본 연구에서는 ELM의 기본개념을 소개하고, 해석해가 존재하는 이송·확산방정식을 ELM과 Eulerian 유한차분법들을 사용하여 해를 구하여 그 결과를 비교, 분석하고자 한다. 본 연구에서 사용되어질 유한차분법은 MacCormack 양해법과 Stone and Brian의 6점음해법이다.

2. 수학적 모형

본 연구에서는 지배방정식으로 해석해가 존재하는 1차원 이송·확산방정식을 선택하였다.

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} + U \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

여기서 C 는 임의시간과 위치에서의 오염물질의 농도이고, x, t 는 각각 위치와 시간을 나타낸다. U 는 x 방향의 유속이고, D 는 종확산계수이다.

초기조건은 다음과 같으며

$$C(x, t=0) = 0 \quad (2)$$

경계조건으로서 상, 하류단 경계 모두에 Dirichlet식의 경계조건을 가정한다.

$$C(x=0, t) = C_0 \quad (3)$$

1)정회원, 서울대학교 공과대학 토목공학과 조교수

2)서울대학교 대학원 토목공학과 석사과정

$$C(x \rightarrow \infty, t) = 0 \quad (4)$$

이 경우에 해석하는 다음 식으로 주어진다.

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x-Ut}{2\sqrt{Dt}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{Ux}{D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+Ut}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (5)$$

여기서 C_0 는 일정한 값을 갖는 초기 농도이며, erfc 는 complimentary error function으로 $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$ 이다.

3. 수치 모형

3.1 ELM의 기본개념

본 연구에서는 이송·확산방정식을 이송항과 확산항으로 분리하여 분리된 두개의 방정식을 서로 다른 방법을 사용하여 해를 구한다. 식 (1)의 지배방정식을 분리하면 다음과 같다(Baptista et al., 1984).

$$\text{이송방정식 : } \frac{C^n - C^{n-1}}{\Delta t} + \left(U - \frac{\partial C}{\partial x}\right)^n = 0 \quad (6)$$

$$\text{확산방정식 : } \frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} = \left(D - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)^{n+1} \quad (7)$$

여기서 C^n 는 이송만이 일어난다고 가정했을 경우의 농도이며, n 은 전시간 단계, $n+1$ 은 현시간 단계를 표시하며, Δt 는 시간중분이다.

3.2 이송방정식의 풀이

이송방정식, 식 (6)는 특성곡선을 따라서 농도값이 시간에 관계없이 일정하다는 것을 의미한다. 본 연구에서는 특성곡선법(method of characteristics)을 이용하여 이송방정식의 해를 구하였다. 식 (6)은 농도의 시간에 대한 전미분이 0이라는 의미이며 다음 식과 같이 표시된다.

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{dx}{dt} = U \quad (9)$$

유속 U 를 일정하다고 가정하면 식 (8)과 (9)의 해는 다음과 같이 나타내진다(Fig.1 참조).

$$C_R^{n+1} = C_P^n \quad (10)$$

$$\frac{x_R - x_P}{\Delta t} = U \quad (11)$$

식 (10)과(11)은 유속이 일정한 경우, 시간 단계 n 에서의 농도는 Δt 시간 동안에 농도의 변화가 전혀 없이 단지 $U\Delta t$ 만큼 이송된다는 것을 의미하고 있다. 따라서 P 점에서의 농도를 산정하는

방법에 따라 특성곡선법에 의한 해의 정도가 좌우되며, 본 연구에서는 여러가지 내삽(interpolation)기법 중에서 Lagrangian 다항식을 사용하여 그 결과를 비교해 보았다. 일반적인 Lagrangian 다항식은 다음과 같이 표시된다.

$$f(x) = \sum_{i=1}^n f_i \phi_i(x) \quad (12)$$

여기서 $\phi_i(x) = \prod_{k=1, k \neq i}^n \left(\frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right)$ 이며, 1차다항식은 $n = 2$, 2차다항식은 $n = 3$, 3차다항식은 $n = 4$ 를 대입하여 얻어진다. Lagrange 1차다항식을 사용한 경우의 해는 정도가 매우 떨어지므로 제외하였다. Lagrange 2차다항식을 사용한 경우의 해는 다음과 같다.

$$C_i^* = C_i^p = \frac{\alpha(1+\alpha)}{2} C_{i-1}^n + (1-\alpha^2) C_i^n + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} C_{i+1}^n \quad (13)$$

여기서 $\alpha = \frac{U\Delta t}{\Delta x}$ 이며 Courant수라 정의한다. Δx 는 거리증분이다.

3차 다항식을 사용한 경우의 해는 다음과 같이 표시된다.

$$C_i^* = C_i^p = L_1 C_{i-2}^n + L_2 C_{i-1}^n + L_3 C_i^n + L_4 C_{i+1}^n \quad (14)$$

여기서

$$L_1 = \frac{(\alpha-1)\alpha(\alpha+1)}{6}$$

$$L_2 = \frac{(2-\alpha)\alpha(1+\alpha)}{2}$$

$$L_3 = \frac{(2-\alpha)(1-\alpha)(1+\alpha)}{2}$$

$$L_4 = \frac{(\alpha-2)(1-\alpha)\alpha}{2}$$

3.3 확산방정식의 풀이

확산항의 경우는 MacCormack 양해법과 Stone and Brian의 6점 음해법을 사용하여 해를 구하고 그 결과를 비교해 보았다.

(1) MacCormack 양해법

이 기법은 2단계 기법으로서, predictor로서 다음의 식을 먼저 계산한다(Hoffmann, 1989;

Fig.2 참조).

$$C_i^* = C_i^n - D \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n) \quad (15)$$

predictor단계에서는 이송방정식의 풀이에서 구한값 C_i^* 를 C_i^n 에 대입하여 C_i^* 을 우선 산정한다.

corrector는 다음 식으로 주어지며, 이 단계에서는 predictor에서 계산한 C_i^* 를 사용하여 최종적인 농도값 C_i^{*1} 를 계산한다.

$$C_i^{n+1} = \frac{1}{2} [C_i^n + C_i^n + D \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n)] \quad (16)$$

이 기법의 차수(order)는 $O(\Delta x^2 + \Delta t^2)$ 이며, 안정조건은 다음과 같다.

$$\Delta t \leq \frac{1}{\frac{u}{\Delta x} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}} \quad (17)$$

(2) Stone and Brian의 6점음해법

본 방법에서는 시간미분항은 分布形 後方差分으로 근사하였으며, 확산항은 Crank-Nicholson式의 中央差分法을 사용하여 표시한다. 이송항이 존재하는 경우 이송항도 Crank-Nicholson式의 中央差分法으로 근사한다(Fig. 3 참조).

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{\Delta t} [\frac{1}{6} (C_{i-1}^{n+1} - C_{i-1}^n) + \frac{2}{3} (C_i^{n+1} - C_i^n) + \frac{1}{6} (C_{i+1}^{n+1} - C_{i+1}^n)] \quad (18)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{1}{2} (\frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{\Delta x^2}) \quad (19)$$

이 식을 확산방정식 (7)에 대입하여 정리하면 다음과 같다.

$$a_1 C_{i-1}^{n+1} + a_2 C_i^{n+1} + a_3 C_{i+1}^{n+1} = a_4 C_{i-1}^n + a_5 C_i^n + a_6 C_{i+1}^n \quad (20)$$

여기서, $a_1 = \frac{1}{6} - \frac{\beta}{2}$

$$a_2 = \frac{2}{3} + \beta$$

$$a_3 = \frac{1}{6} - \frac{\beta}{2}$$

$$a_4 = \frac{1}{6} + \frac{\beta}{2}$$

$$a_5 = \frac{2}{3} - \beta$$

$$a_6 = \frac{1}{6} + \frac{\beta}{2}$$

여기서, $\beta = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$ 이며 diffusion수라 정의한다. $a/\beta = u\Delta x/D$ 로서 Peclet수라고 정의하

며, 이는 이송과 확산의 상대적인 중요성을 나타낸다. 식 (20)을 모든 절점에 대해서 전개하면 선형 대수방정식이 되며 그 계수가 대칭행렬식으로 표시된다. 이는 Gaussian소거법의 일종인 Thomas방법에 의해 해를 구할 수 있다.

4. 모의결과

본 연구에서는 표1 에 요약한 바와 같은 Eulerian-Lagrangian방법과 순수한 Eulerian방법을

사용하여 해를 구하고 그 정도 및 계산시간을 비교하였다. 계산은 소형 컴퓨터(IBM PC 386급)를 사용하였다.

표 1. 본 연구에서 사용된 수치방법들의 명칭소개

Eulerian method	6point method	Stone and Brian의 6점 차분법(음해법)
	MacCormack method	양해법
Eulerian-Lagrangian method	Mocquasb method	이송항 : Method of Characteristic (Lagrange quadratic interpolation) 확산항 : 6point method
	Mocccubsb method	이송항 : Method of Characteristic (Lagrange cubic interpolation) 확산항 : 6point method
	Mocquam method	이송항 : Method of Characteristic (Lagrange quadratic interpolation) 확산항 : MacCormack method
	Mocccubm method	이송항 : Method of Characteristic (Lagrange cubic interpolation) 확산항 : MacCormack method

이송이 지배적인 경우의 각 방법들이 보여주는 해의 거동을 Fig.4에 나타내었다. Courant수가 0.5이상인 경우, 음해법인 Stone and Brian의 6점차분법은 심한 수치진동을 보이고 있다. 각 방법들의 정확성의 비교척도로서 다음과 같이 총 오차를 계산하였다.

$$Total Error = \frac{1}{C_o} \sum_{i=1}^N (abs(C_{Ai} - C_i) * 100) \quad (21)$$

여기서 N 은 총 절점(node)수이고 C_{Ai} , C_i 는 각 절점에서의 해석해 및 수치해이다. $\Delta t = 200$ 초, $\Delta x = 500m$ 로 잡았을 때 $N = 50$, $t = 4000$ 초에서의 값을 비교하였다.

Fig.5는 Peclet No. 가 각각 50,100인 경우에 대해 Courant No.의 변화에 따른 각 방법들의 총 오차의 변화를 보여주고 있다. Courant No.가 0.5이하일 때는 Stone and Brian의 6점차분법이 가장 높은 정도를 나타내고 있으나 그 이상일 경우에는 오차가 급격히 증가함을 보이고 있다. 양해법인 McCormack 방법과 비교하면 Courant No.가 0.7이상인 경우에는 양해법이 음해법보다 안정함을 보여주고 있다. ELM의 결과를 보면 Eulerian 방법에 의한 해와 비교해서 해의 정도가 상당히 우수하며, 거동 또한 매우 안정적으로 나타났다. Fig.6은 Courant No.가 각각 0.5, 0.8인 경우에 대해 Peclet No. 변화에 대한 총오차를 보여주고 있는 것으로 Peclet No.의 증가에 따라 모든 방법들의 해의 정도가 감소하고 있다.

효율성의 지표로써 각 방법들의 계산시간을 비교해 본 결과 큰 차이가 없었으나, 음해법에 비해 양해법이 계산속도가 빠르고, 기존의 Eulerian방법과 ELM의 경우에는 계산속도가 비슷하였다. 이상과 같은 결과로서 이송이 지배적인 이송-확산방정식의 해석에 있어서는 기존의 Eulerian 방법의 유한차분모형보다 ELM이 해의 정도가 우수하며 모형의 거동이 상당히 안정적임을 알 수 있다.

5. 참고문헌

1. 이길성, 강주환 (1987). "대류분산 모형에 관한 유한차분근사의 특성," 대한토목학회 논문집, 4(4), 147-157.
2. 전경수, 이길성 (1992). "특성곡선을 고려한 이송-확산 방정식의 유한차분법," 92년 한국수문학회, 1992 수공학 연구발표회 논문집, 81-84.
3. Baptista, A.M., Adams, E.E., and Stolzenbach, K.D. (1984). "Eulerian-Lagrangian Analysis of Pollutant Transport in Shallow Water," Report No. 296, Dept. Civ. Engr.,

Mass. Inst. of Technology, Cambridge, MA.

4. Cheng, R.T, Vincenzo, C., and Nevil, M. (1984). "Eulerian-Lagrangian Solution of the Convection-Dispersion Equation in Natural Coordinates," *Water Resour. Res.*, 20(7), 944-952.
5. Hoffmann, K.A. (1989). *Computational Fluid Dynamics for Engineers*, Publication of Engr. Education System, Austin, Texas.
6. Holly, F.M, and Preissmann, A. (1977). "Accurate Calculation of Transport in Two Dimensions," ASCE, *J. Hyd. Div.*, 103(11), 1259-1277.
7. Toda, K., and Holly, F.M. (1986). "Hybrid Numerical Method for Linear Advection-Diffusion," Iowa Institute of Hydraulic Research, The University of Iowa, Iowa City, Iowa.

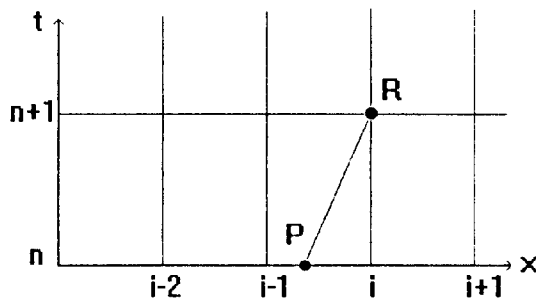


Fig. 1 Finite Grid in 1 - D

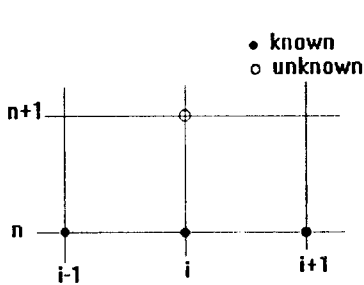


Fig. 2 Grid Points for the MacCormack Scheme

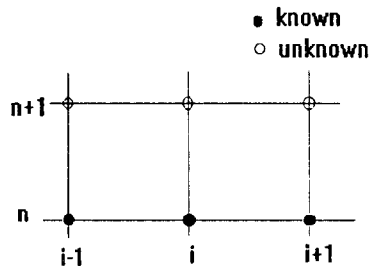


Fig. 3 Grid Points for the Stone & Brian Scheme

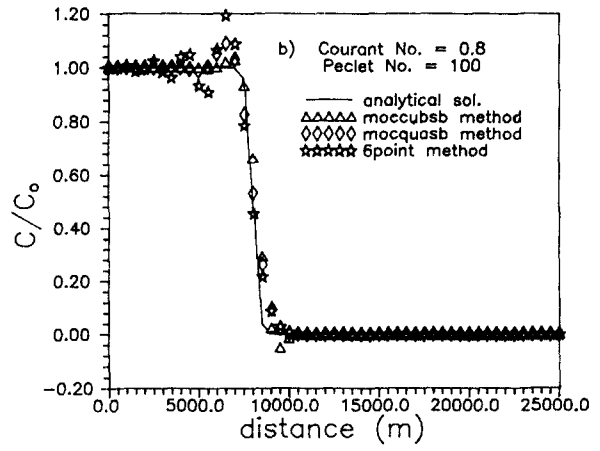
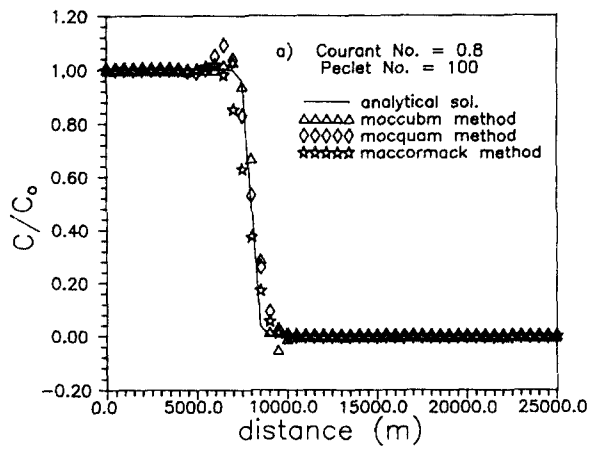


Fig. 4 Concentration Profile Of Each Methods

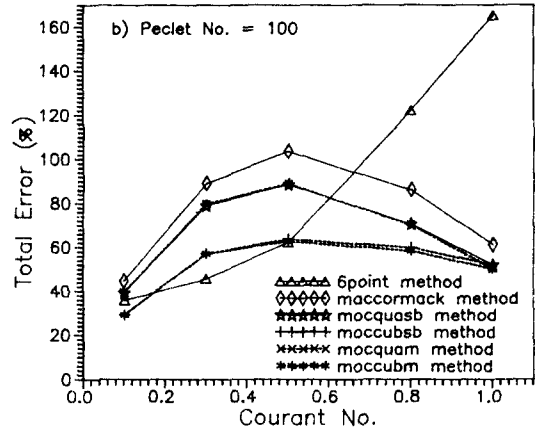
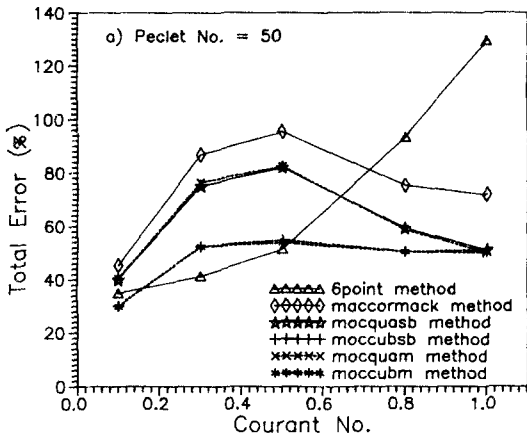


Fig. 5 Comparison of Total Error

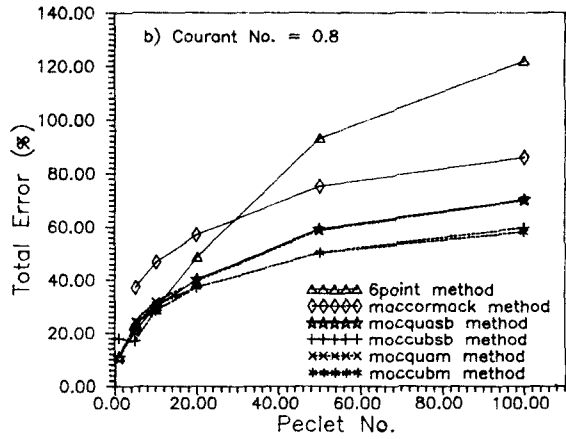
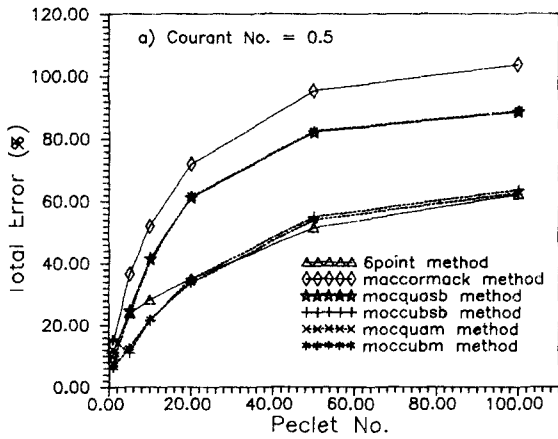


Fig. 6 Comparison of Total Error