Random Walk 모형에 의한 확산해의 민감도 분석

이종섭 · 김호전**

1. 서 론

하천이나 호소 또는 해양에서 물질수송을 해석하는 기본적 방법으로서는 Eulerian 방법과 Lagrangian 방법을 들 수 있다. Eulerian 방법은 물질수송에 관한 확산방정식을 유한차분법 또는 유한요소법에 의하여 수치해를 구하는 방법으로서 가장 널리 이용되고 있는 방법이다. Lagrangian 방법은 Lagrange 좌표계 즉, 물질좌표계에서 개개의 입자의 거동을 추적해가면서 물질수송을 해석하는 방법이다. 이 방법은 Monte Carlo 방법 또는 Random walk 방법으로 잘 알려져 있다.

일반적으로 Eulerian 해석방법이 안고있는 몇가지 문제점은 이류항의 취급, 확산항의 취급에 있어서 물리적인 확산 이외에도 수치적인 일산효과가 개입되며, 복잡한 유동조건하에서 계산수행 시 수렴 또는 발산하는 유동장에서는 음의 농도가 나타나는 경우가 발생한다.

이러한 문제점을 거의 개선할 수 있는 방법으로서 Lagrange적인 입자추적방식에 의한 Random walk 방법을 들 수 있다. 이 방법은 1950년대부터 지하수분야의 확산 및 분산해석에 적용되어 왔으며, 1981년 Prickette et al[1]에 의하여 폭 넓은 수송모델이 제시된 바 있다. 1994년 서 · 정[2] 은 2차원 Random walk 모형을 이용하여 순간점원 방출에 대한 횡확산 해석을 행하고 해석해와 비교하여 방출입자 갯수에 따른 수치해의 정확도에 대하여 논하고 모형의 유용성에 대하여 검토하였다.

본 연구에서는 Random walk 모형의 일반화를 위한 기초적 연구로서 단순화된 조건하에서 확산방정식의 해석해와 비교 · 검증을 행하고 효과적인 감쇠항의 평가방법 및 Random walk 모형의 계산결과에 영향을 미치는 파라미터에 대한 모델결과의 민감도분석에 대하여 검토하였다.

2. Random Walk 모형의 구성

일반적으로 오염물질이 passive contaminant인 경우 우선 유동장의 계산이 요구된다. 유동장의 계산에 있어서, 조류 및 취송류장에 대한 2차원 해수유동모델로서 1986년 Falconer[3]에 의한 MODEL DIVAST등을 이용할 수 있다.

2.1 입자추적 알고리즘

흐름장에 놓여진 입자가 passive contaminant인 경우 시간 $t+\Delta t$에서 입자의 새로운 위치는 표류속도벡터 $\vec{U}$와 분산속도성분 $\vec{u}'$에 의하여 다음과 같이 구해진다.

$$\vec{X}(t+\Delta t)=\vec{X}(t)+\vec{U}\cdot\Delta t+\vec{u}'\cdot\Delta t \tag{1}$$

식 (1)에서 우변 제 3항은 분산에 의하여 입자가 이동하는 것을 나타내는 것으로서 확률과정론적으로 다음과 같이 나타낼 수 있다.

---

* 정회원 · 부산수산대학교 공과대학 토목공학과, 부교수
** 부산수산대학교 해양과학대학 해양공학과, 석사과정

$$\vec{u}' \cdot \Delta t = R \cdot \sigma, \quad \sigma = \sqrt{2\alpha_L \mid u'(\vec{X}(t), t) \mid \cdot \Delta t} \tag{2}$$

여기서, R은 평균치 0, 표준편차 1인 정규분포로서 식 (2)는 이류항을 무시한 확산방정식의 기본해와 일치한다.

2.2 분산항의 평가 방법

분산은 난류확산에 있어서 연직방향의 속도분포로 인한 겉보기 확산을 고려한 것으로서 Elder[4]는 2차원 개수로에서 식 (3)과 같이 구하였다.

$$D_L = 5.93\, h\, U_* \tag{3}$$

여기서, h는 수심, U_*는 마찰속도이며 일반적으로 횡분산계수 D_T는 종분산계수 D_L의 약 1/4 정도의 값을 취한다.

식 (2)에서 분산에 의한 속도성분 $\vec{u}'$는 다음식으로부터 구할 수 있다.

$$u_L' = R_1 (2D_L / \Delta t)^{1/2}, \quad u_T' = R_2 (2D_T / \Delta t)^{1/2} \tag{4}$$

여기서, R_1과 R_2는 평균치 0, 표준편차 1의 정규분포를 갖는 난수이고, 분산속도의 x 및 y 방향의 성분은 다음과 같이 된다.

$$u' = u_L' \cos\theta - u_T' \sin\theta, \quad v' = u_L' \sin\theta + u_T' \cos\theta \tag{5}$$

2.3 감쇠항의 평가방법

Lagrange적인 입자추적모형에서 격자점 (i , j) 에서 농도 C_{ij} 는 다음식과 같다.

$$C_{ij}(t) = \frac{M}{N} \frac{n_{ij}(t)}{h_{ij} \cdot \Delta x \cdot \Delta y} \tag{6}$$

여기서, M : 오염물질의 총 질량, N : 투입된 총 입자수, n_{ij} : 격자 (i , j)내에 있는 입자수 h_{ij} : 수심, Δx , Δy : x , y 방향의 격자간격, $m = M/N$: 1개 입자당 오염물질의 질량이다.

이들 물질의 농도 C에 관한 식은 입자의 침강속도나 감쇠계수 λ에 의하여 식과 그해는 다음과 같이 지수적인 감쇠로 나타난다.

$$\frac{dC}{dt} = -\lambda C, \quad C(t) = C_0 \exp(-\lambda t) = C_0 \exp(-t/t_0) \tag{7}$$

여기서, C_0는 $t=0$에서의 초기농도이고, t_0는 $1/\lambda$로서 농도가 초기농도보다 $e^{-1}(=0.386)$배로 감소하는데 걸리는 지수배 반감기 (e-folding time) 또는 체류시간이다.

식 (7)는 개개입자의 질량 m의 감쇠로서 나타낼 수 있다.

$$m(t+\Delta t) = m_0 \exp(-\lambda \cdot \Delta t) = m_0 \exp(-t/t_0) \tag{8}$$

따라서, 시간에 따른 농도감쇠는 식 (8)에 의하여 개개입자의 감쇠 질량 m을 구하여 식 (6)으로부터 농도 $C(t)$를 구할 수 있다.

3. 1차원 및 2차원 이류 · 확산에 대한 검증

3.1 순간 점원 방출에 대한 해석해

1차원 이류 · 확산에 관한 기본방정식과 해석해는 다음과 같다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad C(x,t) = \frac{C_0}{\sqrt{4\pi K_x t}} \exp\left\{ -\frac{(x-ut)^2}{4K_x t} \right\} \tag{9}$$

2차원 이류·확산에 관한 기본방정식과 해석해는 다음과 같다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} = K_x\frac{\partial^2 x}{\partial x^2} + K_y\frac{\partial^2 y}{\partial y^2} \tag{10.a}$$

$$C(x,y,t) = \frac{C_0}{4\pi t\sqrt{D_L \cdot D_T}} \exp\left[-\frac{1}{4t}\left(\frac{(x-ut)^2}{D_L} + \frac{(y-vt)^2}{D_T} \right) \right] \tag{10.b}$$

여기서, C는 농도, u는 이류속도, K_x, K_y는 확산계수, $C_0 = M/h$로서 M은 투하된 물질의 총질량, h는 수심이다.

3.2 결과 및 고찰

본 모형에서는 이류속도 u에 의한 입자의 이동과 분산에 의한 속도성분인 u_L만 고려하면 된다. 여기서는 해석해와의 비교를 위하여 가장 단순한 경우인 일정수심의 정상·등류상태하에서 분산계수 $D_L = 1m^2/s$, 격자간격 $\Delta x = 10m$ 로 주고 계산시간간격 Δt, 방출입자의 갯수 N_0등을 변화시켜가면서 계산을 수행하였다.

Δt에 대한 모델의 민감도를 파악하기 위해 방출입자의 갯수가 1000개인 경우 Δt를 0.125초, 2.0초, 50.0초, 200.0초로 각각 바꾸어 가면서 계산하였으며 그 계산 결과 모델에 의한 농도분포는 불규칙한 변동성분을 포함하고 있으나 해석해와 비슷한 양상을 띠었다. 그러나 모델의 계산시간간격 Δt에는 커다란 영향을 받지 않았다.

입자갯수에 따른 모델결과를 평가하기 위하여 방출입자갯수 N_0가 각각 100, 1,000, 10,000개인 경우에 대하여 Δt를 일정하게 하고 계산을 행한 결과는 그림 1와 같다. 방출입자의 갯수 N_0가 100개인 경우 모델결과의 진동폭이 매우 커지는 것으로 나타났으며, N_0가 1,000개인 경우 (그림 1의 CASE 2b) 변동폭이 어느정도 적어지며, N_0가 10,000개 이상인 경우 해석해와 거의 일치하는 것으로 나타났다.

한편, 1차원 이류·확산에 대한 모델의 검증에 있어서 입자의 갯수 N_0는 모두 10,000개로 하였으며 Courant 수를 0.5, 1.0, 5.0으로 변화시켜 가면서 검증한 결과 Random walk모형에 의한 농도분포의 계산결과는 Courant 수에 관계없이 해석해와 매우 잘 일치하였다. 따라서, Random walk 모형에 의한 수치해는 계산시간간격 Δt에는 커다란 영향을 받지 않으나, 수치해의 진동을 줄이기 위해서는 단위길이당 방출입자수를 1,000 ea/m 이상으로 함이 바람직하다.

또한 순간점원방출에 의한 2차원 이류·확산에 대한 모델의 검증을 행하기 위해 계산조건을 Courant 수가 0인 경우와 Courant 수가 6인 경우 계산을 행한결과 모델결과는 해석해와 잘 일치하였으며, 특히 Courant 수가 6정도로서 큰 경우에도 모델결과는 해석해와 잘 일치하는 안정된 결과를 나타내었다.

4. 감쇠항에 대한 검증

Random walk 모형에서 입자제거방식에 의한 감쇠항의 평가를 검증하기 위하여 해석해인 식(7)과 모델결과를 비교하였다. 계산조건은 표 1에서와 같이 초기방출입자의 갯수 N_0와 감쇠율 λ를 일정하게 하고 Δt를 각각 5초, 10초 및 100초로 바꾸에 가면서 해석해와 비교하였다.

표 1. 감쇠항의 계산조건

Parameter	λ	N_0 (ea)	C_0 (ppm)	Δt(s)
CASE 4a CASE 4b CASE 4c	0.001	1,000	1,000	5 10 100

4.1 결과 및 고찰

감쇠계수 λ가 0.001인 경우 Δt에 따른 입자제거 판단의 기준치 $\lambda \cdot \Delta t$는 각각 0.005, 0.01 및 0.1이 된다. 그림 2는 해석해와 모델에 의한 계산결과를 비교하여 나타낸 것으로서 $\lambda \cdot \Delta t$가 0.01 이하인 CASE 4a 와 CASE 4b의 경우는 해석해와 거의 일치하고 있음을 볼 수 있다. 따라서, $\lambda \cdot \Delta t$값이 0.01이 되도록 계산시간간격 Δt를 결정하면 좋을 것으로 판단된다.

5 연속점원방출에 대한 검증

5.1 연속점원 방출에 의한 해석해

2차원 이류·확산의 기본방정식인 식 (10.a)에서 v=0인 경우의 해를 시간 t=0부터 ∞까지 적분하여 구한 정상상태의 해는 다음과 같다[5].

$$C(x,y)=\frac{C_0}{2\sqrt{\pi K u r}}\exp\left\{\frac{u}{2K}(x-r)^2\right\},\quad K=\frac{\sigma^2}{2t}=D_L \tag{11}$$

여기서, $r=\sqrt{x^2+y^2}$ 으로서 방출점으로부터 임의지점까지의 거리, K는 확산계수이다.

한편, y=0인 중심축상에서의 농도는 식 (12)과 같다.

$$C(x)=\frac{C_0}{2\sqrt{\pi K u x}} \tag{12}$$

5.2 계산조건

연속점원 방출에 있어서 해석해와 본 모형에 의한 계산결과의 비교를 위하여 계산조건을 표 2와 같이 주었다.

표 2. 연속점원방출의 계산조건

Parameter	$D_L(m^2/s)$	u, v(m/s)	Δs(m)	Δt(s)	Cr. No	Diff. No	$N_0/\Delta s^2(ea/m^2)$
CASE 6a	1	u=0.1 v=0	10	50	0.5	1.0	10
CASE 6b				100	1.0	2.0	
CASE 6c				300	3.0	6.0	

5.3 계산결과 및 고찰

해석해와의 비교를 위하여 한방향으로만 유속 u=0.1m/sec가 존재하는 단순한 경우에 대하여 해석해와의 비교를 위하여 계산시간간격 Δt를 계산결과와 해석해를 비교하여 평면적인 농도분포를 나타낸 것은 그림 3와 같으며 해석해와 수치계산결과가 거의 일치하고 있음을 볼 수 있다. 한편, Courant 수가 3.0인 CASE 6c의 경우에는 Courant 수가 작은 경우보다 농도값의 변동이 크게 나타남을 볼 수 있다.

그림 4은 중심축을 따른 농도변화(C/C_0)의 양상을 나타낸다.

6. 요약 및 결론

Lagrange적인 입자추적방법에 의한 Random-walk 모형의 알고리즘을 개발하고 모델의 적용 및 신뢰성을 검증하기 위하여 해석해와 비교·검증를 행하였다. 또한 모델결과에 영향을 미치는 파라미터에 대한 민감도 분석을 행하였다. 이상의 결과를 요약하면 다음과 같다.

1) Random walk 모형에 의한 1차원 또는 2차원 확산의 수치해는 이류속도, 격자간격 및 계산시간간격에 의한 Courant 수에는 거의 영향을 받지 않으나, 수치해의 시·공간적인 변동은 방출입자의 갯수에 크게 영향을 받는다.

2) 입자제거 방식에 의한 감쇠항의 평가는 매우 효과적이며, 입자제거 판단의 기준치는 $\lambda \cdot \Delta t$의 값이 0.01이하가 되도록 하면 충분하다.

3) 연속점원방출의 경우 Random walk 모형에 의한 수치해는 Courant 수에 관계없이 해석해와 잘 일치하였다. 그러나, Courant 수가 작을수록 수치해의 변동폭이 작아진다.

이상의 결과로 부터 본 모델은 물질의 이류·확산, 침강(감쇠) 및 생성등을 고려한 물질수송현상을 파악하는데 있어서 Eulerian해석의 문제점을 극복할 수 있는 매우 강력한 수단이 될 것으로 판단된다.

참고문헌

1. Prickette, T.A., Naymik, T.G. and Lonnquist, C.G., "A Random Walk Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality Evaluation", Illinois State Water Survey, Bulletin 65, 1981, 103p.
2. 서일원·정태성, "2차원 Random-Walk 模型을 이용한 횡확산해석", 제36회 수공한 연구발표회 논문집, 한국수문학회, 1994, pp. 191-198.
3. Falconer, R.A., "A Two-dimensional Mathematical Model Study of the Nitrate Levels in an Inland Natural Basin", Proc. Inter. Conf. Water Quality Modellings in the Inland Natural Environ., BHRA, Fluid Enging, Bournmouth, Paper J1, 1986, pp. 325-344.
4. Elder, J.W., "The Dispersion of Marked Fluid in Turbulent Shear Flow", J. Fluid Mech., Vol. 5, 1959, pp. 544-560.
5. 矢野雄幸·佐藤弘三, "擴散方程式入門", 公害研究對策 センター, 1978, pp. 29-31.

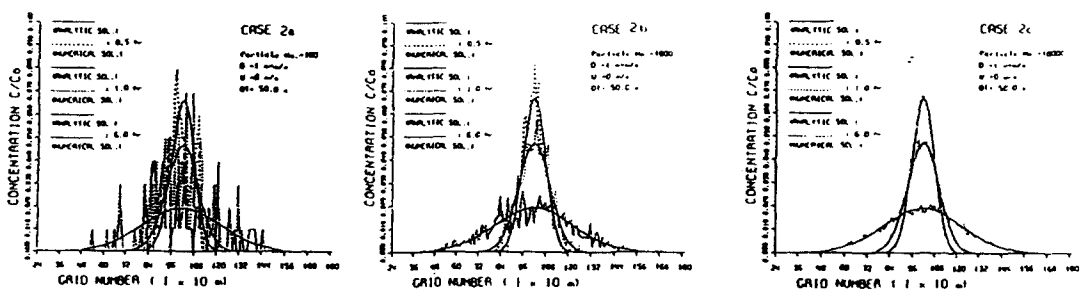

그림 1. 1차원 pure diffusion의 경우 방출입자의 갯수에 따른 모델결과와 해석해와의 비교.

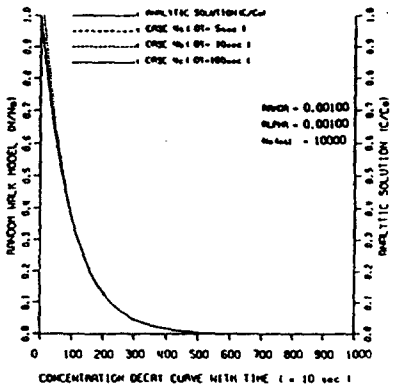

그림 2. 입자제거방식에 의한 모델결과와 해석해의 비교.

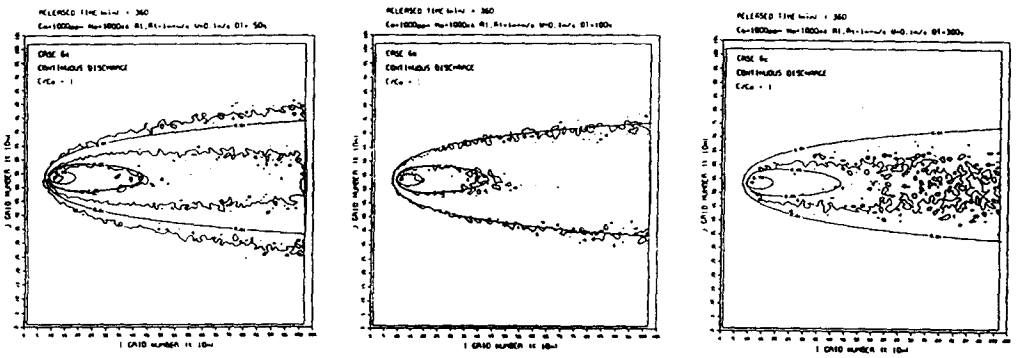

그림 3. 2차원 연속점원방출의 경우 Courant 수에 따른 모델결과와 해석해의 비교.

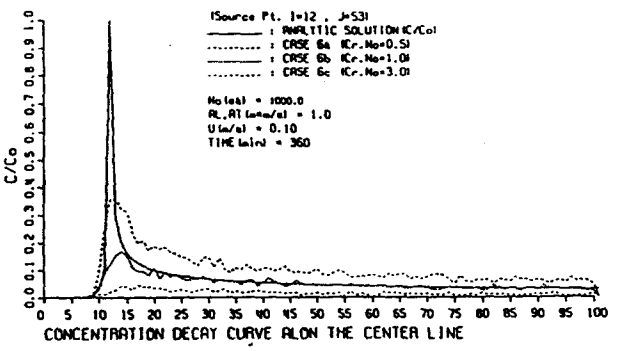

그림 4. 그림 3에서 중심축을 따른 농도변화의 비교.