한국전산구조공학회
1998년도 봄학술발표회 논문집

Parabolic 방정식의 효율적인 시간해석알고리즘에 대한 비교연구

A Comparative Study of Efficient Transient Analysis Algorithm for Parabolic Equations

최창근* 이은진** 유원진**
Choi, Chang-Koon Lee, Eun-Jin Yu, Won-Jin

ABSTRACT

A finite element analysis for physical phenomenon which are governed by parabolic equation, has some inefficiencies caused by much computational time and large storage space. In this paper, a comparative study is performed to suggest the best efficient transient analysis algorithms for parabolic equations. First, the general finite element analysis techniques are summarized in views of formulation procedures, treatments of convection terms, and time stepping methods. Results of several combinations applied to one dimensional convection-diffusion equation and Burger equation are represented and compared using some criteria such as accuracy, stability, and computational time. Through the results, some guidelines to select a algorithm for solving parabolic equations are proposed for diffusion dominant and convection dominant cases. Finally applicability of two dimensional extension of the result is also discussed.

1. 서 론

최근에 많은 수치해석방법들 중에서도 복잡한 기하형상과 경계조건을 다루기에 용이하고 수학적 기반이 확고한 유한요소법을 이용하여 여러 물리현상의 지배방정식인 포물선형(Parabolic)방정식에 대한 수치해석이 활발히 진행되고 있다. 그러나 해석대상의 자유도가 증가할수록 지나친 계산시간과 과도한 저장공간으로 인해서 다른 수치해석방법들에 비해 매우 비효율적인 방법이 된다는 단점이 발생한다. 이에 대해서 해의 정확도를 유지하면서 안정성을 보장하고, 빠른 계산속도를 가지는 효율적인 시간해석알고리즘에 대한 연구의 필요성이 대두되고 있다. 이러한 필요성은 바람의 거동에 대한 지배방정식인 비압축성 Navier-Stokes 방정식의 수치해석에서 더욱 절실하나 가장 간단하게 적용할 수 있는 이차원에서 해석한다 하더라도 비압축성(Incompressibility)이라는 운동학적 성질(kinematic property)을 어떻게 다루냐에 따라서 기본 정식화가 틀려지고, 해의 진동(oscillation)을 방지하기 위해서 상류화(Upwind)방법이 적용되는 등 매우 복잡한 특성을 가지고 있다. 따라서 비교연구를 위한 예제 해석시 계산시간이 많이 걸리고, 시간 해석 알고리즘의 변화에 따른 효과도 확실히 알기 힘들기 때문에 본 연구에서는 같은 포물선형방정식인 일차원의 선형 대류확산(Convection-Diffusion)방정식, 비선형 Burger 방정식에 대해서 예제해석을 수행함으로써 각각의 해석기법에 따른 시간해석알고리즘의 효율성을 파악하고자 한다.

비정상(Unsteady)문제의 해석을 위해 사용되는 시간해석알고리즘은 시간 Stepping 방법과 대류항의 처리방법의 조합으로 구성된다. 비정상문제를 해결하기 위해 다양한 종류의 시간 Stepping 기법들이 도입되어 사용되고 있지만, 시간해석의 효율성을 평가할 수 있는 정확한 거동특성을 나타내는 것은 대부분 일차원의 선형문제들에 대해서이다. 대류항에 관련된 비선형문제들과 조합된 경우는 명확한 특성이 밝혀지지 않았다. 그러므로 본 연구에서는 각각의 조합된 방법들에 의해 만들어진 시간해석알고리즘이 어떠한 안정성, 수렴속도, 제한조건과 그 외의 정성적인 특성들을 보일 것인가에 대해서 다양한 예제 해석을 통한 비교연구를 수행하여 가장 효율적인 시간해석알고리즘을 제안하고자 한다.

* 한국과학기술원 토목공학과 교수
** 한국과학기술원 토목공학과 박사과정

2. 시간해석알고리즘의 구분

본 연구의 대상인 포물선형문제의 범주를 나타내기 위해서 일반적인 이차의 일반적인 편미분식을 나타내면 다음과 같다.

$$A(t,x)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}+2B(t,x)\frac{\partial^2 u}{\partial t\partial x}+C(t,x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\Phi(t,x,u,\frac{u}{t},\frac{u}{x}) \qquad (1)$$

여기서 $A(t,x)\neq 0$ 이고 수학적인 구조를 기준으로 다음과 같이 구분된다.[1]

$$B^2-AC\begin{cases}<0 & \text{타원형(Elliptic)}\\ =0 & \text{포물선형(Parabolic)}\\ >0 & \text{쌍곡선형(Hyperbolic)}\end{cases} \qquad (2)$$

실제 물리현상에 있어 포물선형문제는 시간에 대해서 일차, 공간에 대해서 이차의 미분치를 갖고, 쌍곡선형문제는 시간에 대해서 이차, 공간에 대해서도 이차의 미분치를 갖는 특성이 있다. 본 연구의 대상이 되는 포물선형문제의 대표적인 형태인 대류확산방정식과 Burger 방정식은 다음과 같다.

표 1 지배방정식

구분	선형 대류확산방정식	비선형 Burger 방정식
대상 물리현상	열전달현상	난류(Turbulent Flow)나 Shock 현상
미분방정식	$\varphi_{i,t}+u_i\varphi_{,i}=(k\varphi_{,i})_{,i}+\chi_i$	$u_{i,t}+u_ju_{i,j}=(ku_{,i})_{,j}+\chi_i$
부연설명	φ: 온도, u: 유체의 대류속도, k: 확산계수, χ: 하중항	u: 유체의 속도, k: 확산계수, χ: 하중항

여기서 $u_i\varphi_{,i}, u_ju_{i,j}$는 유체의 운동에 의해 전달되는 물리량을 나타내는 대류항이며 결과적으로 (선형 또는 비선형) 비대칭인 행렬로 나타내진다. $(k\varphi_{,i})_{,i}$, $(ku_{,i})_{,j}$는 확산에 의해 전달되는 물리량을 나타내는 확산항이며 선형 대칭 행렬로 나타내진다. 시간해석알고리즘의 구분은 비선형항의 처리방법과 시간 Stepping 방법에 의해서 이루어진다.

비선형항의 처리방법

일차원(x 방향)의 비선형 Burger 방정식을 다음의 식(3)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}=k\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad (3)$$

이 때 대류항이 지닌 비선형성을 어떻게 가정하여 다루느냐에 따라서 식의 구성이 바뀌고 해의 수렴특성 역시 바뀌게 된다. 대략 다음의 세가지 방법으로 적용될 수 있다.[2]

(1) Fully Nonlinear Iteration : 이 방법은 각 시간단계에서 공간상의 비선형성을 고려하기 위한 반복해석을 하는 것이다. 이것은 일종의 Newton-Raphson 방법이 된다. 이 방법은 해의 정확도면에서는 가장 좋은 결과를 보이지만 각 시간단계에서 반복계산을 수행해야 하므로 계산시간이 많이 필요하게 된다.

(2) Semi Implicit Linearlization : 이 방법은 비선형의 대류항을 각 시간간격에 대해서 일정하다고 가정하여 선형화시키는 것이다. 이것을 수식으로 나타내면 다음과 같다.

$$u_{n+1}\frac{\partial u_{n+1}}{\partial x}\longrightarrow u_n\frac{\partial u_{n+1}}{\partial x} \qquad (4)$$

위의 (1)의 방법역시 각 반복계산 상에서 각 구간별로 선형화를 가정하고 있기 때문에 그 반복회수를 1 이라고 생각하면 (2)의 방법과 동일하다.

(3) Fully Explicit Treatment : 이 방법은 대류항의 비선형성을 Fully Explicit 하게 처리하는 것이다. 이것을 수식으로 나타내면 다음과 같다.

$$u_{n+1}\frac{\partial u_{n+1}}{\partial x} \longrightarrow u_n \frac{\partial u_n}{\partial x} \tag{5}$$

그리고 이 대류항을 우측항의 하중항처럼 다루게 된다. 그렇게 되면 비대칭항이 우측항으로 이동되고 좌측항은 대칭항만 남게 되므로 행렬식을 푸는 과정에서 Full Bandwidth 대신 Half Bandwidth 를 사용하게 되어 계산시간을 줄일 수 있다. 그러나 대류항을 Explicit 하게 사용했을 경우, 상대적으로 작은 시간간격이 필요하기 때문에 계산시간의 손해를 볼 여지가 있으며, 정확도가 손실될 수 있다.

시간 Stepping 방법

비정상문제를 풀기 위해서는 시간 Stepping 방법의 적용이 필요하다. 현재까지 포물선형문제에 대해서 많은 시간 Stepping 방법들이 제안되어 왔으나 본 연구에서는 문헌 조사[3-6]를 통해 가장 좋은 거동을 나타내는 방법인 One-step α방법을 채택하였다. α값에 따른 방법의 구분을 표 2 에서 정리하였다.

표 2 One-step α 방법의 구분

α	방법
0	Forward Euler
1/2	Crank-Nicolson
1	Backward Euler

결과평가의 기준

비선형항 처리방법과 시간 Stepping 방법의 조합에 의해 구성된 시간해석알고리즘에 대한 예제 해석 후, 그 알고리즘의 효율성을 평가하기 위해 해의 오차, 안정성 및 계산시간을 기준으로 한다.

(1) 오차평가(Error Estimate)
본 연구에서는 해의 정확도에 대한 reference 로 오차평가를 하게 된다. 오차란 정확해와 수치법에 의한 근사해와의 차이다. 본 연구에서는 시간해석알고리즘을 대상으로 하기 때문에 시간 간격(=Δt)을 작게 하면 정확해에 접근하게 되는 특성을 보이므로, 시간 간격에 대한 척도로서 오차를 평가하게 된다. 본 연구에서는 Zienkiewicz 및 Zhu[7]가 제안한 후처리오차평가법을 이용하여 해의 정확도를 평가하였다. 오차평가의 대상은 해석대상문제의 기본 물리량의 공간미분항이다.

(2) 안정성(Stability)
안정성은 수치해의 시간에 대한 Boundedness 의 평가로부터 구한다. 포물선방정식의 수치해석에 대한 기존연구에서는 선형인 경우만 일반적인 조건과 수식들을 제시하고 있고, 물리현상의 중요한 특성인 비선형 부분이나 적용된 부분에서는 매우 한정된 경우에 있어서만 제안하고 있다. 안정성 조건은 일반적으로 확산계수와 Courant 수에 의존하는 특성을 보인다. 본 연구에서는 여러 가지의 확산계수에 대해 Courant 수에 따른 수치해석을 수행하여, 대략적인 안정성 조건을 가늠할 수 있는 해의 수렴특성을 제시하였다.

(3) 계산시간(Computational Time)
일반적으로 시간해석알고리즘이 해석을 수행하면서 걸리는 계산시간은 CPU 시간으로 평가된다. 그러나 본 연구에서는 실제 행렬식의 구성이나 형식 등의 특성에 대한 고려를 할 수 있도록 예제 해석시 수행하는 프로그램 코드의 총 Statement 수를 계산시간의 평가방법으로 삼았다. 이것은 한 개의 Statement 는 모두 같은 시간으로 해석된다는 가정하에 적용하였다. 대략적인 프로그램의 순서도를 보면 그림 1 와 같다. 계산시간의 변화요인으로는 시간 간격의 크기, Stiffness Matrix 재구성의 유무, Half / Full Bandwidth 사용 유무, Nonlinear term 의 Iteration 유무, Solver 의 사용유무를 들 수 있고 그 외에도 여러가지 요인들(Element, Node 의 총수, Element 내 Node 수, 적분차수 등)이 있다.

3. 예제적용 및 해석

일차원의 선형 대류확산방정식과 비선형 Burger 방정식에 대하여 6 가지 알고리즘으로 구분하여 해석을 수행하였다.(표 3).

표 3 시간해석알고리즘의 구분

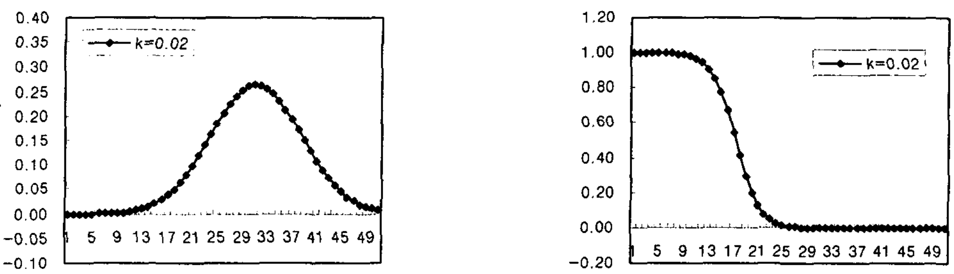
알고리즘 번호	선형 대류확산방정식		비선형 Burger 방정식	
	대류항의 처리	시간 Stepping 방법	비선형항의 처리	시간 Stepping 방법
1	좌측항	α =1/2	Fully Nonlinear Iteration	α =1/2
2		α =1		α =1/2, Lumped mass 사용
3	우측항	α =1/2	Semi Implicit Linearlization	α =1/2
4		α =1		α =1
5		α =0, Consistent mass 사용	Fully Explicit Treatment	α =1/2
6		α =0, Lumped mass 사용		α =1

예제해석에 사용한 선형 대류확산방정식과 비선형 Burger 방정식은 표 4 와 같이 참고문헌[8-9]에서 발췌하였다.

표 4 적용예제

구분	선형 대류확산방정식	비선형 Burger 방정식
참고문헌	[8]에서 참조	[9]에서 참조
범 위	$0 \le x \le 1$	$0 \le x \le 1$
경계조건	$\Phi(0,t)=0,\ \dot{\Phi}(1,t)=0$	$v(0,t)=1,\ v(1,t)=0$
초기조건	$\Phi(x,0)=\exp(-(x-x_0)^2/2\sigma^2)$	$v(x,0)=0$
수 치	u=1.0, x_0=0.1, σ=0.04, t=0.5 k=0.001, 0.02, 0.1, 0.5	t=0.6 k=0.004, 0.02

확산계수 k 를 변화시켜 가면서 예제해석을 수행하였다. 각 알고리즘의 효율성을 평가하는 데에는 모든 예제해석의 결과가 고려되었으나, 지면의 한계로 모든 결과를 그래프로 나타내지는 않았으며 각 알고리즘의 수렴특성을 제시하기 위해 k=0.02 인 경우에 한하여 예제 해석의 결과를 그래프(그림 2,3)로 나타내었다. 그림 1 에서는 예제에 대하여 Δt 를 매우 작게 하여 해석한 결과인 정확해의 근사값을 제시하였다.



(a) 선형 대류확산방정식 (b) 비선형 Burger 방정식

그림 1 정확해의 근사값 (k=0.02)

그림 1(a)에서 수직축은 변수 Φ의 크기를, 그림 1(b)에서 수직축은 변수 v의 크기를 나타내며 수평축은 절점번호를 나타낸다. 본 연구에서 모든 일차원해석에 있어서 절점 1 은 x=0, 절점 51 은 x=1 을 나타내며 이는 0 과 1 사이에 51 개의 절점으로 모델링되어 있슴을 뜻한다.

각 알고리즘에 대한 예제 해석의 결과는 그림 2,3 에 제시되어 있으며, Cr=5,2.5,1,0.5,0.25,0.1,0.05 의 7 개의 시간간격으로 나타내었다. Cr($= u\Delta t / h$)은 Courant 수로 시간 간격에 관련된 특성을 나타내는 변수(Parameter)이다. 그러므로 큰 Cr 에서부터 작은 Cr 까지 해석한 결과를 한꺼번에 나타냄으로써 시간간격을 줄이면서 해가 정확해에 수렴해가는 특성을 살펴볼 수 있다. 시간 간격의 제한이 있는 경우, 대략적으로 안정하다고 할 수 있는 Cr 에서부터 결과를 기재하였다. 경우에 따라서 Cr=0.05 보다 작은 값에서 안정하게 된다면 그 특성을 알 수 있을 정도의 결과를 선택해서 제시하였다. 이와 같은 방법으로 시간간격을 작게 하면서 해가 정확해에 접근해가는 수렴특성과 안정성에 의한 시간제한조건에 대해서 대략적으로 살펴볼 수 있다.

예제 해석의 결과로 주어진 k 값에 대하여, 각 알고리즘이 비슷한 오차값을 갖는 각각의 Cr 을 구하여 계산시간을 구한 내용이 표 5과 표 6에 정리되어 있으며, 이러한 내용을 바탕으로 표 7 에서는 각 알고리즘의 효율성이 평가되어 있다.

표 5 각 알고리즘의 결과비교 1 (선형 대류확산방정식)

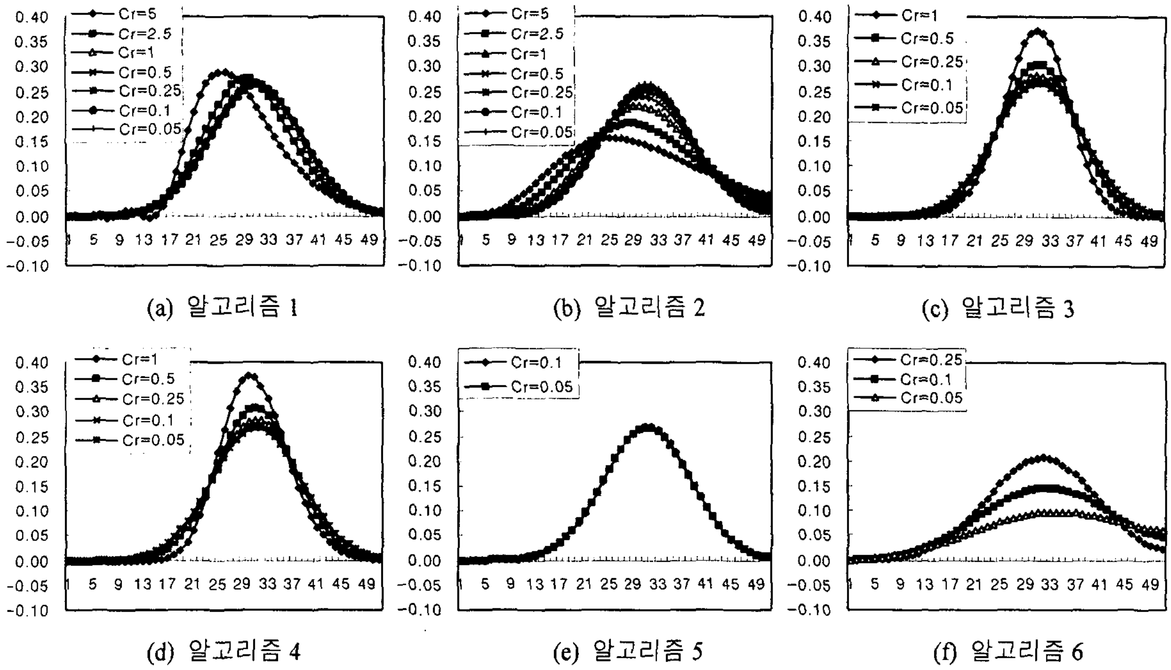
k	No.	오차	Cr	계산시간	k	No.	오차	Cr	계산시간
0.001	1	0.1407	5	24,373	0.02	1	0.0528	2.5	40428
	2	0.1185	0.1	811,070		2	0.0453	0.5	158,870
	3	0.1536	0.05	1,349,700		3	0.0554	0.5	142,370
	4	0.1536	0.05	1,349,700		4	0.0556	0.5	142,370
	5	0.1535	0.05	1,349,700		5	0.0491	0.1	678,970
	6	0.1595	0.65	78,293		6	0.0459	0.33	146,250
0.1	1	0.0312	1	88593	0.5	1	0.0114	0.25	329420
	2	0.0297	1	88593		2	0.0112	0.5	168870
	3	0.0332	1	75291		3	0.0114	0.25	276520
	4	0.0357	2.5	35046		4	0.0113	1	75291
	5	0.0306	0.033	2,040,800		5	0.0114	0.006	11187000
	6	0.0200	0.066	698,370		6	0.0104	0.013	3512100

표 6 각 알고리즘의 결과비교 2 (비선형 Burger 방정식)

k	No.	오차	Cr	계산시간	k	No.	오차	Cr	계산시간
0.004	1	0.3237	1	535,070	0.02	1	0.06784	2.5	218,960
	2	0.3290	0.1	4,631,000		2	0.06683	0.5	932,770
	3	0.3238	1	201,520		3	0.06719	1	201,520
	4	0.3209	0.05	3,872,300		4	0.06517	0.25	781,120
	5	0.3362	0.05	3,608,200		5	0.06757	0.1	1,808,200
	6	0.3363	0.05	3,608,200		6	0.06758	0.1	1,808,200

표 7 각 알고리즘의 효율성 평가

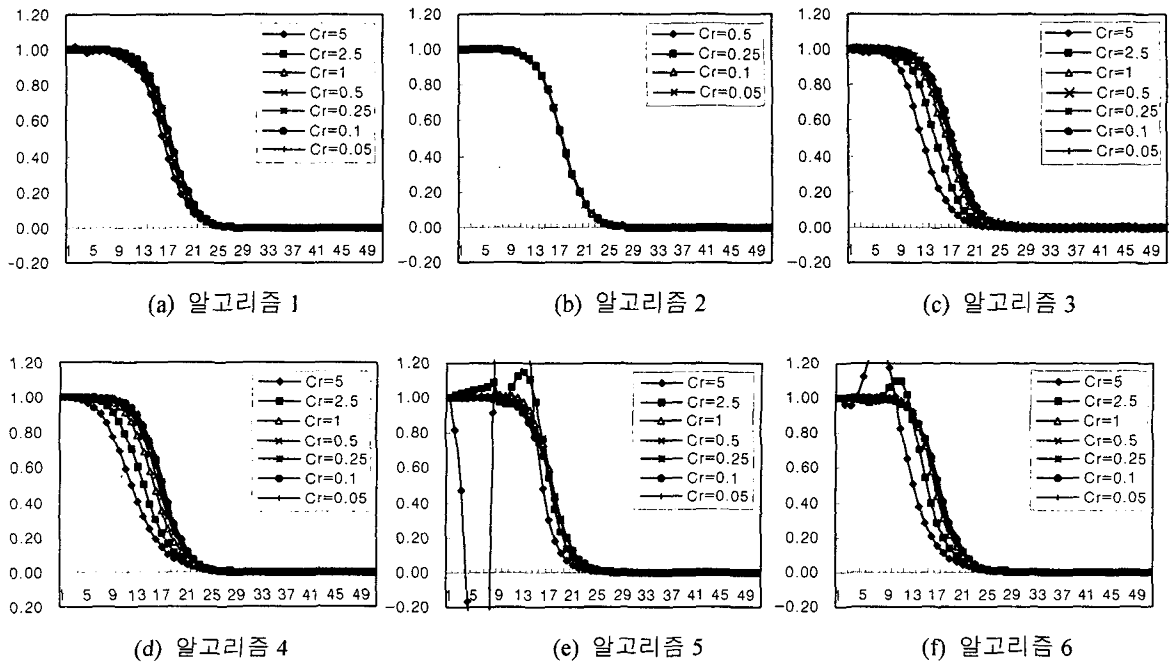
효율성(선형 대류확산방정식)				효율성(비선형 Burger 방정식)			
No.	대류가 지배 (k가 작다)	확산이 지배 (k가 크다)	자유도 증가시	No.	대류가 지배 (k가 작다)	확산이 지배 (k가 크다)	자유도 증가시
1	A	B	C	1	A	C	C
2	C	B	C	2	C	C	A
3	C	B	B	3	A	B	B
4	C	A	B	4	C	B	B
5	C	C	A	5	C	A	A
6	B	C	A	6	C	A	A



(a) 알고리즘 1 (b) 알고리즘 2 (c) 알고리즘 3

(d) 알고리즘 4 (e) 알고리즘 5 (f) 알고리즘 6

그림 2 선형 대류확산방정식의 각 알고리즘의 수렴특성(k=0.02, t=0.5): 그림 2(a)~2(f)는 각각의 알고리즘이 Cr 을 작게 할수록 정확해에 접근해가는 수렴특성과 안정성에 의한 시간제한을 나타냄.



(a) 알고리즘 1 (b) 알고리즘 2 (c) 알고리즘 3

(d) 알고리즘 4 (e) 알고리즘 5 (f) 알고리즘 6

그림 3 비선형 Burger 방정식(k=0.02), 각 알고리즘의 수렴특성(t=0.6): 그림 3(a)~3(f)는 각각의 알고리즘이 Cr 을 작게 할수록 정확해에 접근해가는 수렴특성과 안정성에 의한 시간제한을 나타냄.

4. 결 론

본 논문은 포물선형방정식을 대상으로 비선형항의 처리방법과 시간 Stepping 방법을 달리하면서 효율적인 시간해석알고리즘을 찾기 위한 비교연구이다. 일차원의 선형 대류확산방정식, 비선형 Burger 방정식에 대한 다양한 수치해석을 통해 나온 결과를 정리하면 다음과 같다; 확산이 지배적일 때, 대류항을 Explicit 하게 하중항으로 처리하고, Backward Euler ($\alpha = 1$) 방법을 쓰는 것이 효율적이다. 대류가 지배적일 때, 대류항을 Implicit 하게 처리하되 비선형항을 처리하는 데 있어 Fully Nonlinear Iteration 보다 Semi Implicit Linearlization 방법이 효율적이다. 더불어 Crank-Nicolson ($\alpha = 1/2$) 방법을 쓰는 것이 효율적이다. 그러나 각 방법을 적용하는 데에 있어서 Bandwidth 가 커질수록, 대상 자유도가 늘어날수록, 대류항을 Implicit 하게 처리하면 계산시간이 늘어난다는 점에 주의하여야 하며, 계산시간 면에서 좋은 결과를 나타내는 Lumped mass 의 사용은 충분한 사전 검토를 필요로 한다. 추후연구과제로는 실제 이차원의 비압축성 Navier-Stoke 방정식에 대해서 다양한 정식화와 해석기법이 적용된 시간해석알고리즘에 대한 수치예제 해석이 이루어져야 할 것으로 생각된다.

참고문헌

1. D.G.Zill and M.R.Cullen, "Advanced Engineering Mathematics", PWS-KENT, 1992
2. S.Turek, "A Comparative Study of Time-Stepping Techniques for the Incompressible Navier-Stokes Equations : from Fully Implicit Non-linear Schemes to Semi-Implicit Projection Methods", *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Vol. 22, 1996, pp.987-1011
3. D.B.Duncan and D.F.Griffiths, "The Study of a Petrov-Galerkin Method for First-Order Hyperbolic Equations", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*,Vol. 45, 1984, pp.147-166
4. L.A.Khan and P.L.-F.Liu, "An Operator Splitting Algorithm for Coupled One-dimensional Advection-Diffusion-Reaction Equations", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, Vol. 127, 1995, pp.181-201
5. X.C.Zhong and G.Moretti, "Comparison of Different Integration Schemes Based on the Concept of Characteristics as Applied to the Ablated Blunt Body Problem", *Comput. Fluids*,Vol.10, 1982, pp.277-294
6. G.R.Carmichael, T.Kitada and L.K.Peters, "Application of a Galerkin Finite Elements Method to Atmospheric Transport Problems", *Comput. Fluids*, Vol. 8, 1980, pp.155-176
7. O.C.Zienkiewicz and J.Z.Zhu, "A Simple Error Estimator and Adaptive Procedure for Practical Engineering Analysis", *Int. J. Numer. Methods Eng*, Vol. 24, 1987, pp.337-357
8. P.M.Gresho and R.L.Lee, "Don't Suppress the Wiggles-They're Telling You Something", *Comput. Fluids*, Vol. 9, 1981, pp.223-253
9. J.D.Murphy and P.M.Prenter, "Higher Order Methods for Convection-Diffusion Problems", *Comput. Fluids*, Vol. 13, 1985, pp.157-176