

최적화된 집적 유한 차분법을 위한 내재적 시간전진 기법의 개발

Development of Optimized Compact Finite Difference Schemes

○ 박노성¹⁾, 김재욱²⁾, 이덕주³⁾

N.S.Park, J.W.Kim, D.J.Lee

Optimized high-order compact(OHOC) schemes were proposed, which have high spatial order of truncation and resolution to simulate the aeroacoustic problems due to unsteady compressible flows. Generally, numerical schemes are categorized explicit or implicit by time-marching method. In this research, OHOC differences which were developed with explicit time-marching method is used to have implicit formulation and the implicit OHOC differences result in block hepta-diagonal matrix. This paper presents the comparisons between the explicit and implicit OHOC schemes with a second order accuracy of time in the 1-d linear wave convection problem, and between the explicit OHOC scheme of 4th-order accuracy in time and the implicit OHOC scheme of 1st-order accuracy in time for the 1-d nonlinear wave convection problem. With these comparisons, the characteristics of implicit OHOC scheme are shown in the point of CFL number.

1. 서론

비정상(unsteady) 압축성(compressible) 유동에 의한 공력음향(aeroacoustics)을 모사하여 공력소음원을 해석하기 위해서는 고차의 정확도와 높은 해상도를 가지며, 상대적으로 계산시간을 많이 필요로 하지 않는 유한 차분법이 필수적으로 요구되는데 이러한 요구를 만족시키는 유한 차분법 중 최근에 관심의 대상이 되고 있는 집적 유한 차분법이 최적화된 수치기법(optimized high-order compact scheme : OHOC)이 개발되었는데 이 수치기법은 외재적(explicit) 형태를 가지고 있다. 일반적으로 전산유체역학 분야에서 사용되는 수치기법들은 시간전진의 방법에 따라 외재적(explicit) 방법과 내재적(implicit) 방법이 있을 수 있는데 외재적 방법은 정확한 시간 모사에 많이 사용되지만 CFL수가 작은 경우에만 가능하기 때문에 시간의 제약을 많이 받는 단점이 있고, 내재적 방법은 정상 유동과 같은 수렴 해를 모사할 때 많이 사용되고, CFL 수가 큰 경우에도 가능하여 시간의 제약을 적게 받지만 선형화된 행렬을 추가로 계산해야 하기 때문에 프로그래밍하는 알고리즘이 복잡하다 단점이 있다. 아직까지 내재적 형태로 formulation된 적이 없는 기존의 고해상도 및 고차의 정확도를 갖는 외재적 형태의 수치기법이 implicit로 정립화 되었을 때 explicit 기법을 보완할 만한 장점을 확인하기 위하여 본 연구에서는 외재적 형태를 갖는 기존의 최적화된 유한 차분법을 내재적(implicit) 형태를 갖도록 유도하고 1차원 Euler 방정식에 적용하여 외재적 형태를 갖을 때와 같은 정확도의 경우에 대하여 비교하였다. 기존의 OHOC 차분법이 시간에 대해서 4차의 정확도를 갖는 외재적 시간 전진기법인 것과는 달리 앞으로 살펴볼 연구에서는 시간에 대해서 Taylor 확장을 통한 1차의 정확도와 trapezoidal 또는 Crank-Nicolson 차분[1]을 통한 2차의 정확도를 갖는 내재적인 시간 전진기법을 유도하여 OHOC 차분법을 적용하였다. 내재적인 형태로 유도되는 과정에서 추가로 발생하는 블록 7각 대각행렬로 이루어진 선형방정식계를 계산하였으며, 외재적인 시간 전진을 이용하는 OHOC 차분법의 결과를 비교하기 위하여 종(bell) 모양과 반원(semi-circle) 모양을 가지는 1차원 선형파의 전파 문제와 충격파관(shock tube) 내에서의 압력과 밀도

1) KAIST 항공우주공학과 대학원 (305-701, 대전시 유성구 구성동 373-1, Tel : (042) 869-3756)

2) KAIST 항공우주공학과 대학원 (305-701, 대전시 유성구 구성동 373-1, Tel : (042) 869-3756)

3) KAIST 항공우주공학과 교수 (305-701, 대전시 유성구 구성동 373-1, Tel : (042) 869-3716)

가 변화하는 과정을 모사한 1차원 비선형파의 전파 문제를 다루었다.

2. 수치적 방법

2.1 공간 차분(OHOC difference)

7-point stencil을 이용한 공간 차분인 Pade' Scheme[2-5]의 일반적인 형태는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \beta \frac{\partial f_{i-2}}{\partial x} + \alpha \frac{\partial f_{i-1}}{\partial x} + \frac{\partial f_i}{\partial x} + \alpha \frac{\partial f_{i+1}}{\partial x} + \beta \frac{\partial f_{i+2}}{\partial x} \\ = c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6\Delta x} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} + a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} \end{aligned} \quad (2.1)$$

Tam과 Webb[8]이 DRP(dispersion-relation-preserving) scheme에서 쓴 방법은 unidiagonal 즉, $\alpha = \beta = 0$ 인 경우이다. 하지만, 절단정확도(truncation order)와 해상도(resolution)을 높이기 위해 multi-diagonal 으로의 확장이 필요하며 계수들은 각 격자점(node)에서의 값을 Taylor 확장을 이용하여 i 점에 대한 관계식을 유도한 후, 원하는 정확도까지 계수 비교를 통하여 a, b, c, α, β 의 관계식을 만든다. 또한, Fourier 해석을 통해 위상오차(dispersive error)를 최소로 하는 a, b, c, α, β 의 관계식을 이끌어낸다. 여기서는, Lele[2]가 제안한 계수 최적화 방법에 가중함수(weighting function)를 도입하여 계수를 직접 적분하여 구한 J.W.Kim[6]의 방법을 사용하였다. 한편, 경계면 부근에서는 다음과 같이 차분될 수 있다. (tridiagonal의 경우)

$$\begin{aligned} i = 0; \\ f'_0 + a_{01} f'_1 = \frac{1}{\Delta x} (a_{00} f_0 + a_{01} f_1 + a_{02} f_2 + a_{03} f_3) \\ i = 1; \\ a_{10} f'_0 + f'_1 + a_{12} f'_2 = \frac{1}{\Delta x} (a_{10} f_0 + a_{11} f_1 + a_{12} f_2 + a_{13} f_3 + a_{14} f_4) \\ i = 2; \\ a_{21} f'_1 + f'_2 + a_{23} f'_3 = \frac{1}{\Delta x} (a_{20} f_0 + a_{21} f_1 + a_{22} f_2 + a_{23} f_3 + a_{24} f_4 + a_{25} f_5) \end{aligned} \quad (2.2)$$

여기서의 계수들은 6차의 절단정확도를 갖는 tridiagonal ($\beta = 0$) 차분법에서 얻어지며, 참고문헌[6]에 잘 나타나 있다.

2.2 1차의 정확도를 갖는 내재적 시간 전진

1차원 비정상 압축성 Euler 방정식에 대하여, 각각 $(i-1), i, (i+1)$ 격자점에서 1차의 정확도를 갖는 Taylor 확장을 한 후에 OHOC 차분에서 나타나는 계수를 곱해주면, (2.3) 식이 얻어진다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} = 0, \quad Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_t \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho e_t + p)u \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\frac{Q_{i-1}^{n+1} - Q_{i-1}^n}{\Delta t} &= -\frac{\partial E_{i-1}}{\partial x} + O(\Delta t) \quad , \quad \alpha \frac{Q_{i-1}^{n+1} - Q_{i-1}^n}{\Delta t} = -\alpha \frac{\partial E_{i-1}}{\partial x} + O(\Delta t) \\
\frac{Q_i^{n+1} - Q_i^n}{\Delta t} &= -\frac{\partial E_i}{\partial x} + O(\Delta t) \quad , \quad \frac{Q_i^{n+1} - Q_i^n}{\Delta t} = -\frac{\partial E_i}{\partial x} + O(\Delta t) \quad (2.3) \\
\frac{Q_{i+1}^{n+1} - Q_{i+1}^n}{\Delta t} &= -\frac{\partial E_{i+1}}{\partial x} + O(\Delta t) \quad , \quad \alpha \frac{Q_{i+1}^{n+1} - Q_{i+1}^n}{\Delta t} = -\alpha \frac{\partial E_{i+1}}{\partial x} + O(\Delta t)
\end{aligned}$$

OHOC 차분에서 나타나는 계수를 곱해서 얻은 (2.3) 식의 우변 세 식을 더하여 tridiagonal인 경우의 OHOC 차분을 한 후에 내재적 시간전진을 시키면 (2.4) 식과 같다.

$$\begin{aligned}
LHS &= \frac{1}{\Delta t} (\alpha Q_{i-1} + Q_i + \alpha Q_{i+1})^{n+1} - \frac{1}{\Delta t} (\alpha Q_{i-1} + Q_i + \alpha Q_{i+1})^n \\
RHS &= -\left(\alpha \frac{\partial E_{i-1}}{\partial x} + \frac{\partial E_i}{\partial x} + \alpha \frac{\partial E_{i+1}}{\partial x} \right) \quad (2.4) \\
&= -\frac{1}{\Delta x} [c(E_{i+3} - E_{i-3}) + b(E_{i+2} - E_{i-2}) + a(E_{i+1} - E_{i-1})]^{n+1}
\end{aligned}$$

2.3 2차의 정확도를 갖는 내재적 시간 전진

(2.5) 식은 두 식의 Taylor 확장을 이용하여 정리하였을 때 얻어지는 2차의 정확도를 갖는 내재적 시간전진의 결과를 나타낸다[1].

$$\begin{aligned}
Q^{n+1} &= Q^n + \Delta t \frac{\partial Q^n}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 Q^n}{\partial t^2} + \frac{(\Delta t)^3}{6} \frac{\partial^3 Q^n}{\partial t^3} + O(\Delta t)^4 \\
Q^n &= Q^{n+1} - \Delta t \frac{\partial Q^{n+1}}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 Q^{n+1}}{\partial t^2} - \frac{(\Delta t)^3}{6} \frac{\partial^3 Q^{n+1}}{\partial t^3} + O(\Delta t)^4 \\
\frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t} &= -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial E^n}{\partial x} + \frac{\partial E^{n+1}}{\partial x} \right) + O(\Delta t)^2 \quad (2.5)
\end{aligned}$$

(2.4) 식과 (2.5) 식을 정리하여 모든 격자점에 대해 나타내면 (2.6) 식과 같은 block 7각-대각 행렬이 얻어지는데 각 block의 내부는 3×3의 행렬로 나타난다. 이렇게 얻어진 (2.6) 식을 계산하기 위하여 LU 분해(decomposition)[7]를 이용하였다.

$$\begin{bmatrix}
[D_0] & [E_0] & [F_0] & [G_0] & & & & & \\
[C_1] & [D_1] & [E_1] & [F_1] & [G_1] & & & & \\
[B_2] & [C_2] & [D_2] & [E_2] & [F_2] & [G_2] & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\
& [A_i] & [B_i] & [C_i] & [D_i] & [E_i] & [F_i] & [G_i] & \\
& & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\
& & & [A_{m-2}] & [B_{m-2}] & [C_{m-2}] & [D_{m-2}] & [E_{m-2}] & [F_{m-2}] \\
& & & & [A_{m-1}] & [B_{m-1}] & [C_{m-1}] & [D_{m-1}] & [E_{m-1}] \\
& & & & & [A_m] & [B_m] & [C_m] & [D_m]
\end{bmatrix}
\begin{Bmatrix}
\Delta Q_0 \\
\Delta Q_1 \\
\Delta Q_2 \\
\vdots \\
\Delta Q_i \\
\vdots \\
\Delta Q_{m-2} \\
\Delta Q_{m-1} \\
\Delta Q_m
\end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix}
RHS_0 \\
RHS_1 \\
RHS_2 \\
\vdots \\
RHS_i \\
\vdots \\
RHS_{m-2} \\
RHS_{m-1} \\
RHS_m
\end{Bmatrix}
\tag{2.6}$$

3. 결과

공간에 대해서 6차의 정확도를 갖는 OHOC 차분을 이용하여 1차원 선형파의 전파와 비선형파의 전파 문제를 다루었다. 1차원 선형파의 경우 초기의 파형은 종(bell) 모양과 반원(semi-circle) 모양을 갖으며 전파하도록 조건을 주었으며, 외재적인 시간 전진기법으로 2차의 정확도를 갖는 Runge-Kutta 방법을 이용한 OHOC 차분으로 계산한 결과와 비교하였다. OHOC 차분은 공간에 대해서 6차의 정확도를 갖는 tridiagonal 형태의 차분이며 시간에 대해서 2차의 정확도를 갖는 내재적인 시간 전진기법을 이용한 결과와의 비교를 Fig 1. - Fig 4. 에서 나타내었다. Explicit의 경우 CFL 값이 0.5 이상이 되면 발산하지만, Implicit의 경우 1.0의 값을 가지면 위상 오차가 나타나기는 하지만 발산은 하지 않는다. 1차원 비선형파의 경우 충격파관(shock tube) 내에서 압력과 밀도가 변화하는 과정을 계산 모델로 하였으며 시간에 대해서 1차의 정확도를 갖는 내재적 시간 전진기법의 OHOC 결과와 시간에 대해서 4차의 정확도를 갖는 외재적 시간 전진기법의 OHOC 결과를 Fig 5., 6. 에서 나타내었다. 이 때 Explicit과 Implicit의 CFL 값을 동일하게 하였을 때와 다르게 하였을 때의 계산 결과와 시간을 비교하면 내재적인 시간 전진에서는 외재적인 시간 전진에서 사용한 CFL 값보다 약 3배 가까이 큰 값을 사용할 수 있었으며 확산 오차가 지배적임을 알 수 있다. 동일 CFL number일 경우에 내재적 시간 전진기법이 20.81 sec가 소요되었으며 외재적 시간 전진기법이 7.14 sec가 소요되어 더 오랜 계산 시간을 소요한 반면 CFL number가 다른 경우에 내재적 시간 전진기법이 6.48 sec가 소요되어 외재적 시간 전진기법보다 계산 시간이 약간 단축되었음을 확인하였다.

4. 결론

본 연구에서는 외재적(explicit) 형태를 갖는 기존의 최적화된 유한 차분법(OHOC)을 내재적(implicit) 형태를 갖도록 유도하고 1차원 Euler 방정식에 적용하여 외재적 형태를 갖을 때와 비교하였다. 시간에 대한 정확도가 같은 경우 explicit time marching보다 implicit time marching이 더욱 안정된 수치해와 보다 큰 CFL 값을 갖을 수 있었다. 4차의 시간 정확도를 갖는 explicit 시간 전진과 비교했을 때 1차 시간 정확도의 implicit 시간 전진에서는 확산 오차(dissipation error), 2차 시간 정확도에서는 위상 오차(dispersion error)를 갖지만 여전히 보다 큰 CFL 값을 갖을 수 있었다. 따라서 더 높은 시간 정확도를 갖는 implicit 시간 전진에 대한 개선이 요구된다.

참고문헌

- [1] John C.Tannehill, Dale A.Anderson, and Richard H.Pletcher, *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Taylor&Francis (1997), p120-121
- [2] Lele,S.K., "Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution", *Journal of Computational Physics*, Vol.103, 1992, p16-42
- [3] H.Lomax, *AIAA Journal*, Vol.14, No.4,1976, p512-518
- [4] L.Collatz, *The Numerical Treatment of Differential Equations*, Springer-Verlag, New York,1966, p538
- [5] Z.Kopal, *Numerical Analysis*, Wiley, New York, 1961, p552
- [6] J.W.Kim and D.J.Lee, "Numerical Simulation of Nonlinear Waves Using Optimized High-Order Compact Schemes", *Computational Fluid Dynamics Journal*, Vol.5, 1996
- [7] Steven C.Chapra and Raymond P. Canale, *Numerical Methods for Engineers*, 1990, p271-290
- [8] Tam,C.K. and Webb,J.C., "Dispersion-Relation-Preserving Schemes for Computational Aeroacoustics", *Journal of Computational Physics*, Vol.107, 1993

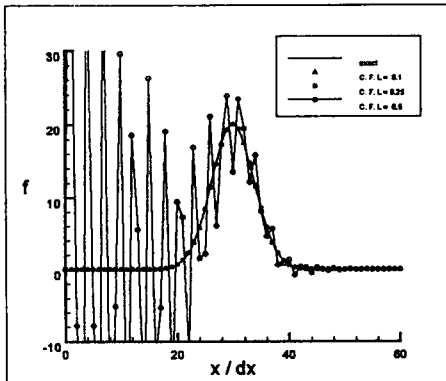


Fig. 1 Linear bell-shaped wave convection by explicit time-marching

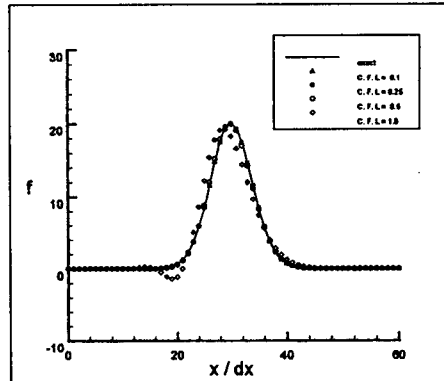


Fig. 2 Linear bell-shaped wave convection by implicit time-marching

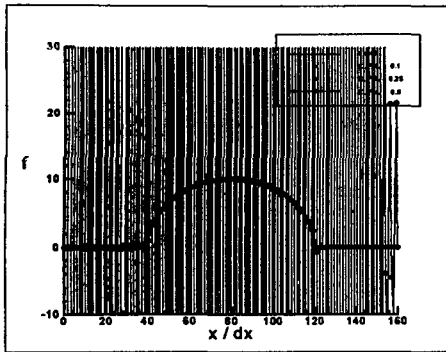


Fig. 3 Linear semi-circular wave convection by explicit time-marching

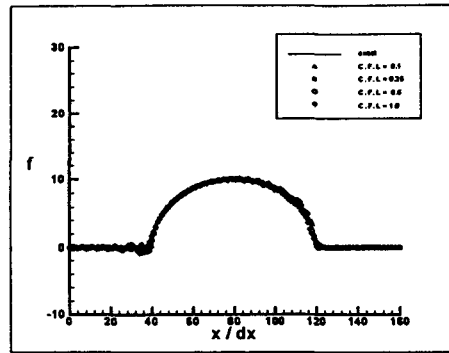
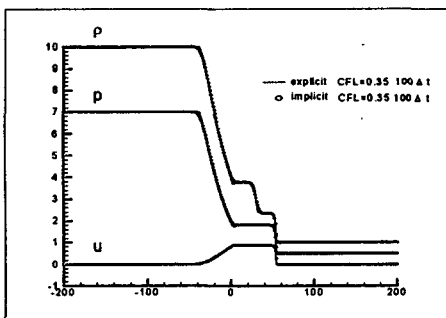
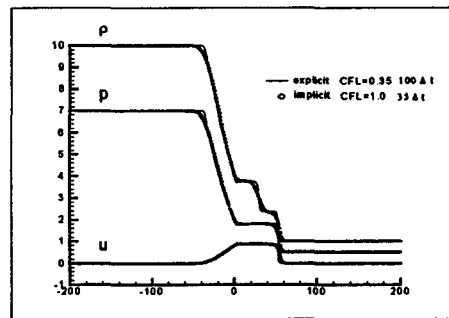


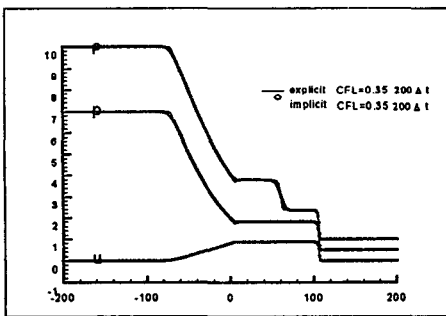
Fig. 4 Linear semi-circular wave convection by implicit time-marching



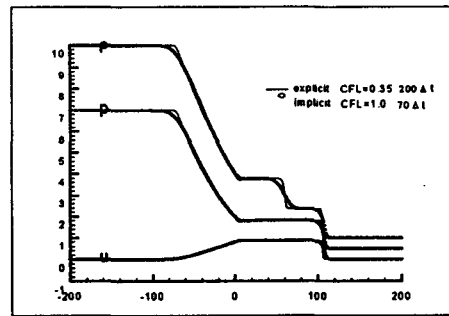
(a)



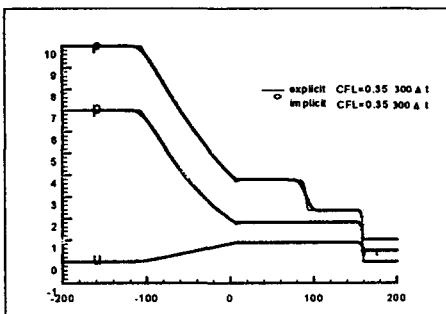
(a)



(b)

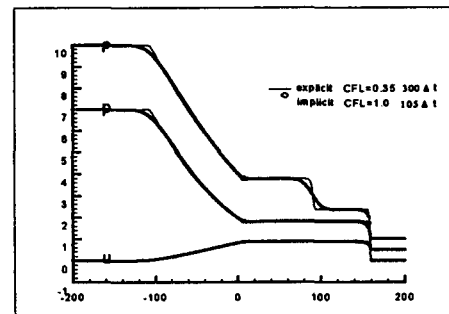


(b)



(c)

Fig. 5 Nonlinear wave convection by 4th-order explicit & 1st-order implicit with same CFL number



(c)

Fig. 6 Nonlinear wave convection by 4th-order explicit & 1st-order implicit with different CFL number