

Particle tracking algorithm for the Lagrangian-Eulerian finite element method

석희준

한국수자원공사 수자원연구원 (sxh60@kowaco.or.kr)

<요약문>

Multivariate Newton Raphson method is developed to perform the particle tracking in the three dimensional area using four objective functions. In this method, three variables are solved to compute target point and actual and real tracking time. The simulated pathlines in various types of three dimensional elements are well matched with exact pathline.

Key Words : Multivariate Newton Raphson method, particle tracking, objective functions

1. 서론

지하수계의 수많은 오염물 거동 현상은 극심한 비선형 이송, 분산, 반응식으로 표현된다. 이런 극심한 비선형문제를 풀기 위해서 정확하고, 효율적이며, 오차에 덜 민감한 알고리즘의 사용은 올바른 해를 구하는데 매우 중요한 요건이 된다. 이전에는 대부분의 지하수 오염물 거동문제가 유한요소법 및 차분법과 같이 주로 Eulerian 접근에 의하여 해석되었으나 점차 Eulerian 접근의 한계를 인식함으로써 다양한 Lagrangian 방식이 개발되어 사용되었다. 그러나 기존의 Lagrangian 방식에 속하는 입자추적방법 알고리즘은 대부분 일차원 및 이차원문제에 국한되어 있을 뿐만 아니라 오로지 정류 상태의 지하수 흐름을 가정하는 등 많은 한계점을 가지고 있었다. 따라서 이런 문제점을 극복하는 새로운 입자추적 알고리즘이 Suk과 Yeh [2002]에 의해서 개발되었고 이 논문은 Suk과 Yeh [2002]에 의해서 개발된 삼차원 입자 추적 알고리즘의 확장으로서 Multivariate Newton-Raphson (MNR)을 새롭게 개발하였다.

2. Multivariate Newton-Raphson method (MNR)

전체적인 입자 추적 방법의 과정은 기본적으로 Cheng et al. [1996]을 따른다. 본 연구에서는 Cheng et al. [1996]의 입자추적과정 중 목표면이 정해져 있을 때 목표점을 결정하는 과정을, 새롭게 개발된 MNR 방법을 이용하여 효과적으로 계산하였다. MNR 방법을 설명하기 위해서 목표면이 삼각형인 경우 꼭지점은 1, 2, 3으로, 사각형인 경우 1, 2, 3, 4로 정의한다. 이때 격자망 요소가 사면체, 오면체, 육면체에 따라 목표면은 삼각형이거나 사각형일 수 있다. 여기서는 편의상 목표면이 사각형일 경우에 대해 서만 설명하기로 한다. 이때 목표점 Q 의 x 좌표는 다음과 같이 정의될 수 있다.

$$X_Q = \sum_{i=1}^4 X_i N_i(\epsilon, \eta) \quad (1)$$

여기서 X_i 는 꼭지점 i 의 x 좌표이며, N_i 은 꼭지점 i 의 내삽함수이고, ϵ, η 은 국소 좌표들이다. 마찬가지로 Y_Q 와 Z_Q 도 식(1)과 유사하게 나타낼 수 있다. 또한 가상입자가 목표면내의 목표점 Q 에 도달할 때 x 의 속도는 다음과 같이 정의될 수 있다.

$$VX_Q^* = \sum_{i=1}^4 VX_i^* N_i(\epsilon, \eta) \quad (2)$$

이때 VX_i^* 는 가상입자가 목표면내의 목표점에 도달할 때 목표면 꼭지점 i 의 x 속도이다. 전향 입자추적 방법이 수행될 때 꼭지점 i 의 VX_i^* 는 다음과 같이 정의된다.

$$VX_i^* = \theta VX_i^{n+1} + (1 - \theta) VX_i^n \quad (3)$$

여기서 VX_i^{n+1} 는 지하수 흐름 시간 간격에서 $n+1$ 단계에서의 꼭지점 i 의 x 속도이며, VX_i^n 는 지하수 흐름 시간 간격에서 n 단계의 꼭지점 i 의 x 속도이다. 이때 VY_Q^* 와 VZ_Q^* 도 식(2)과 유사하게 나타낼 수 있고 VY_i^* 와 VZ_i^* 는 식 (3)과 유사한 방법으로 나타낼 수 있다. θ 는 시간에 대한 내삽 계수이고 다음과 같이 정의된다.

$$\theta = \frac{\Delta t^*}{\Delta t} \quad (4)$$

여기서 Δt 는 주어진 추적 시간이고, Δt^* 는 시작점 P 로부터 목표점 Q 까지 실제 추적에 의해서 소비된 시간이다. 속도-이동 거리관계에 따라서, 다음과 같은 네 개의 식이 성립된다.

$$X_Q - X_P = \Delta t^* \cdot VX \quad (5)$$

$$Y_Q - Y_P = \Delta t^* \cdot VY \quad (6)$$

$$Z_Q - Z_P = \Delta t^* \cdot VZ \quad (7)$$

$$\sqrt{(X_Q - X_P)^2 + (Y_Q - Y_P)^2 + (Z_Q - Z_P)^2} = \sqrt{VX^2 + VY^2 + VZ^2} \cdot \Delta t^* \quad (8)$$

여기서 X_P, Y_P, Z_P 는 시작점 P 의 x, y, z 좌표들이며, V_X, V_Y, V_Z 는 평균속도이다. 전향 입자추적 방법이 수행될 때 VX 는 다음과 같이 정의된다.

$$VX = \frac{1}{2} (VX_P^n + VX_Q^*) \quad (9)$$

여기서 VX_P^n 는 지하수 흐름 시간 간격에서 n 단계의 시작점 P 의 x 속도이며 VY 와 VZ 도 식 (9)과 유사한 방법으로 나타낼 수 있다. 식 (5)에 식 (1)-(4), 그리고 (9)의 정보를 이용하여 정리하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$F(\epsilon, \eta, \theta) = A_1 + A_2\epsilon + A_3\eta + A_4\epsilon\eta + A_5\theta + A_6\theta^2 + A_7\theta\epsilon + A_8\theta\eta + A_9\theta\epsilon\eta + A_{10}\theta^2\epsilon + A_{11}\theta^2\eta + A_{12}\theta^2\epsilon\eta = 0 \quad (10)$$

여기서 A_1-A_{12} 계수에 대한 설명은 지면상 생략하기로 하겠다. 마찬가지로 식 (6), (7), 그리고 (8)에 대해서도 같은 절차를 이용하면 식 (10)과 같이 θ , ϵ 그리고 η 의 함수 형태를 가진 다른 세 개의 식들로 나타낼 수 있다. 여기서는 지면상 생략하기로 하겠다. 따라서 네 개의 목적함수와 세 개의 미지수를 가지므로 세 개의 목적함수로 이루어진 네 개의 목적 함수조합을 만들 수 있고, 이 중 하나의 조합을 이용하여 MNR 방법으로 세 개의 미지수를 구할 수 있다.

3. 수치 해석 결과

MNR 방법을 이용하여 다양한 삼차원 격자망 요소들(사면체, 오면체, 육면체)로 이루어진 공간상에서 각각 입자추적방법을 수행하였다. 수치 모의 조건은 삼차원 공간상에서 가상 입자가 나선형으로 올라가도록 유체 흐름 공간장을 다음과 같이 설정하였다.

$$V_x(x, y, z, t) = \frac{(-\sin(\pi t/100) + \cos(\pi t/100))}{2} \quad (11)$$

$$V_y(x, y, z, t) = \frac{(\sin(\pi t/100) + \cos(\pi t/100))}{2} \quad (12)$$

$$V_z(x, y, z, t) = 0.1 \quad (13)$$

영역 $[0, 90] \times [0, 90] \times [0, 90]$ 은 729개의 육면체, 1458개의 오면체, 4374개의 사면체 요소들로 각각 분할하고, 각각의 상황 하에서 MNR 방법을 이용하여 입자추적방법을 수행하였다. 입자 추적 수행 결과 그림 1(a), (b)에서 보이는 바와 같이 수치 모의된 입자 추적 경로는 해석해와 거의 일치한다. 단 지면상 육면체의 경우는 나타내지 않았다.

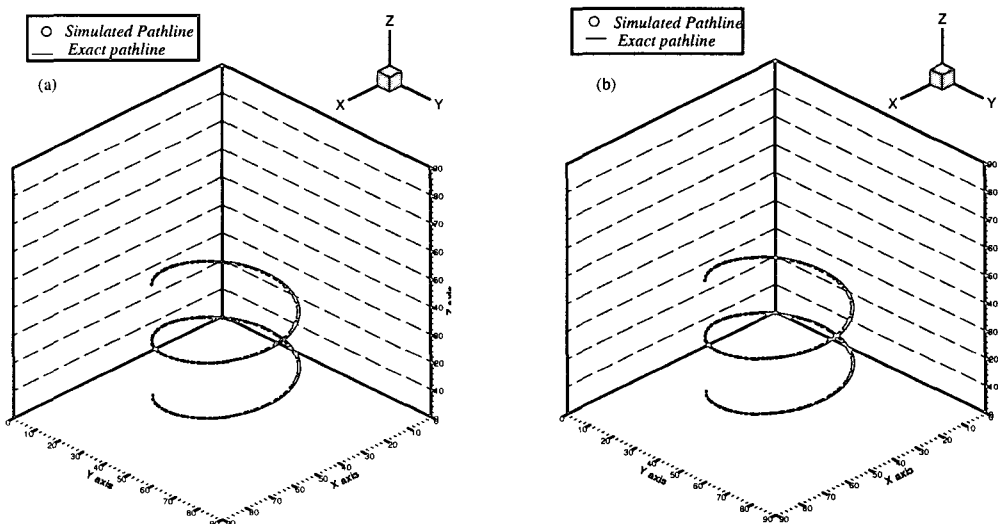


그림 1. 격자망 요소가 (a) 사면체인 경우와 (b) 오면체인 경우일 때 MNR을 이용한 입자추적 결과와 해석해와의 비교.

4. 참고문헌

- [1] Cheng, H. P., Cheng, J. R., and Yeh, G. T. "A particle tracking technique for the Lagrangian Eulerian finite element method in multi-dimensions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39, 1115-1136, 1996.
- [2] Suk, H. and Yeh, G. T. "Particle tracking algorithm for the Lagrangian-Eulerian finite element method under the transient conditions in multi-dimensions", *Proceedings of XIV international conference on computational methods in water resources*, June 23-28, 1035-1042, 2002, Delft, The Netherlands.