

FDM을 이용한 層流流動場內에서 汚染物質 擴散에 관한 研究

Numerical Prediction of Contaminant Dispersion within the Laminar Flow Field using FDM

김 양 술*
Yang-Sull Kim

ABSTRACT

A simulation of contaminant dispersion in a water reservoir has been done using 2-D finite difference method(FDM). The steady state velocity field of the reservoir was computed using stream function-vorticity formulation of Navier-Stokes equation and continuity equation. Based on the computed steady state velocity field, the transient convective diffusion equation of the contaminant dispersion was computed.

For the 1m×1m reservoir model with inlet and outlet attached, it was shown that the center of circulation located toward right. For the numerical values of $\nu = 0.01(\text{cm}^2/\text{s})$ and $D = 0.6(\text{cm}^2/\text{s})$ and the flow of $50(\text{cm}^3/\text{s})$, it was determined that the outflow had to be shut down in 18 seconds to prevent from severe pollution. Also the required time was computed to be 6 seconds for the inflow of $100(\text{cm}^3/\text{s})$. The result of this study is considered, hopefully, to be useful for the design of the water reservoir systems that are the subjects to various contamination.

1. 서 론

최근 지구환경보존에 대한 우려가 국가차원을 넘어서 전세계적으로 높아져가고 있고, G7 등 선진 공업국이 주축이 되어 환경오염문제를 새로운 무역규제의 무기로 또는 새로운 국제 질서의 도구로 등장시켰다. 또한 국내적으로도 하천이나 대기중

으로 방출되는 각종 공업폐수나 유독성가스 등으로 인한 환경오염에 대해 산업계와 일반 국민의 관심이 높아져가고 있다^{1~3)}.

오염방지등에 대한 문제의식이 날로 심각해지고 있으나 이의 대처방안이나 공해방지 기술의 개발 등을 뒷받침할 이론적 근거나 학문적 연구가 미약한 실정이다.

* 홍익대학교 기계설계학과

유동장내에서 이물질 확산에 대한 연구는 1970년대 중반까지는 주로 염료⁴⁾나 방사선 동위원소등의 추적체^{5,6)}(tracer)를 이용하여 이물질이 확산하는 경로를 실험적으로 탐지하는 방법을 선호하는 경향을 보였지만 최근에는 대용량의 컴퓨터를 이용하여 유동방정식과 확산방정식의 수치해를 구하고 이로부터 오염정도를 계산하는 방식이 널리 쓰이고 있다. 우리 나라의 경우 다수 산업체의 영세성등이 원인이 되어 오염방지기술의 개발이 극히 부진하고 오염방지기술의 발전을 학문적으로 뒷받침해야 할 학계에서도 오염과정의 논리적인 분석의 필요성에 대한 인식이 높지 않고 유동장내에서의 이물질의 확산에 대한 기초연구는 전무한 상태이다.

본 연구는 층류유동장내에서의 오염물질 확산에 관한 수치해석적⁷⁾ 연구로서, 근래에 들어 환경문제로 인한 심각성이 대두되는 현실에 비추어 특히 수질오염에 대한 이론적 해석을 목적으로 한다. 따라서 본 연구에서는 기초적 단계의 지나지 않으나, 유동특성을 이해하는데 중요한 Navier-Stokes Equations을 유동함수/와류법(stream function-vorticity method)¹⁰⁾의 형태로 수조(reservoir)내의 속도장을 정상상태에서 구한 다음, Fick's second law를 응용한 확산방정식(diffusion equation)을 이용해 오염물질의 확산을 계산하였으며, 특히 이 확산과정은 비정상상태에서 행하게 되며, 여기에서 node간격이나 유량, 점성 등이 결과에 어떤 영향을 주는지 예측하고, Patankar¹⁰⁾의 상류도식(Upwind Scheme)의 유한차분식을 도입하여 Simulation하여 실제 거동과 유사한 유동특성을 고찰해 보고자 한다.

2. 이론해석

2.1 2차원 정상 비압축성 유동방정식

정상상태의 비압축성 2차원 유동에서 운동방정식과 Navier-Stokes Equations은 편미분으로 표현될 수 있으며, 이러한 일반적인 방정식들과 함께 상태방정식에 의한 유체 유동해석에 필요한 방정식들은 다음과 같다.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \dots\dots\dots (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \dots\dots\dots (2)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \dots\dots\dots (3)$$

$$\rho \frac{D\psi}{Dt} = \rho g - \nabla p + \mu \nabla^2 \psi \dots\dots\dots (4)$$

여기에서 압력항(P)를 소거하여 정리하면

$$\begin{aligned} & \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \right. \\ & \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \\ & = \mu \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \right. \\ & \left. \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \dots\dots\dots (5) \end{aligned}$$

여기에 유동함수/와류법(stream function-vorticity method)을 적용하면 다음과 같이 유도할 수 있다.

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \omega}{\partial x} + \frac{\partial \omega}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) \dots\dots\dots (6)$$

유동함수 ψ 는 임의시간 t에서 점(x, y)를 지나는 stream line과 기준 stream line사이에 흐르는 유량을 의미하며, Fig. 1에 나타나 있다.

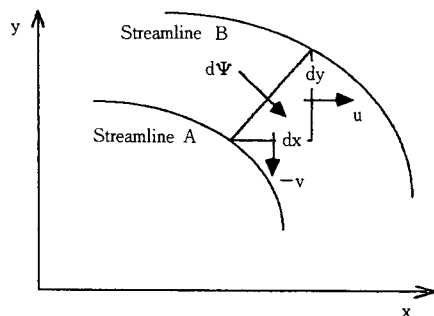


Fig. 1 Coordinates of stream function

여기서 $v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$, $u = -\frac{\partial \psi}{\partial y}$ 이므로,

$d\psi = -vdx + udy$, $\psi = \psi(x, y)$ 이면

$d\psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{\partial \psi}{\partial y} dy$ 이다.

(6)식에서 ω 는 시간에 따른 유동입자의 각도 변화를 나타낸다. 비회전 유동일때는 $\nabla \times \mathbf{v} = 0$ 즉 $\partial v/\partial x = \partial u/\partial y$ 가 된다. Fig. 2는 유체입자의 회전을 나타낸 것이다.

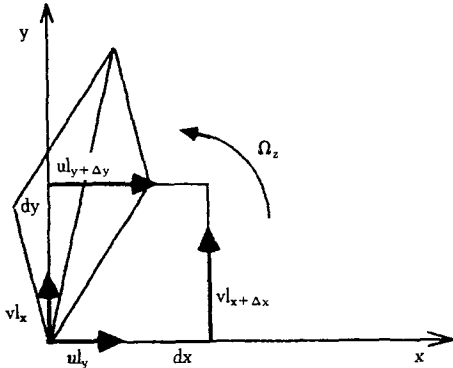


Fig. 2 Rotation of fluid particle

반시계 방향을 각의 양의 방향으로 잡으면, δ_x 와 δ_y 의 회전속도는 아래와 같다.

$$\delta_x \text{의 회전속도} = \frac{v + (\partial v/\partial x)\delta x - v}{\delta x} = \frac{\partial v}{\partial x}$$

$$\delta_y \text{의 회전속도} = \frac{-(u + (\partial u/\partial y)\delta y - u)}{\delta y} = -\frac{\partial u}{\partial y}$$

따라서 線素 δ_x , δ_y 가 갖는 순간 회전속도의 평균을 구하여 z축에 관한 회전만을 고려하면 $d\Omega = 1/2(\partial v/\partial x - \partial u/\partial y)$ 이 된다. 일반적으로 $2d\Omega_z$ 를 vorticity ω 로 놓고 정리하면, $\omega = (\partial v/\partial x - \partial u/\partial y)$ 이 된다.

이러한 현상은, 강 한가운데 있는 나뭇잎은 회전을 거의 하지 않지만 강 바깥쪽에서는 심하게 나뭇잎이 돌아(회전)가면서 떼내려가는 현상이라고 생각된다.

따라서 시간에 따른 유동입자의 변화 ω 는

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

$$= -\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) \dots \dots \dots (7)$$

결과적으로 (8)~(10)식으로 나타낼 수 있으며, 이 식에 FDM¹⁰⁾의 방법을 이용하여 프로그래밍하였고, 여기에 오염물질을 확산시키게 되므로 $\partial \omega/\partial t = 0$ 으로 놓고 계산하게 된다.

또한 Vorticity transport equation은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} + u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} = \\ \nu \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) \dots \dots \dots (8) \end{aligned}$$

오염물질의 확산과정은 Fick's second law를 도입하여 다음과 같이 표현할 수 있었다.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \nabla c = D \nabla^2 c + q \dots \dots \dots (9)$$

식(9)는 밀도와 확산계수가 일정하다고 가정한 경우이며, 여기서 열전달 문제와 Mass transfer 문제가 서로 유사성을 가지고 있음을 알 수 있으며, 여기에서 유체 유동이 없는 상태 즉 모든 유체 입자의 속도 $v=0$ 이라 놓으면 $\partial c/\partial t = D \nabla^2 c$ 로 표 되는데 이는 일반적인 확산에 의한 물질이동을 의미한다.

따라서, 물질전달방정식은 다음 식으로 주어진다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) + q \\ \dots \dots \dots (10) \end{aligned}$$

윗 식에서 q항은 오염물질이 발생되는 지점에서만 적용이 되며 그 밖의 다른 공간에서는 $q=0$ 이 된다.

2.2 유한차분방정식

본 연구에서는 Crank-Nicolson방법 대신 Patakar¹⁰⁾의 상류도식(Upwind scheme)을 이용해서 해를 구하였으며, 해의 정확도는 Crank-Nicolson 방법보다 부정확하겠지만 ν 의 영역 및 확산 방정식의 경우 확산계수 D의 값을 보다 광범위하게 적용할 수 있는 장점이 있음을 알 수 있었다. 각 방정식들을 프로그래밍하는데 필요한 수식들을 유한차분법(FDM)으로 유도하면 다음과 같다.

유동입자의 각도변화를 나타내는 (7)식을 유한차분화 하면

$$\omega_p = -2 \left(\frac{\psi_e}{E(E+W)} + \frac{\psi_w}{W(E+W)} - \frac{\psi_p}{EW} + \frac{\psi_n}{N(N+S)} + \frac{\psi_s}{S(N+S)} - \frac{\psi_p}{NS} \right) \quad (11)$$

이 되며, 다음에 유동함수 ψ_p 로 표현하면,

$$\psi_p = \left(\frac{\psi_e}{E(E+W)} + \frac{\psi_w}{W(E+W)} + \frac{\psi_n}{N(N+S)} + \frac{\psi_s}{S(N+S)} + \frac{1}{2} \omega_p \right) \left(\frac{1}{EW} + \frac{1}{NS} \right) \dots \dots (12)$$

이 됨을 알 수 있다.

또한 (12)식을 SOR(Successive Overrelaxation method) 반복법을 사용하면,

$$\psi_p^{n+1} = (1-\alpha) \psi_p^n + \alpha f(\psi_e, \psi_w, \psi_n, \psi_s, \psi_p) \dots \dots (13)$$

로 나타낼 수 있다.

다음에, Vorticity transport 방정식(8)을 유한차분법으로 유도하면 정상상태에서 $\partial \omega / \partial t = 0$ 이므로

$$\left[2\nu \left(\frac{1}{NS} + \frac{1}{EW} \right) + u \frac{(E-W)}{EW} + v \frac{(N-S)}{NS} \right] \omega_p = \left[\frac{2\nu - Sv}{N(N+S)} \right] \omega_n + \left[\frac{2\nu - Wu}{E(E+W)} \right] \omega_w + \left[\omega_w + \frac{2\nu + Eu}{W(E+W)} \right] \omega_w + \left[\frac{2\nu + Nv}{S(N+S)} \right] \omega_s \dots \dots (14)$$

이 되며 좀더 간단히 표현하면, $K_p \omega_p = K_n \omega_n + K_e \omega_e + K_w \omega_w + K_s \omega_s$ 의 형태로 나타낼 수 있다. (여기에서 K_p, K_n, K_e, K_w, K_s 등은 위의 결과식에서 각각의 vorticity Node의 앞에 위치한 값으로 상수이다.) SOR 방법을 사용할 경우에는 식(14)는 다음과 같이 단순화 된다.

$$\omega_p^{n+1} = (1-\alpha) \omega_p^n + \frac{\alpha}{K_p} \left[K_e \omega_e^n + K_w \omega_w^n + K_s \omega_s^n \right] \dots \dots (15)$$

여기서, 일반적으로 $1 < CC < 2$ 범위 내에서 결정되지만, 여기에서는 $CC=1.2$ 가 가장 적당하다. 유동 속도에 대한 유한차분방정식은 $u = \partial \psi / \partial y, v = -\partial \psi / \partial x$ 이므로 (16), (17)식과 같이 표현할 수 있다.

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{S}{N(N+S)} \psi_n - \frac{N}{S(N+S)} \psi_s + \frac{(N-S)}{NS} \psi_p \dots \dots (16)$$

$$v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{W}{E(E+W)} \psi_e - \frac{E}{W(E+W)} \psi_w + \frac{(E-W)}{EW} \psi_p \dots \dots (17)$$

여기에서 유동함수 $\psi_n, \psi_e, \psi_w, \psi_s, \psi_p$ 는 이미 위에서 구한 결과 값이 이용된다.

다음에 물질전달방정식 식(10)의 해를 구하기 위해 2차원 유동에 관한 이산화 방법(Discretization method)을 사용하여 유한차분방정식을 구하면

$$a_p c_p = a_n c_n + a_e c_e + a_w c_w + a_s c_s + q \dots \dots (18)$$

으로 표시할 수 있다.

$$\begin{aligned} a_n &= D_n A(|P_n|) + [[-F_n], 0] \\ a_e &= D_e A(|P_e|) + [[-F_e], 0] \\ a_w &= D_w A(|P_w|) + [[F_w], 0] \\ a_s &= D_s A(|P_s|) + [[F_s], 0] \end{aligned}$$

또한, a_n, a_e, a_w, a_s 는 수조의 각 내방향에 대한 확산과 전도의 영향을 전도 D_x 와 유량 F 에 의해 나타내 주고 있다.

이상의 유한차분방정식을 사용하여 층류유동장 내에서 오염물질 확산에 대한 유한차분(FDM) 프로그램을 작성하였으며, Fig. 3은 프로그램 과정에 대한 알고리즘을 요약하여 나타낸 흐름도(flow chart)이다.

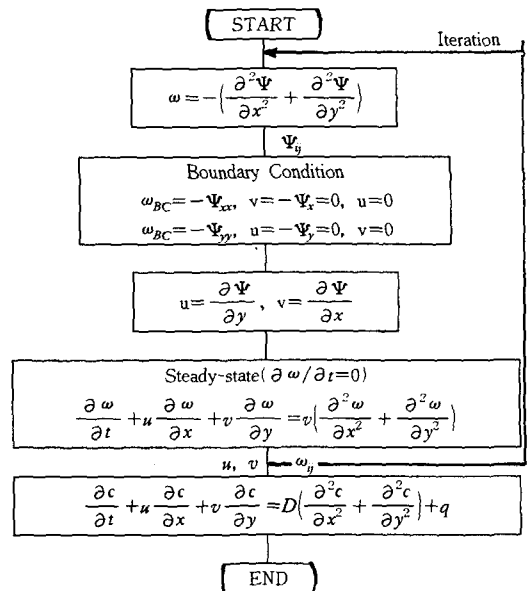


Fig. 3 Flow chart of FDM program

2.3 모델 및 경계 조건

본 연구에서 사용한 모델은 Fig. 4와 같이 가로, 세로 각각 1m인 수조를 설정하였으며, y=0인 지점에서의 경계 조건은, 벽 표면에서의 Ψ 값은 보통 상수로 하여 벽면에서의 vorticity(ω)를 계산하기 위해 Ψ 를 Taylor series로 표현하여 수행하였다. Fig. 5는 벽면에서의 Grid를 나타낸 것으로서

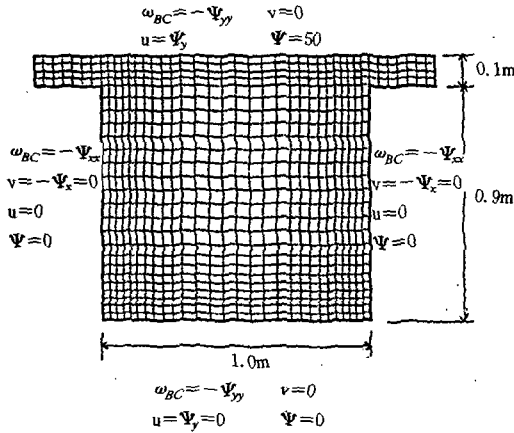


Fig. 4 Reservoir & boundary condition

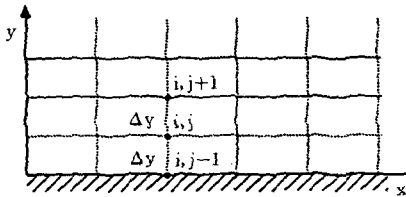


Fig. 5 Grid at the boundary surface

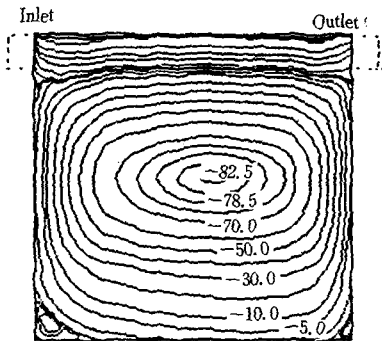


Fig. 6 Grid at the corner

벽면에서의 경계조건은

$$\omega_{j-1} = \frac{2}{\Delta y^2} (\psi_{j-1} - \psi_j) \dots \dots \dots (19)$$

Fig. 6은 모서리 부분에서의 Grid를 나타낸 것으로서 코너부분에서의 경계조건은

$$\omega_{cor} = \frac{1}{2} (\omega_{j-1} + \omega_{i-1}^*) \dots \dots \dots (20)$$

3. 고 찰

(8), (10)식을 유한차분법(FDM)을 이용해 프로그래밍 하는데 있어서 Crank-Nicolson method와 Patankar의 상류도식(Upwind Scheme)으로 수치화 할 수 있지만, Crank-Nicolson 방법을 사용할 경우 해의 정확도는 매우 뛰어나지만, 적용범위에 있어서는 상류도식(Upwind Scheme)보다는 다소 제한적이다. 즉 (8)식의 경우에는 Kinematic viscosity ν 의 값이 아주 작은 값이 될 경우에는 왼쪽의 대류항(Convective term)과 오른쪽의 확산항(diffusion term)이 균형을 이루지 못하고 negative diffusion을 유발하여 원하는 결과를 얻을 수 없었다. 하지만 ν 와 유량의 범위가 어느 일정 영역 내에 있을 때에는 다른 방법보다 즉 Implicit method나 Explicit method 보다 훨씬 정확한 해를 구할 수가 있었다. 따라서 본 연구에서는 Crank-Nicolson 방법 대신 Patankar의 상류도식(Upwind scheme)을 적용하여 먼저 Navier-Stokes equation을 유동 함수/와류법(Stream function-Vorticity method)으로 매질의 정상상태의 velocity field를 시뮬레이션한 결과, Fig. 7에서와 같이, 입구에서의 속도구배는 완전히 발달된 영역으로 포물선 형태를 보였으며, 여기서 오염물질의 침투위치는 수조 하단부의 왼쪽 0.3m 지점으로 하였으며, 또한 입구로부터

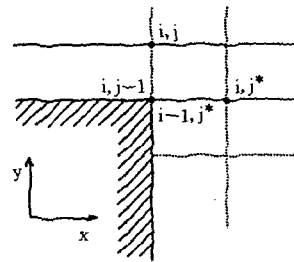
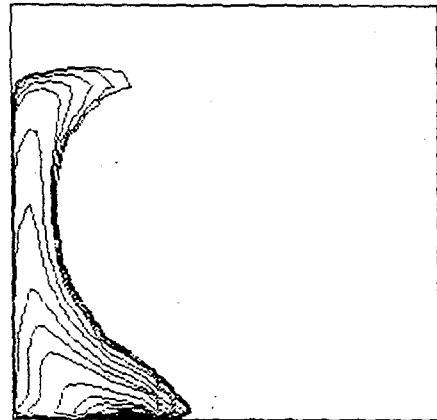


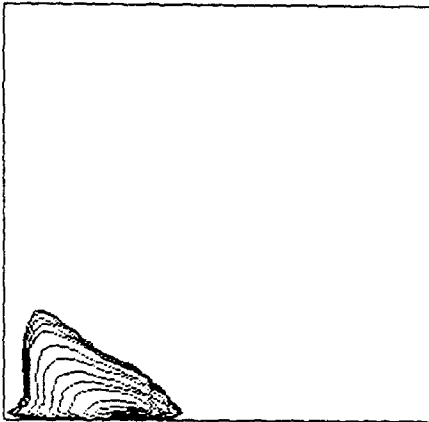
Fig. 7 Simulation at the streamline

들어오는 유량의 일부는 출구로 직접 유출이 되지
 만 일부는 수조 내에서 circulation을 일으키는 것
 으로 나타났다. 수조내 circulation은 유량의 양이
 많아질수록 오른쪽으로 치우치는 것으로 보이는
 데, 이는 운동량 방정식의 대류항의 비선형이 커
 지면서 흐름의 좌우대칭성을 잃기 때문인 것으로
 생각된다.

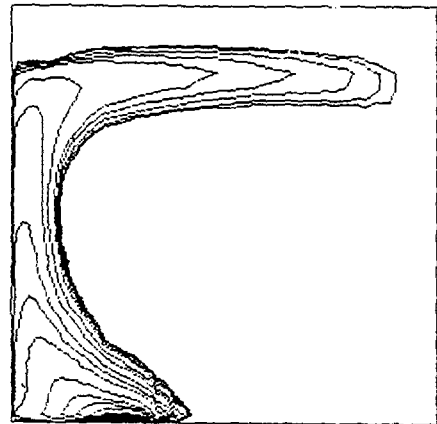
Fig. 8은 정상상태 유동장하에서 이물질의 확산
 과 비정상 상태의 확산방정식을 계산하여 시물레
 이션한 것을 나타낸 것으로, 여기에서는 동점성계
 수가 $0.01(\text{cm}^2/\text{s})$, 유량을 $50(\text{cm}^3/\text{s})$, 확산계수 D
 가 $0.6(\text{cm}^2/\text{s})$ 로 했을 경우에 확산을 미연에 방지
 하려면 적어도 18sec 내에 대책을 세워야 되는 것



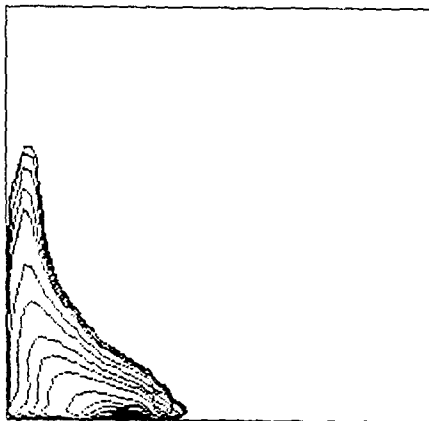
(c) 18.0sec



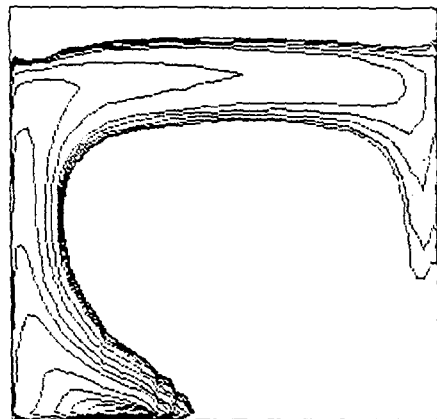
(a) 6.0sec



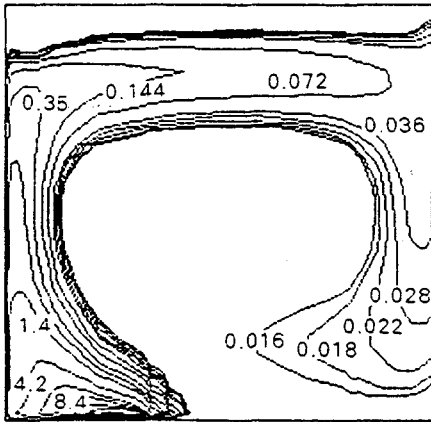
(d) 24.0sec



(b) 12.0sec



(e) 30.0sec



(f) 36.0sec

Fig. 8 Simulation of the contaminant dispersion

으로 나타났다. 유량을 100(cm³/s)로 했을 경우에는 확산속도가 상당히 커지므로 18sec 내에는 이미 오염물질이 출구를 통하여 유출이 된다. 그러므로 적어도 6sec 내에 대책이 필요하다.

오염물질의 확산 속도는 확산계수 D와 유동속도(flow velocity) u, v의 영향을 크게 받는다. D의 값이 0.1(cm²/s) 이하인 물질의 경우에는 시뮬레이션 상에서 negative diffusion이 발생하므로 계산상 어려움이 따르는데 이를 극복하기 위하여 상류도식(upwind scheme)을 사용하여 인위적으로 확산계수 D값을 크게 해주었다.

4. 결 론

본 연구에서는 유한차분법(FDM)을 이용하여 수조(reservoir)내에서 오염물질이 어떻게 확산되어 나가는가에 대해서 시뮬레이션한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 오염물질의 확산속도는 확산계수 D와 flow velocity u, v의 영향을 크게 받는다는 것을 알 수 있었다.
- 2) 확산계수 D의 값을 0.1(cm²/s) 이하인 물질의 경우에는 시뮬레이션 상에서 negative diffusion이 발생하므로 계산상 어려움이 따르는데 상류도식(upwind scheme)을 사용하므로써 가능함을 알 수 있었다.

- 3) 유한차분법(FDM)을 이용하여 오염물질의 확산되는 과정을 예측할 수 있음을 알 수 있었다. 본 연구에서 얻은 결과는 실제로 산업체의 수질정화시설등을 설계함에 있어 중요한 정보를 제공할 수 있을 것으로 기대된다.

기 호 설 명

- μ : viscosity
- ν : kinematic viscosity
- ρ : density
- D : diffusion coefficient
- u : velocity in x-direction
- v : velocity in y-direction
- ω : vorticity
- Ψ : stream function
- c : molar concentration
- q : production term
- N, E, W, S : x, y-direction distances between four grid points
- Δt : time step

Subscripts

- n, e, w, s : position in each four direction nodes

Superscripts

- n : old value(at time t) of the variable
- n+1 : new value(at time t+ Δt) of the variable

참 고 문 헌

- 1) A. Filip et al, Lakes and reservoirs, pollution and eutrophication : prediction of water quality in a future water supply reservoir. Water sci. tech. 19(5/6) pp. 793~802, 1987.
- 2) Van Craenbroeck et al, Process and transport in river : a comparison of simple methods for estimating the mass flow of fluoride discharged into rivers. Water sci. tech. 19(5/6) pp. 729~740, 1987.
- 3) Shun Dar Lin et al, Effects of Waste discharges on Mississippi river sediments : J Am Water Works Assoc. 79(11) pp. 26~32, 1987.

- 4) Diran Basmadjian et al, Distribution of chemicals in rivers during contamination and recovery. Proc. ASCE J. Environ. Eng. 113 (6) pp. 1185~1201, 1987.
 - 5) Carl W. chen et al, Investigation of beach contamination using tracer. ASCE J. Environ. Eng. 117(1) pp. 101~115, 1991.
 - 6) Peter G Meieret et al, Application of tracer techniques to continuous-flow toxicity testing. Water Res. 21(10) pp. 1259~1264, 1987.
 - 7) Rashid Al-Layla et al, Numerical modeling of solute transfort patterns in the Damman aquiter. Water Res bull 24(1) pp. 77~86, 1988.
 - 8) Rn Vaidya et al, Convective diffusion model for mass transfer in a rotating biological contactor : disc submergence < 50°C. Water Res. 21(12) pp. 1499~1504, 1987.
 - 9) Roger A Falconer et al, Modeling solute transfort using QUICK scheme. Proc. ASCE Environ. Eng. 114(1) pp. 3~20, 1988.
 - 10) Suhas V. Patanka, Numerical heat transfer and fluid flow, McGraw-Hill, INC, 1980.
-