

비정렬 셀 중심 방법에서 확산플럭스의 새로운 수치근사방법

명 현 국¹

A NEW NUMERICAL APPROXIMATION OF DIFFUSION FLUX IN UNSTRUCTURED CELL-CENTERED METHOD

H.K. Myoung^{*1}

The existing approximations of diffusion flux in unstructured cell-centered finite volume methods are examined in detail with each other and clarified to have indefinite expressions in several respects. A new numerical approximation of diffusion flux at cell face center is then proposed, which is second-order accurate even on irregular grids and may be easily implemented in CFD code using cell-centered finite volume method with unstructured grids composed of arbitrary convex polyhedral shape.

Key Words: 확산플럭스 (Diffusion Flux), 수치근사방법(Numerical Approximation), 비정렬 셀 중심 방법 (Unstructured Cell-Centered Method), 종속변수의 구배(Gradient of Dependent Variable)

1. 서 론

일반적으로 열유체 유동해석 코드의 정확도 및 다용성은 그것이 채택하고 있는 계산 격자구조의 유연성과 밀접하게 관계되므로, 격자의 선택은 매우 중요하다. 이러한 면에서 비정렬격자(unstructured grid)를 사용하는 유한체적법(FVM)이 지난 십 수 년에 걸쳐 CFD 연구 분야에서 주목을 받아왔다 [1-6]. 이것은 정렬격자(structured grid)계가 가지고 있는 두 가지 단점인 복잡하고 실제적인 형상에 대한 격자생성이 어렵고 또한 관심 있는 영역에 격자를 능동적으로 적합 시키기 어려운 점을 비정렬격자계에서는 용이하게 해결할 수 있기 때문이다. 또한, 비정렬격자계를 사용하는 유한체적법 중에서 수치해를 정렬격자계에서와 같이 격자생성으로 만들어진 기본 셀(또는 제어체적)의 중심에 저장하는 셀 중심 방법(cell-centered method)이 현재 가장 널리 사용되고 있다. 이것은 이 방법이 기하학적으로 매우 단순하고, 해석 영역의 경계가 면으로 구성되므로 특이점이 존재하지 않으며, 임의의 셀에 대해 특별한 보간법을 사용하지 않고 보존법칙을 만족할

수 있는 점 등 많은 장점을 가지고 있기 때문이다.

한편, 비정렬격자계에서는 일반적으로 격자점 간의 연결에 특별한 규칙이 없이 생성되기 때문에 2차원에서는 삼각형 및 사각형 셀, 3차원에서는 사면체, 프리즘, 육면체 셀 등 격자생성법에 따라 여러 가지 모양의 셀이 있을 수 있으므로, 수치해석 방법에서 사각형 및 육면체 셀만을 사용하는 정렬격자의 경우와 매우 상이하다. 특히, 비정렬격자계에서는 확산항 및 대류항 이산화를 정렬격자계에서와 같이 처리하기 어렵다. 일례로, 제어체적 중심에서의 해(종속변수)의 구배(gradient)는 확산항 및 고차의 대류항 등의 계산에 필요하나, 비정렬격자계에서는 정렬격자계에서 사용하는 국소좌표변환과 유한차분법을 통해 얻는 방법이 적절하지 못하다. 또한, 확산항을 수치근사(또는 이산화)하기 위해서는 셀 면(적분면)에서 해의 구배를 알아야 하는데, 정렬격자계에서 사용하는 셀 중심에서 구한 구배값을 셀 면의 중심으로 내삽하는 방법은 잘 알려진 바와 같이 셀의 크기가 일정한 균일격자에서는 종속변수 값들의 연결성이 제거되는 decoupling이 발생하여 해의 수렴을 방해하는 문제점이 있으며, 비정렬격자에서는 선형화하기가 힘들어 사용하기 곤란하다. 또한 확산항에서 나타나는 교차 확산항은 비정렬격자계에서는 특별한 처리가 요구된다. 따라

접수일: 2005년 9월 9일, 심사완료일: 2006년 2월 13일.

1 정회원, 국민대학교 기계자동차공학부

* Corresponding author E-mail: myong@kookmin.ac.kr

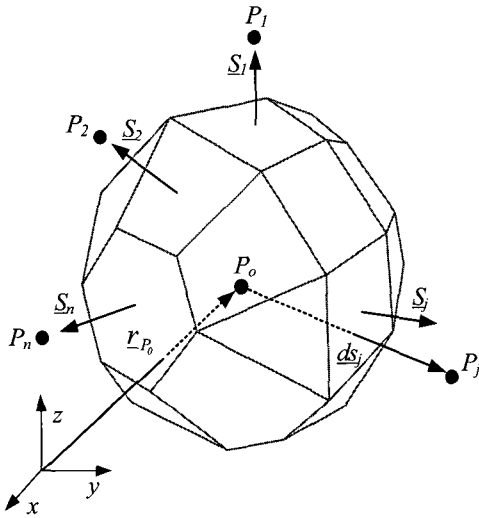


Fig. 1 Control volume of an arbitrary polyhedral shape

서 현재까지 비정렬격자계를 사용하는 수치해석방법에서 확산항 수치근사방법에 대한 여러 가지 방법이 제안되어 있으며[1-6], 최근에는 이 방법들이 상용 CFD 코드에 적용되어 널리 사용되고 있다. 그러나 이들 방법들에 대해 상호 비교분석한 연구는 상대적으로 많지 않은 실정이다.

본 연구에서는 현재 셀 중심 비정렬격자계를 사용하는 수치해석방법에서 제안되어 있으며 현재 상용 CFD 코드에 적용되어 널리 사용되고 있는 대표적인 확산항 수치근사방법에 대해 상호비교분석을 통해 불명확한 점을 밝히고, 불규칙적인 격자에서도 2차 정확도를 가지면서 용이하게 코드에 접목시켜 사용할 수 있는 새로운 확산플럭스 근사방법을 제안하고자 한다.

2. 기존의 확산항 근사방법 분석

일반적으로 적분형 수송방정식은 종속변수(또는 해)를 ϕ 라고 할 때 다음과 같은 형태를 가진다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho\phi) dV + \int_S [\rho\phi v - \Gamma_\phi \nabla\phi] \cdot dS \\ = \int_V Q_{\phi V} dV + \int_S Q_{\phi S} \cdot dS \end{aligned} \quad (1)$$

여기서 종속변수 ϕ 는 속도, 온도 등을 의미하며, 계수 Γ_ϕ 는 종속변수에 따라 달라진다. 만일 V 및 S 가 Fig. 1에서와 같이 다면체 형상을 가지는 계산 셀의 체적 V_{P_0} 및 분리된 면 S_j ($j=1, N_j$)를 가진다면, 식 (1)은 다음과 같이 표현된다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_{P_0}} (\rho\phi) dV + \sum_j \int_{S_j} [\rho\phi v - \Gamma_\phi \nabla\phi] \cdot dS_j \\ = \int_{V_{P_0}} Q_{\phi V} dV + \sum_j \int_{S_j} Q_{\phi S} \cdot dS_j \end{aligned} \quad (2)$$

식 (2)에서 좌변 각 항은 비정상항과 대류 및 확산항이고, 우변 항들은 체적 적분형 및 면적 적분형 생성항을 각각 의미한다.

본 연구에서 대상으로 하고 있는 식 (2)의 확산항은 일반적으로 식 (3)과 같이 수치적으로 근사시킬 수 있으며,

$$\begin{aligned} \sum_j \int_{S_j} \Gamma_\phi \nabla\phi \cdot dS_j \approx \\ \sum_j \Gamma_\phi (\nabla\phi)^*_{P_0} \cdot \underline{S}_j = \sum_j D_j \end{aligned} \quad (3)$$

이 식을 이산화하기 위해서는 셀을 둘러싸고 있는 셀 면 j 에서 해의 구배 $(\nabla\phi)^*_j$ 를 알아야 한다. 그런데 이 셀 면에서의 구배값을 근사적으로 평가하기 위해서는 점 P_0 주위에서의 ϕ 의 변화를 적절히 가정하여야 하며, 수치 알고리즘의 안정성 및 얻어진 해의 정확도는 일반적으로 셀 면에서의 ϕ 값 및 그 구배 $\nabla\phi$ 값을 평가하기 위해 사용된 보간 방법의 형태에 크게 의존한다.

현재 유한체적법을 사용하는 CFD 코드(특히 정렬격자계를 사용하는)에서는 이들 값을 평가하기 위하여 유한차분법을 채택하고 있으며, 대부분 가급적 상호 직각인 좌표계를 택하여 점 P_0 와 이웃 점을 연결하는 국소좌표계의 좌표축을 따라 종속변수 ϕ 의 변화를 가정하고 있다. 그러나 이 방법은 곡률좌표계를 사용할 경우 매우 복잡하게 되며, 또한 서로 다른 기하학적 형상을 가지는 셀을 사용할 경우에는 일반성을 잃어 버려 특별한 처리를 해야 하는 등 거의 적용할 수 없게 된다.

다른 방법은 최근 비정렬격자계를 사용하는 CFD 코드에서 대부분 채택하고 있는 방법으로 유한요소법의 개념과 유사한 방법이다. 즉, 이 방법은 종속변수 ϕ 의 분포를 점 P_0 를 둘러싼 공간에서 찾는 방법으로 종속변수의 선형분포를 다음과 같이 가정한다.

$$\phi(r, t) = \phi_{P_0} + (\nabla\phi)_{P_0} \cdot (r - r_{P_0}) \quad (4)$$

여기서 r_{P_0} 는 점 P_0 의 위치벡터이고, $(\nabla\phi)_{P_0}$ 는 점 P_0 에서 ϕ 구배의 근사값으로, 가우스정리(Gauss theorem 또는 발산정리) 또는 최소자승법(least square method)을 사용하여 구하고 있다[1-6]. 여기서는 본 연구와의 관련성을 고려하여 가우스정리를 사용하는 것으로 한다. 즉, 가우스정리를 이용하는 방법은 다음과 같이 $(\nabla\phi)_{P_0}$ 를 구하며,

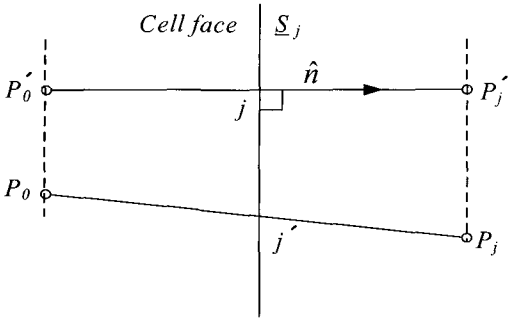


Fig. 3 A new way of calculating cell face gradients

$$\begin{aligned}
 (\nabla\phi)_{P_0} &= [\int_{V_{P_0}} (\nabla\phi)_{P_0} dV] / V_{P_0} \\
 &= \sum_j (\bar{\phi} \cdot S)_j / V_{P_0}
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

위식에서 셀 면에서의 $\bar{\phi}$ 값은 이웃하는 셀들에서의 값을 가중평균[1-3] 또는 단순히 산술평균[4,5]하여 구해진다.

현재 식 (5)와 같이 구해지는 셀 중심에서의 해의 구배값들을 사용하여 식 (4)에 나타나는 셀 면에서의 $(\nabla\phi)_j^*$ 를 구하는 방법으로는 크게 세 가지 방법이 현재 사용되고 있다. 첫째는 다음과 같이 셀 중심에서 구한 $\nabla\phi$ 를 셀 면의 중심으로 내삽하는 것이다.

$$(\nabla\phi)_j^* = w_j (\nabla\phi)_{P_0} + (1 - w_j) (\nabla\phi)_{P_j}
 \tag{6}$$

여기서,

$$w_j = | (r_j - r_{P_j}) / (r_{P_j} - r_{P_0}) |
 \tag{7}$$

로 이웃하는 두 셀의 크기가 다른 경우 거리 가중내삽을 위한 가중값(보간값)이며, r_j 는 셀 면 j 를 공유한 인접한 두 셀의 중심 P_0 및 P_j 를 잇는 직선 $ds_j (= r_{P_j} - r_{P_0})$ 이 셀 면 j 와 만나는 점의 위치벡터로, 일반적으로는 셀 면의 중심과 일치하지 않는다는 점에 주의할 필요가 있다(Fig. 3 참조). 그러나 이 방법은 잘 알려진 바와 같이 셀의 크기가 일정한 균일 격자에서는 종속변수 값들의 연결성이 제거되는 decoupling이 발생하여 해의 수렴을 방해하는 문제점이 있고, 또한 선형화 하기가 힘들어 수송방정식의 비정상항을 외재적으로 처리하는 경우에만 간혹 사용되고 있는 정도이다. 두 번째 방법은 셀 중심의 ϕ 값으로부터 경계면을 둘러싼 격자점에서 ϕ 값을 내삽하여 얻으면 셀 면에서 셀 P_0 및 셀 P_j 의 중심을 잇는 직선 ds_j 방향과 셀 면 접선방향으로 해의 변화를 알 수

있으므로 국소좌표 변환을 통하여 해의 구배 $(\nabla\phi)_j^*$ 를 얻을 수 있다[6]. 이 방법은 정렬격자계에서 널리 사용되고 있는 방법과 마찬가지로, 비정렬격자계에서는 3차원에서 한 면이 삼각형 이상의 다각형이 되므로 여기서 2개만의 방향벡터를 설정하는 것이 어려우며 또한 각 격자점에 해를 내삽시키는 데에도 많은 문제점을 포함하고 있다. 세 번째 방법은 ds_j 방향의 $d\phi$ 는 사용하고, $\nabla\phi_j$ 의 나머지 성분은 경계면을 공유하는 인접한 두 셀 중심에서 구한 $\nabla\phi$ 를 거리 가중평균 또는 산술평균하여 사용하는 것[1-5]으로, 일반적으로 표현하면 다음과 같이 된다.

$$\begin{aligned}
 D_j &= \Gamma_{\phi_j} [f_j (\phi_{P_j} - \phi_{P_0}) \\
 &\quad + ((\nabla\phi)_j \cdot S_j - f_j (\nabla\phi)_j \cdot ds_j)]
 \end{aligned}
 \tag{8}$$

여기서 우변 첫 번째 항은 주확산항(primary diffusion term)이고, () 안의 항은 교차 (또는 이차)확산항(cross or secondary diffusion term)으로, 해의 안정적인 수렴성을 위해 일반적으로 주확산항은 직각격자계에서와 같이 내재적으로 처리하고, 교차확산항은 지연수정(deferred-correction)방법을 사용하여 생성항에 첨가시키는 수치해석 방법이 수치 안정성면에서 우수하기 때문에 일반적으로 널리 사용되고 있다.

한편, 식 (8)에서 f_j 항은 기하학적 요소로 연구자에 따라 다른 표현이 사용되고 있다. 즉, Demirdzic-Muzafertija[1] 및 Ferziger-Peric[2] (이하 DM 방법)은 직각격자계에서와 같이 단순하게 아래 표현을 사용하고 있으나,

$$f_j = \frac{S_j}{|ds_j|}
 \tag{9}$$

Mathur-Murthy[4] 및 Zwart et al.[5](이하 MM 방법)은 셀 면을 공유하는 인접한 두 셀의 중심을 잇는 선과 셀 면 사잇각이 0이 아닌 비직교성까지 고려하여 다음 표현을 사용하고 있다.

$$f_j = \frac{S_j}{ds_j \cdot \hat{n}}
 \tag{10}$$

이 기하학적 요소 f_j 에 대한 평가는 셀 면에 수직인 단위 벡터를 Fig. 2와 같이 분리하여 식 (8)의 형태를 유도해봄으로써 확인할 수 있다. 즉, Fig. 2에서 \hat{n} 과 \hat{s} 를 셀 면에 수직인 단위벡터 및 두 셀 P_0 및 P_j 의 중심을 잇는 직선 ds_j 의 단위 벡터라고 할 때, 그림에서와 같이 \hat{n} 은 $\alpha\hat{s}$ 와 $\hat{n} - \alpha\hat{s}$ 의 두 성분으로 나눌 수 있으며, 이 경우 $(\nabla\phi)_j \cdot \hat{n}$ 은 다음과 같이 된다.

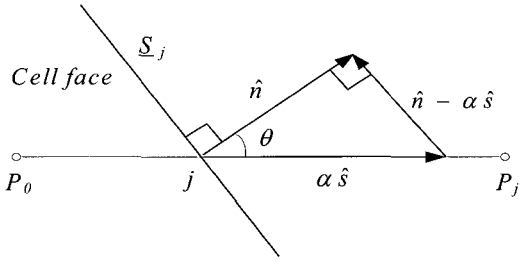


Fig. 2 Splitting of unit face normal vector

$$(\nabla\phi)_j \cdot \hat{n} = (\nabla\phi)_j \cdot \alpha\hat{s} + (\nabla\phi)_j \cdot (\hat{n} - \alpha\hat{s}) \quad (11)$$

식 (11)에서 우변의 첫 번째 항은 통상적인 방법으로 ϕ_{P_0} 및 ϕ_{P_j} 를 이용하여 직접 차분하고, 두 번째 항은 뒤에서 기술하는 바와 같이 두 셀 중심에서 구한 $\nabla\phi$ 를 사용하여 구하는 것으로 하면 다음과 같이 표현된다.

$$(\nabla\phi)_j \cdot \hat{n} = (\overline{\nabla\phi})_j \cdot \alpha\hat{s} + (\overline{\nabla\phi})_j \cdot (\hat{n} - \alpha\hat{s}) \quad (12)$$

여기서,

$$(\overline{\nabla\phi})_j \cdot \alpha\hat{s} = \alpha \frac{\phi_{P_j} - \phi_{P_0}}{ds_j} \quad (13)$$

만일 $\hat{n} - \alpha\hat{s}$ 벡터가 셀 면과 평행하다면 \hat{n} 과 $\hat{n} - \alpha\hat{s}$ 는 직교하므로 $\alpha = 1/\hat{s} \cdot \hat{n}$ 이 되며, 식 (12)에 다음 관계식을 대입하여 정리하면,

$$\alpha = \frac{1}{\hat{s} \cdot \hat{n}} = \frac{\hat{n} \cdot \hat{n}}{\hat{s} \cdot \hat{n}} = \frac{ds_j S_j}{ds_j \cdot S_j} \cdot \hat{n} \quad (14)$$

결과적으로 셀 면에서의 $(\nabla\phi)_j^*$ 는 다음과 같이 구해진다.

$$(\nabla\phi)_j^* = (\phi_{P_j} - \phi_{P_0}) \frac{S_j}{ds_j \cdot S_j} + [(\overline{\nabla\phi})_j - ((\overline{\nabla\phi})_j \cdot ds_j) \frac{S_j}{ds_j \cdot S_j}] \quad (15)$$

참고로, S_j 와 ds_j 의 사잇각이 0인 직각격자인 경우 식 (15)는 아래 식 (16)과 같이 나타내어져, 결과적으로 확산플럭스는 우변 첫 번째 항만으로 이루어져 직각격자에서 유한차분

으로 이산화된 식과 일치하며, 이 경우 기하학적 요소를 나타내는 식 (9)와 식 (10)은 일치하게 된다.

$$(\nabla\phi)_j^* = \frac{\phi_{P_j} - \phi_{P_0}}{ds_j} \hat{n} + [(\overline{\nabla\phi})_j - (\overline{\nabla\phi})_j \cdot \hat{n}] \hat{n} \quad (16)$$

그러나 일반적인 격자에서는 식 (15)를 사용하여 확산플럭스 D_j 를 구할 수 있으며, 결과적으로 다음과 같이 된다.

$$D_j = (\phi_{P_j} - \phi_{P_0}) \frac{\Gamma_j S_j}{ds_j \cdot \hat{n}} + \Gamma_j [(\overline{\nabla\phi})_j \cdot S_j - ((\overline{\nabla\phi})_j \cdot ds_j) \frac{S_j}{ds_j \cdot \hat{n}}] \quad (17)$$

결과식 (17)을 일반적인 표현식 (8)과 비교해 보면 기하학적 요소 f_j 는 일반적인 비직교성까지 고려한 식 (10)과 같이 구하는 것이 보다 적절하다는 사실을 확인할 수 있다. 또한 기하학적 요소 f_j 는 이산화방정식의 계수로 반영되므로 비직교성이 큰 경우 식 (10)의 형태는 식 (9)에 비해 결과적으로 대각선성분의 값을 크게 하는 역할을 하므로 수치안정성 면에서도 더 우수하다고 볼 수 있으며, 이러한 관점에서 기하학적 요소로 식 (9)를 사용하는 DM 방법[1,2]은 비직교성이 큰 격자계에서는 뒤에 기술하는 바와 같이 수치안정성 면에서 문제가 있을 수 있다.

한편, 식 (15) (또는 식 (8))는 대부분의 상용 CFD 코드에서 사용되는 가장 일반적인 근사방법이나, 몇 가지 점에서 문제를 가지고 있다. 먼저, 이 식은 점 P_0 와 점 P_j 를 잇는 선분이 셀 면 중심을 지난다는 가정 하에서 얻어진 식으로 이 경우에는 2차 정확도를 가질 것이나, 일반적으로 격자가 불규칙하던지 찌그러짐(skewness)이 존재하면 점 P_0 와 점 P_j 를 잇는 선분은 셀 면 중심을 지나지 않으며, 이 경우 식 (15)에 사용되는 $(\nabla\phi)_j$ 는 Fig. 3에서 보는 바와 같이 셀 면과만나는 점 P_j^* 에서만 2차 정확도를 가진다. 따라서 식 (15)를 사용하여 면적 적분한 식 (17)로 얻어지는 값은 더 이상 2차 정확도를 보장하지 않게 된다.

다음으로, 식 (15)에서 우변 교차확산항의 첫 번째에 나타나는 셀 면서의 종속변수의 구배 $(\overline{\nabla\phi})_j$ 에 대해서 연구자에 따라 셀 면을 공유하는 두 인접 셀 중심에서 구한 구배 값 $\nabla\phi$ 의 평균값[4,5] 또는 다음 식과 같이 $\nabla\phi$ 의 거리 가중평균값[1-3]을 사용하고 있으며,

$$\overline{\nabla\phi}_j = w_j \nabla\phi_{P_0} + (1 - w_j) \nabla\phi_{P_j} \quad (18)$$

식 (15)의 우변 교차확산항의 두 번째에 나타나는 $(\overline{\nabla\phi})_j \cdot ds_j$ 항은 모든 연구자들이 다음과 같이 표현하고 있다[1-5].

$$\begin{aligned} (\overline{\nabla\phi})_j \cdot ds_j = & [(\nabla\phi)_{P_0} \cdot (r_j - r_{P_0}) \\ & + (\nabla\phi)_{P_j} \cdot (r_{P_j} - r_j)] \end{aligned} \quad (19)$$

한편, 일반적으로 경계면에서의 확산 플럭스 D_j 는 연구자들 모두 내부 경계면에서 구하는 식 (17)과 유사하게 다음과 같이 표현하고 있다[1-5].

$$\begin{aligned} D_b = & (\phi_{P_0} - \phi_{P_b}) \frac{\Gamma_{\phi_b} S_b}{ds_b \cdot \hat{n}} + \\ & \Gamma_{\phi_b} [(\nabla\phi)_{P_0} \cdot S_b - ((\nabla\phi)_{P_b} \cdot ds_b) \frac{S_b}{ds_b \cdot \hat{n}}] \end{aligned} \quad (20)$$

그런데 이 경우 두 인접 셀 중심에서 구한 구배값 $\nabla\phi$ 의 평균값을 사용하는 방법[4,5]은 경계면에서 논리적으로 문제가 없다. 그러나 식 (18)과 같이 거리 가중평균값을 사용하는 통상적인 방법[1-3,6]은 경계면에서는 식 (18)의 ω_j 값이 0이 되어 식 (20)의 표현을 얻을 수 없게 되어 논리적인 모순점을 가지고 있으며, 또한 격자가 불규칙하던지 찌그러짐(skewness)이 존재하여 점 P_0 와 점 P_j 를 잇는 선분이 셀 면 중심을 지나지 않는 경우 거리 가중평균을 식 (7)과 같이 구할 수 있는지에 대한 명확한 근거가 없게 된다.

3. 새로운 확산항 근사방법

본 연구에서는 확산플럭스 D_j 가 불규칙적인 격자에서도 2차 정확도를 가지면서도 용이하게 CFD 코드에 접목시켜 사용할 수 있는 새로운 근사방법을 제안하기로 한다. 이 방법은 Fig. 3에서 보는 바와 같이 셀 면 중심을 지나고 셀 면에 수직한 선분과 점 P_0 와 점 P_j 를 통과하고 셀 면에 평행한 선분이 만나는 보조점 P'_0 와 P'_j 점에서의 값을 사용하여 구해지며, 기본적으로 Ferziger-Peric[2]이 정렬격자계에 대해 제시한 개념을 비정렬격자계에 맞게 다소 수정하고 확장한 것이다. 즉, 이 두 점의 값을 사용하면 셀 면 중심에서의 수직구배는 통상의 중심차분으로 다음과 같이 근사시킬 수 있다.

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_j \approx \frac{\phi_{P'_j} - \phi_{P'_0}}{L_{P'_j, P'_0}} \quad (21)$$

여기서 $L_{P'_j, P'_0}$ 는 보조점 P'_0 와 P'_j 사이의 거리, 즉

$L_{P'_j, P'_0} = |r_{P'_j} - r_{P'_0}|$ 이며, $\phi_{P'_j}$ 및 $\phi_{P'_0}$ 의 값은 각각 다음과 같이 셀 중심에서의 구배값을 사용해서 구한다.

$$\phi_{P'_0} = \phi_{P_0} + (\nabla\phi)_{P_0} \cdot (r_{P'_0} - r_{P_0}) \quad (22)$$

$$\phi_{P'_j} = \phi_{P_j} + (\nabla\phi)_{P_j} \cdot (r_{P'_j} - r_{P_j}) \quad (23)$$

Ferziger-Peric[2]은 식 (8)의 우변 교차확산항의 두 번째에 나타나는 $(\overline{\nabla\phi})_j \cdot ds_j$ 항은 식 (20)의 형태를 그대로 사용하면서 우변 교차확산항의 첫 번째에 나타나는 셀 면에서의 종속변수의 구배 $(\overline{\nabla\phi})_j$ 을 구하기 위해 식 (21)을 사용하면 2차 정확도를 가진다고 기술하고 있으나, 이들이 제안한 식은 앞에서 기술한 바와 같이 기하학적 요소 f_j 값이 적절하지 못하며, 또한 이 항 전체를 지연수정항으로 처리한다고 기술하고 있다.

본 연구에서는 확산플럭스 D_j 가 불규칙적인 격자에서도 2차 정확도를 가지도록 하기 위해, 2차 정확도를 가지는 식 (21)에 아래에 기술하는 바와 같이 기하학적 관계를 대입하여 결과적으로 식 (8)과 같이 주확산항과 교차확산항의 형태로 유도함으로써, 해의 수렴성 면에서 안정적인 내재적인 항과 지연수정항을 모두 가지는 형태를 제시한다. 즉, 보조점 P'_0 와 P'_j 에서의 위치벡터는 그림으로부터 다음과 같이 용이하게 구할 수 있다.

$$r_{P'_0} = r_j - [(r_j - r_{P_0}) \cdot \hat{n}] \hat{n} \quad (24)$$

$$r_{P'_j} = r_j - [(r_j - r_{P_j}) \cdot \hat{n}] \hat{n} \quad (25)$$

그런데 $L_{P'_j, P'_0}$ 는 식 (24)와 식 (25)로부터 다음과 같이 표현될 수 있으므로,

$$L_{P'_j, P'_0} = (r_{P'_j} - r_{P'_0}) \cdot \hat{n} = ds_j \cdot \hat{n} \quad (26)$$

결과적으로 식 (21)은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\phi}{\partial n}\right)_j = & \frac{(\phi_{P'_j} - \phi_{P'_0})}{ds_j \cdot \hat{n}} \\ & + \frac{(\nabla\phi)_{P_j} \cdot [(r_j - r_{P_j}) - [(r_j - r_{P_j}) \cdot \hat{n}] \hat{n}]}{ds_j \cdot \hat{n}} \\ & - \frac{(\nabla\phi)_{P_0} \cdot [(r_j - r_{P_0}) - [(r_j - r_{P_0}) \cdot \hat{n}] \hat{n}]}{ds_j \cdot \hat{n}} \end{aligned} \quad (27)$$

따라서 결과 식 (27)을 사용하여 2차 정확도를 가지는 확산플럭스 D_j 는 다음과 같이 직접 구해질 수 있다.

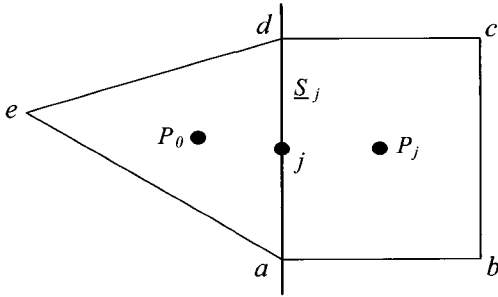


Fig. 4 Schematic diagram for calculation of cell face gradients

$$D_j = \Gamma_{\phi_i} \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)_j S_j \quad (28)$$

참고로, 식 (27)의 식 형태는 용이하게 CFD 코드에 접목시켜 사용할 수 있는 형태로, 기존의 확산항 처리방법과 마찬가지로 수치안정성 면에서 우변 첫 번째 항은 내재적으로 처리하고, 나머지 항들은 지연수정 방법을 사용하여 생성항에 첨가시키는 방법을 사용하면 된다.

그런데, 식 (27)을 식 (7)의 기하학적 성질을 이용하여 기존의 식 형태로 나타내면 결과적으로 식 (28)의 2차 정확도를 가지는 확산플럭스 D_j 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$D_j = (\phi_{P_j} - \phi_{P_0}) \frac{\Gamma_{\phi_j} S_j}{ds_j \cdot \bar{n}} + \Gamma_{\phi_j} [(1 - \omega_j)(\nabla \phi)_{P_0} + \omega_j(\nabla \phi)_{P_j}] \cdot S_j - \Gamma_{\phi_j} [(\nabla \phi)_{P_0} \cdot (r_j - r_{P_0}) + (\nabla \phi)_{P_j} \cdot (r_{P_j} - r_j)] \frac{S_j}{ds_j \cdot \bar{n}} \quad (29)$$

식 (29)가 본 연구에서 새롭게 제안하는 확산항 근사방법으로, 이 식은 형태상으로는 기존의 식 (17)과 유사하나, 몇 가지 새로운 사실을 제시하고 있다. 첫째, 식 (29)는 등간격이고 점 P_0 와 점 P_j 를 잇는 선분이 셀 면 중심을 지나는 경우 식 (17)과 정확히 일치한다. 둘째, S_j 와 ds_j 의 사이각이 0인 직각각자인 경우 식 (27)로부터 명확하게 알 수 있듯이 식(29)의 첫 번째 항만 남아 결과적으로 확산플럭스가 직각각자에 대해서 유한차분으로 이산화한 식과 일치하게 된다. 셋째, 식 (29)에 나타나는 거리가중 평균을 격자가 불규칙하던지 찌그러짐(skewness)이 존재하여 점 P_0 와 점 P_j 를 잇는 선분이 셀 면 중심을 지나지 않는 경우에도 식 (7)과 같이 구할 수 있게 되어 코드에 적용하기 용이하다. 넷째, 식 (29)는 일반적인 확산플럭스에 대한 표현식인 식 (8)의 우변 교차확산항의 첫 번째에 나타나는 셀 면에서의 종속변수의 구배

$(\overline{\nabla \phi})_j$ 를 셀 면을 공유하는 두 인접 셀 중심에서 구한 구배값 $\nabla \phi$ 의 평균값[4,5] 또는 거리 가중평균값[1-3]을 사용하고 있는 기존의 방법과는 달리 다음과 같이 구해야함을 제시하고 있다.

$$(\overline{\nabla \phi})_j = (1 - w_j)(\nabla \phi)_{P_0} + w_j(\nabla \phi)_{P_j} \quad (30)$$

식 (30)은 다소 의외의 새로운 형태이나, 이 식을 사용하면 경계면에서도 논리적인 모순 없이 자연스럽게 식 (20)이 성립한다. 또한, 이 식 형태는 가우스정리를 사용해서 다음과 같이 설명할 수 있다. 즉, Fig. 4에 나타난 바와 같이 경계면 j 를 공유하는 두 인접 셀 각각에 대해 가우스정리를 이용하여 더하면 다음 관계식이 얻어진다.

$$V_{P_0}(\nabla \phi)_{P_0} + V_{P_j}(\nabla \phi)_{P_j} = \sum_f (\bar{\phi} \cdot S)_f \quad (31)$$

위 식에서 f 는 두 셀이 공유하는 경계면 j 를 제외한 두 셀에서의 모든 셀 표면을 의미한다. 또한, 경계면 중심에서의 구배값을 두 셀 전체에 대한 대표값으로 가정하고 두 셀 전체에 대해 다시 가우스정리를 사용하면 아래의 식이 얻어지며,

$$(\overline{\nabla \phi})_j (V_{P_0} + V_{P_j}) = \sum_f (\bar{\phi} \cdot S)_f \quad (32)$$

이 두 식으로부터 경계면 중심에서의 구배값은 다음과 같이 되고,

$$(\overline{\nabla \phi})_j = \frac{V_{P_0}(\nabla \phi)_{P_0} + V_{P_j}(\nabla \phi)_{P_j}}{V_{P_0} + V_{P_j}} \quad (33)$$

1차원 또는 직사각형 격자계인 경우 식 (30)과 같이 되어 이 식의 타당성을 입증하고 있다. 넷째로, 식 (29)는 기존의 형태인 식 (8)에서 $(\overline{\nabla \phi})_j \cdot ds_j$ 항이 일반적으로 다음과 같이 되어야함을 제시하고 있다.

$$[(\nabla \phi)_{P_0} \cdot (r_j - r_{P_0}) + (\nabla \phi)_{P_j} \cdot (r_{P_j} - r_j)] = (\overline{\nabla \phi})_j \cdot ds_j + [(\nabla \phi)_{P_0} - (\nabla \phi)_{P_j}] \cdot (r_j - r_j) \quad (34)$$

식 (34)는 점 P_0 와 점 P_j 를 잇는 선분이 셀 면 중심을

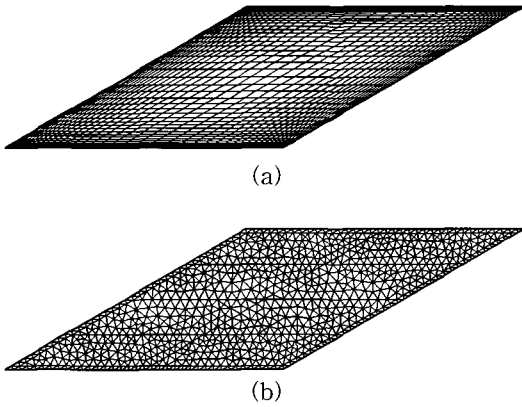


Fig. 5 Segments of grid used for heat conduction in a skewed plate ($\theta = 30^\circ$). (a) quadrilateral mesh, (b) triangular mesh

지나든지, 인접 셀 중심의 구배값이 같은 경우에는 기존의 방법[1-5]인 식 (19)와 일치함을 나타내고 있다. 그러나 점 P_0 와 점 P_j 를 잇는 선분이 셀 면의 중심을 지나지 않는 일반적인 경우에는 식 (34)와 같이 되어 기존의 식 (8)에서 셀 면 종속변수의 구배를 나타내는 두 개의 $(\nabla\phi)_j$ 가 다르게 표현 되어야함을 제시하고 있으며, 이러한 사실은 비록 결과 식 형태는 다르나 기존 연구[1]에서도 언급되고 있다.

본 연구에서 새롭게 제안한 비정렬 셀 중심 방법에서의 확산항 근사방법을 평가하기 위해 Fig. 5와 같이 바닥면과 30° 기울어진 수직벽을 가지는 이차원 물체에 대한 순수 열전도문제를 선택하였다. 그림에서 왼쪽 경사진 수직벽이 고온이고, 오른쪽벽은 저온이며, 위아래면은 단열되어있다. 또한 격자의 비직교성 및 찌그러짐이 매우 크도록 격자수는 Fig. 5(a)와 같이 40 x 40 CV인 비등간격 사각형 격자계와 Fig. 5(b)와 같이 사각형 격자와 비슷한 1558 CV인 비정렬삼각형 격자계를 사용하여 계산하고, 각각의 격자계에 대해 확산항 근사방법에 따른 해의 수렴성 및 상대적인 정확도를 조사하였다. Table. 1은 고온 벽면에서의 무차원 열플럭스 결과를 나타내며, 수학적으로 이 값은 경사진 두 벽면을 포함해 벽면에 평행한 모든 단면선상에서 1이 되어야한다. 참고로, 격자계 형상에 따른 제약으로 경사진 두 벽면을 포함해 벽면에 평행하고 두 벽면의 중앙에 위치하는 단면에서 계산된 무차원 열플럭스 값을 조사한 결과 Table. 1에 나타낸 값과 유효숫자 범위내에서 일치함이 확인되었으며, 이는 모든 근사방법이 보존성(conservative property)을 만족하고 있음을 의미한다. Table. 1에 제시된 결과를 보면 각 근사방법의 정확도는 격자계 형태에 다소 의존하는 경향을 보여 정확도면에서 우열을 나타내기 어려우나, 전체적으로는 모두 받아들일 수 있는 정

도의 정확도를 나타내고 있다고 판단된다. 그러나 DM 방법 [1,2]은 비직교성이 상대적으로 더 큰 사각형 격자계에서 수렴이 되지 않고 발산하는 것으로 나타나, 이 방법은 수치 안정성(수렴성)에 문제가 있음을 알 수 있으며, 이것의 주된 원인은 이 방법에서 채용하고 있는 식 (9)의 기하학적 요소 형태에 있다고 판단된다. Table. 1에서 수정 DM 방법은 단지 기하학적 요소로 원래의 식(9) 대신에 MM 방법 및 본 연구에서 제시한 방법에서 사용하는 식 (10)을 사용한 것으로 이 경우에는 수렴성 및 정확도면에서도 타당한 결과를 나타내고 있어 이러한 사실을 입증하고 있다. 이 결과로부터 기하학적 요소 f_j 는 일반적인 비직교성까지 고려한 식 (10)과 같이 구하는 것이 타당함을 확인할 수 있다.

한편 세가지 확산항 근사방법이 거의 동등한 결과를 제시하는 것은 다음과 같이 설명할 수 있다. 즉, 확산항 근사식의 일반적인 표현인 식 (15)를 달리 표현하면 다음과 같으며,

$$(\nabla\phi)_j^* = \overline{(\nabla\phi)_j} + [(\phi_{P_j} - \phi_{P_0}) - \overline{(\nabla\phi)_j} \cdot ds_j] \frac{S_j}{ds_j \cdot S_j} \tag{35}$$

위식은 다음과 같이 설명할 수 있다[1]. 즉, 우변 첫 번째 항은 공간적으로 2차 중심차분으로 되나, 수치격자 특성길이의 2배에 해당하는 주기를 가진 진동을 감지할 수 없어, 결과적으로 물리적으로 불합리한 진동분포가 생길 수 있다. 이러한 불합리한 진동해를 방지하기 위해 식 (35)의 []내에 나타낸 3차의 확산항이 추가적으로 도입되었으며, 이 항은 일단 수렴된 해가 얻어지면 ϕ 의 공간 분포가 선형 또는 2차 곡선일 때는 사라질 것이며, 그렇지 않더라도 그것의 크기는 2차 도식의 절단오차에 비례하므로 제시한 이산화방법의 거동에 영향을 미치지 않을 것이다. 이러한 관점에서 보면 셀 면서의 종속변수의 구배 $(\nabla\phi)_j$ 를 구하는데 있어 기존의 방법인 셀 면을 공유하는 두 인접 셀 중심에서 구한 구배 값 $\nabla\phi$ 의 평균값[4,5] 및 식 (18)과 같은 $\nabla\phi$ 의 거리 가중평균값[1-3]을 취하는 방법과 본 연구에서 제시한 식 (30)을 사용하는 경우가 결과면에서 큰 차이를 나타내고 있지 않다고 사료된다.

Table. 1 Predicted Non-dimensional Heat Flux at Sloped Hot Wall.

Approx. method of diffusion flux	Quadrilateral mesh	Triangular mesh
Present	1.00342	1.00876
DM[1,2]	diverge	1.00737
MM[3,4]	1.00477	1.00780
Modified DM	1.00614	1.00760

참고로, 본 연구에서 새롭게 제안한 비정렬 셀 중심 방법에서의 확산항 근사방법을 적용한 수치해석 결과를 통한 추가적인 유용성 확인은 본 논문에서는 생략하나 삼각형 및 사각형 등 다양한 비정렬격자계를 사용하여 해석하고, 기존의 검증용 해와 비교분석한 정사각형 캐비티내 고레이놀즈수 판구동(lid-driven) 유동[7] 및 열전도 물체가 존재하는 캐비티내 자연대류 열전달[8]을 포함하여 Demirdzic 등[9]이 비직교격자를 사용하는 경우의 계산정확도를 평가하기 위하여 선택한 유동인 바다벽면에 대해 기술어진 측(수직) 벽을 가지는 이차원 캐비티내의 판구동 및 부력구동(buoyancy-driven) 층류유동과 이차원 사각형 닥트 내에 놓여있는 실린더 주위의 층류 자연대류 유동 등 복잡한 형상을 가지는 2차원 열/유체 유동[10]에 대한 연구결과를 통해 확인되었다.

4. 결 론

본 연구에서는 현재 셀 중심 비정렬격자계를 사용하는 수치해석방법에서 제안되어 있으며 상용 CFD 코드에 적용되어 널리 사용되고 있는 대표적인 확산항 수치근사에 대해 제기되는 불명확한 점을 상호 비교분석을 통해 명확히 하고, 불규칙적이고 여러 가지 형상을 가지는 격자에서도 2차 정확도를 가지면서도 용이하게 코드에 접목시켜 사용할 수 있는 새로운 확산플럭스 근사방법을 제안하였다. 특히, 본 연구를 통해 확산플럭스의 수치근사 식에서 셀 면을 공유하는 인접한 두 셀의 중심을 잇는 선과 셀 면 사잇각이 0이 아닌 비직교성을 가진 일반적인 경우에도 수치 안정성 및 정확도면에서 우수한 성능을 발휘하는 기하학적 요소에 대한 표현을 이론적 및 수치해석적으로 명확히 하였다.

후 기

본 연구는 2005년도 국민대학교 교내연구비를 지원받아 수행된 연구이다.

참고문헌

- [1] Demirdzic, I. and Muzafertija, S., 1995, "Numerical Method for Coupled Fluid Flow, Heat Transfer and Stress Analysis using Unstructured Moving Meshes with Cells of Arbitrary Topology," *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol.125, p.235-255.
- [2] Ferziger, J.H. and Peric, M., 2002, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 3rd ed., Springer.
- [3] Muzafertija, S., 1994, "Adaptive Finite Volume Method for Flow Predictions using Unstructured Meshes and Multigrid Approach," *PhD Thesis, University of London*.
- [4] Mathur, S.R. and Murthy, J.Y., 1997, "A Pressure-Based Method for Unstructured Meshes," *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol.31, p.195-215.
- [5] Zwart, P.J., Raithby, G.D. and Raw, M.J., 1999, "The Integrated Space-Time Finite Volume Method and its Application to Moving Boundary Problems," *J. Comp. Physics*, Vol.154 p.497-519.
- [6] Davidson, L., 1996, "A Pressure Correction Method for Unstructured Meshes with Arbitrary Control Volumes," *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Vol.22, p.265-281.
- [7] 명현국, 2005, "정사각 캐비티내 고레이놀즈수 Lid-Driven 유동의 수치해석," *한국전산유체공학회지*, 제10권, 제4호, p.18-23.
- [8] 명현국, 전태현, 2005, "열전도 물체가 존재하는 캐비티내 자연대류 열전달에 대한 수치적 연구," *한국전산유체공학회지*, 제10권, 제3호, p.36-42.
- [9] Demirdzic, I., Lilek, Z. and Peric, M., 1992, "Fluid Flow and Heat Transfer Test Problems for Non-Orthogonal Grids: Bench-Mark Solutions," *Int. J. Numer. Methods Fluids*, Vol.15, p.329-354.
- [10] 명현국, 김종태, 김중은, 2005, "비정렬격자계를 사용하는 3차원 유동해석코드 개발 (II) -코드성능평가," *대한기계학회논문집 B권*, 제29권, 제9호, p.1057-1064.