

수치 해석적, 준 해석적 및 해석적 방법을 통합한 새로운 입자추적기술 개발

석 희 준*

한국지질자원연구원

Development of new integrated particle tracking techniques combining the numerical method, semi-analytical method, and analytical method

Heejun Suk*

Korea Institute of Geoscience and Mineral Resources

ABSTRACT

In this study, new integrated particle tracking algorithm was developed to reduce the inherent problem of Eulerian-Lagrangian method, or adverse effect of particle tracking error on mass balance error. The new integrated particle tracking algorithm includes numerical method, semi-analytical method, and analytical method which consider both temporal and spatial changes of velocity field during time step. Detail of mathematical derivations is well illustrated and four examples are made to verify through the comparison of the new integrated particle tracking with analytical solution or Runge-Kutta method. Additionally, It was shown that the there is better superiority of the new integrated particle tracking algorithm over other existing particle tracking method such as Lu's method.

Key words : Integrated particle tracking method, Numerical method, Semi-analytical method, Analytical method, Lu's method

요 약 문

본 연구를 통해서 윌러리안-라그랑지안 방법(ELM)의 본질적인 문제점인 입자추적오차에 의해 발생하는 질량오차를 최소화하기 위해서, 새로운 통합 입자 추적 방법이 개발되었다. 새로운 통합입자 추적 방법은 시간 간격 내에서 시공간의 속도변화를 동시에 고려한 수치 해석적 방법, 준해석적 방법, 그리고 해석적 방법을 결합시킨 것이다. 수치 해석적 방법, 준해석적 방법, 그리고 해석적 방법의 수학적 유도를 자세히 나타내었고, 네 가지 예제를 만들어서 개발된 통합입자추적방법을 해석해 및 4차 룬지쿠타 방법과의 비교를 통해서 검증하였을 뿐만 아니라 기존의 입자추적방법인 Lu의 방법과 비교를 통해서 우수성을 보였다.

주제어 : 통합적 입자 추적 방법, 수치해석적 방법, 준해석적방법, 해석적 방법, Lu 방법

1. 서 론

지하수 오염물 거동 문제를 수치적으로 풀기 위해 윌러리안 방법(Eulerian method)과 윌러리안-라그랑지안 방법(Eulerian-Lagrangian method)이 주로 사용된다. 윌러리안

방법은 이송항과 확산항을 한꺼번에 유한요소법(FEM)이나 유한차분법(FDM), 혹은 유한체적법(FVM)을 이용하여 풀며, 윌러리안-라그랑지안 방법은 이송항과 확산항을 분리하여 이송항은 역추적 알고리즘을 활용하여 풀고, 확산항은 유한요소법이나 유한차분법, 혹은 유한체적법을 이

*Corresponding author : sxh60@kigam.re.kr

원고접수일 : 2008. 8. 29 심사일 : 2008. 9. 6 게재승인일 : 2008. 12. 26

질의 및 토의 : 2009. 2. 28 까지

용하여 푼다. 전통적으로 율러리안 방식은 Courant number에 의해 제약을 받기 때문에 연산을 효율적으로 수행하는데 많은 제약을 갖고 있으나, 율러리안-라그랑지안 방식은 Courant number의 수치적 제약으로부터 훨씬 자유로움으로 연산 효율적으로 오염물 거동을 계산할 수 있다(Baptista et al., 1984; Baptista, 1987; Douglas and Russell, 1982; Williamson and Rasch, 1988; Leonard, 1988; Leonard and Mokhtari, 1990; Yeh, 1990; Suk and Yeh, 2007; 석희준, 2006). 그러나 이러한 수치적인 장점에도 불구하고 율러리안-라그랑지안 방법은 질량을 보존하지 못하기 때문에, 활용 면에서 크게 제약을 받고 있다(Celia et al., 1990; Russell, 1990; Healy and Russell, 1998; 석희준, 2006). 율러리안-라그랑지안 방법의 질량오차는 크게 네 가지 원인으로부터 비롯된다(Oilveria and Baptista, 1998): 첫째, 특성선의 부정확한 입자추적, 둘째 비보존흐름장작용, 셋째 특성선을 따라 후향입자추적을 수행하여 얻은 목표점에서의 농도 내삽 오차, 마지막으로 정확한 경계조건 시행의 어려움에 기인한다. Oliveria와 Baptista(1998)는 입자추적오차가 오염물거동의 농도 해에 미치는 심각한 오류들에 대해 상세하게 연구하였다.

현재까지 주로 사용된 입자추적 방법들은 크게 세 가지로 구분된다: 해석적 방법(analytical method), 준해석적 방법(Semi-analytical method), 수치해석적 방법(Numerical method). 해석적 방법은 유동함수를 해석적으로 푸는 방법으로 어떠한 수치오차도 가지고 있지 않다는 장점이 있으나, 적용 분야가 극히 제한되어 있다(Bear, 1979). 준해석적 방법은 널리 사용되는 방법으로서 셀 내에서 x , y , z 방향 중 한 방향의 속도만을 이용하여 입자추적을 실시하는 방법이다. 이 방법은 셀 내부의 추적 선에 대한 해석 식을 사용하므로 어떠한 적분오차도 포함되지 않는다(Pollock, 1988; Pollock, 1994; Lu, 1994; Konikow et al., 1996; Zheng, 1990; Goode, 1990). 그러나 이 방법은 블록중심유한차분법(Block centered finite difference method)에 국한되어 적용되고 있으며, 입자의 어느 한 속도성분을 이용하여 셀 경계를 통과할 때, 고려되지 않은 나머지 성분에서 속도의 불연속으로 인해서 크게 오차를 가질 수 있다(Bensabat et al., 2000). 특히 시공간면에서 불균질하고 비선형적인 속도장을 가질 경우 위의 두 방법은 적합하지 않다. 수치해석적 방법은 불균질하고 비선형적인 속도장을 가질 경우에 입자추적을 수행하도록 개발되었다. 그러나 대부분의 수치해석적 방법들은, 해석적 방법과 준해석적 방법들과 마찬가지로, 정류흐름만을 가정

하여 개발되었기 때문에 시간적으로 매우 불규칙한 흐름 변화를 갖는 부정류상태에서는 결과의 정확성이 크게 떨어지게 된다. 현재 가장 많이 사용되는 상용입자추적 모델들, 즉 MODFLOW와 연동된 입자추적 프로그램인 MODPATH에 사용되는 Pollock 방법(Pollock, 1994), MOC3D에 사용되는 Zheng 방법(Zheng, 1990), MT3D에 사용되는 Konikow 방법(Konikow et al., 1996), 3DFEMWATER/3DLEWASTE에 사용되는 Yeh 방법(Yeh et al., 1992), Cheng 방법(Cheng et al., 1996)들은 모두 정류 흐름만을 가정하여 개발된 것이다. 한편, Lu(1994)는 시간에 따른 속도변화를 고려하는 입자추적 방법을 개발하기 위해서, 시간간격 내에서 시간에 따른 속도의 선형변화를 고려하도록, MODFLOW의 후처리기인 Pollock 방법(Pollock, 1994)을 개선하였고, 비정류상태에서 Lu 방법이 Pollock 방법보다 5배에서 15배 정확한 결과를 도출하였다고 보고하였다.

본 연구에서는 입자추적오차를 최소화하기 위해서, 새로운 통합 입자 추적 알고리즘을 개발하였다. 본 통합 입자추적 알고리즘은 해석해와 비교를 통해서 검증되었고, Pollock 방법을 개선한 Lu 방법(Lu, 1994)과 비교함으로써 본 통합 입자 추적 알고리즘의 우수성을 나타내고자 하였다. 본 통합 입자 추적 알고리즘은 시간 간격 내에서 시공간의 속도변화를 동시에 고려하는 수치 해석적 방법, 준 해석적 방법, 그리고 해석적 방법을 개발하여, 결합시킨 것이다.

2. 통합입자추적알고리즘

통합입자추적알고리즘은 시간간격 내에서 시공간의 속도변화를 동시에 고려한 수치 해석적 방법, 준 해석적 방법, 그리고 해석적 방법을 결합한 알고리즘으로서, 특정한 지하수 유동체제에 따라 세 방법 중 가장 정확하고 효율적인 한 가지 방법을 찾아 입자추적을 실시하도록 개발되었으며, 다음 장에서 각각 나누어 설명하고자 한다.

2.1. 뉴우턴 랩슨 방법(Newton-Raphson method) 이용한 수치해석적 방법

본 연구에서 개발한 통합입자추적 알고리즘 중 첫 번째 방법은 뉴우턴 랩슨 방법을 이용한 수치해석적 입자추적 방법이다. 이 방법은 Suk and Yeh(2008)에 의해서 개발된 방법으로서, 기본적으로 Cheng et al.(1996)에 의해서 개발된 알고리즘(Cheng 방법)을 따르지만 입자추적에 사용되는 평균속도를 추정하는 방법에 차이가 있다. Cheng

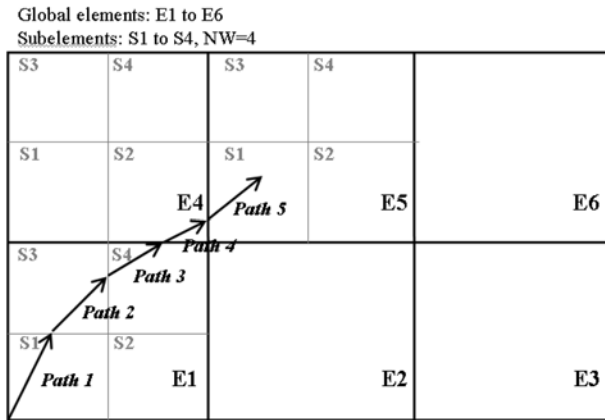


Fig. 1. A two-dimensional example (Suk and Yeh, 2008).

방법에서 평균속도는 단순히 이동시간간격의 이전 시간과 현재시간의 속도장의 산술평균이나, Suk and Yeh(2008)에 의해서 개발된 수치해석적 방법(Suk 방법)은 이동시간간격내에서 시간에 따라 변하는 속도장을 고려하기 위해서 시간의 일차 선형 내삽 방법을 이용하여 입지추적에 사용되는 평균속도를 구함으로 시간간격 내에서 시간에 따른 속도변화가 큰 경우, 입지추적의 정확성을 크게 높였다. 본 연구에서는 Suk 방법을 간략히 소개하였으며, 자세한 내용은 Suk and Yeh(2008)에 잘 나타나 있다.

임의의 시간간격 내에서 시간에 따른 속도의 변화를 고려하는 경우에 대한 입지추적 알고리즘을 설명하기 위해서 Fig. 1과 같은 이차원적인 영역에서 입지추적과정을 설명하고자 한다. Fig. 1에 따르면 입자가 요소 E1에서 경로 1, 2와 3을 따라 이동한 후에 요소 E4의 경로 4를 따라 추적하고 최종적으로 요소 E5의 경로 5로 진행한다. 여기서 입지추적방법의 첫 번째 과정은 우선 입자가 지나갈 요소를 결정하는 것이다. 이것은 입자의 시작점에서 속도와 입자 주변을 둘러싼 요소들에 있는 절점에서의 속도들과 주변 요소들의 주변을 둘러싼 면의 기하학적 형상에 의해서 결정된다. 이에 대한 자세한 설명은 Cheng et al.(1996)에 잘 나타나 있다. Fig. 1의 예제에서 첫 번째 요소 E1이 결정되면 요소 E1은 균등하게 NW 개의 부요소들과 NPW 개의 세립 절점들로 나누는 두 번째 과정을 수행한다. 이때 NW는 NXW 곱하기 NYW로 계산되고, NPW는 NXW+1 곱하기 NYW+1로 계산된다. 이때 NXW와 NYW는 각각 x와 y 방향의 사용자 정의 세립 숫자들로서, 사용자가 주요소를 많은 부요소로 나누길 원하면 NXW와 NYW를 크게 설정하면 된다. Fig. 1의 예제에서는 NXW와 NYW는 각각 2로 설정하였으므로 NW와 NPW는 각각 4와 9가 된다. 세 번째 과정은 입자

가 지나갈 부요소를 결정 하는 것으로서, 이 방법은 첫 번째 과정에서 수행하였던 주요소를 결정하는 논리와 같다. Fig. 1의 예제에 보여진 것처럼 세 번째 과정에서 부요소 S1이 결정되면 다음 네 번째 과정의 입지추적과정은 크게 다음의 두 가지 소절차를 따른다: 첫 번째 소절차는 입자가 지나갈 부요소의 목표면을 구하는 것이고, 두 번째 소절차는 첫 번째 소절차에서 결정된 부요소의 면에서 입자의 목표점을 구하는 것이다. 첫 번째 소절차에서 목표면을 구하는 자세한 절차는 Cheng et al.(1996)에 나타나 있으므로 여기서는 생략하기로 한다. 그리고 두 번째 소절차에서는 입지추적의 목표점을 뉴턴 랩슨 방법에 의해서 구하기 위해 입지추적 목적함수를 오로지 일차선형시간계수의 함수형태로 만든 후, 뉴턴 랩슨 방법을 이용하여 목표점에 도달하는데 걸리는 추적 시간과 도달 위치를 동시에 계산한다. 이에 대한 자세한 설명은 아래에 잘 나타나 있다. 상기의 네 번째 절차에서 목표점과 추적시간이 결정되면 다섯 번째 절차에서는 주어진 시간과 추적시간을 비교하여 다음 입지추적과정을 위해 남아있는 추적시간을 구한다. 만약 남아있는 추적시간이 없으면 입지추적과정은 종료되지만, 그렇지 않은 경우에는 다음 입지추적과정을 위해서 목표점과 목표점의 속도를 각각 새로운 입지추적을 위한 시작점과 시작점의 속도로 정의하고, 속도장도 흘러간 추적시간동안 변화된 정도를 고려하여 최신화 시킨다. 이상과 같이 다섯 번째 절차가 모두 끝나면 위에서 설명하였던 상기 과정을, 남아 있는 추적 시간이 모두 소모되거나 입자가 경계에 도달할 때까지 입지추적과정은 다시 되풀이 한다.

여기서는 입지추적의 목표점과 추적시간을 뉴턴 랩슨 방법에 의해서 결정하기 위해 목적함수를 유도하는 수학적 과정에 대해서 이론적으로 설명하였다. 이에 대한 자세한 설명은 Suk and Yeh(2008)에 나타나 있지만, 여기서는 전체적인 이해를 돕기 위해 간략히 설명하였다. 우선 목적함수를 유도하기 위해 추적시간과 이동거리는 다음과 같이 표현 할 수 있다.

$$\Delta x = x_q - x_p = \Delta t \cdot V_x \tag{1}$$

$$\Delta y = y_q - y_p = \Delta t \cdot V_y \tag{2}$$

$$\Delta t^* = \frac{\sqrt{(x_q - x_p)^2 + (y_q - y_p)^2}}{\sqrt{V_x^2 + V_y^2}} \tag{3}$$

여기서 $(\Delta x, \Delta y)$ 은 입지추적시간동안 이동거리이고, (x_p, y_p) 은 시작점 p 의 좌표들이고, (x_q, y_q) 은 목표점 q 의

위치를 나타낸다. (V_x, V_y) 은 평균 추적속도이다. Δt^* ($= t^* - t^n$)은 시작점 p 로부터 목표점 q 까지 추적에 의해서 소비되는 시간이다. 여기서 t^n 은 이전 단계에서의 시간이며, 입자추적단계에서 시작 시간이고, t^* 은 입자가 목표점 q 에 도달한 시점의 시간을 나타낸다. 여기서 평균추적속도는 시작점 p 와 목표점 q 의 속도들을 산술평균하여 아래와 같이 구할 수 있다.

$$V_x = \frac{1}{2}(V_{xp}^n + V_{xq}^*), \quad V_y = \frac{1}{2}(V_{yp}^n + V_{yq}^*) \quad (4)$$

여기서 (V_{xp}^n, V_{yp}^n) 은 시간 t^n 에서 시작점의 속도이고, (V_{xq}^*, V_{yq}^*) 은 시간 t^* 에서 목표점 q 의 속도이다.

이차원상에서 입자추적을 설명하기 위해서 Fig. 2와 같은 목표면상에서 목표점이 위치한 경우를 가정하였다. Fig. 2의 목표점 q 가 양끝점 1과 2를 잇는 선 구획내에 있기 때문에, 목표점은 일차선형공간내삽계수 ξ 를 사용하여 아래와 같이 나타 낼 수 있다.

$$x_q = \xi x_1 + (1-\xi)x_2, \quad y_q = \xi y_1 + (1-\xi)y_2 \quad (5)$$

여기서 (x_1, y_1) 과 (x_2, y_2) 은 각각 양 끝점 1과 2의 위치들을 나타낸다. 마찬가지로 시간 t^* 에서 목표점 q 의 속도는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$V_{xq}^* = \xi V_{x1}^* + (1-\xi)V_{x2}^*, \quad V_{yq}^* = \xi V_{y1}^* + (1-\xi)V_{y2}^* \quad (6)$$

여기서

$$V_{x1}^* = \theta V_{x1}^{n+1} + (1-\theta)V_{x1}^n, \quad V_{y1}^* = \theta V_{y1}^{n+1} + (1-\theta)V_{y1}^n \quad (7)$$

$$V_{x2}^* = \theta V_{x2}^{n+1} + (1-\theta)V_{x2}^n, \quad V_{y2}^* = \theta V_{y2}^{n+1} + (1-\theta)V_{y2}^n \quad (8)$$

여기서 (V_{x1}^*, V_{y1}^*) 과 (V_{x2}^*, V_{y2}^*) 은 각각 시간 t^* 에서 양 끝점 1과 2의 속도, $(V_{x1}^{n+1}, V_{y1}^{n+1})$ 과 $(V_{x2}^{n+1}, V_{y2}^{n+1})$ 은 각각 시간 t^{n+1} 에서 양 끝점 1과 2의 속도, (V_{x1}^n, V_{y1}^n) 과 (V_{x2}^n, V_{y2}^n) 은 각각 시간 t^n 에서 양 끝점 1과 2의 속도이다. 여기서 일차선형시간내삽계수 θ 는 다음과 같이 정의 된다.

$$\theta = \frac{t^* - t^n}{t^{n+1} - t^n} = \frac{\Delta t^*}{\Delta t} \quad (9)$$

여기서 Δt 은 주어진 추적시간이고, Δt^* 은 시작점 p 로부터 목표점 q 까지 추적하는데 소비되는 시간이다. 목표함수를 일차선형시간계수 θ 의 함수형태로 표현하기 위해서 식 (3)을 식 (1)과 (2)에 대입한 후, 일차선형공간내삽계수 ξ 를 일차선형시간내삽계수 θ 의 함수형태로 표현하고, 마

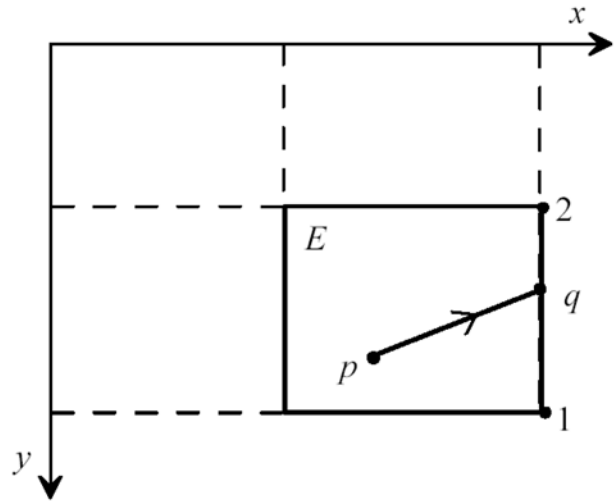


Fig. 2. Geometric representation of tracking a particle in element E from the starting point p to the target point q on the line segment 1 and 2 (Suk and Yeh, 2008).

지막으로 평균추적속도 (V_x, V_y) 를 θ 의 함수로 표현할 수 있다면, 식 (1)과 (2)는 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$F(\theta) = (x_q(\theta) - x_p) \sqrt{V_x(\theta)^2 + V_y(\theta)^2} - \sqrt{(x_q(\theta) - x_p)^2 + (y_q(\theta) - y_p)^2} \cdot V_x(\theta) = 0 \quad (10)$$

$$G(\theta) = (y_q(\theta) - y_p) \sqrt{V_x(\theta)^2 + V_y(\theta)^2} - \sqrt{(x_q(\theta) - x_p)^2 + (y_q(\theta) - y_p)^2} \cdot V_y(\theta) = 0 \quad (11)$$

여기서 $F(\theta)$ 와 $G(\theta)$ 은 각각 θ 에 대한 x 와 y 방향의 목적함수이다. 여기서 일차선형공간내삽계수 ξ 를 일차선형시간내삽계수 θ 의 함수 형태식으로 유도하는 과정과 평균추적속도, (V_x, V_y) 를 θ 의 함수로 나타내는 과정들은 Suk and Yeh(2008)에 자세히 나타나 있다. 이상과 같이 두개의 목적 함수 중에 하나에 대해 뉴턴 랩슨 방법을 이용하여 θ 을 계산한 후, ξ 과 θ 의 관계를 이용하여 ξ 를 계산하면, 목표점과 목표점에서 속도는 식 (5)와 (6)을 이용하여 각각 구할 수 있다.

2.2. 준 해석적 방법

비록 위에서 언급한 수치 해석적 입자추적과정은 수학적으로 명료하고 정연하지만 특수한 흐름 상황을 갖는 경우에는 뉴턴 랩슨 방법을 갖고 수렴 해를 구하는 것이 불가능할 수 있다. 가령 시작점과 목표점에서 속도의 방향이 서로 반대방향이면서 속도의 크기가 같은 특별한 경

우에는 일차선형시간내삽계수 θ 의 값에 상관없이 목적함수가 항상 '0'이 되기 때문에 뉴턴 랩슨 방법을 이용하여 입자추적을 수행하는 것이 불가능하다. 따라서 본 연구에서는 위의 특별한 경우를 포함하여 입자가 직선으로 이동하는 경우에 입자추적을 수행하기 위해, 준해석적 방법과 해석적 방법을 개발하였다. 따라서 입자가 직선으로 이동할 경우에 준해석적 또는 해석적 방법을 적용하고, 그렇지 않은 경우에 수치 해석적 방법을 사용하도록 하였다. 입자가 직선으로 이동하는지를 판단하기 위해서 시작점의 속도와 목표점의 이전 시간 단계의 속도와 현재 시간 단계에서의 속도방향들을 각각 검사하여야 한다. 왜냐하면 위의 세 가지 속도들의 방향이 같으면 입자가 직선으로 이동한다고 판단할 수 있기 때문이다. 위의 세 가지 속도들의 방향을 구하기 위해 입자가 직선으로 이동한다고 가정하여 우선 가상의 목표점을 구한 후, 이 지점에서의 현재 단계의 속도와 이전 단계에서의 속도들을 각각 구한다. 여기서 가상의 목표점은 시작점의 속도를 이용하여 얻은 선과 목표 면을 이루는 선의 교차점으로 하며, 가상의 목표점은 다음과 같이 정의된다.

$$x_q = \frac{m_p x_p - m_l x_1 + y_1 - y_p}{m_p - m_l},$$

$$y_q = m_p \left(\frac{m_p x_p - m_l x_1 + y_1 - y_p}{m_p - m_l} - x_p \right) + y_p$$

만약 $m_p - m_l \neq 0, VXP \neq 0, x_2 - x_1 \neq 0$ (12)

$$x_q = x_p, y_q = m_l(x_p - x_1) + y_1 \quad \text{만약 } VXP = 0, x_2 - x_1 \neq 0$$
 (13)

$$x_q = x_1, y_q = m_p(x_1 - x_p) + y_p \quad \text{만약 } VXP \neq 0, x_2 - x_1 = 0$$
 (14)

여기서 m_p 는 시작점에서 속도의 기울기이고 m_l 은 목표면을 이루는 선의 기울기이며 시작점의 속도 (VXP, VYP)는 다음과 같이 정의될 수 있다.

$$VXP = V_{xp}^n, VYP = V_{yp}^n$$
 (15)

가상의 목표점이 결정되면, 공간내삽계수, ξ 를 구할 수 있고, 가상의 목표점에서의 현재시간단계의 속도와 이전 시간단계에서의 속도들은 각각 다음과 같이 계산 할 수 있다.

$$V_{xq}^{n+1} = (1-\xi)V_{x1}^{n+1} + \xi V_{x2}^{n+1}, V_{yq}^{n+1} = (1-\xi)V_{y1}^{n+1} + \xi V_{y2}^{n+1}$$
 (16)

$$V_{xq}^n = (1-\xi)V_{x1}^n + \xi V_{x2}^n, V_{yq}^n = (1-\xi)V_{y1}^n + \xi V_{y2}^n$$
 (17)

여기서 V_{xq}^{n+1} 와 V_{yq}^{n+1} 은 목표점에서 현재시간단계에서의 x 와 y 의 속도이고, V_{xq}^n 와 V_{yq}^n 은 목표점에서 이전시간단계에서의 x 와 y 의 속도를 의미한다. 최종적으로 위에서 구한 세 가지 속도들의 방향이 서로 같은지를 확인하기 위하여, 시작점과 목표점을 잇는 직선과 위의 세 가지 속도들과의 내적을 각각 구하고 이를 상호 비교 하면, 세 가지 속도들의 방향이 서로 같은지를 확인 할 수 있다. 즉 세 개의 내적이 서로 같으면, 시작점에서의 속도방향, 목표점의 이전과 현재단계에서의 속도들의 방향이 모두 평행한 것이므로 입자는 직선으로 이동하게 된다. 입자가 직선으로 이동하는 경우, 가상의 목표점이 실제 목표점이 되므로 목표점을 미리 알 수 있다. 이런 경우 본 통합입자 추적 알고리즘에서는 해석적 방법이나 준해석적 방법을 이용하여 입자가 목표점에 도달하는 시간을 구할 수 있고 또한 얻어진 추적 시간을 이용하여 목표점에서의 속도를 계산할 수 있다.

우선, 준해석적 방법을 이용하여 목표점에 도달하는 시간을 구하기 위해 아래와 같은 이동거리 Δx 와 평균 속도 $V_x(\theta)$ 와의 관계를 이용한다.

$$\Delta x = \int_0^\theta V_x(\theta) \cdot \Delta t d\theta$$
 (18)

여기서 평균속도 $V_x(\theta)$ 는 시작점과 목표점에서의 속도를 산술평균한 값으로서 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$V_x(\theta) = \frac{\theta}{2} [\xi(V_{x1}^{n+1} - V_{x1}^n) + (1-\xi)(V_{x2}^{n+1} - V_{x2}^n)] + \frac{1}{2} (\xi V_{x1}^n + (1-\xi)V_{x2}^n + V_{xp}^n)$$
 (19)

여기서 목표점을 알기 때문에, ξ 는 이미 알려진 계수가 되고, 평균속도 $V_x(\theta)$ 는 오로지 θ 의 함수가 된다. 식 (19)을 식 (18)에 대입한 후, 적분하면 다음과 같다.

$$A\theta^2 + B\theta + C = 0$$
 (20)

여기서

$$A = \frac{1}{4} [\xi(V_{x1}^{n+1} - V_{x1}^n) + (1-\xi)(V_{x2}^{n+1} - V_{x2}^n)]$$
 (21)

$$B = \frac{1}{2} [\xi V_{x1}^n + (1-\xi)V_{x2}^n + V_{xp}^n]$$
 (22)

$$C = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$
 (23)

여기서 $A = 0$ 인 경우, 해는 다음과 같이 나타 낼 수 있다.

$$\theta = -\frac{C}{B}$$
 (24)

그러나 $A \neq 0$ 인 경우, 해는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\theta_{1,2} = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} \quad (25)$$

$B^2 - 4AC < 0$ 인 경우, 해는 존재하지 않고, $B^2 - 4AC = 0$ 인 경우, 하나의 해가 존재한다. $B^2 - 4AC > 0$ 인 경우, 해가 두개 존재하므로 어떤 해가 진정한 해인지 결정해야 한다. 두 해가 모두 양수인 경우 작은 값이 해가 된다. 한해가 양수이고, 한해는 음수인 경우, 양수가 해가 되며, 두수가 모두 음수인 경우는 잘못된 목표 면이 설정된 경우이며, 이런 경우 다른 목표 면을 선택하여야 한다.

2.3. 해석적 방법

비록 준해석적 방법이 정확성 있는 결과를 제시하지만, 시간과 공간에 대한 속도의 변화가 큰 경우, 준해석적 방법을 이용하여 얻은 결과는 정확성이 다소 떨어질 수 있다. 이렇게 시간과 공간에 대한 속도의 변화가 클 경우 준해석적 방법보다 훨씬 정확성이 높은 해석적 방법이 본 연구를 통해서 처음으로 개발되었다. 비록 Lu (1994)가 일차선형방법을 이용하여 해석적인 방법을 이용한 입자추적 모델을 개발했지만, 이 방법은 시간과 공간에서의 상호교차 항을 피하기 위해, x나 y 혹은 z 방향 중 한쪽 방향에 대한 속도변화만 고려했으며, 요소 내에서 이동 거리에 따른 속도 구배의 시간적인 변화를 고려하지 못했다.

반면에 본 논문에서 처음으로 소개하는 이 해석적 방법은 요소 내에서 이동 거리에 따른 시간과 공간의 속도구배 변화를 고려할 수 있다. 또한 요소 내에서 시간과 공간에 대해 속도가 선형으로 변화한다는 가정이 만족하면 주어진 속도 장에 관계없이 항상 정확한 해를 도출할 수 있다. 해석적 방법이 적용되기 위해서는 준해석적 방법에서와 마찬가지로 입자가 직선으로 이동하는지를 판단한 후 적용해야 한다. 입자가 직선으로 이동하는지를 판단하기 위해서, 시작점에서 목표점을 잇는 선의 방향 코사인인을 우선 정의한다.

$$\cos \alpha = \frac{x_q - x_p}{\sqrt{(x_q - x_p)^2 + (y_q - y_p)^2}} \quad (26)$$

$$\sin \alpha = \frac{y_q - y_p}{\sqrt{(x_q - x_p)^2 + (y_q - y_p)^2}} \quad (27)$$

시작점에서 이전시간단계의 속도와 현재시간단계의 속도, 목표점에서 이전시간단계의 속도와 현재시간단계의 속도와 위에서 얻은 방향 코사인에 대해 각각 내적을 수행하면, 아래와 같이 시작점과 목표점을 잇는 직선 상에

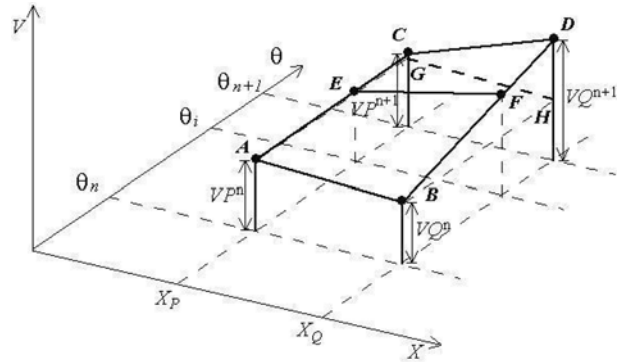


Fig. 3. Conceptual view of schematic illustration of the linear temporal and spatial interpolation scheme for the particle velocity in the x direction. ABGH represents steady state velocity distribution, and ABCD represents hypothetical real velocity distribution.

투영된 네 가지 속도들을 각각 얻을 수 있다.

$$VV_P^n = V_{xp}^n \times \cos \alpha + V_{yp}^n \times \sin \alpha \quad (28)$$

$$VV_P^{n+1} = V_{xp}^{n+1} \times \cos \alpha + V_{yp}^{n+1} \times \sin \alpha \quad (29)$$

$$VV_Q^n = V_{xq}^n \times \cos \alpha + V_{yq}^n \times \sin \alpha \quad (30)$$

$$VV_Q^{n+1} = V_{xq}^{n+1} \times \cos \alpha + V_{yq}^{n+1} \times \sin \alpha \quad (31)$$

여기서 $VV_P^n, VV_P^{n+1}, VV_Q^n, VV_Q^{n+1}$ 는 각각 시작점에서 이전시간단계, 시작점에서 현재시간단계, 목표점에서 이전시간단계, 목표점에서 현재시간단계의 투영된 속도들을 각각 의미한다. 주어진 요소에서 시간 θ 와 위치 $x(\theta)$ 에서 움직이는 입자의 속도는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$VPX(x(\theta), \theta) = A(\theta)(x(\theta) - x_p) + VXP + A_t \theta \quad (32)$$

여기서 $A(\theta)$ 는 요소 내에서 거리에 따른 속도 구배이고, A_t 는 시간간격 내에서 시간에 따른 속도 변화율이며 다음과 같다.

$$A_t = V_{xp}^{n+1} - V_{xp}^n \quad (33)$$

$$A(\theta) = F\theta + G \quad (34)$$

여기서

$$F = \frac{V_{xq}^{n+1} - V_{xq}^n - V_{xp}^{n+1} + V_{xp}^n}{x_q - x_p} \quad (35)$$

$$G = \frac{V_{xq}^n - V_{xp}^n}{x_q - x_p} \quad (36)$$

본 해석식과 Lu (1994)의 해석식의 주된 차이점은, 본

해석식은 $A(\theta)$ 를 시간에 대한 함수로 정의하였으나 Lu (1994)는 단순히 상수로 정의하였다. Lu 방식의 문제점을 잘 나타나기 위해서 Fig. 1에서 보는 바와 같이 실제 속도분포가 평면 ABCD에 해당한다고 가정하면, 시간 $\theta_n, \theta_{n+1}, \theta$ 에서 거리에 따른 속도구배는 각각 선 AB, CD, EF의 기울기에 해당된다. 그러나 거리에 따른 속도구배가 Lu의 경우처럼 상수로 취급하면 속도분포는 평면 ABCD가 아니라 ABGH로 근사되므로 입자추적 수행 결과에 커다란 오차가 나타날 확률이 크다.

식 (32)의 입자추적속도를 갖고 입자의 추적 위치를 계산하면 다음과 같다.

$$\int_0^t VPX(x(s), s)ds = x(t) - x(0) \tag{37}$$

여기서 t 는 입자추적 시간이고, s 는 가공 변수이다. 식 (32)을 (37)에 대입하고, 변수 t 을 θ 로 바꾼 후 적분을 수행하고 다시 양변을 θ 로 미분한 후 최종적으로 해를 구하면 다음과 같이 나타 낼 수 있다.

$$x(\theta) = e^{\frac{(F\theta^2 + 2G\theta)\Delta t}{2(VXP - Gx_p)\Delta t} - \frac{G^2\Delta t}{2F}\sqrt{\frac{\pi}{2F\Delta t}}} \left[\operatorname{erf}\left[\frac{(G+F\theta)\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{2F}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{G\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{2F}}\right] \right] + e^{\frac{(F\theta^2 + 2G\theta)\Delta t}{2(A_t - Fx_p)\Delta t} - \frac{(F\theta^2 + 2G\theta)\Delta t}{2F\Delta t}} \left[\frac{1 - e^{-\frac{(F\theta^2 + 2G\theta)\Delta t}{2F\Delta t}}}{F\Delta t} \right] + e^{\frac{(F\theta^2 + 2G\theta)\Delta t}{2(A_t - Fx_p)\Delta t} - \frac{G^2\Delta t}{2F}\sqrt{\frac{\pi}{2F\Delta t}}} \left[\operatorname{erf}\left[\frac{G\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{2F}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{(G+F\theta)\sqrt{\Delta t}}{\sqrt{2F\Delta t}}\right] \right] \tag{38}$$

식 (38)을 통해서 부정류 하에서 입자가 직선으로 이동할 때 정확한 입자추적시간을 계산할 수 있다.

3. 수치 실험 및 결과

3.1. 해석적 방법, 준해석적 방법, 수치 해석적 방법과 4차 룬지 쿠타 방법과의 비교

첫 번째 예제는 2.3 절에서 언급한 해석적 방법, 2.2 절에서 언급한 준 해석적 방법, 2.1 절에서 언급한 수치 해석적 방법, 단일 속도 접근 방법(Single velocity approach)들과 4차 룬지쿠타 방법(4-th order Runge-Kutta method)을 통하여 계산된 입자추적시간 결과들을 상호 비교하였다. 여기서 4차 룬지 쿠타 방법을 이용하는

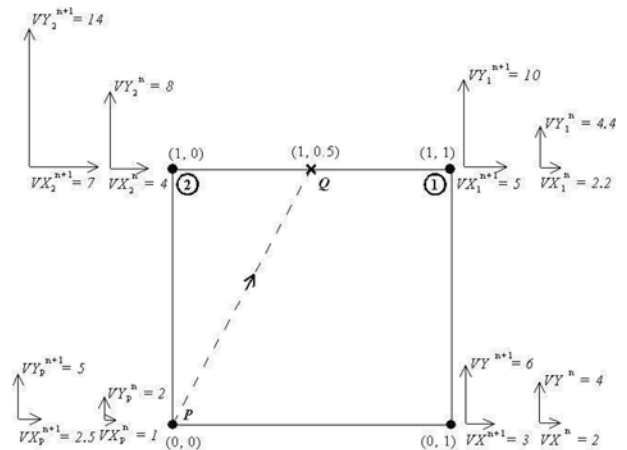


Fig. 4. Illustration of velocity field in subelement and tracked path line. (Dotted line indicates the tracked path); P indicates the source point; Q indicates the target point; ① and ② denote two ending points of target side, respectively.

경우 시간간격을 충분히 작게 하여 (시간간격 = 10^{-7}) 거의 정확한 해를 산출한다고 가정하였다. 본 예제에서 입자추적을 위한 수치모의 상황은 Fig. 4에 나타나 있다. Fig. 4에서 보는바와 같이 관심 요소를 이루고 있는 네 절점의 x축 속도와 y축 속도의 비가 모두 2:1이므로 입자는 직선으로 이동할 것이다. 본 예제 수행에서 동등한 조건으로 모든 입자 추적 방법들을 상호 비교하기 위해서 수치 해석적 방법 수행시 주요소를 소요소로 세분하지 않고 입자추적을 수행하였다. 수행 결과, Table 1에서 보는 바와 같이 뉴우턴 랩슨 방법을 이용한 수치 해석적 방법은 4차 룬지 쿠타 방법의 결과와 11.1%의 차이를 보였으나 해석해 방법을 이용하여 얻은 입자추적 결과는 4차 룬지 쿠타 방법의 결과와 정확히 일치하였다. 또한 준 해석적 방법은 4차 룬지 쿠타 방법과 약 5.3%의 차이를 보였다. 마지막으로 시간과 공간에 따른 속도변화를 고려하지 않고, 시작점에서의 속도만을 이용하여 입자추적을 실시하는 단일속도접근방법과 4차 룬지 쿠타 방법을 비교한 결과, 109.6%의 차이를 보였다. 따라서 시간과 공간에 따른 속도변화를 고려하지 않는 단일속도접근방법은 다른 입자추적방법들에 비해 오차가 상당히 컸다. 효율적인 면에서는 준해석적 방법이 가장 빠르게 계산되었는데, 이는 준해석적 방법이 다른 입자추적 방법과 달리 내부적으로 반복연산을 수행하지 않기 때문이다. 그러나 해석적 방법의 경우에는 비선형 최적 알고리즘을 이용해야 하므로 계산속도는 빠르지 않았다.

3.2. 수치 해석적 방법의 검증 및 효율성 평가

2절에서 언급한 수치 해석적 방법을 검증하고 효율성을

Table 1. Comparisons of particle travel times and computational efficiency with various numerical methods

| Numerical method | Computational Efforts (CPU times, seconds) | Particle Travel Times |
|-------------------------------|--|---------------------------|
| Analytical method | Nonlinear optimization calculation is needed, (1.0×10^{-2}) | 2.386015×10^{-1} |
| Semi-analytical method | No iteration needed, (0.0×10^{-2}) | 2.258612×10^{-1} |
| Newton-Raphson method | 5 iteration numbers, (1.0×10^{-2}) | 2.120868×10^{-1} |
| Single velocity approach | No iteration needed, (0.0×10^{-2}) | 5.0×10^{-1} |
| 4-th order Runge-Kutta method | 2,386,015 time steps with time step length of (9.1×10^0) | 2.386015×10^{-1} |

Table 2. Comparisons of particle end location at the simulation time 200 and total iteration number

| Mesh Refinements | Particle end location | Total iteration number |
|---------------------------|-----------------------|------------------------|
| No mesh refinement | (50.000, 18.776) | 2,438 |
| Mesh refinement of 4 by 4 | (50.000, 19.760) | 2,299 |

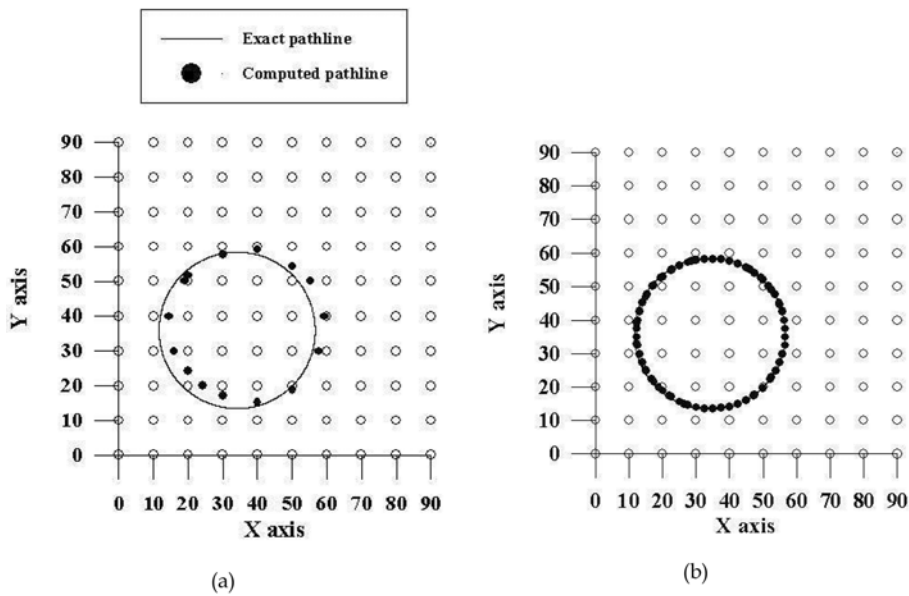


Fig. 5. Comparisons of particle tracking results with exact pathline under the transient circular flow (a) with no mesh refinement and (b) with 4 by 4 mesh refinement.

나타내기 위해서 다음과 같이 시간에 따라 변하는 무차원의 속도 장을 가정하고 입자추적을 수행하였다.

$$V_x(x,y,t) = \frac{\left(-\sin\left(\frac{\pi t}{100}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right)\right)}{2} \quad (39)$$

$$V_y(x,y,t) = \frac{\left(\sin\left(\frac{\pi t}{100}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right)\right)}{2} \quad (40)$$

여기서 관심영역 $[0, 90] \times [0, 90]$ 은 10×10 인 사각요소들로 등분하였고, 초기에 입자는 (50.000, 20.000)에서 이동하여 (50.000, 20.000)에서 (50.000, 51.831), (18.169, 51.831), (18.169, 20.000)을 거쳐서 (50.000, 20.000)으로 이동하는 시나리오를 설정하였다. 만약 입자추적이 정확하게 이루어졌다면 추적시간 200에 입자는 시작점으로 되돌아와야 한다. 따라서 추적시간 200과 입자 종착 위치

(50.000, 20.000)는 입자추적이 얼마나 정확히 수행되었는지를 판단할 수 있는 척도가 된다.

본 수치모의에서는 주요소를 소요소로 세분하는 방법이 수치 해석 결과의 정확성에 미치는 영향을 파악하기 위해, 주요소를 소요소로 세분하지 않은 경우와 주요소를 4×4 소요소로 세분한 경우의 결과들을 상호 비교하였다. Fig. 5에서 보는 바와 같이 주요소를 소요소로 세분하지 않은 경우 입자추적 결과는 정확한 경로 선으로부터 차이를 보이나 주요소를 4×4 소요소로 세분한 경우 입자추적 결과는 정확한 경로선과 잘 일치하였다. 따라서 주요소를 소요소로 세분하면 할수록 입자추적 결과가 정확해짐을 확인할 수 있었다. 또한 주요소를 소요소로 세분하는 방법이 효율성에 미치는 영향을 평가하기 위해 총 반복수를 비교하였다. Table 2에서 보는 바와 같이 주요소를 세분하지 않은 경우의 총 반복수는 주요소를 4×4 로 세분한

경우보다 많았는데 이는 세분한 경우보다 세분하지 않은 경우에 수렴이 훨씬 잘 이루어지지 않았기 때문이다.

3.3. 본 수치 해석적 방법과 Lu 방법의 상호 비교 I

본 수치 해석적방법과 Lu 방법의 입자추적의 정확성을 비교하기 위해서 무한의 균질한 피압 대수층내에 하나의 양수정이 (0, 0)에 위치한다고 가정하여 아래의 속도장을 정의하였다 (Pokrajac과 Lazic (2002)).

$$V_x = \frac{Q}{2\pi\phi B} \frac{x}{(x^2+y^2)} \tag{41}$$

$$V_y = \frac{Q}{2\pi\phi B} \frac{y}{(x^2+y^2)} \tag{42}$$

여기서 Q는 양수율을, B는 대수층의 두께를, ϕ는 공극률을 의미한다. 상기의 정류상태흐름을 비정류상태흐름으로 임의로 변경하기 위해, 입자추적 초기의 속도는 식 (41)과 (42)의 1.5배가 되도록 하였고, 입자추적 종료시의 속도는 식 (41)과 (42)의 0.5배가 되도록 하였으며 수치모의 시간 동안 입자의 속도는 입자추적 초기와 종료시간 사이에 선형적으로 변한다고 가정하였다.

관심영역 [0, 120 m] × [0, 120 m]은 36개의 요소와 49개의 절점으로 등분하였으며 이때 각각의 요소는 20 m × 20 m인 사각형이다. 본 수치모의에서는 Q = 680 m³/day, B = 0.91 m로 결정하였고, 입자는(100 m, 100 m)에서 시작해서 일직선으로 양수정을 향하여 80.72 일 후에 (19.74 m, 19.74 m)에 도달하는 시나리오를 설정하였다. 이때 정확한 입자추적시간과 이동거리를 얻기 위해서 충분히 작은 시간간격인 0.001 일을 사용하는 4차 룬지 쿼타 방법이 적용되었다.

Lu 방법과 수치 해석적 방법과의 정확성을 비교하기 위해서, 4차 룬지 쿼타 방법의 입자추적결과 차이를 계산하면, Fig. 6에서 보는바와 같이 시간이 경과됨에 따라 Lu 방법과 본 수치 해석적 방법의 오차가 전반적으로 커지며, Lu 방법의 오차가 본 수치 해석적 방법보다 더 크게 나타났음을 알 수 있다. 또한 본 수치 해석적 모델은 주요소를 소요소로 더 많이 세분하면 할수록 오차가 더 줄어드는 것을 Fig. 6에서 볼 수 있다. 특히 주요소가 4 × 4 소요소로 등분된 경우, 본 수치 해석적 방법의 오차는 Lu 방법보다 18.45배 줄어들었다.

3.4. 본 수치 해석적 방법과 Lu 방법의 상호 비교 II

무한 균질 피압 대수층에서 (0, -152.4 m)에 위치한 양수정과 (0, 152.4 m)에 위치한 주입정이 같은 유량의

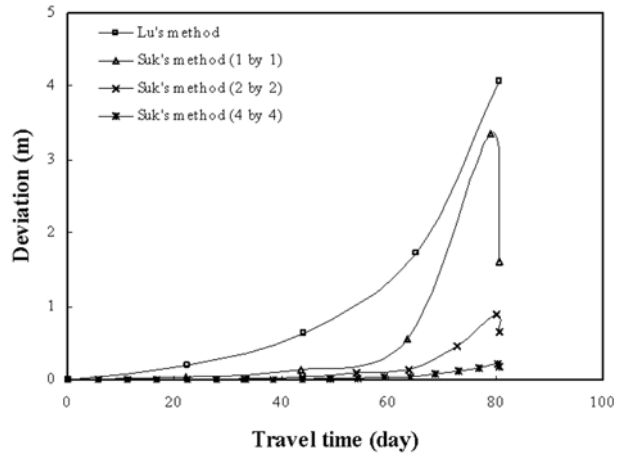


Fig. 6. Particle tracking deviation with travel time in the scenario with one pumping well.

주입율과 양수율을 갖는다고 설정하면 다음과 같은 속도장을 얻을 수 있다.

$$V_x = \frac{Q}{2\pi\phi B} \left(\frac{x}{x^2+(y-152.4)^2} - \frac{x}{x^2+(y+152.4)^2} \right) \tag{43}$$

$$V_y = \frac{Q}{2\pi\phi B} \left(\frac{y-152.4}{x^2+(y-152.4)^2} - \frac{y+152.4}{x^2+(y+152.4)^2} \right) \tag{44}$$

여기서도 양수정이 하나인 경우에서와 같이 정류상태를 비정류상태의 흐름으로 임의로 만들기 위해 입자추적의 초기에서 속도는 식 (43)과 (44)의 0.5배가 되도록 하였고, 입자추적의 종료시 속도는 식 (43)과 (44)의 1.5배가 되도록 하였으며, 수치모의 시간동안 입자의 속도는 입자추적 초기와 종료시간 사이에 선형적으로 변한다고 가정하였다.

관심영역 [0, 180 m] × [-180 m, 160 m]는 153개의 요소와 180개의 절점으로 등분하였으며 각각의 요소는 20 m × 20 m인 사각형이다. 본 수치모의에서는 Q = 680 m³/day, B = 0.91 m로 결정하였고, 입자 A는 (20 m, 140 m)에서 출발하여 210 일 후에 (17.34 m, -142.12 m)에 도달하고, 입자 B는 (60 m, 140 m)에서 출발하여 372 일 후에 (23.62 m, -150.51 m)에 도달하는 시나리오를 설정하였다(Fig. 7a). 이때 정확한 입자추적시간과 이동거리를 얻기 위해서 충분히 작은 시간간격인 0.001 일을 사용하는 4차 룬지 쿼타 방법이 적용되었다.

Lu 방법과 수치 해석적 방법과의 정확성을 비교하기 위해서, 4차 룬지 쿼타 방법을 이용하여 얻은 추적선과 Lu 방법과 수치 해석적 방법을 통해서 얻은 추적선들을 함께 나타내었다. Fig. 7a에서 보는바와 같이 두 입자추적의 결과는 거의 같은 모양의 궤적을 갖는다. 그러나 Fig. 7b과 c에서 보는바와 같이 Lu 방법의 추적 오차는 시간이 지

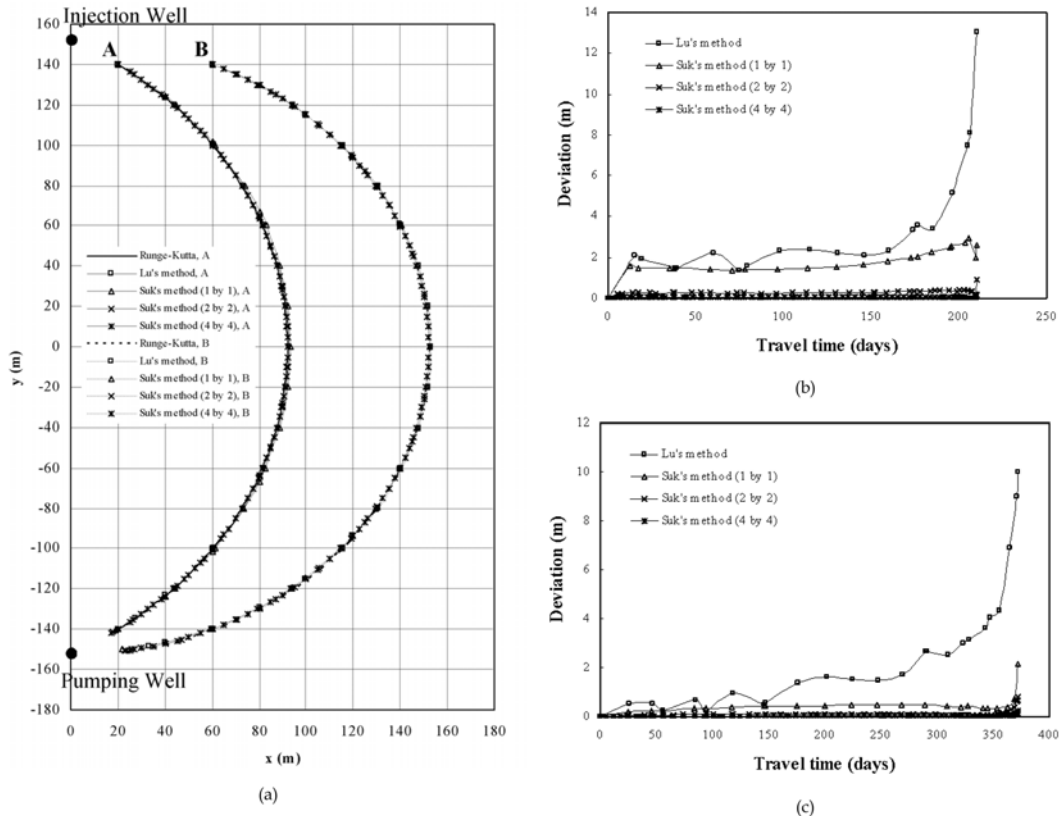


Fig. 7. For example on one pumping well and one injection well system, (a) path lines, (b) deviation at particle A, and (c) deviation at particle B with travel time.

남에 따라 즉 입자가 양수정에 가까워짐에 따라 급격히 증가하는 것을 볼 수 있다. 즉 입자 A에서 출발하는 경우에 Lu 방법을 통해 얻은 추적선의 오차는 주요소를 4×4 소요소로 등분한 본 수치 해석적 방법을 통해서 얻은 결과보다 86.7배 컸고, 입자 B에서 출발하는 경우에는 Lu 방법을 이용한 추적선의 오차가 주요소를 4×4 소요소로 등분한 본 수치 해석적 방법을 통해서 얻은 결과보다 45.5배 컸다. 양수정과 주입정이 함께 존재하는 경우를 하나의 양수정을 가정한 경우와 비교하면, 양수정과 주입정이 함께 존재하는 경우 Lu의 방법을 이용해 얻은 추적선의 오차는 크게 증가하지만, 본 수치 해석적 방법을 통해서 얻은 추적선의 오차는 거의 변함이 없다. 양수정과 주입정이 함께 존재할 때, Lu 방법의 정확성이 떨어지는 이유는 다음과 같다. Lu 방법은 입자추적 시 x, y, z 중 오로지 한 방향의 속도만을 이용하여 입자추적을 수행하므로 본 예제의 경우와 같이 추적선이 직선이 아닌 곡선으로 바뀔 때 추적오차가 증가하게 된다. 그밖에도 Lu 방법의 경우는 요소를 소요소로 등분하는 알고리즘을 갖고 있지 않기 때문에 속도장이 급변하는 경우 추적선을 정확하게 모의하기 어렵게 된다.

4. 결 론

본 연구에서는 윌리안-라그랑지안 방법이 갖고 있는 본질적인 문제점인 입자추적오차에 의한 질량오차를 최소화하기 위해서, 새로운 통합 입자 추적 알고리즘을 개발하였다. 본 알고리즘은 해석해와 비교를 통해서 검증하였고 또한 기존의 입자추적알고리즘(Lu 방법)과 비교함으로써 통합 입자 추적 알고리즘의 우수성을 나타내었다. 여기서 본 통합 입자 추적 알고리즘은 시간 간격 내에서 시간간의 속도변화를 동시에 고려한 수치 해석적 방법, 준 해석적 방법, 그리고 해석적 방법을 결합시킨 것이며, 특히 준 해석적 방법과 해석적인 방법은 특정한 지하수 유동 체계 내에서 수치 해석적 방법의 제약을 극복할 수 있는 기법으로서, 개발된 입자추적기법의 범용성을 높인다. 본 통합입자추적 알고리즘 중 수치 해석적 방법은 요소를 세분하면 할수록 정확성이 높아진다. 따라서 시간공간적으로 복잡하고 급변하는 지하수 유동 체계를 가지는 경우에 본 통합 입자 추적 방법은 기존의 입자추적 방법인 Lu의 방법에 비해서 훨씬 우수함을 확인할 수 있었다.

사 사

본 연구는 한국지질자원연구원 기본 사업인 ‘청정 대용량 지하수 자원 확보 기술(08-3211)’의 연구비 지원에 의해 수행되었으며, 또한 한국과학재단의 국제협력연구사업인 ‘몽골지역내 지하수 부존량, 지하수 유동 특성 및 수질 특성 평가’의 일환으로 수행되었습니다. 이에 감사를 드립니다.

참 고 문 헌

- 석희준, 2006, 효율적인 수치 모델링 기법 개발을 위한 ELLAM과 LEZOOMPC의 비교분석, 한국지하수토양환경학회지, **11**(1), 37-44.
- Baptista, A.M., Adams, E., and Stolzenbach, K., 1984, Eulerian-Lagrangian analysis of pollutant transport in shallow water, Rep. 296, R.M. Parsons Lab. for Water Resour. and Hydrodyn., Mass. Inst. of Technol., Cambridge.
- Baptista, A.M., 1987, Solution of advection-dominated transport by Eulerian-Lagrangian methods using the backward methods of characteristics, Ph.D. thesis, Dep. of Civ. Eng., Mass. Inst. of Technol., Cambridge.
- Bear, J., 1979, *Hydraulics of groundwater*, New York: McGraw-Hill, p. 567.
- Bensabat, J., Zhou, Q., and Bear, J., 2000, An adaptive path line-based particle tracking algorithm for the Eulerian-Lagrangian method, *Advances in Water Resources*, **23**(4), 383-397.
- Celia, M.A., Russell, T.F., Herrera, I., and Ewing, R.E., 1990, An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation, *Adv. Water Resour.*, **13**, 187-206.
- Cheng, H.P., Cheng, J.R., and Yeh, G.T., 1996, A particle tracking technique for the Lagrangian Eulerian finite element method in multi-dimensions, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **39**, 1115-1136.
- Douglas, J. and Russell, T.F., 1982, Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures, *SIAM J. Numer. Anal.*, **19**, 871-885.
- Goode, D.J., 1990, Particle velocity interpolation in block-centered finite difference groundwater flow models, *Water Resources Research*, **26**(5), 925-940.
- Healy, R.W. and Russell, T.F., 1998, Solution of the advection-dispersion equation in two dimensions by a finite-volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method, *Adv. Water Resour.*, **21**(1), 11-26.
- Konikow, L.F., Goode, D.J., and Hornberger, G.Z., 1996, A three-dimensional model of characteristics solute-transport model (MOC3D), U.S. Geological Survey, Water Resources Investigation, Report 96-4267, p. 99.
- Leonard, B.P., 1988, Universal limiter for transient interpolation modeling of advective transport equations: The ULTIMATE conservative difference scheme, NASA Tech. Memo. 100916.
- Leonard, B.P. and Mokhtari, S., 1990, Beyond first-order unwinding: The ULTRA-SHARP alternative for non-oscillatory steady-state simulation of convection, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, **30**, 729-866.
- Lu, N., 1994, A semianalytical method of path line computation for transient finite difference groundwater flow models, *Water Resources Research*, **30**(8), 2449-2459.
- Oliveira, A. and Baptista, A.M., 1998, On the role of tracking on Eulerian-Lagrangian solutions of the transport equation, *Advances in Water Resources*, **21**(7), 539-554.
- Pokrajac, D. and Lazic, R., 2002, An efficient algorithm for high accuracy particle tracking in finite elements, *Advances in Water Resources*, **25**(4), 353-369.
- Pollock, D.W., 1988, Semianalytical computation of path lines for finite-difference models, *Ground Water*, **26**(6), 743-750.
- Pollock, D.W., 1994, User's guide for MODPATH/MODPATH-PLOT, Version 3: a particle tracking post-processing package for MODFLOW. The US Geological Survey finite-difference ground-water flow models, US Geological Survey Open-File Report 94-464, p. 249.
- Russell, T.F., 1990, Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for advection-dominated problems. In Numerical Analysis, 1989, Pitman Res. Notes Math, Series, Vol. 228, ed. D.F. Griffiths & G.A. Watson. Longman Scientific and Technical, Harlow, U.K., 206-228.
- Suk, H. and Yeh, G.T., 2007, 3D, three-phase flow simulations using the Lagrangian-Eulerian approach with adaptively zooming and peak/valley capturing scheme, *Journal of Hydrologic Engineering, ASCE*, **12**(1), 14-32.
- Suk, H. and Yeh, G.T., 2008, A multi-dimensional finite element particle tracking method for solving complex transient flow problem, in press *Journal of Hydrologic Engineering*.
- Williamson, D.L. and Rasch, P.J., 1988, Two-dimensional semi-Lagrangian transport with shape preserving interpolation, *Mon. Weather Rev.*, **117**, 102-109.
- Yeh, G.T., 1990, A Lagrangian-Eulerian method with zoomable hidden fine-mesh approach to solving advection-dispersion equations, *Water Resour. Res.*, **26**(6), 1133-1144.
- Yeh, G.T., Cheng, J.R., Gwo, J.P., Lin, H.C., Richards, D.R., and Martin, W.D., 1992, 3DFEMWATER/3DLEWASTE Numerical code for delineating wellhead protection areas in agricultural

regions based on the assimilative capacity criterion, U.S. Environmental Protection Agency, EPA/600/R-92/223, p. 256.

Zheng, C., 1990, MT3D user's manual: a modular three-dimen-

sional transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems, S.S. Papadopulos and Associates, p. 163.