

3차원 지표하 시스템에서 Lagrangian-Eulerian 유한요소법에 대한 입자추적 알고리즘

이재영¹ · 감미아^{2*}

¹University of Central Florida, ²안동대학교 환경공학과

A Particle Tracking Method for the Lagrangian-Eulerian Finite Element Method in 3-D Subsurface System

Jae-Young Lee¹ and Meea Kang^{2*}

¹Department of Civil and Environmental Engineering, University of Central Florida, Orlando, FL, USA

²Department of Environmental Engineering, Andong National University

지표하 다공성매체에서 비정상상태의 유동을 해석하기 위한 종래의 수치적 모형들은 초기 건조한 토양으로의 강우로 인한 침투와 같은 한계적인 유입경계조건인 경우에 국지적 유동영역으로 인해 수치적 진동 및 불안정성을 초래한다. 이러한 경우 주로 공간적으로 세분된 격자와 작은 계산시간 간격을 요구하는데 이는 계산의 효율성을 떨어뜨린다. 따라서 본 연구에서는 유입 경계조건을 포함하는 비정상 상태의 지표하 유동해석을 위해 입자추적 알고리즘을 적용하여 불연속 영역에서의 수치적 불안정성을 제거하고자 하였다. 즉, 수치적 안정성이 개선된 혼합 LE 유한요소기법을 제시하였다. 제시된 모형의 수치적 검증에 대해 비정상 균일 유동장과 불균일 유동장의 가상예제에 적용한 결과 해석해와 유사한 결과를 얻을 수 있었고 이를 토대로 함양 및 양수에 대한 3차원 가상유역 모의에 적용되었다. 본 연구에서 제시한 입자추적 알고리즘은 포화 및 불포화 다공성 매체의 유동을 보다 실질적으로 모의할 수 있으며 계산의 정확성 및 안정성에 크게 기여할 것으로 판단되었다.

주요어 : 지표하 유동, 입자추적법, 혼합 LE 유한요소 기법, 강우, 침투

The conventional numerical models to analyze flow in subsurface porous media under the transient state usually generate numerical oscillation and instability due to local flux domain for critical cases such as infiltration into initially dry soil during rainfall period. In this case, it is required refined mesh and small time step, but it decrease efficiency of computation. In this study, numerical instability in discontinuity domain is removed by applying particle tracking algorithm to simulate unsteady subsurface flow with inflow boundary condition. Finally the hybrid LE FEM improving numerical stability is proposed. The hypothetical domains with unsteady uniform and nonuniform flow field were used to demonstrated algorithm verification. In comparison with analytic solution, we obtained reasonable results and conducted simulation of hypothetical 3-D recharge/pumping area. The proposed algorithm can simulate saturated/unsaturated porous media with more practical problems and will greatly contribute to accuracy and stability of numerical computation.

Key words : subsurface flow, particle tracking method, hybrid LE FEM, rainfall, infiltration

서 론

지표하 다공성매체(subsurface porous media)에서 유동을 해석하기 위한 종래의 수치적 모형들은 토양표면

근처의 증발과 초기 건조한 토양형으로의 침투와 같은 한계적인 조건인 경우 일반적으로 수두(water head)의 급경사를 가진 국지적 이동영역을 생성하며 낮은 수리 전도율(hydraulic conductivity) 조건에서 매우 작은 양의

*Corresponding author: wdream@andong.ac.kr

수분이 이동한다. 한편, 습윤선단부(wetting front) 뒤의 짧은 거리이내의 수분의 양은 훨씬 큰 수리전도율과 작은 수두경사에 의해 증가한다. 이러한 경우의 유동에 대한 불충분한 국지해법은 수치적 진동(oscillation) 및 불안정성(unstability)을 초래할 수 있다.

비정상 상태의 흐름에서 유동경계조건(flux boundary condition)에 대한 기존의 입자추적(particle tracking)은 급선단부(sharp front) 영역에서 계산의 정확성을 증가시키기 위해 세분된 격자를 요구한다. 그러나 현재 급선단부에 대한 해법은 수치적 기법에서 효율적이지 못하며 특히 유동경계조건하에서 급격한 수두경사의 영역을 계산하기 위해 어떠한 타당한 3차원 비정상상태의 지하수 유동모형도 없는 실정이다. 본 연구에서 제시된 입자추적 알고리즘은 기존의 연구를 통하여 유동경계조건에 적용된 비선형 및 급선단부에 대한 해결책으로써 고려되어 왔다. 그러나 해법에 대한 효율성 및 정확성은 침투나 다른 유입(sink)현상이 발생할 동안 선단부의 통과로 초래되는 문제점 때문에 양호하지 못하다.

LE(Lagrangian-Eulerian) 접근법은 1980년대 초부터 널리 이용되어 왔으며 입자추적 알고리즘은 이러한 LE 접근법의 주요 부분을 차지하고 있다. LE 방법에서의 정확도는 입자추적 알고리즘에 좌우된다고 할 수 있으며 이러한 입자추적 기법은 유적선(path line) 및 추적시간 정보를 생성시키는 보편적인 기법으로 대류이송 성분을 고려하기 위해 용질전달 모형과 연계할 수 있다. 지금까지 대부분의 현존하는 수치모형들은 정상상태(steady state) 유동이나 계산시간 간격동안의 단계별 유속변동을 이용하는 것에 한계를 지니고 있었다. 이러한 정상상태에 기반한 연구는 Pollock 등(1988)과 Schafer-Perini와 Wilson 등(1991)에 의해 수행된 바 있다. 이들 모형 중의 소수는 또한 유동장이 입자유속이 비정상상태 해석이 진행됨에 따라 단계별로 처리될 수 있도록 임의의 모의시간 간격에 걸쳐 두드러지게 변하지 않는다는 가정을 이용하여 비정상상태(transient) 해석에 대해 이용될 수 있다. Lu 등(1994)은 이전 정상상태에서 확장하여 비정상 상태하에서 시간간격 동안의 유속변화를 산정하기 위한 준해석적 입자추적기법을 개발하여 왔다. 이러한 연구는 각각의 지정된 유한차분 셀과 시간단계내에서 유속의 시간적 변동을 산정하기 위해 단순한 선형보간기법을 수정한 것이다.

하지만 입자의 유속이 입자경로선을 얻기위해 모든 시간 단계에 걸쳐 적분되었을 때 많은 시간단계에 걸쳐서 초래되는 누적오차로부터 일부 문제들이 야기될 수 있으며 따라서 이것은 입자의 최종위치와 추적시간에서 커다란

오차를 발생시킬 수 있다. 더욱이 유동장 모의에서 보다 세분된 계산 시간간격이 정확도를 향상시킬 수 있다고 할지라도 계산의 효율성 문제로 인해 한계를 지닌다.

비정상 조건하에서 유적선을 추적하기 위해 Bensabat 등(2000)은 유적선 기반의 입자추적 접근법을 이용하였으며 이는 요소간(inter-element) 세분, 요소내(in-element) 경로세분과 입자유속의 이차 시공간 보간, 입자추적과정에서 수치적분에 대한 예측-보정 방법에 의해 특성화되었다. 따라서 이러한 입자추적 접근법은 격자세분보다 오히려 추적오차를 조절하기 위해 입자유속의 크기 및 방향의 변동율과 관련된 실제적 오차범위를 만족하면서 추적시간 증가로 추적기간을 분리함으로써 요소 내 세분을 요구한다.

한편 2차원 LE 유한요소법에 대한 입자추적 기법은 Cheng과 Yeh 등(1996)에 의해 제시되었으며 2차원 이송-확산 전달방정식의 해를 구하기 위해 Local Zooming 및 Valley Capturing 기법을 적용함으로써 이송확산과 관련된 수치적 오차를 크게 향상시켰다. 이러한 연구는 요소기반 입자추적기법의 실제현상에 대한 문제적용에 기초를 제공하였다. 하지만 이들 선행연구들은 3차원 경우에서 입자추적의 모의결과를 제시하지는 못하였다. 이에 Suk 등(2003)은 다차원 매체에서의 비정상 유동문제를 입자추적 알고리즘을 적용한 혼합 LE 기법을 이용하여 해석함으로써 3차원 입자추적기법에 의한 지하수 유동모의 시스템의 토대를 구축하였다.

Yeh와 Cheng 등(2004)은 1차원 수계망, 2차원 지표류, 3차원 지표하 매체를 통합한 WASH123D 모형을 개발하여 유역시스템의 유동, 열전달, 유사 및 수질이송에 대한 모의를 위해 입자추적기법을 적용하였으며 Zhang과 Yeh 등(2005)에 의해 3차원 화학물질 이송해석을 위한 혼합 LE 유한요소기법이 개발되어 유역의 지표하 이송시스템에 성공적으로 적용되었다.

본 연구에서는 Cheng과 Yeh 등(1996)에 의해 개발된 요소내 입자추적기법을 기반으로 하여 이전 모형에서의 단계별 유속계산보다 오히려 시공간상의 이항보간기법에 의한 단계별 유속변화를 고려하여 혼합 LE나 FEM 접근법의 수치적 수행을 개선하기 위한 알고리즘을 제시하였다. 본 접근법은 대상영역의 내부절점에 대해서 입자추적법을 도입한 LE 방법을, 유입되는 유동경계 절점에 대해서는 기존의 FEM 방법을 적용하는 것이다. 이를 바탕으로 포화 및 불포화 다공성 매체에서 흐름거동을 정교하게 모의할 수 있는 수치적 도구를 개발하는 것이며 계산의 정확성을 향상시키기 위한 새로운 알고리즘을 제시함으로써 실제유역에서 한계적 경계조건을 가진 지하수

유동에 대한 효율적인 수치모형 수립에 크게 기여할 것으로 기대한다.

지배방정식

포화-불포화 다공매체를 통한 지표하 밀도중속 유동의 지배방정식(Richard equation)은 질량평형의 보존법칙에 기초하여 다음과 같이 유도될 수 있다(Lin 등, 1997).

$$\frac{\rho}{\rho_0} F \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\vec{K} \cdot \left(\nabla h + \frac{\rho}{\rho_0} \nabla z \right) \right] + \frac{\rho^*}{\rho_0} q \quad (1)$$

ρ = 염도 및 온도의 함수인 물의 밀도; ρ_0 = 물의 기준밀도; h = 압력수두; t = 시간; \vec{K} = 수리전도율 tensor; Z = 위치수두; q = 단위시간당 단위체적당 유입/유출량; q^* = 원수의 밀도; 는 다음 식과 같이 주어질 토양의 수분함량이다.

$$F = \alpha' \frac{\theta_e}{n_e} + \beta' \theta_e + n \frac{dS_q}{dh} \quad (2)$$

여기서 α' = 매체의 수정 압축성; β' = 물의 압축성; θ_e = 유효 수분함유량; n_e = 유효공극률; S_q = 포화도이다.

식 (1)은 Galerkin 유한요소 기법으로 이산화될 수 있다. 여기서 제기되는 문제는 불포화 영역에서 진행되는 급선단부의 존재로 인해 수치적 정확성을 해결하기 위해 매우 세분된 격자가 요구된다는 것이다. 세분된 격자의 이용은 유한요소법이 이용되었을 때 선형 안정성 조건을 만족시키기 위해 작은 크기의 계산시간 간격을 요구한다. 다른 한편으로는 LE 접근법의 이용은 선형적으로 절대적으로 안정한 방법이기 때문에 큰 계산시간 간격이 허용될 수 있다. 이러한 LE 방법의 적용을 용이하게 하기 위해 이송형(advective form)으로 식 (1)을 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\rho}{\rho_0} F \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\vec{K} \cdot \nabla h \right) + \vec{V}_F \cdot \nabla h + Q \quad (3)$$

여기서

$$\vec{V}_F = \left[\frac{\rho}{\rho_0} \frac{\partial K_{xz}}{\partial h}, \frac{\rho}{\rho_0} \frac{\partial K_{yz}}{\partial h}, \frac{\rho}{\rho_0} \frac{\partial K_{zz}}{\partial h} \right]^T \quad (4)$$

$$Q = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho}{\rho_0} K_{xz} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho}{\rho_0} K_{yz} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho}{\rho_0} K_{zz} \right) \right] \quad (5)$$

따라서 식 (3)은 다음과 같이 Lagrangian 형태로 나타낼 수 있다.

$$\frac{\rho}{\rho_0} F \frac{D_{\vec{V}_F} h}{Dt} = \nabla \cdot \left(\vec{K} \cdot \nabla h \right) + Q \quad (6)$$

여기서

$$\vec{V}_F = - \frac{\rho_0}{\rho F} \vec{V}_F \quad (7)$$

혼합 LE 방법을 이용하여 식 (6)은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\rho}{\rho_0} F \frac{h^{n+1} - h^*}{\Delta \tau} = \omega \left\{ \nabla \cdot \left[\vec{K} \cdot \nabla h \right] + Q \right\}^{n+1} + (1-\omega) \left\{ \nabla \cdot \left[\vec{K} \cdot \nabla h \right] + Q \right\}^* \quad (8)$$

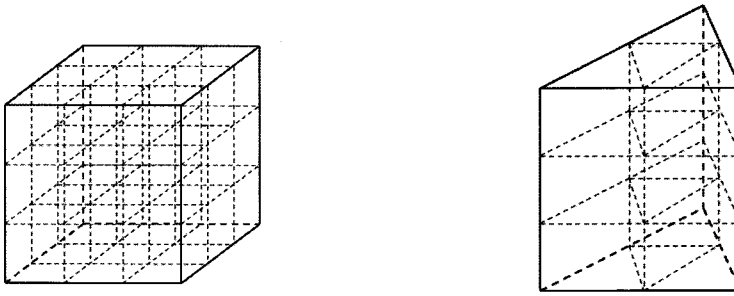
여기서 h^{n+1} 은 새로운 시간단계에서 절점에서 압력 수두이다. 뿔 첨자 *는 입자추적법에서 입자가 중지하는 목표지점(target point)을 표시하며 $\Delta \tau$ 는 입자추적에 의해 소요된 시간이다. 이러한 목표지점에서 모든 항들의 값들은 공간 및 시간보간을 이용하여 계산되어질 수 있다.

입자추적 알고리즘

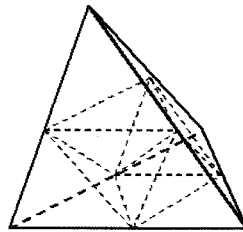
입자추적 알고리즘은 BEST3D(Yeh 등, 2003)에서 3차원 이동격자에 대해 개발되었고 실행되어왔다. 입자추적 알고리즘에서 목표지점의 위치를 찾기 위해 현재 시간단계 및 이전 시간단계에서의 유속장이 알려져 있다고 가정하는 후방입자추적법(backward particle tracking)이 수행되었는데 이것은 위조입자가 현재 시간단계부터 이전 시간단계까지 추적경로를 따라 이동하는 것이다. 유속의 변화는 시공간에서 이중선형보간법(bilinear interpolation)을 이용하여 고려되었고 유속장이 해의 일부로써 비선형 반복해법으로 해를 찾는데 이용되어질 것이다.

입자추적의 정확성을 향상시키기 위해 Fig. 1에서처럼 모든 3차원 전체요소(global element)는 하부요소(sub-element)로 더 세분될 수 있는데 여기서 육면체형(hexahedral) 요소가 27개의 하부요소로 나누어지고 삼각기반의 프리즘 요소는 12개의 하부요소로 분할되어졌으며 사면체형(tetrahedral) 요소는 8개의 하부요소 분할되었다. 이와같이 전술한 후방입자추적 알고리즘은 하부요소에 대해 개발되었으며 하부요소의 기하형상은 Fig. 1(a)-(c)와 같다.

입자추적동안 목표지점은 내부나 경계면 중 하나에 위치해야 하며 하부요소로 분할됨으로써 입자는 일반적으로



(a) sub-elements of a hexahedral element (b) sub-element of a triangle-based prism element



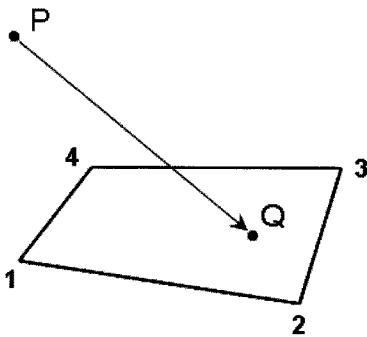
(c) sub-elements of a tetrahedral element

Fig. 1. Sub-elements used in backward particle tracking.

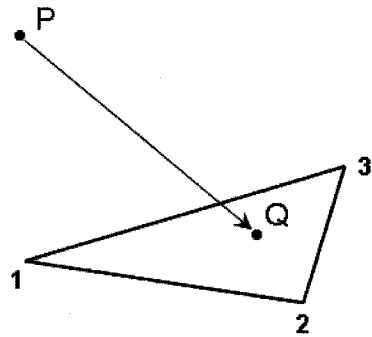
하나의 하부요소로부터 다른 하부요소까지 이동할 수 있다. 따라서 입자들은 유효추적시간(available tracking time)에 지배를 받는 각 하부요소의 하나의 경계에서 다른 경계까지 이동한다. 이러한 입자는 추적시간이 소모되면 하부요소내에서 중단될 것이다. 또한 입자는 요소의 경계를 횡단할 수도 있고 인접 요소의 하부요소로 유입될 수도 있다. 그러므로 입자추적에서 근본적인 과정은 목표경계면(target surface)라 불리는 하부요소 경계면상의 입자위치를 결정하는 것이다. 육면체 요소에 있어서 목

표경계면은 사각형이고 사면체 요소는 목표경계면이 삼각형이며 삼각형 기반의 프리즘 요소는 목표경계면이 사변형이나 삼각형이다. Fig. 2에서 나타난 바와 같이 사변형 1-2-3-4는 Fig. 2(a)에서 하부요소의 목표경계면이다. 삼각형 1-2-3은 Fig. 2(b)에서 하부요소의 목표경계면이다.

입자추적 과정동안에 지점 P에서 출발한 입자는 목표경계면 방향으로 이동한다. 만일 잔류 추적시간(remaining tracking time)에 입자가 목표경계면에 도달한다면 입자는 목표경계면상의 지점 Q에서 중단될 것이다. 따라서 후



(a) quadrilateral target surface



(b) triangular target surface

Fig. 2. Target surface of 3-D backward particle tracking.

방입자추적에서 기본적인 초기화 과정은 다음과 같다.

- ① 초기지점(source point) P의 위치 (x_p, y_p, z_p) ;
- ② 목표경계면의 절점좌표 $(X_i, Y_i, Z_i) i=1,2,3,4)$;
- ③ 새로운 시간단계에서 절점유속 $(VX_i^{n+1}, VY_i^{n+1}, VZ_i^{n+1} = 1,2,3,4)$;
- ④ 이전 시간단계에서 절점유속 $(VX_i^n, VY_i^n, VZ_i^n = 1,2,3,4)$

이상의 값들을 이용하여 목표지점 Q의 위치 (x_Q, y_Q, z_Q) 를 찾는다.

본 절에서는 후방입자추적의 목표경계면 중 일반적으로 많이 사용하는 사변형에 대한 입자추적 알고리즘을 기술하고자 한다. 먼저 유효추적시간을 SDT로 놓고 시간부분인자(time fraction factor)는 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$\theta = \frac{\Delta t - SDT}{\Delta t} \tag{9}$$

여기서 Δt 는 입자추적에 대한 시간단계 크기이다.

목표지점 Q의 좌표 (x_Q, y_Q, z_Q) 는 유한요소 보간함수를 이용하여 목표경계 사변형으로부터 절점좌표의 선형보간으로써 다음과 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} X_Q &= \sum_{i=1}^{N_e} X_i N_i(\xi, \eta), & Y_Q &= \sum_{i=1}^{N_e} Y_i N_i(\xi, \eta), \\ Z_Q &= \sum_{i=1}^{N_e} Z_i N_i(\xi, \eta) \end{aligned} \tag{10}$$

여기서 (ξ, η) 는 목표경계 사변형에서의 지점 Q에 대한 국지좌표이며 (X_i, Y_i, Z_i) 는 요소에서의 절점좌표이고 $N_i(\xi, \eta)$ 는 사변형 요소의 보간함수이다. 여기서 N_e 는 목표경계면에서의 절점번호이다.

동일하게 목표경계 사변형의 절점유속은 시간부분인자를 이용하여 현재 및 이전단계에서의 절점유속에 대한 선형보간으로써 식 (11)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} VX_i &= (1-\theta)VX_i^{n+1} + \theta VX_i^n \\ VY_i &= (1-\theta)VY_i^{n+1} + \theta VY_i^n \\ VZ_i &= (1-\theta)VZ_i^{n+1} + \theta VZ_i^n \end{aligned} \tag{11}$$

여기서 윗 첨자 $n+1$ 과 n 은 현재 시간단계 및 이전 시간단계를 나타낸다. 목표지점 Q의 유속은 유한요소 보간함수를 이용하여 목표경계 사변형으로부터 절점유속의 선형보간으로써 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} VX_Q &= \sum_{i=1}^{N_e} VX_i N_i(\xi, \eta), & VY_Q &= \sum_{i=1}^{N_e} VY_i N_i(\xi, \eta), \\ VZ_Q &= \sum_{i=1}^{N_e} VZ_i N_i(\xi, \eta) \end{aligned} \tag{12}$$

평균유속 접근법에 있어서 추적속도는 초기지점(P) 유속과 목표지점(Q) 유속의 평균과 같다.

$$\begin{aligned} VX &= \frac{1}{2}(VX_Q + VX_P), & VY &= \frac{1}{2}(VY_Q + VY_P), \\ VZ &= \frac{1}{2}(VZ_Q + VZ_P) \end{aligned} \tag{13}$$

현 추적단계가 끝난 후에 다음 추적에 대한 가용 추적시간을 SDTI이라고 하고 $\Delta t^* = SDT - SDTI = SDT - (1-\theta)\Delta t$ 라고 하면, 다음의 목적함수들이 이용될 수 있다.

목적함수 A :

$$X_Q - X_P = VX \cdot \Delta t^* \tag{14}$$

목적함수 B :

$$Y_Q - Y_P = VY \cdot \Delta t^* \tag{15}$$

목적함수 C :

$$Z_Q - Z_P = VZ \cdot \Delta t^* \tag{16}$$

목적함수 D :

$$\begin{aligned} &\sqrt{(X_Q - Y_P)^2 + (Y_Q - Y_P)^2 + (Z_Q - Z_P)^2} \\ &= \sqrt{VX^2 + VY^2 + VZ^2} \cdot \Delta t^* \end{aligned} \tag{17}$$

식 (14)를 재정리하기 위해 식 (10)-(13)을 이용하면 다음 식을 얻는다.

$$\begin{aligned} F(\xi, \eta, \theta) &= A_1 + A_2 \xi + A_3 \eta + A_4 \xi \eta + A_5 \theta + A_6 \theta^2 + A_7 \theta \xi \\ A_8 \theta \eta + A_9 \theta \xi \eta + A_{10} \theta^2 \xi + A_{11} \theta^2 \eta + A_{12} \theta^2 \xi \eta &= 0 \end{aligned} \tag{18}$$

식 (15)를 재정리하기 위해 식 (10)-(13)을 이용하면 다음 식을 얻는다.

$$\begin{aligned} G(\xi, \eta, \theta) &= B_1 + B_2 \xi + B_3 \eta + B_4 \xi \eta + B_5 \theta + B_6 \theta^2 + B_7 \theta \xi \\ B_8 \theta \eta + B_9 \theta \xi \eta + B_{10} \theta^2 \xi + B_{11} \theta^2 \eta + B_{12} \theta^2 \xi \eta &= 0 \end{aligned} \tag{19}$$

식 (16)을 재정리하기 위해 식 (10)-(13)을 이용하면 다음 식을 얻는다.

$$\begin{aligned} H(\xi, \eta, \theta) &= C_1 + C_2 \xi + C_3 \eta + C_4 \xi \eta + C_5 \theta + C_6 \theta^2 + C_7 \theta \xi \\ C_8 \theta \eta + C_9 \theta \xi \eta + C_{10} \theta^2 \xi + C_{11} \theta^2 \eta + C_{12} \theta^2 \xi \eta &= 0 \end{aligned} \tag{20}$$

식 (17)을 재정리하기 위해 식 (10)-(13)을 이용하면 다음 식을 얻는다.

$$\begin{aligned}
 EF(\xi, \eta, \theta) = & D_1 + D_2\xi + D_3\eta + D_4\xi\eta + D_5\xi^2 + D_6\eta^2 \\
 & + D_7\xi^2\eta + D_8\xi\eta^2 + D_9\xi^2\eta^2 \\
 & + D_{10}\theta^3 + D_{11}\xi\theta^3 + D_{12}\eta\theta^3 + D_{13}\xi\eta\theta^3 + D_{14}\xi^2\eta^2 \\
 & + D_{15}\eta^2\theta^3 + D_{16}\xi^2\eta\theta^3 + D_{17}\xi\eta^2\theta^3 + D_{18}\xi^2\eta^2\theta^3 \\
 & + D_{19}\theta^3 + D_{20}\xi\eta^2\theta^3 + D_{21}\eta\theta^3 + D_{22}\xi\eta\theta^3 + D_{23}\xi^2\theta^3 \\
 & + D_{24}\eta^2\theta^3 + D_{25}\xi^2\eta\theta^3 + D_{26}\xi\eta^2\theta^3 + D_{27}\xi^2\eta^2\theta^3 \\
 & + D_{28}\theta^4 + D_{29}\xi\theta^4 + D_{30}\eta\theta^4 + D_{31}\xi\eta\theta^4 + D_{32}\xi^2\theta^4 \\
 & + D_{33}\eta^2\theta^4 + D_{34}\xi^2\eta\theta^4 + D_{35}\xi\eta^2\theta^4 + D_{36}\xi^2\eta^2\theta^4 = 0
 \end{aligned} \quad (21)$$

식 (18)-(21)에서 A, B, C, D 는 전개과정에서 도입된 각각의 계수들이다(Yeh and Shan, 2003 참조).

목표지점에 대한 미지의 벡터 를 고려하면 식 (18)-(21)은 폐합 비선형방정식의 형태로 선택될 수 있으며 Newton-Raphson 방법이 이들 방정식의 해를 구하는데 이용되었다. 본 연구에서는 3차원 문제에 대해 Picard 기법이 목표지점의 위치와 소요시간을 결정하는데 이용되었다.

입자추적 알고리즘의 검증

본 연구에서 제시된 입자추적 알고리즘을 검증하기 위해 이전 연구(Suk, 2003)에서 적용되었던 가상예제를 이용하였다. 본 예제에서는 비정상 균일유속장과 비정상 불균일유속장에서의 입자추적 모의결과를 해석해와 각각 비교하였다.

비정상 균일유속장에서의 후방입자추적

번째 시험모의는 가상유역인 3차원 정육면체 영역에서 모의수행 되었다. 대상유역에서의 비정상 균일 유속항은 다음 식과 같다고 가정하였다.

$$u(x, y, z, t) = \frac{1}{2} \left[-\sin\left(\frac{\pi t}{100}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right) \right]$$

$$v(x, y, z, t) = \frac{1}{2} \left[\sin\left(\frac{\pi t}{100}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right) \right]$$

$$w(x, y, z, t) = 0.1 \quad (22)$$

전술한 유속장에서 이동하는 입자의 궤적은 다음의 상미분방정식(ODE)의 해를 구함으로써 얻어질 수 있다.

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} \left[-\sin\left(\frac{\pi t}{100}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right) \right]$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{2} \left[\sin\left(\frac{\pi t}{100}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right) \right]$$

$$\frac{dz}{dt} = 0.1 \quad (23)$$

식 (23)의 ODE 시스템에 대한 해석해(analytic solution)는 다음과 같으며 이는 후방입자추적법의 모의결과를 검증하는데 이용되었다.

$$x(t) = x_0 + \frac{50}{\pi} \left[\sin\left(\frac{\pi t}{100}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right) - 1 \right]$$

$$y(t) = y_0 + \frac{50}{\pi} \left[\sin\left(\frac{\pi t}{100}\right) - \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right) + 1 \right]$$

$$z(t) = z_0 + 0.1t \quad (24)$$

대상영역은 $18 \times 18 \times 18$ 크기의 선형 육면체요소에 의해 분할되었다. 후방입자추적동안에 각 육면체요소는 $4 \times 4 \times 4$ 의 하부요소에 의해 세분되었다. $t=0$ 에서 입자의 초기위치 $(x_0, y_0, z_0) = (70, 40, 80)$ 이고 추적과정에서 이용된 시간단계 크기는 $\Delta t = 10$ 이다. 후방추적은 입자가 영역의 경계에 다다를 때 중단되며 추적과정동안에 발생된 시간단계의 총 수는 100이다. Fig. 3은 대상영역내에서 추적입자의 나선형궤적을 보여주고 있고 입자추적에 대한 수치해와 해석해와의 비교는 Fig. 4에 나타나 있다. 본 연구에서 적용된 후방 입자추적 알고리즘은 해석해인 Runge-Kutta 입자추적 알고리즘과 비교되었으며 그 결과

Table 1. Results in computation of unsteady uniform velocity field.

	Time step size	Number of time steps	Time period of traveling	Total CPU time(sec)	CPU time per step(sec)
Backward particle tracking algorithm	10	100	1000.0	6.20	0.06
Runge-Kutta particle tracking	1.0	1000	1000.0	236.0	0.24

는 Table 1에 나타내었다. 그림에서와 같이 후방 입자추적 알고리즘의 해는 해석해와 잘 일치하고 있어 양호한 정확성을 보이고 있었으며 도표에서와 같이 해의 효율성이 증가하고 계산비용이 상당히 감소하였음을 알 수 있었다.

비정상 불균일유속장에서의 후방입자추적

두 번째 시험모의는 3차원 직사각형 영역에서 수행되어졌으며 비정상 불균일유속장은 다음 식으로 나타낸다.

$$u(x,y,z,t) = \frac{y}{5} \left[\sin\left(\frac{\pi t}{50}\right) - \cos\left(\frac{\pi t}{50}\right) \right]$$

$$v(x,y,z,t) = \frac{x}{5} \left[\sin\left(\frac{\pi t}{50}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{50}\right) \right]$$

$$\frac{dz}{dt} = 4.0 \tag{25}$$

여기서 입자의 유속은 임의시간의 입자위치에서의 유속과 같다고 가정한다. 전술한 유속장에서의 입자의 궤적은 다음의 상미분방정식으로 해를 구함으로써 얻어질 수 있다.

$$\frac{dx}{dt} = \frac{y}{5} \left[\sin\left(\frac{\pi t}{50}\right) - \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right) \right]$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{x}{5} \left[\sin\left(\frac{\pi t}{50}\right) + \cos\left(\frac{\pi t}{100}\right) \right]$$

$$\frac{dz}{dt} = 4.0 \tag{26}$$

이러한 ODE 시스템은 해석해를 얻기가 어렵기 때문에 4차 Runge-Kutta 방법이 방정식의 해를 구하는데 이용되어졌다. 여기서 상미분방정식을 푸는 Runge-Kutta 방법은 앞 장의 Runge-Kutta 입자추적 알고리즘과는 다르다. 4차 Runge-Kutta 방법으로부터의 수치해는 현 후방 입자추적 알고리즘을 검증하기 위한 정확해(exact solution)로 이용될 것이며 4차 Runge-Kutta 기법에서 이용된 계산시간 간격은 0.01이다.

입자추적 알고리즘을 시험모의하기 위해 대상영역은 20×20×20의 선형육면체요소로 분할되었다. 후방입자추적 과정동안 각각의 육면체요소는 4×4×4의 하부요소로 세분화되었다. t=0에서 입자의 초기위치는 (x₀, y₀, z₀) = (-20, 72, 144)이며 추적과정에 이용된 계산시간간격의 크기는 Δt=0.5 이다. 후방추적과정은 영역의 경계면에 입자가 도달했을 때 중단된다. 본 예제에서 추적과정에 이용된 시간간격의 총 수는 50이다. Fig. 5는 영역내의 입자의 나선형궤적을 보여주며 알고리즘의 검증을 위한 해석해와의 비교는 Fig. 6에 나타나 있다. 또한 후방 입자추적알고리즘과 Runge-Kutta 입자추적알고리즘의 비교결과는 Table 2에 나타나 있다. 그림에서와 같이 입자추적알고리즘의 해는 해석해와 양호하게 일치하고 있어 만족할만한 정확성을 보이고 있었으며 도표에서와 같이 해의 효율성이 증가하고 계산비용이 대폭 감소하였음을 알 수 있었다.

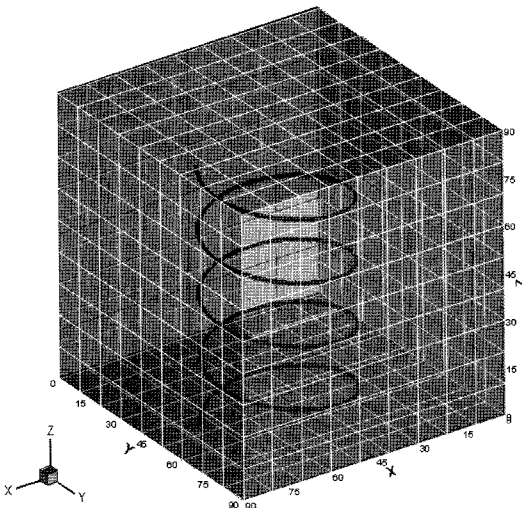


Fig. 3. Trajectory of particle in 3-D backward particle tracking.

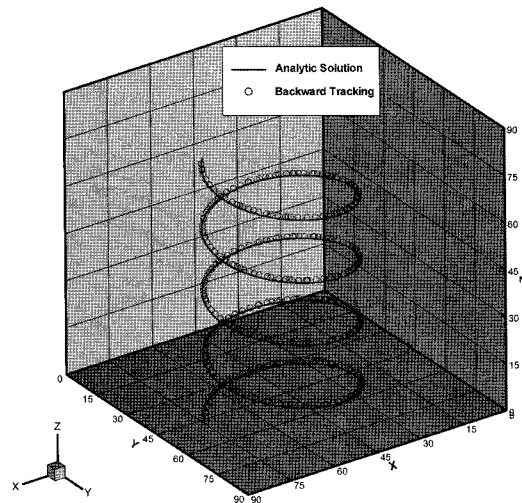


Fig. 4. Comparison of the trajectory with the analytic solution.

Table 2. Results in computation of unsteady non uniform velocity field.

	Time step size	Number of time steps	Time period of traveling	Total CPU time(sec)	CPU time per step(sec)
Backward particle tracking algorithm	0.5	50	25.0	7.5	0.15
Runge-Kutta particle tracking	0.01	2500d	25.0	850.0	0.34

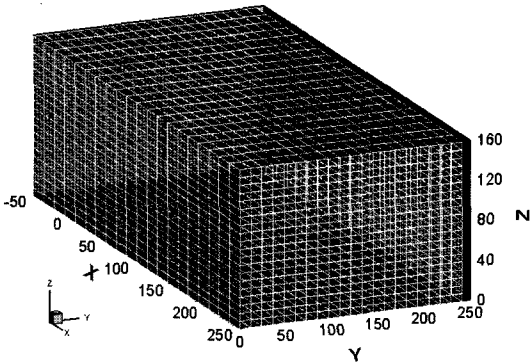


Fig. 5. Trajectory of particle in 3-D backward particle tracking.

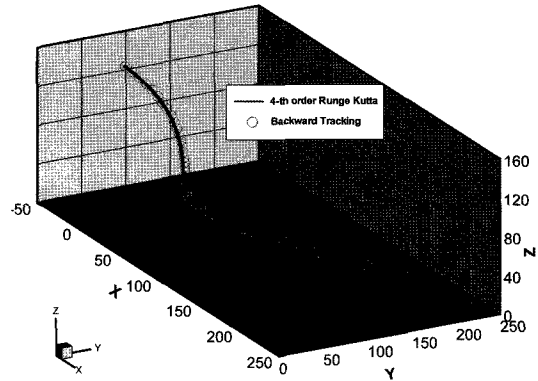


Fig. 6. Comparison of the trajectory with the analytic solution.

3차원 지하수 유동 모델링

본 연구에서 개발된 입자추적알고리즘을 3차원 지하수유동 알고리즘과 결합하여 혼합 LE-FEM 모형을 구축한 후 모형의 적용성을 검증하고자 하였다. 이를 위해 가상적인 3차원 양수시스템이 채택되었다(Yeh 등, 1992). 본 예제는 좌측과 우측의 경계면이 일정한 하천수위를 유지하고 있는 단일 양수정이 포함된 유역으로서 함양(recharge)과 양수(pumping)에 의한 비정상 지하수유동을 고려하였다.

대상영역의 전후면, 그리고 바닥면은 불투수성 재료로 가정하였고 지표면은 토양-대기의 경계면으로 이루어져 있다(Fig. 7). 초기조건으로서 지하수면은 수평방향으로 일정하며 대수층 바닥면으로부터 60 m로 가정되었다. 양수정은 (x, y) = (540 m, 400 m)에 위치되었고 모의수행 시작 5일후에 양수가 이루어졌다. 초기 양수정내의 수위는 초기 지하수면과 동일하며 양수시작 후 수위가 하강하여 30 m로 일정하게 유지되는 것으로 설정하였다. 대상유역의 매체는 등방성이며 포화수리전도율은 $K_{xx} = 5 \text{ m/day}$, $K_{yy} = 0.5 \text{ m/day}$, 그리고 $K_{zz} = 2 \text{ m/day}$ 로 가정되었다. 또한 토양은 공극율이 0.25, 초기 수분함량이 0.0125이며 토양의 답수수심(ponding depth)은 0로 가정하였다. 한편 토양의 불포화 수리특성은 다음 식으로 주어졌다.

$$\theta = \theta_s + (\theta_r - \theta_s) \frac{1}{1 + (\alpha(h_a - h))^{\beta}} \tag{27}$$

$$K_r = \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^2 \tag{28}$$

여기서 θ 는 수분함량이고 θ_s 는 포화수분함량, θ_r 는 잔류수분함량 혹은 초기수분함량이며 h 는 압력수두, h_b 와 h_a 는 수분함량과 상대수리전도율을 계산하는데 이용되는 매개변수이며 K_r 은 상대수리전도율을 나타낸다.

대상유역은 양수정을 중심으로 대칭이므로 $0 < x < 1000 \text{ m}$, $0 < y < 400 \text{ m}$, 그리고 $0 < z < 72 \text{ m}$ 에 해당하는 영역을 $20 \times 8 \times 10 = 1600$ 개 요소로 이산화되었다. x 방향으로의 이산화는 20~50 m의 범위를 가지는 반면 y 방향으로는

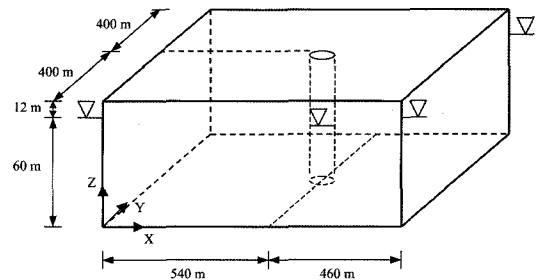


Fig. 7. Three-dimensional recharge and pumping problem (Yeh et al., 1992).

47 m로 증가치가 일정하며 z 방향으로의 이산화는 포화 지대에서는 20 m, 불포화지대에서는 0.25 m의 증가치를 이용하였다. 모의수행을 위한 초기조건은 총수두 $H = 60$ m 혹은 압력수두 $h = 60 - z$ 로 지정되어졌고 주어진 경계 조건으로는 $x = 0$, $0 < z < 60$ 에서 위치한 연직경계면은 정수압분포라고 각각 가정하였으며 모의시작 이후 10일간 5 cm/day의 강우조건과 그 이후 무강우 조건을 고려하여 유역의 표면선단부에 변동경계조건(variable boundary condition)을 지정하였다. 그 외의 모든 경계면은 비유동(no-flux) 조건으로 가정하였다. 모의수행을 위한 계산시간간격은 변동계산간격이 적용되었는데 초기 시간간격 크기는 1.0 시간이고 이후의 시간간격은 8.0 까지 단계별로 증가시켜 총 20 일을 모의하였다. 수치계산을 위한 압력수두의 허용오차는 비선형 반복기법에 대해서 10^{-3} m이며 선형 반복기법에 대해서 5×10^{-3} m를 사용하였으며 이완인자(relaxation factor)는 1.0으로 초기화되었다.

본 예제에서는 세 가지 시나리오에 의한 지하수 모델링이 수행되었다. 즉 (a) 양수전의 강우로 인한 함양에 따른 지하수 거동과 (b) 함양과 양수가 동시에 이루어졌을 때의 지하수 거동, 그리고 (c) 강우가 중단된 후의 양수에 의한 지하수 거동이 시간별로 각각 모의되었다. 개발된 혼합 LE 모형을 적용하여 모의한 결과 양수전의 함양에 의한 지하수면의 변동분포는 Fig. 8에 나타나 있고 함양과 양수가 동시에 이루어졌을 경우의 지하수면의 변동분포는 Fig. 9에 나타났으며 강우가 중단된 후 양수에 의한 지하수면의 변동 분포는 Fig. 10에 각각 나타나 있다. 또한 각각의 시나리오에 대한 Darcy 유속분포가 Fig. 11~13에 도시되었다. 그림에서 보는 바와 같이 입자추적기법을 도입한 3차원 지하수 유동 모형은 모든 시나리오에 있어서 합리적이고 타당한 결과를 제공하는 것으로 판단되었다. 또한 이전의 연구결과(Yeh 등 1992)와 유사한 지하수 거동을 예측할 수 있었으며 칩투나 양수와 같은 한계적인 경계조건에서도 안정적이고 만족할 만한 정확성을 가지는 해를 얻을 수 있었다.

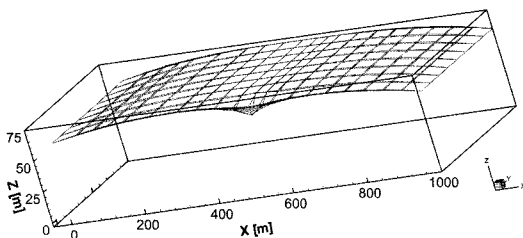


Fig. 8. Water table distribution for recharge period($t = 3$ day).

결론

본 연구에서는 입자추적 알고리즘을 도입한 향상된 혼합 LE 유한요소 기법을 3차원 지하수 유동시스템에 적용하여 한계적인 경계조건하에서의 실제적인 지하수 거동을 모의

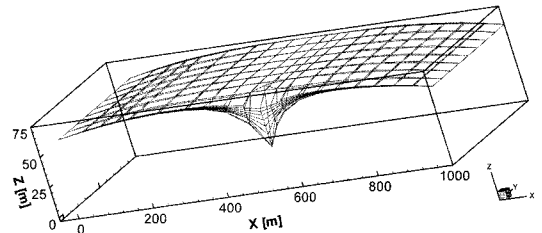


Fig. 9. Water table distribution for recharge and pumping period ($t = 6$ day).

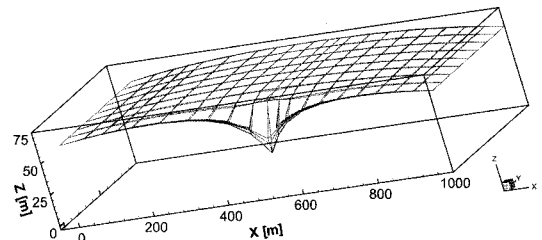


Fig. 10. Water table distribution for pumping period ($t = 15$ day).

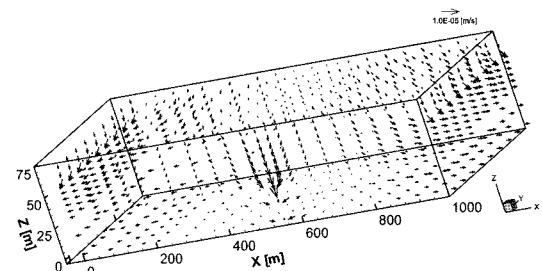


Fig. 11. Velocity distribution for recharge period ($t = 3$ day).

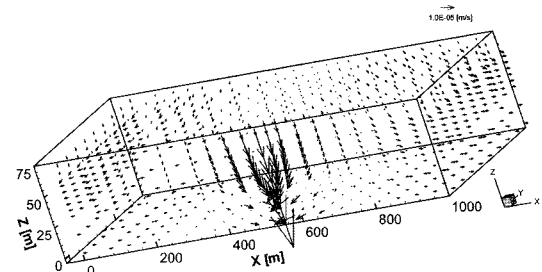


Fig. 12. Velocity distribution for recharge and pumping period ($t = 6$ day).

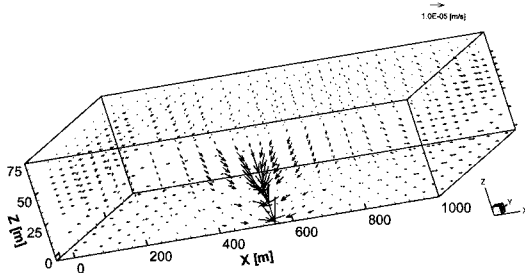


Fig. 13. Velocity distribution for pumping period ($t = 15$ day).

하고자 하였다. 이를 위해서 대상영역의 내부절점에 대해서는 후방입자추적법을 도입한 Lagrangian 접근법을 이용하였으며 경계절점에 대해서는 기존의 Eulerian 접근법인 FEM 수치기법을 적용하여 급선단부와 같은 불연속 구간에서의 수치적 오차 및 불안정성을 극복하고자 하였다.

본 연구에서 개발된 혼합 LE 유한요소 모형은 수치적 곱증을 위해 비정상 균일유속장과 비정상 불균일유속장에서 후방입자추적법에 의한 모의결과와 해석해인 Runge-Kutta 방법에 의한 결과와 비교하였다. 그 결과 알고리즘의 해가 해석해와 잘 일치하고 있어 양호한 정확성을 보이고 있었다. 아울러 계산결과를 비교하였을 때 해의 효율성이 증가하고 계산비용이 대폭 감소하였음을 알 수 있었다.

이를 바탕으로 수치적으로 개선된 알고리즘을 3차원 지하수 유동시스템에 적용시켜 한계조건을 반영한 가상구역에 적용을 하였다. 유역에 대한 모의는 양수전의 강우에 의한 함양과 강우 중의 양수, 그리고 강우중단 후의 양수과정을 각각 모의하여 실제적인 지하수 문제들을 모의수행하여 안정적이고 만족할 만한 해를 얻을 수 있었다. 따라서 본 연구에서 제시된 수치기법은 현저하게 감소된 계산적 비용으로 인해 지하수 유동해석에서 크게 향상된 계산효율성, 그리고 한계조건에서 발생하는 수치적 오차 및 불안정성을 감소시키는 정확성을 만족하는 정교한 수치모형을 제공할 것으로 판단된다.

사 사

이 논문은 2006년 정부(교육인적자원부)의 재원으로 한국학술진흥재단의 지원을 받아 수행된 연구임. (KRF-2006-214-D00173)

참고문헌

- Bensabat J., Zhou Q., and Bear J., 2000, An adaptive pathline-based particle tracking algorithm for the Eulerian-Lagrangian method, *Advances in Water Resources*, 23, 383-397.
- Cheng, H. P., J. R. Cheng, and G.T. Yeh, 1996, A particle tracking technique for the Lagrangian-Eulerian finite element method in multi-dimensions", *International J. Numerical Methods in Engineering* in January, 39(7), 1115-1136.
- Cheng, J. R., H. P. Cheng, and G. T. Yeh, 1996, A Lagrangian-Eulerian Method with Adaptively Local Zooming and Peak/Valley Capturing Approach to Solve Two-Dimensional Advection-Diffusion Transport Equations", *International J. of Numerical Methods in Engineering*, 39(6), 987-1016.
- Lin, H. C., D. R. Richards, G. T. Yeh, J. R. Cheng, H. P. Cheng, and N. L. Jones, 1997, FEMWATER: A Three-Dimensional Finite Element Computer Model for Simulating Density-Dependent Flow and Transport in Variably Saturated Media", Technical Report CHL-97-12. U.S. Army Corps of Engineers.
- Lu N. A., 1994, A semianalytical method of path line computation for transient finite difference groundwater flow models. *Water Resources Research*, 30(8), 2449-2459.
- Pollock D. W., 1988, Semianalytical computation of path line for finite-difference models, *Ground Water*, 26(6), 743-750.
- Schafer-Perini A. L. and Wilson J. L., 1991, Efficient and accurate front tracking for two-dimensional groundwater flow models, *Water Resources Research*, 27, 1471-1485.
- Suk, H., 2003, Development of 2-and 3-D Simulator for Three-Phase Flow with General Initial and Boundary Conditions on the Fractional Flow Approach, Ph.D. thesis, Dept. of Civil and Environmental Engineering. The Pennsylvania State University.
- Yeh, G. T., H. P. Cheng, G. B. Huang, F. Zhang, H. C. Lin, E. Edris, and D. Richards, 2004, A Numerical Model of Flow, Heat Transfer, and Salinity, Sediment, and Water Quality Transport in Watershed Systems of 1-D Stream-River Network, 2-D Overland Regime, and 3-D Subsurface Media(WASH123D: Version 2.0)" Technical Report, U.S. Army Corps of Engineers.
- Yeh, G. T. and Shan, H., 2003, BEST3D: A Bay and Estuary Model for Simulating Hydrodynamics and Thermal, Salinity, Sediment, and Water Quality Transport in 3-Dimensions. Technical Report. Dept. of Civil and Environmental Engineering, University of Central Florida.
- Yeh, G. T., Sharp-Hansen, S., Leuter, B., Stroble, R., and Scarborough, J., 1992, 3DFEMWATER/3DFEMWASTE: Numerical codes for delineating wellhead protection areas in agricultural regions based on the assimilative capacity criterion, EPA/600/R-92/223.
- Zhang, F., G. T. Yeh, J. C. Parker, and S. C. Brooks, 2005, Three Dimensional Reactive Chemical Transport Modeling in Groundwater of Watershed System, *Computer and Geosciences*.

2009년 5월 11일 원고접수, 2009년 6월 16일 게재승인

이재영

Department of Civil and Environmental
Engineering, University of Central Florida,
Engineering Bldg. I, Suite 322, 4000 Central
Florida Blvd. Orlando, FL 32816-2450, USA
TEL: 1-407-823-3019
FAX: 1-407-823-3315
e-mail: jylee@mail.ucf.edu

강미아

안동대학교 환경공학과
경북 안동시 송천동 388
TEL: 054-820-6267
FAX: 054-820-6267
e-mail: wdream@andong.ac.kr