

1차원 자유경계문제의 해석을 위한 Implicit 이동최소제곱 차분법

Implicit Moving Least Squares Difference Method for 1-D Moving Boundary Problem

윤 영 철†

Yoon, Young-Cheol

요 지

본 논문은 1차원 자유경계문제 해석의 정확도 향상을 위해 이동최소제곱 차분법을 이용하여 이동경계의 위상변화를 implicit하게 추적하는 기법을 제시한다. 기존의 이동최소제곱 차분법은 이동경계의 위치를 explicit하게 진전시켜 반복계산은 필요없지만 해의 정확도 감소를 피할 수 없었다. 그러나 본 연구에서 제시한 implicit 기법은 전체 계방정식이 비선형 시스템이 되어 반복계산 과정이 필요하지만, 실제로 수치예제를 통해 검증해 본 결과 계산량의 큰 증가없이 해석의 정확도를 획기적으로 향상시켰다. 이동하는 미분불연속 특이성을 갖는 용해(melting)문제를 수치계산한 결과, implicit 이동최소제곱 차분법을 통해 2차정확도를 얻을 수 있음을 보였다.

핵심용어 : 이동최소제곱 차분법, 1차원 자유경계문제, implicit 기법, 위상변화, 2차정확도

Abstract

This paper presents an implicit moving least squares(MLS) difference method for improving the solution accuracy of 1-D free boundary problems, which implicitly updates the topology change of moving interface. The conventional MLS difference method explicitly updates the moving interface; it requires no iterative solution procedure but results in the loss of accuracy. However, the newly developed implicit scheme makes the total system nonlinear involving iterative solution procedure, but numerical verification show that it dramatically elevates the solution accuracy with moderate computation increase. Through numerical experiments for melting problems having moving singularity, it is verified that the proposed method can achieve the second order accuracy.

Keywords : moving least squares finite difference method, 1-D free boundary problem, implicit scheme, topology change, second order accuracy

1. 서 론

자유경계문제(Free Boundary Problem)는 고체의 용융(melting), 액체의 고체화(solidification, freezing), two-phase 흐름(flow), 생체필름(bio film) 성장 등 다양한 분야의 응용문제와 연관이 깊다. 자유경계문제는 기본적으로 확산(diffusion) 또는 열전도 방정식과 같은 포물형(parabolic) 미분방정식 형태를 갖는데, 해석영역 내부에 존재하는 계면경계(interface)의 위치가 시간에 따라 바뀌고, 그 위치는 필드해(field solution, 주로 온도를 의미)와 함께 해(solution)의 일부로 구해야 하기 때문에 일반적으로 비선형 시스템을 수반하고 고난이도의 수치해석이 필요하다. 또한,

평행방정식 자체는 확산하는 특성을 갖고 있지만, 계면경계의 위상변화 추적을 위해 Level Set 방정식과 같이 쌍곡형(hyperbolic) 미분방정식 특성을 나타내는 추가적인 지배방정식을 도입하는 경우가 많기 때문에 수치해석에 어려움이 많다. 특히, 시간이 경과하면서 계면경계의 형상이 점점 복잡해지는 dendritic 고체화 문제의 경우, 자유경계의 모델링이 해석영역의 이산화에 위해 필요한 요소망(mesh)이나 그리드(grid) 구조와 계속적으로 문제를 일으키기 때문에 수치해석은 더욱 어려워진다(Yang, 1996; Chessa 등, 2002).

자유경계문제에서 자유경계는 잠열(latent heat)로 인한 열용량(heat capacity)의 불연속으로 인해 해의 미분장(derivative field)에 불연속을 야기시킨다. 자유경계문제의

† 책임저자, 정회원 · 명지전문대학 토목과 부교수
Tel: 02-300-1135 ; Fax: 02-303-1132
E-mail: ycyoon@mjc.ac.kr

• 이 논문에 대한 토론을 2012년 12월 31일까지 본 학회에 보내주시면 2013년 2월호에 그 결과를 게재하겠습니다.

해석을 위해 지배미분방정식을 직접 차분하는 방식의 연구들은 계면경계의 처리방법에 따라 크게 세 가지 정도로 나눌 수 있다. 첫째, Level Set Method(Osher 등, 1988)와 같이 지배방정식은 유한차분법으로 이산화하고, 계면경계를 진전시키기 위해 계면경계의 kinetics 관계에 대한 level set 방정식을 추가적으로 푸는 방법이다. 둘째, 전술한 방법보다 좀 더 직접적인 방법으로서 계면경계의 불연속 특이성을 유발하는 열원(heat source)을 Dirac delta 함수로 보고 모자(hat) 모양의 선형함수로 직접 이산화하는 방법인데, Immersed Boundary Method(IBM; Tu 등, 1992)가 대표적이다. 셋째, IBM을 개선하여 계면경계의 미분불연속 조건을 차분식에 직접 매입하는 방법으로서 Immersed Interface Method(IIM; LeVeque, 1994)를 들 수 있다. IIM은 계면경계 모델링과정에서 계면경계 형상의 고차미분에 대한 정보를 추가적으로 얻기 위해 절삭오차(truncation error) 조건식을 사용하는데 결과적으로 차분식의 형태가 매우 복잡해진다. Front Tracking Method(Juric 등, 1996) 역시 IIM을 기반으로 front-tracking 기법을 조합한 자유경계문제 해석기법의 하나이다.

본 연구에 앞서 윤영철 등(2009)은 계면경계조건을 이동최소제곱 차분법의 근사식 안으로 매입하여 1차원 이동경계문제를 해석할 수 있는 수치기법을 제안했다. 그 기법은 기존의 유한차분법 기반의 수치기법과 달리 그리드가 필요치 않으며 절점만을 이용하여 각 절점에서 차분식을 세워 지배방정식을 만족시킨다. 임의의 위치에서 자유로운 근사식 구성이 가능하며 그 근사식이 이동하는 자유경계의 위치를 결정하는데 필요한 조건식을 포함하고 있기 때문에 절점배치와 독립된 자유경계 모델링이 가능하다. 다만, 윤영철 등(2009)은 비선형 시스템을 피하고 계산 효율성을 높이기 위해 계면경계의 위치 결정시 이전 단계의 해석결과로부터 얻은 자유경계 속도값을 이용한 explicit 진전(update) 기법을 사용했기 때문에 최적의 정확도를 얻을 수 없었다.

본 연구에서는 해석의 정확도를 향상시키고 최적의 오차수렴률을 얻기 위해 현재 단계의 자유경계 속도를 이용하여 계면경계의 위치를 implicit한 방법으로 진전시키는 기법을 정식화한다. 현재의 해석단계에서 절점해(nodal solution)와 함께 계면경계의 위치도 미지값이기 때문에 결과적으로 반복계산을 통한 비선형 시스템을 풀어야 한다. 효과적인 implicit 알고리즘의 개발을 통해 계산 효율성을 크게 떨어뜨리지 않으면서도 explicit한 계면경계 진전으로 인해 얻을 수 없었던 2차정확도(second order accuracy)를 얻을 수 있는 기법을 제시하고자 한다.

2. 자유경계문제의 정식화

고체의 용융(melting) 현상을 모사하기 위한 Stefan 문제를 고려한다. 본 절에서는 편의상, 가정을 통해 재료의 밀도, 비열, 열전도율에 대한 표현을 방정식으로부터 효과적으로 제거했으나, 본 연구의 방법은 재료의 밀도, 비열, 열전도율을 모두 포함한 방정식에도 동일하게 적용될 수 있다. 식 (1)~(4)에는 반무한 영역에 대한 1차원 자유경계문제를 기술하는 지배방정식과 경계조건, 계면경계조건을 기술했다.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < s(t), \quad t > 0 \quad (\text{평형방정식}) \quad (1)$$

$$u(x=0, t) = f(t) \quad (\text{Dirichlet 조건}) \quad (2)$$

$$u(x=s(t), t) = 0 \quad \text{on } \Gamma \quad (\text{계면경계조건}) \quad (3)$$

$$v = -\alpha \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=s(t)} \quad \text{on } \Gamma \quad (\text{계면경계조건}) \quad (4)$$

여기서, $s(t)$ 는 시간 t 에서 계면경계의 위치이고, $v = \frac{ds(t)}{dt}$ 는 계면경계의 이동속도를 나타낸다. $\alpha = c(u_f - u_{ref})/L$ 는 Stefan 상수를 나타내고, u_{ref} 는 기준이 되는 온도, u_f 는 응결(또는 freezing) 온도, L 은 잠열(latent heat)을 의미한다. 식 (4)는 계면경계가 이동하는 kinetics와 열유속(heat flux)의 관계를 표현하는데, 추후 근사함수 유도과정에서 미분근사식에 매입되어 자유경계의 kinetics식을 포함한 근사함수가 유도된다.

3. Implicit 이동최소제곱 차분법을 사용한 자유경계문제의 이산화

3.1 확장된 이동최소제곱 차분법의 근사함수

1차원 문제의 경우, 미분 가능한 함수에 대해 m 차 이상의 고차항을 제외하고 Taylor 전개를 하면 정규해(regular solution)에 대한 다음 근사식을 세울 수 있다.

$$u_L^m(x) := u(y) + \dots + \left(\frac{x-y}{\rho} \right)^m \frac{\rho^m}{m!} u^{(m)}(y) \quad (5) \\ = \mathbf{p}_m^T(x, y) \mathbf{a}(y)$$

여기서, ρ 는 근사식을 계산하는 영향영역이며, 이동최소제곱법과 조합될 때 가중함수(weight function)의 영향반경을 가리킨다. 괄호속의 위첨자는 미분의 차수를 나타낸다. 다항식기저함수 $\mathbf{p}_m^T(x, y)$ 와 $u(x)$ 의 y 에서의 미분계수들을 포함

하는 벡터 $\mathbf{a}(y)$ 는 다음과 같다.

$$\mathbf{p}_m^T(x, y) = \left\{ 1, (x-y), \dots, \frac{(x-y)^m}{m!} \right\} \quad (6)$$

$$\mathbf{a}(y) = \{u(y), u^{(1)}(y), \dots, u^{(m)}(y)\}^T \quad (7)$$

미지의 미분계수 $u(y), \dots, u^{(m)}(y)$ 를 계산하기 위해 이동 최소제곱 근사에 포함된(x 로부터의 거리가 ρ 이내인) 절점들에 대해 다음과 같이 잔차식을 구성한다.

$$J := \sum_I w \left(\frac{x-y}{\rho} \right) \left\{ \mathbf{p}_m^T(x_I, y) \mathbf{a}(y) - u_I \right\}^2 \quad (8)$$

위 식의 $w \left(\frac{x-y}{\rho} \right)$ 는 $x=y$ 에서 1, x 가 y 로부터 ρ 이상 떨어진 곳에서는 0의 값을 갖는 임의의 형상을 갖는 가중함수이고, u_I 는 x_I 위치에서의 절점해이다. $\mathbf{a}(y)$ 는 $\frac{\partial J}{\partial \mathbf{a}}=0$ 조건으로부터 잔차식 J 를 최소화하고 y 를 x 로 치환하여 다음과 같이 구한다.

$$\mathbf{a}(x) = \left(\sum_I \mathbf{p}_m^T(x_I, x) w \left(\frac{x_I-x}{\rho} \right) \mathbf{p}_m^T(x_I, x) \right)^{-1} \cdot \left(w \left(\frac{x_1-x}{\rho} \right) \mathbf{p}_m^T(x_1, x), \dots, w \left(\frac{x_N-x}{\rho} \right) \mathbf{p}_m^T(x_N, x) \right) \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} \quad (9)$$

여기서, y 를 x 로 치환하는 것은 Taylor 다항식을 전개한 위치에서만 미분근사 한다는 의미이다. y 를 x 로 치환하는 과정을 기존의 무요소법 관련 논문에서는 ‘moving process’라고 부르기도 했다(Li 등, 1999). 이제 식 (9)를 일반화된 형상함수를 포함한 식 (10)과 같이 정리하면 편리하다.

$$\mathbf{a}(x) = \begin{pmatrix} D_x^{(0)} u(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ D_x^{(m)} u(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_1^{(0)}(\mathbf{x}) & \dots & \Phi_N^{(0)}(\mathbf{x}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_1^{(m)}(\mathbf{x}) & \dots & \Phi_N^{(m)}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} \quad (10)$$

여기서, $D_x^{(m)}$ 는 이동최소제곱 미분근사를 위한 x 에 대한 m 차 미분연산자를 의미한다.

이제 계면경계 주변의 특이해를 근사하기 위해 식 (5)의 Taylor 다항식에 썬기함수를 추가하고 미분점프값을 적용하면 시간 t 에서의 수정된 Taylor 근사식은 다음과 같다(윤영철 등, 2007d).

$$u_L^{m,w}(x, t) := \mathbf{p}_m^T(x, y) \mathbf{a}(y) + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right]_I b_I(x, t) \quad (11)$$

여기서, $b_I(x, t) = \|x - x_I(t)\|$ 는 선형썬기함수 또는 자유경계로부터 x 까지의 거리함수이다. $[f]_I = f^+ - f^-$ 는 계면경계 Γ 를 가로지르는 점프(jump) 연산자를 나타낸다. 그리고 $x_I(t)$ 는 x 에서 Γ 로의 투영점으로서 1차원문제의 경우 단순히 $s(t)$ 를 가리킨다. 본 연구에서 제시하는 implicit 이동 최소제곱 차분법은 $b_I(x, t)$ 의 정의를 위해 현재 시점에서 미지값인 자유경계의 이동속도 v^{n+1} 을 사용하기 때문에 전체 계방정식을 비선형 시스템으로 만드는데, 반복계산시 $b_I(x, t)$ 값이 매번 바뀌므로 지속적인 갱신이 필요하다. 한편, 미지벡터 $\mathbf{a}(y)$ 는 정규해 근사함수 경우와 동일하게 $\frac{\partial J}{\partial \mathbf{a}}=0$ 조건으로부터 계산한다.

얼음이 녹는 문제와 같은 1차원 자유경계문제에서 식 (4)를 활용하면 계면경계를 지나는 해의 미분 점프값을

$$\left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right]_I = \frac{\partial u^+}{\partial x} - \frac{\partial u^-}{\partial x} = \frac{v}{\alpha} \quad (12)$$

로 표현할 수 있고, 다시 식 (11)에 대입한 후, 형상함수에 대한 식으로 정리하면 다음과 같다.

$$u^{m,w}(x, t) : = \sum_I \Phi_I(x) \left\{ u_I - \frac{v}{2\alpha} b_I(x_I, t) \right\} + \frac{v}{2\alpha} b_I(x, t) \quad (13)$$

윗 식으로부터 식 (1)~(4)에 주어진 지배방정식을 이산화하기 위해 필요한 1차, 2차 미분근사식은 다음과 같이 얻는다.

$$D_x^{(1)} u^{m,w}(x, t) := \sum_I \Phi_I^{(1)}(x) \left\{ u_I - \frac{v}{2\alpha} b_I(x_I, t) \right\} - \frac{v}{2\alpha} \text{sign}(x - x_I(t)) \quad (14)$$

$$D_x^{(2)} u^{m,w}(x, t) := \sum_I \Phi_I^{(2)}(x) \left\{ u_I - \frac{v}{2\alpha} b_I(x_I, t) \right\} \quad (15)$$

여기서, 형상함수의 m 차 미분근사 $\Phi_I^{(m)}(x)$ 는 식 (10)에서 보듯이 형상함수 계산시 함께 얻어지고, 선형함수인 썬기함수에 대한 미분계산은 간단하므로 본 연구의 미분근사 과정은 매우 간결하고 계산효율성 측면에서 다른 수치기법과 비교하여 우수한 경쟁력을 가질 수 있다.

더욱이, 식 (13)~(15)에서 유도한 미분근사식은 계면경계의 특이성(미분 불연속)과 이동경계의 kinetics를 동시에 모델링할 수 있다는 장점을 갖는다. 따라서 본 연구의 해석

기법은 Level Set Method(Osher 등, 1988)나 Front-Tracking Method(Juric 등, 1996)와 같이 계면경계의 kinetics와 형상변화(topology change)를 모델링하기 위한 별도의 지배방정식이 필요 없다. 다만, 미분근사에 새롭게 도입된 자유경계의 이동속도 v 는 미지값이므로 계면경계에서 상변화가 일어날 때 온도가 규정값($u(x=s(t), t)=0$)이어야 한다는 조건(식 (3))으로부터 필요한 조건식을 얻는다.

3.2 자유경계 진전을 위한 Implicit 알고리즘

본 연구의 미분근사시 x (또는 x_I) 위치에서 썩기함수값 $b_I(x, t)$ (또는 $b_I(x_I, t)$)를 정의해야 하므로 $s^{n+1}(t)$ 값이 필요하다. 기존 연구에서 윤영철 등(2009)은 전체 계방정식이 비선형 시스템이 되는 것을 피하기 위해 다음과 같이 계면경계의 위치를 결정했다.

$$s^{n+1}(t) = s^n(t) + \Delta t \cdot v^n \tag{16}$$

여기서, Δt 는 시간적분을 위한 시간간격이다. 즉, 속도항을 한 단계 뒤로 지연시켜 현재 해석단계에서 이전 단계의 이동경계속도 v^n 을 사용했다. 기본적으로 자유경계문제는 온도해 u_I 와 함께 계면경계의 위치 $s^{n+1}(t)$ (또는 현재 해석단계에서의 이동경계속도 v^{n+1})도 미지값이기 때문에 비선형 시스템을 만들지만, 식 (16)과 같이 $n+1$ 단계에서의 계면경계 위치를 n 단계의 정보로만 정의하여 전체 계방정식을 반복계산이 필요 없는 선형 시스템으로 만든 것이다. 그러나 이와 같이 $s^{n+1}(t)$ 를 근사적으로 정의함으로써 계산은 쉽지만, 계면경계 위치를 찾는 계산과정이 어느 정도 오차를 포함할 수밖에 없다. 다행히, 윤영철 등(2009)에서 보듯이 이와 같은 오차는 발산하지는 않으나 해석단계가 진행되면서 자연스럽게 감소되지 않는 특징을 보인다.

본 연구에서는 해의 정확도 향상을 위해 속도항을 지연시키지 않고, 현재 단계에서의 속도를 사용하여 $n+1$ 단계의 계면경계의 위치를 다음과 같이 정의한다.

$$s_{(i)}^{n+1}(t) = s^n(t) + \Delta t \cdot v_{(i-1)}^{n+1} \tag{17}$$

여기서, 아래첨자는 반복계산 단계를 나타낸다. 즉, $v_{(i-1)}^{n+1}$ 는 $n+1$ 단계의 $i-1$ 번째 반복계산에서 얻은 자유경계 속도값이다. $s^n(t)$ 는 n 단계에서 반복계산을 통해 수렴된 값이다. $s_{(i)}^{n+1}(t)$ 정의시 v^n 대신 $v_{(i-1)}^{n+1}$ 를 사용하면서 $v_{(i-1)}^{n+1}$ 값이 수렴할 때까지 반복계산을 통해 전체 계방정식을 풀어야 하므

로 비선형 시스템이 된다. 단, i 번째 반복계산에서 $v_{(i)}^{n+1}$ 는 전체 계방정식을 풀어 구해야 하는 미지값이지만, $s_{(i-1)}^{n+1}(t)$ 는 바로 이전 반복 계산에서의 $v_{(i-1)}^{n+1}$ 를 이용하므로 미지값이 아니라는 것을 주의할 필요가 있다. 식 (17)은 v^n 없이 $v_{(i-1)}^{n+1}$ 만을 사용하여 v^{n+1} 을 정의하기 때문에 완전한 2차정확도 기법(second order scheme)은 아니지만, Backward Euler 차분과 유사하며 2차정확도에 근접하고 또 비교적 간단히 고려할 수 있는 진전방법이다.

매 해석단계의 반복계산시 다음 단계의 해석으로 넘어가기 위한 수렴여부의 판단은 속도항 또는 계면경계 위치의 상대 오차에 대한 다음 오차 기준값(error criterion)들을 활용한다.

$$\frac{\|v_{(i)}^{n+1} - v_{(i-1)}^{n+1}\|}{\|v_{(i-1)}^{n+1}\|} \leq \delta_v \tag{18}$$

$$\text{또는 } \frac{\|s_{(i+1)}^{n+1} - s_{(i)}^{n+1}\|}{\|s_{(i)}^{n+1}\|} \leq \delta_s \tag{19}$$

본 연구에서는 절점거리(특성길이) h 에 대해 $\delta_v = \xi h$ 또는 $\delta_s = \xi \Delta t h$ 로 정의하고 $\xi = O(10^{-5} \sim 10^{-6})$ 값을 적용했다.

3.3 평형 방정식의 이산화

열전달방정식을 기반으로 하는 자유경계문제의 평형방정식을 시간적분하기 위해 본 연구에서는 안정성(stability)의 문제가 없는 implicit법(음해법)인 Backward Euler법을 이용하여 다음과 같이 차분식을 구성한다.

$$(\mathbf{I} - \Delta t \Delta^h) u^{n+1} = u^n \tag{20}$$

여기서, 위첨자는 시간단계를 나타내고, Δ^h 는 이산화된 Laplace 연산자, \mathbf{I} 는 identity 연산자이다. Implicit 법은 Δt 의 크기에 상관없이 안정적이므로 계산 효율성과 목표하는 해의 정확도를 고려하여 Δt 의 크기를 결정한다.

계면경계로부터 멀리 떨어진 정규영역에서 평형방정식은 다음과 같이 간단히 이산화된다.

$$\sum_I \{\Phi_I(x) - \Delta t \Phi_I^{(2)}(x)\} u_I^{n+1} = \sum_I \Phi_I(x) u_I^n \tag{21}$$

한편, 계면경계 근방의 특이영역에서 평형방정식에 대한 차분식은 식 (13)과 (15)의 미분근사식을 이용하여 다음과 같이 구성한다.

$$\begin{aligned} & \sum_I \{ \Phi_I - \Delta t \Phi_I^{(2)}(x) \} u_I^{n+1} \quad (22) \\ & + \frac{v^{n+1}}{2\alpha} \left\{ \left(b_I^{n+1}(x,t) - \sum_I \Phi_I(x) b_I^{n+1}(x,t) \right) \right. \\ & \quad \left. - \Delta t \sum_I \Phi_I^{(2)}(x) b_I^{n+1}(x,t) \right\} \\ & = \sum_I \Phi_I u_I^n + \frac{v^n}{2\alpha} \left\{ b_I^n(x,t) - \sum_I \Phi_I(x) b_I^n(x,t) \right\} \end{aligned}$$

윗 식을 보면, $n+1$ 단계의 (i) 번째 반복계산에서 절점해 u_I^{n+1} 과 계면경계의 이동속도 v^{n+1} 는 미지값이지만 $b_I^{n+1}(x,t)$ 나 $b_I^{n+1}(x,t)$ 값은 $v_{(i-1)}^{n+1}$ 값에 종속되어 결정되므로 미지값이 아니라는 것을 주의할 필요가 있다. 결과적으로 미분근사식에 자유경계의 이동에 대한 kinetics 조건식이 포함되어 있기 때문에 계면경계를 이동시키기 위한 별도의 미분방정식의 도입은 필요 없다는 점이 중요하다. 따라서 이동최소제곱 차분법을 이용한 자유경계문제의 해석은 정적인 Eulerian 절점과 이동하는 Lagrangian 계면경계 모델링을 조합하여 지배방정식의 강형식을 직접 푸는 방식으로 이루어진다고 말할 수 있다.

4. 수치예제

4.1 1차원 반무한 공간에서의 용해문제

본 절에서는 Stefan 상수 $\alpha=0.2$, $f(t)=1$ (Dirichlet 조건)로 주어지는 반무한 공간에서의 용해문제를 고려한다. 이 문제에 대한 이론해는 열전단 문제의 해석적 접근에서 빈번하게 사용되는 상사법(Similarity Method)을 이용하여 계산할 수 있으며, $0 < x < s(t)$ 영역에 대해 시간에 따른 온도와 계면경계의 위치는 다음과 같다.

$$u(x,t) = 1 - \frac{\text{erf}(x/2\sqrt{t})}{\text{erf}(\lambda)}, \quad s(t) = 2\lambda\sqrt{t} \quad (23)$$

여기서, erf 는 에러함수(error function), λ 는 아래와 같은 초월함수 방정식의 해이다.

$$\sqrt{\pi} \lambda \exp(\lambda^2) \text{erf}(\lambda) = \alpha \quad (24)$$

해의 수렴률 조사를 위해 다음과 같은 L^2 오차 기반의 상대오차 정의를 사용한다.

$$E = \frac{\int_t \int_{\Omega} \| u^{nu} - u^{ex} \|_{L^2} d\Omega dt}{\int_t \int_{\Omega} \| u^{ex} \|_{L^2} d\Omega dt} \quad (25)$$

여기서, u^{nu} , u^{ex} 는 각각 수치해와 이론해이고, 그라디언트 (gradient)의 오차 계산시에도 동일하게 적용했다.

그림 1에는 81개 절점모델에 대한 계산결과로 얻은 시간에 따른 계면경계 위치를 도시했다($\Delta t=0.02$ 초, 60단계). 계면경계의 위치를 implicit(음해적) 알고리즘으로 진전시킨 해석결과가 기존의 explicit(양해적) 알고리즘보다 이론해와 더 잘 일치하는 것을 볼 수 있는데, explicit update(양해적 진전)의 경우, 초기단계에서 발생한 오차가 줄지 않고 유지되는 경향이 있는 반면(비록 발산하지는 않지만), implicit update(음해적 진전)의 경우, 초기에 어느 정도 시간단계가 지나면서 수치해가 이론해에 잘 수렴한 상태로 계속해서 정확한 계산이 이루어지고 있다. 또한, 그림 2는 시간에 따른 자유경계의 이동속도 계산결과인데, implicit update의 경우에는 초기단계부터 이론해와 잘 일치하고 있지만, explicit update의 경우에는 초기에 비교적 큰 오차가 발생한 후 해석이 진행되면서 감소되기는 하지만 감소되는 속도가 더디고 또 implicit update 수준까지 감소되지 않는다는 것을 알 수 있다. 그림 3에는 본 연구의 비선형 시스템 계산시 서로 다른 개수의 절점을 사용한 모델들에 대한 반복계산 횟수를 도시했다. 초기의 몇 단계를 제외하면 대부분의 반복계산은 4회~6회 사이에서 빠르게 수렴하는 것을 알 수 있으며, 절

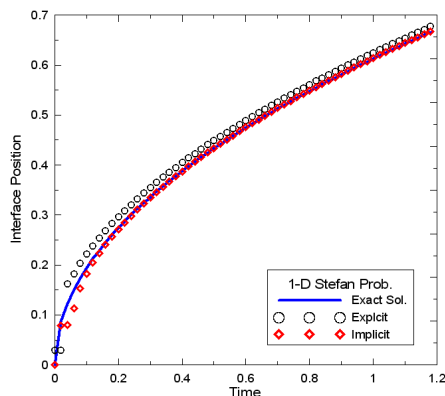


그림 1 시간에 따른 계면경계 위치의 변화

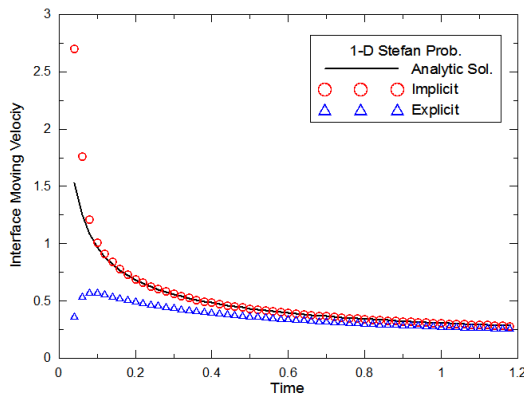


그림 2 시간에 따른 계면경계 이동속도의 변화

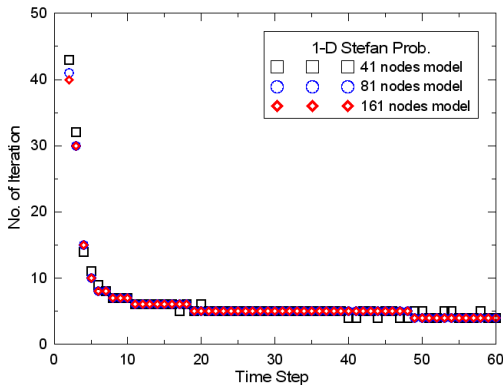


그림 3 절점갯수에 따른 반복계산 횟수

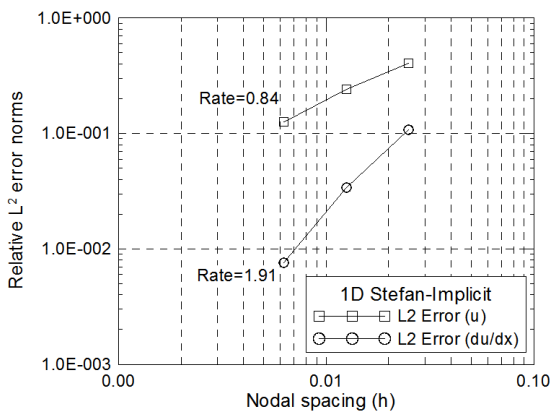


그림 4 해의 수렴률(시간과 공간에 대한 L_2 상대오차)

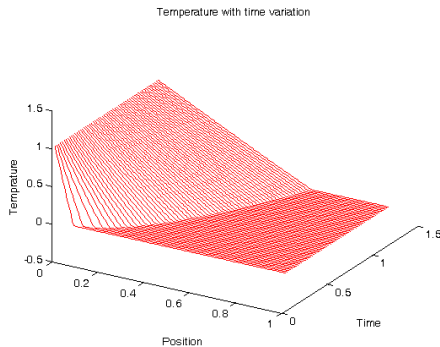


그림 5 시간에 따른 해(온도)의 변화

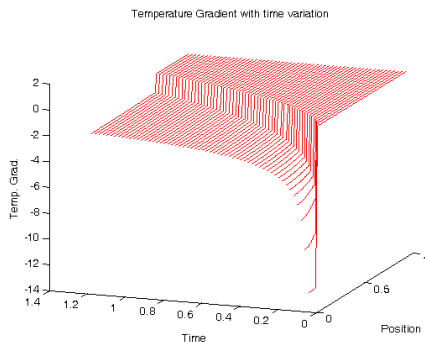


그림 6 시간에 따른 온도 그라디언트의 변화

점의 개수가 증가해도 반복계산 횟수는 거의 일정하게 유지된다. 초기의 반복계산 횟수가 상대적으로 많은 것은 초기 속도값 v^0 가 상당히 큰 값임에도 불구하고 계산의 편의상 0으로 가정하고 해석을 시작했기 때문이다. 그림 4에는 온도 해와 온도 그라디언트에 대한 상대오차 수렴률을 도시했는데, 계면경계에 존재하는 수학적 특이성(불연속성)에도 불구하고 2차정확도(second order accuracy)에 가까운 수렴률이 얻어졌다. 그림 5에는 161개 절점모델로 계산한 시간에 따른 온도변화 모습을 도시했는데, 식 (23)에서 보듯이 시간이 경과하면서 계면경계가 \sqrt{t} 함수의 형태로 이동하는 것을 확인할 수 있다. 그림 5는 시간에 따른 온도 그라디언트의 변화 모습인데, 계면경계에서 온도가 갑자기 변화하면서 생성되는 미분점프가 시간이 경과하면서 감소되는 현상을 smearing 현상 없이 날카롭게 잘 묘사하고 있다.

4.2 일정한 이동경계 속도를 갖는 자유경계문제

본 절에서는 $\alpha=1.0$, Dirichlet 조건이 $f(t)=\exp(t)-1$ 로 주어진 경우, 1차원 반무한 공간에서의 용해문제를 해석했다. 본 예제는 Dirichlet 조건을 조절하여 계면경계가 일정한 속도로 이동하도록 만든 경우인데, 자유경계문제의 이론해는 대부분의 경우 구하기 어렵지만, 이 경우에는 다음과 같이 이론해가 주어진다(Caldwell 등, 2004).

$$u(x,t) = \exp(t-x) - 1, \quad s(t) = t \quad (26)$$

그림 7에는 161개 절점모델을 이용한 계산결과로 얻은 시간에 따른 계면경계 위치를 이론해와 함께 도시했는데, 수치 해석 결과와 이론해가 서로 잘 일치하는 것을 볼 수 있다. 그림 8은 시간에 따른 온도 변화모습인데 계면경계가 일정한 속도로 이동하는 모습을 확인할 수 있다. 그림 9는 시간에

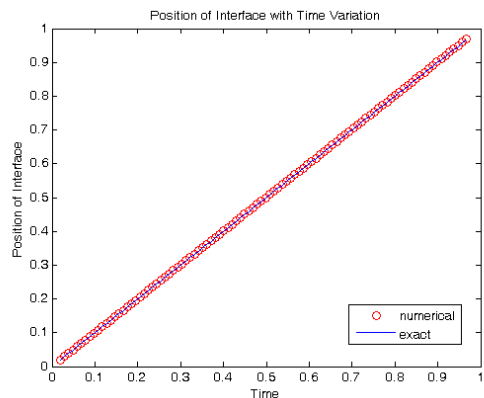


그림 7 시간에 따른 계면경계 위치의 변화

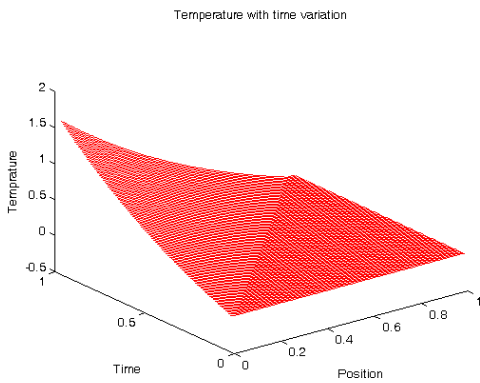


그림 8 시간에 따른 해(온도)의 변화

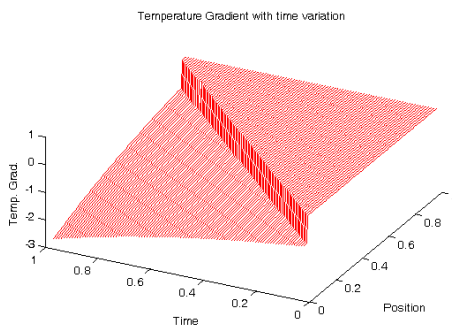


그림 9 시간에 따른 온도 그라디언트의 변화

따른 온도 그라디언트 변화모습으로서 계면경계에서 일정한 값을 갖는 온도 그라디언트의 점프가 smearing 현상이 잘 묘사되는 것을 볼 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 1차원 자유경계문제를 보다 정확하게 풀기 위해 implicit(음해적) 방법으로 계면경계를 진전시키는 이동최소제곱 차분법을 제안했다. 자유경계문제를 수치계산 할 때, 매 해석단계에서 열전달 방정식의 해인 온도뿐만 아니라 이동경계의 위치까지 미지값이 되면서 전체 계방정식이 비선형 시스템이 되기 때문에 반복해석기법을 도입했다. 연구결과, implicit(음해적) 알고리즘의 도입을 통해 계산량 증가가 크지 않은 반면, 해의 정확도는 획기적으로 향상되었다. 시간적분이 진행됨에 따라 비록 오차가 발산은 하지 않았으나 그 크기를 줄이기 어려웠던 기존의 explicit update(양해적 진전) 방법과 달리, 본 연구의 implicit update(음해적 진전) 방법은 매 해석단계에서 일정한 오차기준 이내에서 수렴한 해를 찾은 후 다음 단계로 넘어가기 때문에 정해와 매우 잘 일치하는 수치해를 얻을 수 있었다. 특히, 절점의 개수가 증가해도 반복계산 횟수가 거의 증가하지 않고 정확도를 잘 유지하는 것으로부터 본 연구의 수치기법이 자유경계문제의

해석에 있어서 수학적 특성이 우수한 이산화 방정식을 만들어내고, 또 비선형 시스템을 매우 안정적으로 풀어낸다는 것을 알 수 있었다. 물론, 자유경계의 기하학적 형상이 복잡해지고 절점의 개수가 상당히 늘어나는 2차원 문제에 대해서 추가적인 검증이 필요하지만, 본 연구에서 개발한 해석 알고리즘은 문제의 차원에 의존하는 ad hoc한 기법이 없기 때문에 2차원 또는 3차원 문제에도 자연스럽게 확장될 수 있을 것으로 판단된다.

수치예제들을 통해 본 연구의 해석기법이 계산효율성의 큰 희생 없이도 기존의 explicit update기법보다 더 정확한 해를 준다는 것을 구체적으로 보였으며, 체계적인 오차평가에 근거한 수렴률 산정을 통해 특이성을 갖는 자유경계문제에 대해 2차정확도에 거의 근접하는 높은 수렴률을 얻을 수 있음을 보였다.

감사의 글

이 논문은 2010년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단 기초연구사업의 지원을 받아 수행된 연구임(No. 2010-0006050).

참 고 문 헌

윤영철, 김동조, 이상호 (2007a) 탄성균열해석을 위한 그리드 없는 유한차분법, 한국전산구조공학회 논문집, 20(3), pp.321~327.

윤영철, 김효진, 김동조, 왕 캬 리우, 테드 벨리체코, 이상호 (2007b) 이동최소제곱 유한차분법을 이용한 응력집중문제 해석 (I): 고체문제의 정식화, 한국전산구조공학회 논문집 20(4), pp.493~499.

윤영철, 김효진, 김동조, 왕 캬 리우, 테드 벨리체코, 이상호 (2007c) 이동최소제곱 유한차분법을 이용한 응력집중문제 해석 (II): 균열과 국소화 밴드 문제로의 적용, 한국전산구조공학회 논문집 20(4), pp.501~507.

윤영철, 김도완 (2007d) 이동최소제곱 유한차분법을 이용한 계면경계를 갖는 이중재료의 열전달문제 해석, 한국전산구조공학회 논문집, 20(6), pp.779~787.

윤영철, 김도완 (2009) 확장된 이동최소제곱 유한차분법을 이용한 이동경계문제의 해석, 한국전산구조공학회 논문집, 22(4), pp.315~322.

Caldwell, J., Kwan, Y.Y. (2004) Numerical Methods for One-dimensional Stefan Problems, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 20, pp.535~545.

Chen, S., Merriman, B. Osher, S., Smereka, P.

- (1997) A Simple Level Set Method for Solving Stefan Problem, *Journal of Computational Physics*, 135, pp.8~29.
- Chessa, J., Smolinski, P., Belytschko, T.** (2002) The Extended Finite Element Method (XFEM) for Solidification Problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 53, pp.1959~1977.
- Belytschko, T., Lu, Y.Y., Gu, L.** (1994) Element-Free Galerkin Methods, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37, pp.229~256.
- Javierre, E., Vuik, C., Vermolen, F.J., van der Zwaag, S.** (2006) A Comparison of Numerical Models for One-dimensional Stefan Problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 192, pp.445~459.
- Juric D., Tryggvason, G.** (1996) A Front-tracking Method for Dendritic Solidification, *Journal of Computational Physics*, 123, pp.127~148.
- Kim, D.W., Yoon, Y.-C., Liu, W.K., Belytschko, T.** (2007a) Extrinsic Meshfree Approximation Using Asymptotic Expansion for Interfacial Discontinuity of Derivative, *Journal of Computational Physics*, 221, pp.370~394.
- Kim, D.W., Yoon, Y.-C., Liu, W.K., Belytschko, T., Lee, S.-H.** (2007b) Meshfree Collocation Method with Intrinsic Enrichment for Interface Problems, *Computational Mechanics*, 40(6), pp.1037~1052.
- LeVeque, R. J., Li, Z.** (1994) The Immersed Interface Method for Elliptic Equations with Discontinuous Coefficients and Singular Sources, *SIAM J. Numer. Anal.* 31, pp.1019~1044.
- Li, S., Liu, W.K.** (1999) Reproducing Kernel Hierarchical Partition of Unity, Part I-Formulation and Theory, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45, pp.251~288.
- Moes, N., Dolbow, J., Belytschko, T.** (1999) A Finite Element Method for Crack Growth without Remeshing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46(1), pp.131~150.
- Osher, S., Sethian, J.A.** (1988) Fronts Propagating with Curvature-dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations, *Journal of Computational Physics*, 79, pp.12~49.
- Tu, C., Peskin, C.S.** (1992) Stability and Instability in the Computation of Flows with Moving Immersed Boundaries: A Comparison of Three Methods, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* 13, pp.1361~1376.
- Yang, Zhiyun** (1996) A Cartesian Method for Elliptic Boundary Value Problems in Irregular Regions, Ph. D. Thesis, U. of Washington.

- 논문접수일 2012년 6월 26일
- 논문심사일
 - 1차 2012년 6월 28일
 - 2차 2012년 8월 29일
- 게재확정일 2012년 10월 10일