

2차원 수치해석을 이용한 오염물질의 거동해석

Numerical Analysis of Two-Dimensional Pollutant Transport Model

이정규* · 김광기**

1. 서 론

오염물의 이동현상을 정확하게 모의하기 위하여 이송·확산방정식을 여러 가지 수치기법을 이용하여 해석하였으며 계속해서 연구를 진행하고 있다. 본 연구에서는 이송항과 확산항을 분리한 후 각각의 물리적 특성에 알맞은 수치기법을 사용하는 연산자 분리기법을 이용해 2차원 이송·확산방정식을 해석하였다. 이송항의 경우 수치적으로 정확하고 안정한 파동방정식을 이용하였고 변동유속장 처리 및 하류로의 원활한 흐름해석을 위해 특선곡선법을 이용하였다. 확산항의 경우 Hobson에 의해 제안된 three-level, locally implicit 수치기법을 2차원으로 확장하여 기존의 양해법의 단점인 시간간격의 제약을 완화시킬 수 있는 정확하면서도 안정한 수치기법을 얻을 수 있었다. 본 모형을 정확해와 비교해 봤을 때 이송항의 경우 다양한 Cr(Courant) 수에 경우, 변동유속 및 비등간격인 격자에 경우에도 우수한 결과를 얻을 수 있었고, 확산항의 경우 ADI, LOD scheme 등 여러 가지 수치기법과 비교해 봤을 때, 안정하면서도 짧은 계산시간동안 정확한 결과를 얻을 수 있었다.

2. 이송·확산 방정식

수심방향의 농도변화를 무시할 수 있는 경우 2차원 이송·확산 방정식은 다음과 같다

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (1)$$

여기서 $C = C(x, y, t)$ 는 농도, $u = u(x, y, t)$, $v = v(x, y, t)$ 는 각각 x 방향과 y 방향 유속이며 D_x, D_y 는 각각 x 방향과 y 방향 확산계수이다.

식(1)을 연산자 분리기법(Abbott 1998)을 이용하여 이송항과 확산항을 분리하면 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\text{advection term} : \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = 0$$

$$\text{diffusion term} : \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}$$

연산자 분리기법을 이용한 이송·확산방정식 해석시 $n\Delta t \leq t \leq (n+1/2)\Delta t$ 의 시간간격에서는 이송만이 일어나고, $(n+1/2)\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$ 에서는 확산만이 일어나는 것으로 가정하되 각각의 강도를 실제의 두 배로 하여 전체 시간간격에 대해서는 실제와 같은 효과가 나타나도록 하는 것이다.

* 한양대학교 공과대학 도시건설환경공학과군 교수

** 한양대학교 대학원 토목공학과 석사과정

3. 수치해석

3.1 이송항의 수치기법

연산자 분리기법에 의해 분리되어진 1차원 이송방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

이 방정식을 이용한 이송방정식의 해석은 유한차분기법이나 유한요소법등 여러 가지 수치기법을 통해 이루어져 왔다. 하지만 1차 미분항으로 이루어진 이송방정식을 수치 해석하는 경우 수치감쇠, 위상오차 그리고 진동 등이 나타난다는 문제는 계속적으로 대두되고 있다.

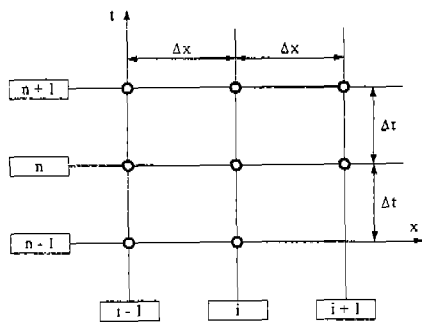
본 연구에서 제시하는 수치기법은 이러한 이송방정식의 단점을 없애기 위해, 1차 미분항으로 이루어진 이송방정식 대신 2차 미분항으로 이루어진 파동방정식을 이용하여 해석(Komatsu,1997) 하였다.

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - U^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \quad (3)$$

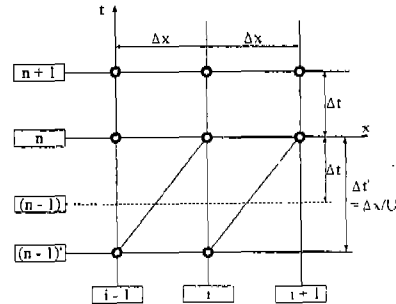
파동방정식은 전진파(advancing wave)와 후진파(backward wave)의 두 가지 형태로 이루어져 있고, 반면 이송방정식은 전진파로만 이루어져 있다. 따라서 본 연구에는 이송항 해석시 파동방정식의 전진파만을 이용하여 해석하였다.

Gaussian 분포같은 대칭형 분포의 전파를 계산할 때, 공간에 대해 대칭이었던 수치기법의 결과가 비대칭적인 형태로 나타난다는 사실을 알고 있다. 이는 이송항 해석과정에서 흐름방향(streamwise) 비대칭 흐름이 생겨 일어난 결과이다. 따라서 본 연구에서는 Fig. 1.과 같이 공간에 대해 비대칭이며 상류 흐름에 대하여 보다 많은 정보를 얻을 수 있는 다음과 같은 수치기법을 적용하였다.

$$\begin{aligned} & (1-x) \left(\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \right)_{i-1} + x \left(\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \right)_i \\ & - a^2 \left[\theta \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_{n+1} + (1-\theta) \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_n \right] = 0 \end{aligned} \quad (4)$$



<Fig.1> 유한차분 계산격자망



<Fig.2> 특성곡선을 이용한 유한차분 격자망

만약 $i-1$ 와 i 의 초기 분포가 이송과정에 정확하게 부합된 농도 분포를 가진다면, 수치 해석시 정확한 결과를 얻을 수 있지만, $i-1$ 의 초기 분포가 i 의 초기 분포와 다른 형태의 값을 가진다면 수치감쇠 등의 오차를 수치해석할 경우 나타날 수 있다. 이를 보완하기 위해 Fig.2와 같은 특성곡선을 이용한 수정 격자망을 사용하였다. 이로 인하여 $C_{i-1}^{(n-1)'} = C_i^n$, $C_i^{(n-1)'} = C_{i+1}^n$ 와 같은

관계를 얻을 수 있으며 다음과 같은 차분식을 얻게 된다.

$$2(1-x)[C_{i-1}^{n+1} - (\alpha+1)C_{i-1}^n + \alpha C_i^n] + 2x[C_i^{n+1} - (\alpha+1)C_i^n + \alpha C_{i+1}^n] \\ = \alpha(\alpha+1)\theta[C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}] + \alpha(\alpha+1)(1-\theta)[C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n] \quad (5)$$

여기서 α 는 Courant 수(= $U\Delta t/\Delta x$)이고 x , θ 는 2차원 시간과 공간에 대한 가중계수이다. 가중계수 x , θ 의 최적값은 Taylor Series Analysis를 통해 Cr수의 함수로 이루어진 $x=0.5155\alpha + 0.9688$, $\alpha\theta=-0.1691\alpha-0.3152$ 값으로 나타낼 수 있다.

식(5)와 가중계수 x , θ 를 이용한 이송수치기법은 다음과 같다.

· 1st Step (x-direction)

$$p_{x1}C_{i-1,j}^{n+1} + p_{x2}C_{i,j}^{n+1} + p_{x3}C_{i+1,j}^{n+1} = p_{x4}C_{i-1,j}^n + p_{x5}C_{i,j}^n + p_{x6}C_{i+1,j}^n \quad (6)$$

· 2nd Step (y-direction)

$$p_{y1}C_{i,j-1}^{n+1} + p_{y2}C_{i,j}^{n+1} + p_{y3}C_{i,j+1}^{n+1} = p_{y4}C_{i,j-1}^n + p_{y5}C_{i,j}^n + p_{y6}C_{i,j+1}^n \quad (7)$$

여기서, x-방향이면 $d=x$, y-방향이면 $d=y$

$$p_{d1} = 0.3776\alpha_{d0+} + 0.3152\alpha_{d0-} - 0.5467\alpha_{d1+} + 0.4843\alpha_{d1-} + 0.1691\alpha_d^2$$

$$p_{d2} = 1.3072 + 0.0624|\alpha_d| - 0.3382\alpha_d^2$$

$$p_{d3} = 0.3152\alpha_{d0+} + 0.3776\alpha_{d0-} + 0.4843\alpha_{d1+} - 0.5467\alpha_{d1-} + 0.1691\alpha_d^2$$

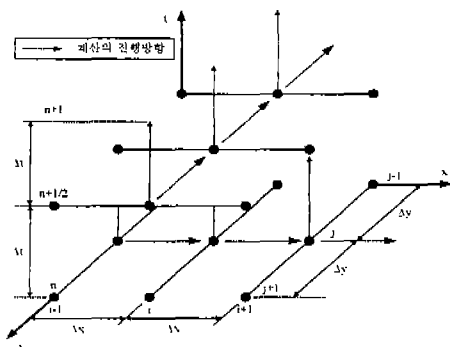
$$p_{d4} = 0.3776\alpha_{d0+} + 0.3152\alpha_{d0-} + 0.5157\alpha_{d1+} - 0.4533\alpha_{d1-} + 0.1381\alpha_d^2$$

$$p_{d5} = 1.3072 - 0.0624|\alpha_d| - 0.2762\alpha_d^2$$

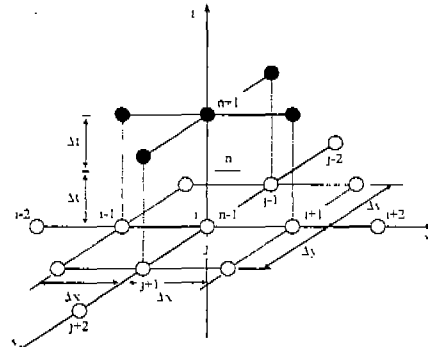
$$p_{d6} = 0.3152\alpha_{d0+} + 0.3776\alpha_{d0-} - 0.4533\alpha_{d1+} + 0.5157\alpha_{d1-} + 0.1381\alpha_d^2$$

$$\alpha_{d0+} = AINT\left[\frac{\alpha_d + 1}{|\alpha_d| + 1}\right] \quad \alpha_{d0-} = AINT\left[\frac{1 - \alpha_d}{|\alpha_d| + 1}\right]$$

$$\alpha_{d1+} = \frac{|\alpha_d| + \alpha_d}{2} \quad \alpha_{d1-} = \left|\frac{\alpha_d - |\alpha_d|}{2}\right| \quad \alpha_d = \frac{U\delta t}{\delta d}$$



<Fig. 3> 2차원 이송수치해석 과정 모식도



<Fig. 4> 2차원 확산수치해석 유한차분 격자망

3.2 확산항의 수치기법

1-차원 locally implicit 수치기법(Hobson 1996, 이정규 1997)과 마찬가지로 2차원 확산수치기법

도 양해법과 음해법의 특성을 절충해 만든 차분식을 확산에 적용하였다. 본 연구에서 제안하는 2차원 수치기법은 Fig.4와 같이 $p(i+2, j)$, $p(i-2, j)$, $p(i, j+2)$, $p(i, j-2)$, $p(i+1, j+1)$, $p(i-1, j+1)$, $p(i+1, j-1)$, $p(i-1, j-1)$ 의 수치격자를 이용하여 2차원 확산수치기법을 얻는 방법이다.

$$\begin{aligned} \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - C_{i+1,j}^{n-1}}{2\Delta t} &= \frac{D}{\Delta h^2} [(C_{i+2,j}^{n-1} - 2[(1-\alpha)C_{i+1,j}^{n-1} + \alpha C_{i+1,j}^{n+1}] + [\beta C_{i,j}^{n+1} + (1-\beta)C_{i,j}^{n-1}]) \\ &\quad + (C_{i+1,j+1}^{n-1} - 2[(1-\alpha)C_{i+1,j}^{n-1} + \alpha C_{i+1,j}^{n+1}] + C_{i+1,j-1}^{n-1})] \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - C_{i,j+1}^{n-1}}{2\Delta t} &= \frac{D}{\Delta h^2} [(C_{i+1,j+1}^{n-1} - 2[(1-\alpha)C_{i,j+1}^{n-1} + \alpha C_{i,j+1}^{n+1}] + C_{i-1,j+1}^{n-1}) \\ &\quad + (C_{i,j+2}^{n-1} - 2[(1-\alpha)C_{i,j+1}^{n-1} + \alpha C_{i,j+1}^{n+1}] + [\beta C_{i,j}^{n+1} + (1-\beta)C_{i,j}^{n-1}])] \end{aligned} \quad (9)$$

$$\frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta h^2} [(C_{i+1,j}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i-1,j}^{n+1}) + (C_{i,j+1}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j-1}^{n+1})] \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j-1}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n-1}}{2\Delta t} &= \frac{D}{\Delta h^2} [(C_{i+1,j-1}^{n-1} - 2[(1-\alpha)C_{i,j-1}^{n-1} + \alpha C_{i,j-1}^{n+1}] + C_{i-1,j-1}^{n-1}) \\ &\quad + ([\beta C_{i,j}^{n+1} + (1-\beta)C_{i,j}^{n-1}] - 2[(1-\alpha)C_{i,j-1}^{n-1} + \alpha C_{i,j-1}^{n+1}] + C_{i,j-2}^{n-1})] \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_{i-1,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n-1}}{2\Delta t} &= \frac{D}{\Delta h^2} [([\beta C_{i,j}^{n+1} + (1-\beta)C_{i,j}^{n-1}] - 2[(1-\alpha)C_{i-1,j}^{n-1} + \alpha C_{i-1,j}^{n+1}] + C_{i-2,j}^{n-1}) \\ &\quad + (C_{i-1,j+1}^{n-1} - 2[(1-\alpha)C_{i-1,j}^{n-1} + \alpha C_{i-1,j}^{n+1}] + C_{i-1,j-1}^{n-1})] \end{aligned} \quad (12)$$

위의 식들을 $C_{i,j}^{n+1}$ 에 대하여 풀어 정리하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{n+1} &= A (C_{i+2,j}^{n-1} + C_{i,j+2}^{n-1} + C_{i-2,j}^{n-1} + C_{i,j-2}^{n-1}) \\ &\quad + B (C_{i+1,j+1}^{n-1} + C_{i-1,j+1}^{n-1} + C_{i+1,j-1}^{n-1} + C_{i-1,j-1}^{n-1}) \\ &\quad + E (C_{i+1,j}^{n-1} + C_{i,j+1}^{n-1} + C_{i-1,j}^{n-1} + C_{i,j-1}^{n-1}) \\ &\quad + F C_{i,j}^{n-1} \end{aligned} \quad (13)$$

여기서,

$$\begin{aligned} A &= \frac{K^2}{[1 + (4\alpha + 4)K + (16\alpha - 4\beta)K^2]} \\ B &= \frac{2K^2}{[1 + (4\alpha + 4)K + (16\alpha - 4\beta)K^2]} \\ C &= \frac{K[1 - 4(1-\alpha)K]}{[1 + (4\alpha + 4)K + (16\alpha - 4\beta)K^2]} \\ E &= \frac{[1 + 4\alpha K + 4(1-\beta)K^2]}{[1 + (4\alpha + 4)K + (16\alpha - 4\beta)K^2]} \end{aligned}$$

안정해석(Stability Check)을 하면 다음과 같다.

$$C_{i,j}^n = C_0 \rho^{[k]\Delta t} e^{i\alpha(i)\Delta x} e^{i\beta(j)\Delta y} \quad (14)$$

식(14)를 이용하여 식(13)에 적용하면 다음과 같은 식을 얻는다.

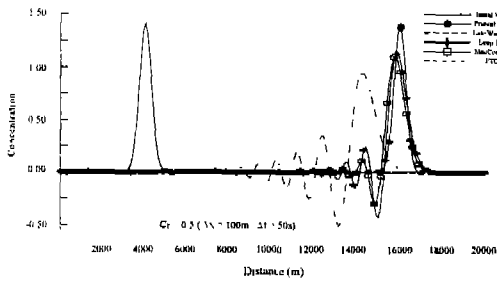
$$\rho^{2\Delta t} = A[8 \cos^2(\alpha \Delta x) - 4] + B[4 \cos^2(\alpha \Delta x)] + E[4 \cos(\alpha \Delta x)] + F \quad (15)$$

이를 정리하면 다음과 같다.

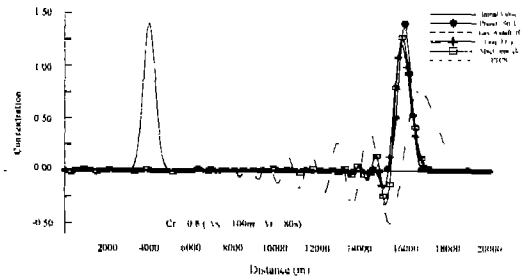
$$K \leq \frac{-12(\alpha+1) \pm \sqrt{\{12(\alpha+1)\}^2 - 112(-\alpha^2 + 6\alpha - 1 - 2\beta)}}{16(-\alpha^2 + 6\alpha - 1 - 2\beta)} \quad (16)$$

다음 조건을 만족할 최적 가중계수 α 와 β 는 각각 1/8와 1/2값을 갖는다.

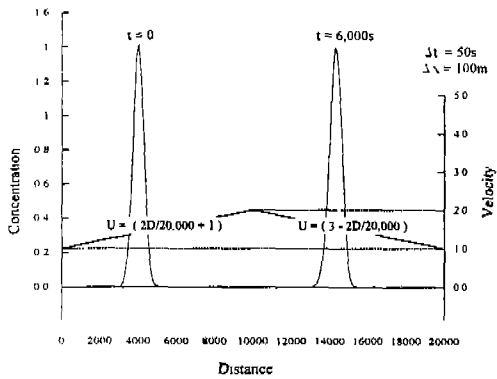
4. 모형의 검증 및 적용결과 고찰



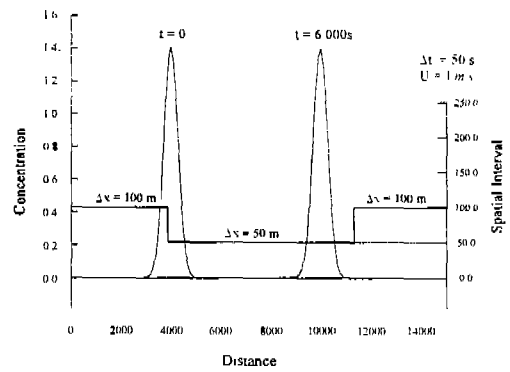
<Fig.5> Cr=0.5일 경우 이송항의 수치결과



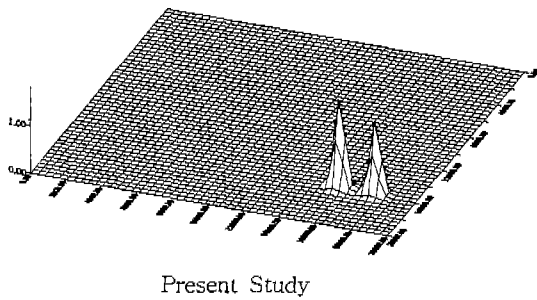
<Fig.6> Cr=0.2일 경우 이송항의 수치결과



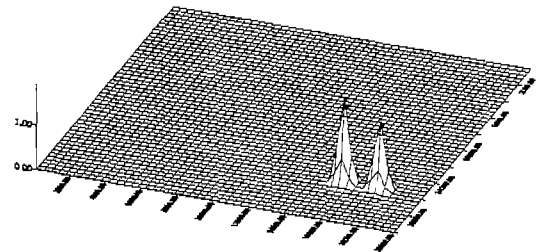
<Fig.7> 변동유속으로 해석한 이송항의 수치결과



<Fig.8> 변동 Δx으로 해석한 이송항의 수치결과

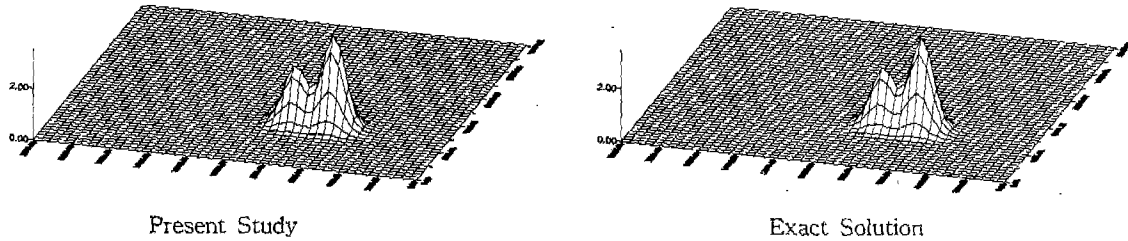


Present Study



Exact Solution

<Fig.9> 2차원 이송방정식의 결과



<Fig.10> 2차원 이송·확산방정식의 결과

5. 결 론

본 연구에서는 연산자 분리기법을 이용해 이송항은 파동방정식의 전진파를 특선곡선을 이용하여 해석하고, 확산항에 경우에는 Hobson의 three-level locally implicit 모형을 이용하여 2차원으로 확장시켜 만든 수치기법을 이용하였다. 2차원 이송·확산방정식의 해석결과를 정확해와 비교해본 결과 Cr수, 변동유속 및 변동공간격자에 대하여 적용하였을 경우에도 우수한 결과를 나타내고 있으며, 2차원 확산해석시 ADI(Fletcher 1990), LOD(Morton 1997) 수치기법보다 짧은 시간내에 정확한 해를 구하는 것으로 나타났다.

6. 참고문헌

- 이정규, 강창구, 1997. "연산자 분리기법에 의한 1차원 이송-확산방정식의 수치모형.", 한국수자원학회논문집, Vol. 30, pp. 143-154
- Komatsu, T., Ohgushi, K. and Asai, K., 1997. "Refined numerical for advective transport in diffusion simulation." *J. Hydr. Engrg., ASCE*, Vol. 123(1), pp. 41-50.
- Hobson, J. M., Wood, N., and Mason, P. J., 1996. "A new finite-difference Diffusion Scheme." *J. of Computational Physics*, Vol. 125, pp. 16-25.
- Fletcher, C. A. J., 1990. "Computational techniques for fluid dynamics.", Second Edition Springer-Verlag
- Morton, K. W. and Mayers, D. F., 1997. "Numerical Solution of Partial Differential Equation. Cambridge University Press
- Abbott, M. B. and Minns, A. W., 1998. "Computational Hydraulics." Second Edition, Ashgate