

연산자 분리기법에 의한 1차원 이송-확산방정식의 수치모형 Numerical Model of One-Dimensional Advection-Diffusion Equation Applying Split-Operator Method

이 정 규* · 강 창 구** · 이 중 인***
Lee, Jong-Kyu · Kang, Chang Ku · Lee, Jong In

Abstract

A numerical model for solving advection-diffusion equation is presented by split-operator method combining the Holly-Preissmann scheme with a fifth-degree interpolating polynomial for advection operator and the explicit scheme proposed by Hobson et al. for diffusion operator. To examine the developed model, the obtained numerical solutions are compared with both the analytic solution and those from the existing models for the instantaneous source (Gaussian hill) and the continuous source (advanced front) at upstream boundary with constant velocity and diffusivity condition. For the various cases having different Courant and Peclet numbers, it is shown that the present study provides stable solutions even for Courant numbers exceeding one. The results obtained by the present study also agree well with existing analytical solutions for both cases. The proposed explicit scheme somewhat releases the conventional restriction of explicit schemes for determining the time step size and provides satisfactory results for relatively large time step size.

요 지

이송항에는 5차 보간다항식을 사용하는 Holly-Preissmann 기법을, 확산항에는 Hobson 등이 제안한 양해법을 사용하는 연산자 분리기법을 이용하여 1차원 이송-확산방정식의 수치모형을 제안하였다. 제안된 모형을 검증하기 위하여 일정한 유속과 종확산계수를 갖는 순간적으로 부과된 오염원의 경우와 상류단에 연속적인 오염원을 갖는 경우에 대하여 본 모형의 해를 해석해와 기존의 모형으로부터 구한 해를 비교검토하였다. Courant 수와 Peclet 수를 가진 경우에 대한 수치해석을 통하여, 본 모형이 Courant 수가 1보다 큰 경우에 대해서도 안정된 해를 제공함을 알 수 있었으며, 해석해가 존재하는 경우에 본 모형을 적용하여 얻은 수치해와 비교한 바 전반적으로 잘 일치하였다. 본 모형의 확산항에 사용된 양해법에서는 일반적인 양해법의 단점인 계산시간간격의 제약이 상당히 완화되어 상대적으로 큰 계산시간간격에 대해서도 양호한 결과를 보였다.

- * 한양대학교 공과대학 토목공학과 교수
- ** 도화종합기술공사(주) 수자원개발실
- *** 한양대학교 대학원 토목공학과 박사수료

1. 서 론

자연상태에서 오염물의 이동을 정확히 표현하는 방정식은 3차원 이송-확산방정식이지만 횡단면에 대하여 완전혼합이 이루어진 경우 거시적으로 볼때 1차원적으로 해석될 수 있으며, 실제로 하천수계 전 구간을 대상으로 하는 확산모형 등에 있어서는 1차원 이송-확산방정식에 의한 해석이 널리 행하여지고 있다(Fischer 등, 1979).

이송-확산방정식은 쌍곡선형 특성과 포물선형 특성을 동시에 지니고 있으므로 이러한 두가지 특성을 살릴 수 있도록 이송항과 확산항을 분리하여 각각의 특성에 맞는 해석기법을 사용하는 연산자 분리법(split-operator method)이 많이 사용되고 있다(전경수와 이길성, 1994; 서일원과 김대근, 1994; 이희영 등, 1995; 김경섭, 1995; Cheng 등, 1984; Yeh, 1990). Holly와 Preissmann(1977)은 특성곡선 통과지점 양측의 두 격자점에서 농도 및 그 공간 미분값들을 계수로 하는, Courant 수의 함수인 3차 보간다항식을 도입하여 특성곡선을 따라 시간에 따른 전미분 형태로 근사시켜 방정식의 쌍곡선성을 반영하는 Holly-Preissmann 기법을 개발하였으며, Holly-Preissmann 기법으로 이송항을 풀고, 확산항의 계산에는 Crank-Nicolson 기법을 이용하는 모형을 수립하였다. 전경수와 이길성(1994)은 5차 보간다항식에 의한 Holly-Preissmann 기법과 Crank-Nicolson 기법을 이용한 모형(HP-CN 모형)을 수립하였다.

Park과 Liggett(1990, 1991)은 Taylor 급수와 최소자승법을 사용한 고차시간근사법(higher-order time approximation)에 기초한 Taylor-Least-Square(TLS) 방법으로 유한요소모형을 수립하여 2차원 및 3차원 이송-확산방정식을 해석하였다. TLS 모형은 이송-확산방정식의 이송과 확산연산자에 대하여 각기 다른 정확도로 차분하여 확산이 영(零)인 한계 내에서 3차의 정확도(3rd-order accuracy)를 달성하였다.

확산항의 해석에 있어서, 일반적인 양해법을 사용

할 경우 수치안정성을 만족시켜야 하기 때문에 계산 시간간격의 제약이 발생한다. 이러한 제약으로 인하여 각각의 계산단계에서의 계산시간은 짧지만 소요되는 계산시간간격의 증가로 인하여 전체계산에 있어서는 오히려 더 많은 시간이 걸리게 된다. DuFort와 Frankel(Abbott와 Basco, 1989)은 이러한 양해법과 음해법의 장점만을 취하는 차분기법을 제안하였다. 이는 계산시간도 짧고 해의 수렴을 위한 계산시간간격의 제약이 없지만, 계산시간간격이 매우 작을 때에만 정확한 해에 접근하는 단점이 있다. Hobson 등(1996)은 DuFort-Frankel의 차분기법을 변형하여 계산시간간격이 큰 경우에도 안정적인 해를 제공하는 방법을 제안하였다.

본 연구에서는 연산자 분리방법을 사용하여 1차원 이송-확산방정식의 해석을 위한 수치모형을 제안하였다. 5차 보간다항식에 의한 Holly-Preissmann 기법으로 이송항을 계산하고, 확산항은 Hobson 등(1996)의 차분기법을 이용하여, 양해법을 사용하여 확산항을 계산하면서도 Cr가 1 이상의 경우에도 적용할 수 있는 1차원 이송-확산모형을 구성하였다.

모형을 검증하기 위하여 일정한 유속과 확산계수에 대한 점오염원의 종확산문제와 상류단에 연속오염원을 갖는 종확산문제에 대하여 본 연구에서 제안한 모형을 적용한 계산결과를 해석해, HP-CN 모형 그리고 TLS 모형의 1차원 해석결과와 비교하였다.

2. 이송-확산방정식

유속과 종확산계수가 일정할 때 1차원 흐름에서의 이송-확산현상에 대한 지배방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1)$$

여기서, $C(x, t)$ 는 공간좌표 x 와 시간 t 의 함수인 농도이며, u 와 D 는 각각 유속과 종확산계수를 의미한다.

식 (1)은 이송만이 존재할 때와 확산만이 존재할 때, 즉 $D=0$ 일 때와 $u=0$ 일 경우에 대해, 이송방정

식인 식 (2)와 확산방정식인 식(3)과 같이 표현되며, 이들은 각각 쌍곡선형(hyperbolic type)과 포물선형(parabolic type)특성을 가진 미분방정식으로 된다.

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

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

이러한 이송-확산방정식은 1차원 등류에서의 이송-확산과 같은 특수한 경우에 대해서는 해석해가 존재하지만, 자연하도에서 발생하는 일반적인 경우에 적용할 수 있는 해석해는 없으므로 대부분 수치해석을 통하여 해를 구한다. 본 연구에서는 수치계산의 편이를 도모하기 위해 고정격자를 그대로 이용하면서 이로 인한 과도한 수치오차를 제어하기 위해 이송항의 처리에 있어서 특성곡선(characteristic line)의 정보전달 방향성을 고려하는, Eulerian-Lagrangian 기법을 사용한다. 이러한 기법의 적용을 위해서는 고정된 계산격자에서의 농도 뿐만 아니라 특성곡선이 통과하는 임의의 점에서의 농도값이 필요한데 이는 특성곡선 양측의 두점에서의 농도와 그 공간미분항 등에 의한 보간을 수행하여 얻게 된다.

식 (1)은 연산자 분리기법을 이용하여 다음과 같이 이송항과 확산항으로 분리할 수 있으며, 이를 반 시간간격(half-time step)에 대하여 적용하여 순차적으로 계산하게 된다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + 2u \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 2D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5)$$

즉, $n\Delta t \leq t \leq (n+1/2)\Delta t$ 에서는 이송만이 일어나고, $(n+1/2)\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$ 에서는 확산만이 일어나는 것으로 가정하되 각각의 강도를 실제의 두배로 하여 전체 시간간격에 대해서는 실제와 같은 효과가 나타나도록 하는 것이다. 결국 식 (4)와 식 (5)를 반 시간간격에 대하여 차분하면, 두배의 이송

과 확산 강도를 의미하는 $2u$, $2D$ 와 반 시간간격을 의미하는 $\Delta t/2$ 의 효과가 서로 상쇄되어 식 (1)을 차분한 식과 같은 형태를 가지게 된다.

3. 수치해석

3.1 이송방정식의 수치기법

이송-확산방정식에 의하여 지배되는 오염물의 이동현상에 있어서 물리적으로 확산현상이 지배적이면 이송-확산의 수치해에서 이송항의 오차는 큰 영향을 미치지 않는다. 그러나 이송에 의해서 지배되는 흐름에 있어서는 수치확산이 실제 물리적인 확산보다 커지게 된다. 따라서 이러한 오차의 발생을 억제하기 위해서 고차의 보간다항식을 사용한 보간의 수행이 필요하다.

식 (2)와 같은 일차원 이송방정식의 해는 다음과 같이 표현된다.

$$C(x, t + \Delta t) = C(x - u\Delta t, t) \quad (6)$$

식 (6)은 일정한 유속 u 를 갖는 흐름에서 시각 t 에서의 농도분포는 시간 Δt 가 지난후 그 농도분포형상의 변화없이 $u\Delta t$ 의 거리만큼 이동함을 의미한다. 다시 말하면 시각 t 에서 $(x - u\Delta t)$ 점의 농도는 시각 $t + \Delta t$ 에서 x 점의 농도와 같다는 것이다. 즉 x 점에서 미지(未知)의 농도는 $(x - u\Delta t)$ 점에서 기지(既知)의 농도값으로 구할 수 있다는 뜻이다. 따라서 시간단계 ($t + \Delta t$)에서 각각의 농도값은 t 에서의 값을 이용하여 양해법으로 구할 수 있다. 그러나 고정된 격자점에서의 농도값만을 알고 있을 때, $C(x - u\Delta t, t)$ 를 구하는 방법은 일반적인 양해법과는 구별된다.

식 (6)을 그림 1의 격자망에 대하여 적용하면 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$C_i^{n+1} = C_p^n \quad (7)$$

여기서 점 P 는 격자점 $(i, n+1)$ 을 지나는 특성곡선의 시간단계 n 에서의 위치로서 Δx 로 무차원화한 좌표는 (p, n) 이며 다음과 같은 관계를 가진다.

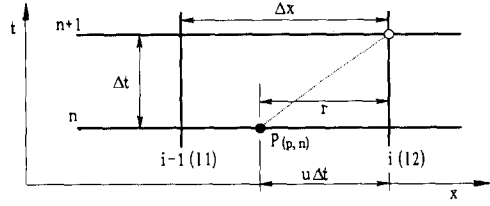


그림 1. 유한차분 격자망

$$(\Delta x)_p = (\Delta x)_i - u\Delta t \quad (8)$$

일반적으로 점 P 는 격자점상에 위치한다고 볼 수 없으므로 각각의 i 에 대하여 C_i^n 만을 알고 있다면 P 점에서의 농도 $C(x-u\Delta t, t_n)$ 을 구하기 위해서는 보간을 수행하여야 하며, 가장 간단한 방법은 x_{i-1} 과 x_i 사이의 농도변화가 선형적이라고 가정하는 것이다. 하지만 이 방법은 심각한 수치감쇠(numerical damping)효과가 나타날 수 있으며 이러한 수치감쇠는 더욱 정교한 보간법을 사용함으로써 감소시킬 수 있다(Holly와 Preissmann, 1977). 그 예로서 농도를 알고 있는 주위의 4점 즉, $i-2, i-1, i, i+1$ 을 사용하는 3차 보간(cubic interpolation)을 들 수 있다. 그러나 본 연구에서는 고차의 보간다항식을 세우기 위해 i 와 $i-1$ 의 범위를 넘는 점에서의 농도값을 이용하는 대신, i 와 $i-1$ 에서의 농도와 그 미분값을 이용하여 보간을 수행하기 때문에 단지 2점에서의 정보만으로도 보간을 수행할 수 있다. Cr 가 1을 넘을 경우 P 점이 $i-1 \sim i$ 의 범위를 넘게 되므로 일반적인 적용이 가능하도록 P 점 전후 격자점의 위치를 각각 $I1, I2$ 라고 하면 다음과 같이 표현되는 매개변수 r 을 정의할 수 있다.

$$r = I2 - p \quad (9)$$

식 (8)을 식 (9)에 대입하면 r 은 Cr 의 형태를 가짐을 알 수 있으며, Cr 가 1보다 큰 경우에는 Cr 의 소수 부분만을 의미한다.

보간함수에 의한 계산의 정확도를 향상시키기 위하여 Holly와 Preissmann(1977)은 3차 보간다항식을 사용하였으나, 본 연구에서는 이를 좀 더 확장한 5차 보간다항식을 사용한다(전경수와 이길성, 1994).

$$C_p^n(r) = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + a_3 r^3 + a_4 r^4 + a_5 r^5 \quad (10)$$

식 (10)의 보간다항식의 계수들은 점 P 양측의 두 격자점에서의 다음 조건들로 구할 수 있다.

$$C_p^n(0) = C_{I2}^n \quad (11a)$$

$$C_{x_p}^n(0) = C_{x_{I2}}^n \quad (11b)$$

$$C_{xx_p}^n(0) = C_{xx_{I2}}^n \quad (11c)$$

$$C_p^n(1) = C_{I1}^n \quad (11d)$$

$$C_{x_p}^n(1) = C_{x_{I1}}^n \quad (11e)$$

$$C_{xx_p}^n(1) = C_{xx_{I1}}^n \quad (11f)$$

여기서, C_x, C_{xx} 는 각각 C 의 1계와 2계 공간미분값을 의미하며 이들에 대한 보간다항식은 다음과 같이 식 (12)의 관계를 이용하여 식 (10)으로부터 구할 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} = -\frac{1}{\Delta x} \frac{\partial}{\partial r} \quad (12)$$

$$C_{x_p}^n(r) = (a_1 + 2a_2 r + 3a_3 r^2 + 4a_4 r^3 + 5a_5 r^4) \left(-\frac{1}{\Delta x} \right) \quad (13)$$

$$C_{xx_p}^n(r) = (2a_2 + 6a_3 r + 12a_4 r^2 + 20a_5 r^3) \left(-\frac{1}{\Delta x} \right)^2 \quad (14)$$

식 (10), (13), (14)에 식 (11)을 대입하여 각각의 계수값을 구할 수 있으며, 이를 C, C_x, C_{xx} 에 대한 다항식으로 정리하면 다음과 같이 표현된다.

$$C_i^{n+1} = C_p^n = A_1 C_{11}^n + A_2 C_{12}^n + A_3 C_{x_1}^n + A_4 C_{x_2}^n + A_5 C_{xx_1}^n + A_6 C_{xx_2}^n \quad (15)$$

$$C_{x_i}^{n+1} = C_{x_p}^n = B_1 C_{11}^n + B_2 C_{12}^n + B_3 C_{x_1}^n + B_4 C_{x_2}^n + B_5 C_{xx_1}^n + B_6 C_{xx_2}^n \quad (16)$$

$$C_{xx_i}^{n+1} = C_{xx_p}^n = D_1 C_{11}^n + D_2 C_{12}^n + D_3 C_{x_1}^n + D_4 C_{x_2}^n + D_5 C_{xx_1}^n + D_6 C_{xx_2}^n \quad (17)$$

식 (15)~(17)에서의 계수값들은 문헌 강창구 (1997)를 참조 바란다.

3.2 확산방정식의 수치기법

확산방정식의 수치해석에 있어서 단순 양해법을 사용할 경우 공간격자점 i 에서의 값을 계산할 때 $i+1$, $i-1$ 점에서의 영향밖에 고려되지 않으며 Δt 는 한 점에서 다음 점으로 확산이 발생하는 시간보다 작거나 같아야 하는 등의 계산시간간격 제약이 발생한다 (Hobson 등, 1996). 한편 음해법을 사용할 경우 각각의 계산시간단계에서, 공간격자점 i 에서 계산을 수행할 때 다른 모든 공간격자점의 영향이 고려되므로 시간간격의 제약이 없다. 그러나 행렬의 계산이 필요하여 계산시간단계당 많은 계산시간이 소요된다. 여기서 계산시간의 큰 변동 없이 두 방법의 절충을 생각해 볼 수 있다.

만일, i 번째의 격자점을 계산하는데 있어서, $i+1$ 과 $i-1$ 에서의 미지값과 $i+2$ 와 $i-2$ 에서의 기지값을 사용하여 식을 세운다면, 이는 i 를 기준으로 보면 2점이나 떨어진 곳의 영향을 고려하는 결과가 되고, 계산시간간격의 제약이 완화될 것을 예측할 수 있다. 이러한 개념을 바탕으로 공간격자점 i 에서 다음과 같이 3개의 식을 세울 수 있다.

$$\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i+1}^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x} \left(\frac{C_{i+2}^{n-1} - C_{i+1}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{C_{i+1}^{n+1} - C_i^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad (18)$$

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x} \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_i^{n+1}}{\Delta x} - \frac{C_i^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad (19)$$

$$\frac{C_{i-1}^{n+1} - C_{i-1}^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x} \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{C_{i-1}^{n+1} - C_{i-2}^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad (20)$$

식 (18)~(20)에서 알 수 있듯 $i+2$ 와 $i-2$ 에서의 항들은 $t-\Delta t$ 에서 정해지고 우변의 다른 모든 항들은 ($t+\Delta t$)에서 정해진다. 따라서 미지수는 C_{i-1}^{n+1} , C_i^{n+1} , C_{i+1}^{n+1} 3개이고, 식 또한 3개 이므로 이들을 연립하면 해를 구할 수 있다. 단, 여기서 위의 식들로 구하고자 하는 것은 C_i^{n+1} 하나이다. 다시 말하면, 위 식들은

C_{i-1}^{n+1} , C_i^{n+1} , C_{i+1}^{n+1} 모두를 구하기 위한 식이 아니라, 단지 C_i^{n+1} 를 구하기 위한 식이며 다른 미지수를 구하려면 해당 격자점에서의 새로운 연립방정식을 세워야 한다. 이 식들은 각각의 격자점에서 직접적으로 계산되기 때문에 양해법이라 할 수 있고 단순 양해법보다는 다소 복잡하지만 음해법보다는 간단하다. 이 차분식은 물리적으로 $\Delta t \leq (2\Delta x)^2 / (4D) = (\Delta x)^2 / D$ 일 경우 안정하며, 실제 안정해석(stability analysis)에서는 무조건 안정한 것으로 나타났다(Hobson 등, 1996).

Δx 를 상수로 가정하고 식 (18)~(20)을 연립하여 정리하면 다음과 같이 하나의 식으로 표현할 수 있다.

$$(2K^2 + 4K + 1) \left(\frac{C_i^{n+1} - C_i^{n-1}}{2\Delta t} \right) = D \left(\frac{C_{i+1}^{n-1} - 2C_i^{n-1} + C_{i-1}^{n-1}}{\Delta x^2} + 4K \frac{C_{i+2}^{n-1} - 2C_i^{n-1} + C_{i-2}^{n-1}}{(2\Delta x)^2} \right) \quad (21)$$

여기서, $K=2D\Delta t/(\Delta x)^2$ 이다.

식 (21)의 우변은 두 부분으로 분리될 수 있다. 첫 번째 부분은 단순 양해법과 같은 형태이고, 두 번째 부분은 역시 단순 양해법이지만 두배의 공간격자간격을 가지고 가중치($4K$)가 곱해져 있다. 이는 다시 시간미분항의 관점에서 식 (22)와 같은 미분방정식으로 나타낼 수 있다.

$$\phi \frac{\partial C}{\partial t} = X \left[\frac{\partial C}{\partial t} \right]_{\Delta x} + \psi \left[\frac{\partial C}{\partial t} \right]_{2\Delta x} \quad (22)$$

여기서, $[\partial C/\partial t]_{\Delta x}$ 와 $[\partial C/\partial t]_{2\Delta x}$ 는 각각 격자간격 Δx 와 $2\Delta x$ 에 의한 양해법을 나타낸다. 일반적인 양해법은 K 값이 작을 때 효과적이므로 계산수행에 있어서 한 계산시간단계에 한 공간격자 이하를 진행할 뿐이다. K 값이 증가함에 따라 계산지점에서 보다 많이 떨어진 점의 정보를 필요로 하게 되고 따라서 ψ 값이 K 에 비례할 것을 예측할 수 있으며, 식 (21)에서 $X=1$, $\psi=4K$, $\phi=2K^2+4K+1$ 의 관계가 성립됨을 알 수 있다.

한편, 식 (22)의 우변의 두항이 그 자체로 완벽한 확산방정식의 차분식이기 때문에 이 식에서 확산의 정확한 함을 이루기 위해서는 $X+\psi=\phi$ 의 관계를 만족해야 한다. 그러나 위의 관계에서 알 수 있듯이 $X+\psi < \phi$ ($1+4K < 2K^2+4K+1$)의 관계를 나타내므로 이 차분식은 실제보다 확산을 적게 나타내고 있고, 그로 인해 시간지체(time-lag)가 발생한다. 따라서 이 차분식은 무조건 안정하지만 K 가 0에 접근해야만 (즉 $2K^2+4K+1 \rightarrow 4K+1$) 정확해에 근접한다는 단점을 안고 있으므로 이러한 단점을 해결하기 위해 다음과 같은 값을 사용할 수 있다.

$$X=1, \psi=4K, \phi=4K+1$$

위의 값들을 사용하여 식 (23)과 같은 형태의 차분식을 세울 수 있다.

$$(4K+1) \left(\frac{C_i^{n+1} - C_i^{n-1}}{2\Delta t} \right)$$

$$= D \left(\frac{C_{i+1}^{n-1} - 2C_i^{n-1} + C_{i-1}^{n-1}}{\Delta x^2} + 4K \frac{C_{i+2}^{n-1} - 2C_i^{n-1} + C_{i-2}^{n-1}}{(2\Delta x)^2} \right) \quad (23)$$

식 (23)을 다시 식 (18)~(20)과 같은 형태로 표현하면

$$\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i+1}^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x} \left(\frac{C_{i+2}^{n-1} - C_{i+1}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{C_{i+1}^{n+1} - (2C_i^{n+1} - C_i^{n-1})}{\Delta x} \right) \quad (24)$$

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x} \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_i^{n+1}}{\Delta x} - \frac{C_i^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad (25)$$

$$\frac{C_{i-1}^{n+1} - C_{i-1}^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x} \left(\frac{(2C_i^{n+1} - C_i^{n-1}) - C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{C_{i-1}^{n+1} - C_{i-2}^{n-1}}{\Delta x} \right) \quad (26)$$

이며, 식 (24)와 식 (26)에서 양해법과 음해법의 가중평균을 도입하면 다음과 같은 식을 얻을 수 있다.

$$\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i+1}^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{D}{\Delta x} \left(\frac{(C_{i+2}^{n-1} - [(1-\alpha)C_{i+1}^{n-1}] + \alpha C_{i+1}^{n+1})}{\Delta x} - \frac{[(1-\alpha)C_{i+1}^{n-1}] + \alpha C_{i+1}^{n+1} - [\beta C_i^{n+1}] + (1-\beta)C_i^{n-1}}{\Delta x} \right) \quad (27)$$

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^{n-1}}{2\Delta t} =$$

$$\frac{D}{\Delta x} \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_i^{n+1}}{\Delta x} - \frac{C_i^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad (28)$$

$$\frac{C_{i-1}^{n+1} - C_{i-1}^{n-1}}{2\Delta t} =$$

$$\frac{D}{\Delta x} \left(\frac{[\beta C_i^{n+1} + (1-\beta)C_i^{n-1}] - [(1-\alpha)C_{i-1}^{n-1} + \alpha C_{i-1}^{n+1}]}{\Delta x} \right. \\ \left. \frac{[(1-\alpha)C_{i-1}^{n-1} + \alpha C_{i-1}^{n+1}] - C_{i-2}^{n-1}}{\Delta x} \right) \quad (29)$$

식 (27)~(29)를 K 를 이용하여 정리하여 연립하면 다음과 같은 양해법 형태의 차분식을 얻을 수 있다.

$$[1 + 2K(1+\alpha) + 2K^2(2\alpha-\beta)] \left(\frac{C_i^{n+1} - C_i^{n-1}}{2\Delta t} \right) \\ = D \left([1 - 2K(1-\alpha)] \frac{C_{i+1}^{n-1} - 2C_i^{n-1} + C_{i-1}^{n-1}}{\Delta x^2} \right. \\ \left. + 4K \frac{C_{i+2}^{n-1} - 2C_i^{n-1} + C_{i-2}^{n-1}}{(2\Delta x)^2} \right) \quad (30)$$

안정해석에 의하면 식 (30)은 다음과 같은 조건을 만족하여야 안정하다(Hobson 등, 1996).

$$K \leq \frac{3 + 3\alpha + \sqrt{16\alpha^2 - 24\alpha + 16 + 28\beta}}{2\alpha^2 - 12\alpha + 2 + 8\beta} \quad (31)$$

여기서, 전술한 바 있는 물리적 안정조건($\Delta t \leq \Delta x^2/D$)과 K 의 정의에서 $K \leq 2$ 라는 조건을 얻을 수 있고, 그 한계값인 $K=2$ 를 사용하면, 식 (24)~(26)에서 보여지는 $\beta = 2\alpha$ 의 관계와 식 (31)로부터 $\alpha = 3/4$ 과 $\beta = 3/2$ 을 얻을 수 있다.

3.3 초기 및 경계조건

본 연구에서는 1차원 이송-확산방정식의 정확해가 존재하는 순간적으로 부하된 오염원의 경우와 상류단에 연속적인 오염원을 갖는 경우에 대하여 수치해석을 수행하였다. 전자의 경우 일정한 유속과 종확산계수를 갖는 단위 흐름면적당 질량 M 의 오염물이 x

$=0$ 에 순간적으로 방류되고 t_0 의 시간이 경과된 후의 농도분포를 초기조건으로 사용하였으며, 후자의 경우 $x=0$ 에서의 농도가 C_0 로 일정하게 유지되는 농도분포를 사용하였다. 이들 초기농도분포는 각각 식 (32), (33)과 같이 표현된다(Liggett, 1994).

$$C(x, t_0) = \frac{M}{\sqrt{4\pi D t_0}} \exp\left[-\frac{(x-ut_0)^2}{4Dt_0}\right] \quad (32)$$

$$C(x, t_0) \\ = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{x-ut_0}{2\sqrt{Dt_0}} + \exp\left(\frac{ux}{D}\right) \operatorname{erfc} \frac{x+ut_0}{2\sqrt{Dt_0}} \right] \quad (33)$$

여기서, $C_0(x)$ 는 초기농도분포이다.

경계조건으로 상류단의 농도는 일정하게 하고 상하류단 모두에서 농도경사를 영(零)으로 하였으며, 그림 2와 같이 Cr 가 1보다 크게 되어 특성곡선이 시간축을 통과하여 이전단계의 농도값과 그 미분값들을 찾을 수 없는 경우 C_{11} , Cx_{11} , Cxx_{11} , C_{12} , Cx_{12} , Cxx_{12} 값들을 모두 상류단 경계치로 주어서 농도경사가 영(零)이 되는 효과를 주었다.

4. 수치해석 결과 및 분석

일정한 유속과 종확산계수를 갖는 흐름에서 단위 흐름면적당 질량 M 의 오염물이 $x=0$ 에 순간적으로 방류된 경우 t_0+t 의 시간이 경과된 후의 농도분포는 식 (34)와 같고,

$$C(x, t+t_0) \\ = \frac{M}{\sqrt{4\pi D(t+t_0)}} \exp\left[-\frac{\{x-u(t+t_0)\}^2}{4D(t+t_0)}\right] \quad (34)$$

$x=0$ 에 농도 C_0 의 연속적인 오염원을 갖는 경우는 식 (35)와 같이 표현된다(Liggett, 1994).

$$C(x, t+t_0)$$

$$= \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left\{ \frac{x-u(t+t_0)}{2\sqrt{D(t+t_0)}} \right\} + \exp \left(\frac{ux}{D} \right) \operatorname{erfc} \left\{ \frac{x+u(t+t_0)}{2\sqrt{D(t+t_0)}} \right\} \right] \quad (35)$$

4.1 확산방정식의 해석결과

유속이 영(零)인 경우 즉, 확산만이 존재하는 경우에 대하여 기존 확산방정식의 수치기법들과 본 모형에서 사용한 Hobson 등(1996)의 양해법의 해석결과를 비교하였다. 초기조건으로는 식 (32)와 같은 Gaussian hill 분포를 사용하였으며 $D \Delta t / \Delta x^2$ 로 정의되는 무차원수인 diffusion수를 변화시켜서 비교하였다(Hoffman, 1992). 기존의 수치기법으로는 양해법인 3-level 4th-order기법, forward-time centered space(FTCS) 기법, DuFort-Frankel 기법과 음해법인 2nd-order Crank-Nicolson, 4th-order Crank-Nicolson기법을 사용하였다(Fletcher, 1988).

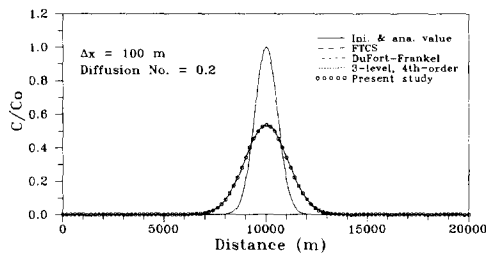


그림 2. 기존 양해법과 본 모형의 계산결과 ($D=20\text{m}^2/\text{s}$)

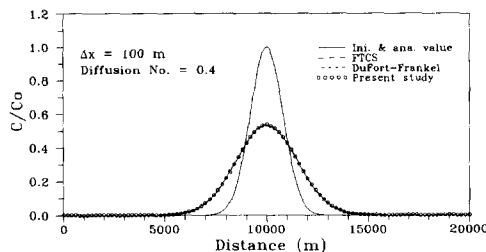


그림 3. 기존 양해법과 본 모형의 계산결과 ($D=40\text{m}^2/\text{s}$)

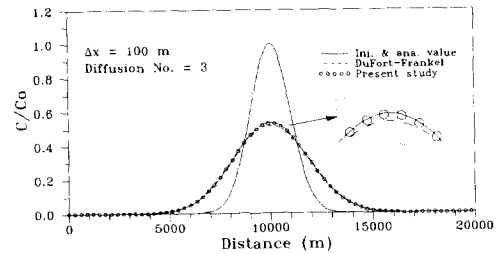


그림 4. 기존 양해법과 본 모형의 계산결과 ($D=60\text{m}^2/\text{s}$)

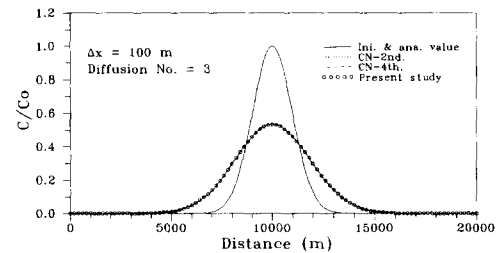


그림 5. 기존 음해법과 본 모형의 계산결과 ($D=60\text{m}^2/\text{s}$)

그림 2는 diffusion수가 0.2인 경우로 전술한 기존의 3가지 양해법과 본 모형의 계산결과가 모두 해석해와 잘 일치함을 보여준다. 그림 3은 diffusion수가 0.4인 경우로 3-level 4th-order기법은 발산하여서 비교대상에서 제외하였으며, 다른 방법들은 해석해와 잘 일치한다.

그림 4는 diffusion수가 3인 경우로 3-level 4th-order기법, FTCS 기법은 발산하여서 제외하였으며 DuFort-Frankel 기법은 발산하지는 않았지만 해석해와 비교적 큰 오차가 발생하고, 본 모형이 더욱 더 정확하게 확산을 예측함을 알 수 있다. 그림 5는 diffusion수가 3인 경우에 대한 기존의 음해법들과 본 모형의 계산결과로서 모두 해석해와 잘 일치함을 보이고 있다. 본 모형은 양해법이지만 diffusion수가 큰 경우에 대하여 기존의 양해법처럼 발산하거나 큰 오차를 보이지 않음을 알 수 있다.

4.2 이송-확산방정식의 해석결과

5차 보간다항식에 의한 Holly-Preissmann 기법과 Hobson 등(1996)의 기법을 사용한 본 모형과 전경수와 이길성(1994)의 모형(HP-CN), Park과 Liggett의 모형(TLS)에 대하여 식 (32), (33)과 같은 동일한 초기조건을 사용하여 계산을 수행하였으며, 모든 계산경우에 있어서 초기농도분포의 최대값을 1로 하여, 식 (34)와 같이 Gaussian hill 분포를 갖는 해석해와 식 (35)와 같은 advanced front 분포를 갖는 해석해에 대하여 비교하였다.

Gaussian hill의 경우에 대해서는 결과의 정확도 분석을 위하여 Noye(1987)에 의하여 제안된 종확산 방정식에 대한 수치기법의 정확도분석을 위한 무차원 척도를 사용하였으며, 이는 다음과 같이 정의된다.

$$E_1 = |C_{cal} - C_{exact}|_{max} / (C_{exact})_{max} \quad (36a)$$

$$E_2 = \frac{\sum_{i=1}^{I_{max}} |(C_{cal})_i - (C_{exact})_i|}{\sum_{i=1}^{I_{max}} (C_{exact})_i} \quad (36b)$$

$$E_3 = [(C_{cal})_{max} - (C_{exact})_{max}] / (C_{exact})_{max} \quad (36c)$$

$$E_4 = (C_{cal})_{min} / (C_{exact})_{max} \quad (36d)$$

$$E_5 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{I_{max}} [(C_{cal})_i - (C_{cal})_i] \sum_{i=1}^{I_{max}} (C_{exact})_i \quad (36e)$$

$$E_6 = [(X_{peak})_{cal} - (X_{peak})_{exact}] / \Delta x \quad (36f)$$

여기서, C_{cal} 는 수치모형에 의한 계산값, C_{exact} 는 해석해이며, X_{peak} 는 최대농도 발생지점이다. 위의 무차원 척도들은 각각 E_1 과 E_2 는 모형의 전반적인 정확성, E_3 는 수치분산, E_4 와 E_5 는 수치진동, E_6 는 최대농도의 발생지점의 정확성을 나타낸다. E_4 와 E_5 는 수치진동이 있을 경우 음의 값을 가지며, E_6 의 경우 오차를 공간격자 간격으로 정규화한 값이다.

표 1. Cr와 Pe에 따른 오차

Model	Cr	Pe	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
TLS	0.50	50.0	0.021876	0.018818	0.021876	-0.000000	-0.000000	0
	0.50	5.0	0.001924	0.002160	0.001924	-0.000002	-0.000001	0
HP-CN	0.50	50.0	0.045352	0.036267	0.045352	-0.000000	-0.000000	0
	0.50	5.0	0.003883	0.003576	0.003883	0.000000	0.000000	0
	0.75	10.0	0.007897	0.007261	0.007897	0.000000	0.000000	0
	1.00	100.0	0.051601	0.037984	0.051602	0.000000	0.000000	0
	1.00	50.0	0.021004	0.018878	0.021004	0.000000	0.000000	0
	1.00	10.0	0.007892	0.007257	0.007892	0.000000	0.000000	0
	1.00	4.0	0.001534	0.001428	0.001534	0.000000	0.000000	0
	1.00	2.0	0.000760	0.000711	0.000760	0.000000	0.000000	0
	1.50	10.0	0.007853	0.007228	0.007853	0.000000	0.000000	0
	2.00	100.0	0.051574	0.037973	0.051574	0.000000	0.000000	0
	2.00	50.0	0.020981	0.018862	0.020981	0.000000	0.000000	0
	2.00	10.0	0.007806	0.007192	0.007806	0.000000	0.000000	0
	2.00	4.0	0.001513	0.001413	0.001513	0.000000	0.000000	0
	2.00	2.0	0.000740	0.000696	0.000740	0.000000	0.000000	0
Present study	0.50	50.0	0.047944	0.038152	0.047944	-0.000000	-0.000000	0
	0.50	5.0	0.005054	0.004641	0.005054	0.000000	0.000000	0
	0.75	10.0	0.010108	0.009239	0.010108	0.000000	0.000000	0
	1.00	100.0	0.054444	0.039832	0.054444	0.000000	0.000000	0
	1.00	50.0	0.023277	0.020833	0.023277	0.000000	0.000000	0
	1.00	10.0	0.010382	0.009475	0.010382	0.000000	0.000000	0
	1.00	4.0	0.001712	0.001588	0.001712	0.000000	0.000000	0
	1.00	2.0	0.000142	0.000138	0.000142	0.000000	0.000000	0
	1.50	10.0	0.010433	0.009498	0.010433	0.000000	0.000000	0
	2.00	100.0	0.057105	0.041486	0.057105	0.000000	0.000000	0
	2.00	50.0	0.025099	0.022361	0.025099	0.000000	0.000000	0
	2.00	10.0	0.009997	0.009085	0.009997	0.000000	0.000000	0
	2.00	4.0	0.000301	0.000276	0.000301	0.000000	0.000000	0
	2.00	2.0	0.001790	0.001674	-0.001790	0.000000	0.000000	0

본 연구에서 사용한 각각의 모형의 Gaussian hill의 해석결과에 대한 Cr와 Péclet수에 따른 $E_1 \sim E_6$ 값이 표 1에 나타나 있다. 여기서, Péclet수는 $Pe = u \Delta x / D$ 표현되는 무차원 수로서 Pe가 클 수록 이송이 지배적인 흐름이다. 표 1에서 Cr가 0.5 이하의 경우에 있어서 큰 차이는 아니지만 Pe에 관계없이 TLS모형이 가장 정확한 해를 제공함을 알 수 있다. 그러나

TLS모형은 0.5 이상의 Cr를 갖는 경우 과도한 수치 오차를 보여서 Cr가 0.5 이하의 경우에 대해서만 다른 모형과 비교하였다. 전체적으로 모든 모형이 수치 진동은 발생하지 않음을 알 수 있고, Cr가 클 경우에 대한 본 모형과 HP-CN모형의 결과는 전반적으로 매우 유사하게 나타났다.

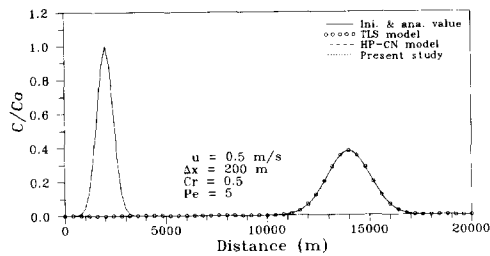


그림 6. 해석해, TLS, HP-CN 및 본 모형의 계산결과

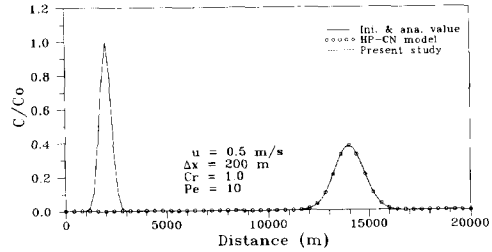


그림 7. 해석해, TLS, HP-CN 및 본 모형의 계산결과 (Cr = 1.0)

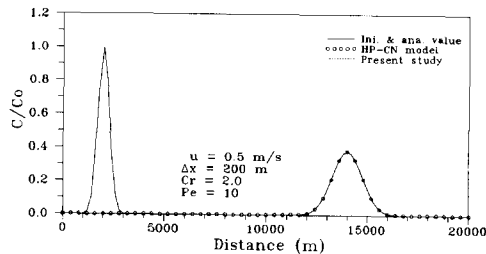


그림 8. 해석해, HP-CN 및 본 모형의 계산결과 (Cr = 2.0)

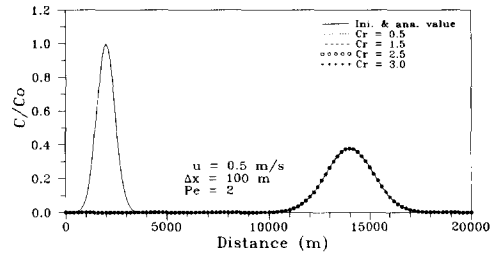


그림 9. Cr에 따른 본 모형의 계산결과 (Pe = 2.0)

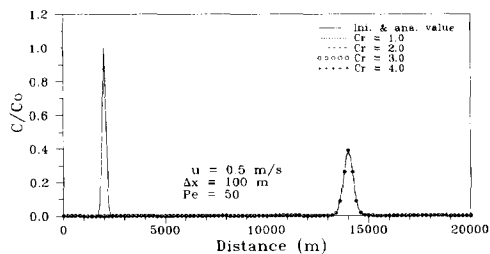


그림 10. Cr에 따른 본 모형의 계산결과 (Pe = 50)

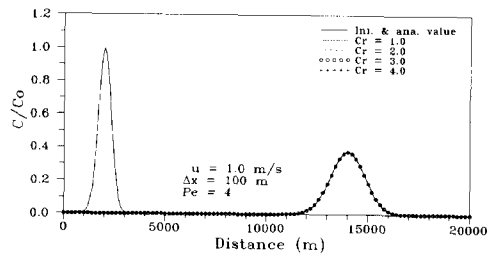


그림 11. Cr에 따른 본 모형의 계산결과 (u = 1.0m/s)

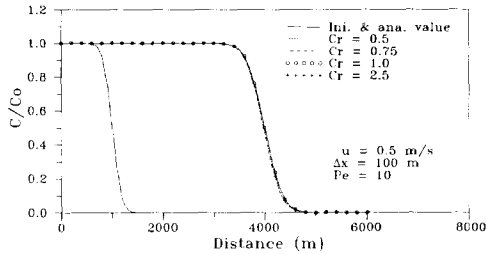


그림 12. 해석해와 본 모형의 계산결과(Pe=10)
그림 12. 해석해와 본 모형의 계산결과(Pe=10)

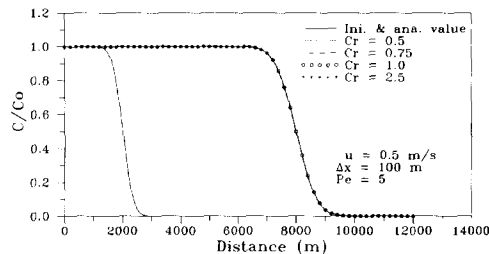


그림 13. 해석해와 본 모형의 계산결과(Pe=5)

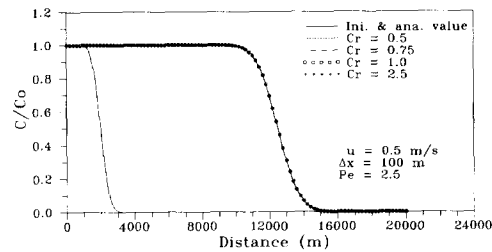


그림 14. 해석해와 본 모형의 계산결과(Pe=2.5)

그림 6~8은 Gaussian hill의 경우에 대하여 각각의 모형의 결과를 비교 도시한 것이다. 그림 6은 Cr=0.5인 경우에 대한 각각의 모형의 결과를 비교한 것으로 모두 해석해와 잘 일치함을 알 수 있고, 그림 7, 8은 각각 Cr=1.0, 2.0에 대한 본 모형과 HP-CN 모형의 결과를 비교한 것으로 두 모형 모두 해석해와 잘 일치함을 알 수 있다. 그림 9~11은 Cr에 따른 본 모형의 계산 결과를 도시한 것으로 Cr가 클 경우에도

전반적으로 잘 일치하고 있으나, Pe가 클 경우, 즉 종 확산계수가 작고 Cr가 클 경우에 약간의 오차를 보이고 있다.

그림 12~14는 advanced front의 경우에 대하여 해석해와 본 모형의 결과를 비교 도시한 것이다. Pe가 각각 10, 5, 2.5인 경우에 대하여 Cr를 0.5에서 2.5까지 변화시켜가며 계산하였으며 Cr가 1보다 큰 경우에도 전반적으로 해석해와 잘 일치함을 알 수 있다.

이상의 결과에서 알 수 있듯이 본 모형은 확산항의 해석에 양해법을 사용했음에도 불구하고, 음해법인 Crank-Nicolson 기법을 사용한 전경수와 이길성(1994)의 모형과 비교해 볼 때, 1 이상의 Cr를 갖는 경우에도 거의 동일한 결과를 얻었으며, Cr가 3보다 큰 경우에도 비교적 정확한 해를 구할 수 있으므로 양해법의 최대 단점인 계산시간간격의 제약을 상당히 완화할 수 있었다.

5. 결 론

1차원 이송-확산방정식의 해석에 있어서, 연산자 분리기법으로 이송항과 확산항을 분리하여, 이송항의 해석에는 특성곡선법의 일종인 5차 보간다항식에 의한 Holly-Preissmann 기법을 사용하고, 확산항의 해석에는 Hobson 등의 양해법을 사용한 이송-확산 모형을 제안하였다.

본 연구에서 제안한 모형에서 사용한 확산항의 수치기법과 기존의 수치기법을 비교하여 diffusion수가 비교적 큰 경우에 대하여 양호한 결과를 보임을 알 수 있었다.

이송-확산해석에 있어서 Gaussian hill과 advanced front의 경우에 대하여 본 모형, 유한요소 모형인 TLS모형, 5차 보간다항식에 의한 Holly-Preissmann 기법과 Crank-Nicolson 기법을 사용한 연산자 분리모형의 계산결과를 해석해와 비교하였으며, 전반적으로 잘 일치함을 알 수 있었다. 그러나 TLS모형은 Cr가 작을 경우에는 계산결과가 매우 우수하였으나, Cr가 증가함으로써 수치진동이 발생하였다.

특히 본 모형은 Cr가 1보다 상당히 큰 경우에도 해석해와 잘 일치하였으며, 일반적인 양해법의 단점인 계산시간간격의 제약을 상당히 완화할 수 있었다.

참 고 문 헌

- 강창구 (1997). “연산자 분리기법을 이용한 이송-확산방정식의 수치해석,” 석사학위논문, 한양대학교.
- 김경섭 (1995). “이송-확산방정식의 Implicit Eulerian-Lagrangian 해.” 대한환경공학회지, 대한환경공학회, 제17권, 제9호, pp. 917-926.
- 서일원, 김대근 (1994). “Eulerian-Lagrangian 방법을 이용한 1차원 종확산방정식의 수치모형.” 한국수문학회지, 한국수문학회, 제27권, 제2호, pp. 155-166.
- 이희영, 이재철, 장석환, 정선길 (1995). “유한차분 모형에 의한 일차원 이송-확산방정식 계산결과와의 비교.” 한국수자원학회지, 한국수자원학회, 제28권, 제4호, pp. 125-136.
- 전경수, 이길성 (1994). “종확산 방정식에 대한 Eulerian-Lagrangian 연산자 분리방법.” 대한토목학회논문집, 대한토목학회, 제14권, 제1호, pp. 131-141.
- Abbott, M.B., and Basco, D.R. (1989). *Computational fluid dynamics*. Longman Scientific & Technical.
- Cheng, R.T., Vincenzo, C., and Milford, S.N. (1984). “Eulerian-Lagrangian solution of convection-dispersion equation in natural coordinates.” *Water Resources Research*, Vol. 20, No. 7, pp. 944-952.
- Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J., and Brooks, N.H. (1979). *Mixing in inland and coastal waters*. Academic Press.
- Fletcher, C.A.J. (1988). *Computational techniques for fluid dynamics*, Vol. 1, Springer-Verlag.
- 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.
- Hoffman, J.D. (1992). *Numerical methods for engineers and scientists*. McGraw-Hill.
- Holly, F.M., and Preissmann, A. (1977). “Accurate calculation of transport in two dimensions.” *J. of Hydraulics Division*, ASCE, Vol. 103, No. 11, pp. 1259-1277.
- Liggett, J.A. (1994). *Fluid mechanics*. McGraw-Hill.
- Noye, J. (1987). “Numerical methods for solving the transport equation.” in *Numerical Modelling: Applications to Marine Systems*, Elsevier.
- Park, N.-S., and Liggett, J.A. (1990). “Taylor-least-squares finite element for two-dimensional advection-dominated unsteady advection-diffusion problems.” *Int. J. for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 11, pp. 21-38.
- Park, N.-S., and Liggett, J.A. (1991). “Application of Taylor-least-squares finite element to three-dimensional advection-diffusion equation.” *Int. J. for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 13, pp. 759-773.
- Yeh, G.T. (1990). “A Lagrangian-Eulerian method with zoomable hidden fine-mesh approach to solving advection-dispersion equations.” *Water Resources Research*, Vol. 26, No. 6, pp. 1133-1144.

〈접수: 1997년 1월 6일〉