

대기오염모델에서의 이류방정식에 대한 수치적 방법의 비교

A Comparison of Numerical Methods for the Advection Equation for Air Pollution Models

심 상 규 · 박 영 산

한국과학기술연구원 환경연구센터

(원고접수: 1992. 5. 23)

Shang-Gyoo Shim and Young-San Park

Environment Research Center

Korea Institute of Science and Technology

(Received 23 May 1992)

Abstract

Numerical solutions to the advection equations used for long-range transport air pollution models are calculated using three numerical methods; Antidiffusion correction method(Smolarkiewicz, 1983), Positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of the advective fluxes(Bott, 1989), and Positive definite pseudospectral method(Bartnicki, 1989). Accuracy, numerical diffusion and computational time requirement are compared for two-dimensional transport calculations in a uniform rotational flow field. The solutions from three methods are positive definite. Bartnicki(1989)'s method is most conservative but requires approximately 10 times as much computational time as Smolarkiewicz(1983)'s method of which numerical diffusion is the largest. All three methods are more conservative for a cone shape initial condition than for a rectangular block initial condition with a steep gradient.

1. 서론

최근 수 십년동안 수치모델은 대기질 문제의 이해와 해결에 주요한 도구로 이용되어왔다. 대기오염 모델은 다양한 물리적, 화학적 과정을 고려해야 한다. 그 주요한 과정 중의 하나가 대기 중에서 바람장에 의한 이류이다. 특히 산성비모델, 황사수송모델과 같은 장거리수송 대기질모델에서는 이류를 계산하는 방법의 선정이 중요하다. 그 방법은 전체 질량이 보존되면서 오염물질이 이류하는 동안 항상 양의 값을 유지해야 하고, 수치적 확산이 적게 일어나야 우수한 방법이라 하겠다. 계산기에서의 계산시간도 고려해야 한다.

본 연구에서는 이류되는 동안 항상 양의 값을 갖

으면서 확산이 작게 일어나는 이류 방법으로 알려진 Smolarkiewicz(1983), Bott(1989), Bartnicki(1989) 등이 사용한 이류 방법들을 시험, 비교하여 그 특징을 살펴 보고자 한다.

2. 이류 알고리즘

일반적으로 가장 많이 사용되는 이류 방법은 'upstream' 방법이다. 이 방법은 명시적(explicit)이며 시간에 대해 전진 차분이기 때문에 수치적으로 매우 효율적인 뿐만 아니라 항상 양의 값을 갖는다. 그러나 이 방법은 공간과 시간에 대해 1계 정밀도(first order accuracy)를 갖기 때문에 확산이 크게 일어난다. 반면에 2계 이상의 정밀도를 갖는 이류

방법은 확산이 작게 일어나는 반면 음의 값이 나타난다. 하지만 이류식의 해가 음의 값을 갖는 경우 모델 전체에 불안정을 가져올 수 있다.

Smolarkiewicz(1983)와 Bott(1989)가 사용한 방법은 upstream 방법을 기본으로 하고 있으며 Bartnicki(1989)는 의사 스펙트로 방법을 사용하였다.

편의상 이 세 가지 방법의 이류방정식들을 1차원 형태로 나타내었다. 다차원 형태로 확장하는 것은 같은 방법으로 나타 낼 수 있다.

2.1 반확산 보정 방법

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uC) = 0 \tag{1}$$

식(1) (x와 t는 공간과 시간을 나타내는 독립변수이고 u는 수평 바람 속도성분, C는 이류되는 스칼라 양이다.)과 같은 1차원 이류방정식을 유한 차분 형태 이면서 속(flux) 형태로 나타내면,

$$C_i^{n+1} = C_i^n - [F(C_i^n, C_{i+1}^n, u_{i+1/2}^n) - F(C_{i-1}^n, C_i^n, u_{i-1/2}^n)] \tag{2}$$

와 같다. 여기서 $C_i^n = C(n\Delta t, i\Delta x)$ 이며 n과 i는 시간과 공간좌표를 뜻한다.

$$F(C_i, C_{i+1}, u) = [(u + |u|) C_i + (u - |u|) C_{i+1}] \frac{\Delta t}{2\Delta x}$$

이다. $C_i^{n+1}, C_{i+1}^n, C_{i-1}^n$ 을 점 (t^n, x_i) 에 대해 2계(second order) Taylor 합으로 확장하면 식(2)는

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uC) = \frac{\partial}{\partial x}(K_d \frac{\partial C}{\partial x}) \tag{3}$$

와 같이 표시할 수 있다. 여기서 $K_d = 0.5(|u| \Delta x - \Delta t u^2)$ 이다.

2계 정밀도를 갖는 이류식(3)의 오른쪽 항은 식(2)에서 절단오차(truncation error)로 인해 발생하는 확산량을 나타낸다. Smolarkiewicz(1983)의 방법은 먼저 식(2)로 이류를 시킨 다음 이때 발생하는 확산오차를 식(4)와 같은 확산식의 효과를 역으로 작용시켜 보정하는 것이다.(Antidiffusion Correction Method; 이하 AC로 약칭한다.)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(K_d \frac{\partial C}{\partial x}) \tag{4}$$

그러기 위해 인위적인 확산속도 u_d 를 도입하여,

$$u_d = \begin{cases} -\frac{K_d}{C} \frac{\partial C}{\partial x} & C > 0 \text{인 경우,} \\ 0 & C = 0 \text{인 경우,} \end{cases}$$

이라하면 식(4)는

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(u_d C) \tag{5}$$

와 같이 나타낼 수 있다. 그리고 반확산속도 \tilde{u} 를 다음과 같이 정의하면

$$\tilde{u} = -u_d \tag{6}$$

이며 이류식(5)에서 u_d 대신 \tilde{u} 를 이용하면 확산식(4)에 대해 반대로 작용하는 효과를 얻게된다. 따라서 식(2)는 다음과 같이 보정할 수 있다.

$$\begin{aligned} C_i^* &= C_i^n - [F(C_i^n, C_{i+1}^n, u_{i+1/2}^n) - F(C_{i-1}^n, C_i^n, u_{i-1/2}^n)] \\ C_i^{n+1} &= C_i^* - [F(C_i^*, C_{i+1}^*, \tilde{u}_{i+1/2}) - F(C_{i-1}^*, C_i^*, \tilde{u}_{i-1/2})] \end{aligned} \tag{7}$$

여기서,

$$\tilde{u}_{i+1/2} = \frac{|u_{i+1/2}| (\Delta x - \Delta t u_{i+1/2}^2) (C_{i+1}^* - C_i^*)}{(C_i^* + C_{i+1}^* + \epsilon) \Delta x}$$

이고 ϵ 는 매우 작은 값(예, 10^{-15})으로 $C_i^* = C_{i+1}^* = 0$ 일 $\tilde{u} = 0$ 이기 위해 사용한 것이다.

2.2 Bott 방법

Bott(1989)가 사용한 방법(이하 B89 라고 약칭한다.)의 원리는 이류속(advective fluxes)을 적당한 가중치(weighting factor)로 곱한 다음 양의 값을 갖도록 제한(limitation)을 가한 것이다.

먼저 식(1)을 속 형태로 나타내면,

$$C_i^{n+1} = C_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n] \tag{8}$$

이며, 여기서 오른쪽 경계를 통과하는 C의 속 $F_{i+1/2}^n$ 는

$$F_{i+1/2}^n = \frac{\Delta x}{\Delta t} [r_i^+ C_i^n - r_{i+1}^- C_{i+1}^n] \tag{9}$$

이다. 여기서 $r_i^\pm = \pm (r_{i+1/2}^\pm \pm |r_{i+1/2}^\pm|) / 2$ 이고 Courant 수 r은 $r_{i+1/2}^\pm = u_{i+1/2}^\pm \frac{\Delta t}{\Delta x}$ 라고 정의된다.

그런데 Bott는 확산오차는 C를 제대로 표현해 주지 못했기 때문에 발생한다고 보고 다음과 같은 면적 보정식을 만족하는 다항식으로 C를 나타내었다.

$$C_{i,m} = \sum_{k=0}^m a_{i,k} x'^k dx', \quad i=j, j\pm 1, \tag{10}$$

여기서 $x' = (x-x_0)/\Delta x$, $-1/2 \leq x' \leq 1/2$ 이고 계수 a_n 는 $(m+1)$ 개의 C로 이루어진 함수이다. 3장에서 시험할 때는 $m = 4$ 로 하였다.

$$\begin{aligned} I_{m,+}(r_{i+1/2}) &= \int_{1/2-r_i}^{1/2} C_{i,m}(x') dx', \\ I_{m,-}(r_{i-1/2}) &= \int_{-1/2}^{-1/2+r_i} C_{i,m}(x') dx', \\ I_{m,i} &= \int_{-1/2}^{1/2} C_{i,m}(x') dx' \end{aligned} \quad (11)$$

라고 정의하였을 때 식(9)은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$F_{i+1/2}^n = \frac{\Delta x}{\Delta t} [I_{m,+}^+(r_{i+1/2}) - I_{m,-}^-(r_{i+1/2})] \quad (12)$$

이식에 가중요소 $C_i/I_{m,i}$ 를 곱하고 식(14)와 같은 속 제한을 가하면 다음과 같이 표현된다.

$$F_{i+1/2} = \frac{\Delta x}{\Delta t} \left[\frac{i_{m,i+1/2}^+}{i_{m,i}} C_i - \frac{i_{m,i+1/2}^-}{i_{m,i+1}} C_{i+1} \right] \quad (13)$$

$$\begin{aligned} i_{m,i+1/2}^+ &= \max(0, I_{m,+}^+(r_{i+1/2})) \\ i_{m,i+1/2}^- &= \max(0, I_{m,-}^-(r_{i+1/2})) \\ i_{m,i} &= \max(I_{i,i}, i_{m,i+1/2}^+ + i_{m,i-1/2}^- + \epsilon) \end{aligned} \quad (14)$$

이며, 시간 단계를 나타내는 n 의 표기를 생략하였다. 식(13)을 식(8)에 대입하여 해를 구한다.

2.3 의사 스펙트로 방법

Bartnicki(1989)가 사용한 방법의 원리는 이류식에 의사 스펙트로 방법을 적용한 다음 이때 발생한 해들 중에서 음의 값들을 여과(filtering) 과정을 통하여 모두 제거하는 것이다. (Positive Definite Pseudospectral Method, 이하 이 방법을 PDPS로 약칭한다.) 여기에 사용한 의사 스펙트로 방법은 Gazdag(1973)가 개발한 방법이다. 시간 $n\Delta t$ 일때의 농도를 C^n 이라 할때 그 다음 시간 $(n+1)\Delta t$ 의 농도 C^{n+1} 를 유한 Taylor 합으로 표시하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} C^{n+1} &= C^n + \frac{\partial C^n}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 C^n}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + \frac{\partial^3 C^n}{\partial t^3} \frac{\Delta t^3}{3!} + \dots \\ &\dots + \frac{\partial^p C^n}{\partial t^p} \frac{\Delta t^p}{p!} \end{aligned} \quad (15)$$

여기서 C에 대한 시간 미분항을 식(1)을 이용하여 공간 미분 형태로 바꿔 표시하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &= -u \frac{\partial C}{\partial x} \\ \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} &= -\left(\frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial C}{\partial x} + u \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (16)$$

C에 대한 공간 미분의 계산은 스펙트로 방법을 이용한다. 모든 격자점의 집합을 R이라 하고 그 개수를 L이라 할 때 농도 C의 이산 푸리에 변환(discrete Fourier transform) C는

$$C(k, t) = \frac{1}{L} \sum_{x \in R} C(x, t) e^{-ikx} \quad (17)$$

이며 여기서 $i = \sqrt{-1}$ 이고 k 는 $-L/2 < k \leq L/2$ 인 정수이다. $C(k, t)$ 로 부터 C에 대한 편미분은 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} = \sum_{|k| < L/2} ik C(k, t) e^{ikx} \quad (18)$$

식(17), (18)의 계산은 계산기에서 고속 푸리에 변환(FFT)을 이용하면 매우 빠르게 수행할 수 있다.

이 방법의 안정조건은 식(13)에서 확장계(the order of expansion) P에 의해 결정되는 데 P가 3, 4, 7, 8 일 경우 이 방법은 안정하다(Bartnicki, 1989). 이 스펙트로 방법은 Courant 수의 영향을 크게 받지 않는다.

3. 실험 및 결과

지금까지의 세 가지 방법을 비교하기 위해 2차원 면(32×32)에서 시험을 하였다. 공간격자 간격은 $\Delta x = \Delta y = 1$, $\Delta t = 0.1$ 이며, 각속도 $\omega = 0.157$ 로 점 $(x_0, y_0) = (16\Delta x, 16\Delta y)$ 을 회전 중심으로 반시계 방향으로 회전시켰다. 이때 이류속도 성분은 $u = -\omega(y - y_0)$, $v = \omega(x - x_0)$ 이며 1회전 하는데는 400번의 시간단계(time step)를 요한다. 초기 농도 분포를 3차원 모양으로 나타내면 그림1(a)와 같은 원뿔 형태로서 밀 면의 직경이 $8\Delta x = 8\Delta y$ 이며 최고값은 점 $(16\Delta x, 24\Delta y)$ 에서 1로 하였다. 공간적인 농도 변화가 매우 큰 경우를 시험해 보기 위해 그림2(a)처럼 block 형태에 대해서도 시험하였는데 한번이 $6\Delta x = 6\Delta y$ 인 정방형 면에서 농도는 모두 1을 갖도록 하였다. 총 6회전을 하였으며 시분할(time-splitting) 방법을 사용하였다(그림 1, 2, 3).

초기 농도 분포가 원뿔 형태인 경우의 6회전 이류시킨 결과를 그림 1. (b) - (d)에 나타내었다.

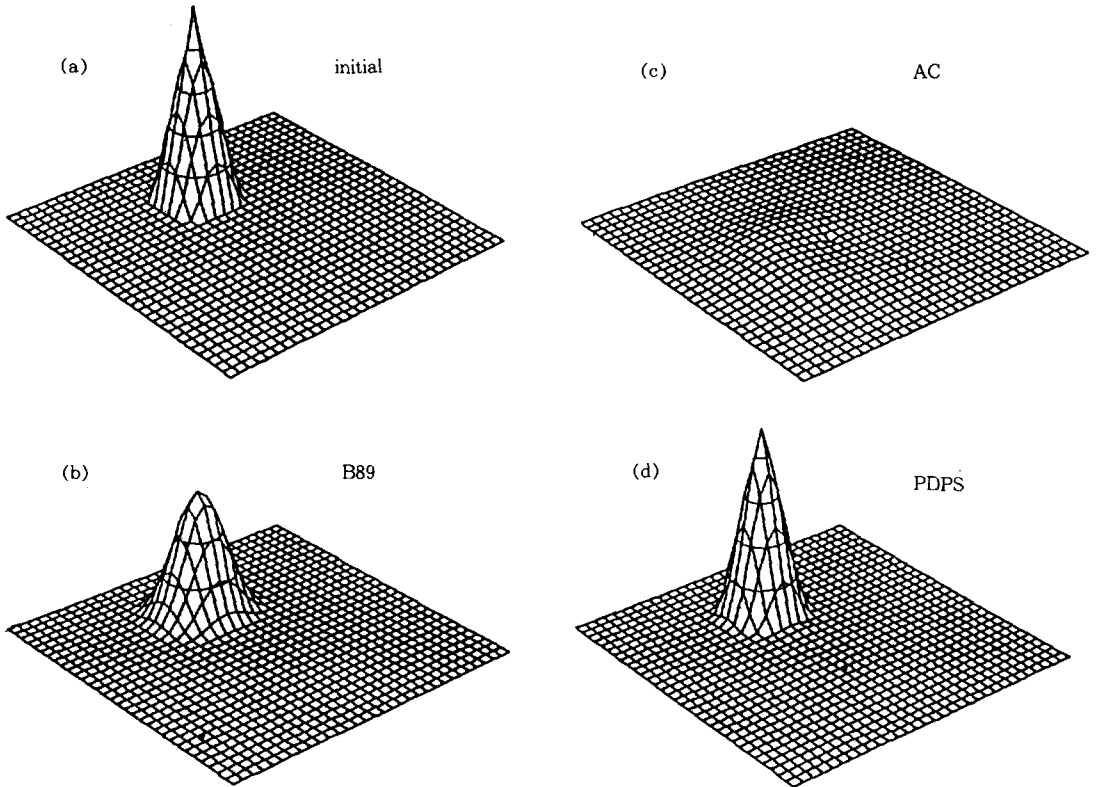


Fig. 1. Initial condition and numerical solutions after six full rotations(2400 iterations). (a) a cone shape initial condition. (b) solution for the antidiffusion correction method-AC. (c) solution for Bott(1989)'s method-B89. (d) solution for the positive definite pseudospectral method-PDPS.

PDPS의 경우 초기형태를 거의 그대로 유지하였고 B89의 경우는 초기형태에서 크게 벗어나지 않았으며 AC의 경우는 확산이 매우 크게 일어났다. 초기 농도가 block형태인 경우(그림2 참조)도 PDPS와 B89가 정밀도가 높았으나 AC는 확산이 크게 일어났다. 이 결과를 2차원 형태로 그림3에 나타내었다. 두 경우 모두 PDPS는 확산이 가장 적었으며 B89는 확산이 약간 일어난 반면 AC의 경우에는 확산이 매우 크게 일어났으며 최고값이 나타난 위치도 초기형태에서의 위치에서 약간 벗어났다.

이 결과를 자세히 분석하기 위해 질량보존비, 질량분포비, 최고값, 평균오차 등을 그림4에 나타내었으며 각각의 값은 다음과 같다.

질량보존비(Mass Conservation Ratio)

$$= \sum C(t) / \sum C(0),$$

질량분포비(Mass Distribution Ratio)

$$= \sum C^2(t) / \sum C^2(0),$$

최고값(Peak Conservation) = max(C(t)),

평균오차(Average Absolute Error)

$$= \sum (|C(t) - C(0)|) / (32)^2$$

여기서 합은 격자점 전체에 대해서 이루어졌다. 질량보존비로부터 이루하는 동안 전체 질량은 얼마나 보존되는 가를 알 수 있으며 질량분포비로부터는 수치적 확산이 일어나는 정도를 알 수 있다(그림4).

두 초기 조건 모두에 대해 PDPS가 질량이 거의 100% 보존되고 수치적 확산이 매우 적었으며, 최고값도 잘 유지되는 것으로 나타났다. 그 다음으로 B89가 확산이 적게 일어났는데 초기형태가 block형태인 경우의 최고값은 회전하는 동안 오히려 증가하였다. AC는 세 방법 중 질량의 손실이 가장 크고 수치적 확산도 가장 크게 일어났다. 세 방법 모두 처음 1회전하는 동안에 나머지 5회전하는 동안보다 확산이 상대적으로 크게 일어났다. 이것은 특히 AC의 경우 매우 뚜렷하였다. 초기형태가 원뿔형태일 때 보다 block 형태일 경우에 세 방법 모두 확산과 오차가 더 컸다.

이들 방법들이 계산기에서 소요되는 계산시간을 비교하였다. 한국과학기술연구원 부설 시스템공학연

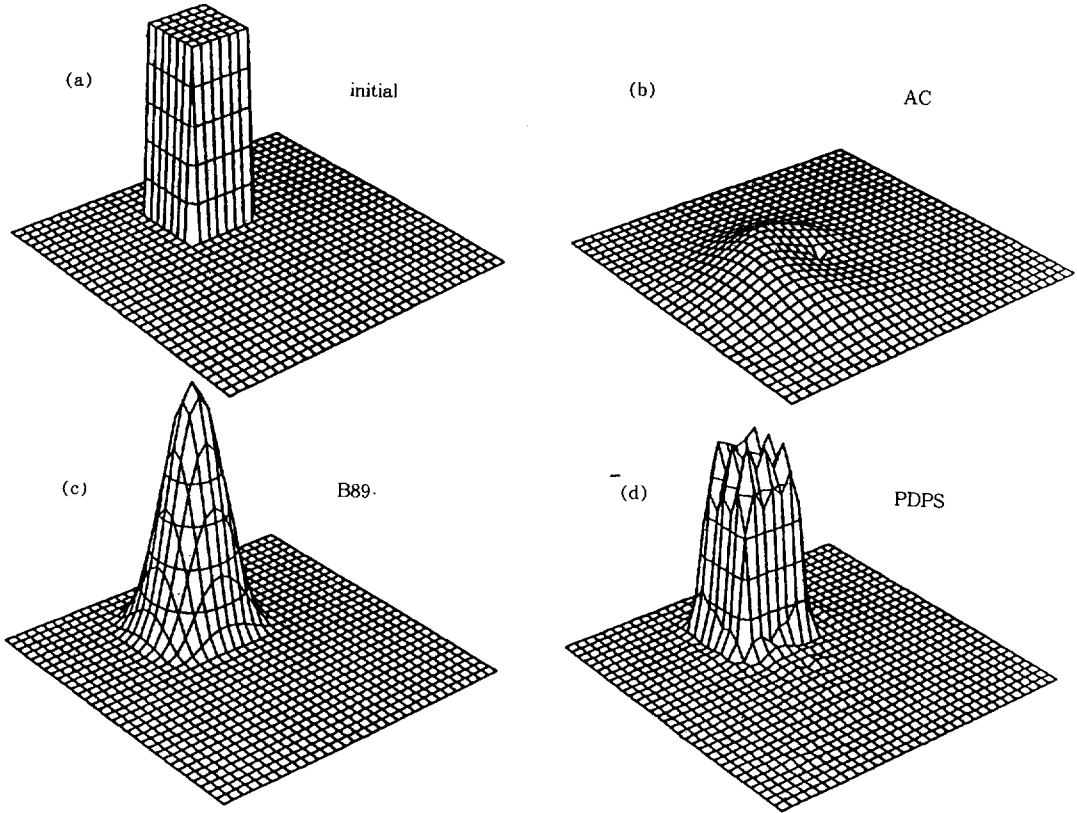


Fig. 2. Same as Fig. 1, but for (a) a rectangular block shape initial condition.

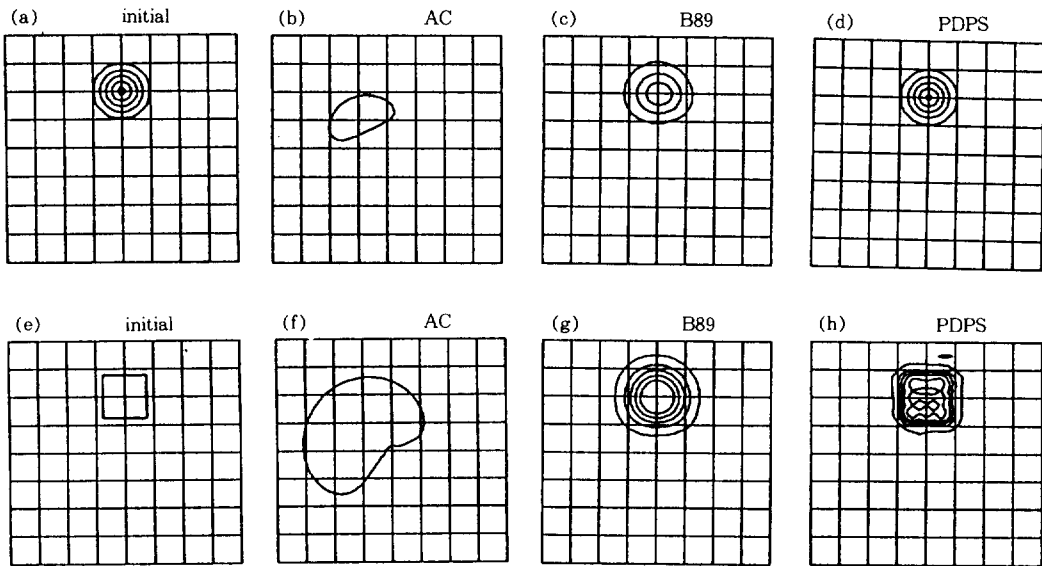


Fig. 3. Two-dimensional representations for Fig. 1 and Fig. 2. (a)-(d) correspond to (a)-(d) at Fig. 1 and (e)-(h) correspond to (a)-(d) at Fig. 2, respectively.

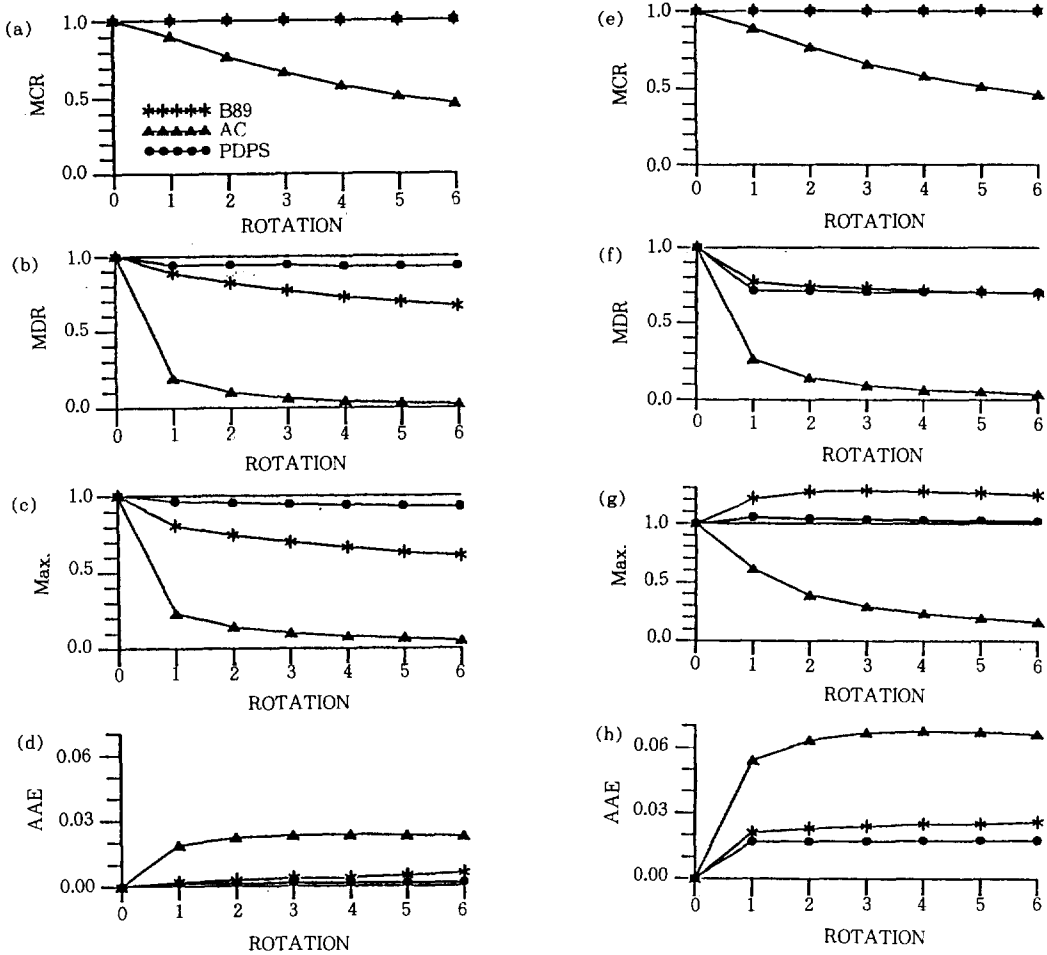


Fig. 4. (a) mass conservation ratios, (b) mass distribution ratios, (c) maximum, and (d) average absolute errors for a cone shape initial condition. (e)–(h) are same as (a)–(d) but for a block shape initial condition.

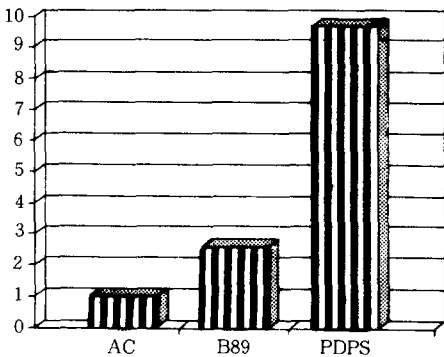


Fig. 5. The relative computational time requirements for three methods.

구소가 보유하고 있는 슈퍼컴퓨터 Cray-2s에서 수행했더니 1회전하는 데에 수행시간(CPU-time)이 AC는 약 3.5초, B89는 9초, PDPS는 34초 정도 소요되었다. AC에 비해 B89는 2.6배, PDPS는 10배 정도 더 오래 걸린 것이다(그림5).

4. 결 론

대기오염모델에 사용할 수 있는 이류방정식에 대한 수치적 방법 3가지를 회전바람장을 이류장으로 하여 시험 비교하였다. Bartnicki(1989)가 사용한 의사 스펙트로 방법이 수치적 확산이 가장 적게 일어나고 정밀도가 높은 반면 계산시간이 오래 걸렸으며 Smolarkiewicz(1983)가 사용한 반확산 보정방법

은 계산시간이 빠른 반면 확산이 가장 크게 일어났다. 세 방법 모두 초기농도의 공간적인 경도가 작을 때 보다 큰 경우 오차가 더 크게 나타났다.

참 고 문 헌

Bartnicki, J. (1989) A simple filtering procedure for removing negative values from numerical solutions of the advection equation. *Environmental Software*, 34, 187-207.

Bott, A. (1989) A positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of the advective fluxes. *Mon. Wea. Rev.*, 117, 1006-1015.

Gazdag, J. (1973) Numerical convective schemes

based on accurate computation of space derivatives. *J. Comput. Phys.*, 13, 100-113.

Smolarkiewicz, P.J. (1983) A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion. *Mon. Wea. Rev.* 111, 479-486.

Smolarkiewicz, P.J. (1984) A fully multidimensional positive definite advection transport algorithm with small implicit diffusion. *J. Comput. Phys.*, 54, 325-362.

Van Stijn, Th. L., J. C. H. Van Eijkeren, and N. Praagman (1987) A comparison of numerical methods for air-quality models. National Institute for Public Health and Environmental Hygiene, Scientific Report W.R. 87-6, Netherlands.