하천 오염물질 이송확산 모의에서의 프랙탈 계산기법

Fractal calculus for water pollutant diffusion modeling

김상단* / 송미영** Sangdan Kim, Mee Young Song

요 지

프랙탈 이송확산방정식은 정수 차수의 미분연산자로 구성된 고전적인 이송확산방정식과 비교하여 프랙탈 차수의 미분연산자로 구성된 보다 상위개념의 방정식으로써 정의된다. 지금까지의 프랙탈 이송확산방정식은 추계학적인 기법을 동원하여 푸리에-라플라스 공간에서 주로 해석되었으나, 본 연구에서는 실제 공간에서 유한차분개념을 도입하여 보다 직접적으로 하천에서의 오염물 이송확산에 관한 지배방정식을 유도하였다. 이러한 개념의 유도방법은 프랙탈 차수 및 관련 확산계수의 물리적인 추정에 관한 실마리를 제공할 수 있다. 고전적인 이송확산방정식과는 달리 프랙탈 이송확산방정식은 실제 하천에서 관측되는 오염물의 시간-농도분포곡선의 왜곡현상과 분포곡선의 전후방부 농도를 보다 실제에 가깝게 모의할 수 있을 것으로 기대되어진다.

핵심용어: 수질, 이송확산, 프랙탈

1. 서론

Taylor(1954)는 확산연구에서 다음과 같은 1차원 Fick의 이송확산방정식(Fick, 1855)을 처음 소개하였다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\nu C + \frac{\partial}{\partial x}K\frac{\partial C}{\partial x} \tag{1}$$

여기서 C는 오염물질의 농도, ν 는 유속, K는 확산계수이다. 이러한 1차원 Fick의 확산방정식에 의해 모의된 결과는 정규분포의 형태를 보이고 있는 반면에, 대부분 자연하천에서의 실측된시간-농도 분포곡선은 왜곡된 분포형태를 보이고 있으며, 또한 모의된 시간-농도 분포곡선은 전방부 또는 후방부의 농도가 실제하천에서의 값보다 작은 값을 주는 것으로 알려져 있다. 이에 본 연구는 문제해결의 일차적 과제로서 프랙탈 차원의 미분방정식을 도입하여 실제하천에서 적용 가능한 Fick의 법칙을 일반화하여 새로운 개념의 이송확산방정식의 수학적 유도를 목적으로 한다.

2. 유한차분의 측면에서 본 Fick의 법칙

오염물 입자의 플럭스 J는 농도구배에 비례한다는 Fick의 법칙의 수식 표현은 다음과 같다.

$$J = -K \frac{\partial C}{\partial x} \tag{2}$$

여기서 J는 단위시간당 단위면적당 오염물질량의 플럭스이다. Fick의 법칙에 따른 오염물 입자의 운동은 그림 1과 같은 인접 셀 사이에서의 오염물 입자의 확산을 위한 유한차분기법을 이용하여 살펴볼 수 있다. 먼저 상자 i 안에 있는 오염물 입자의 수를 M_i 라 하면 각각의 상자의 농도는 아래와 같이 쓸 수 있다.

^{*} 정회원, 경기개발연구원 환경정책연구부, 책임연구원, E-mail: skim@kri.kr.kr

^{**} 정회원, 경기개발연구원 환경정책연구부, 연구위원, E-mail: mysong@kri.kr.kr

$$C_i = \frac{M_i}{\Lambda V} \tag{3}$$

여기서 $\Delta V=A\Delta x$ 로서 상자의 부피를 의미하며 A는 흐름 단면적이다. 하천흐름에 의한 유속은 일단 무시하고 상자 안의 오염물 입자들 중에서 단위시간당 총 R의 비율로 입자들이 전방으로 확률 p, 후방으로 확률 q를 보이며 점프한다(여기서 p+q=1)고 가정하면, 상자 i에서 단위시간 Δt 동안에 상자 i+1과 i-1로 점프하는 입자들의 총 수는 $M_iR\Delta t$ 가 되며, 상자 i에서 단위시간 Δt 동안의 플럭스 J_i 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{split} J_{i} &= \frac{R}{A} \left(p M_{i} + p M_{i-1} - q M_{i} - q M_{i+1} \right) \\ &= -R \Delta x^{2} \left\{ p \cdot \frac{C_{i} - C_{i-1}}{\Delta x} - q \cdot \frac{C_{i} - C_{i+1}}{\Delta x} \right\} + 2R \Delta x \left(p - q \right) C_{i} \end{split} \tag{4}$$

이 때 극한 $\Delta x \rightarrow 0$ 을 취한 후, p=q=1/2, $K=R\Delta x^2$ 이라 하면

$$J_{i} = -R\Delta x^{2} \left(p \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + q \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \right) = -K \cdot \frac{\partial C}{\partial x}$$
 (5)

3. 프랙탈 계산법

연속함수 C(x)의 Taylor급수를 고려하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$C(x+\tau) = C(x) + \tau DC(x) + \frac{\tau^2}{2!} D^2 C(x) + \dots + \frac{\tau^n}{n!} D^n C(x) + \dots$$
 (6)

여기서 D는 미분연산자이며, 상방향연산자 $E_{ au}^{+1}$ 을 $E_{ au}^{+1}C(x)=C(x+ au)$ 와 같이 정의하면 $E_{ au}^{+1}C(x)=e^{ au D}C(x)$ 이 된다. 따라서, 미분연산자와 상방향연산자는 서로 $E_{ au}^{+1}=e^{ au D}$ 와 같은 관계를 맺고 있음을 알 수 있다. 우측차분연산자는 $\Delta^1_-=1-E_{ au}^{+1}=1-e^{ au D}$ 과 같이 정의할 수 있으며, 이러한 개념으로부터 우측미분연산자를 아래와 같이 정의할 수 있다.

$$\frac{dC(X)}{dx} = -D_{-}^{1}C(x) = -\lim_{\tau \to 0} \frac{\Delta_{-}^{1}C(x)}{\tau}$$
 (7)

한편, 하방향연산자는 $E_{ au}^{-1}C(x)=C(x- au)$, 좌측차분연산자는 $\Delta_+^1=1-E_{ au}^{-1}=1-e^{- au D}$ 로 정의할 수 있으며, 좌측미분연산자는 다음과 같다.

$$\frac{dC(x)}{dx} = D_{+}^{1}C(x) = \lim_{\tau \to 0} \frac{\Delta_{+}^{1}C(x)}{\tau}$$
 (8)

이 때, 식 (7)과 (8)은 수학적으로 같은 연산자를 표기하므로 좌우측미분연사자들은 $D^1_+=-D^1_-$ 이 됨을 알수 있다.

다음 과정으로, 위와 같은 정수차수 미분의 경우를 바탕으로 하여 다음과 같이 프랙탈 차수의 미분을 정의할 수 있다.

$$\Delta_{+}^{\alpha}C(x) = (1 - E_{\tau}^{-1})^{\alpha}C(x) = \sum_{k=0}^{\infty} {\alpha \choose k} (-1)^{k}C(x - k\tau)$$

$$= W_{0}^{\alpha}C(x) - W_{1}^{\alpha}C(x - \tau) - W_{2}^{\alpha}C(x - 2\tau) - \cdots$$
(9)

여기서 W는 프랙탈 가중함수로서 $W_0^{\alpha}=1,~W_k^{\alpha}\geq 0~(k\geq 1)$ 이다. 이 때, $0<\alpha\leq 1$ 이다. 마찬가지로 우측차분연산자에 대해서는 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$\Delta_{-}^{\alpha}C(x) = C(x) - \sum_{k=1}^{\infty} W_k^{\alpha}C(x+k\tau)$$
(10)

이로부터 프랙탈 차수의 미분연산자는 다음과 같이 정의될 수 있다.

$$D_{+}^{\alpha}C(x) = \frac{d^{\alpha}}{dx^{\alpha}}C(x) = \lim_{\tau \to 0} \frac{\Delta_{+}^{\alpha}}{\tau^{\alpha}}C(x), D_{-}^{\alpha}C(x) = -\frac{d^{\alpha}}{dx^{\alpha}}C(x) = \lim_{\tau \to 0} \frac{\Delta_{-}^{\alpha}}{\tau^{\alpha}}C(x)$$
(11)

따라서 α 가 정수가 아니라면 $D_+^{\alpha}C(x)\neq -D_-^{\alpha}C(x)$ 이 된다. 여기서 프랙탈 차수의 미분연산자는 Samko 등(1993)에 의해 다음과 같이 정의된다.

$$D_{+}^{\alpha}C(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^{n}}{dx^{n}} \int_{-\infty}^{x} ds (x-s)^{n-q-1} C(s)$$
(12)

$$D_{-}^{\alpha}C(x) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_x^{\infty} ds (s-x)^{n-q-1} C(s)$$
(13)

이 때 n은 α 보다 작지 않은 최소 정수이다. 그림 2는 정수 차수의 일반적인 도함수와 프랙탈 차수의 도함수의 비교를 보여주고 있다. 어떤 점 x=s에서의 정수 차수 도함수는 s 근방의 기울기로서 정의됨에 따라도함수가 내포하고 있는 정보는 함수의 국부적인 거동만을 제공하는 반면에, 어떤 점 x=s에서의 프랙탈 차수의 도함수는 함수 전체의 정보를 모두 포함하고 있다 (blank, 1996). 그림 3은 α 가 각각 0.1, 0.5, 0.9일 때, 어떤 주어진 점에 대한 주위 점들의 가중치 W_k^{α} 를 보여주고 있다. α 값이 1에 가까운 값일수록 근방의점들에 보다 큰 가중치가 주어지며, α 값이 0에 가까울수록 먼 곳에 있는 점들의 영향이 더 크게 작용하고 있다. 즉, 프랙탈 차수의 미분연산자는 어떤 점에 대한 전체 함수값들의 가중평균이 된다.

4. 프랙탈 Fick의 법칙

이제 프랙탈 Fick의 법칙을 유도하기 위하여 그림 4를 고려하도록 하겠다. 그림 4에서 알 수 있듯이 상자 i 안에 있는 오염물 입자들은 그림 1의 경우와는 달리 시간 Δt 동안에 상자 i-1과 i+1 뿐만 아니라 그보다 더 멀리 이동할 수 있다. 이 때, 상자 i에 있는 오염물 입자가 상자 i+1 또는 i-1로 이동할 확률은 상자 i+2 또는 i-2로 이동할 확률보다 크며, 또한 상자 i+2 또는 i-2로 이동할 확률은 상자 i+3 또는 i-3로 이동할 확률보다 크다고 가정한다. 따라서 상자 i 에서 단위시간 Δt 동안의 플릭스 J_i 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$J_{i} = \frac{R}{A} \left(p\omega_{1}^{\alpha} C_{i-1} + p\omega_{2}^{\alpha} C_{i-2} + p\omega_{3}^{\alpha} C_{i-3} + \cdots p\omega_{1}^{\alpha} C_{i} + p\omega_{2}^{\alpha} C_{i} + p\omega_{3}^{\alpha} C_{i} + \cdots \right)$$

$$- q\omega_{1}^{\alpha} C_{i+1} - q\omega_{2}^{\alpha} C_{i+2} - q\omega_{3}^{\alpha} C_{i+3} - \cdots - q\omega_{1}^{\alpha} C_{i} - q\omega_{2}^{\alpha} C_{i} - q\omega_{3}^{\alpha} C_{i} - \cdots)$$

$$= R\Delta x \left(p \sum_{k=1}^{\infty} \omega_{k}^{\alpha} C_{i-k} + p \sum_{k=1}^{\infty} \omega_{k}^{\alpha} C_{i} - q \sum_{k=1}^{\infty} \omega_{k}^{\alpha} C_{i+k} - q \sum_{k=1}^{\infty} \omega_{k}^{\alpha} C_{i} \right)$$

$$(14)$$

여기서 w_k^{lpha} 는 상자 i 로부터 k개만큼 떨어진 인근 상자(즉, 상자 i-k 또는 상자 i+k)에 있는 오염물 입자가 상자 i로 점프할 확률로서 $\sum_{k=1}^{\infty}\omega_k^{lpha}=1$ 이며 ω 는 k에 대하여 감소함수이다. 이 때 lpha는 k에 대한 ω

의 감소 정도를 나타내는 매개변수이다. 만약 가중치 w_k^lpha 를 아래와 같이 각각 정의할 수 있다면 이는 곧 프랙탈 가중함수를 적용할 수 있게 됨을 의미한다.

$$\omega_k^{\alpha} = \frac{W_k^{\alpha}}{\sum_{k=1}^{\infty} W_k^{\alpha}} = \frac{W_k^{\alpha}}{T} \tag{15}$$

여기서 W_k^{α} 는 식 (9)에서 정의한 프랙탈 가중함수이며, 만약 $\alpha=1$ 이면 T=1이고, $0<\alpha<1$ 이면 0< T<1이 된다. 이제 플럭스 J_i 는 앞서 설명한 프랙탈 계산법에 의해 아래와 같이 유도될 수 있다.

$$J_{i} = -\frac{R\Delta x}{T} \left\{ p \left(C_{i} - \sum_{k=1}^{\infty} W_{k}^{\alpha} C_{i-k} \right) - q \left(C_{i} - \sum_{k=1}^{\infty} W_{k}^{\alpha} C_{i+k} \right) - (1+T)(p-q) C_{i} \right\}$$

$$= -\frac{R\Delta x^{\alpha+1}}{T} \left\{ p \cdot \frac{\Delta_{+}^{\alpha} C_{i}}{\Delta x^{\alpha}} - q \cdot \frac{\Delta_{-}^{\alpha} C_{i}}{\Delta x^{\alpha}} \right\} + R\Delta x \cdot \frac{T+1}{T} \cdot (p-q) C_{i}$$
(16)

이 때, 극한 $\Delta \to 0$ 을 취하고 확산계수를 $K_{\alpha}=R\Delta x^{\alpha+1}/T$ 로 정의하면 다음과 같은 프랙탈 Fick의 법칙을 유도할 수 있다.

$$J_i = -K_{\alpha} \left(p \cdot D_+^{\alpha} C_i - q \cdot D_-^{\alpha} C_i \right) \tag{17}$$

여기서 α 는 프랙탈 차수로서 $0<\alpha\leq 1$ 의 범위를 가지며, D_+^{α} 와 D_-^{α} 는 프랙탈 차수의 미분연산자이고, K_{α} 의 단위는 $length^{\alpha+1}/time$ 이다. 만약 식 (30)에서 $\alpha=1$ 이라면 T=1이 되고, 여기에 p=q=1/2라 하면 프랙탈 Fick의 법칙은 기존의 Fick의 법칙과 완전히 같아지게 되므로 기존에 사용되어오던 Fick의 법칙은 프랙탈 Fick의 법칙의 한 가지 특수한 경우로서 설명될 수 있다. 따라서 하천오염물질의 모의를 위한 프랙탈 이송확산방정식은 아래와 같이 된다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\nu C + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ K_{\alpha} \left(\frac{1+\beta}{2} D_{+}^{\alpha} C - \frac{1-\beta}{2} D_{-}^{\alpha} C \right) \right\}$$
(18)

이 때 통계학적인 설명의 용이성을 위하여 eta는 p와 q를 대신하여 사용된 매개변수로서 다음과 같은 관계를 갖는다.

$$p = \frac{1+\beta}{2} \tag{19}$$

$$q = \frac{1-\beta}{2} \tag{20}$$

위와 같은 β 의 정의는 농도분포 곡선의 왜곡도를 나타내는데 매우 용이하다. β 는 $-1 \leq \beta \leq 1$ 의 범위를 갖고 있으며 $\beta=0$ 인 경우는 왜곡도가 0이 되어 농도분포곡선은 왜곡되지 않고 좌우 대칭인 분포곡선을 나타내며, $\beta \to -1$ 인 경우는 분포곡선의 첨두부가 왼쪽으로 크게 치우친 분포곡선을, $\beta \to 1$ 인 경우에는 오른쪽으로 크게 치우친 분포곡선을 보여주게 된다.

5. 결론

본 연구에서는 하천에서의 오염물질 거동해석을 위한 프랙탈 이송확산방정식을 유도하였다. 유도의 핵심과정은 프랙탈 계산법의 도입이었으며, 이 과정을 유한차분개념을 통하여 해석적으로 설명하고자 하였다. 본연구에서 제안된 프랙탈 이송확산방정식을 통하여 하천 오염물질의 모의 시 발생되는 시간-농도 분포곡선의 왜곡현상과분포곡선의 전방부 또는 후방부의 농도 과소평가 문제 등을 해결할 수 있을 것으로 기대된다.

참고문헌

- 1. Blank, L. (1996). "Numerical treatment of differential equations of fractional order." Manchester Centre for Computational Mathematics Numerical Analysis Report No. 287.
- 2. Fick, A. (1855). "On liquid diffusion." Philos. Mag., 294, pp. 30-39.
- 3. Samko, S.G., Kilbas, A.A. and Marichev, O.I. (1993). "Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications." Gorden & Breach, Amsterdam.
- 4. Taylor, G.I. (1954). "Conditions under which dispersion of a solute in a stream of solvent can be used to measure molecular diffusion." Proc. Roy. Soc. A, 225, pp. 473477.

