

야외규모 TCE 질량전이 모델의 개발

박은규¹, John C. Parker²

1. 경북대학교 자연과학대학 지질학과 (egpark@knu.ac.kr)

2. Environmental Science Division, Oak Ridge National Laboratory, USA

초록

본 연구에서는 야외규모 TCE (trichloroethylene) 질량전이역학을 평가하기 위해 TCE의 대수층 내 유입 및 용해상 거동을 고해상도 수치 모사를 실시하였다. 공간적으로 불균질한 대수층 10 x 10 x 10 m 도메인 내부의 유입된 TCE 분포를 모사하기 위해 본 연구를 통해 개발된 정성적 침투모델 (percolation model)이 이용되었다. 이를 기초로 하여 연계되어진 (coupled) 지하수 유동 및 용해상 거동 장기 (long-term) 모사를 실시하였다. 지역적으로 일어나는 질량전이는 기존 연구를 통하여 발표되어진 실험실규모 연구에 기초하였다. 지하수가 도메인을 지나 흘러나가는 경계면에서 측정되어진 용해상 (aqueous phase) TCE의 질량선속 (mass flux)을 통해 실질 야외규모 질량전이 상수가 계산되었다. 관찰된 바 야외규모 질량전이 상수는 실험실 연구를 통해 측정된 값에 비하여 훨씬 작은 값을 보였다. 이는 지하수 유속 및 TCE의 불균질한 분포에 기인한다. 야외규모 질량전이 상수는 평균 지하수 유속에 직접 비례하는 것으로 관찰되었고 이는 기존 실험실 연구를 통해 알려진 평균 지하수 유속의 0.7승이라는 결과와 대조되는 것이다. 또한 모사를 통해 관찰된 야외규모 질량전이 상수는 상대 TCE 질량의 고갈상수 승에 비례함을 보였다. 이러한 고갈상수는 TCE가 측방으로 퍼지는 현상이 강한 대수층, 즉 저투수성 층의 발달이 양호한 대수층, 에서는 1보다 작은 값을 갖고 그렇지 않은 대수층, 즉 저투수성 층의 발달이 미약한 대수층, 에서는 대체적으로 1보다 높은 값을 갖는 것으로 관측되었다. 이는 DNAPL의 측방 퍼짐이 강한 대수층에서는 용해로 인한 시간에 따른 오염원 부근에서의 농도 감소가 미약하기 때문인 것이며, 그와 반대로 DNAPL의 측방 퍼짐이 약한 대수층에서는 시간이 지남에 따라 용해에 의해 지속적으로 오염원 부근에서의 농도가 감소 또는 소멸함으로써 인하여 측정되는 용해상 DNAPL의 질량 선속 역시 계속적으로 감소되는 것으로 밝혀졌다.

*핵심어: 질량전이, DNAPL, 고갈상수, 불균질성, 대수층

서론

최근 국내 조사 (건설교통부, 2002)에 의하면 지하수로부터 가장 흔하게 검출되는 주 유기오염 화학종은 고비중 난용해성유기물질(DNAPL, dense non-aqueous phase liquids)의 일종인 TCE (trichloroethylene)로 특히 공단 지역과 금속광산 지역에 부존하는 대수층 및 지하수에서 집중적으로 검출되는 것으로 나타났다. TCE의 대수층 오염 특성은 주로 높은 비중에 의해 발생하며, 지표에서 유입된 TCE는 중력의 영향에 의해 대수층의 최상부인 지하수면을 통과하여 대수층 내로 유입되고, 이 유입경로를 따라 수리전도도의 분산이 낮을 경우 주로 수직적 이동 (vertical movement)을 하며 이와는 반대로 경로상의 수리전도도의 분산이 높을 경우 (ex. 대수층 내 저투수층의 발달) 측면이동 (lateral movement)이 주를 이루게 된다. 대수층이 TCE에 노출 되면 낮은 용해도에 의해 상당히 오

랜 기간에 걸쳐 지하수에 영향을 미치며 맹독성이므로 대수층 내부 적은 양의 TCE 유입도 오랜 기간 동안 심각한 위협을 초래할 수 있다. TCE에 의해 오염된 대수층에 대한 정화는 TCE로부터의 오염 물질 방출 및 시간에 따른 방출량, 즉, 질량전이의 감소 경향에 크게 좌우된다. 대수층 내 TCE로부터 지하수가 오염되는 방출 과정은 질량전이역학에 기인한다. 그러므로 야외규모에서 TCE의 질량전이역학에 대한 지식은 TCE에 의한 잠재적 위해성 파악 및 TCE로 오염된 지역의 정화기법 적용 의사결정에도 지대한 영향을 미친다. 또한 오염된 대수층에 대한 자연저감감시체계 (MNA, monitored natural attenuation) 적용 가능여부 역시 야외규모 질량전이역학에 의해 판단되어질 수 있다.

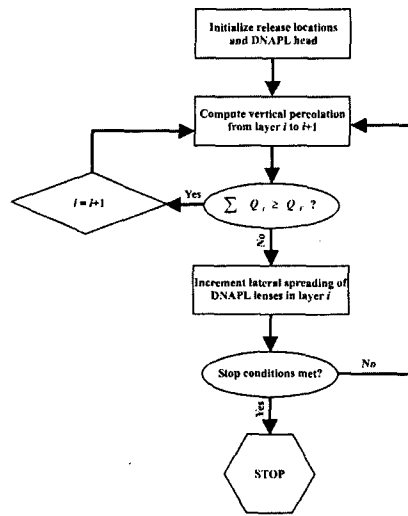
기존 DNAPL 질량전이역학과 관련된 연구들은 대부분 실험실규모에서 수행되어져 왔다 (Parker and Park, 2004). 이들 연구들은 대체로 DNAPL에 의한 포화지수와 유속 (aqueous phase velocity)의 함수로 질량전이 상수 (mass transfer coefficient)를 표현했다. 그러나 이러한 연구 결과들을 야외에 적용하였을 때 발생하는 이론적 불일치 문제가 계속적으로 제기되어져 왔으며 (Anderson et al., 1992), 실험실규모와 야외규모 간의 지배인자 불일치 및 차원(dimensionality) 불일치가 이러한 결과를 가져올 것이라 예측된다.

따라서 본 연구의 목적은 야외규모 TCE 질량전이역학을 설명할 수 있는 구성 모델을 개발하는데 있다. 모델의 개발을 통하여 야외에서 측정된 용해상 TCE의 시간에 따른 농도 변화를 통해 TCE 오염원 지역에서 일어나는 지하수 오염특성을 파악할 수 있다. 또한 이러한 모델의 개발은 향후 DNAPL에 의해 오염된 대수층 정화 및 위해성 평가에 있어서 매우 유용하게 이용되어질 수 있다.

연구방법 및 분석

실제 지하상황과 유사한 불균질한 3차원적 야외규모를 고려한 DNAPL 질량전이역학에 대한 기존 연구는 최근의 몇몇 연구 (Parker and Park, 2004; Park and Parker, 2005)를 제외하고는 현재까지 전무한 상태이다. 야외규모 과정은 실험실 상황에서 고려할 수 있는 것 보다 훨씬 다양한 복잡성을 띄기 때문에 이러한 이론 개발은 일반적으로 개념모델의 확립 후 컴퓨터 모사가 선행되어야 한다. 그러나 이를 모사하기 위한 다중상 거동모델 (multi-phase migration model)의 연산 복잡성 및 컴퓨터자원 한계에 기인하여 아직까지 본격적인 정량적 시도가 이루어지지 않고 있는 실정이다 (Poulsen and Kueper, 1992; Parker and Park, 2004). 일반적으로 DNAPL의 지하 거동은 작은 규모 (수 mm 내지 수 cm 규모)의 불균질성에 의존하며 이러한 작은 규모의 불균질성은 현재의 지하조사 기술력으로는 규명할 수 없다. 또한 작은 규모의 불균질성을 고려한 모델의 개발이 가능하다 하더라도 엄청난 연산시간이 요구된다 (Parker and Park, 2004). 본 연구에서는 대안적으로 정성적 침투모델을 이용하였다 (Parker and Park, 2004). 그림1은 Parker and Park (2004)에 의해 제시된 정성적 침투모델의 알고리즘과 SGS (sequential Gaussian simulation)법을 이용하여 모사된 10 x 10 x 10 m 대수층 내 TCE의 분포도이다. 모사를 위해 대수층 도메인을 1,000,000개의 그리드로 나누었으며 개개의 그리드는 0.2 x 0.2 x 0.025 m의 크기를 가진다. 오염원의 분포는 그림1b에서 보는 바와 같이 상부구역에서는 미약한 풀 (pool) 구조가 관찰되며 핑거 (finger)가 우세한 수직적인 분포가 주를 이루며 하부 구역에서는 수평적인 분포가 주를 이루는 것으로 관찰되었으며 이는 최하부에 존재하는 불투수성층에 기인한다.

a.



b.

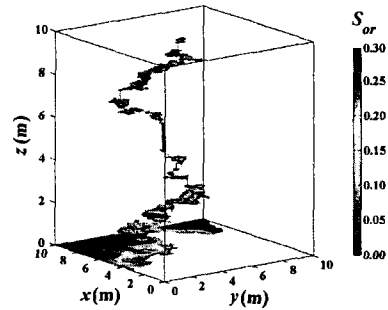


그림1. (a) 정성적 침투모델의 연산 모식도 (b) 정성적 침투모델을 통해 개발된 TCE 분포

오염원 및 분포가 만들어진 후 이를 이용하여 상부구역, 하부구역 및 통합구역에 대한 지하수 유동 및 오염물질 용해/거동 모사를 실시하였다. 도메인 내에서 오염원의 용해에 의한 지속적인 상대 투수계수 변화를 모사하기 위해 유동 모델과 용해/거동 모델이 연계되어 적용되었다. 그리드 규모에서 일어나는 질량전이는 실험실 규모의 개개 그리드 사이즈를 고려하여 기 발표된 실험실규모 연구 (Miller et al., 1990)에 기초하였다. 모든 지하수의 유동은 도메인의 지하수 배출면을 통해 배출이 되며 이 전체 면을 통해 지나가는 용해상 (aqueous phase) TCE의 질량선속 (mass flux)을 시간단위로 측정하였다.

본 연구에서는 야외규모 TCE의 질량전이역학을 설명하는 함수를 구성하기 위해 기존 연구에서 이용되는 실험실규모 질량전이함수의 규모확장 (scale-up)을 통해 아래와 같은 야외규모 질량전이함수를 구성하였다 (Parker and Park, 2004).

$$\kappa_{eff} = \kappa_0 \left(\frac{q}{K} \right)^{\beta_1} \left(\frac{M}{M_0} \right)^{\beta_2}$$

여기서 κ_{eff} 는 실질 질량전이 상수, κ_0 는 비례상수 q 는 평균 지하수 유속, K 는 평균 대수층 수리전도도, β_1 은 조절상수, M 은 도메인 내부에 남아있는 TCE의 질량, M_0 는 최초 TCE 질량, 그리고 β_2 는 고갈상수이다. 규모확장을 통해 얻어진 함수와 모사를 통해 측정된 TCE 질량 선속 대비를 통해 얻어진 결과는 표1과 같다.

표1. 실질질량전이 함수와 모사결과를 대비를 통해 얻어진 맞춤상수 (fitting coefficient)

| | 상부구역 | 하부구역 | 상부+하부 |
|-------------------------|-------|--------|-------|
| κ_0 (d^{-1}) | 0.049 | 0.0024 | 0.049 |
| M_0 (kg) | 231 | 103 | 334 |
| β_1 (-) | 1.0 | 1.0 | 1.0 |
| β_2 (-) | 1.1 | 0.4 | 1.4 |

표1에서 보는 바와 같이 실질 질량전이 상수는 평균 지하수 유속에 비례하는 것으로 나타났다. 이는 기존의 실험실 규모에서 밝혀진 평균 지하수 유속의 0.7 승이라는 결과보다 훨씬 강한 의존성을 보이

는 것이다. 고갈상수는 DNAPL의 수평 퍼짐 현상이 강한 하부구역에서는 1보다 작은 특성을 보이며 그와 반대로 수직적 분포가 우세한 상부구역에서는 1보다 큰 특성을 보였다 (그림 2).

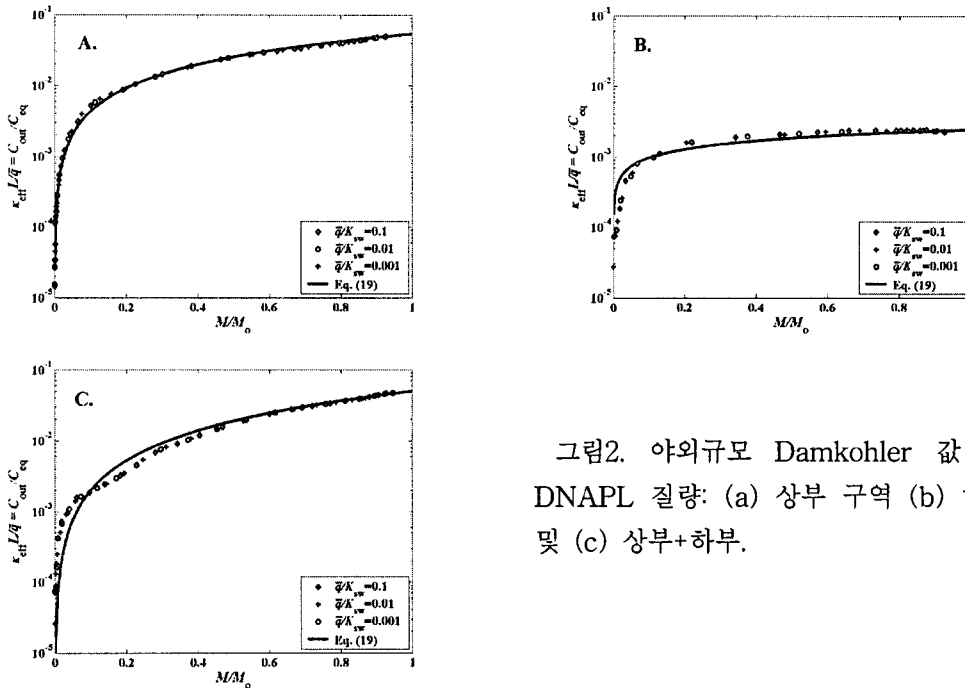


그림2. 야외규모 Damkohler 값 대 상대 DNAPL 질량: (a) 상부 구역 (b) 하부 구역, 및 (c) 상부+하부.

결론 및 향후 연구 방향

본 연구를 통해 야외규모에서 질량전이역학을 지배하는 가장 중요한 인자는 DNAPL과 지하수흐름의 공간적 불균질성, 및 이들의 상호관계라는 것을 관찰하였다. 또한 연구를 통해 TCE 오염원의 감소로 인한 시간에 따른 TCE 질량선속의 감소가 일어날 수 있으며 이는 DNAPL의 분포 특성 및 지하불균질성에 의존한다. 본 연구를 통하여 TCE의 질량 선속은 평균지하수 속도에 비례하며 오염원이 존재하는 구역의 상대 TCE 질량의 고갈상수 승에 비례함을 보였다. 이러한 고갈상수는 대수층의 불균질성과 밀접한 관계를 가질 것으로 예측된다. 이에 기초한 향후의 연구는 1) 주어진 대수층의 불균질 특성에 따른 고갈상수의 상관관계, 2) 의사결정 도구로써 개발되어진 질량전이역학 모델을 이용하였을 때 발생할 수 있는 불확실성에 대한 정량적 분석, 및 3) 파쇄암반층에서의 질량전이역학 개발이며 이를 위한 연구가 현재 진행 중이다.

참고문헌

Miller, C. T., M. M. Poirier-McNeill, and A. S. Mayer, Dissolution of trapped nonaqueous phase liquids: Mass transfer characteristics, *WRR*, 26(11), 2783-2796, 1990.

Park, E., and Parker, J. C., Evaluation of an Upscaled Model for DNAPL Dissolution Kinetics in Heterogeneous Aquifers, *AWR*, (in press, Fall 2005)

Parker, J. C., and E. Park, Modeling field-scale dense nonaqueous phase liquid dissolution kinetics in heterogeneous aquifers, *WRR* 2004;40: W05109, doi:10.1029/2003WR002807.

Poulsen, M. M., and B. H. Kueper, A field experiment to study the behavior of tetrachloroethylene in unsaturated porous media, *EST*, 26, 889-895, 1992.