

## 동역학적 흡착 관계식을 이용한 다공 매질에서의 유동세균에 의한 유기성 오염물의 가속이송 예측 모델

### Modeling Bacteria Facilitated Contaminant Transport in Porous Media with Kinetic Adsorption Relationships

김승현(Seung-Hyun Kim)\*

**요약** : 유동 세균 입자는 지체계수를 감소시키므로써 지하수에서 소수성 오염물의 이동을 촉진시킨다. 그 크기와 표면의 적당한 물리화학적 조건으로 인하여 세균은 효율적인 오염물의 운반자가 될 수 있다. 이러한 운반자가 있을 때, 그 계는 액상, 입상, 그리고 고상의 3 상으로 해석되어야한다. 오염물은 각 상에 모두, 혹은 그 중의 일부에 존재할 수도 있다. 본 연구에서는 세균이 있는 경우, 생화학적으로 분해 가능한 유기성 오염물의 다공매질에서의 거동을 물질수지에 기초하여 수학적 모델로 묘사한다. 세균의 액상과 고상사이의 물질 전이 및 오염물의 액상과 입상사이의 물질 전이는 동역학적 관계식으로 나타냈다. 모델 결과를 일반화하기 위하여 무차원화를 수행했고, 그 해를 구하여 세균에 의한 오염물의 가속이송 효과를 알 수 있었다. 모델 결과는 문헌상의 실험결과와 비교되었다. 모델 결과로부터 오염물은 그 계의 Damkohler I 수가 10 이상일 경우 국지 평형 가정을 할 수 있었으며, 세균의 성장율과 주입 농도 등이 오염물의 청소에 아주 중요한 요소임을 알 수 있었다.

**Abstract** : Mobile bacterial particles can act as carriers and enhance the transport of hydrophobic contaminants in ground water by reducing retardation effects. Because of their colloidal size and favorable surface conditions, bacteria can act as efficient contaminant carriers. When such carriers exist in a porous medium, the system can be thought of as three phases: an aqueous phase, a carrier phase, and a stationary solid matrix phase. Contaminant can be present in either or all of these phases. In this study, a mathematical model based on mass balances is developed to describe the transport and fate of biodegradable contaminant in a porous medium. Bacterial mass transfer mechanism between aqueous and solid matrix phases, and contaminant mass transfer between aqueous and bacterial phases are represented by kinetic models. Governing equations are non-dimensionalized and solved to analyze the bacteria facilitated contaminant transport. The numerical results of the facilitation effect match favorably with experimental data reported in the literature. Results show that the contaminant transport can be described by local equilibrium assumption when Damkohler numbers are larger than 10. Significant sensitivities to model parameters, particularly bacterial growth rate and influent bacterial concentration, were discovered.

## 서론

지하수에 유동성 콜로이드가 있을 경우 오염물이 콜로이드에 부착하므로써 가속이송이 발생한다(McCarthy and Zachara, 1989). 이 경우 오염물의 이동속도는 대류-확산에 기초한 보통의 지체계수로 계산한 값보다 훨씬 더 빠를 수 있다(Corapcioglu and Jiang, 1993). McCarty 와 Zachara(1989)는 거대 유기물 분자들의 음이온성 콜로이드는 지하수에서 흙 입자들이 음이온을 띠고 있기 때문에 그 이동속도가 빠르며, 이를 고려하지 않았을 경우 오염물의 이동거리가 과소평가될 수 있다고 하였다. 또한, Vinten 등(1983)과 Kan 과 Thomson(1990) 등도 용해 유기분자

(Dissolved Organic Matter)나 콜로이드등이 DDT와 같은 소수성 물질의 이동성을 증대시킨다고 하였다.

세균은 콜로이드 크기이며 어느 지하수에도 있다. 보통의 자연조건에서 음전하를 띠고(Harden and Haris, 1953), 또 그 비중이 물과 비슷하므로 콜로이드 용액을 형성한다(Marshall, 1986). Harvey(1989)등에 의하면 세균크기의 물질들 중에서는 큰 입자들의 이동속도가 더 크다고 하는데, 그 이유는 작은 입자들은 높은 확산을 때문에 흙 입자에 더 잘 부착하기 때문이라고 한다.

세균 표면은 소수성을 띤 부분이 있기 때문에 소수성 물질들을 여기에 흡착할 수 있다. Canten 등(1977)은 세균 표면에 소수성 물질이 흡착 및 탈착할 수 있다고 했다. Baughman 과 Paris (1981)는 문헌고찰을 통해 세균 표면에 오염물이 흡착할 수 있다고 결론지었다. Tsezos 와 Bell(1989), 그리고 McRea(1985)

\*경북 경산시 대동 214-1 영남대학교 환경공학과 (Environmental Engineering Dept., Yeungnam Univ., 214-1, Dae-dong, Kyungsan, Korea 712-749)

등에 의하여 여러 다른 물질들 즉, lindane, pentachlorophenol, 그리고 diazinon 등도 같은 경향을 가진다는 것이 밝혀졌다. Lindqvist 와 Enfield(1992) 등은 세균 표면에서의 부착현상은 능동적인 생물학적 현상이라기 보다는 수동적인 물리 화학적인 현상임을 밝혔다.

Bellin 과 Rao(1993)는 세균의 존재로 인해 오염물의 가속이송뿐 아니라 오염물의 생분해도 일어난다고 하였다. 그들은 실험을 통하여, 세균의 농도가 높을 경우 오염된 지역을 청소하는데는 세균에 의한 오염물의 가속이송 효과가 중요할 수 있다고 결론지었다. Jenkins 와 Lion(1993)은 실험을 통해 다핵 방향족 탄수화물(PAH)의 세균에 의한 가속이송현상을 밝혔다.

종래에는 지하수의 오염물 이동에서 액상과 고상(흙 입자)만을 고려해 왔는데, 콜로이드 입자(입상)가 추가될 경우 이를 고려한 3상 해석이 필요하다(Corapcioglu and Jiang, 1993; Figure 1).

세균과 오염물이 동시에 다공매질을 통과할 때, 그것들의 각 상 간의 물질전이가 일어나며, 이 현상은 국지 평형 모델(local equilibrium model)과 동역학적 접근법의 두 가지의 이론으로 해석이 가능하다. 어떤 세균은 국지평형 특성을 보이기도 하지만(Dickson, 1991), 많은 다른 세균들은 동역학적 거동을 보인다(Bitton et al., 1974; Hornberger et al., 1992).

본 연구에서는 동역학적 방법을 사용하여 세균과 오염물의 물질전이를 묘사한다. 모델 결과를 일반화하기 위하여 무차원화를 수행하였고, 모델의 수치해를 구했다. 몇가지 변수에 대한 민감도 분석을 수행하며, 또한 모델을 문헌상의 실험 결과와 비교하였다.

### 지배방정식 유도

콜로이드에 의한 오염물의 가속이송은 Corapcioglu 와 Jiang (1993), 그리고 Jiang 과 Corapcioglu(1993)에 의해 연구된 바 있다. 세균은 콜로이드 크기이고(Ghiorse and Wilson, 1988), 그 물리 화학적 성질로 인하여 안정한 콜로이드 용액을 형성한다(Marshall, 1986). 대부분의 지하수 오염물은 소수성이어서 세균의 표면에 잘 붙는다. 따라서, 세균은 지하수에서 오염물의 가속이송을 위한 특성을 갖추고 있다고 볼 수 있다. 이 절에서

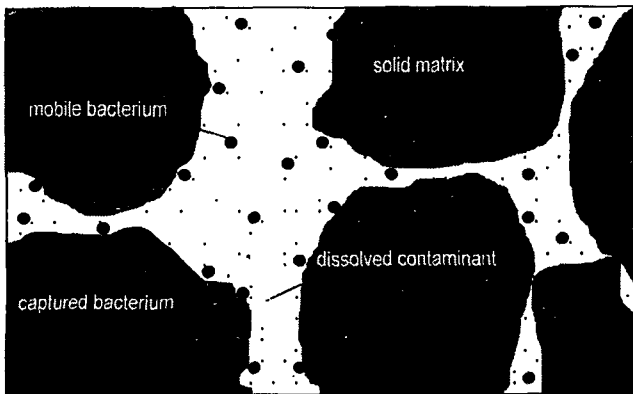


Figure 1. Schematic diagram of a porous medium with three phases.

는 다공매질에서 세균과 오염물의 동시 이송에 대한 수학적 표현을 유도한다.

### 세균의 이송

세균이 다공매질에서 이동할 때, 여러가지 기작이 여기에 관여하지만, 여기서는 이들 각각 기작의 총화인 현상론적 접근법을 이용하여 거시적 관점(Darcy scale)의 지배 방정식을 유도한다. 액상의 유동 세균에 대한 물질수지식은

$$\frac{\partial[(n-\alpha_c)C_c]}{\partial t} = -\nabla \cdot J_c^f - Q_s^{cm} + Q_g^{cm} - Q_d^{cm} \quad (1)$$

로 표시되며, 여기에서  $C_c$ 는 액상에서 유동 세균의 농도,  $Q_s^{cm}$ 는 세균의 고상에서의 순 부착율,  $n$ 은 공극율,  $\alpha_c$ 는 부착 세균의 용적율,  $J_c^f$ 는 유동 세균의 flux를 나타낸다.  $Q_g^{cm}$ 과  $Q_d^{cm}$ 는 유동 세균의 성장과 폐사를 나타낸다. 식(1)에서는 세균과 물의 속도는 같다고 가정했다.

고상에 부착한 세균의 물질 수지식은

$$\frac{\partial(\rho_c \alpha_c)}{\partial t} = Q_s^{cm} + Q_g^{cc} - Q_d^{cc} \quad (2)$$

로 나타낼 수 있으며, 여기서  $\rho_c$ 는 세균의 비중,  $Q_g^{cc}$ 와  $Q_d^{cc}$ 는 부착 세균의 성장과 폐사를 각각 나타낸다. 유동 세균의 flux는

$$\begin{aligned} J_c^f &= D_B \nabla [(n-\alpha_c)C_c] - D_{MD} \nabla [(n-\alpha_c)C_c] + q_w C_c \\ &= -D^* \nabla [(n-\alpha_c)C_c] + q_w C_c \end{aligned} \quad (3)$$

로 나타낼 수 있으며,  $D^*$ 는 유동 세균의 수력학적 확산계수이고  $q_w$ 는 Darcy의 유속을 나타낸다.

세균의 입자가 안정할 경우에는 물을 따라 흐르지만, 불안정할 경우에는 흙 입자의 표면에 부착한다. 여기에 '관여하는 요소는 세균과 흙의 표면 특성과 물의 pH, 이온 강도(O'Melia, 1985)등이다. 세균의 흙 입자에의 부착에 포화 모델을, 그리고 세균의 흙 입자로부터의 탈착에 단순 선형 모델을 사용하면 다음과 같은 세균의 순 부착율을 얻는다(Corapcioglu and Haridas, 1984; Tan et al., 1994).

$$Q_s^{cm} = K_1 \Gamma (n-\alpha_c) C_c - K_2 \rho_c \alpha_c \quad (4)$$

여기에서  $K_1$ 과  $K_2$ 는 세균의 부착과 탈착계수를 나타내고,  $\Gamma = (\alpha_{c,max} - \alpha_c) / \alpha_{c,max}$ 는 흙 입자 표면에서 세균의 부착에 대한 잔여능력을 나타낸다.  $\alpha_{c,max}$ 는 다공매질의 세균에 대한 최대 부착능력을 나타낸다(Gannon et al., 1991). 세균이 성장 및 폐사하지 않는, 다시말하여 무기 콜로이드라면 충분한 시간뒤의 액상과 고상간의 세균의 평형분배식은

$$\alpha_c = \frac{\alpha_{c,max} C_c}{K_c + C_c} \quad (5)$$

로 나타낼 수 있다. 식 (5)는 Langmuir 등은 흡착식으로 여기에서  $K_c = \alpha_{c,max} K_2 \rho_c / (k_1 n)$ 는 고상의 부착능력중 절반이 포화되었을 때, 액상에서의 콜로이드의 농도를 나타낸다.  $C_c \ll K_c$ 인 경우에는 식 (5)는

$$\sigma_c = \sigma_{c, \max} \frac{C_c}{K_c} = \frac{K_1 n}{K_2 \rho_c} C_c \quad (6)$$

즉, 선형 등은 흡착식으로 된다.

**오염물 이송**

오염물은 다공매질속을 흘러가며 고상과 입상(세균)에 부착한다. 세균의 표면에 오염물이 붙는 속도는 일반적으로 매우 빠르고(Lindqvist and Enfield, 1992), 능동적인 생물학적 과정이 아니라 수동적인 물리화학적 과정으로 알려져 있다(Canton et al., 1977; Paris and Lewis, 1976). 콜로이드 입자에 대한 이 기작은 최근 Corapcioglu 와 Jiang(1993) 그리고 Jiang 과 Corapcioglu (1993)에 의하여 연구된 바 있다. 세균의 물리화학적 특성이 콜로이드와 비슷하기 때문에(Harden and Haris, 1953; Marshall, 1986) Corapcioglu 와 Jiang(1993)의 해석 방법을 세균에 적용했다.

유동 세균의 표면에 부착한 오염물의 물질 수지식은

$$\frac{\partial[(n-\sigma_c)\sigma_{cm}C_c]}{\partial t} = -\nabla \cdot (\sigma_{cm}J_c^f) + Q_{cm}^a - R_{cm} \quad (7)$$

로 나타낼 수 있으며, 부착 세균에 부착한 오염물의 물질 수지식은

$$\frac{\partial(\sigma_c \rho_c \sigma_c)}{\partial t} = Q_{cc}^a - R_{cc} \quad (8)$$

로 나타낼 수 있다. 여기서  $\sigma_{cm}$ 은 유동 세균의 표면에 부착한 오염물의 질량비이고,  $Q_{cm}^a$ 은 유동 세균의 표면에서의 오염물의 순 부착율,  $Q_{cc}^a$ 는 부착 세균의 표면에서의 오염물의 순 부착율, 그리고  $R_{cm}$ 과  $R_{cc}$ 는 유동 및 부착 세균의 표면에 있는 오염물의 이용속도이다.  $\sigma_{cc}$ 는 부착 세균의 표면에서 부착한 오염물의 질량비를 나타낸다. 오염물의 액상과 입상사이에서의 물질전이는 다음과 같이 동역학적 관계식으로 나타낼 수 있다.

$$Q_{cm}^a = K_a \frac{C_c}{C_{c, ref}} (n - \sigma_c) C_D - K_d (n - \sigma_c) C_c \sigma_{cm} + K_2 \rho_c \sigma_c \sigma_{cc} - K_1 \Gamma (n - \sigma_c) C_c \sigma_{cm} \quad (9)$$

$$Q_{cc}^a = K_a \frac{\sigma_c}{\sigma_{c, max}} (n - \sigma_c) C_D - K_d \rho_c \sigma_c \sigma_{cc} - K_2 \rho_c \sigma_c \sigma_{cc} + K_1 \Gamma (n - \sigma_c) C_c \sigma_{cm} \quad (10)$$

여기서 식 (9)와 (10)의 오른쪽 첫째항은 오염물의 세균 표면에서의 흡착율을 나타내고 두번째 항은 탈착율을 나타낸다. 세째 항은 세균의 탈리로 인한 부착 오염물의 전이를, 그리고 마지막 항은 세균의 부착으로 인한 오염물의 전이를 나타낸다.  $K_a$ 는 세균 표면에서 오염물의 흡착율 상수,  $K_d$ 는 탈착율 상수를 나타낸다. 유동 및 부착 세균의 특성은 같다고 볼 수 있으므로 흡착 및 탈착 계수는 이들 두 세균의 표면에서 같다고 가정했다(van Loosdrecht et al., 1990).  $C_{c, ref}$ 는 세균의 기준 농도이고, 여기서는  $C_{c, ref} = K_c$ 로 하였다.

액상에서의 오염물 이동은

$$\frac{\partial(\sigma_D \rho_D)}{\partial t} + \frac{\partial[(n-\sigma_c)C_D]}{\partial t} =$$

$$-V \cdot \{-DV[(n-\sigma_c)C_D] + q_w C_D\} - Q_{cm}^a - Q_{cc}^a - R_f - R_f^* \quad (11)$$

로 표시될 수 있으며, 여기서  $\rho_D$ 는 다공매질의 겉보기 비중,  $D$ 는 오염물의 수력학적 확산 계수,  $\sigma_D$ 는 흙 입자에 붙은 오염물의 질량비를 나타낸다.  $R_f$ 는 액상 오염물의, 그리고  $R_f^*$ 는 고상에 부착한 오염물의 세균에 의한 이용 속도를 나타낸다.

일반적으로 소수성 유기물의 흙 입자 표면에서의 결합은 가역반응이고 그 속도가 매우 빠르므로(Miller and Weber, 1984; de Marsily, 1986)

$$\sigma_D = K_3 C_D \quad (12)$$

로 나타낼 수 있다. 여기서  $K_3$ 는 오염물의 액상과 고상간의 평형 분배 계수이다. 세균과 오염물에 대한 수력학적 확산 계수는 서로 같다고 할 수 있는데 이는 기계적 확산이 분자확산에 비해 충분히 크다는 가정을 전제한다.

**세균의 성장, 폐사, 그리고 오염물의 섭취**

유동 및 부착 세균의 성장을 묘사하기 위하여 Monod 모델을 사용하며, 오염물이 세균의 먹이로 섭취될 수 있다고 가정했다. 그러면

$$Q_g^{cm} = \mu^{cm} (n - \sigma_c) C_c = \frac{\mu_{max} C_D}{K_s + C_D} (n - \sigma_c) C_c; \quad (13)$$

$$Q_g^{cc} = \mu^{cc} \rho_c \sigma_c = \frac{\mu_{max}' C_D}{K_s' + C_D} \rho_c \sigma_c$$

을 얻으며  $\mu^{cm}$ 과  $\mu^{cc}$ 는 부유 및 부착 세균의 비 성장율이고,  $\mu_{max}$ 와  $\mu_{max}'$ 는 부유 및 부착 세균의 최대 비 성장율이다.  $K_s$ 와  $K_s'$ 은 Monod 의 반속도 상수이다. 그 계의 오염물 농도가 아주 낮으면, 식 (13)은 다음의 식으로 귀결된다(Zobell, 1943; Corapcioglu et al., 1991).

$$Q_g^{cm} \equiv [\mu_{max}/K_s] (n - \sigma_c) C_D C_c = \mu_5 (n - \sigma_c) C_D C_c; \quad (14)$$

$$Q_g^{cc} \equiv [\mu_{max}'/K_s'] \rho_c C_D \sigma_c = \mu_4 \rho_c C_D \sigma_c$$

부유 및 부착세균의 성질이 서로 같다고 가정하여(van Loosdrecht et al., 1990)  $\mu_4 = \mu_5 = \mu$  라고 하면 다음과 같이 된다.

$$Q_g^{cm} = \mu (n - \sigma_c) C_D C_c; \quad Q_g^{cc} = \mu \rho_c C_D \sigma_c \quad (15)$$

식 (15)는 액상의 오염물만 고려하고 있다. 입상과 고상의 오염물도 고려하면 식 (15)는

$$Q_g^{cm} = \mu \left( C_D + \frac{\rho_b \sigma_D}{n - \sigma_c} + \sigma_{cm} C_c \right) (n - \sigma_c) C_c; \quad (16)$$

$$Q_g^{cc} = \mu \left( C_D + \frac{\rho_b \sigma_D}{n - \sigma_c} + \frac{\sigma_c \rho_c \sigma_{cc}}{n - \sigma_c} \right) \rho_c \sigma_c$$

로 된다. 세균표면의 오염물을 섭취하여 세균이 성장하는 정도는 아주 작기때문에 이를 무시할 수 있다. 부유 및 부착 세균의 폐사율은 다음과 같이 1차 반응으로 묘사했다.

$$Q_d^{cm} = k_d(n - \alpha_c)C_c; \quad Q_d^{\infty} = k_d \rho_c \alpha_c \quad (17)$$

여기서  $k_d$ 는 세균의 폐사율 상수이다.

섭취되는 기질의 양과 생성되는 미생물의 양 사이에는 일정한 비율이 있으므로 기질 이용 속도는

$$R_f = \frac{\mu C_D}{Y} (n - \alpha_c) C_c + \frac{\mu C_D}{Y} \rho_c \alpha_c - \beta k_d (n - \alpha_c) C_c \quad (18)$$

$$R_f^* = \frac{\mu \rho_b \sigma_D}{Y} C_c + \frac{\mu \rho_b \sigma_D (n - \alpha_c)}{Y} \rho_c \alpha_c - \beta k_d \rho_c \alpha_c \quad (19)$$

$$R_{cm} = \frac{\mu \sigma_{cm} C_c}{Y} (n - \alpha_c) C_c; \quad R_{\alpha c} = \frac{\mu \rho_c \alpha_c \sigma_{\alpha c} / (n - \alpha_c)}{Y} \rho_c \alpha_c \quad (20)$$

로 나타낼 수 있다. 여기서  $Y$ 는 수확 계수이다. 식 (20)에서 알 수 있듯이 세균의 표면에 있는 오염물을 이용한 세균의 성장은 다른 항에 비해 훨씬 작으므로 무시될 수 있다.  $\beta$ 는 폐사한 세균의 오염물로의 전환계수이며, 본 연구에서는 다핵 방향성 탄수화물과 같은 유기물의 이송을 다루므로 이것은 무시한다. 그러면 식 (18)과 (19)는 다음식으로 압축된다.

$$R_f + R_f^* = \frac{\mu}{Y} (C_D + \frac{\rho_b \sigma_D}{n - \alpha_c}) [(n - \alpha_c) C_c + \rho_c \alpha_c] \quad (21)$$

#### 지배방정식의 무차원화

식 (3), (4), (15), 그리고 (17)을 식 (1)과 (2)에 대입하여 세균의 농도에 대한 1차원 지배 방정식을 구하면

$$\frac{\partial(\theta C_c)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [-D^* \frac{\partial}{\partial x} (\theta C_c) + q_w C_c] - K_1 \Gamma \theta C_c + K_2 \rho_c \alpha_c + \mu (C_D + \frac{\rho_b \sigma_D}{\theta}) \theta C_c - k_d \theta C_c \quad (22)$$

$$\frac{\partial(\rho_c \alpha_c)}{\partial t} = K_1 \Gamma \theta C_c - K_2 \rho_c \alpha_c + \mu (C_D + \frac{\rho_b \sigma_D}{\theta}) \rho_c \alpha_c - k_d \rho_c \alpha_c \quad (23)$$

로 되고 여기서  $\theta$ 는 순 공극율로 다음과 같이 정의된다.

$$\theta = n - \alpha_c \quad (24)$$

식 (9), (10), (12), (18), 그리고 (19)를 (11)에 대입하므로써 액상 오염물의 물질수지식을 구하면

$$\frac{\partial}{\partial t} [(K_3 \rho_b + \theta) C_D] = -\frac{\partial}{\partial x} [-D \frac{\partial}{\partial x} (\theta C_D) + q_w C_D] - K_a \theta \frac{C_c}{K_c} C_D - K_a \theta \frac{\alpha_c}{\alpha_{c, \max}} C_D + K_d \theta C_c \sigma_{cm} + K_d \rho_c \alpha_c \sigma_{\alpha c} - \frac{\mu}{Y} (C_D + \frac{\rho_b \sigma_D}{\theta}) (\theta C_c + \rho_c \alpha_c) \quad (25)$$

이 되고  $R_{\alpha c}$ 과  $R_{cm}$ 을 무시한 후, 식 (3), (9), 그리고 식 (10)을 (7)과 (8)에 대입하면

$$\frac{\partial(\theta \sigma_{cm} C_c)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \{ [-D^* \frac{\partial}{\partial x} (\theta C_c) + q_w C_c] \sigma_{cm} \}$$

$$+ K_a \theta \frac{C_c}{K_c} C_D - K_d \theta C_c \sigma_{cm} + K_2 \rho_c \alpha_c \sigma_{\alpha c} - K_1 \Gamma \theta C_c \sigma_{cm} \quad (26)$$

$$\frac{\partial(\sigma_{\alpha c} \rho_c \alpha_c)}{\partial t} = K_a \frac{\alpha_c}{\alpha_{c, \max}} \theta C_D - K_d \rho_c \alpha_c \sigma_{\alpha c} - K_2 \rho_c \alpha_c \sigma_{\alpha c} + K_1 \Gamma \theta C_c \sigma_{cm} \quad (27)$$

이 된다. 식 (22)-(27)은 6개의 미지수  $C_c, \alpha_c, \theta, C_D, \sigma_{cm}$  그리고  $\sigma_{\alpha c}$ 에 대한 6개의 완전한 지배 방정식으로 적절한 초기 및 경계 조건이 있으면 풀 수 있다. 모델 결과를 일반화하는 데는 무차원화가 유용하므로 다음의 변수들을 이용하여 지배방정식을 무차원화한다.

$$x^* = \frac{x}{L}; \quad t^* = \frac{t}{L/v}; \quad C_c^* = \frac{C_c}{C_{co}}; \quad C_D^* = \frac{C_D}{C_{Do}}; \quad \theta^* = \frac{\theta}{n};$$

$$K_3^* = \frac{K_3 \rho_b}{n}; \quad \alpha_c^* = \frac{\alpha_c \rho_c}{n C_{co}}; \quad \sigma_{cm}^* = \frac{\sigma_{cm} C_{co}}{C_{Do}}; \quad \sigma_{\alpha c}^* = \frac{\sigma_{\alpha c} C_{co}}{C_{Do}} \quad (28)$$

그러면, 식 (22)-(27)은 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial(\theta^* C_c^*)}{\partial t^*} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2(\theta^* C_c^*)}{\partial x^{*2}} - \frac{\partial(\theta^* C_c^*)}{\partial x^*} - (D_{a1} \Gamma + D_{ad}) \theta^* C_c^* + D_{a2} \alpha_c^* + D_{ag} (1 + \frac{K_3^*}{\theta^*}) C_D^* \theta^* C_c^* \quad (29)$$

$$\frac{\partial \alpha_c^*}{\partial t^*} = D_{a1} \Gamma \theta^* C_c^* - (D_{a2} + D_{ad}) \alpha_c^* + D_{ag} (1 + \frac{K_3^*}{\theta^*}) C_D^* \alpha_c^* \quad (30)$$

$$\theta^* = 1 - \frac{C_{co}}{\rho_c} \alpha_c^* \quad (31)$$

$$\frac{\partial}{\partial t^*} [(1 + \frac{K_3^*}{\theta^*}) \theta^* C_D^*] = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2(\theta^* C_D^*)}{\partial x^{*2}} - \frac{\partial(\theta^* C_D^*)}{\partial x^*} - D_{am} \theta^* C_c^* C_D^* - D_{ac} \theta^* \alpha_c^* C_D^* + D_{ar} (\theta^* C_c^* \sigma_{cm}^* + \alpha_c^* \sigma_{\alpha c}^*) - D_{as} (1 + \frac{K_3^*}{\theta^*}) C_D^* (\theta^* C_c^* + \alpha_c^*) \quad (32)$$

$$\frac{\partial(\theta^* C_c^* \sigma_{cm}^*)}{\partial t^*} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial \sigma_{cm}^*}{\partial x^*} \frac{\partial(\theta^* C_c^*)}{\partial x^*} + \frac{\sigma_{cm}^*}{Pe} \frac{\partial^2(\theta^* C_c^*)}{\partial x^{*2}} - \frac{\partial(\theta^* C_c^* \sigma_{cm}^*)}{\partial x^*} + D_{am} \theta^* C_c^* C_D^* - (D_{ar} + D_{a1} \Gamma) \theta^* C_c^* \sigma_{cm}^* + D_{a2} \alpha_c^* \sigma_{\alpha c}^* \quad (33)$$

$$\frac{\partial(\alpha_c^* \sigma_{\alpha c}^*)}{\partial t^*} = D_{ac} \theta^* \alpha_c^* C_D^* - (D_{ar} + D_{a2}) \alpha_c^* \sigma_{\alpha c}^* + D_{a1} \Gamma \theta^* C_c^* \sigma_{cm}^* \quad (34)$$

여기서  $Pe = vL/D$ 는 Peclet 수이고 세균과 오염물에 대해서 같다고 가정했다. 이러한 무차원화 과정에서, Jennings 와 Kirkner (1984)가 지적했듯이 거의 모든 변수들이 무차원 변수에 포함된다. 여기서는 주로 1차 Damkohler 수 이었는데,  $D_{a1} = LK_1/v$ ,  $D_{a2} = LK_2/v$ ,  $D_{ag} = L\mu C_{Do}/v$ ,  $D_{ad} = Lk_d/v$ ,  $D_{as} = L\mu C_{co}/(vY)$ ,  $D_{am} = LK_a C_{co}/(vK_c)$ ,  $D_{ac} = LK_a n C_{co}/(v\alpha_{c, \max} \rho_c)$ , 그리고  $D_{ar} = LK_d/v$  등이다. 이들 무차원 수들은 각 세균의 흡 입자 표

면에서의 부착 및 탈착계수, 세균의 성장과 폐사율, 오염물의 섭취율, 유동 및 부착 세균의 표면에서의 오염물의 흡착속도, 그리고 세균의 표면에서 오염물의 탈착속도와 물의 이동속도의 비를 나타낸다. 식 (6)과  $D_{am}$ 와  $D_{ac}$ 의 정의에서  $D_{am}/D_{ac}$ 이 일정하다는 것을 알 수 있다.

모델의 해

제안된 모델의 유한 시공간 실험에 대한 해를 구한다. 식(29)-(34)에 대한 해석해는 1 차원인 경우에도 거의 불가능하다. 그러나, 오염물이 없는 낮은 세균의 농도에 대한 의사 해석해는 다음과 같은 초기 및 경계 조건에서 가능하다(Corapcioglu and Haridas, 1985).

$$\theta^+ C_c^+ = 1 \quad @ x^+ = 0 \quad (35)$$

$$\frac{\partial(\theta^+ C_c^+)}{\partial x^+} = 0 \quad @ x^+ \rightarrow \infty \quad (36)$$

$$\theta^+ C_c^+ = \alpha_c^+ = 0 \quad @ t^+ = 0 \quad (37)$$

그들의 해는 다음과 같이 주어진다.

$$\theta^+ C_c^+ = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{Pe x^+}{2} - D_{ad} t^+\right) \cdot \int_0^{\frac{x^+}{2\sqrt{t^+/Pe}}} \left\{ \exp\left[-\xi^2 - \left(\frac{Pe x^+}{4\xi}\right)^2 - \frac{Pe x^+ D_{a1}}{4\xi^2} - D_{a2}\left(t^+ - \frac{pe x^+}{4\xi^2}\right)\right] \right. \\ \left. \cdot I_0\left[\sqrt{\frac{Pe x^+ D_{a1} D_{a2}\left(t^+ - \frac{Pe x^+ D_{a1}}{4\xi^2}\right)}{\xi^2}}\right] + (D_{a2} + D_{ad}) \exp\left[-(D_{a2} + D_{ad})\left(t^+ - \frac{Pe x^+}{4\xi^2}\right)\right] \right. \\ \left. \cdot \int_0^{\left(t^+ - \frac{Pe x^+}{4\xi^2}\right)} \exp\left[-(D_{a2} + D_{ad})\tau\right] I_0\left(\frac{\sqrt{Pe x^+ D_{a1} D_{a2} \tau}}{\xi^2}\right) d\tau \right\} d\xi \quad (38)$$

여기에서  $\xi$ 와  $\tau$ 는 적분 변수이고,  $I_0$ 는 1종 0차 Bessel 함수 값

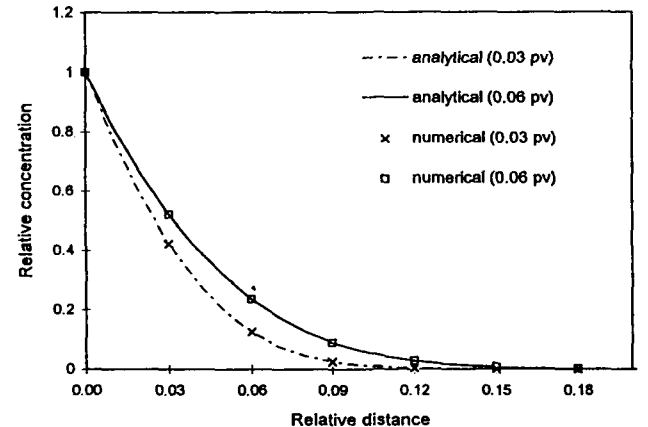


Figure 2. Comparison of numerical results with the analytical solution of Corapcioglu and Haridas (1985).

이다. 이 해석해와 식 (29)-(30)에 대한 수치해를 비교하므로써 수치해법을 검증할 수 있었다(Figure 2). 여기에 사용된 변수값들은  $Pe = 3.75$ ,  $D_{a1} = 100$ ,  $D_{a2} = 1$ ,  $D_{ag} = 0$ , 그리고  $D_{ad} = 0.017$  이었다.

다음 과정은 검증된 수치해법을 적용하여 식 (29)-(34)를 푸는 것이다. 여기에 적용된 초기 및 경계 조건은 다음과 같다.

$$C_c^+(x^+, 0) = C_D^+(x^+, 0) = 0; \quad \alpha_c^+(x^+, 0) = 0; \quad (39)$$

$$\alpha_{cm}^+(x^+, 0) = \alpha_{cc}^+(x^+, 0) = 0$$

$$C_c^+(0, t^+) - \frac{1}{Pe} \frac{\partial C_c^+}{\partial x^+}(0, t^+) = 1; \quad (40)$$

$$C_D^+(0, t^+) - \frac{1}{Pe} \frac{\partial C_D^+}{\partial x^+}(0, t^+) = 1$$

$$\alpha_{cm}^+(0, t^+) = 0 \quad (41)$$

$$\frac{\partial C_c^+}{\partial x^+}(1, t^+) = 0; \quad \frac{\partial C_D^+}{\partial x^+}(1, t^+) = 0 \quad (42)$$

각 시간 단계별로 식 (29)-(34)를 차례로 푼다(연속해법). 식 (29)와 (32)의 해법에는 implicit 유한 차분법이 사용되었고, 식 (30)과 (34)에는 Runge-Kutta 법이 사용되었다. 식 (33)의 해는 수치 해법에 고유한 수치 확산을 줄이기 위하여 MOC (Method of Characteristic)의 하나인 Lagrangian-Eulerian 법이 사용되었다. 식 (33)의 해에는 일정농도 경계 조건이 사용되었는데 식 (33)에는 확산이 없기 때문에 물질수지에 지장을 주지 않는다.

모델 결과 및 민감도 분석

본 연구에 사용된 모델 변수값들은 주로 Jenkins 와 Lion (1993)의 실험자료로부터 얻었고, Table 1에 나타내었다. 파과 곡선은 전체 오염물 농도, 즉  $C_{DTr}^+ = C_D^+ + C_c^+ \alpha_{cm}^+$ 에 대한 값이다. 세균의 부착율, 세균의 성장율, 그리고 오염물의 세균 표면에서의 흡착 및 탈착율 등 모델 변수들이 모델 거동에 끼치는 영향에

Table 3. Model parameters.

| Parameter         | Value                   |
|-------------------|-------------------------|
| n                 | 0.4                     |
| L                 | 5 cm                    |
| v                 | 0.003 cm/sec            |
| $\rho_c$          | $1.03 \times 10^6$ mg/L |
| $\rho_b$          | $1.6 \times 10^6$ mg/L  |
| $\alpha_{c, max}$ | 0.01                    |
| Pe                | 4                       |
| $C_{co}$          | 65 mg/L                 |
| $C_{DO}$          | 0.0748 mg/L             |
| $D_{a1}$          | 10                      |
| $D_{a2}$          | 1                       |
| $K_3^+$           | 33                      |
| $D_{an}$          | 7.22                    |
| $D_{ar}$          | 10                      |
| $D_{ad}$          | $0.5 \times 10^{-5}$    |
| $D_{ag}$          | $1.0 \times 10^{-9}$    |
| $D_{as}$          | 0.0261                  |

대해서 알아 보았다. 이 때 다른 변수들은 변화시키지 않고 Table 1 에 있는 값들을 사용했다. Figure 3a는 세균의 흡착율이 이 오염물의 파과곡선에 주는 영향을 나타내고 있는데, 여기서 세균의 성장율과 폐사율은 모두 0 이고, 세균과 오염물은 연속적으로 주입되었다. 그림에서 알 수 있듯이 세균의 부착율, 즉  $Da_1$ 이 감소할수록 오염물의 가속이송은 증가한다. 그러나, 계가 평형상태에 도달한 후에는 그 농도가 같아지는 것을 알 수 있다. 이 경향은, 세균의 부착율이 오염물의 액상 농도만의 파과곡선에 주는 영향을 나타내는 Figure 3b에서도 알 수 있는데,  $Da_1$ 이 감소할수록 액상의 오염물 농도가 감소함을 알 수 있다. 다시말하면, 이 감소할수록 입상, 즉  $Da_1$ 세균표면에 부착하여 이송되는 오염물의 양이 증가하며, 가속 이송 효과가 증가한다는 것이다. Figure 3b 에서 초기의 거꾸로된 농도 곡선은, 오염물의 이송속도가 세균보다 느릴 경우에 오염물이 주로 가속 이송에 의존해서 이송되는 현상을 나타낸 것이다.

Figure 4a와 b 는 오염물 파과곡선의 세균 성장율에 대한 민감도를 시간과 공간상에 그린 것이다. 오염물은 펄스방식 (9.2 pore volumes)으로 부하되었고 세균은 연속 주입되었다. 기대했던대로 세균의 성장율은 오염물의 이송에 큰 영향이 있음을 알 수 있다. 세균의 성장을 나타내는 Damkohler 수, 즉  $Da_g$ 가 0 부터  $1.0 \times 10^6$ 과  $2.0 \times 10^6$ 으로 증가함에 따라 오염물의 최대 농도는 0.339에서 0.127과 0.061로 감소했음을 알 수 있다(Figure

4a). 또한 오염물의 파과곡선이 세균의 성장율의 증가에 따라 앞 쪽으로 이동, 다시말하면 오염물의 이송이 가속되었다는 것을 알 수 있다. 이러한 경향은 Figure 4b에서도 볼 수 있다.

Figure 5 는 세균 표면에서의 오염물의 흡착 및 탈착속도가

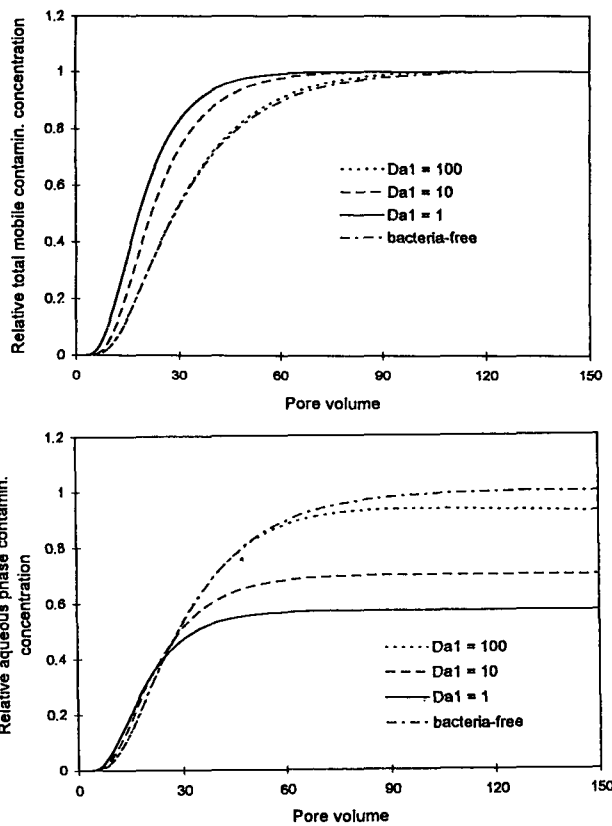


Figure 3. Sensitivity of total mobile(a) and aqueous(b) phase contaminant BTCs to the Damkohler number of bacterial deposition,  $Da_1$  with no bacterial growth/decay.

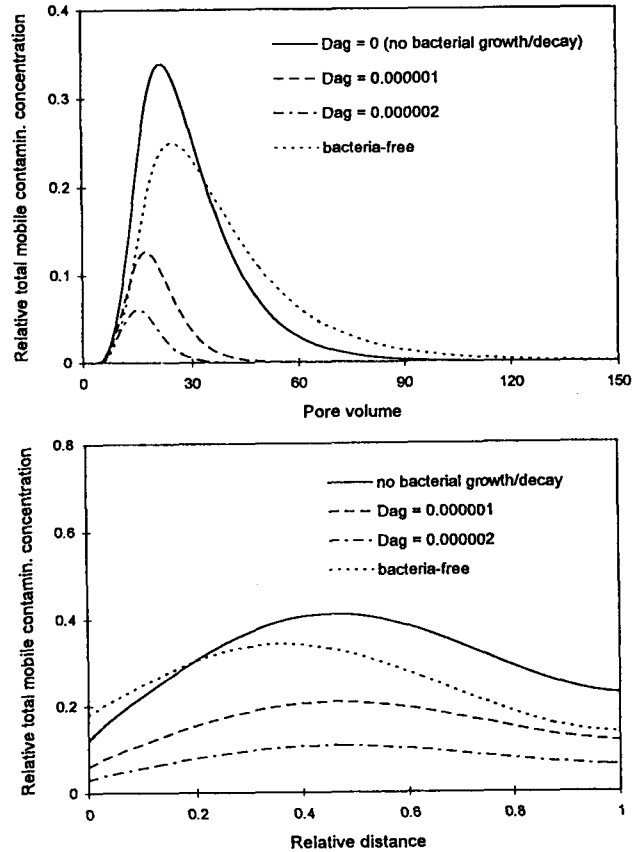


Figure 4. Sensitivity of temporal(a) and spatial(b) variations of total mobile contaminant concentrations to the Damkohler number of bacterial growth,  $Da_g$  at  $t+= 15$  pore volumes.

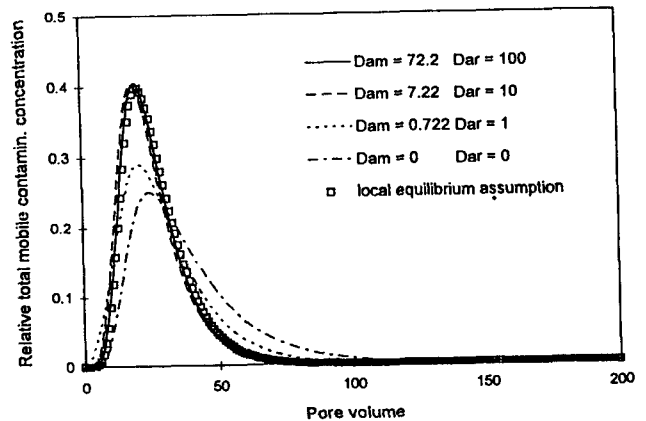


Figure 5. Sensitivity of total mobile contaminant BTC to the Damkohler numbers of contaminant adsorption and desorption on mobile bacteria,  $Dam$  and  $Dar$  ( $Dam/Dar = 10$ ) with no bacterial growth/decay and no bacterial deposition.

오염물의 파과곡선에 주는 영향을 나타낸다. 오염물은 펄스방식(9.2 pore volumes)으로 부하되었고 세균은 연속주입되었다. 여기서 오염물의 흡착속도/탈착속도의 비율은 10으로 고정되었다.  $D_{am}$ 이 0 부터 0.722와 72.2로 증가함에 따라 오염물의 최대농도를 주는 시간은 25에서 21및 20(pore volulmes)으로 감소하였고, 최대농도는 0.25에서 0.29와 0.4로 각각 증가했다. 이러한 경향은 세균표면에서 오염물의 부착및 탈착속도가 증가함에 따라 오염물의 이동성이 증가한다는 것을 나타내는 것이다. 그러나, 부착및 탈착속도가 증가할수록 그 민감도는 감소하며, 결국 국지 평형 모델로 수렴해간다. 여기서 국지 평형모델의 값은 Corapcioglu 와 Kim(1995)이 구한 값이다.

Figure 6 은 모델예측치와 Jenkins 와 Lion(1993)의 실험결과를 비교한 것이다. Jenkins 와 Lion(1993)은 세균이 있을 경우와 없을 경우에 다공매질에서 phenanthrene의 파과곡선을 구하여 세균에 의한 소수성 오염물의 가속이송을 연구하였다. 또한 그들은 등온 흡착실험을 통하여 세균 표면에서의 흡착능력을 측정했으며, 그 흡착및 탈착속도가 매우 빠르다고 가정하여 평형 분배 모델을 사용하였다. 평형 분배 계수는  $K_d^{cell} = 11.1 \times 10^{-3} \text{ L/mg of}$

cell carbon이다. 식 (25) 혹은 (26)을 Jenkins와 Lion(1993)의 실험조건에 대입하여

$$K_d^{cell} = \frac{\sigma_{cm}}{C_D} = \frac{K_a}{K_d} \frac{1}{K_c} \quad (43)$$

과

$$\frac{D_{am}}{D_{ar}} = \frac{K_a}{K_d} \frac{1}{K_c} C_{co} = K_d^{cell} C_{co} = 0.722 \quad (44)$$

를 얻는다. Figure 6에서 알 수 있듯이 평형 모델보다는  $D_{am} = 4.332$  와  $D_{ar} = 6$  의 계수값을 사용한 동역학적 모델이 실험 결과와 더 잘 일치한다는 것을 알 수 있으며, 본 모델이 실제현상을 예측할 수 있다는 것을 알 수 있다.

Figure 7은 주입 세균과 오염물의 농도비가 오염물의 파과곡선에 주는 영향을 나타낸다. 이 비율이 증가하면 오염물 파과곡선의 최대농도가 급격히 감소한다. 이로부터 오염된 지역의 생물학적 처리에는 가능한 높은 농도의 세균을 주입하는 것이 중요하다라는 것을 알 수 있다.

## 결 론

동역학적 관계식을 이용하여 오염물의 가속이송을 모델링하였다. Jenkins와 Lion(1993)의 실험결과를 이용하여 모델을 검증하였다. 본 연구의 결과로부터, 다른 상 간의 물질전이는 그 Damkohler 수가 10을 넘을 경우 국지 평형 가정을 도입할 수 있다는 것과 세균의 생장이 오염물의 농도저하에 매우 중요하다는 것, 그리고 주입 세균의 농도가 오염된 지역을 청소하는데 중요하다는 것 등을 알 수 있었다.

## 사 사

이 논문은 1995학년도 영남대학교 학술연구조성비에 의한것임.

## 참고문헌

- Baughman,G.L., and Paris,D.F., 1981, Microbial bio-concentration of organic pollutants from aquatic systems-A critical review, CRC Critical Rev. Microbio., January, p.205-228.
- Bell,J.P., and Tsezos,M., 1987, Removal of hazardous organic pollutants by biomass adsorption, J.Water Pollut. Control. Fed., 59, p.191-198.
- Bellin,C.A., and Rao, P.S.C.; 1993, Impact of bacterial biomass on contaminant sorption and transport in a subsurface soil, Appl. Environ. Microbiol., 59, p.1813-1820.
- Bitton,G., Lahav,N., and Henris,Y., 1974, Movement and retention of klebsiellaerogenes in soil columns, Plant and soil, 40, p. 373-380.
- Canton,J.H., van Esch, P.A.G.,Greve, P.A., and van Hellemond, A.B.A.M., 1977, Accumulation and elimination of alpha-hexachlorochlohexane(HCH) by the marine algae

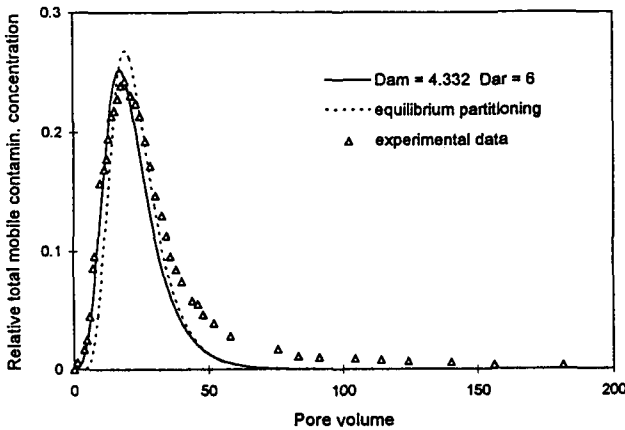


Figure 6. Comparison of model results with experimental data of Jenkins and Lion(1993).

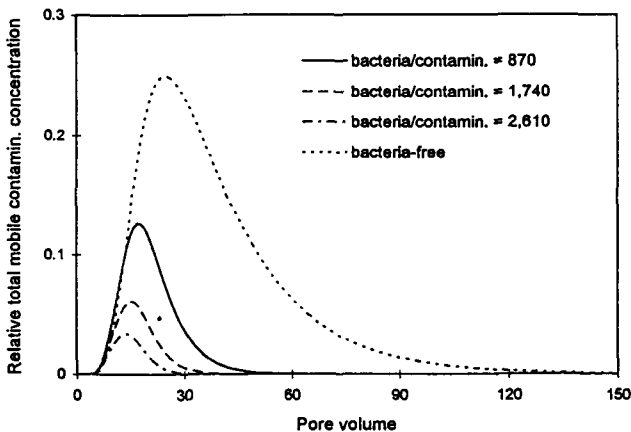


Figure 7. Effect of the ratio of influent bacterial concentration to influent contaminant concentration on contaminant BTC with  $D_{ag} = 1.0 \times 10^6$  and  $D_{ad} = 0.5 \times 10^6$ .

- Chlamidomanas and Dun alliella, *Water Res.*, 11, p.111-115.
- Corapcioglu, M.Y., and Haridas, A., 1984, Transport and fate of microorganisms in porous media: A theoretical investigation, *J. Hydrology*, 72, p.149-169.
- Corapcioglu, M.Y., and Haridas, A., 1985, Microbial Transport in soils and groundwater: A numerical model, *Adv. Water Resources*, 8, p.188-200.
- Corapcioglu, M.Y., Hossain, M.A., and Hossain, M.A., 1991, Methanogenic biotransformation of chlorinated hydrocarbons in groundwater, *J. Environ. Eng.*, 117, p.47-65.
- Corapcioglu, M.Y., and Jiang, S., 1993, Colloid-facilitated groundwater contaminant transport, *Water Resour. Res.*, 29, p. 2215-2226.
- Corapcioglu, M.Y., and Kim, S.H., 1995, Modeling facilitated contaminant transport by mobile bacteria, accepted for publication by *Water Resour. Res*
- de Marsily, G., 1986, *Quantitative Hydrogeology*, Academic Press, Inc., New York.
- Dickson, R.A., 1991, Problems with using existing transport models to describe microbial transport in porous media, in *Modeling the environmental fate of microorganisms* edited by Hurst, C.J., American Society for Microbiology, Washington D.C. Gannon, J.T., Tan, Y., Baveye, P., and Alexander, M., 1991, Effect of sodium chloride on transport of bacteria in a saturated aquifer material, *Appl. Environ. Microbiol.*, 57, p.2497-2501.
- Ghiorse, W.C., and Wilson, J.T., 1988, Microbial ecology of the terrestrial subsurface, *Adv. Appl. Microbiol.*, 33, p.172-197.
- Harden, V.P., and Harris, J.O., 1953, The isoelectric point of bacterial cells, *J. Bacteriol.*, 65, p.198-202.
- Harvey, R.W., George, L.H., Smith, R.L., and LeBlanc, 1989, Transport of microspheres and indigenous bacteria through a sandy aquifer: Results of natural and forced-gradient tracer experiments, *Environ. Sci. Technol.* 23, p.51-56.
- Hornberger, G.M., Mills, A.L., and Herman, J.S., 1992, Bacterial transport in porous media: Evaluation of a model using laboratory observations, *Water Resour. Res.*, 28, p.915-938.
- Jenkins, M.B., and Lion, L.W., 1993, Mobile bacteria and transport of polynuclear aromatic hydrocarbons in porous media, *Appl. Environ. Microbiol.*, 59, p.3306-3313.
- Jennings, A.A., and Kirkner, D.J., 1984, Instantaneous equilibrium approximation analysis, *J. Hydr. Engrg., ASCE*, 110, p.1700-1717.
- Jiang, S., and Corapcioglu, M.Y., 1993, A hybrid equilibrium model of solute transport in porous medium in the presence of colloids, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 73, p. 275-286.
- Lindqvist, R., and Enfield, C.G., 1992, Biosorption of dichlorodiphenyl trichloroethane and hexachlorobenzene in ground water and its implications for facilitated transport, *Appl. Environ. Microbiol.*, 58, p.2211-2218.
- Marshall, K.C., 1986, Adsorption and adhesion processes in microbial growth at interfaces, *Advances in Colloid and Interfaces Science*, 25, p.59-86.
- McCarthy, J.F., and Zachara, J.M., 1989, Subsurface transport of contaminants, *Environ. Sci. Technol.*, 23, p.496-502.
- Miller, C.T., and Weber Jr., W.J., 1984, Modeling of organic contaminant partitioning in groundwater systems, *Ground Water*, 22, p.584-592.
- O'Melia, C.R., 1985, Particles, pretreatment and performance in water filtration, *J. Environ. Eng.*, 111, p.874-890.
- Paris, D.F., and Lewis, D.L., 1976, Accumulation of methoxychlor by microorganisms isolated from aqueous systems, *Bull. Environ. Contam. Toxicol.*, 15, p.24-32.
- Tan, Y., Gannon, J.T., Baveye, P., and Alexander, M., 1994, Transport of bacteria in an aquifer sand: Experiments and model simulations, *Water Resour. Res.*, 30, p.3243-3252.
- Tsezos, M., and Bell, J.P., 1989, Comparison of the biosorption and desorption of hazardous organic pollutants by live and dead biomass, *Water Res.*, 23, p.561-568.
- van Loosdrecht, M.C.M., Lyklema, J., Norde, W., and Zehnder, A.J. B., 1990, Influence of interfaces on microbial activity, *Microbiological Reviews*, 54, p.75-87.
- Vinten, A.J.A., Yaron, B., and Nye, P.H., 1983, Vertical transport of pesticides into soil when adsorbed on suspended particles, *J. Agric. Food Chem.*, 31, p.662-664.
- Zobell, C.E., 1943, The effect of solid surfaces upon bacterial activity, *J. Bacteriol.*, 46, p.39-59.