

# 비균질 다공성 매질에서 선형 흡착 용질의 공간적 거동에 대한 수치적 연구

## A Numerical Study on Spatial Behavior of Linear Absorbing Solute in Heterogeneous Porous Media

정우창\* · 이치현\*\* · 송재우\*\*\*

Jeong, Woo Chang · Lee, Chi Hun · Song, Jai Woo

### Abstract

This paper presents a numerical study of the spatial behavior of a linear absorbing solute in a heterogeneous porous medium. The spatially correlated log-normal hydraulic conductivity field is generated in a given two-dimensional domain by using the geostatistical method (Turning Bands algorithm). The velocity vector field is calculated by applying the two-dimensional saturated groundwater flow equation to the Galerkin finite element method. The simulation of solute transport is carried out by using the random walk particle tracking model with CD(constant displacement) scheme in which the time interval is automatically adjusted. In this study, the spatial behavior of a solute is analyzed by the longitudinal center-of-mass displacement, longitudinal spatial spread moment and longitudinal plume skewness.

**Keywords** : Heterogeneous porous medium, Geostatistical method, Random walk particle tracking method, Constant displacement scheme

### 요 지

비균질 다공성 매질을 통과하는 선형 흡착 용질의 공간적 거동에 대한 특성이 수치적 기법을 통해 분석되었다. 공간적으로 서로 상관된 투수계수의 대수적 분포를 지구통계학적 기법인 TBM(Turning Bands Method)을 사용하여 2차원 공간 내에 발생시켰으며, 이를 통한 지하수 흐름의 수리수두분포와 유속벡터장은 정상상태의 포화된 2차원 지하수 흐름 방정식에 Galerkin 유한요소법을 적용하여 계산하였다. 또한, 용질이동에 대한 수치모의는 시간간격을 자동으로 보정해주는 CD(constant displacement)기법이 포함된 난보모형(Random Walk Particle Tracking Model, RWPTM)을 통해 수행되었다. 본 연구에서 용질의 공간적 거동의 특성은 종방향 질량중심 이동거리, 종방향 공간 퍼짐 모멘트 그리고 용질분포의 종방향 왜곡계수를 통해 분석되었다.

**주요어** : 비균질 다공성 매질, 지구통계학, 유한요소법, 난보(亂步)모형, CD 기법

\* 정희원 · 홍익대학교 토목공학과 겸임교수

\*\* 홍익대학교 방재연구센터 연구원

\*\*\* 홍익대학교 공과대학 토목공학과 교수

## 1. 서론

최근 지표수자원의 부족과 오염으로 인한 대체 수자원으로써 지하수의 중요성은 날로 증대되고 있는 실정이다. 그러나 유해폐기물 매립장을 비롯하여 농약살포, 지하에 매설된 유류 탱크 및 각종 사고로부터 발생하는 지하수 오염은 심각한 문제로 대두되고 있다. 한번 오염된 지하수는 그 영향이 지표수와는 비교가 되지 않을 정도로 장기적이기 때문에 지하수 보호 차원에서 오염물질의 이동경로를 파악하는 것은 중요하다.

일반적으로 수착(sorption)은 다공성 매질을 구성하는 입자의 표면에 화학물의 물리적 그리고 화학적 흡착(adsorption)과 탈착(desorption)을 포함하며, 통기대(vadose zone)와 지하 대수층을 통한 많은 유해 물질의 이동을 조절하는 주요 인자이다. 본 연구에서는 물리적 그리고 화학적으로 비균질인 다공성 매질을 통과하는 선형흡착용질의 공간적 거동특성을 수치적 기법을 이용하여 분석하였다. 공극수로부터 매질의 입자까지 흡착에 의한 용질의 화학적인 이동은 물리적인 이동에 비해 매우 빠르며, 가역적이고 평형과 선형 isotherm 조건으로 가정하였다.

흡착에 의한 용질의 이동을 수학적으로 묘사하기 위해 사용되는 이송-확산-흡착 방정식에는 시간상과 공간상으로 변화되는 물리적(예를 들면, 투수계수) 그리고 화학적(예를 들면, 분배계수) 매개변수를 포함한다. 자연상태에 있는 다공성 매질에 대한 이러한 매개변수의 무작위적인 공간적 변동성(random spatial variability)을 다루기 위해 추계학적인 방법이 많은 연구자들 사이에서 사용되고 있다(Tompson 등, 1989; Dagan, 1986; Woodbury와 Sudicky, 1992; Tompson과 Gelhar, 1990; Abulaban과 Nieber, 2000; Abulaban 등, 1998). 지하수 흐름과 흡착용질의 이동에 대한 추계학적 방법에서 투수계수와 분배계수는 확률장(random field)에 해당되는 공간상에서의 확률함수(random function)가 되며, 이러한 확률함수는 통계학적 모멘트(즉, 평균과 분산)에 의해 특성지어질 수 있다. 본 연구에서는 공간상에서 변동하는 투수계수와 분배계수를 지구통계학적인 방법을 통해 고려된 2차원 영역 내에 발생시켰으며, 두 매개변수의 공간적 상관관계는 지수형 공분산 함수의 특성을 갖는다고 가정하였다.

본 연구에서는 2차원 공간 내에 무작위적으로 분포된 투

수계수와 분배계수를 포함하는 비균질 다공성 매질을 통과하는 선형흡착용질의 공간적 거동특성 알아보기 위해 먼저 2차원의 포화된 지하수 흐름방정식에 Galerkin 유한요소법을 적용하여 정상상태에서의 속도벡터장을 계산하였다. 또한 선형흡착용질의 이동에 대한 수치모의는 각각의 요소에서 계산된 속도벡터를 통해 시간간격을 자동으로 보정해주는 CD(contant displacement)기법이 포함된 난보모형을 이용하였다(Wen과 Kung, 1996). 이 기법은 비균질 다공성 매질을 이동하는 용질의 거동을 수치모의하는데 있어 모든 요소에서 동일한 시간간격을 이용하는 전통적인 CT(Constant Time)기법보다 계산상의 효율이 높은 것으로 알려져 있다(Wen과 Kung, 1996). 본 연구에서 선형흡착용질의 공간적 거동특성에 대한 분석은 종방향 질량중심 이동거리(longitudinal center-of-mass displacement), 종방향 공간 퍼짐 모멘트(longitudinal spatial spread mement) 그리고 용질분포의 종방향 왜곡계수(longitudinal plume skewness)를 통해 수행되었다.

## 2. 이송-확산-흡착 방정식

포화된 2차원 다공성 매질 내에서의 흡착용질의 이동은 식 (1)과 같은 이송-확산-흡착 방정식에 의해 묘사될 수 있다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C) + \frac{\rho}{\theta} \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

여기서,  $C$  ( $ML^{-3}$ )는 용액상태에서의 농도,  $S$  ( $M/M$ )는 토양의 질량당 용질의 질량으로 표현되는 흡착된 상태에서의 농도,  $\mathbf{v}$  ( $LT^{-1}$ )는 국부유속벡터,  $\rho$  ( $ML^{-3}$ )는 다공성 매질의 건조체적밀도,  $\theta$ 는 공극율 ( $L^3/L^3$ ),  $t$  ( $T$ )는 시간 그리고  $\mathbf{D}$  ( $L^2T^{-1}$ )는 기계적 확산과 분자확산을 포함하는 국부적인 동수역학적 확산계수이며, 각각 다음과 같이 표현된다.

$$\mathbf{D} = (\alpha_T V + D_m) \mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}}{V} \quad (2)$$

여기서,  $D_m$  ( $L^2T^{-1}$ )은 분자확산계수이며, 일반적으로 현장규모에서의 용질이동에 대해서는 무시된다.  $\alpha_L$ 과  $\alpha_T$  ( $L$ )는 각각 종방향과 횡방향 확산도이며,  $\mathbf{I}$ 는 단위벡

터,  $\mathbf{v}\mathbf{v}$ 는 속도벡터의 diadic 그리고  $V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2}$ 이다.

$\nabla^2:(\mathbf{D}C) = \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C) - (\nabla C) \cdot (\nabla \cdot \mathbf{D})$ 인 항등관계를 이용하고 재정리하면 식 (1)은 다음과 같이 표현된다.

$$-\frac{\partial}{\partial t} \left[ C \left( 1 + \frac{\rho}{\Theta} \frac{S}{C} \right) \right] + \nabla \cdot [C(\mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{D})] - \nabla^2: (\mathbf{D}C) = 0 \quad (3)$$

식 (3)에서  $\left( 1 + \frac{\rho}{\Theta} \frac{S}{C} \right)$ 는 농도와 공간에 따라 변화되는 지체계수(retardation coefficient)  $R(C, \mathbf{x})$ 이다. 식 (3)에서 시간미분항의  $C \left( 1 + \frac{\rho}{\Theta} \frac{S}{C} \right)$ 는 흡착과 용해된 용질의 농도를 합한 총 용질농도,  $C_T = R(C, \mathbf{x})C$ 이며, 총 용질농도의 항으로 표현하면 다음과 같다.

$$-\frac{\partial C_T}{\partial t} + \nabla \cdot [C_T(\mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{D})/R] - \nabla^2:(\mathbf{D}C_T/R) = 0 \quad (4)$$

흡착된 상태에서의 농도  $S$ 와 용액상태의 농도  $C$  사이의 국부적인 평형조건을 묘사하기 위해 식 (5)로 표현되는 Freundlich isotherm이 사용되었다.

$$S = K_d(x, y)C^n \quad (5)$$

여기서,  $K_d(x, y)$  [ $L^3M^{-1}$ ]는 흡착능에 관련된 공간상에서 변화하는 분배계수(distribution coefficient)이며,  $n$ 은 흡착강도이다. 식 (5)를 이용하여 지체계수  $R$ 을  $C$ 의 함수로 표현하면 다음과 같다.

$$R(C, x, y) = 1 + \frac{\rho K_d(x, y)}{\Theta} C^{n-1} \quad (6)$$

식 (6)에서  $n=1$ 일 때 선형 Freundlich isotherm에 해당되며, 그에 따른 지체계수  $R$ 은 다음과 같다.

$$R(C, x, y) = 1 + \frac{\rho K_d(x, y)}{\Theta} \quad (7)$$

### 3. 난보모형(Random Walk Particle Tracking Model)

일반적으로 이송-확산-흡착 방정식을 유한차분법 또는 유한요소법과 같은 전통적인 수치기법을 이용하여 풀 때 농도의 급격한 공간적 그리고 시간적 변화가 있는 지점에서 수치적 분산(numerical dispersion)과 같은 문제가 발생된다. 이것은 이송-확산-흡착 방정식의 이중적 특성(즉, 식 (1)에서 확산항을 제거하면 쌍곡선형 방정식 그리고 이송항을 제거하면 포물선형 방정식)에 기인되는 것으로 알려져 있다. 수치적 분산을 감소시키기 위해서는 공간적 그리고 시간적 간격을 될 수 있는 한 작은 Péclet 수를 갖도록 조밀하게 할 필요가 있으나 이 경우 상당한 계산량이 요구된다. 이러한 전통적인 기법에 대한 대안으로써 난보모형이 사용될 수 있다. 이 기법에서 용질의 분포는 공간과 시간에 따라 변화하는 국부유속에 따라 이동하는 많은 수의 입자들로 표현된다. 다공성 매질의 국부적인 분산도(dispersivity)에 비례하는 무작위 성분은 비균질성에 의해 발생하는 브라운 운동과 같은 거동을 고려하기 위해 이송에 의한 입자의 이동에 더해진다. 이 기법은 정확성과 효율성면에서 전통적인 유한차분법과 유한요소법보다 일반적으로 우수한 것으로 알려져 있다(Kinzelbach, 1986; Tompson, 1993). 그러나 난보모형의 단점으로는 사용된 입자의 수가 너무 적을 경우 용질 분포의 전방과 후방에서 폭 넓은 진동이 발생된다는 것이다.

난보모형의 수학적인 토대는 이송-확산 방정식과 Fokker-Planck 방정식 사이의 유사성이다(Kinzelbach, 1986). 확률장에서 입자의 이동은 비선형 Langevin 방정식에 의해 묘사될 수 있다(Tompson과 Gelhar, 1990).

$$\frac{d\mathbf{X}_p}{dt} = \mathbf{A}(\mathbf{X}_p(t), t) + \mathbf{B}(\mathbf{X}_p(t), t) \cdot \boldsymbol{\xi}(t) \quad (8)$$

여기서,  $\mathbf{X}_p(t)$ 는 시간  $t$ 에서 입자의 위치벡터,  $\mathbf{A}(\mathbf{X}_p(t), t)$ 는 공간과 시간에 대한 기지의 함수이며,  $\mathbf{X}_p$ 를 변화시키기 위한 driving force를 나타내는데 사

용된다. 그밖에  $B(\mathbf{X}_p(t), t)$ 는  $A(\mathbf{X}_p(t), t)$ 와 함께 random force를 결합하는 시간과 공간에 대한 기지 함수이며, 벡터  $\xi(t)$ 는 random force이다. 시간에 대해 식 (8)을 적분하면 다음과 같다.

$$\Delta \mathbf{X}_p = \mathbf{A}(\mathbf{X}_p(t))\Delta t + \mathbf{B}(\mathbf{X}_p(t), t) \cdot \xi(t)\Delta t \quad (9)$$

많은 수의 입자들이 초기시간  $t_0$ 에서 초기위치벡터  $\mathbf{X}_{p0}$ 로부터 독립적으로 이동하기 시작한다면 시간  $t$  이후에 입자들은 위치벡터  $\mathbf{X}_{pt}$  주위에 분포될 것이며, 이러한 입자들의 빈도분포를  $f(\mathbf{X}_{pt}/\mathbf{X}_{p0}, t_0)$ 로 표현할 수 있다. 입자들의 이러한 분포들은 다음과 같은 Fokker-Planck 방정식에 의해 묘사될 수 있다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{A}f) - \frac{1}{2} \nabla^2 : (\mathbf{B}\mathbf{B}^T f) = 0 \quad (10)$$

이송-확산-흡착 방정식인 식 (1)에서 흡착항을 제거하고 벡터형식으로 표현하면 다음과 같다.

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}C_T) - \nabla^2 : (\mathbf{D}C_T) = 0 \quad (11)$$

식 (10)과 (11)을 비교하면 이송-확산 방정식과 Fokker-Planck 방정식이 유사하다는 것을 알 수 있다. 즉,  $\mathbf{A} = \mathbf{v}$ ,  $\mathbf{B}\mathbf{B}^T = 2\mathbf{D}$  그리고  $f = C$ 이며, 이를 식 (9)에 대입하면 다음과 같다.

$$\mathbf{X}_p(t+\Delta t) = \mathbf{X}_p(t) + \mathbf{v}\Delta t + \sqrt{2\mathbf{D}} \cdot \mathbf{W}(t) \quad (12)$$

식 (12)에서  $\mathbf{W}(t)$ 는 random 성분을 포함하는 벡터이며, 중심값 이론(central limit theorem)에 따라 0의 평균과 1의 분산을 가진 통계학적으로 독립인 정규분포의 random 벡터  $\mathbf{Z}$ 를 이용하는 것으로 충분하다. 따라서  $\mathbf{W}(t)$ 는  $\mathbf{Z}\sqrt{\Delta t}$ 이며, 결과적으로 식 (12)는 다음과 같이 표현된다.

$$\mathbf{X}_p(t+\Delta t) = \mathbf{X}_p(t) + \mathbf{v}\Delta t + \mathbf{Z} \cdot \sqrt{2\mathbf{D}\Delta t} \quad (13)$$

2차원 비균질 다공성 매질에서의 용질이동에 대한 문제에 대해 식 (13)은 다음과 같다(Kinzelbach, 1988).

$$x_p(t+\Delta t) = x_p(t) + v_x' \Delta t + Z_L \sqrt{2\alpha_L V \Delta t} \frac{v_x}{V} - Z_T \sqrt{\alpha_T V \Delta t} \frac{v_y}{V} \quad (14)$$

$$y_p(t+\Delta t) = y_p(t) + v_y' \Delta t + Z_L \sqrt{2\alpha_L V \Delta t} \frac{v_y}{V} + Z_T \sqrt{\alpha_T V \Delta t} \frac{v_x}{V} \quad (15)$$

여기서,  $V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2}$  그리고  $v_x'$ 와  $v_y'$ 는 각각 이송과 확산에 의해 이동되는  $x$ 와  $y$  방향으로의 입자의 속도이며 다음과 같다.

$$v_x' = v_x + \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{xy}}{\partial y} \quad (16)$$

$$v_y' = v_y + \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} \quad (17)$$

식 (14)와 (15)를 이용하는 전통적인 방법에서는 일정한 시간간격  $\Delta t$ 를 사용하는 CT 기법을 사용한다. 그러나 비균질 다공성 매질의 경우 투수계수의 공간적 변동으로 인해 균일하지 않은 지하수 유속분포가 발생된다. 만약 투수계수의 변동성이 매우 크다면 지하수 유속은 광범위한 값들로 분포될 것이며,  $\Delta t$ 의 값은 높은 유속값에 근거하여 선택돼야 한다(Uffink, 1985). 따라서 선택된  $\Delta t$ 의 값은 높은 유속값들이 존재하는 지역에서 정확한 결과를 얻기 위해서는 작을 필요가 있다. 그러나 만약 동일하게 작은  $\Delta t$ 의 값이 사용되었을 때, 낮은 유속값들을 포함하는 지역에서 입자들은 느리게 이동할 것이며, 주어진 검사지점에 도달하기 위해서는 매우 긴 시간이 소요될 것이다. 보다 정확한 결과를 얻기 위해 많은 수의 입자들을 사용할 경우 이러한 문제는 계산상 상당한 비용을 유발시킨다. 본 연구에서는 Wen과 Kung(1996)에 의해 제안된 CD 기법을 이용하였다. CD기법은 비균질 매질을 이동하는 각각의 입자에 대해 사용된 시간간격은 입자의 현재 위치에서 유속값에 따라 자동으로 보정되며, 식 (18)에서처럼 각각의 입자에 일정한 이동거리  $\Delta s$ 를 지정해줌으로써 유속이 큰 영역에 위치한 입자에는 짧은 시간간격이 할당되며, 유속이 작은 영역에 위치한 입자에는 큰 시간간격이 할당되게 된다.

$$\Delta t = \frac{\Delta s}{v'}, \quad v' = \sqrt{v_x'^2 + v_y'^2} \quad (18)$$

결과적으로 지하수 유속이 크고 작은 지역에 있는 입자들 모두가 비슷한 거리를 이동하게 되며 거의 동일한 용질 이동단계에 의해 검사지점에 도달된다(Wen과 Kung, 1996). 이것은 CT기법에 비해 시간적으로 상당히 지체되는 입자의 이동문제를 해결할 수 있으며, 이로 인해 계산시간을 크게 감소시킨다. CD기법에서 각각의 개별적인 입자의 이동은 독립적으로 이루어지며, 이동시간과 농도는 계산과정에서 각각의 입자에 대해 기록된다. CD기법으로부터의 용질이동에 대한 결과는 도달시간, 도달농도 그리고 검사영역에서의 도달위치로 표현된다.

#### 4. 수치모의실험

본 수치모의에서 고려된 2차원 영역은 그림 1과 같이 크기가 200 m×20 m이며, 이를 1 m×1 m 크기를 가지는 4000개의 정사각형 요소와 4221개의 절점으로 분할하였다. 적용된 경계조건으로 좌·우 경계에 각각 1.0 m와 0.0 m의 수리수두(hydraulic head)값을 적용하였다. 또한 상부와 하부경계를 통한 흐름은 없다고 가정하였다. 지하수 흐름에 대해 정상상태의 포화된 2차원 지하수 흐름 방정식에 Galerkin 유한요소법을 적용을 통해 각각의 절점에서 수리수두분포를 계산하였으며, 이를 통해 각각의 요소에서 속도벡터를 계산하였다(Istok, 1989). 용질입자는 경계를 통한 이탈을 피하기 위해 x 방향으로 5.0 m 그리고 y 방향으로 10.0 m 지점을 선택하였으며, 이 지점 주위의 4개 요소에 50000개의 용질입자를 균등하게 분포시켰다. 사용된 유효 공극율과 매질의 건조체적밀도는 각각 0.25와 1.37 kg/m<sup>3</sup>이다.

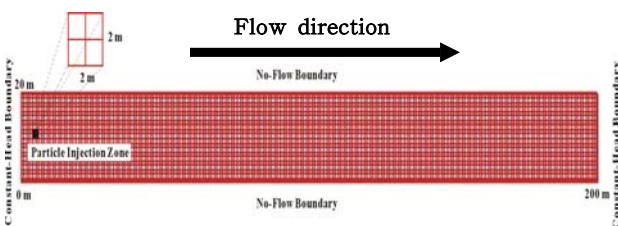


그림 1. 2차원 수치모의 영역

본 연구에서 고려된 영역내에 공간상으로 변화하는 투수계수 ( $K$ )와 분배계수 ( $K_d$ )의 발생은 각각  $Y(x, y) = \ln[K(x, y)]$   $W(x, y) = \ln[K_d(x, y)]$ 인 대수 정규분포로 가정하였으며,  $Y(x, y)$ 와  $W(x, y)$ 의 공간적 상관성을 묘사하기 위해 식 (19)와 같이 표현되는 등방성의 지수적 공분산 함수가 사용되었다(Dagan, 1989; Bosma 등, 1993).

$$C_Y(\mathbf{h}) = \sigma_Y^2 \exp\left(-\frac{|\mathbf{h}|}{l_Y}\right),$$

$$C_W(\mathbf{h}) = \sigma_W^2 \exp\left(-\frac{|\mathbf{h}|}{l_W}\right) \quad (19)$$

여기서,  $\mathbf{h}$  (L)는 영역내 두 점 사이의 거리벡터이며,  $l_Y$ 와  $l_W$  (L)는 각각  $Y(x, y)$ 와  $W(x, y)$ 의 공간적 상관길이를 나타낸다. 따라서 식 (19)는 거리  $|\mathbf{h}|$  만큼 떨어진 두 개의  $Y$ 값 사이의 공간적 상관정도를 의미한다. 공간적으로 상관된 투수계수와 분배계수의 무작위적 분포를 발생하기 위하여 지구통계학적 기법이 적용되었으며, 사용된 알고리즘은 2차원 또는 3차원 문제를 1차원 문제로 변환시킴으로써 연산효율이 높은 Turning Bands 알고리즘이다(Matheron, 1973; Langtuejoul, 1994; Tompson 등, 1989).

투수계수와 분배계수 사이의 상관관계를 묘사하기 위해 다음과 같은 식을 이용하였다(Bosma 등, 1993).

$$K_d(x, y) = \langle K_d^G \rangle [\exp(Y(x, y))]^\beta \quad (20)$$

여기서,  $\langle K_d^G \rangle$ 는 Freundlich 분배계수의 기하학적 평균이며,  $\beta > 0$ 이면, 완전 정상관(perfect positive correlation)을 나타내며,  $\beta < 0$ 이면, 완전 역상관(perfect negative correlation)을 나타낸다(Abulaban 등, 2000).

본 연구에서는 투수계수와 분배계수 사이에 역상관 관계가 있으며, 이러한 관계는 용질의 이동속도에 영향을 미친다고 가정하였다. 용질의 이동속도는 지체계수에 의해 변화되는 지하수의 유속에 해당된다. 투수계수가 높은 지역에서의 지하수 유속은 크나 역상관 관계에 의해 분배계수

는 작으며, 그밖에 지체효과도 작아진다. 따라서, 용질의 이동속도는 지하수의 유속과 큰 차이가 없다. 반대로 투수 계수가 낮은 지역에서의 분배계수는 크며 그에 따라 지체 효과도 커진다. 이는 지하수 유속보다 상당히 작은 지체된 용질의 이동속도를 유발시킨다.

본 연구에서 공간적 상관길이, 화학적 비균질성 그리고 물리적 비균질성에 의한 용질의 이동특성을 종방향 질량중심 이동(longitudinal center-of-mass displacement,  $X_1$ ), 종방향 공간 퍼짐 모멘트(longitudinal spatial spread moment,  $X_{11}$ ), 용질분포의 종방향 왜곡계수(longitudinal coefficient of plume skewness,  $S_k$ ) 및 용질의 농도분포를 이용하여 분석하였다.

$$X_1(t) = \frac{\theta}{M(t)} \sum_{j=1}^{N_e} x_j C_j(t) A_j \quad (21)$$

$$X_{11}(t) = \frac{\theta}{M(t)} \sum_{j=1}^{N_e} (x_j - X_1(t))^2 C_j(t) A_j \quad (22)$$

$$S_k(t) = \frac{1}{(X_{11})^{3/2}} \left[ \frac{\theta}{M(t)} \sum_{j=1}^{N_e} (x_j - X_1(t))^3 C_j(t) A_j \right] \quad (23)$$

여기서,  $N_e$ 는 요소의 수,  $C_j(t)$ 는 요소  $j$ 에서 흡착되지 않은 액체상태인 용질의 농도,  $\theta$ 는 공극율,  $A_j (= \Delta x \Delta y)$ 는 요소  $j$ 의 면적 그리고  $M(t)$ 는 액체상태인 용질의 총질량을 나타내며, 다음과 같이 표현된다.

$$M(t) = \theta \sum_{j=1}^{N_e} C_j A_j \quad (24)$$

식 (24)에서 요소  $j$ 에 존재하는 액체상태인 용질의 농도  $C_j$ 는 다음과 같은 질량보존식에 의해 계산된다 (Abulaban 등, 1998).

$$M_j = (\theta C_j + \rho C_j^m) A_j \quad (25)$$

여기서,  $M_j$ 는 요소  $j$  내에 존재하는 모든 입자의 각각에 대한 질량의 합 ( $N_j m_p$ )인 용질의 총량이며,  $N_j$ 는 입자의 수 그리고  $m_p$ 는 개별적인 입자의 질량이다. 선형

isotherm( $n=1.0$ )에 대해 식 (25)은 선형이며, 식 (7)의 지체계수에 의해 나누어진 용질의 총량으로서  $C_j$ 를 직접 계산할 수 있다.

#### 4.1 공간적 상관길이(spatial correlation length)의 영향

식 (19)의 지수적 공분산 함수에서 투수계수에 대한 흐름의 연직방향으로의 상관길이  $l_Y$ 의 값에 따른 용질의 공간적 거동에 대한 특성을 분석하였다. 본 수치모의실험에서 사용된  $l_Y$ 의 값은 5.0 m와 15.0 m이며, 두 경우 모두  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값을 3.0으로 가정하였다. 그밖에  $\beta$ 의 값은 -0.5 그리고  $\langle Y \rangle$ 와  $\sigma_Y^2$ 를 각각 0.0과 0.04로 하였다.

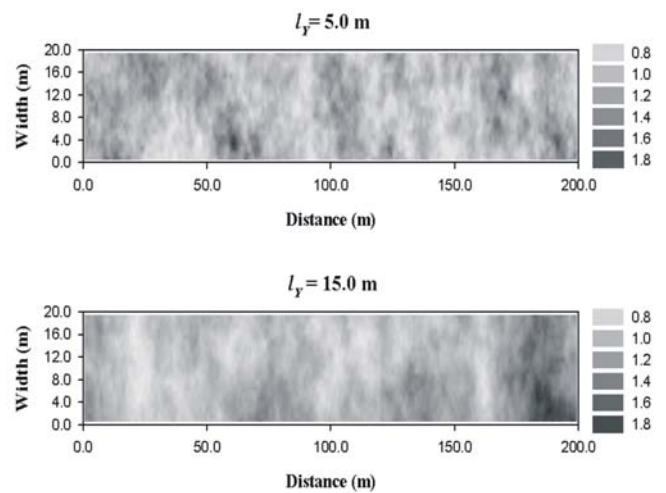


그림 2. 공간적 상관길이에 따른 투수계수의 분포

그림 2는 상관길이에 따른 투수계수의 분포를 나타낸 것이며,  $l_Y=15.0 m$ 인 경우의 투수계수 분포가  $l_Y=5.0 m$ 인 경우보다 공간적으로 더욱 상관되어 있음을 알 수 있다. 그림 3은 공간적 상관길이에 대한 종방향 질량중심 이동거리의 시간에 따른 변화를 비교한 것이며, 시간에 따라 두 경우 모두 거의 선형으로 증가하는 양상을 볼 수 있다. 또한  $l_Y=15.0 m$ 의 경우가  $l_Y=5.0 m$ 의 경우보다 질량중심이 더욱 많이 이동하며, 이러한 차이는 시간에 따라 점차적으로 커진다. 따라서 공간적 상관길이가 큰 투수계수의 분포가 용질의 이동에 보다 원활한 경로를 제공하는 것을 알 수 있다.

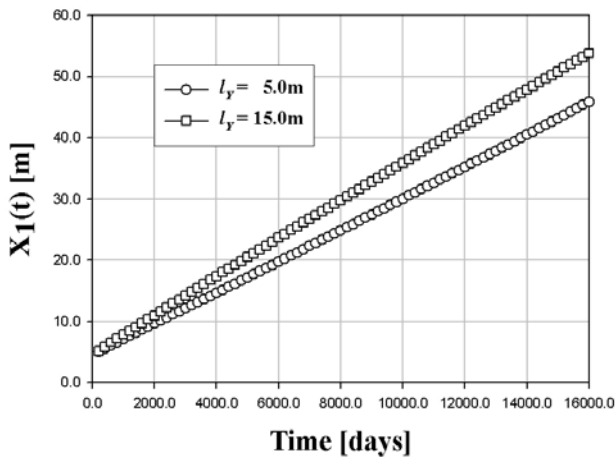


그림 3. 시간에 따른 종방향 질량중심이동

그림 4는 시간에 따른 종방향 공간 퍼짐 모멘트를 비교한 것이다. 그림 4에서처럼  $l_y = 15.0 m$ 의 경우가  $l_y = 5.0 m$ 보다 용질이 더욱 퍼지면서 진행되는 것을 알 수 있다. 이는 그림 2에서처럼 공간적 상관길이가 클수록 서로 유사한 투수계수값들을 포함하는 지역이 크며, 이에 따라 용질의 공간 퍼짐 모멘트가 큰 것으로 판단된다.

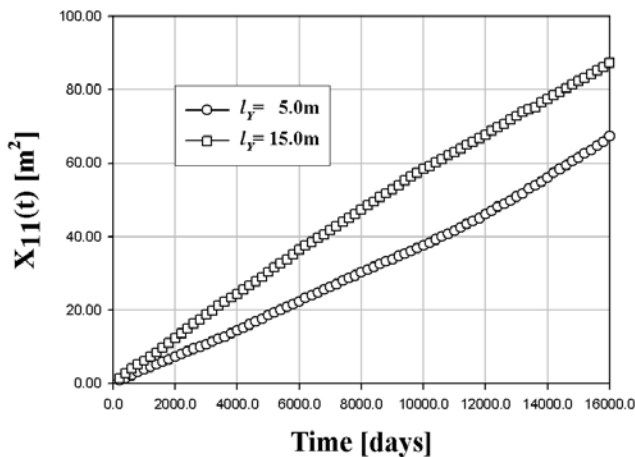


그림 4. 시간에 따른 종방향 공간 퍼짐 모멘트

그림 5는 시간에 따른 종방향 용질분포의 왜곡계수의 변화를 나타낸 것이다. 초기엔  $l_y = 5.0 m$ 과  $15.0 m$  모두 큰 폭으로 진동하는 경향을 나타낸다. 그러나 질량중심이 이동하면서  $l_y = 5.0 m$ 인 경우 전반적으로 양의 왜곡

계수값, 즉, 그림 5a)의 형태처럼 용질분포의 전방이 긴 비대칭 형태를 나타내며, 또한 계수값의 변동폭이 큰 것을 알 수 있다. 그러나  $l_y = 15.0 m$ 인 경우 왜곡계수값이 0.0 근처에 분포해 있으며, 이는 용질분포의 전방과 후방이 거의 대칭형태로 이동함을 의미한다.

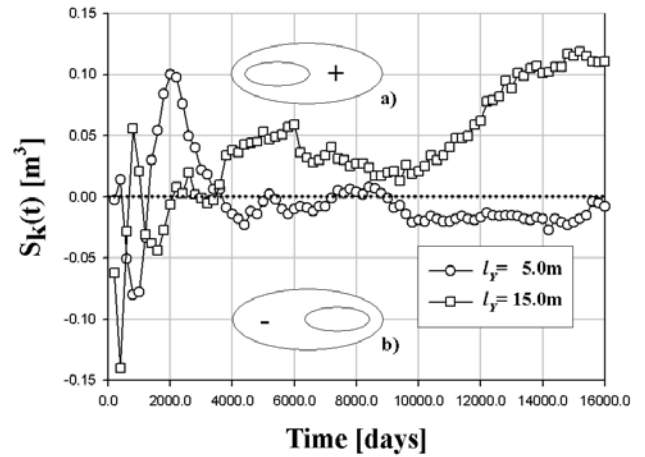


그림 5. 시간에 따른 용질분포의 종방향 왜곡계수

## 4.2 화학적 비균질성의 영향

화학적 비균질성, 즉 분배계수의 비균질적 분포에 의한 용질의 공간적 거동에 대한 변화를 알아보기 위해 투수계수 분포의 평균과 분산값을 각각 0.0과 0.04로 고정시켰으며, 분배계수의 기하학적 평균인  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값을 0.5, 0.8, 1.0, 3.0, 5.0으로 변화시키면서 수치모의실험을 수행하였다. 그리고 투수계수 분포에 대한 공간적 상관길이의 값을  $5.0 m$ 로 하였으며,  $\beta$ 값은  $-0.5$ 가 사용되었다.

그림 6은 각각  $\langle K_d^G \rangle$ 의 변화에 따른 종방향 질량중심 이동거리의 변화를 나타낸 것이며,  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값이 증가할수록 종방향 질량중심 이동거리가 시간에 따라 감소함을 알 수 있다. 이는  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값이 증가함에 따라 지체계수  $R$ 의 증가로 인해 용질입자의 속도가 감소함에 기인하는 것으로 사료된다.

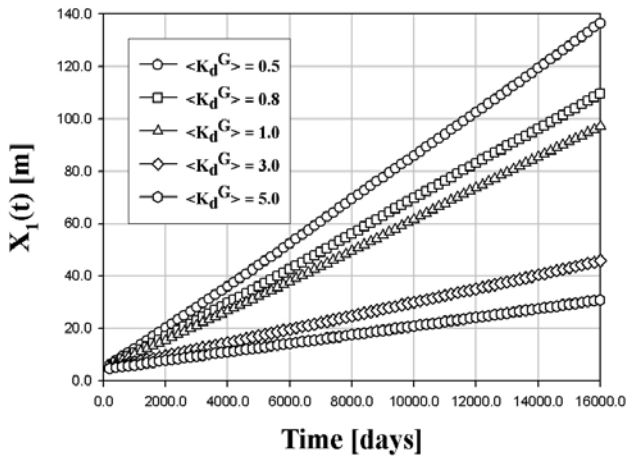


그림 6.  $\langle K_d^G \rangle$  에 따른 종방향 질량중심 이동

또한 그림 7에서처럼  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값이 증가함에 따라 종방향 공간 퍼짐 모멘트도 시간에 따라 감소하며, 이는  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값이 증가함에 따라 흡착되지 않은 액체상태의 용질농도가 감소하기 때문인 것으로 사료된다.

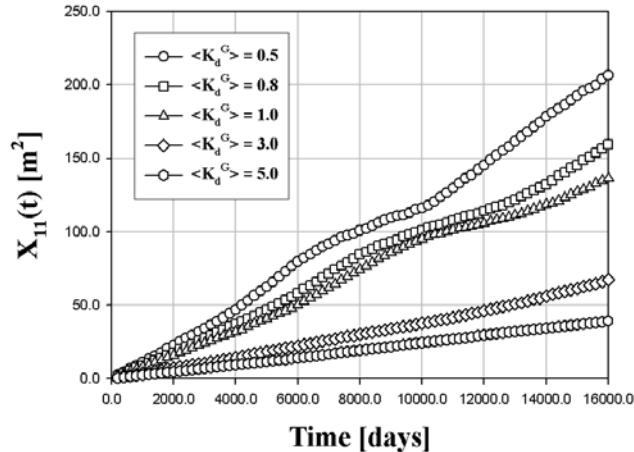


그림 7.  $\langle K_d^G \rangle$  에 따른 종방향 공간 퍼짐 모멘트

그림 8은  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값에 따른 용질분포의 종방향 왜곡계수의 시간적 변화를 나타낸 것이며,  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값이 상대적으로 작은 경우(즉, 0.5, 0.8 그리고 1.0) 용질분포는 전방과 후방으로의 비대칭 형태를 번갈아 취하면서 이동하는 것을 알 수 있다. 이는  $\langle K_d^G \rangle$  값이 작은 경우 용질분포의 공간적 거동은 화학적 비균질성보다는 오히려 물리적

비균질성(즉, 투수계수의 분포)에 의해 지배받는다라는 것을 의미한다. 그러나 상대적으로  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값이 큰 경우(즉, 3.0과 5.0) 용질분포의 공간적 거동은 화학적 비균질성에 의해 더욱 큰 영향을 받으며,  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값이 5.0인 경우 종방향으로 거의 대칭인 형태로 이동함을 알 수 있다.

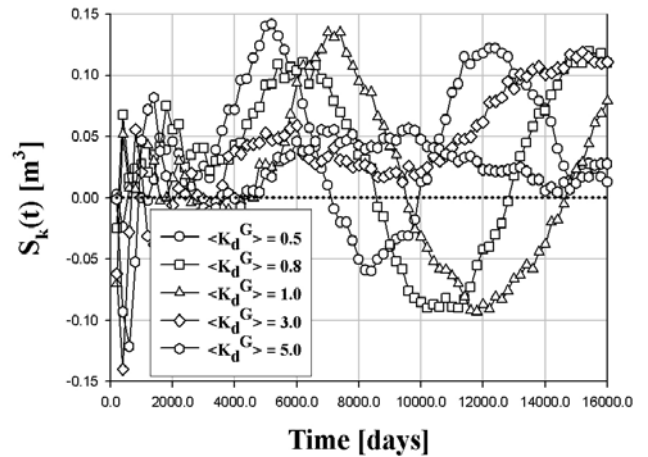


그림 8.  $\langle K_d^G \rangle$ 의 값에 따른 용질분포의 종방향 왜곡계수

### 4.3 물리적 비균질성의 영향

본 수치실험은 공간적으로 변화하는 투수계수 분포로 표현되는 물리적 비균질성의 영향을 알아보기 위해 수행되었다. 투수계수분포에 대해 사용된 평균값은 0이며, 분산값( $\sigma_Y^2$ )을 0.02, 0.25, 0.64, 1.00, 1.44로 변화시켰다. 또한 분배계수의 기하학적 평균과 투수계수 분포의 공간적 상관길이를 각각 0.5와 5.0 m로 하였다.

그림 9는  $\sigma_Y^2$ 값의 변화에 따른 종방향 질량중심 이동거리의 시간적 변화를 나타낸 것이며,  $\sigma_Y^2$ 값이 증가함에 따라 종방향 질량중심 이동거리는 시간에 따라 감소하는 경향을 나타낸다. 이는  $\sigma_Y^2$ 값의 증가에 따라 유속분포의 대조차가 점차적으로 커지는 것에 기인한다.



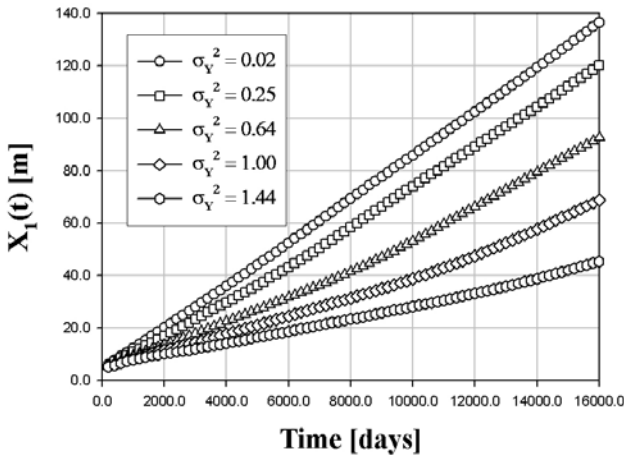


그림 9.  $\sigma_Y^2$ 에 따른 종방향 질량중심 이동거리

그림 10은 종방향 질량중심 이동거리에 대한 종방향 공간 퍼짐 모멘트의 변화를 나타낸 것이다. 종방향 질량중심 이동거리에 대한 결과와는 반대로  $\sigma_Y^2$ 값의 증가에 따라 종방향 공간 퍼짐 모멘트는 증가하는 경향을 나타낸다. 또한  $\sigma_Y^2$ 값이 0.02인 경우 종방향 공간 퍼짐 모멘트는 거의 선형으로 증가하나  $\sigma_Y^2$ 값이 증가할수록 점차적으로 비선형으로 증가하는 경향이 나타났다.

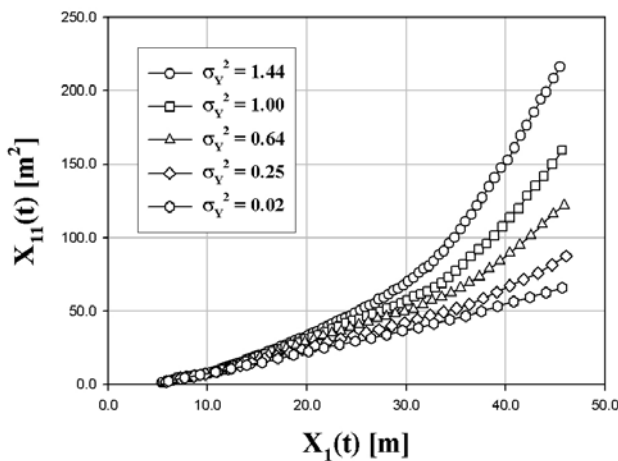


그림 10.  $\sigma_Y^2$ 에 따른 종방향 공간 퍼짐 모멘트

그림 11은  $\sigma_Y^2$ 값에 따른 종방향 왜곡계수의 시간적 변화를 나타낸 것이며,  $\sigma_Y^2$ 값이 0.02인 경우 용질분포가 거의 대칭인 형태로 이동하는 반면  $\sigma_Y^2$ 값이 증가할수록 용질

분포의 질량중심을 기준으로 시간에 따라 전방과 후방으로의 비대칭 형태를 번갈아 취하면서 용질이 이동하며, 또한 비대칭의 정도는  $\sigma_Y^2$ 값이 증가함에 따라 커지는 경향이 나타났다.

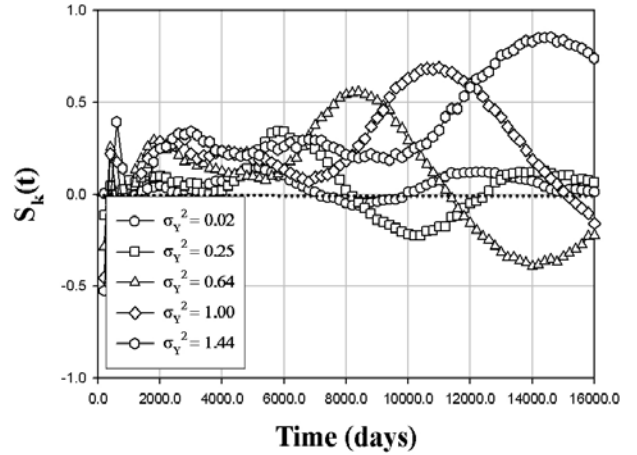


그림 11.  $\sigma_Y^2$ 의 값에 따른 용질분포의 종방향 왜곡 계수

## 5. 결론

비균질 다공성 매질 내에서 선형흡착용질의 공간적 그리고 시간적 거동을 수치적으로 분석하였으며, 본 연구로부터 얻어진 결과는 다음과 같다.

(1) 투수계수 분포의 공간적 상관길이 ( $l_Y$ )의 영향에 대한 수치모의실험 결과로써  $l_Y$ 가 15.0m인 경우가 5.0m의 경우보다 용질의 종방향 질량중심 이동거리와 종방향 공간 퍼짐 모멘트가 시간에 따라 더욱 커짐을 알 수 있었다. 그러나  $l_Y$ 가 5.0m일 때 용질은 질량중심을 기준으로 시간에 따라 거의 비대칭인 형태로 이동하나  $l_Y$ 가 15.0m일 때는 거의 대칭인 형태로 이동하는 경향을 나타내었다.

(2) 화학적 비균질성(분배계수의 비균질적 분포)의 영향에 대한 수치모의실험 결과로써 분배계수의 기하학적 평균값  $\langle K_d^G \rangle$ 이 증가할수록 지체계수는 커지며, 그에 따라 종방향 질량중심 이동거리와 종방향 공간 퍼짐 모멘트는 감소하였다. 또한  $\langle K_d^G \rangle$ 값이 증가할수록 동일한 시간에서 흡착되지 않은 액체상태의 용질농도는 감소하였다.  $\langle K_d^G \rangle$ 값이 상대적으로 작은 경우(예를 들면, 0.5, 0.8, 1.0) 용

질분포의 공간적 거동은 화학적 비균질성 보다는 오히려 물리적 비균질성(즉, 투수계수의 비균질적 분포)에 의해 지배받는 것으로 나타났으며,  $\langle K_d^G \rangle$  값이 상대적으로 큰 경우(3.0과 5.0) 용질분포의 공간적 거동은 화학적 비균질성에 더욱 큰 영향을 받는 것으로 나타났다.

(3) 물리적 비균질성(투수계수의 비균질적 분포)의 영향에 대한 수치모의실험에서 투수계수의 분산값  $\sigma_Y^2$ 이 증가함에 따라 종방향 질량중심 이동거리는 시간에 따라 감소하

는 경향을 나타냈으나, 종방향 공간 퍼짐 모멘트는 증가하였다. 이는  $\sigma_Y^2$ 값의 증가에 따라 유속분포의 대조차가 점차적으로 커지는 것에 기인하는 것으로 판단된다. 또한  $\sigma_Y^2$ 값이 0.02인 경우 용질분포가 거의 대칭인 형태로 이동하는 반면,  $\sigma_Y^2$ 값이 증가할수록 비대칭인 형태를 나타내며, 그 정도도 증가하는 것으로 나타났다.

(접수일자 : 2003년 7월 23일)

## 참 고 문 헌

1. Abulaban, A, Nieber, J.L. (2000), Modeling the effects of nonlinear equilibrium sorption on the transport of solute plumes in saturated heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, Vol.23, pp. 893~905.
2. Abulaban, A, Nieber, J.L., Misra, D. (1998), Modeling plume behavior for nonlinearly sorbing solutes in saturated homogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, Vol. 21, pp. 487~498.
3. Bosma, W.J.P., S.E.A.T.M. van der Zee., Rinaldo, A. (1993), Linear Equilibrium Adsorbing Solute Transport in Physically and Chemically Heterogeneous Porous Formations, 2. Numerical Results. *Water Resources Research*, Vol. 29, No. 12, pp. 4031~4043.
4. Dagan, G. (1986), Solute Transport in heterogeneous porous formations. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.145, pp.151~177.
5. Dagan, G. (1989), *Flow and Transport in porous formations*, Springer-Verlag, Berlin. Germany.
6. Fetter, C.W. (1990), *Contaminant Hydrogeology*, 2nd ed, Prentice-Hall Inc.
7. Istok, J. (1989), *Groundwater modeling by the finite element method*, American Geophysical union, USA.
8. Kinzelbach, W. (1986), *Groundwater Modeling, An Introduction with Sample Programs in BASIC*, Elsevier, Amsterdam, Netherlands.
9. Kinzelbach, W. (1988), The random walk method in pollutant transport simulation, in Custidio, E., A.Guigui, and J.P. Lobo Ferreria, eds., *Groundwater Flow and Quality Modeling*, NATO ASI Ser. C., Math. Phys. Sci., D. Reidel, Norwell, Mass., Vol. 224, pp. 227~246.
10. Langtuéjoul, C. (1994), Non conditional simulation of stationary isotropic multigaussian random functions, *Proc. Geostatistical Simulation Workshop*, Fontainebleu, France.
11. Matheron, G. (1973), The intrinsic random function and their applications. *Adv. Appl. Prob.*, Vol. 5, pp. 439-468.
12. Tompson, A.F.B. (1993), Numerical Simulation of Chemical Migration in Physically and Chemically Heterogeneous Porous Media. *Water Resources Research*, Vol.29, No.11, pp. 3709~3726.
13. Tompson, A.F.B. and Gelhar, L.W. (1990), Numerical Simulation of Solute Transport in Three-Dimensional, Randomly Heterogeneous Porous Media. *Water Resources Research*, Vol. 16, pp. 374~383.
14. Tompson, A.F.B., Ababou, R. and Gelhar, L.W. (1989), Implementation of the Three-Dimensional Turning Bands Random Field Generator. *Water Resources Research*, Vol. 25, No. 10, pp. 2227~2243.
15. Uffink, G.J.M. (1985), A random-walk methods for simulation of macrodispersion in a stratified aquifer. *Proc. Hamburg Symp.*, IAHS.
16. Wen, X.H. and Kung, C.S. (1996), Implementation of the Constant Displacement Scheme in Random Walk. *Computers & Geosciences*, Vol.22, No.4, pp. 369~377.
17. Woodbury, A.D. and Sudicky, E.A. (1992), Inversion of the Borden tracer experiment data: Investigation of stochastic moment models. *Water Resources Research*, Vol.28, pp. 2387~2398.