

# 유전자 알고리즘을 이용한 비선형 흡착 식 및 이류-확산 모델 파라미터 추정

## Estimation of Nonlinear Adsorption Isotherms and Advection-Dispersion Model Parameters Using Genetic Algorithm

도남영\* · 이승래\*\* · 박현일\*\*\*

Do, Nam-Young · Lee, Seung-Rae · Park, Hyun-Il

### Abstract

In this study, estimation of nonlinear adsorption isotherms(Langmuir & Freundlich adsorption isotherm) and advection-dispersion model parameters was conducted using genetic algorithm(GA) for Zn and Cd adsorption. Estimated parameters of nonlinear adsorption isotherms, which were obtained from the optimization process using genetic algorithm(GA), are nearly same with the parameters obtained from a linearization process of the nonlinear isotherms. Estimated effective diffusion coefficients, which were obtained from a finite element analysis of the advection-dispersion model and an optimization procedure using the genetic algorithm, for the metals were approximately in the order of  $10^{-7}$ cm<sup>2</sup>/s which could be obtained based on the linear distribution coefficient. The effective diffusion coefficients based on the nonlinear retardation factors were in the range of  $10^{-6}$ ~ $10^{-5}$ cm<sup>2</sup>/s. As a result, the correlation coefficient obtained between the measured and calculated concentration was over 0.9 which means that the genetic algorithm should be successfully applied to estimate the unknown parameters of the nonlinear adsorption isotherms and advection-dispersion model.

**Keywords :** Zinc, Cadmium, Effective diffusion coefficient, Retardation Factor, Genetic Algorithm

### 요 지

본 연구에서는 아연 및 카드뮴을 대상으로 수행된 흡착실험과 칼럼확산실험 결과를 바탕으로 유전자 알고리즘을 이용한 최적화 과정을 통하여 비선형 흡착 모델 및 이류-확산 모델식의 파라미터들을 추정하여 보았다. 수행결과 비선형 흡착 식 (Langmuir 흡착모델과 Freundlich 흡착모델) 들의 모델파라미터 추정은 이들 흡착식 들의 선형화 과정을 거쳐 얻어진 파라미터들과 거의 일치하는 결과를 얻을 수 있었다. 오염물질의 이동 해석을 위해 수행된 이류-확산 모델의 유한요소해석과 모델 파라미터 추정을 위해 수행된 최적화 과정을 통해 얻은 아연과 카드뮴의 확산계수는 선형 분배계수를 이용할 경우 두 금속 모두에서 약  $10^{-7}$ cm<sup>2</sup>/s 차원의 확산계수를 얻을 수 있었다. 또한 비선형 흡착 모델로부터 얻어진 지연인자를 이용할 경우 두 금속 모두에서  $10^{-6}$ ~ $10^{-5}$ cm<sup>2</sup>/s 범위의 확산계수 값을 얻을 수 있었다. 결론적으로 유전자 알고리즘을 이용한 최적화 과정을 통한 비선형 흡착식 및 이류-확산 모델의 파라미터 추정은 성공적으로 수행될 수 있었고, 실측값과 최적화 과정을 거쳐 예측된 값 사이의 상관계수는 0.9 이상으로 높은 상관성을 보이는 것으로 나타났다.

**주요어 :** 아연, 카드뮴, 유효확산계수, 지연인자, 유전자 알고리즘

\* 비회원, 한국과학기술원 건설 및 환경공학과 위촉연구원

\*\* 정회원, 한국과학기술원 건설 및 환경공학과 교수

\*\*\* 비회원, 삼성물산(주) 건설부문 기술연구소 선임연구원

## 1. 서론

차수재의 기능에 기초한 설계(performance-based design)를 위해서는 약 40~50년간에 걸쳐(매립지 운영기간 + 매립완료 후 모니터링 기간) 매립지 차수재를 통한 오염물질 유출농도가 매립지 주변 대수층에서의 오염물질의 농도 기준을 초과하지 않도록 적절한 두께의 차수재를 설계해야 한다. 이를 위해서는 적절한 경계조건과 초기조건 하에서 매립지 차수재를 통한 오염물질 이동 모델링이 필수적으로 요구된다 (Katsumi 등, 2001).

투수계수가  $10^{-7}$ cm/s 이하로 매우 작은 매립지 차수재를 통한 오염물질의 이동 메카니즘은 확산(diffusion)과 지연현상(retardation)에 의해 크게 영향받는 것으로 알려져 있다(Lo, 1996 ; Shackelford 등, 1989 ; Rowe와 Booker, 1985 ; Freeze와 Cherry, 1979). 따라서 차수재를 통한 오염물질의 이동은 이류-확산 모델(advection-dispersion model)에 의해 설명되어질 수 있다. 이류-확산 모델에 의한 오염물질의 이동을 설명하기 위해서는 합리적인 확산계수(diffusion coefficient)와 지연인자(retardation factor)의 산정이 중요하다.

합리적인 확산계수의 산정을 위해서는 현장에서 사용되는 것과 동일한 차수재 재료를 이용하여 확산 실험을 한 후 이때 구해지는 차수재 내의 오염물질의 농도를 구하고 이를 바탕으로 한 이류-확산 모델의 보정을 통해 확산계수를 산정하는 것이 일반적인 방법이다. 또한 지연인자를 구하기 위한 방법으로는 중금속과 흡과의 반응에 의한 흡착평형과 이들 흡착평형을 묘사하는 현상학적 모델(phenomenological models)을 이용한 흡착평형상수 또는 분배계수의 결정이 중요한 인자이다.

따라서 본 연구에서는 아연과 카드뮴을 대상으로 각 중금속 별 지연인자와 확산계수를 구하기 위해 자연점토를 대상으로 도남영과 이승래(2001, 2002)에 의해 수행된 실내 흡착 실험과 칼럼확산실험결과를 바탕으로 유전자 알고리즘을 이용한 최적화 과정을 통해 합리적인 지연인자와 확산계수를 산정하여 보았다. 이때 중금속 오염물의 다짐 점토지반을 통한 이동 해석을 위하여 사용된 이류-확산 모델의 근사해를 구하기 위해 본 연구에서는 유한요소해석을 이용하였다.

## 2. 유한요소법을 이용한 오염물질 이동해석

1차원 이류-확산 모델을 2차원으로 확장할 경우 지배방정식은 식 (1)로 표현될 수 있다.

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} \quad (1)$$

여기서,  $D_x$ 와  $D_y$ 는 x와 y방향에 대한 수리동역학적 분산계수이고,  $v_x$ 와  $v_y$ 는 x와 y방향에 대한 평균 침투 속도(average pore fluid velocity)이다. 지연인자 R은 평형상태에서 오염물질 용액상에서의 농도와 흡착된 농도와의 관계가 선형적일 경우 선형 흡착모델에 의한 분배계수로 표현될 수 있고(식 (2)), 비선형적인 관계를 가질 경우에는 식 (3)과 (4)와 같이 각각 Langmuir 흡착모델과 Freundlich 흡착모델에 의한 분배계수에 의해 표현될 수 있다.

선형흡착모델 :

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{n} K_L \quad (2)$$

Langmuir 흡착모델 :

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{n} \frac{K_{ads} Q^0}{(1 + K_{ads} c)^2} \quad (3)$$

Freundlich 흡착모델 :

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{n} K_F (1/n) c^{(1/n-1)} \quad (4)$$

식 (1)의 근사해를 구하기 위해 Galerkin의 가중잔여 방법(weighted residual method)을 적용하고 부분적분과 Green의 정리를 이용할 경우 식 (5)와 같이 표현된다.

$$[G_e] \{c\}^e + [H_e] \{c\}^e + [R_e] \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} \right\}^e = \{f\}^e \quad (5)$$

여기서,

$$[G_e] = \int \int_A \left( D_x \frac{\partial^2 [N]}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 [N]}{\partial y^2} \right) dA \quad (6)$$

$$[H_e] = \int \int_A \left( v_x [N]^T \frac{\partial [N]}{\partial x} + v_y [N]^T \frac{\partial [N]}{\partial y} \right) dA \quad (7)$$

$$[R_e] = \int \int_A (R [N]^T [N]) dA \quad (8)$$

$$\{f\}^e = \int_S [N]^T \left( D_x \frac{\partial c}{\partial x} n_x + D_y \frac{\partial c}{\partial y} n_y \right) dS \quad (9)$$

$$[N] = \text{weighting function matrix of element} \quad (10)$$

식 (6)~식 (9)와 같은 element matrix는 수치적분법을 이용하여 구할 수 있다. 그리고 식 (5)를 global matrix 식으로 표현하면 식 (11)과 같다.

$$[A][C] + [R] \left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\} = \{f\} \quad (11)$$

여기서,  $[A] = [G] + [H]$

시간 영역에서의 식 (11)의 해는 유한 차분법을 이용하여 구할 수 있다. 즉 식 (11)에서  $\{\partial C / \partial t\}$ 는 식 (12)와 같이 표현된다.

$$\left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\} = \frac{1}{\Delta t} [\{C\}^{t+\Delta t} - \{C\}^t] \quad (12)$$

그리고 각 절점에서의 농도  $\{C\}$ 는 시간  $t$ 와  $t + \Delta t$ 사이에서 다음 식 (13)과 같이 근사화 될 수 있다.

$$\{C\} = (1 - \alpha)\{C\}^t + \alpha\{C\}^{t+\Delta t} \quad (13)$$

여기서,  $\alpha$ 는 0과 1사이의 값을 가지며,  $\alpha=1$ 일 경우 후방차분근사(backward difference approximation)방법,  $\alpha=0$ 일 경우 전방차분근사(forward difference approximation)방법,  $\alpha=0.5$ 일 경우 중앙차분근사(central difference approximation)방법으로 불리어진다. 후방차분근사를 사용할 경우 시간 단계 크기를 어떻게 나누든지 안정성(stability)을 확보할 수 있다. 그러나 시간 단계 크기는 정확성(accuracy)에 있어서 또한 중요한 요인이 된다(Zhao 등, 1994).  $\alpha=1$ 일 경우 식 (11)은 식 (14)로 표현된다.

$$\left( [A] + \frac{1}{\Delta t} [R] \right) \{C\}^{t+\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} [R] \{C\}^t + \{f\}^{t+\Delta t} \quad (14)$$

이때 지연인자  $R$ 이 비선형적인 관계를 갖는 Langmuir 흡착모델이나 Freundlich 흡착모델로 표

현될 경우 식 (1)에 대한 해를 구하기 위해서는 반복적인 해석방법이 적용되어야 한다. 따라서 본 연구에서는 가정된 초기값을 이용하여 첫 번째 계산된 각 절점에서의 농도를 이용하여 다음 반복 계산 해를 얻는 직접반복방법(direct iteration method 또는 Picard method)을 이용하였다(Reddy, 1993). 이 경우 전 단계 반복과정에서 얻은 해와 그 다음 단계에서 얻은 해의 차이가 오차한계(error tolerance)이하로 떨어질 때까지 반복적으로 해를 구한 후 다음 시간 단계의 해를 구한다.

### 3. 유전자 알고리즘을 통한 비선형 흡착 모델 및 이류-확산 모델 파라미터 추정

유전 탐색 프로세서는 Fig. 1에서와 같이 초기집단의 생성, 적합도 평가와 재생산, 교배, 돌연변이 과정을 통하여 보다 해에 근접한 개체집단으로 발전된다는 개념이다. 이와 같이 한 세대 동안 재생산, 교배, 돌연변이를 거치면서 새롭게 형성된 집단은 다시 평가되고 앞서 수행한 일련의 연산과정은 최적해가 발견될 때까지 반복된다. Table 1은 본 연구에서 비선형 흡착식 및 이류-확산 모델의 파라미터 추정을 위해 사용된 유전 연산자와 기타 전략들을 정리한 것이다.

재생산을 알고리즘으로 구현한 재생산 연산자는 적합도 값을 기반으로 집단  $P(k)$ 내의 개체들을 선택하고 교배급원(mating pool)  $\bar{P}(k+1)$ 을 형성해준다. 이러한 선택은 약한 개체들을 집단에서 몰아내고 강한 개체를 선택함으로써 이들의 유전자들이 이후 세대의 집단에서 넓게 퍼지도록 해준다. 본 연구에서는 Pham과 Jin(1995)에 의해 제안된 구배와 유사한 선택자(gradient-like selector)와 확률적 속성 때문에 최적자를 선택하지 못하는 단점을 보완해 줄 수 있는 엘리트 전략(elitist strategy)을 사용하였다.

구배와 유사한 선택자를 사용할 경우 최적개체들로부터 멀리 떨어져 있는 약한 개체는 최적 개체 쪽으로 더 큰 움직임을 받게 되고, 가까이에 있는 강한 개체는 더 작은 움직임을 받게 된다(진강규, 2000). 이렇게 함으로써 루울렛 휠에서는 소멸되기 쉬운 약한 개체들을 최적 개체부근으로 끌어 모으고, 반대로 경쟁자로서 강한 개체들은 원래 위치 부근에 머물게 해준다. 엘리트 전략은 집단 내에서 가장 강한 개체가 다음 세대로 변경되지 않고 전달되는 것을 보장하기 위해 고안된 것이다. 만약 이전

```

Set  $k = 0$ ;
Create an initial population  $P(k)$ ;
Evaluate  $P(k)$  by calculation of objective function value;
Calculate fitness using the scaling window scheme;
While<the termination conditions are not met>
Set  $k = k + 1$ ;

Reproduce mating pool  $\bar{P}(k)$  from  $P(k-1)$  using roulette wheel selection/gradient-like selector/remainder stochastic sample with replacement/stochastic universal sampling/tournament selection/local selection/rank-based selection;

Crossover  $\bar{P}(k)$  to form a tentative population  $\tilde{P}(k)$  using simple crossover/arithmetical crossover/modified simple crossover;

Mutate  $\tilde{P}(k)$  to form the new population  $P(k)$  using uniform mutation/dynamic mutation;

Evaluate  $P(k)$  by calculation of objective function value;
Applies Elitism;
Applies the Scaling window scheme;
End While;
Output the solution;

```

Fig. 1. Procedures for Genetic Algorithm(GA)

Table 1. Used genetic operators and strategies to find the unknown parameters

Encoding		Real
Genetic operators	Reproduction	Gradient-like selection
	Crossover	Modified simple crossover
	Mutation	Dynamic mutation
Other strategies		Elitism
		Scaling window scheme

세대의 최적 개체를 저장하고 있다가 일련의 모의 진화가 수행된 후 현 세대에서 소멸된 것이 확인되면, 저장된 최적개체를 현 세대에서 가장 약한 개체 또는 임의로 선택된 개체와 교환하게 된다. 이 방법은 일반적으로 유전 알고리즘의 성능을 개선하는 것으로 알려져 있다(De Jong, 1975).

개체집단의 적합도 평가에 응용되는 정규화(normalization) 방법은 초기에는 유전자의 다양성을 충분히 유지할 수 있도록 개체간의 상대적인 적합도의 영향을 줄여주고, 후기에는 그 영향이 커지게 해 줄 수 있도록 원시 적합도 값을 직접 사용하지 않고 새로운 척도를 도입하여 변화한 후 사용하면 초기 세대의 집단에 초우량(상대적인 적합도 차가 큰) 개체가 출현하게 되면서 이들이 집단을 지배하게 되어

(유전적 다양성 상실) 지역 최적점으로 급히 수렴하게 되는 문제 해결에 도움이 된다. 또한 이와 반대로 후기 세대에 나타날 수 있는 개체들이 한점 주위로 군집 되어 좋은 개체와 더 나은 개체를 구별하는 것이 쉽지 않게 되는 문제 해결에도 도움을 줄 수 있다. 따라서 본 연구에서는 이러한 정규화 방법으로 자주 응용되는 스케일링 윈도우(scaling window) 방법을 사용하였다(진강규, 2000). 스케일링 문제의 성패는 전체 성능이 증가하는 동안 어떻게 일관되게 선택압을 유지하는가에 달려있다고 해도 과언이 아니다. 본 연구에서 사용된 교배 방법은 수정단순교배(modified simple crossover)로 이진코딩의 일점교배를 아주 근접하게 묘사한 연산자이다(진강규, 2000). 두 염색체에 대해 교배점  $j \in [1, N-1]$ 이 무작위

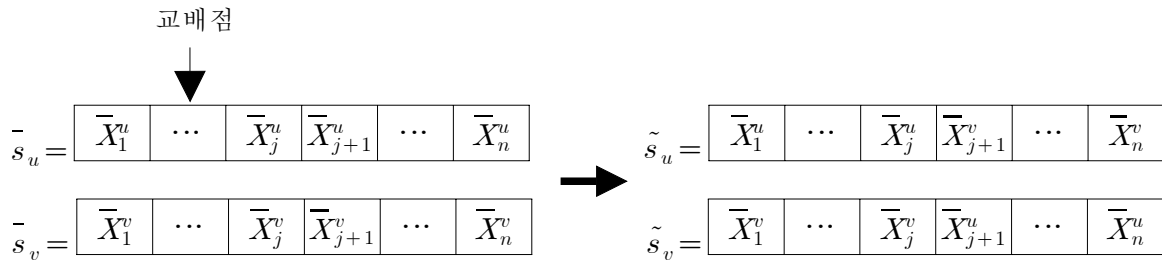


Fig. 2. Procedure for modified simple crossover

로 선택되면  $j$ 번째 요소는 식 (15)로 일차결합되고 그 후의 요소들은 서로 교환되어 자손이 생산된다.

$$\tilde{X}_j^u = \lambda \bar{X}_j^v + (1 - \lambda) \bar{X}_j^u \quad (15a)$$

$$\tilde{X}_j^v = \lambda \bar{X}_j^u + (1 - \lambda) \bar{X}_j^v \quad (1 \leq j \leq n) \quad (15b)$$

여기서,  $\bar{X}_j$  = 다음 부모 염색체 이고  $\tilde{X}_j$  = 자손 염색체 이다. Fig. 2는 이 연산자의 연산 결과를 보여 준다.

또한 본 연구에서 사용된 동적돌연변이(dynamic mutation) 일명 불균등돌연변이(non-uniform mutation) 라고도 불리는 이 연산자는 정밀도를 높이기 위하여 미세 조정이 가능하도록 고안된 것이다.  $j$ 번째 유전자에서 돌연변이가 일어나면  $X_j$ 는 식 (16)으로부터 결정된다(진강규, 2000).

$$X_j = \begin{cases} \tilde{X}_j + \Delta(k, X_j^{(U)} - \tilde{X}_j), & \text{if } \tau = 0 \\ \tilde{X}_j - \Delta(k, \tilde{X}_j - X_j^{(L)}), & \text{if } \tau = 1 \end{cases} \quad (16)$$

여기서  $\tau$ 는 0 또는 1 둘 중에 하나를 취하는 난수이고  $X_j^{(L)}$ 과  $X_j^{(U)}$ 는 각각 해당 유전자의 정의영역 하한값과 상한값이다.  $\Delta(k, y)$ 로는 다음 함수가 이용될 수 있다.

$$\Delta(k, y) = y \cdot r \cdot \left(1 - \frac{k}{T}\right)^b \quad (17)$$

여기서  $r$ 은 0과 1 사이의 실수 난수이고,  $T$ 는 알고리즘이 실행되는 최대 세대수이고,  $b$ 는 불균등 정도를 나타내는 매개변수로서 사용자에게 의해 결정된다. 이 함수는  $[0, y]$ 에서 값을 가지는데, 세대수  $k$ 가 증가함에 따라 0에 가까운 수를 발생할 확률이 높아지도록 접근하게 된다. 이 연산자의 특징은 초기에는 전 공간

을 균등한 확률로 탐색하다가 세대수가 증가하면 매우 지역적으로 탐색하도록 해준다(진강규, 2000).

비선형 흡착 식 및 이류-확산 모델의 파라미터 추정을 위한 목적함수는 식 (18)과 같이 구성되었다. 따라서 본 연구에서는 유전자 알고리즘을 이용한 최적화 과정을 통하여 아연과 카드뮴 흡착 실험 (도남영과 이승래, 2001) 및 칼럼 확산 실험 (도남영과 이승래, 2002)으로부터 얻은 관측된 중금속 농도 (흡착 실험의 경우; 평형상태에서의 용액상의 중금속 농도 및 흡착된 농도, 칼럼 실험의 경우; 깊이별 간극수 농도)와 임의로 생성된 파라미터 값을 이용하여 계산된 예측된 농도 값(흡착실험의 경우; Langmuir 및 Freundlich 모델을 이용한 평형 상태에서의 예측된 농도 값, 칼럼실험의 경우; 유한요소법을 이용한 이류-확산 모델로부터 계산된 깊이별 농도 값)의 차를 최소화하는 모델 파라미터를 찾고자 하였다.

$$\text{Objective function} = \sum_{i=1}^{Num} [C(i) - \hat{C}(i)]^2 \quad (18)$$

여기서,  $Num$ =흡착 실험 및 칼럼 실험을 통해 얻어진 관측 값의 개수,  $C(i)$ = 관측 값,  $\hat{C}(i)$ = 모델 식 계산을 통해 예측된 값

#### 4. 비선형 흡착 모델 및 이류-확산 모델 파라미터 추정

일반적인 비선형 흡착 모델식의 파라미터를 구하기 위한 과정은 먼저 비선형 흡착식을 선형화 한 후 선형식의 기울기와 절편으로부터 다시 비선형 흡착식의 파라미터를 계산하는 과정을 거친다. 대표적인 비선형 흡착 모델식인 Langmuir 흡착모델이나 Freundlich 흡착모델은 각각 식 (19)와 (20)으로 표현되고 이들을 선형화한 식은 각각 식 (21)과 (22)로 표현된다.

$$q_e = \frac{Q^0 K_{ads} c_e}{1 + K_{ads} c_e} \quad (19)$$

$$q_e = K_F c_e^{1/n} \quad (20)$$

여기서,

$q_e$  = adsorbed concentration at equilibrium condition (mg/g)

$c_e$  = solved concentration at equilibrium condition (mg/L)

$K_{ads}$  = adsorption equilibrium constant (L/mg)

$Q^0$  = maximum adsorption capacity as a mono layer (mg/g)

$K_F$  [(mg/g)·(L/mg)<sup>1/n</sup>] and  $1/n$  = Freundlich sorption parameters

$$\frac{c_e}{q_e} = \frac{1}{Q^0 K_{ads}} + \frac{c_e}{Q^0} \quad (21)$$

$$\ln q_e = K_F + \frac{1}{n} \ln c_e \quad (22)$$

본 연구에서는 이러한 선형화 과정을 거치지 않고 유전자 알고리즘을 적용한 최적화 과정을 통해 비선형 흡착 모델 식들의 파라미터(Langmuir 모델;  $K_{ads}$  와  $Q^0$ , Freundlich 모델;  $K_F$ ,  $1/n$ ) 와 이류-확산 모델 파라미터(확산계수와 유속) 추정을 시도하였다.

이때 비선형 흡착 모델식과 이류-확산 모델의 각 파라미터들의 집단크기는 각각 300과 40으로 하였고, 최대 세대수는 각각 100과 50으로 하였다. 그리고 교배와 돌연변이 확률은 각각 0.9와 0.1을 사용하였다. 각각의 파라미터에 있어서의 추정범위는 Table 2와 같다.

매립지 내부에 형성되는 수위가 30cm 이내로 형성될 경우 침출수위에 의한 동수경사는 거의 무시할 수 있는 수준으로 판단되고, 따라서 유속  $v$  는 차수재의 투수계수 값에 크게 의존하게 된다. 따라서 본 연구에서는 실험에 사용한 다짐 점토의 투수계수 측정을 위해 삼축 압축 시험기를 이용한 투수계수 측정을 수행하였다. 이때 투수시험의 단계별 조건은 Table 3과 같은 조건에서 수행되었고 이때 얻어진 평균 투수계수는  $1.5 \times 10^{-8}$  cm/sec 이다(Fig. 3). 이러한 실험 결과를 바탕으로 이류-확산 모델의 유속에 대한 추정범위를 결정하였다.

본 연구에서 중요하게 고려된 이류-확산 모델의 파라미터는 각 중금속들의 확산계수이다. 세대수 증가에 따르는 목적함수의 감소는 Fig. 4에서 알 수 있는 바와 같이 50세대 이전에 급격한 감소를 보이는 것을 알 수 있다. 따라서 50세대 이후의 파라미터들은 목적함수를 최소화하는 값에 수렴하여 더 이상의 큰 변화를 보이지 않는 것을 알 수 있다.

Table 2. Genetic algorithm features and parameters estimation ranges

Number of chromosomes in the population	300(40)*	
Number of generations(termination criterion)	100(50)**	
Crossover probability	0.9	
Mutation probability	0.1	
Estimation ranges for Langmuir model parameters	$K_{ads}$	0.001 ~ 10
	$Q^0$	0.001 ~ 10
Estimation ranges for Freundlich model parameters	$K_F$	0.001 ~ 10
	$\frac{1}{n}$	0.001 ~ 10
Estimation ranges for dispersion and velocity coefficients	$D(\text{cm}^2/\text{s})$	$10^{-8} \sim 10^{-4}$
	$v(\text{cm}/\text{s})$	$10^{-9} \sim 10^{-8}$

( )\* Number of chromosomes in the population to estimate parameters of advection–dispersion model

( )\*\* Number of generations to estimate parameters of advection–dispersion model

Table 3. Experimental conditions for measuring hydraulic conductivity of compacted clay

Stage of test	Parameters	Values
Compaction	Dry unit density( $\gamma_d$ ), g/cm <sup>3</sup>	1.55
Compaction	Water content, percent	27.4
Compaction	Porosity(n)	0.42
Compaction	Sample volume, cm <sup>3</sup>	49.1 (D=5cm, H=2.5cm)
Compaction	Void volume, cm <sup>3</sup>	20.63
Back pressure	Final cell pressure, kPa	315
Back pressure	Final back pressure, kPa	280
Back pressure	Final Skempton's B parameter	0.92
Permeation	Induced hydraulic gradient	50
End	Dry unit density( $\gamma_d$ ), g/cm <sup>3</sup>	1.51
End	Water content, percent	27.7
End	Degree of saturation, %	96.4
End	Porosity(n)	0.435

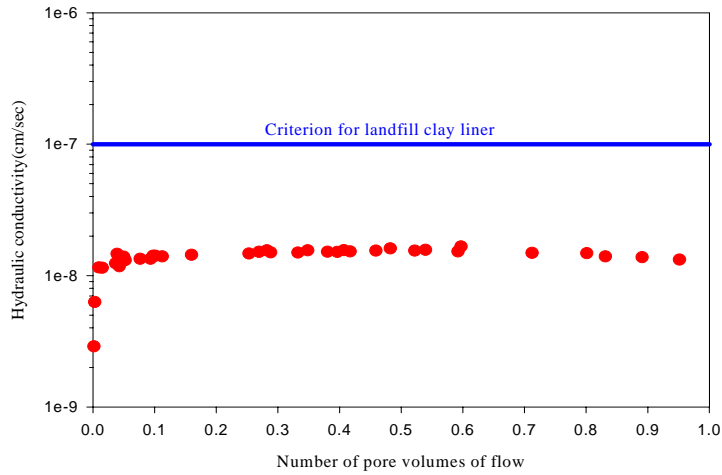
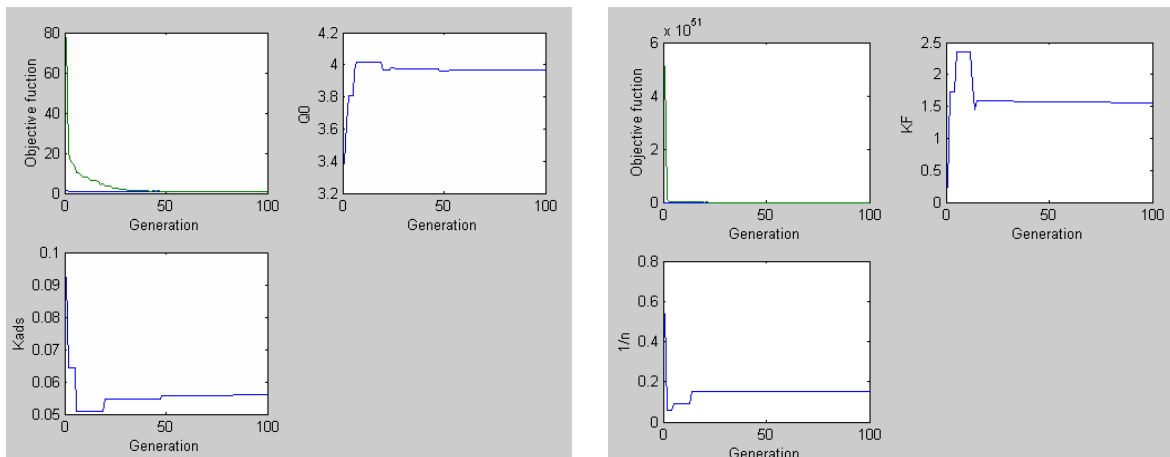


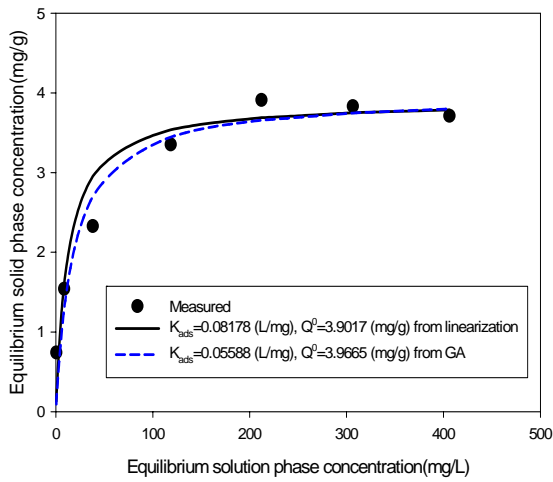
Fig. 3. Measured hydraulic conductivity with the number of pore volumes of flow



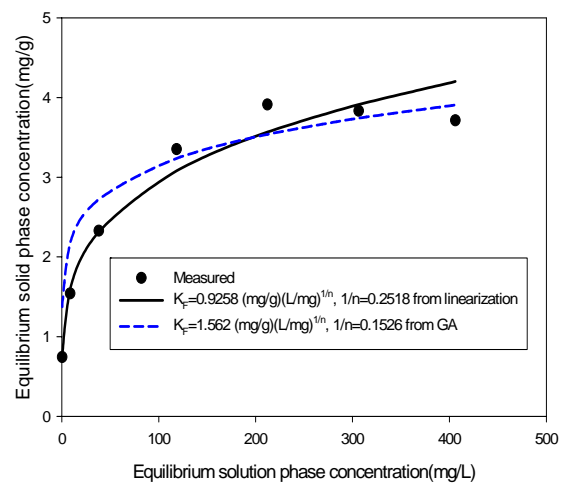
(a) Langmuir adsorption model

(b) Freundlich adsorption model

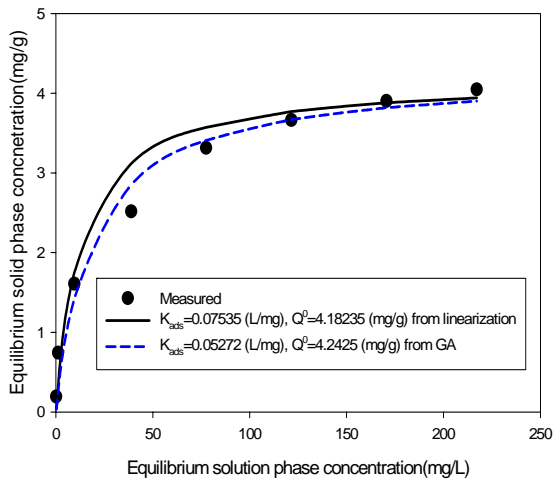
Fig. 4. Evolution of the objective function and parameters values along the successive generations



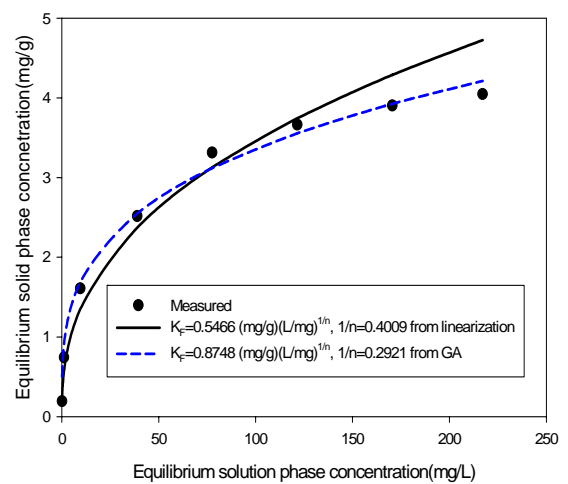
(a) Langmuir model parameters for Zn



(b) Freundlich model parameters for Zn



(c) Langmuir model parameters for Cd



(d) Freundlich model parameters for Cd

Fig. 5. Results of batch adsorption tests and predicted values using linearization and GA

Table 4와 Fig. 5은 식 (21)과 (22)를 이용한 선형화 과정을 통해 얻은 Langmuir 와 Freundlich 흡착 모델 파라미터와 유전자 알고리즘을 적용하여 얻어진 동일 모델 파라미터를 나타낸 것이다. 유전자 알고리즘을 적용한 모델 파라미터 추정 경우에는 측정된 농도와 임의의 범위에서 뽑은 모델 파라미터를 이용한 모델 식으로부터 얻은 농도의 차를 최소화 하는 방향으로 파라미터를 추정하게 된다(식 18). Table 4에서 알 수 있는 바와 같이 Langmuir 모델 파라미터의 경우에는 선형화 과정을 통해서 구한 값

과 유전자 알고리즘을 이용해 구한 값의 차이가 크지 않고 만족할 만한 결과를 얻을 수 있었다. 특히 유전자 알고리즘을 통해 추정된 흡착용량( $Q^0$ ) 값의 경우 Table 2에서 알 수 있는 바와 같이 값의 추정 범위가 0.001 ~ 10으로 비교적 넓은 범위에도 불구하고 선형화 과정에서 얻은 값과 2%이내의 범위에서 일치하는 값을 얻을 수 있었다. 하지만 Freundlich 모델 파라미터의 추정에 있어서는 선형화 과정을 통해 얻은 값과 유전자 알고리즘을 통해 추정된 값의 차가 비교적 크게 나타났다. 이러한 이유는 Fig. 6에



서 알 수 있는 바와 같이 유전자 알고리즘을 통한 파라미터 추정에 있어서는 목적함수를 최소화시키기 위해 비교적 측정된 자료가 많은 농도범위를 중점으로 해서 파라미터 추정이 이루어지기 때문에 판단된다. Fig. 6은 식 (22)에 바탕을 둔 선형회귀분석(직선)과 최적화 과정을 통해 얻은 Freundlich모델 파라미터를 이용하여 얻은 계산된 흡착량(점선)을  $lnc_e$ 와  $lnq_e$ 축에 나타낸 것이다. 하지만 Fig. 5에서 알 수 있는 바와 같이 선형화 과정을 통해 얻은 Freundlich 모델 파라미터를 이용할 경우 고농도에서의 흡착량을 과대 평가하는 것에 반하여, 유전자 알고리즘을 이용하여 얻은 Freundlich 모델 파라미터를 이용할 경우에는 고농도에서의 흡착량을 보다 더 정확하게 예측하는 것으로 나타났다.

Fig. 5에 따르면 아연과 카드뮴 흡착실험 결과는 비선형 흡착식을 따르는 것으로 나타났다. 그러나 칼럼확산실험에서 얻은 칼럼 깊이별 간극수 농도와

흡착된 농도사이의 관계(도남영과 이승래, 2002)는 선형적인 관계를 따르는 것으로 나타났다(Fig. 7). 칼럼확산실험을 통해 얻은 간극수 농도와 흡착된 농도 사이의 이러한 선형적인 관계는 중금속별로 약한 달간 확산실험을 수행한 후 그때까지의 깊이별 간극수 농도와 흡착된 중금속 농도가 평형상태인 것으로 가정했을 때의 흡착평형을 도식한 것이다. 한편 확산실험과 흡착실험으로부터 구한 흡착량을 비교할 경우에는 흡착실험으로부터 구한 흡착량이 확산실험으로부터 구한 흡착량 보다 많음을 알 수 있다. 이러한 경향은 확산실험의 경우 특정한 흐름경로를 통한 중금속의 이동만이 이루어지고 반응에 참여하는 흡 입자의 표면적이 산화광물에 의해 코팅되거나, 흡 입자들 간의 패드(peds)의 형성 그리고 다른 미세구조(micro-structure)의 변화에 의해 반응에 참여하는 흡 입자의 표면적이 흡착실험에 비해 상대적으로 매우 작기 때문인 것으로 사료된다(Yong, 2001).

Table 4. Estimated parameters of nonlinear adsorption models for Zn and Cd with linearization and genetic algorithm

Methods to estimate model parameters	Zn						Cd					
	Langmuir model			Freundlich model			Langmuir model			Freundlich model		
	$K_{ads}$ (L/mg)	$Q^0$ (mg/g)	correlation coefficient ( $\rho$ )	$K_F$ (mg/g) · (L/mg) <sup>1/n</sup>	1/n	correlation coefficient ( $\rho$ )	$K_{ads}$ (L/mg)	$Q^0$ (mg/g)	correlation coefficient ( $\rho$ )	$K_F$ (mg/g) · (L/mg) <sup>1/n</sup>	1/n	correlation coefficient ( $\rho$ )
Linearization	0.0817	3.90167	0.9651	0.92579	0.251	0.9773	0.0753	4.1823	0.9846	0.54656	0.400	0.9873
Genetic Algorithm	0.05588	3.966	0.9805	1.56	0.1526	0.9821	0.05271	4.242	0.9911	0.874	0.2921	0.9961

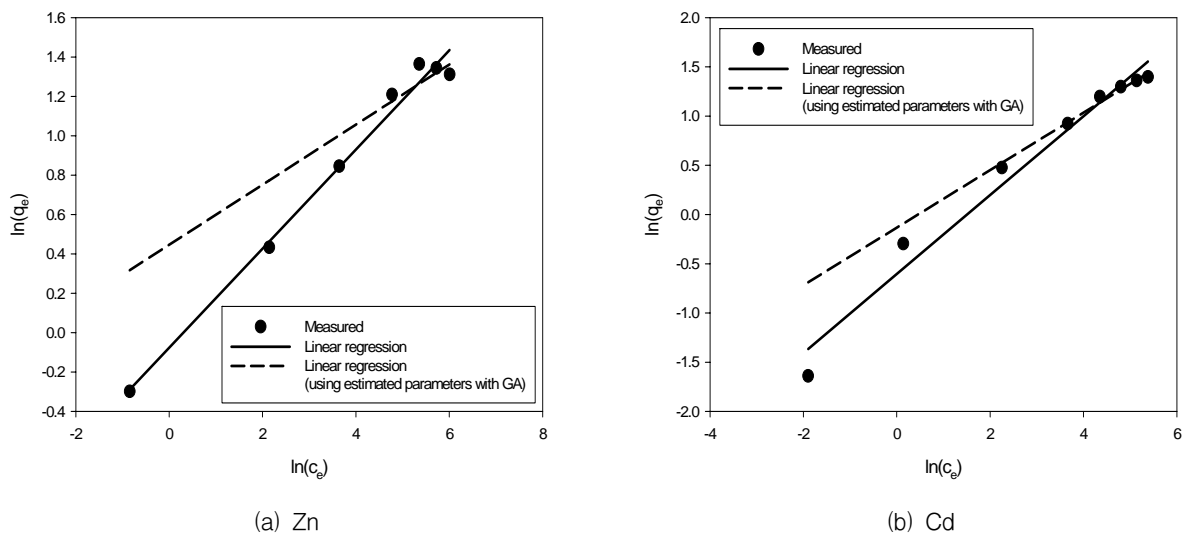
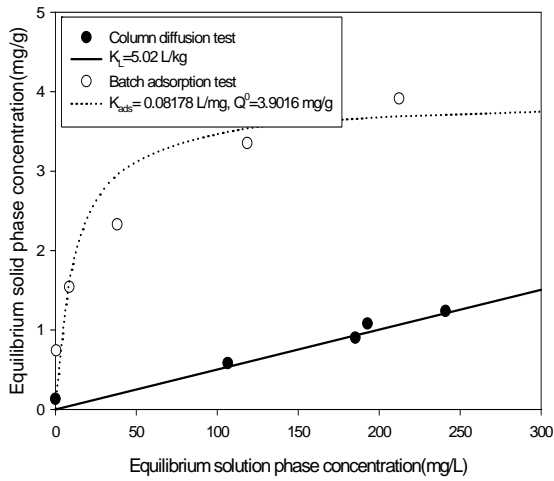


Fig. 6. Measured and linear regression results using estimated parameters with GA

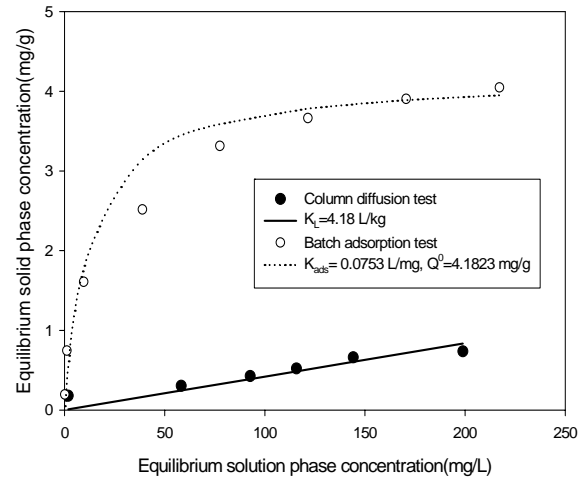
따라서 칼럼확산실험에 의한 중금속 흡착 평형상수 값은 확산 실험 기간이 길어지거나 짧아짐에 따라 다소 변화될 수 있는 것으로 사료된다. 칼럼확산실험으로부터 구한 아연과 카드뮴의 선형 분배계수는 각각 5.02 L/kg, 과 4.18 L/kg으로 아연의 경우가 다소 큰 흡착상수를 얻을 수 있었다. 본 연구에서는 칼럼확산실험 결과(깊이별 간극수 농도)를 유전자 알고리즘을 적용한 유한요소해석을 통해 각 중금속 별 확산계수를 구하는 과정에서 다음의 세 가지 방법으로부터 얻은 지연인자( $R$ )를 이용하였다. 첫째는 칼럼 확산 실험으로부터 얻어진 선형 분배계수, 둘째는 흡

착실험 결과를 선형화해서 얻은 Langmuir 모델 파라미터 그리고 마지막으로 유전자 알고리즘을 적용하여 구한 Langmuir 모델 파라미터를 이용하였다.

Fig. 8은 칼럼 확산 실험이 완료된 시점(32일)에서 각 중금속들의 깊이별 간극수 농도를 바탕으로 유전자 알고리즘을 적용한 유한요소해석을 통해 각 중금속별(아연과 카드뮴) 확산계수( $D$ )와 유속( $v$ )을 최적화 하였다. 이때 지연인자( $R$ )는 앞서 설명한 바와 같이 3가지의 다른 값을 이용하였다. Table 5는 각 중금속 별로 추정된 이류-확산 모델 파라미터(유효 확산계수와 유속)를 정리한 것이다.

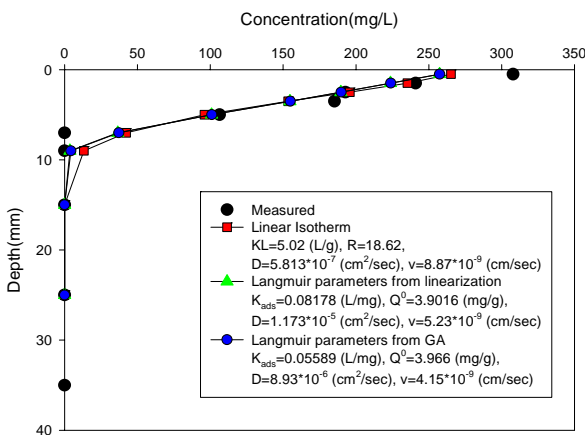


(a) Zn

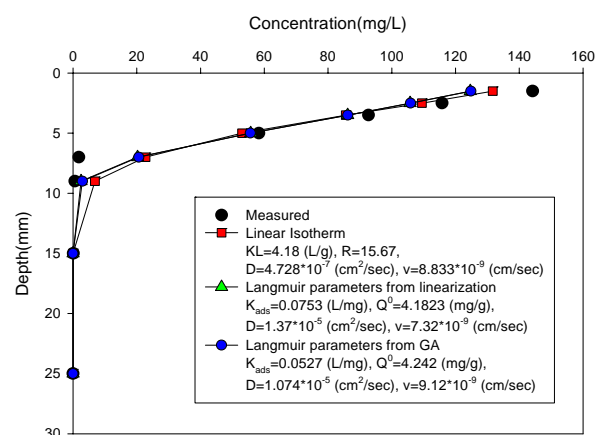


(b) Cd

Fig. 7. Adsorption isotherm obtained from the batch adsorption and the column diffusion tests for the metals



(a) Zn



(b) Cd

Fig. 8. Depth profiles of measured concentration and predicted values on the basis of the three different kind of retardation factors for the metals

Table 5. Summary of estimated diffusion coefficients and velocities obtained from optimization using GA based on the three different kind of retardation factors

Methods to estimate retardation factors (R)	Zn		
	Diffusion coefficient (D, cm <sup>2</sup> /s)	Velocity (v, cm/s)	correlation coefficient (ρ)
Linear isotherm parameters from diffusion tests $K_L = 5.02(L/kg)$ $n = 0.42, \rho_b = 1.51g/cm^3$ $R = 1 + \frac{\rho_b}{n} K_L = 18.62$	$5.813 \times 10^{-7}$	$8.87 \times 10^{-9}$	0.9859
Langmuir isotherm parameters from linearization $K_{obs} = 0.08178(L/mg)$ $Q^0 = 3.9016(mg/g)$ $R = 1 + \frac{\rho_b}{n} \frac{K_{obs} Q^0}{(1 + K_{obs} c)^2}$	$1.173 \times 10^{-5}$	$5.23 \times 10^{-9}$	0.9896
Langmuir isotherm parameters from GA $K_{obs} = 0.05589(L/mg)$ $Q^0 = 3.966(mg/g)$	$8.933 \times 10^{-6}$	$4.15 \times 10^{-9}$	0.9894
Methods to estimate retardation factors (R)	Cd		
	Diffusion coefficient (D, cm <sup>2</sup> /s)	Velocity (v, cm/s)	correlation coefficient (ρ)
Linear isotherm parameters from diffusion tests $K_L = 4.18(L/kg)$ $n = 0.42, \rho_b = 1.51g/cm^3$ $R = 1 + \frac{\rho_b}{n} K_L = 15.67$	$4.728 \times 10^{-7}$	$8.833 \times 10^{-9}$	0.9914
Langmuir isotherm parameters from linearization $K_{obs} = 0.0753(L/mg)$ $Q^0 = 4.1823(mg/g)$ $R = 1 + \frac{\rho_b}{n} \frac{K_{obs} Q^0}{(1 + K_{obs} c)^2}$	$1.37 \times 10^{-5}$	$7.32 \times 10^{-9}$	0.9926
Langmuir isotherm parameters from GA $K_{obs} = 0.0527(L/mg)$ $Q^0 = 4.242(mg/g)$	$1.074 \times 10^{-5}$	$9.12 \times 10^{-9}$	0.9924

이때 각 파라미터의 추정 범위는 Table 2에 나타내었다. 선형 분배계수로부터 계산된 지연인자를 이용하여 추정된 확산계수는 카드뮴의 경우  $4.728 \times 10^{-7} \text{cm}^2/\text{s}$ , 아연의 경우  $5.813 \times 10^{-7} \text{cm}^2/\text{s}$  로 아연의 경우가 약 19%정도 큰 확산계수 값을 갖는 것으로 나타났다. 반면 Langmuir 모델로부터 얻어진 지연인자를 사용하는 경우에는 두 금속 모두에서 대

략  $10^{-6} \sim 10^{-5} \text{cm}^2/\text{s}$  정도의 범위에서 확산계수가 추정되었다. 하지만 이 경우에 있어서 아연과 카드뮴의 확산계수를 비교해 볼 경우 카드뮴의 확산계수 값이 아연에 비해 약 17 ~ 20% 가량 큰 것으로 나타났다(Table 5). 이러한 결과는 지연인자의 변화에 따라 추정되는 확산계수 값이 크게 달라질 수 있다는 것을 의미한다. 또한 과대 평가된 비선형 흡착

모델식을 이용하여 산정한 지연인자를 이용하여 확산계수를 추정할 경우에는 선형 분배계수를 이용하여 구한 확산계수에 비해 두 금속 모두에서 약 100 배 정도 큰 확산계수를 얻을 수 있었다. 이러한 결과는 중금속 오염물과 흡착의 반응에 의한 지연현상이 오염물의 이동현상에도 큰 영향을 미칠 수 있음을 의미하며, 실내실험으로부터 구해진 모델 파라미터를 이용한 실제 현장에서의 오염물 이동을 예측하고자 하는 경우에는 파라미터 선정에 주의를 요해야 함을 의미한다.

## 5. 결론

본 연구에서는 아연과 카드뮴을 대상으로 수행된 흡착실험과 칼럼확산실험 결과를 바탕으로 유전자 알고리즘을 적용한 최적화 과정을 통하여 비선형 흡착 모델식과 이류-확산 모델의 파라미터들을 추정하여 보았다. 연구 수행결과를 요약하면 다음과 같다.

(1) Langmuir 모델 파라미터 추정에 있어서는 흡착 모델의 선형화 과정을 통해 얻은 값과 거의 일치하는 결과를 얻을 수 있었고, Freundlich 모델 파라미터 추정에 있어서는 선형화 과정을 거쳐 얻은 값과 다소 차이가 있는 값을 얻었다. 유전자 알고리즘을 이용한 최적화 과정에서는 초기 집단을 생성하고 샘플링된 집단의 재생산, 교배, 돌연변이의 과정을 거치면서 목적함수를 최소화시키는 방향으로 최적화 과정을 수행하게 된다. 따라서 Freundlich 모델 파라미터 추정에 있어서 실험결과의 수가 많은 고농도 범위를 중심으로 최적화 과정이 수행되게 됨에 따라 선형화 과정을 거쳐 얻은 파라미터와는 다소 차이가 있는 값을 얻을 수 있었다. 그러나 실측된 실험결과와 선형화 또는 최적화 과정을 통해 얻은 파라미터를 이용해 예측된 결과와의 상관계수(correlation coefficient)를 비교해볼 경우 두개의 중금속 모두에서 유전자 알고리즘을 통해 얻은 파라미터를 이용하여 예측된 결과가 더 높은 상

관계수 값을 갖는 것으로 나타났다.

(2) 이류-확산 모델의 파라미터 추정 결과 칼럼확산 실험에서 얻은 선형 분배계수를 이용하여 확산계수를 추정할 경우 두 금속 모두에서 약  $10^{-7}$   $\text{cm}^2/\text{s}$  정도의 확산계수를 갖는 것으로 나타났고, 다소 과대평가된 지연인자(비선형 흡착 모델 식으로부터 얻어짐)를 이용할 경우에는 두 금속 모두에서  $10^{-6}\sim 10^{-5}\text{cm}^2/\text{s}$  범위의 확산계수를 갖는 것으로 나타났다. 결론적으로 유전자 알고리즘을 이용한 최적화 과정을 통한 비선형 흡착식 및 이류-확산 모델의 파라미터 추정은 성공적으로 수행될 수 있었다. 실측값과 최적화 과정을 거쳐 예측된 값 사이의 상관계수는 0.9 이상으로 높은 상관성을 갖는 것으로 나타났다.

(3) 중금속들의 지연인자와 확산계수 값을 추정하는 문제는 중금속들의 매립지 점토 차수재를 통한 이동성을 예측하고 또한 매립지 차수 시스템의 설계와 매립지 주변 지반의 오염방지를 위해 필수적으로 요구된다. 이 경우에 있어서 본 연구에서 수행된 유전자 알고리즘을 적용한 비선형 흡착 모델 및 이류-확산 모델 파라미터 최적화 과정은 합리적인 파라미터를 산정할 수 있게 하고 또한 산정된 파라미터를 이용한 중금속들의 이동성을 예측할 수 있게 한다. 하지만 보다 향상된 이류-확산 모델의 파라미터 추정결과를 얻기 위해서는 보다 많은 수의 측정값과 또한 시간 변화에 따른 측정된 농도 값과 같은 실험 결과를 보완해야 할 것으로 판단된다.

## 감사의 글

본 연구는 스마트 사회기반시설 연구센터(SISTeC)의 연구비 지원에 대하여 깊은 감사를 드립니다.

(접수일자 : 2005년 9월 6일)

## 참고 문헌

1. 도남영 · 이승래(2001), 혼합 흡착-연속추출법을 이용한 자연 점토의 납(Pb), 구리(Cu), 아연(Zn), 카드뮴(Cd) 흡착 시 온도 영향. 한국지반환경공학회 논문집, 제 2권, 제 3호, pp. 17~35.
2. 도남영 · 이승래(2002), 칼럼 확산 실험을 통한 아연 및 카드뮴의 유효확산계수에 미치는 온도 영향. 한국지반환경공학회

논문집, 제 3권, 제 1호, pp. 13~26.

3. 진강규(2000), 유전자알고리즘과 그 응용, 교우사, 377p.
4. De Jong, K. A.(1975), An analysis of the behaviour of a class of genetic adaptive systems. Doctoral Dissertation, The Univ. of Michigan, Ann Arbor, Michigan.
5. Freeze, R.A. and Cherry, J.A.(1979), Groundwater. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J.
6. Katsumi, T, Benson, C.H., Foose, G.J., and Kamon, M.(2001), Performance-based design of landfill liners. Engineering Geology, Vol. 60, pp. 139~148.
7. Lo, I. M .C.(1996), The role of organic attenuation in saturated clay barrier system. Wat. Sci. Tech., Vol. 33, pp. 145~151.
8. Pham, D. T. and Jin, G.(1995), Genetic algorithm using gradient-like reproduction operator. Electronics Letters, Vol. 31, No. 18, pp. 1558~1559.
9. Reddy, J.N.(1993), An introduction to the finite element method. McGraw-Hill, Inc.
10. Rowe, R.K. and Booker, J.R.(1985), 1-D pollutant migration in soils of finite depth. J. Geotech. Eng., ASCE, Vol. 111, pp. 479~499.
11. Shackelford, C.D., Daniel, D.E. and Liljestrand, H.M.(1989), Diffusion of inorganic chemical species in compacted clay soil. J. of contaminant hydrology, Vol. 4, pp. 241~273.
12. Yong, R.N.(2001), Geoenvironmental Engineering: Contaminated soils. Polluted fate, and Migration, CRC press, 307p.
13. Zhao, C., Xu, T. P., and Valliappan, S. P.(1994), Numerical modelling of mass transport problems in porous media: a review. Computers & Structures, 53, pp. 849~860.