

토양 오염원의 이동에 관한 연구 (감쇠항이 있는 3차원 이송-확산 방정식의 수치모형 개발)

A Study on the Transport of Soil Contaminant

(A Development of FDM Model for 3-D Advection-Diffusion Equation with Decay Term)

김 상 준*

Kim, Sang-Jun

Abstract

To simulate the transport of pollutant, a numeric model for the advection-diffusion equation with the decay term is developed. This is finite-difference model using the implicit method (with the weight factor α) and Gauss-Seidel SOR(successive over-relaxation). This model is compared to the analytical solutions (of simpler dimensional or boundary conditions), and in the condition of Peclet number $< 5 \sim 20$, the result shows stable condition, and Crank-Nicolson method ($\alpha = 0.5$) shows the more accurate results than fully-implicit method ($\alpha = 1$). The mass of advection, diffusion and decay is calculated and the error of mass balance is less than 3%. This model can evaluate the 3-D concentrations of the advection-diffusion and decay problems, but this model uses only the finite-difference method with the fixed grid system, so it can be effectively used in the problems with small Peclet numbers like the pollutant transport in ground-water.

Keywords : soil contaminant, advection-diffusion, decay, Peclet number, mass balance

요 지

오염물질의 이동 현상을 모의하기 위하여, 감쇠항이 있는 3차원 이송-확산 방정식의 수치모형이 개발되었다. 개발된 모형은 유한차분 모형으로서 시간단계의 가중치 α 를 포함하는 음해법(implicit finite difference method)과, 반복법인 Gauss-Seidel SOR (successive over relaxation)이 사용되었다. 모형은 보다 단순화된 가정 하에서 존재하는 두 가지의 해석적인 해와 비교되었다. 그 결과 Peclet number가 5~20 이하에서는 수치 분산의 영향이 크지 않았고 작은 오차 범위 내에서 해석적인 해와 동일하였다. 또한 가중치 α 의 변화에 대한 모형의 거동은 Crank-Nicolson 모형($\alpha=0.5$)이 fully-implicit 모형($\alpha=1$)보다 해석적인 해에 접근함을 보여주었다. 모형의 검증과 실효성 제고를 위하여, mass balance를 검토하였다. 즉, 이송, 확산 및 감쇠항 각각에 대한 질량 이동을 산출하였으며, 그 결과 질량 이동의 계산 오차는 약 3% 이내였다. 본 모형은 감쇠 과정이 수반되는 3차원 이송-확산의 농도분포와 질량이동을 산출할 수 있으며 다양한 경계 조건을 설정함으로써 현장조건을 반영할 수 있다. 그러나 본 모형은 고정 격자를 기반으로 하는 유한차분 모형이므로 Peclet number가 비교적 작게 나타날 수 있는 토양 및 지하수계의 오염물질 이동 등의 문제에서 유용하게 적용될 수 있을 것으로 사료된다.

핵심용어 : 토양오염, 이송-확산, 감쇠율, Peclet 수, 질량보존

* 가천대학교 토목환경공학과 교수 (e-mail: sj282kim@kyungwon.ac.kr)

Dept. of Civil and Environmental Engineering, Gachon University, Seongnam 461-701, Korea

1. 서 론

최근 산업의 발달과 도시화로 인하여 가정과 축산 농가, 유류저장 탱크 혹은 공장 등에서 배출하는 오염 물질의 양이 크게 증가하고 새로운 유해 물질도 증가함으로써 토양과 지하수의 오염이 심화되어 가고 있다. 토양과 지하수를 보존하는 문제는 이제 환경 보전의 차원에서 중요한 문제로 인식되고 있다. 오염 물질의 이동현상에 관한 수학적 모형은 여러 연구자들에 의해 다양하게 제시되었으나 일반적으로는 이송-확산(advection-diffusion) 방정식에 오염 물질이 흡입자에 흡착(혹은 탈착) 하는 것과 오염물질 자체의 감쇠(혹은 성장)를 나타내는 항목을 포함시키는 것으로서 기술 된다(Baveye and Valocchi, 1989; Tan et al., 1994; Clement et al., 1997). 연구자들은 이론적인 모형의 수립과 실험을 통하여 토양 내에서의 오염 물질 이동현상을 파악하기 위해서 노력해왔다. 예를 들면, Corapcioglu and Haridas (1985)는 dispersion, convection, Brownian motion 등의 현상을 이론적으로 제시하였으며, Taylor and Jaffe (1990a)는 바이오 필름(bio-film) 모형에 대하여 연구하고, 바이오 필름의 기하학적인 모양이 확산 계수를 변화시킨다는 이론 체계를 수립하였다. 한편 Zysset et al. (1994)은 오염 물질(입자에 고착되어 있거나 흐름에 부유되어 있는)의 성장에 한도를 두는 모형을 이용하여 수치적인 해를 구하고 이를 실험치와 비교하는 결과를 제시하였다. 수치 모형과 관련하여, 수치모형은 2차원 모형과 3차원 모형, 정상류 모형과 전이류 모형, 혹은 FEM 모형, FDM 모형 등으로 구분할 수 있다. 모형의 발전 과정을 살펴보면 Gupta and Tanji (1976)는 다공성 매체에서의 유체 흐름에 대한 FEM 모형을 개발하였으며,

Wang and Anderson (1982)는 FEM 및 FDM의 일반적인 해법을, Pinder and Gray (1997)는 지표 및 지하 흐름에 대한 FEM 모형의 해법을 제시하였다. 또한, McDonald and Harbaugh (1991)는 3차원 FDM 모형인 MODFLOW를 개발하였다. 이러한 수치모형과 관련하여, 국제 지하수 모형 센터(IGWMC, International Groundwater Modeling Center)에는 많은 관련 모형이 등록되어 있다(Table 1). 그러나 이러한 모형 중에서도 상업적으로 가장 성공한 모형은 3차원 유한차분 모형인 MODFLOW 모형(Waterloo Hydrogeologic Inc., 2002)으로서 전세계적으로 많은 사용자를 확보하고 있다.

한편, 국내에서의 관련 연구를 살펴보면, 이상일 등(2006)은 강변 여과 과정에서의 오염 물질(용존성 유기 물질과 박테리아 등) 이동을 모의하기 위한 수학적 모델을 제시하였다. 수치모형의 연구와 관련하여, 유명관과 전경수(1999)는 1차원 이송-확산 방정식에 대하여 이송에 대하여는 Holly-Preissmann 기법을, 확산에는 Crank-Nicolson 방법을, 감쇠에 대하여는 해석적 방법을 각각 적용하였다. 이정규와 김주영(2000)은 2차원 이송확산 방정식에 대하여 변동 유속장 처리를 원활하게 하기 위한 특성곡선법과, Peclet number (Sun, 1996)의 제한을 완화할 수 있는 방법을 제시하였다. 김영도와 서일원(2001)은 확률 분포 모형을 이용한 방법론을 적용하여, 서일원과 송창근(2007)은 유한요소 수치모형을 개발하여 자연 하천에서의 2차원 이송-확산 문제를 모의하였다. 그러나 이와 같은 많은 노력에도 불구하고, 특히 국내에서는 3차원 지배방정식의 수치모형 연구 및 개발은 미미한 실정으로서, 이는 외국의 상업적 모형을 맹목적으로 사용하는 위험성을 불식시키지 못하는 요인이 되고 있다. 본 논문에서는 이러한 문제

Table 1. Soil and Groundwater Model (Flow and Transport)

Name	Content
ABCFEM	two-dimensional transient finite element flow and random walk transport
ASM	two-dimensional transient finite difference flow and transport
FTWORK	three-dimensional transient finite difference flow and transport
MULAT	three-dimensional steady-state finite element flow and transport
NETFLO	three-dimensional steady-state flow in fracture networks
PLASM	two-dimensional transient finite difference flow; IGWMC version
RADFLOW	two-dimensional radial transient finite difference flow
SUTRA	two-dimensional transient hybrid FE/FD flow and transport
TARGET	series of two- and three-dimensional integral finite difference flow and transport models

점에 초점을 두고 오염물질 이동 현상에 대한 3차원 편미분 방정식인 다음 식에 대한 유한차분 수치모형을 수립하고, 모형의 검증과 적용성을 연구, 제시하였다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\xi C - U \frac{\partial C}{\partial x} - V \frac{\partial C}{\partial y} - W \frac{\partial C}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (1)$$

여기서, C 는 용질의 농도, ξ 는 감쇠율, U, V, W 는 각각 x, y, z 방향으로 용매의 이동속도이며, D_x, D_y, D_z 은 확산계수이다. 이 식에서, $\frac{\partial C}{\partial t}$ 는 시간에 따른 농도의 변화, $-U \frac{\partial C}{\partial x}$ (혹은 $-V \frac{\partial C}{\partial y} - W \frac{\partial C}{\partial z}$)는 이송에 의하여, $D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ (혹은 $D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}, D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$)는 확산에 의하여 용질이 검사체적으로 유입되는 것을 의미하며, $-\xi C$ 는 용질이 농도에 비례하여 감쇠되는 것을 의미한다. 여기서 각 항의 차원은 $ML^{-3}T^{-1}$ (단위시간당, 단위체적당 질량의 증감)이다.

2. 수치모형의 구성

Eq. (1)의 해석적인 해(analytical solution)는 보통 단순화된 가정 하에서만 존재하며, 실제 문제에 적용하기 위해서는 수치해석적인 방법이 필수적이다. 수치해석은 유한차분, 유한요소모형, 특성곡선법 등으로 나눌 수 있다 (Anderson, and Woessner, 1992). 또한 계산방식에 따라 Eulerian 방법과 Lagrangian 방법으로 구분하기도 한다. Eulerian 방법은 계산 처리과정이 고정된 격자에서 진행하므로 Peclet number가 클 경우 이송 항에 기인하는 수치 확산(numerical dispersion)이 발생하는 문제가 있고, 이를 극복하기 위하여 고정된 격자에서 확산 항을 계산하고 이송 항은 좌표축을 이동시키는 Lagrangian 방법으로 처리하여 결합하기도 한다(이정규와 김주영, 2000). 그러나 이러한 방법은 프로그래밍이 어렵고 계산 비용의 과다, 질량 보존의 문제 등을 발생시키는 것이 단점으로 지적되고 있다(김영도와 서일원 2001).

본 연구는 편미분방정식 Eq. (1)에 대하여 유한차분 수치모형으로 그 해를 구하고자 한다. 먼저 차분방정식을 구하기 위하여, Fig. 1과 같은 격자를 고려한다(그림에서는 x 방향으로의 배열만을 나타내고 있다).

이제 임의의 내부 격자점(i, j, k)에서 Eq. (1)을 대체할 차분방정식을 구성하기 위하여 Eq. (1)의 좌변 항인 $\frac{\partial C}{\partial t}$ 는 후방 차분법을 사용하고, 우변 항들을 시간 단계의 가

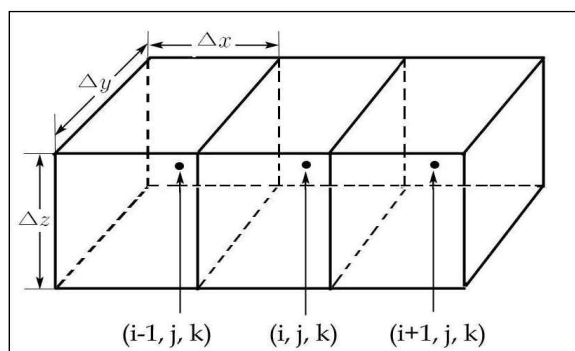


Fig. 1. Three Adjacent Nodes along the x Direction

중치($\alpha + \beta = 1$)를 포함하여 표현하면 각각 다음과 같다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_{i,j,k}^m - C_{i,j,k}^{m-1}}{\Delta t} \quad (2)$$

$$-\xi C = -\xi C_{i,j,k}^n \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \alpha \frac{C_{i+1,j,k}^m - C_{i-1,j,k}^m}{2\Delta x} + \beta \frac{C_{i+1,j,k}^{m-1} - C_{i-1,j,k}^{m-1}}{2\Delta x} \quad (4a)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = \alpha \frac{C_{i,j+1,k}^m - C_{i,j-1,k}^m}{2\Delta y} + \beta \frac{C_{i,j+1,k}^{m-1} - C_{i,j-1,k}^{m-1}}{2\Delta y} \quad (4b)$$

$$\frac{\partial C}{\partial z} = \alpha \frac{C_{i,j,k+1}^m - C_{i,j,k-1}^m}{2\Delta z} + \beta \frac{C_{i,j,k+1}^{m-1} - C_{i,j,k-1}^{m-1}}{2\Delta z} \quad (4c)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \simeq \alpha \frac{C_{i+1,j,k}^m - 2C_{i,j,k}^m + C_{i-1,j,k}^m}{(\Delta x)^2} + \beta \frac{C_{i+1,j,k}^{m-1} - 2C_{i,j,k}^{m-1} + C_{i-1,j,k}^{m-1}}{(\Delta x)^2} \quad (5a)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \simeq \alpha \frac{C_{i,j+1,k}^m - 2C_{i,j,k}^m + C_{i,j-1,k}^m}{(\Delta y)^2} + \beta \frac{C_{i,j+1,k}^{m-1} - 2C_{i,j,k}^{m-1} + C_{i,j-1,k}^{m-1}}{(\Delta y)^2} \quad (5b)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \simeq \alpha \frac{C_{i,j,k+1}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j,k-1}^n}{(\Delta z)^2} \quad (5c)$$

$$+ \beta \frac{C_{i,j,k+1}^{n-1} - 2C_{i,j,k}^{n-1} + C_{i,j,k-1}^{n-1}}{(\Delta z)^2}$$

Eqs. (2)~(5)를 Eq. (1)에 대입하고 미지수만을 좌변에 놓으면 다음과 같은 차분방정식이 산출된다.

$$\frac{C_{i,j,k}^m}{\Delta t} + \xi C_{i,j,k}^n + 2\alpha D_x \frac{C_{i,j,k}^m}{\Delta x^2} + 2\alpha D_y \frac{C_{i,j,k}^m}{\Delta y^2} \quad (6)$$

$$+ 2\alpha D_z \frac{C_{i,j,k}^m}{\Delta z^2} + \alpha U \left(\frac{C_{i+1,j,k}^m - C_{i-1,j,k}^m}{2\Delta x} \right)$$

$$+ \alpha V \left(\frac{C_{i,j+1,k}^m - C_{i,j-1,k}^m}{2\Delta y} \right) + \alpha W \left(\frac{C_{i,j,k+1}^m - C_{i,j,k-1}^m}{2\Delta z} \right)$$

$$- \alpha D_x \left(\frac{C_{i+1,j,k}^m + C_{i-1,j,k}^m}{\Delta x^2} \right) - \alpha D_y \left(\frac{C_{i,j+1,k}^m + C_{i,j-1,k}^m}{\Delta y^2} \right)$$

$$- \alpha D_z \left(\frac{C_{i,j,k+1}^m + C_{i,j,k-1}^m}{\Delta z^2} \right) = \frac{C_{i,j,k}^{m-1}}{\Delta t}$$

$$- \beta U \left(\frac{C_{i+1,j,k}^{m-1} - C_{i-1,j,k}^{m-1}}{2\Delta x} \right) - \beta V \left(\frac{C_{i,j+1,k}^{m-1} - C_{i,j-1,k}^{m-1}}{2\Delta y} \right)$$

$$+ \beta W \left(\frac{C_{i,j,k+1}^{m-1} - C_{i,j,k-1}^{m-1}}{2\Delta z} \right)$$

$$+ \beta D_x \left(\frac{C_{i+1,j,k}^{m-1} - 2C_{i,j,k}^{m-1} + C_{i-1,j,k}^{m-1}}{(\Delta x)^2} \right)$$

$$+ \beta D_y \left(\frac{C_{i,j+1,k}^{m-1} - 2C_{i,j,k}^{m-1} + C_{i,j-1,k}^{m-1}}{(\Delta y)^2} \right)$$

$$+ \beta D_z \left(\frac{C_{i,j,k+1}^{m-1} - 2C_{i,j,k}^{m-1} + C_{i,j,k-1}^{m-1}}{(\Delta z)^2} \right)$$

Eq. (6)에서 $\alpha=1$ 인 경우 완전음해법(fully-implicit method)이며, $\alpha=0.5$ 인 경우 Crank-Nicolson 방법으로 불리운다(여기서 완전음해법이란 Crank-Nicolson 방법을 넓은 의미의 음해법으로 보아 구별하기 위한 표현이며, 양해법은 $\alpha=0$ 인 경우이다).

Eq. (6)는 직접해법(direct method) 혹은 반복법(iterative method) 등을 이용하여 그 해를 구할 수 있다. 본 논문에서는 반복법의 일종인 Gauss-Seidel SOR (successive over relaxation)을 이용하기로 한다. 이 방법은 미지

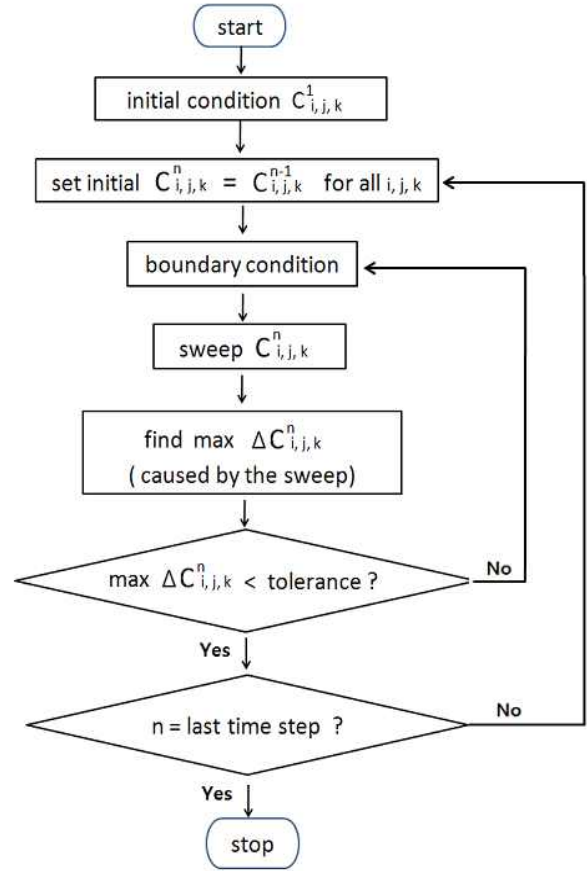


Fig. 2. Flowchart of the FDM Algorithm in This Study

수 $C_{i,j,k}^m$ 에 대해서만 반복적인 계산을 수행하되, 여타 미지수의 값은 계산 과정에서의 최근값을 사용한다(Lee, 1995). 경계조건은 경계면에서 농도의 값이 알려지는 경우와 경계면과 수직방향의 농도 구배가 알려지는 경우로 구분되는데, 후자의 경우 만약 농도구배가 0이면 이송(농도의 1차 도함수에 비례)에 의하여 검사체적으로 유입되는 질량 전달은 0이며 확산(농도의 2차 도함수에 비례)에 의한 질량 전달만이 존재한다는 의미이다.

본 연구에서 사용한 언어는 Microsoft VBA (Visual Basic Application)이며 연산 알고리즘을 간단히 제시하면 Fig. 2와 같다.

3. 모형의 검증 및 분석

Eq. (1)에 대한 수치모형 결과(numerical solution)의 우선적인 검증 방법으로는, 해석적인 해(analytical solution)가 알려져 있는 경우와 비교하여 진행할 수 있다.

3.1 해석적인 해와의 비교(경계면에서 일정한 농도가 유지되는 경우)

한 지점에서($x=0$)에서 일정한 농도 C_0 의 물질이 초기 농도가 0인 영역으로 연속적으로 방출되는 경우를 고려한다. 이 문제를 Eq. (1)의 1차원 형태,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \xi C \quad (7)$$

$$C(x, 0) = 0 \quad 0 < x < \infty$$

$$C(0, t) = C_0 \quad 0 \leq t < \infty$$

$$C(\infty, t) = 0, \quad 0 \leq t < \infty$$

에 적용할 경우에 대한 해석적인 해는 다음과 같은 것으로 알려져 있다(Bedient et al., 1994).

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \exp\left(\frac{Ux}{2D_x}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{x}{2D_x} \sqrt{U^2 + 4\xi D_x}\right] \right. \quad (8)$$

$$\left. \operatorname{erfc}\left[\frac{x - \sqrt{U^2 + \xi D_x t}}{2\sqrt{D_x t}}\right] + \exp\left[\frac{x}{2D_x} \sqrt{U^2 + 4\xi D_x}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{x + \sqrt{U^2 + \xi D_x t}}{2\sqrt{D_x t}}\right] \right\}$$

여기서, $\operatorname{erfc}(x)$ 는 여오차함수(complementary error function)로서 다음과 같다.

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi \quad (9a)$$

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad (9b)$$

본 연구의 3차원 수치모형의 결과를 1차원 해석적인 해를 나타낸 Eq. (8)과 비교하기 위하여 Fig. 3에서 제시된

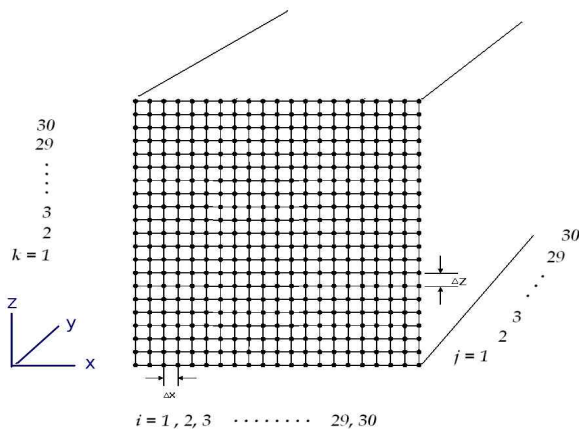


Fig. 3. Grid System for 3-D Numerical Model

격자에서 좌측 연직평면의 한 점($i=1, j=15, k=15$)을 경계 조건 지점으로 하여 이곳의 농도를 일정하게 유지하고 또한 y, z 방향으로의 유속을 0으로 놓음으로서 1차원의 형태를 유지하도록 하였다. Fig. 4~6은 본 연구의 3차원 수치모형과 Eq. (8)로 표현되는 해석적인 해와 비교한 결과를 보여주고 있다. 여기서, Peclet number는 다음 식으로 정의된다.

$$Pe = \frac{V \Delta x}{D} \quad (10)$$

여기서, V 는 속도, Δx 는 거리, D 는 확산계수를 의미한다. Peclet number가 커지면 수치적 분산(numerical dispersion)이 증가한다고 알려져 있다(이정규와 김주영, 2000).

Fig. 4~6에서 Crank-Nicolson 방법이 fully-implicit 보다 해석적인 해에 접근하고 있음을 알 수 있다(Fig. 6에서는 fully-implicit 방법에 의한 결과는 과도한 발산을 보였으므로 제시되지 않았다).

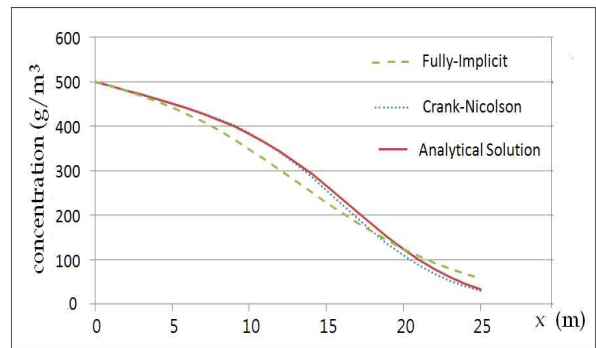


Fig. 4. Comparison between Analytical and Numerical Solutions (Boundary Input; Peclet Number=1, $\xi=0.01$, time=33.1 days)

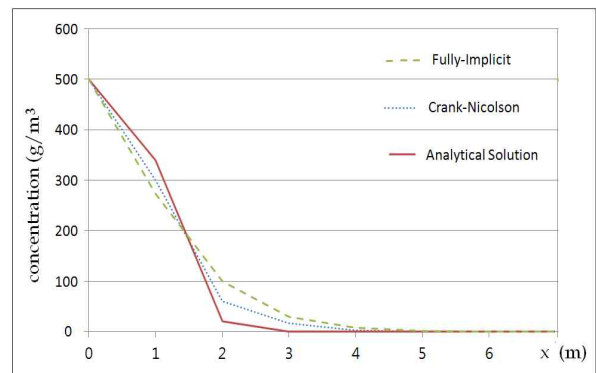


Fig. 5. Comparison between Analytical and Numerical Solutions (Boundary Input; Peclet Number=10, $\xi=0.01$, time=1.1 days)

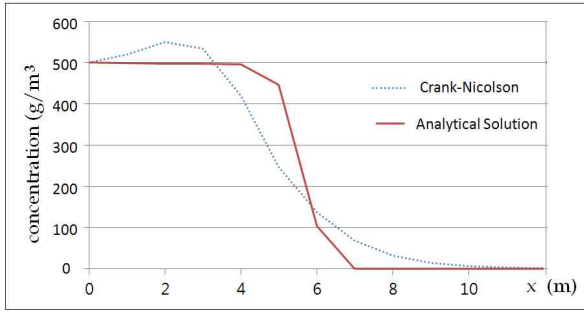


Fig. 6. Comparison between Analytical and Numerical Solutions (Boundary Input; Peclet Number = 50, $\xi=0.01$, time=1.1 days)

3.2 해석적인 해와의 비교(일정량의 질량이 투입된 경우)

질량 M 의 용질이 하나의 점 ($x = x_0, y = y_0, z = z_0$)에 투입된 경우를 수학적으로 표현하면 다음과 같다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} - V \frac{\partial C}{\partial y} - W \frac{\partial C}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (11)$$

$$+ D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \xi C$$

$$C(x, y, z, 0) = 0 \quad (x, y, z) \neq (x_0, y_0, z_0)$$

$$M = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} C(x, y, z, t) dx dy dz \quad 0 < t < \infty$$

$$C(\pm \infty, y, z, t) = 0 \quad t \geq 0$$

$$C(x, \pm \infty, z, t) = 0 \quad t \geq 0$$

$$C(x, y, \pm \infty, t) = 0 \quad t \geq 0$$

여기서, M 은 점(x_0, y_0, z_0)에 투입된 질량을 의미한다. Fig. 7은 투입된 질량에 대하여 이송-확산 현상이 진행되는 모습을 나타내고 있다.

그리고 Eq. (11)과 제시된 조건에 대한 해석적인 해는 다음과 같은 것으로 알려져 있다(Charbeneau, 2000).

$$C(x, y, z, t) = \frac{M}{4 \pi t \sqrt{D_x D_y D_z}} \times \quad (12)$$

$$\exp \left[-\frac{(x-x_0-Ut)^2}{4D_x T} - \frac{(y-y_0-Vt)^2}{4D_y T} - \frac{(z-z_0-Wt)^2}{4D_z T} \right]$$

$$\exp(-\xi t)$$

본 연구의 수치모형을 해석적인 해 Eq. (12)와 비교하기 위하여 Fig. 3으로 표시되는 영역의 일정한 위치에 질량 M 을 투입한 후 그 결과를 산출하였다. 단, 수치격자에

투여되는 질량은

$$M = C(x_0, y_0, z_0, 0) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (13)$$

이며, 또한 Eq. (12)는 무한대 영역에 대한 해석적인 해이므로, 이를 수치모형의 결과와 비교하기 위하여 이송-확산의 결과가 계산 영역의 경계에 도달하지 못하는(즉, 경계농도=0) 시간이 설정되었다. Figs. 8 and 9는 본 연구의 수치모형에 의한 농도분포와 해석적인 해의 비교를 보여

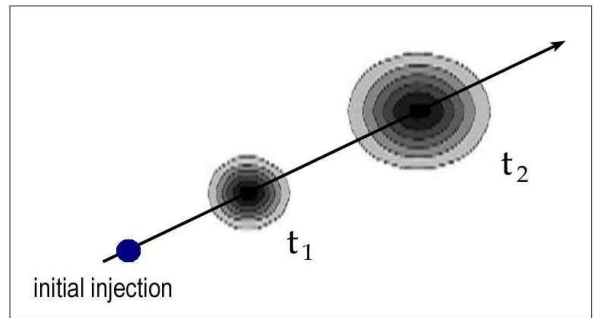


Fig. 7. Variation of Concentration Contours with Time

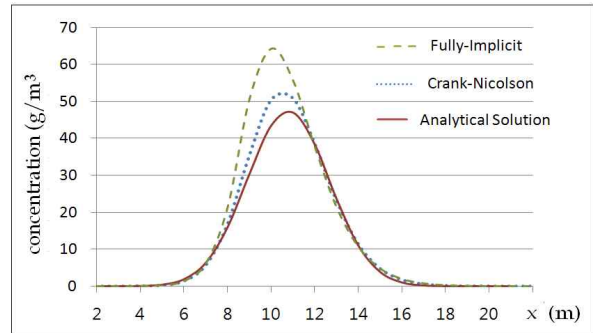


Fig. 8. Comparison between Analytical and Numerical Solutions (Point Input; Pe = 1; $y = 15 \text{ m}, z = 15 \text{ m}; t = 11$ days)

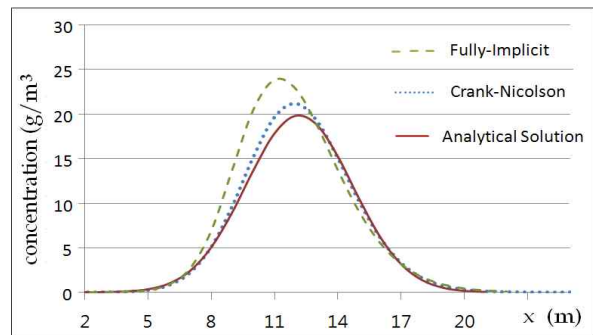


Fig. 9. Comparison between analytical and numerical solutions (Point Input; Pe = 10; $y = 15 \text{ m}, z = 15 \text{ m}; t = 11$ days)

주고 있다. 여기서 Fig. 8은 Peclet number=1의 경우이며, Fig. 9는 Peclet number=10의 경우이다. 그림에서 알 수 있는 바와 같이(경계면에서 일정한 농도가 유지되는 경우의 결과와 마찬가지로) Crank-Nicolson 방법이 fully-implicit 보다 해석적인 해에 접근하고 있음을 알 수 있다.

3.3 질량보존(mass balance)에 의한 모형의 검증 및 수치실험

이론적으로, 영역내로 직접 투입된 질량(point source)과 경계면에서의 질량 유입량(boundary source)은 영역내의 질량 증가분과 감쇠량(decay)의 합과 같아야 하는데 이는 수치 모형의 검증과 활용도 제고를 위하여 중요한 요소이다(Istok, 1989). 여기서 영역 내로 투입되는 질량 혹은 영역 내에 존재하는 질량은 각 격자에 해당하는 농도와 체적의 곱으로 산출되며, 경계면에서 이송과 확산에 의해 유입되는 질량은 다음 식으로 산출할 수 있다.

$$\text{boundary input} = C \times U \times A + (D_s \times \frac{\Delta C}{\Delta x} \times A \times \Delta t) \quad (14)$$

여기서, $C = C(x,y,z,t)$ 는 농도, $U = U(x,y,z,t)$ 는 경계면에 수직 방향으로의 유속, A 는 해당 경계면의 면적, D_s 는 확산계수, Δx , Δt 는 각각 공간 및 시간 간격을 의미

한다.

또한 감쇠되는 질량은

$$\text{decay} = C \times Vol \times \Delta t \times \xi \quad (15)$$

여기서, $C = C(x,y,z,t)$ 는 농도, Vol 은 체적이며 ξ 는 감쇠율이다.

Table 2는 본 모형의 Case-1에 대한 질량이동을 보여주고 있다. 또한 Fig. 10~12는 영역내의 농도 분포를 각 단면별로 보여주고 있다. Table 1에서 경계면의 한 부분에서 일정한 농도(50 g/m^3)를 설정하고 나머지 경계면은 natural condition(ex: $C_{i,j,k} = C_{i+1,j,k}$)로 설정하였다. 또한 초기조건으로 하나의 격자점에서 $5,000 \text{ g}$ 을 투입하였다. 그리고 time=0에서 time=110 days에 이르기까지 질량 비율(ratio)을 나타내었다. 그 결과 질량비율은 초기 시점의 값인 1에서부터 점차 편기되는 양을 나타내지만 그 오차(1-ratio)는 3%를 넘지 않음을 보여준다.

또한, Table 3은 Case-2에 대한 질량이동을 보여주며, Figs. 13 and 14은 영역내의 농도 분포를 각 단면별로 보여주고 있다. Table 2에서 영역의 모든 경계면은 natural condition(ex: $C_{i,j,k} = C_{i+1,j,k}$)로 설정하였고, 초기조건으로 4개의 격자점에서 모두 $20,000 \text{ g}$ 을 투입하였다. 그리고

Table 2. Test-Run (Case 1)

Time (day)		0	18	57	110
① point input (g)		5,000	0	0	0
② boundary input (accumulated)	advection (g)	0	330	1,160	2,275
	diffusion (g)	0	80	110	135
③ decay (accumulated) (g)		0	440	1,400	2,700
④ residual in the control volume (g)		5,000	4,915	4,750	4,534
⑤ ratio (= [③+④]/[①+②])		1	0.999	0.981	0.976
Input parameters : $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1 \text{ m}$; $\Delta t = 0.01 \sim 2 \text{ day}$ (increasing time step) convection velocity : $U = 0.1 \text{ m/day}$ $V = 0$, $W = 0$ diffusion coefficient : $D_x = D_y = D_z = 0.05 \text{ m}^2/\text{day}$; Peclet number ($= \frac{U \Delta x}{D_x}$) = 2 decay factor : $\xi = 0.005$; $\alpha = 0.5$ (Crank-Nicolson method)					
Boundary Input: constant concentration condition $C(x,y,z,t) = 50 \text{ g/m}^3$ at $i=1, j=15, k=9$; $i=1, j=16, k=9$ $i=1, j=15, k=10$; $i=1, j=16, k=9$ $0 < t < \infty$					
Point Input : initial condition $C(x,y,z,0) = 5,000 \text{ g/m}^3$ at $i=10, j=15, k=9$					

time=0에서 time=113 days에 이르기까지 질량 비율(ratio)을 나타내었다. 그 결과 질량비율은 초기 시점의 값인 1에

서부터 점차 편기되는 양을 나타내지만 그 오차(1 - ratio)는 2%를 넘지 않음을 보여준다.

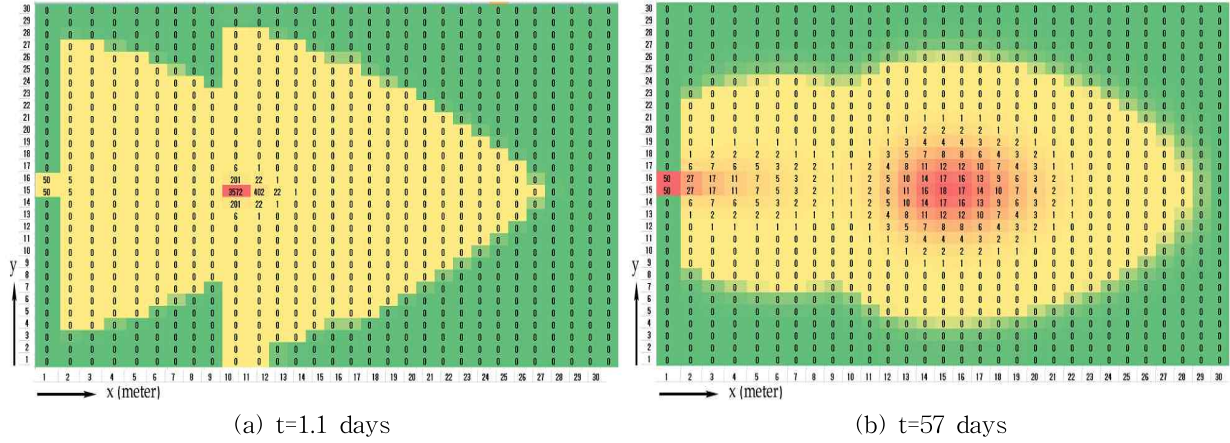


Fig. 10. Concentrations of the Horizontal Plane [Case 1 ; $z = 15m$]

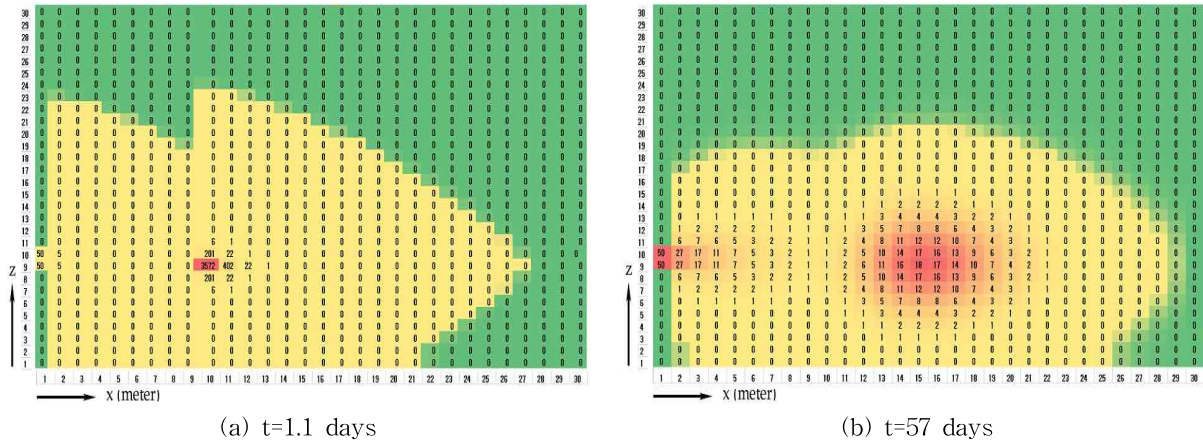


Fig. 11. Concentrations of the Vertical Plane [Case 1 ; $y = 15m$]

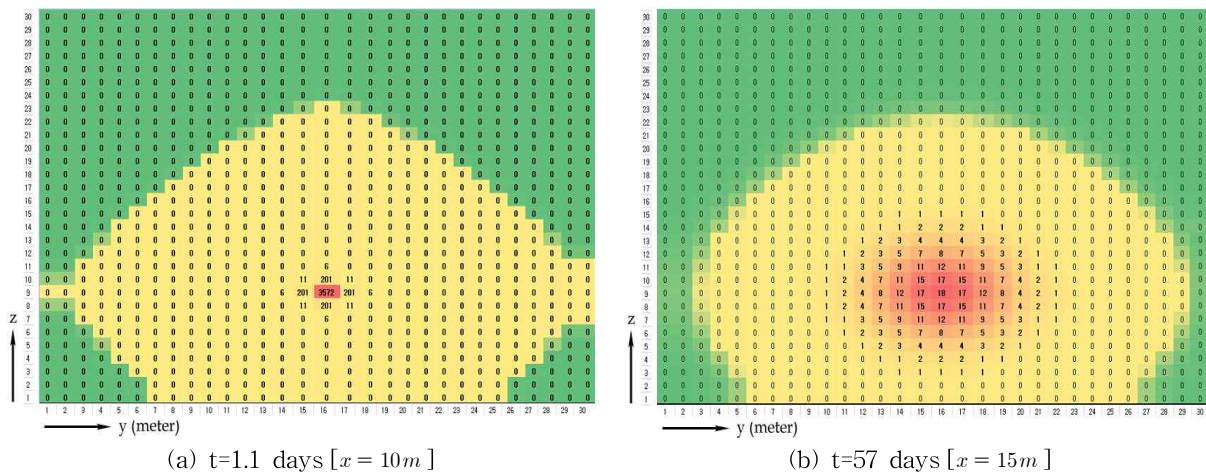


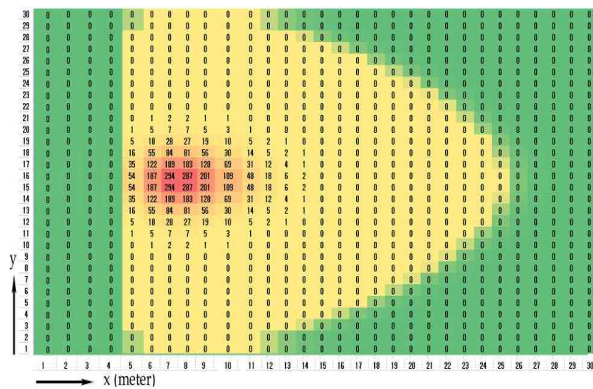
Fig. 12. Concentrations of the Vertical Plane [Case 1 ; $x = 10m$, $x = 15m$]

Table 3. Test-Run (Case 2)

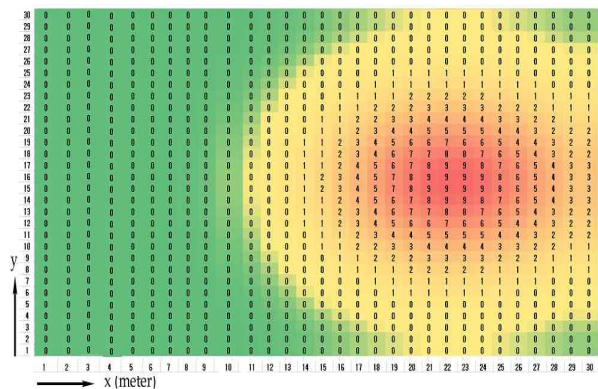
Time (day)	0	24	69	113
① point input (g)	20,000	0	0	0
② boundary input (accumulated)	advection (g)	0	0	0
	diffusion (g)	0	0	0
③ decay (accumulated) (g)	0	2,224	5,784	11,725
④ residual in the control volume (g)	20,000	1,776	14,253	8,702
⑤ ratio (= [③+④]/[①+②])	1.000	1.000	1.002	1.020

Input parameters :
 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1 \text{ m}$; $\Delta t = 0.01 \sim 3 \text{ days}$ (increasing time step)
 convection velocity : $U=0.1 \text{ m/day}$ $V=0, W=0$
 diffusion coefficient : $D_x = D_y = D_z = 0.05 \text{ m}^2/\text{day}$; Peclet number ($= \frac{U \Delta x}{D_x}$) = 2
 decay factor : $\xi = 0.005$: $\alpha = 0.5$ (Crank-Nicolson method)

Boundary Input: 0
 Point Input: initial condition $C(x,y,z,0) = 20,000 \text{ g/m}^3$ at $i = 5, j = 15, k = 26$
 $i = 5, j = 16, k = 26$
 $i = 6, j = 15, k = 26$
 $i = 6, j = 16, k = 26$

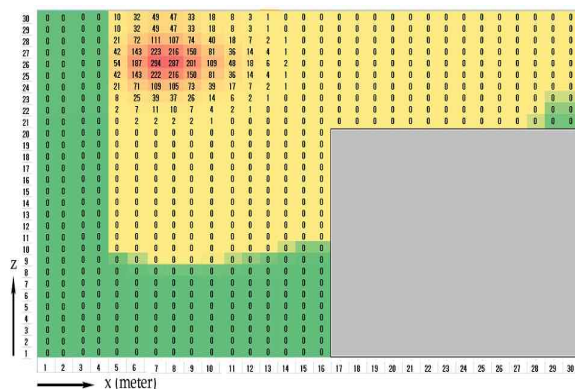


(a) t=24 days

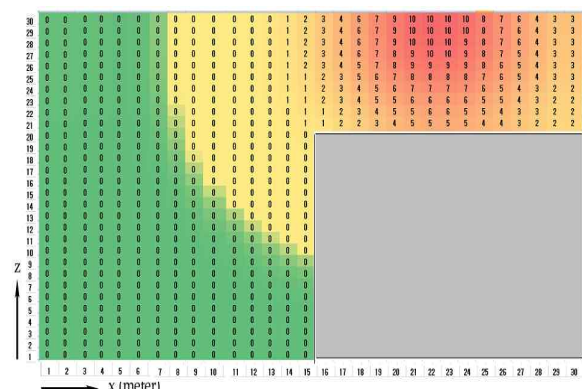


(b) t=113 days

Fig. 13. Concentrations of the Horizontal Plane [Case 2 : z = 25 m]



(a) t=24 days



(b) t=113 days

Fig. 14. Concentrations of the Vertical Plane [Case 2 : y = 15 m]

4. 결론

오염 물질의 이동 현상을 모의하기 위하여, 감쇠항이 있는 3차원 이송-확산 방정식의 수치모형을 구성하고 모형의 검증, 및 수치실험을 수행하였다. 개발된 수치모형은 유한차분 모형으로서, 시간단계 n 과 $n+1$ 에서의 가중치 α 를 포함하는 음해법(implicit finite difference method)과, 반복법인 Gauss-Seidel SOR (successive over relaxation)이 사용되었다.

수치 모형의 검증을 위해서는 그 결과를 단순화된 가정 하에 존재하는 2가지의 해석적인 해와 비교하였다. 먼저 경계면에서 일정한 농도를 유지하는 조건에 대한 경우, Peclet number가 약 20 이하에서는 수치해법에 의한 해는 작은 오차범위 내에서 해석적인 해와 동일함을 보여주었다. 그러나 Peclet number가 20 이상에서는 수치분산(numerical dispersion)이 발생하였고 수치해법에 의한 해를 구하기가 불가능함을 보여주었다. 여기서 Eq. (6)에서의 가중치 α 의 변화에 대한 모형의 거동에 대하여서는 $\alpha=0.5$ 인 Crank-Nicolson 방법이 $\alpha=1$ 인 fully-implicit method (완전 음해법)보다 해석적인 해에 접근함을 보여주었다.

두 번째는 일정량의 질량이 대상지역의 한 점에 투여된 경우이다. 이 경우의 수치모형은 경계면에 일정한 조건이 유지되는 경우보다 Peclet number에 더욱 민감하였다. 즉 Peclet number가 약 5를 경계로 모형의 수치 안정 및 발산이 결정되었다. 한편 가중치 α 에 대한 모형의 반응은 이 경우에도 전자(경계면에 일정한 농도 조건)와 동일하게 Crank-Nicolson 방법이 fully-implicit 방법에 비하여 해석적인 해에 근접하였다.

본 논문에서는 편미분 방정식의 각 항에 관련된 질량 이동량을 산출하는 내용을 포함하여 프로그램을 개발하였다. 즉, 모형의 검증과 실효성의 제고를 위하여 이송, 확산 및 감쇠항 각각에 대한 질량 이동을 산출하여 비교하였다. 그 결과 대부분의 경우 약 3%의 오차범위에서 mass balance가 일치함을 보였으며, 이것은 3차원 수치모형의 불확실성을 고려하여 만족할 만한 결과로 생각된다. 여기서 각 항에 연관된 질량 이동량의 산출은 분석을 위하여 중요한 요소이며, 모형의 수치적 결과를 이해하는 유효한 지침이 될 수 있다.

본 연구에 의해 개발된 3차원 유한차분 수치모형은 이송항이 크지 않은 오염물질의 이동현상(예를 들면 토양 및 지하수계에서의 흐름, 확산, 소멸 및 성장 등)에서, 농도분포의 산출과 질량이동 계산에 유용하게 사용될 수 있을 것으로 사료된다.

감사의 글

이 논문은 2011년도 경원대학교 교내 연구비 지원에 의한 결과임 (과제번호: 2011-MT00668).

참고문헌

- 김영도, 서일원 (2001). "입자의 이산화물분포 모형을 이용한 자연하천의 2차원 이송-확산." **한국수자원학회논문집**, 한국수자원학회, 제34권, 제5호, pp. 499-509.
- 서일원, 송창근 (2007). "2차원 이송분산모형을 이용한 한강 본류 구간에서의 BOD 거동 모의." **대한토목학회논문집**, 대한토목학회, 제27권, 제6B호, pp. 573-581.
- 유명관, 전경수 (1999). "비보전성 오염물질에 대한 종확산 방정식의 수치해법." **한국수자원학회논문집**, 한국수자원학회, 제32권, 제6호, pp. 607-616.
- 이상일, 김대환, 이상신, 유상연 (2006). "강변여과에서 콜로이드 물질과 오염물의 거동에 관한 연구." **한국수자원학회논문집**, 한국수자원학회, 제39권, 제6호, pp. 511-520.
- 이정규, 김주영 (2000). "2차원 이송-확산 방정식의 수치모형." **대한토목학회논문집**, 대한토목학회, 제20권, 제3B호, pp. 351-360.
- Anderson, M.P., and Woessner, W.W. (1992). Applied groundwater modelling-Simulation of flow and advective transport, Academic Press, Inc.
- Baveye, P., and Valocchi, V.A. (1989). "An evaluation of mathematical models of the transport of biologically reacting solutes in saturated soils and aquifers." *Water Resour. Res.*, Vol. 25, No. 6, pp. 1413-1421.
- Bedient, P.B., Rifai, H.S., and Newell, C.J. (1994). Groundwater contamination (Transport and remediation), Prentice-Hall.
- Charbeneau, R.J. (2000). Groundwater hydraulics and pollutant transport, Prentice-Hall.
- Clement, T.P., Peyton, B.M., Skeen, R.S., Jennings, D.A., and Peterson, J.N. (1997). "Microbial growth and transport in porous media under denitrification conditions: experiments and simulations." *J. Contam Hydrol.*, Vol. 24, pp. 269-285.
- Corapcioglu, M.Y., and Haridas, A. (1985). "Microbial transport in soils and groundwater: A numerical

- model." *Adv. Water Resour.*, Vol. 8, pp. 188-200.
- Gupta, S.K., and Tanji, K.K. (1976). "A three-dimensional Galerkin finite element solution of flow through multiaquifers in Sutter basin." *Water Resour. Res.*, Vol. 7, pp. 774-786.
- Istok, J.D. (1989). "Groundwater modeling by finite element method." American Geophysical Union.
- Lee, K-S. (1995). Foundations of theoretical hydraulics with elementary numerical methods, Seoul National University.
- McDonald, M.G., and Harbaugh, A.W. (1991). MODFLOW: A Modular three dimensional finite difference flow model. IGWMC Groundwater modeling Software, International Ground Water Modeling Center.
- Pinder, G.F., and Gray, W.G. (1997). Finite Element Simulation in surface and subsurface Hydrology, Academic Press.
- Richard, M. (2010). Mastering VBA for office 2010. John Wiley and Sons.
- Tan, Y., Gannon, J.T., Baveye, P., and Alexander, M. (1994), "Transport of bacteria in an aquifer sand : Experiments & model simulations." *Water Resour. Res.*, Vol. 30, No. 12, pp. 3243-3252.
- Taylor, S.W., and Jaffe, P.R. (1990a) "Biofilm growth and the related changes in the physical properties of porous medium: 1. Experimental investigation." *Water Resour. Res.*, Vol. 26, No. 9, pp. 2153-2159.
- Sun, N-Z (Translation by Fan, P., and Shi, D.)(1996). Mathematical modelling of groundwater pollution, Springer-Verlag New York Inc., and Geological Publishing House.
- Wang, H.F., and Anderson, M.P. (1982). Introduction to groundwater modelling. W.H. Freeman and Company.
- Waterloo hydrogeologic Inc. (2002). Visual MODFLOW v.3.0 user's manual.
- Waterloo hydrogeologic Inc. (2002). MODFLOW packages reference manual.
- Zysset, A., Stauffer, F., and Dracos, T. (1994). "Modelling of reactive groundwater transport governed by biodegradation." *Water Resour. Res.*, Vol. 30, No. 8, pp. 2423-2434.

논문번호: 11-128	접수: 2011.11.26
수정일자: 2011.12.19	심사완료: 2011.12.19