

수환경 유출 유해화학물질의 추적 및 역추적모형 개발



서 일 원

서울대학교 건설환경공학부
교수
seoilwon@snu.ac.kr



신 동 빈

서울대학교 건설환경공학부
석사과정
shindb@snu.ac.kr



정 성 현

서울대학교 건설환경공학부
박사과정
jsungh@snu.ac.kr



노 효 섭

서울대학교 건설환경공학부
석사과정
hyoddubi1@snu.ac.kr



윤 세 훈

서울대학교 건설환경공학부
박사과정
yunjany85@snu.ac.kr



권 시 윤

서울대학교 건설환경공학부
석사과정
ksy92@snu.ac.kr

1. 머리말

우리나라의 경우 산업의 고도화가 진행됨에 따라 일상생활에 필요한 제품을 만들기 위해 다양한 화학 원료가 사용되고 있다. 그러나 이를 취급하는 사용자의 부주의나 관리장비의 노후화 등으로 인해 유해화학물질이 독성을 가지고 직접 유출되거나 다양한 매체와 반응하여 화재 및 폭발 등의 사고가 빈번하게 발생하고 있다. 특히 수많은 화학공장이 모여 있는 산업단지에서의 사고는 대형사고로 이어져 해

당 사업장뿐 아니라 인근 지역에게까지 큰 피해를 줄 수 있다. 이 중 수환경으로 유출되는 유해화학물질은 주로 무색 무취의 물질들로서 사고가 발생하더라도 초기 발견이 어려워 어류폐사를 발생시키거나 취수장을 거쳐 식수로 유입되는 경우가 발생하기 때문에 이에 대한 대응책의 마련이 필수적이다. 실제로 1991년 페놀 유출사고를 시작으로 2009년 구미공단 '1,4-다이옥산' 유출사고, 2014년 11월 경북 봉화군의 황산유출사고 등 크고 작은 사고가 빈번히 발생하고 있으며 작년 6월에는 대구와 부산의 수돗물에

서 과불화화합물이 검출되기도 하였다, 이 같은 유해화학물질의 수환경 유출사고 시 신속한 초동대처를 통해 피해방지의 골든타임을 놓치지 않는 것이 중요하며, 신속하고 정확한 진행상황 예측을 통한 방재대책 수립이 무엇보다 중요하다고 할 수 있다.

이에 서울대학교의 서일원교수 연구팀은 환경부의 화학사고 대응 R&D 사업의 일환으로 수환경으로 유출된 유해화학물질의 추적 및 발생원 역추적 기술을 개발하는 연구를 수행하고 있다. 2018년 6월부터 2020년 12월까지의 연구기간 동안 시나리오 기반 역추적 모형으로 화학물질사고 발생원과 유출 유해화학물질 정보를 역산정하며, 이 정보를 개발된 1, 2차원 추적모형의 입력자료로 이용한다. 1차원 추적모형으로는 신속한 오염물 추적을 통해 초동대응을 가능케하고, 2차원 추적모형으로는 유출된 유해화학물질의 2차원 혼합거동을 정밀하게 분석하여 사후평가를 통해 미래의 사고에 대한 피해를 최소화하는 기술을 구축하는 것을 목표로 한다.

2. 모형의 개발

본 과제에서 개발하고 있는 요소모형은 수환경으로 유출된 유해화학물질의 신속한 추적을 위한 1차원 하천저장대모형(1D River Storage Model, RSM-1D)과 정확한 예측을 위한 2차원 유해화

학물질 추적모형(2D Contaminant Transport Model, CTM-2DT), 그리고 유해화학물질 발생원 예측을 위한 1차원 역추적모형(1D Inverse Tracking Model, ITM-1D)이다.

2.1 1차원 추적모형

2.1.1 RSM-1D 저장대 모형

RSM-1D에서는 하천 내 오염물질의 이송, 분산 및 지체효과를 고려하여 오염물질의 거동을 모의하는 1차원 저장대 모형(storage zone model)을 이용한다 (그림 1 참조). 저장대모형은 복잡한 자연하천을 본류대(Flow zone)와 저장대(Storage zone)로 단순화하여 해석하며, 본류대와 저장대간의 질량교환은 난류유속변동과 농도차에 의해서만 발생한다고 가정하고 오염물질의 이송과 분산과정을 해석한다(Bencala and Walters, 1983). 1차원 저장대 모형의 해석을 위해서는 기본적으로 네 가지의 저장대 매개변수를 추정하여야 하며 저장대모형의 정확도는 정확한 매개변수 값의 추정에서부터 시작된다고 할 수 있다.

RSM-1D에서는 저장대 모형의 정확도 향상을 위해 오염물의 특성에 따라 흡착과 탈착, 휘발과 생분해 거동을 추가로 모의할 수 있으며 이러한 추가계산 항은 오염물의 거동양상에 따라 분류된 특정값

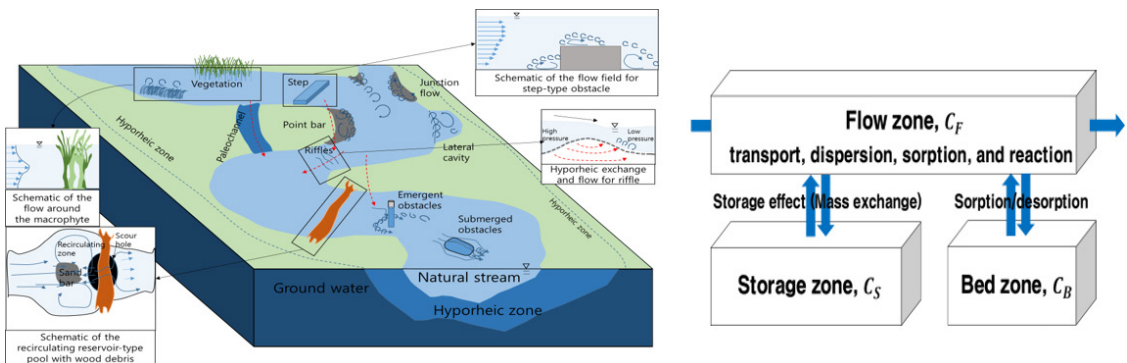


그림 1 하천 저장대 및 RSM-1D모형 개념도(USGS, 1998)

을 기저농도와 현재농도와의 농도차에 곱하여 모의할 수 있도록 한다. RSM-1D는 GIS를 기반으로 한 격자생성 기능을 구현하고, 국립환경과학원에서 구축한 KRF(국립환경과학원, 2015)의 reach file 자료를 이용하여 유속자료를 생성하며, 펄스주입, 질량주입 등 다양한 주입방법 모의가 가능하도록 하여 사용자친화적인 모형의 구축을 목표로 한다.

사용자는 구축된 RSM-1D 모형을 이용하여 유출된 유해화학물질의 거동을 빠르고 정확하게 추적하며, 계산된 시간-농도 곡선을 통해 주요지점에서 기준농도 초과여부를 판단할 수 있다.

2.1.2 RSM-1D 매개변수 예측식 개발

하천저장대모형을 통해 오염물질 혼합거동을 정확하게 예측을 위해서는 올바른 매개변수 값이 제공되어야 한다. 매개변수를 산정하기 위한 방법은 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫 번째는 추적자 실험을 통해 취득된 농도자료와 유량자료를 이용하여 최

적화 방법을 적용해서 저장대 매개변수를 산정하는 방법이며, 두 번째는 경험식을 이용하여 저장대 매개변수를 산정하는 방법이다.

첫 번째 방법의 경우 농도자료 취득을 위해 현장에서 추적자 농도 실험을 수행하여야 한다는 면에서 실무적으로 적용하기 어렵다. 이런 이유로 본 연구에서는 농도 자료를 사용하지 않고 하천의 수리학적·지형적 특성 인자만을 이용하여 저장대모형의 매개변수를 산정하는 예측식을 개발하고자 한다.

해당 예측식을 개발하기 위해서 Cheong et al. (2007)의 연구에서 산정된 저장대 매개변수를 변환하여 본류대 분산계수(K_f), 본류대 면적(A_f), 저장대 면적(A_s), 그리고 저장대 교환계수(α)의 네 가지 저장대 매개변수로 변환하여 식의 제작 및 검증에 사용한다. 하천 단면, 조도, 규모, 그리고 형상으로 인한 저장대에서 물질교환 효과를 나타내는 변수를 결정하기 위해 각 하천의 수리학적·지형적 특성을 대표하는 인자인 수심, 하폭, 유속, 마찰유속, 유

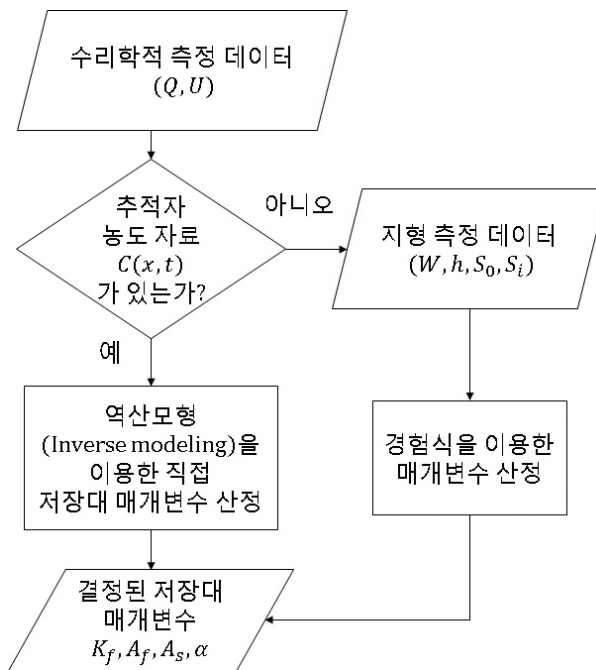


그림 2 저장대모형 매개변수 산정 순서도

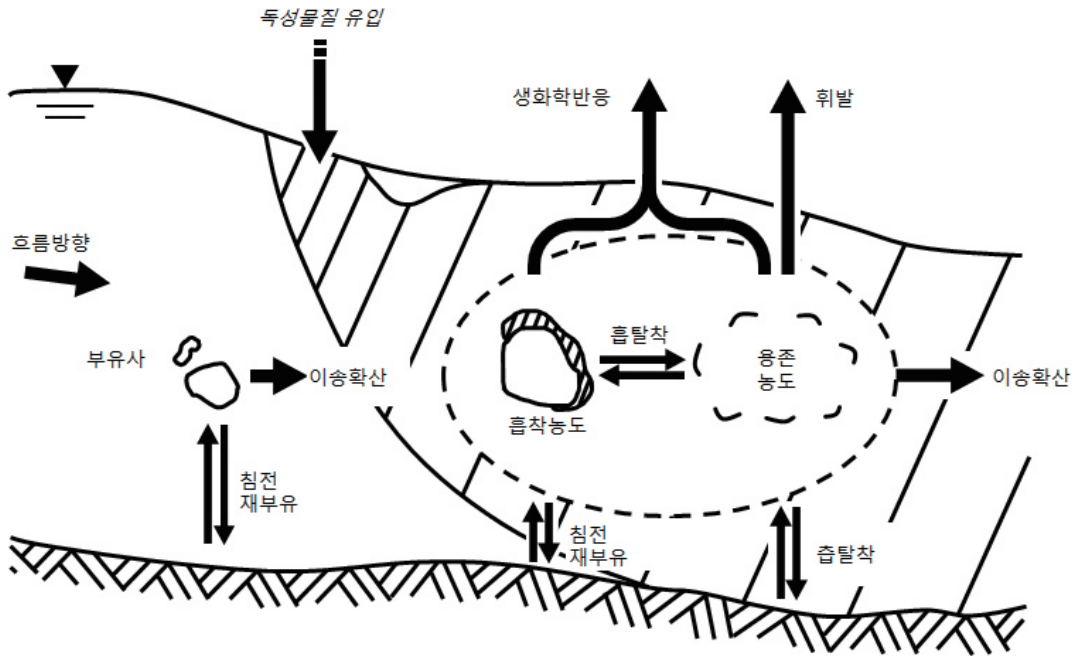


그림 3 CTM-2DT에 흡착된 독성물질의 반응 메커니즘(Thomann et al., 1987)

하거리, 그리고 사행도를 입력변수로 선정했으며 예측식의 범용성을 위해 변수들은 차원해석을 통해 무차원화한다. 예측식의 개발 과정에서 발생할 수 있는 다중공선성과 회귀 이상점 문제를 해결하기 위해 변수 간 상관계수 및 분산팽창계수를 분석하여 변수 결정의 타당성을 검토하며, 선정된 입력변수들을 로버스트 주성분 회귀분석(Robust Principal Component Regression, RPCR) (Verboven and Hubert, 2005)을 적용하여 저장대 매개변수 예측식을 개발한다.

오염물질의 혼합거동에 큰 영향을 미치는 하천 횡단구조물에 의한 국부적인 영향을 고려한 저장대모형 매개변수 예측식 개발을 위해 국내 하천에 가장 많이 설치되어있는 보 모형 실험을 실내 실험실 수로에서 수행하고자 한다. 하천에 설치된 구조물에 의해 발생하는 복잡한 흐름 구조를 시공간적으로 정밀하게 측정하여 규명하고 본류대 및 저장대 영역의 면적을 산정하며 난류성분과 농도의 변동성분을 분석하

여 본류대와 저장대 간의 물질교환계수와 본류대의 종분산계수를 산정한다. 이러한 분석 결과를 바탕으로 높은 상관관계를 지닌 하천의 지형·수리학적 인자 및 하천구조물의 형상인자들을 결정하고 결정된 인자들의 비선형회귀분석을 통해 하천횡단구조물이 있는 경우 사용되는 매개변수 예측식을 개발한다.

개발된 매개변수 예측식은 기존에 제안된 방법과 비교하여 필요한 자료 취득이 용이해 하천저장대모형을 통한 오염물질의 혼합거동 예측을 더욱 신속하고 정확하게 할 수 있을 것으로 기대된다.

2.2 2차원 추적모형

중·대규모 하천 내에 화학물질유출사고가 일어날 경우, 적절한 대응책을 마련하기 위해서는 오염물질의 종방향 확산거동뿐만 아니라, 횡방향 확산거동(이차류, 저장대효과, 반응기작 등에 의한 거동)을 해석해야 하며, 이를 위한 2차원 확산거동모형

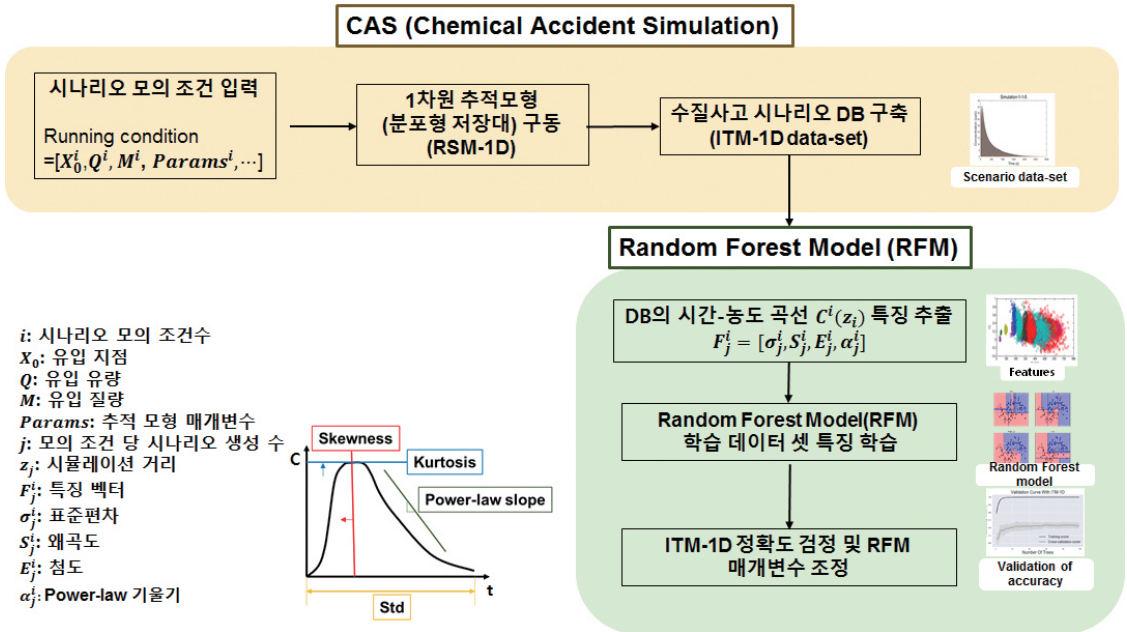


그림 4 ITM-1D 구축 과정 및 시간-농도 곡선 특징

개발이 필요하다(그림 3 참조). 이에 따라 본 과제에서는 서울대에서 기 개발한 2차원 수질해석모형인 CTM-2D(Lee and Seo, 2010)를 발전시켜 유해화학물질의 거동해석에 적합한 CTM-2DT를 개발하고자 한다.

CTM-2DT는 수환경에서의 유해화학질 확산거동을 추적하는 2차원 유한요소 기반 수치모형이다. 유로연장과 하폭이 수심에 비해 큰 국내하천 지형특성을 고려하여 수심 적분된 2차원 이송-확산 방정식을 지배방정식으로 사용하였다.

하천내 오염물질의 거동은 흐름에 따른 이송확산 기작과 물질별 반응기작으로 설명할 수 있는데 흐름에 따른 확산 거동은 흐름모형으로부터 얻어진 유속, 수심과 사용자에 의해 입력된 중·횡분산계수로 해석하며, 물질별 반응기작의 경우 각 물질의 특성에 따라 복잡한 반응기작을 보이므로 각각 모듈을 구축하여 해석해야 한다.

CTM-2DT는 폐놀이나 중금속류와 같은 유해화학물질의 거동해석을 위해 그림 3과 같이 부유사와

화학물질 간의 흡착, 탈착, 휘발 그리고 생화학적반응을 반영한 모형이며 이러한 기작들은 평형 농도와 현재농도와의 농도차에 교환속도 계수를 곱하여 1차원 반응으로 모의 할 수 있도록 한다. 흡탈착 기작의 경우 물질의 특성인 옥탄올-물분배계수를 통해 흡착-용존 농도의 분배계수를 추정하여 평형농도와 교환속도계수를 산정한다. 휘발기작의 경우 유입된 화학물질이 자연에 존재하지 않는다는 가정을 통해 평형농도를 '0'으로 가정하고, 흐름특성(유속, 수심)과 물질특성(확산계수)을 사용하여 교환속도계수를 산정한다. 생화학반응계수 또한 평형농도를 '0'으로 가정하며, 교환속도계수는 물질특성(기존 실험적 연구가 제시한 값)에 따라 결정하게 된다.

CTM-2DT와 부유사거동모형(STM-2D)은 모델의 결과와 해석해와 검증함으로써 프로토타입을 구축한 상태이며, 시험하천 및 실제하천에서 측정된 자료와 비교검증을 하여 범용적인 수치모형 개발을 목표로 하고있다.

2.3. 역추적모형

ITM-1D는 센서를 통해 감지된 수환경 유출 유해 화학물질 정보를 바탕으로 유출지점을 역추적하고 유출질량을 역산정 하는 모형이다. ITM-1D는 신속한 모의를 위해 RSM-1D를 이용한 수질사고 시나리오 기반 DB와 주변 산업단지에서 취급하는 화학물질정보 및 업체의 지리적 정보 기반 DB를 이용한다. ITM-1D를 통해 예측된 유출지점 및 유출질량 정보를 이용하여 사고 시 빠른 초기 대응이 가능하며, 유출 지점에서 1차원 및 2차원 추적모형을 구동하여 유해화학물질의 이동 경로와 농도분포 예측을 통해 취수장 등 주요지점에서 정확한 사고 대응이 가능하다.

ITM-1D는 RSM-1D기반 시나리오 구축 모형 (Chemical Accident Simulator, CAS)과 기계학습 분류모형인 랜덤포레스트모형(Random Forest Model, RFM)으로 이루어져 있다(그림 4 참조). CAS는 RSM-1D를 사용하여 다양한 유입조건(하천유량, 유출지점 및 유출량, 유출 화학물질, 매개변수 등)에 대한 시나리오 모의를 수행하는데, 이 때 병렬 컴퓨팅 기법을 이용하여 신속하게 시나리오 기반 DB를 구축한다. RFM은 의사결정 나무 기반 기계 학습 모형으로, 여러 개의 의사결정 나무를 형성하고 이를 앙상블 학습하여 예측하는 분류 모형이다(Breiman, 2001). RFM은 각 의사결정나무의 노드에서 관측값과 예측값의 불순도를 나타내는 Gini index를 최소화하는 방향으로 최적값을 도출하며, 앙상블 방법으로 인해 자료의 비선형적 관계를 해석함과 동시에 분산이 작은 장점이 있다. 또한, 다양한 데이터 셋에 대해 강건한 모형으로 다양한 수질사고 시나리오를 적용하는 ITM-1D에 적합하다.

CAS로 구축된 수질사고 시나리오 DB는 유입 화학물질별 시나리오의 시간-농도 곡선으로 구성되며, 각 곡선의 특징을 모멘트 법으로 구한 표준편차, 첨도, 왜도 그리고 Power-law 회귀분석을 통해 하천에서 저장대 효과로 인한 체류시간의 특징을 나타

내는 Power-law 기울기로 산출한다. 최종적으로 산출된 시간-농도 곡선의 특징들을 RFM으로 학습하여 예측 모형을 구축한다.

ITM-1D는 지리, 화학적 특징을 반영하기 위해 구축된 화학물질별 유입의심업체 DB를 바탕으로 pH, EC, DO, 수온, 분광 특성 등과 대상 물질과의 상관관계로 유입 화학물질을 예측하고 예상 물질의 취급업체를 경계 조건으로 설정한다.

이 같이 수환경 화학사고시 ITM-1D는 화학물질의 수계에서의 물리적 거동과 반응 그리고 예상유입 지점의 지리적 정보를 고려하여 정확한 예측결과를 제공하며, 향후 수질 보전을 위해 유용하게 사용될 수 있을 것으로 기대된다.

3. 맺는말

상술한 바와 같이 본 과제에서 개발하고 있는 1,2차원 추적모형 및 역추적모형은 수환경 화학사고 시 화학물질의 물리적 거동과 반응 그리고 유입지점의 지리적 정보를 고려하여 예측 도달시간과 확산농도를 제공함으로 의사결정권자들이 화학물질 유출사고에 신속하고 적절한 대응을 할 수 있을 것으로 기대되며, 향후 수질관리 차원에서 또한 유용하게 사용될 수 있을 것으로 기대된다.

4. 감사의 글

이 연구는 환경부 화학사고 대응 환경기술개발사업의 지원에 의하여 연구되었으며 이에 감사드립니다 (201800196001).



참고문헌

- 국립환경과학원(2015). 하천망분석도(KRF) 기반 통합환경정보시스템 구축 최종보고서
- Bencala, K. E. and Walters, R. A. (1983). Simulation of solute transport in a mountain pool‐riffle stream: A transient storage model. *Water Resources Research*, 19(3), 718–724.
- Cheong, T. S., Younis, B. A., & Seo, I. W. (2007). Estimation of key parameters in model for solute transport in rivers and streams. *Water resources management*, 21(7), 1165–1186.
- Lee, M. E. and Seo, I. W. (2010). 2D finite element pollutant transport model for accidental mass release in rivers. *KSCE Journal of Civil Engineering*, 14(1), 77–86.
- Thomann, R. V., Mueller, J. A., & a Mueller, J. (1987). *Principles of surface water quality modeling and control* (Vol. 12, p. 644). New York: Harper & Row.
- USGS (1998). One-dimensional transport with inflow and storage(otis): A solute transport model for stream and rivers. *Water-Resources Investigations Report 98 – 4018*
- Verboven, S. and Hubert, M. (2005). LIBRA: a MATLAB library for robust analysis. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, 75(2), 127–136.
- Breiman, L. (2001). Random forest, *Machine Learning*, 45(1), 5–32