

비평형 흡착을 고려한 유선 시뮬레이션

절대인(jdi@geofluid.snu.ac.kr), 최종근(johnchoe@snu.ac.kr),
박광원(wonii@geofluid.snu.ac.kr)

서울대학교 지구환경시스템공학부

<요약문>

최근 수년간 유선 시뮬레이션은 연산 속도의 효율성과 수치 분산으로 인한 오차를 감소시킬 수 있는 장점으로 인해 많은 연구가 이루어졌으며 오염물의 거동을 모사하는데 많이 사용되고 있다. 이 연구에서는 유선 시뮬레이션의 기법을 이용하여 1차의 비평형 흡착을 고려한 오염물 거동 수치 모사를 수행하였다. 1차의 비평형 흡착의 경우 흡착 계수에 따라 오염물의 이동 속도가 민감하게 반응하는 것을 확인할 수 있었고 흡착 계수의 값이 커질수록 오염의 전파 지연 효과가 크게 나타남을 알 수 있었다. 1차의 비평형 흡착의 경우에 평형 흡착과는 달리 오염이 진행되면서 오염물의 농도를 감소시키는 영향을 나타내었으며 이로 인하여 오염물이 더 이상 진행하지 못하는 제로라인을 형성하게 하였다. 이 제로라인은 흡착 계수의 값이 클수록 탈착 계수의 값이 작을수록 오염원에 가깝게 형성되었다.

key word: 유선 시뮬레이션, 비평형 흡착, 제로라인

1. 서론

최근 수년간 유선 시뮬레이션(streamline simulation) 기법은 저류층 시뮬레이션 분야에서 오일의 회수량을 예측하는데 널리 사용되어 왔다(Datta-Gupta and King, 1995; Thiele et al., 1996). 유선 시뮬레이션 기법은 다른 수치 해석 기법에 비해서 수치 분산을 거의 발생시키지 않는 장점이 있기 때문에 이송이 지배적인 유동에서 주로 사용되어 왔다. 유선 시뮬레이션 기법은 연산 효율이 기존의 유한차분모델에 비해서 10-1000배 뛰어나기 때문에 수백만 격자를 가지는 3차원 저류층 모델의 개발을 가능하게 하였다(Batycky et al., 1997; King and Datta-Gupta, 1998). 유선 시뮬레이션은 수치해를 구함에 있어서 기존의 유한 차분법이나 유한 요소법과는 달리 시간 간격이나 격자 편향성에 의한 영향을 받지 않는다(Batycky et al., 1997).

유선 시뮬레이션 기법은 이송 현상을 모사하는데 널리 쓰이고 있는 입자 추적 기법과 많은 유사점을 가지고 있다. 두 기법 모두 유동장을 기존의 수치 해석 방법으로 구하고 용질 이동이 유동을 따라 일어나는 것으로 파악한다. 입자 추적법에서는 한 격자의 용질 농도가 그 격자로 이동된 용질 입자의 개수로서 파악되는 반면에 유선 시뮬레이션 기법에서는 1차원의 이송 방정식의 수치해를 유선을 따라서 구하고 이를 역매핑을 함으로써 각 격자의 농도를 구하는 차이점이 있다(Crane and Blunt, 1999).

Crane과 Blunt(1999)는 다공질 매질에서의 물질이동 모사에 유선 시뮬레이션 기법을 적용하여 유선 시뮬레이션 기법의 신속함과 효율성을 제시하였으며 기존의 모델에 의한 모사 결과와 비교하여 유선

시뮬레이션의 정확성을 검증하였다. 이 모델에서는 분산이 고려되지 않은 한계점이 있다. Jang 등 (2002)은 유선을 따라 발생하는 이송과 분산의 상대적 비율로 정의되는 이송-분산비(advection-dispersion ratio)를 도입하여 분산을 고려한 모델을 개발하였다. 균열내에서의 유동 실험 결과와 유선 시뮬레이션의 결과를 비교하여 잘 일치함을 보였다.

기존의 유선 시뮬레이션 연구는 이송과 분산 외에 흡착, 분해와 같은 현상을 고려하였지만 이는 대부분 평형 현상이라고 가정하고 이루어졌다. 흡착의 경우에는 다공질 매질과 용질이 충분히 반응할 시간이 주어지는 경우에는 평형의 조건을 만족하지만 유속이 빠른 경우 평형상태에 이르지 못하고 비평형 상태로 흡착과 탈착이 이루어지게 된다. 이와 같은 비평형 현상을 고려한 유선 시뮬레이션 연구는 미비한 실정이다.

이 연구에서는 비평형 흡착을 고려한 유선 시뮬레이션 모델을 개발하였으며 흡탈착 계수값에 대한 용질 이동의 민감도 분석을 수행하였다. 비균질 투수계수를 가지는 매질에서 용질의 전파 양상을 시각화하고 그 결과를 시간에 따라 분석하였다.

2. 본 론

1) 방법

· 유선 시뮬레이션

유선 시뮬레이션의 기본 개념은 다차원의 유체 유동을 유선상의 1차원 유동의 집합으로 분해하여 해석하는 것이다. 주어진 시스템에서의 압력장을 구하고 구한 압력장에서 Darcy 방정식을 이용하여 속도장을 구하여 유선 입자를 추적한다. 각 유선상에서 1차원 이동 문제의 해를 구하고 이를 원래 유동 영역으로 역매핑함으로써 구하고자 하는 특성값을 얻게 된다. 이를 구체적으로 기술하면 다음과 같다.

· 유선입자추적(Streamline tracing)

Pollock(1988)의 방법을 이용하여 주어진 시스템에서의 유선입자의 경로를 추적하였다. 먼저 주어진 시스템에서 압력장을 구하고 구한 압력장에 대해 Darcy 방정식을 적용하면 속도장을 구할 수 있다. 각 격자 경계에서의 속도 성분을 알고 격자내에서는 속도 성분이 선형적으로 변한다고 가정하면 격자 내 임의의 지점 x 에서의 속도는 식(1)과 같다.

$$v_x = v_{x,0} + m_x(x - x_0) \quad (1)$$

여기서, x_0 는 좌표의 원점, $v_{x,0}$ 는 x_0 에서의 속도이다. 속도의 변화량 m_x 를 식(2)와 같이 정의하면 입자의 격자 내 상주시간(residence time)은 식(3)과 같이 구해진다. 마찬가지로 방법으로 y 방향으로의 상주시간을 식 (4)와 같이 구할 수 있다.

$$m_x = \frac{v_{x,\Delta x} - v_{x_0}}{\Delta x} \quad (2)$$

$$\Delta t_{e,x} = \frac{1}{m_x} \ln \left[\frac{V_{x,0} + m_x(x_e - x_0)}{V_{x,0} + m_x(x_i - x_0)} \right] \quad (3)$$

$$\Delta t_{e,y} = \frac{1}{m_y} \ln \left[\frac{V_{y,0} + m_y(y_e - y_0)}{V_{y,0} + m_y(y_i - y_0)} \right] \quad (4)$$

여기서, $v_{x,\Delta x}$ 는 식 $x_0 + \Delta x$ 에서의 속도, x_e, y_e 는 출구 지점의 위치, x_i, y_i 는 입구 지점의 위치를 나타낸다. (3), (4)로부터 구한 값 중 최소값이 입자가 격자에 머문 상주시간이 되고 그 입자는 그 방향으로 빠져나가게 되며 빠져나간 위치는 식 (5), (6)으로 얻어진다.

$$x_e = \frac{1}{m_x} [V_{x,i} \exp(m_x \Delta t_e) - V_{x,0}] \quad (5)$$

$$y_e = \frac{1}{m_y} [V_{y,i} \exp(m_y \Delta t_e) - V_{y,0}] \quad (6)$$

· 좌표 변환(Coordinate transformation)

유선입자추적을 하고 나면 각 유선에 대해서 1차원의 이동 방정식을 풀어야 한다. 이를 위하여 원좌표계로부터 시간과 유선상의 영역으로 좌표 변환이 이루어지는데 이때 TOF(Time Of Flight)의 개념이 이용된다. TOF는 식 (7)과 같이 정의되며 이는 유선이 입의의 격자에까지 도달하는데 걸리는 총시간을 의미하며, 유선이 지나온 모든 격자의 상주시간을 합하여 그 값을 얻는다.

$$\tau = \int_0^s \frac{1}{v} d\xi = \sum_{i=1}^{N_s} \Delta t_{ei} \quad (7)$$

· 유선을 따라 1차원 수치해의 매핑

이송과 1차의 비평형 흡착을 고려한 1차원 용질 이동의 지배방정식은 식 (8), (9)와 같다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial S}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (8)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = k_1 C - k_2 S \quad (\text{Alexander, M., 1999}) \quad (9)$$

여기서, $C(\text{mg/L})$ 는 액상 농도이고, $S(\text{mg/kg})$ 는 흡착된 농도, $\rho_b(\text{kg/L})$ 는 체적 밀도(bulk density), θ 는 공극률, $v(\text{cm/s})$ 는 속도, $k_1(\text{L/kg})$ 은 흡착 계수, $k_2(\text{unitless})$ 는 탈착 계수이다. 식 (8)에 대해서 좌표 변환을 하면 식 (10)를 얻을 수 있다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial S}{\partial t} = - \frac{\partial C}{\partial \tau} \quad (10)$$

식 (9)와 (10)을 차분화하여 수치해를 구하면 식 (11)를 이용하여 각 격자의 특성값을 계산할 수 있다.

$$C_{grid} = \frac{\sum q_i \Delta \tau_i C_i(\tau)}{\sum q_i \Delta \tau_i} \quad (11)$$

2) 결과

설정된 시스템은 그림 1과 같은 투수계수(permeability) 분포를 가지며, 좌측 하부 (10,10)에 주입정이 존재하고 우측상부 (100,100)에 생산정이 존재하며 압력이 각각 100 psi, 20 psi이다. 공극을 포함한 토양의 밀도는 2.7 g/cc 이며, 공극률은 0.3이다. 경계에서의 유동은 일어나지 않는 것으로 가정하였으며 (10,10)에 오염원이 존재하며 그 농도는 10 mg/L로 일정한 것으로 가정하였다. 그림 2는 주어진 시스템에서 압력장의 계산 후에 얻어진 유선입자의 분포를 보여준다 유선의 정의에 의해 유선이 조밀하게 분포한 지역은 유동이 빠른 지역을 의미한다.

탈착 계수가 0.01(unitless)로 일정한 경우에 흡착 계수를 0.005, 0.01, 0.02 L/kg으로 증가시키면서 시뮬레이션을 수행하였다. 그림 3에서와 같이 용질 이동이 흡착 계수에 따라 상당히 민감하게 반응함을 알 수 있다. 흡착 계수가 커질수록 용질 이동의 지연효과가 크게 나타남을 알 수 있으며 투수 계수가 큰 지역으로 오염물의 이동이 주로 발생함을 알 수 있다. 평형흡착의 경우에는 용질의 이동이 지연되는 효과만을 나타내는 반면에 1차의 비평형 흡착의 경우에는 용질의 이동이 진행됨에 따라 흡착에 의해서 용질의 농도가 감소되는 양상을 보였다.

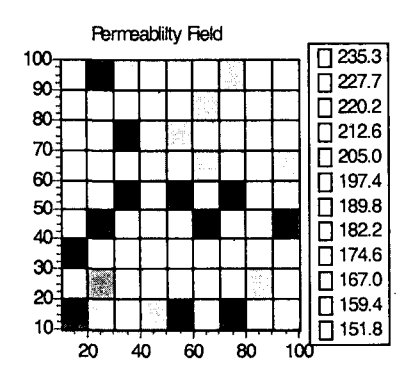


그림 1 Permeability field(md)

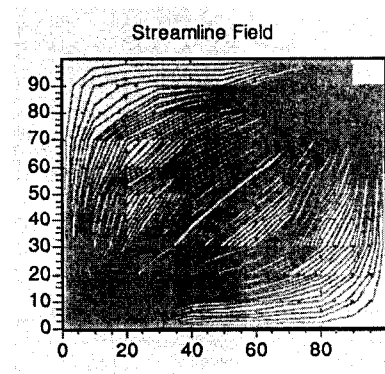
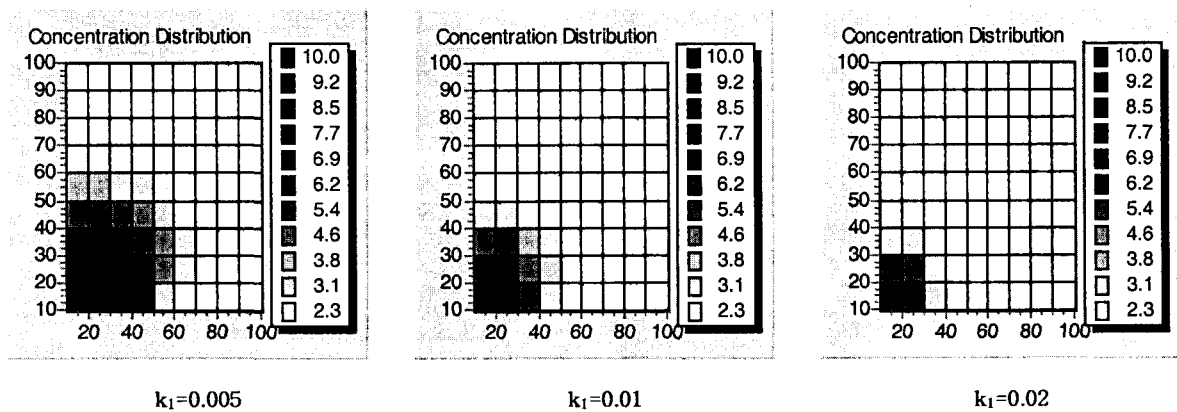


그림 2 Streamline field



$k_1=0.005$

$k_1=0.01$

$k_1=0.02$

그림 3 $k_2=0.01$ 에 대해 $k_1=0.005, 0.01, 0.02$ 로 변할 때의 용질 이동 모사 결과(100일후)

그림 4는 그림 1의 필드에 대해서 $k_1=0.001$, $k_2=0.1$ 일 때 100, 200, 500일 후의 시뮬레이션 결과이다. 그림 4에서 200일의 용질의 이동이 100일의 경우에 비해서 더 많이 진행되었음을 알 수 있다. 반면에 500일의 경우에는 200일의 경우와 거의 유사한 농도 분포를 보이는데 이는 용질의 이동이 진행되면서 1차의 비평형 흡착상은 물질계에서 용질의 농도를 감소시키는 작용을 하고 또한 흡착되는 양과 탈착되는 양이 평형을 이루게 되므로 용질이 더 이상 진행되지 못하는 제로라인을 형성하기 때문이다. 이러한 제로라인은 k_1 이 클수록 k_2 가 작을수록 오염원으로부터 가까이 형성이 되었다.

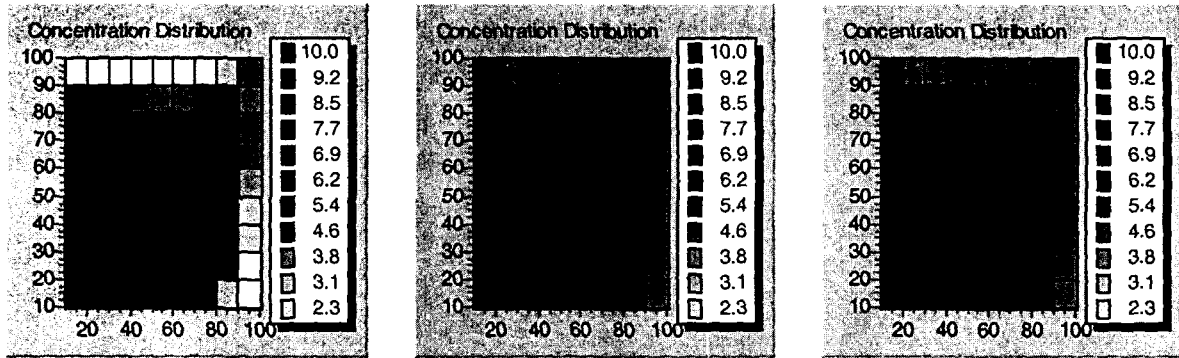


그림 4 $k_1=0.001$, $k_2=0.1$ 일 때 용질 이동 모사 결과(100일, 200일, 500일후)

3. 결론

- 1차의 비평형 흡착을 고려할 경우 흡착 계수가 커짐에 따라 용질 이동의 지연효과가 크게 나타났다.
- 평형 흡착과 달리 1차의 비평형 흡착의 경우 용질이 이동하면서 용질의 농도가 감소하였으며 이는 제로라인을 형성할 수 있게 하였다.
- 흡착 상수가 클수록 탈착 계수가 작을수록 제로라인을 형성하는 위치가 오염원에 가까이 나타났다.

사 사

본 연구는 21세기 프론티어 연구개발사업인 수자원의 지속적 확보기술개발 사업단의 연구비 지원(3-2-1)에 의해 수행되었습니다.

참고문헌

1. Alexander, M., 1999, Bioremediation and Bioremediation(2nd edition), Academic Press, New York. pp. 91-94.
2. Batycky, R.P., Blunt, M.J., and Thiele, M.R., 1997, "A 3D Field Scale Streamline-Based Simulator", SPE Reservoir Engineering, Vol. 12, pp. 246-254.
3. Crane, M.J. and Blunt, M.J., 1999, "Streamline-Based Simulation of Solute Transport", Water Resources Research, Vol. 35, No. 10, pp. 3061-3077.

4. Datta-Gupta, A. and King, M.J., 1995, "A Semianalytic Approach to Tracer Flow Modeling in Heterogeneous Permeable Media", *Advanced in Water Resources*, Vol. 18, pp. 9-24.
5. Jang, M., Lee, J., Choe, J. and Kang, J.M., 2002, "Modeling of Solute Transport in a Single Fracture Using Streamline Simulation and Experimental Validation", *Journal of Hydrology*, Vol. 261, Issues 1-4, pp. 74-85.
6. King, M.J. and Datta-Gupta, A. 1998, "Streamline Simulation: A Current Perspective", *In situ*, Vol. 22, No. 1, pp. 91-117.
7. Pollock, D.W., 1988, "Semi-analytical Computation of Pathlines for Finite-Difference Models", *Ground Water*, Vol. 26, No.6, pp. 743-750.
8. Suthersan, S.S., 1996, *Remediation Engineering; Design Concept*, Lewis Publishers, Boca Raton. pp. 149-150.
9. Thiele, M.R., Batycky, R.P., Blunt, M.J., and Orr, F.M. Jr., 1996, "Simulating Flow in Heterogeneous Media Using Streamtubes and Streamlines", *SPE Reservoir Engineering*, Vol. 10, pp. 5-12.