

불균질도가 높은 대수층내에서의 비에르고딕 용질이동에 관한 수치 시뮬레이션

서 병 민*

충남대학교 기초과학 연구소

Numerical Simulations of Non-ergodic Solute Transport in Strongly Heterogeneous Aquifers

Byong-Min Seo*

Research Institute of Basic Sciences, Chungnam National University

균일한 지하수 유속을 가진 불균질한 등방성 대수층 내에서 정류상태로 흐르는 지하수의 흐름과 함께 이동해가는 비반응성 오염물질에 대한 삼차원 몬테카를로 시뮬레이션이 시행되었다. 로그-정규적으로 분포되어 있는 수리전도도 $K(x)$ 가 임의장으로 설정되었으며 시뮬레이션 동안에 발생할 수 있는 불확실성을 감소하기 위해 여러 가지 방법들이 시도되었다. 3,200개 오염운동에 대한 이차공간적률의 집합적평균 $\langle S_{ij}'(t, l) \rangle$, 그리고 오염운동중심분산 $R_{ij}'(t, l)$ 이 각기 다른 세가지 불균질도 $\sigma_y^2=1.0, 2.5$ 및 5.0 에 대해서 시뮬레이션 되었으며 또한 각기 다른 크기의 평균속도에 수직방향인 선형초기오염원 ($l=1.5$ 및 10)에 대해서 입차추적이 행하여 졌다. 시뮬레이션된 무차원 종적률들은 일차 근사법에 의한 비에르고딕 이론적 결과와 비교적 잘 일치하나 시뮬레이션된 무차원 횡적률들은 일차근사법에 의한 이론적 결과들과 잘 일치하지 않으며 특히 불균질도가 큰 대수층에 대해서 그리고 초기 선형오염원의 크기가 작은 무차원 횡이차공간적률에 대해서 뚜렷하게 저평가 했다. 시뮬레이션된 집합적 평균이차적률은 에르고딕 상태에 도달하지 못했으며 일차근사법에 의한 에르고딕 용질이동에 관한 횡이차공간적률은 시뮬레이션 결과를 저평가 했음을 보인다.

주요어 : 지하수, 등방성, 불균질 대수층, 몬테카를로 시뮬레이션, 비에르고딕 이동

Three dimensional Monte-Carlo simulations of non-ergodic transport of a non-reactive solute plume by steady-state groundwater flow under a uniform mean velocity in isotropic heterogeneous aquifers were conducted. The log-normally distributed hydraulic conductivity, $K(x)$, is modeled as a random field. Significant efforts are made to reduce the simulation uncertainties. Ensemble averages of the second spatial moments of the plume, $\langle S_{ij}'(t, l) \rangle$ and plume centroid variances, $R_{ij}'(t, l)$ were simulated with 3200 Monte Carlo runs for three variances of log K, $\sigma_y^2 = 1.0, 2.5$, and 5.0 , and three dimensionless lengths of line plume sources ($l = 1.5$ and 10) normal to the mean velocity. The simulated second spatial moment and the plume centroid variance in longitudinal direction fit well to the first order theoretical results while the simulated transverse moments are not fit well with the first order results. The first order theoretical results definitely underestimated the simulated transverse second spatial moments for the aquifers of large σ_y^2 and small initial plume sources. The ergodic condition for the second

* Corresponding author : byongseo@hotmail.com

spatial moments is far from reaching, and the first order theoretical results of the transverse second spatial moment of the ergodic plume slightly underestimated the simulated moments.

Key words : groundwater, isotropic, heterogeneous aquifer, Monte-Carlo simulation, non-ergodic transport

서 언

각종 오염원으로부터 유출된 오염원(contaminant plume)은 지하수의 흐름을 따라 이동하며 대수층의 특성 또는 지하수 유속의 변화에 따라 그 크기나 모양이 불규칙하게 변화한다. 오염지대 정화시, 오염원의 크기 및 농도분포 같은 자료들이 절대적으로 요구되나 매질의 불균질성에 따른 오염원의 불규칙한 분포는 지하수학자들이 오염원을 다룸에 있어 직면하는 가장 어려운 점들 중의 하나이다. 따라서 불균질한 지질단위 내에서의 용질의 이동에 관한 정확한 예측방법에 대해서는 1970년대 이후에 활발히 연구되어 오고 있지만 여전히 지속적으로 연구해야 할 중요한 과제 중의 하나로 남아있다.

오염원(contaminant plume) 이동을 다루는 방법 중의 하나는 대수층의 가장 중요한 특성 중의 하나인 수리전도도를 임의장(random field)으로 다루는 것이다. 따라서 지하수의 유속, 수두분포 및 오염물질의 농도분포 또한 임의의 자료들이 될 것이다. 불균질한 대수층에서의 오염원의 이동에 대한 이론을 정립하기 위해 1980년대 이후 많은 추계론적 이론들이 발표되어 왔으나(e.g. Kitanidis, 1988; Dagan, 1990, 1991; Rajaram and Gelhar, 1993; Cushman et al., 1994; Zhang and Nueman, 1995; Selroos, 1995; Zhang et al., 1996; Zhang and Zhang, 1997; Zhang and Federico, 1998, 2000; Federico and Zhang, 1999) 대부분의 이론들이 일차근사법, 낮은 불균질도, 또는 에르고딕상태에 국한되어 연구 발표되어 왔다. Kitanidis(1988)는 최초로 비에르고딕 오염원의 불균질한 대수층 내에서의 이동에 관한 연구를 수행하였으며 오염원의 농도분포에 관한 일, 이차 적률(moment)을 유도해냈다. Dagan(1990)은 라그랑즈(Lagrangian) 접근에 의해 그들 적률들을 두 개의 입자들의 이동과 관계 해석하였는데 그 후에 자신의 이론적인 결과를 2차원 불균질 등방성 대수층에 관한 해석에 이용하였고, 일차근사법에 의한 입자 이동의 실분산계수(effective dispersion coefficients)에 관한 식을 발표하였다. 그 후에 Dagan (1991)의 이론은 Zhang et al.(1996)에 의해 전점근적국면(preasymptotic regime)으로 확장되었으

며 그들은 시간종속적 이차공간적률(time-dependent second spatial moments)과 그에 따른 일차근사법에 의한 비에르고딕 오염원에 관한 실분산(effective dispersivity)을 체계적으로 평가하였다.

이들 이론들이 야외에서 실제 적용되기 위해서는 검증단계를 거쳐야 하는데 검증을 위한 방법은 크게 두가지 예를 들 수 있다. 첫째, 야외추적자 시험을 통해 검증하는 방법인데 이 방법은 몇 가지 이유, 실험대상이 되는 대수층에 대한 아주 자세한 조사가 선행되어야 하며, 많은 비용을 필요로 하며, 그리고 넓은 범위에서의 추적자 시험은 아주 긴 시간을 요한다는 점등으로 인해 실제 비효율적 일 수 있다. 그럼에도 불구하고 현재까지 몇몇 실험(e.g. Mackay et al., 1986; Killey and Moltyaner, 1988; Garabedian and Leblanc, 1991; Hubbard et al., 2001)들이 행해진 바 있다.

둘째, 대체적인 방법으로 수치시뮬레이션(numerical simulation)이 그것이다. 근래 들어 컴퓨터의 계산속도가 급속히 증가하고 슈퍼 컴퓨터의 이용이 용이해짐에 따라 학자들에게 관심의 대상이 된 방법으로 앞에서 언급한 야외 추적자 시험이 가지고 있는 단점을 보완할 수 있는 방법이기도 하나 현재까지 행해졌던 수치시뮬레이션들은 대부분 에르고딕 이동(e.g. Rubin, 1990; Chin and Wang, 1992; Salandin and Fiorotto, 1993; Burr et al., 1994; Selroos and Cvetkovic, 1994; Cvetkovic et al., 1996; Dentz et al., 2002; Hassan et al., 2002), 적은 수(백개 미만)의 임의장(e.g. Tompson and Gelhar, 1990; Quinodoz and Valocchi, 1990; Burr et al., 1994), 이차원적(e.g. Zhang and Lin, 1998; Hassan et al., 1998, 2002), 또는 중분산(e.g. Quinodoz and Valocchi, 1990; Salandin et al., 1991; Salandin and Fiorotto, 1993)에 국한되어 행하여졌으며 이들 모두 낮은 불균질도에 대한 국한된 연구가 진행되어져 왔다. 최근에 Zhang and Seo(2004)는 1600개의 임의대수층을 이용하여 정사각형 모양의 초기오염원으로부터 기원된 종적률과 횡적률을 시뮬레이션 한 바 있다.

이 연구에서는 불균질도가 더 높은 대수층에서의 오염원의 이동에 대해, 그리고 더 많은 수의 임의대수층을 이용하여 수치시뮬레이션을 시행하고, 그에 따른 결과들을 이용해 이미 발표되었던 이론들을 평가,

검증하는데 목적을 두고 있다. 이 연구에서는 세가지 각기 다른 불균질도 당 각각 3200개의 2차원 임의대수층을 통해 이동되는 비에르고딕 오염원에 대한 시뮬레이션을 시행하고 그 오염원에 대한 이차공간적률(second spatial moment)과 중심점분산도(plume centroid variance)가 계산되었다. 그 계산 결과들은 특히 오염원의 중, 횡적인 분산도와 같은 이론적 결과를 평가하는데 사용되었다.

이론적 배경

불균질한 대수층내에서의 오염원의 이동에 관한 추론적 접근시(Dagan, 1989; Cushman, 1990; Gelhar, 1993)에는 수리전도도의 불균질성으로 인해 그 공간적인 적률, 특히 오염원의 이차공간적률이 그 오염원의 크기와 확장정도를 평가하기 위하여 사용되어져 왔다. Kitanidis(1988) 와 Dagan(1990)은 비에르고딕 오염원 이동에 대한 초기값이 l 인 이차공간적률의 집합적평균(ensemble average of second spatial moment), $\langle S_{ij}''(t, l) \rangle$, 에르고딕 오염원의 이차공간적률 또는 입자 하나에 대한 이동분산도(one particle displacement covariance), $X_{ij}''(t)$, 그리고 오염원 중심 분산도(plume centroid variance), $R_{ij}''(t, l)$, 등의 관계식을 정의하였고, 국부적인 소규모 분산을 무시할 경우엔 이들의 관계는 다음과 같다.

$$Z_{ij}''(t, l) \equiv \langle S_{ij}''(t, l) \rangle - S_{ij}''(0', l) = X_{ij}''(t) - R_{ij}''(t, l) \quad (1)$$

여기서 " " 은 무차원, $\langle \rangle$ 은 집합적평균, 그리고

$S_{ij}''(0', l)$ 은 $S_{ij}''(t, l)$ 의 초기값이며 시뮬레이션 동안 일정한 값을 갖는다. 입방형 오염원($l_1' l_2' l_3'$)으로부터 이동된 오염원은 균일한 평균속도 하에서 일차근사법에 의해 다음과 같이 표현될 수 있다(Zhang et al., 1996).

$$R_{ij}''(t, l) = \frac{8\delta_{ij}\sigma_y^2}{l_1^2 l_2^2 l_3^2} \int_0^t \int_0^{l_2} \int_0^{l_3} (l_1 - x)(l_2 - y)(l_3 - z)(t - \tau) [u'(\tau + x, y, z) + u'(\tau - x, y, z)] d\tau dx dy dz \quad (2)$$

$$[u'(\tau + x, y, z) + u'(\tau - x, y, z)] d\tau dx dy dz$$

여기서 σ_y^2 은 임의 대수층의 $\log K$ u'_{ij} ($=u'_{ij}/\mu^2$)은 무차원 속도공분산, μ^2 는 지하수 유속, 그리고 δ_{ij} 는 크로네커델타(Kronecker delta)이다. 식 (2)에서 $R_{ij}''(t, l)$ 와 그에 따른 오염원의 분산에 관하여 Zhang et al. (1996)이 여러가지 선형 및 입방형 오염원에 대해서 이론적으로 평가한 바 있다.

이 연구에서는 평균흐름의 수직방향인 횡방향 $(0, l_2, 0)$ 의 선형 오염원(Fig. 1)에 대해서 몬테카를로 시뮬레이션을 이용한 실험적인 평가를 시도 하였으며 이 오염원에 대한 이론적인 일차근사법에 의한 방정식은 (2)으로부터 Zhang et al.(1996)이 유도하였다. 평균흐름방향의 수직방향이며 횡방향 $(0, l_2, 0)$ 인 선형오염원의 경우엔 (2)의 식이 식 (3)와 같이 표현된다.

$$R_{ij}''(t, l) = \frac{R_{ij}}{L^2} = \frac{4}{l_2^2} \int_0^t \int_0^{l_2} (l_2 - y)(t - \tau) u'_{ij}(\tau, y, 0) d\tau dy \quad (3)$$

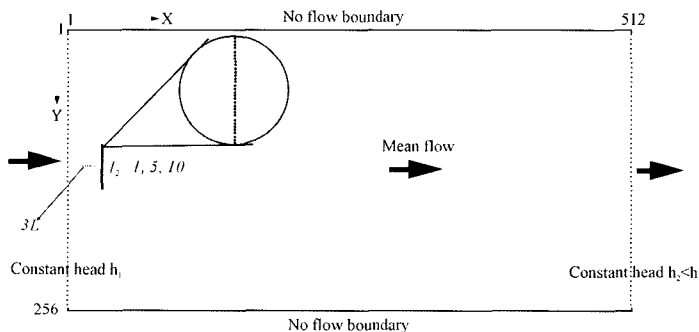


Fig. 1. Schematic diagram showing the location of the initial plume source and boundary conditions of the domain.

여기서 L 은 대수층내 K 의 상관거리(correlation length)이며 이들 일차근사법에 의해 계산된 이차적률들의 결과와 시물레이션에 의해 계산된 결과가 서로 비교 검토되었다.

몬테카를로 시물레이션

몬테카를로 시물레이션은 모델영역디자인, 임의장 산출, 수두분포계산, 입자추적 그리고 통계계산 등의 다섯 단계로 구성된다. 이 연구를 위해 설정된 시물레이션 영역은 Fig.1에 보여진 바와 같이 x, y 방향으로 512×256 개의 셀들로 이루어진 2차원 유한차분격자이며 각 셀들은 x, y 방향의 단위길이(unit length)를 갖는다. 고정수두경계조건이 영역의 좌측 끝과 우측 끝에 위치하고 no-flow 경계조건이 영역의 y 방향 양 끝에 위치하여 전체적으로 x 방향으로의 균일한 지하수흐름을 갖는다. $\log K$ 의 상관거리는 5로, 각 단위격자의 길이는 0.2L과 같다. 시물레이션시 이용된 대수층들은 불균질하나 지하수가 영역의 좌측에서 우측으로 균일한 평균속도로 흘러 통계학적 등방성(statistical isotropy)을 보이는데 Bellin et al. (1992)의 연구 결과에 의하면 설정된 경계조건효과에 의해 영향을 받는 영역은 경계로부터 3L 이하이기 때문에 이 연구에서는 오염물질 입자들이 이동하며 머무는 내부영역을 따로 설정하였다. 내부영역의 한계는 각 경계로부터 3L의 거리에 위치하며 이는 정류상태를 기준으로 산출된 일차근사법의 결과와 비교 검토하기 위한 것이다.

시물레이션의 다음 단계는 $\log K$ 의 평균값과 분산도, 그리고 등방지수공분산함수(isotropic exponential covariance function)를 이용하여 임의장을 산출하는 것이며 이 연구에서는 세가지 각기 다른 등급의 불균질도(i.e. $\sigma_y^2=1.0, 2.5$ 및 5.0)에 대해서 시물레이션이 행해졌다.

산출된 임의 대수층들을 대상으로 정류상태의 지하수흐름 방정식(4)을 이용하여 block centered finite difference scheme에 의한 각 절점에서의 수두를 계산했다. 수두계산은 3차원 유한차분 지하수 모델링 프로그램으로 널리 사용되고 있는 MODFLOW(Hills, 1990)가 사용되었다.

$$\nabla \cdot [K(x)\nabla h] = 0 \quad (4)$$

수두계산후 다음단계는 입자추적(particle tracking)이다. 입자추적을 위해서 잘 알려져 있는 입자추적 코드인 MODPATH(Pollock, 1994)가 이용되었다. 세가지 각기 다른 길이($l=1, 5$, 그리고 10)의 선형 비반응성(non-reactive) 오염원이 시물레이션 되었다. 선형오염원은 평균 흐름방향에 수직방향(y 방향)으로 나열되었으며 경계효과(Ababou et. al., 1989)를 피하기 위해 좌측 고정수두경계에서 3L(15셀) 만큼의 거리에 위치했다. 초기 오염원은 길이에 따라 각기 다른 수의 오염물질 입자들로 구성되며 각 셀에 5개씩의 입자들을 가진다. 초기 오염원으로부터 기원된 오염원은 지하수의 흐름을 따라 이동해 가며 그 오염원을 형성하는 입자들이 추적되었다. 입자들의 추적은 하나의 입자라도 내부영역을 벗어나게 되면 중지되도록 설정하였다. m 개의 임의대수층에 대해 입자추적이 시행된 후, 각 임의대수층에 대해서 오염원 중심위치, $R_{ij}^m(t, \Delta)$ ($i, j=1, 2$), 와 이차공간적률, $S_{ij}^m(t, \Delta)$, 이 계산되었으며 계산과정은 다음과 같다.

$$R_i^m(t, \Delta) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j^{m, p}(t) \quad (5)$$

$$S_{ij}^m(t, \Delta) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [x_j^{m, p}(t) - R_i^m(t, \Delta)][x_j^{m, p}(t) - R_j^m(t, \Delta)] \quad (6)$$

여기서, $x_j^{m, p}(t)$ 는 m 번째 임의 대수층에서의 t 시간 경과 후 p 번째 입자의 위치를 의미하며 N 은 총 오염물질 입자수를 지시해 준다. M 은 시물레이션에 이용된 총 임의대수층의 수이며 이 연구는 각기 다른 세 등급의 불균질도($\sigma_y^2=1.0, 2.5$ 및 5.0)에 대해서 3,200 개의 서로 다른 임의대수층이 이용되었다. 오염원 중심의 평균값, $\langle R_i(t, \Delta) \rangle$, 오염원들의 평균이차공간적률, $\langle S_{ij}(t, \Delta) \rangle$, 그리고 오염원 중심공분산, $R_{ij}(t, \Delta)$ 은 식 (7), (8) 및 (9)에 의해서 계산되었다.

$$\langle R_i(t, \Delta) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M R_i^m(t, \Delta) \quad (7)$$

$$\langle S_{ij}(t, \Delta) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M S_{ij}^m(t, \Delta) \quad (8)$$

$$R_{ij}(t, \Delta) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M [R_{ij}^m(t, \Delta) - \langle R_{ij}(t, \Delta) \rangle][R_{ij}^m(t, \Delta) - \langle R_{ij}(t, \Delta) \rangle] \quad (9)$$

일단 $\langle S_{ij}(t, \Delta) \rangle$ 과 $R_{ij}(t, \Delta)$ 이 계산되면, 에르고딕 오염원의 이차공간공분산, $X_{ij}(t)$,이 적률들 간의 관계식 (1)에 의해 얻어질 수 있다.

모델평가

몬테카를로 시뮬레이션 동안에는 여러가지 오차가 발생할 수 있다. 그중 첫 번째는 임의장 산출동안에 발생할 수 있는 난수생성기(random number generator)에 의한 오차를 생각해 볼 수 있다. 이 연구에서 사용된 난수생성기는 Robin et. al.(1993)에 의해 발표되었으며 Burr et. al.(1994)에 의해 최초로 3차원 이방성대수층에 대한 시뮬레이션에 이용되었다. 기존에 사용되었던 몇 가지 난수 생성기들이 통계학적으로 입력자료와 출력자료가 같지 않은 경우가 있었기 때문에 (Dagan, 1995; Sudicky and Naff, 1995) 이 연구에서는 난수 생성기에 대한 검토가 선행되었다. 입력자료에서 임의대수층의 log K에 대한 상관거리는 5 이고, log K 값들에 대한 분산도는 1.0, 2.5 그리고 5.0이었으며, 출력결과에서도 모든 임의대수층에 대해서 log K에 대한 상관거리가 5, 그리고 log K에 대한 분산도는 각각 1.0, 2.5 그리고 5.0로 입력 값들과 출력 값들이 잘 일치하였다. 세 가지 다른 log K의 분산도에 대한 시뮬레이션된 변동도(variogram)가 Fig. 2(심벌)에 표시되었으며 시뮬레이션된 변동도들은 지수모델변동도(곡선), $\gamma_V = \sigma_V^2 [1 - \exp(-3r/\lambda)]$, 와 잘 일치함을 보이고 있다.

두 번째로 생각할 수 있는 오류의 근원은 방정식을 푸는 과정 중에 생기는 오차를 들 수 있다. 각 셀에서의 수두는 선적인 방정식을 풀어감으로써 얻어지는데 지하수유동방정식의 수치해는 버림오차(rounding off error)와 단절오차(truncation error)를 포함하고 있다. 따라서 수치오차가 클수록 수두해가 덜 정확하고, 오염원 입자의 위치를 부정확하게 하고 그들의 공간적분을 부정확하게 하는 부정확한 속도분포를 갖게 한다. 질량평형(mass balance)이나 수리량(water budget)이 전체적인 수치해의 만족도를 지시해준다. 반복적해법(iterative solver)을 이용함에 있어서 수치해의 정확도는 반복과정동안에 모든 결절점(node)에서의 변화할 수 있는 수두의 최대절

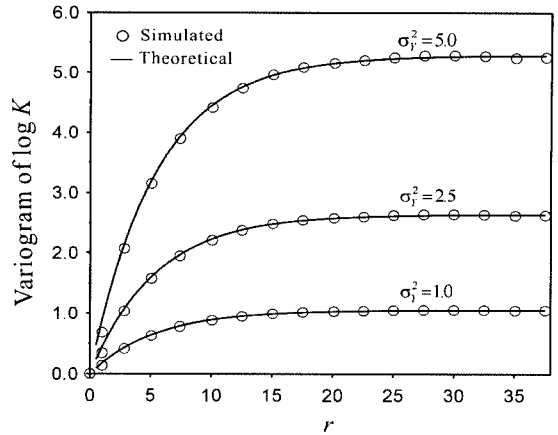


Fig. 2. The simulated (the open circles) and theoretical (the curves) variogram of log hydraulic conductivity, log K, as a function of the separation distance, r.

대값 수렴조건(convergence criterion), ϵ 에 의해 결정된다. 만약 너무 큰 수렴조건이 사용된다면 반복계산은 해에 충분히 가까운 근사값에 도달하기 전에 멈추게 된다. Zhang and Lin(1998)의 실험결과와 같이 정확한 이차공간적률, 특히 횡방향의 적률을 얻기 위해서는 아주 작은 수렴조건을 이용해야 한다($\epsilon=10^{-6}$). 따라서 이 연구에서 행한 모든 시뮬레이션에서 수렴조건, $\epsilon=10^{-6}$ 이 사용되었으며 이에 따른 모든 임의대수층에서의 질량균형 오류는 0.1% 이하이다.

몬테카를로 시뮬레이션 오류의 세 번째 근원은 충분치 못한 수의 임의대수층을 이용함으로써부터 기인될 수 있다. Zhang and Seo(2004)는 시뮬레이션에 필요한 임의대수층의 수, M을 알아보기 위해서 적률들이 안정될 때까지 M을 증가시키며 관찰한 결과 종방향의 적률은 안정되기 위해서 최소 800개 이상의 임의대수층이 필요하며 횡방향으로의 적률은 1600개 이상의 임의대수층이 필요함을 밝힌 바 있다. 따라서 이 연구에서는 종, 횡방향의 적률들을 안정시키기 위해 각 불균질도에 대한 3,200개의 임의 대수층을 사용하였다.

시뮬레이션 결과와 토론

시뮬레이션은 서로 다른 세가지 오염원 크기($l'_2=1.5$ 및 10)와 세가지 서로 다른 불균질도등급($\sigma_V^2=1.0, 2.5$ 및 5)에 대해서 행해졌으며 산출된 무차원 종평균이차공간

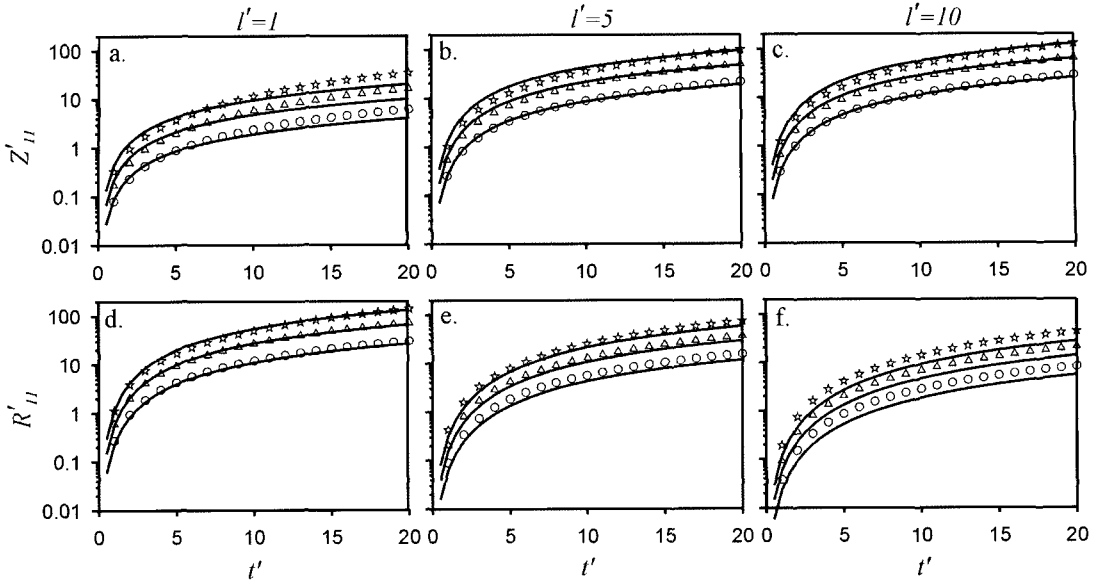


Fig. 3. The simulated dimensionless longitudinal second spatial moments, $Z_{11}(t, l)$ and the dimensionless plume centroid variance, $R_{11}(t, l)$ as functions of the dimensionless time, t , for $\sigma Y=1.0$ (the circles), 2.5 (the triangles), and 5.0 (the stars); a) $Z_{11}(t, l)$ for $l=1$; b) $Z_{11}(t, l)$ for $l=5$; c) $Z_{11}(t, l)$ for $l=10$; d) $R_{11}(t, l)$ for $l=1$; e) $R_{11}(t, l)$ for $l=5$; f) $R_{11}(t, l)$ for $l=10$. The curves are the corresponding first order solutions obtained by Dagan (1988).

적률, $Z'_{11}(t, l)$ 과 무차원 종오염운중심분산, $R'_{11}(t, l)$ 이 무차원 시간 (t)에 대해서 표시되었다 (Fig. 3). 또한 그에 따른 Dagan(1988) 그리고 Zhang et. al.(1996)에 근거한 일차근사법에 의한 이론적 결과가 곡선으로서 Fig. 3에 함께 표시되었다. Fig. 3에서는 다음과 같은 주목할 점들이 관찰된다. 첫째, 모든 세 가지 등급의 불균질도에서, 시뮬레이션된 종적률 $Z'_{11}(t, l)$ 과 $R'_{11}(t, l)$ 은 이론적 결과와 잘 일치됨을 보이고 있다. 둘째로, 시뮬레이션된 $Z'_{11}(t, l)$ 와 $R'_{11}(t, l)$ 는 Fig. 3의 여섯 도표에서 모두 σ_Y^2 이 증가함에 따라 함께 증가하며 이는 대수층이 더 불균질 할수록 오염운은 더 넓게 퍼지고 오염운의 중심점에 대한 불확실성이 커짐을 의미하는 것이다. 셋째, 고정된 σ_Y 에서는, 예를 들면 $\sigma_Y=5.0$ 에서, 시뮬레이션된 $Z'_{11}(t, l)$ 은 무차원시간이 증가함에 따라 증가하며 시뮬레이션된 $R'_{11}(t, l)$ 은 무차원 초기오염원의 크기가 증가함에 따라 감소함을 보인다. 달리 말하면, 초기오염원의 크기가 증가할수록 비에르고딕 오염운의 퍼짐($Z'_{11}(t, l)$)은 증가하며 오염운중심의 분산도($R'_{11}(t, l)$)는 감소함을 의미한다. 마지막으로,

이 연구를 위한 시뮬레이션에서 $Z'_{11}(t, l)$ 는 에르고딕상태에 도달하지 못하였다. 비록 $l_2=1, 5$, 및 10로 증가함에 따라 $R'_{11}(t, l)$ 는 감소하는 경향을 보이지만 Fig. 3f에서의 $R'_{11}(t, l)$ 는 Fig. 3c의 $Z'_{11}(t, l)$ 과 비교해볼 때 여전히 작지 않은 값을 가진다.

Fig. 4는 전체적으로 Fig. 3과 비슷해 보이나 시뮬레이션된 무차원 횡적률, $Z'_{22}(t, l)$ 와 $R'_{22}(t, l)$ 에 관한 결과이다. $Z'_{22}(t, l)$ 는 횡이차공간적률이며 $R'_{22}(t, l)$ 는 횡중심분산을 의미한다. 횡이차공간적률, $Z'_{22}(t, l)$,는 종적률들에 대한 시뮬레이션결과와는 달리 초기선형오염원의 크기, l , 가 작은 경우에 일차근사법에 의한 이론적 결과와 잘 일치하지 않으며 초기선형오염원의 크기가 증가함에 따라 이론적 결과에 근접하게 된다. 이는 일차근사법에 의한 이론이 초기선형오염원의 크기가 작은 경우 횡이차적률에 대해서 현저히 저평가 했음을 의미하는 것이며 대수층의 분산도가 커질수록 그 차이는 더 크게 나타난다. 횡중심분산, $R'_{22}(t, l)$,는 횡이차적률에 비해 이론적 결과와 비교적 잘 일치하며 Fig. 3에서와 비슷한 몇

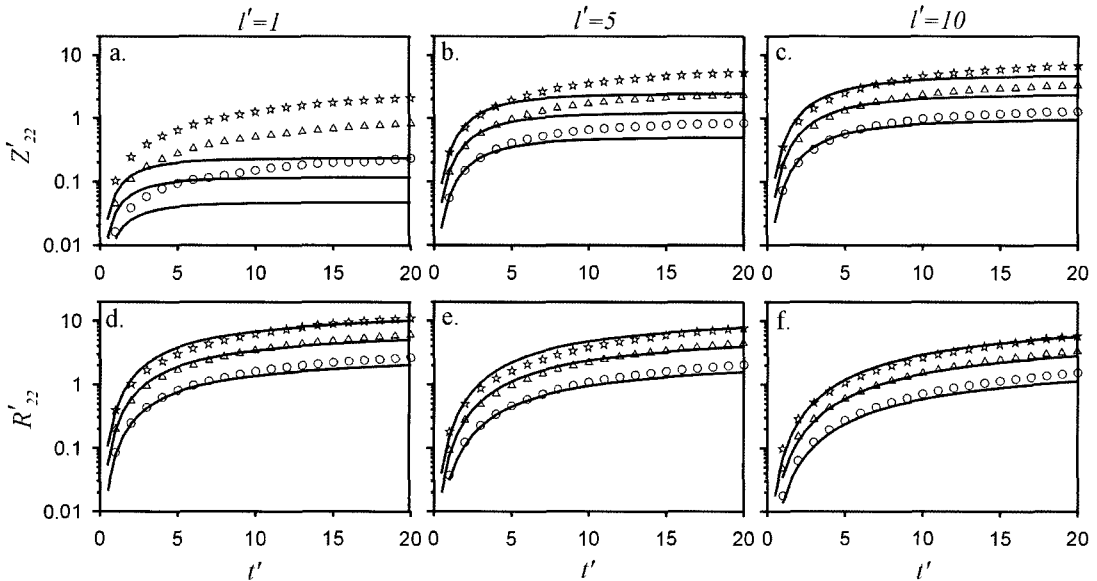


Fig. 4. The simulated dimensionless horizontal transverse second spatial moments, $Z_{22}(t, l)$ and the dimensionless plume centroid variance, $R_{22}(t, l)$ as functions of the dimensionless time, for $\sigma^2_Y=1.0$ (the circles), 2.5 (the triangles), and 5.0 (the stars); a) $Z_{22}(t, l)$ for $l=1$; b) $Z_{22}(t, l)$ for $l=5$; c) $Z_{22}(t, l)$ for $l=10$; d) $R_{22}(t, l)$ for $l=1$; e) $R_{22}(t, l)$ for $l=5$; f) $R_{22}(t, l)$ for $l=10$. The curves are the corresponding first order solutions obtained by Dagan (1988).

몇 결과들이 관찰되고 있다: 1) σ^2_Y 이 증가할수록 $Z'_{22}(t, l')$ 와 $R'_{22}(t, l')$ 는 증가한다; 2) l' 이 증가할수록 $Z'_{22}(t, l')$ 는 증가하고 $R'_{22}(t, l')$ 는 감소한다; 3) $Z'_{22}(t, l')$ 는 에르고딕상태에 상당히 도달하지 못하였다.

에르고딕 오염원의 무차원이차공간적률 또는 단일입자 이동분산, $X'_{ij}(t)$ ($i, j=1, 2, 3$)가 Fig. 5에 표시되었다. $X'_{ij}(t)$ 는 단일입자의 이동에 관한 적률이기 때문에 $Z'_{ij}(t, l')$ 나 $R'_{ij}(t, l')$ 와는 달리 초기 오염원의 크기에 따라 변화하지 않는다. 따라서 각각의 σ^2_Y 에 대하여 세 개의 다른 크기의 오염원으로부터 얻어진 값이 거의 같은 세 쌍의 시뮬레이션 결과가 얻어져야 한다. Fig. 5에서 심벌은 시뮬레이션 결과이며 곡선은 그에 따른 이론적 결과이다. Fig. 5에서는 같은 σ^2_Y 값을 갖는 시뮬레이션 결과들이 거의 같은 위치에 표시되는데 이는 앞에서 언급된 바와 같은 이유의 결과이며 또한 시뮬레이션의 이론적 타당성을 뒷받침해주는 결과이기도 하다.

시뮬레이션된 무차원 단일입자종이동분산, $X'_{11}(t')$ (Fig. 5a)과 무차원 단일입자횡이동분산,

$X'_{22}(t')$ (Fig. 5b)는 세가지 다른 등급의 σ^2_Y 에 대해서 모두 일차근사법에 의한 이론적 결과(Dagan, 1988)와 비교적 잘 일치한다. 그러나 횡이차적률에서는 무차원시간이 증가할수록 시뮬레이션 결과와 이론적 결과가 약간 차이를 보이는 경향이 있는데 이는 Zhang and Seo(2004)의 결과와 일치하는 것이다. Fig. 5에서 보여지는 결과에 의하면, Dagan의 일차근사법에 의한 이론은 종적률 $X'_{11}(t')$ 에 대해서 상당히 정확한 근사값을 제공하고 있음을 결론지을 수 있으며 이 결과는 이전의 몇몇 연구(e.g. Barry et al., 1988; Rubin, 1990; Chin and Wang, 1992; Bellin et al., 1992; Zhang and Lin, 1998; Zhang and Seo, 2004)에서의 결과와 일치하는 것이다. 그러나 Fig. 5b에서 보여진 바와 같이, 일차근사법에 의한 이론은 높은 등급의 불균질도를 가진 대수층에서의 긴 이동시간 후에 대한 횡적률들에 대해서 저평가 했음을 알 수 있다. 이 결과는 Rubin(1990), Zhang and Lin(1998), Hassan et al.(2002) 그리고 Zhang and Seo(2004)에서 행해졌던 시뮬레이션 결과와 일치하는 점이다. 그리고 Fig. 5b에 의하면 시뮬레이션된 $X'_{22}(t')$ 가 시간이 더 흐른 후에는 일정한 기울기를 가질 것으로 생각되는데 이는 Attinger et al.(2002)의 추계론적 연구결과와 일치하는 것이다.

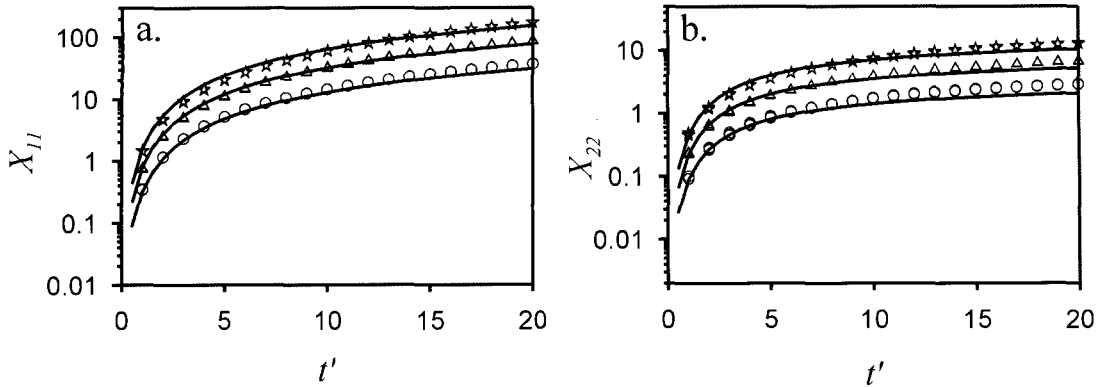


Fig. 5. The simulated dimensionless second spatial moments of an ergodic plume or the one particle displacement variances, $X_{ij}(t)$, as functions of the dimensionless time, t , for $\sigma_Y=1.0$ (the circles), 2.5 (the triangles), and 5.0 (the stars); a) $X_{11}(t)$; b) $X_{22}(t)$. The curves are the corresponding first order solutions obtained by Dagan (1988).

요약 및 결론

평균 지하수 유속이 μ 인 높은 등급의 불균질도를 가진 등방성 대수층 내에서 정류상태로 흐르는 지하수의 흐름과 함께 이동해가는 비반응성 오염물질에 대한 2차원 몬테카를로 시뮬레이션이 시행되었다. 시뮬레이션 동안에 발생할 수 있는 불확실성을 감소하기 위해 여러 가지 방법들이 시도되었으며 로그-정규적인 분포를 가진 수리전도도 $K(x)$ 가 임의장으로 설정되었는데 그 타당성 또한 확인되었다. 3200 오염원들에 대한 이차공간적률의 집합적평균 $\langle S_{ij}'(t', l) \rangle$ ($i, j=1, 2$), 그리고 오염원 중심분산 $R_{ij}'(t', l)$ 이 각기 다른 세가지 불균질도 $\sigma_Y=1.0, 2.5$ 및 5.0 에 대해서 시뮬레이션 되었으며 또한 각기 다른 크기의 평균속도에 수직방향인 선형초기오염원 ($l=1, 5$ 및 10)에 대해서 입자추적이 행하여 졌다. 시뮬레이션 결과에 근거하여 다음과 같은 주된 결론을 얻을 수 있다:

1. 시뮬레이션된 $Z_{ij}'(t', l)$ 와 $R_{ij}'(t', l)$ 는 σ_Y 이 증가할수록 증가하며 초기오염원의 크기 l 이 증가할수록 $Z_{ij}'(t', l)$ 는 증가하고 $R_{ij}'(t', l)$ 는 감소한다. $Z_{ij}'(t', l)$ 는 종방향과 횡방향 모두 에르고딕상태에 도달하지 못하였다.

2. 세가지 다른 등급의 σ_Y 에 대해서 시뮬레이션된 무차원 이차공간적률, $X_{11}'(t', l)$, 무차원 종오염원중심분산, $R_{11}'(t', l)$ 과 횡오염원중심분산, $R_{22}'(t', l)$

는 일차근사법에 의한 비에르고딕 이론적 결과와 비교적 잘 일치함을 보이나 시뮬레이션된 무차원 횡이차공간적률, $Z_{22}'(t', l)$ 는 초기선형오염원의 크기, l 가 작은 경우에 일차근사법에 의한 이론적 결과와 잘 일치하지 않으며 초기선형오염원의 크기가 증가함에 따라 이론적 결과와의 차이가 감소하여 서로 근접하게 된다. 이는 일차근사법에 의한 이론이 초기선형오염원의 크기가 작은 경우 횡이차적률에 대해서 현저히 저평가 했음을 의미하는 것이다.

3. 시뮬레이션된 무차원 단일입자종이동분산, $X_{11}'(t')$ 과 무차원 단일입자횡이동분산, $X_{22}'(t')$ 는 세가지 다른 등급의 σ_Y 에 대해서 모두 일차근사법에 의한 이론적 결과(Dagan, 1988)와 비교적 잘 일치한다. 그러나 횡이차적률에서는 무차원시간이 증가할수록 시뮬레이션 결과와 이론적 결과가 약간 차이를 보이는 경향이 있는데 이는 일차근사법에 의한 이론이 높은 무차원시간에 대해서 저평가 했음을 의미하는 것이다.

참고문헌

Ababou, R., McLaughlin, D., Gelhar, L.W. and Tompson, A.F.B., 1989, Numerical simulation of three-dimensional saturated flow in randomly heterogeneous porous media, *Transp. Porous Media*, 4, 549-565.
 Attinger, S., Dentz, M. and Kinzelbach, W., 2002, Exact Transversal Macro Dispersion coefficients

- for transport in heterogeneous porous media, *ACTA Universitatis Carolinae-Geologica*, 46, 2/3, 117-119.
- Bellin, A., Salandin, P. and Rinaldo, A., 1992, Simulation of dispersion in heterogeneous porous formations: statistics, first order theories, convergence of computations, *Water Resour. Res.*, 28, 9, 2211-2227.
- Barry, D., Coves, A.J. and Sposito, G., 1988, On the dagan model of solute transport in ground-water application to the Borden site. *Water Resour. Res.*, 24, 10, 1805-1817.
- Burr, D.T., Sudicky, E.A. and Naff, R.L., 1994, Nonreactive and reactive solute transport in three-dimensional heterogeneous porous media: Mean displacement, plume spreading, and uncertainty, *Water Resour. Res.*, 30, 3, 791-815.
- Chin, D.A. and Wang, T., 1992, An investigation of the validity of first order stochastic dispersion theories in isotropic porous media, *Water Resour. Res.*, 28, 6, 1531-1542.
- Cushman, J.H., 1990, *Dynamics of Fluids in Hierarchical Porous Media*, Academic. San Diego, Calif.
- Cushman, J.H., Hu, B.X. and Ginn, T.R., 1994, Nonequilibrium statistical mechanics of pre-asymptotic dispersion, *J. Stat. Phys.*, 75, 859-878.
- Cvetkovic, V., Cheng, H. and Wen, X.H., 1996, Analysis of non-linear effects on tracer migration in heterogeneous aquifers using Lagrangian travel time statistics, *Water Resour. Res.*, 32, 6, 1671-1680.
- Dagan, G., 1988, Time-dependent macrodispersion for solute transport in anisotropic heterogeneous aquifers, *Water Resour. Res.*, 24, 9, 1491-1500.
- Dagan, G., 1989, *Flow and Transport in Porous Formations*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany.
- Dagan, G., 1990, Transport in heterogeneous porous formations: Spatial moments, ergodicity, and effective dispersion, *Water Resour. Res.*, 26, 6, 1281-1290.
- Dagan, G., 1991, Dispersion of a passive solute in non-ergodic transport by steady velocity fields in heterogeneous formations, *J. Fluid Mech.*, 233, 197-210.
- Dagan, G. 1995, Comment on "Nonreactive and reactive solute transport in three-dimensional heterogeneous porous media: Mean displacement, plume spreading, and uncertainty" by T.D. Burr, E.A. Sudicky, and R.L. Naff., *Water Resour. Res.*, 31, 5, 1439-1441.
- Dentz, M., Kinzelbach, H., Attinger, S. and Kinzelbach, W., 2002, Temporal behavior of a solute cloud in a heterogeneous porous medium, 3. Numerical simulations, *Water Resour. Res.*, 38, 23-1-13.
- Federico, V.D. and Zhang, Y.K., 1999, Solute transport in heterogeneous porous media with long-range correlations, *Water Resour. Res.*, 35, 10, 3185-3192.
- Garabedian, S.P., Leblanc, D.R., Gelhar, L.W. and Celia, M.A., 1991, Large-scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Code, Massachusetts. 2. Analysis of Spatial moments for a non-reactive tracer, *Water Resour. Res.*, 27, 5, 911-924.
- Gelhar, L.W., 1993, *Stochastic Subsurface Hydrology*, Prentice-Hall. EnglewoodCliffs, New Jersey.
- Hassan, A., Cushman, J.H. and Delleur, J.W., 1998, A Monte Carlo assessment of eulerian flow and transport perturbation models, *Water Resour. Res.*, 34, 1143-1163.
- Hassan, A., Andricevic, R. and Cvetkovic, V., 2002, Evaluation of analytical solute discharge moments using numerical modeling in absolute and relative dispersion frameworks, *Water Resour. Res.*, 38, 1-1-8.
- Hill, M.C., 1990, Preconditioned Conjugate Gradient 2 (PCG2), A computer program for solving ground-water flow equations, U.S.G.S. Water Resources Investigations Report, 90,4048.
- Hubbard, S., Chen, J., Peterson, J., Majer, E.L., Williams, K.H., Swift, D.J., Mailloux, B. and Rubin, Y., 2001, Hydrogeological characterization of the South Oyster vacterial transport site using geophysical data, *Water Resour. Res.*, 37, 10, 2431-2456.
- Killey, R.W.D. and Moltyaner, G.L., 1988, Twin lake

- tracer tests: setting methodology, and hydraulic conductivity distribution, *Water Resour. Res.*, 24, 10, 1585-1612.
- Kitanidis, P.K., 1988, Prediction by the method of moments of transport in a heterogeneous formation, *Jour. Hydrology*, 102, 1-4, 453-473.
- Mackay, D.M., Freyberg, D.L., Roberts, P.V. and Cherry, J.A., 1986, A natural gradient experiment in a sand aquifer, 1. Approach and overview of plume movement, *Water Resour. Res.*, 22, 2017-2030.
- Pollock, D.W., 1994, User's guide for MODPATH/MODPATH-PLOT, Version 3: A particle tracking post-processing package for MODFLOW, The U.S. Geological Survey finite-difference ground-water flow model, U.S. Geological Survey, Open-File Report, 94-464.
- Quinodoz, H.A.M. and Valocchi, J., 1990, Macrodispersion in heterogeneous aquifers: Numerical experiments. In: Molyaner, G. (ed.) International conference and workshop on transport and mass exchange processes in sand and gravel aquifers: field and modeling studies, AGU, Ottawa, Ont., Canada.
- Rajaram, H. and Gelhar, L.W., 1993, Plume scale-dependent dispersion in heterogeneous aquifer, 1. Lagrangian analysis in a stratified aquifer, *Water Resour. Res.*, 29, 9, 3249-3260.
- Robin, M.J.L., Gutjahr, A.L., Sudicky, E.A. and Wilson, J.L., 1993, Cross-correlated random field generator with direct Fourier transform method, *Water Resour. Res.*, 29, 7, 2385-2397.
- Rubin, Y., 1990, Stochastic modeling of macrodispersion in heterogeneous porous media, *Water Resour. Res.*, 26, 1, 133-141.
- Salandin, P., Rinaldo, A. and Dagan, G., 1991, A note on transport in stratified formations by flow tilted with respect to the bedding, *Water Resour. Res.*, 27, 11, 3009-3017.
- Salandin, P. and Fiorotto, V., 1993, Numerical simulations of non-ergodic transport in natural formations, *Proc. XXV IAHR*, Tokyo, 55-62.
- Selroos, J.O. and Cvetkovic, V., 1994, Mass flux statistics of kinetically sorbing solute in heterogeneous aquifer: Analytical solution and comparison with simulation, *Water Resour. Res.*, 30, 1, 63-69.
- Selroos, J.O., 1995, Temporal moments for non-ergodic solute transport in heterogeneous aquifers, *Water Resour. Res.*, 31, 7, 1705-1712.
- Sudicky, E.A. and Naff, R.L., 1995, Reply, *Water Resour. Res.*, 31, 5, 1443-1444.
- Tompson, A.F.B. and Gelhar, L.W., 1990, Numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media, *Water Resour. Res.*, 25, 10, 2541-2562.
- Zhang, D. and Neuman, S.P., 1995, Eulerian-Lagrangian analysis of transport conditioned on hydraulic data, 3. Spatial moments, travel time distribution, mass flow rate, and cumulative release across a compliance surface, *Water Resour. Res.*, 31, 1, 65-75.
- Zhang, Y.K., Zhang, D. and Lin, J., 1996, Non-ergodic solute transport in three-dimensional heterogeneous isotropic aquifers, *Water Resour. Res.*, 32, 9, 2955-2963.
- Zhang, Y.K. and Zhang, D., 1997, Time-dependent dispersion of non-ergodic plumes in two-dimensional heterogeneous porous media, *Journal of Hydrologic Engineering*, 2, 2, 91-94.
- Zhang, Y.K. and Federico, V.D., 1998, Solute transport in three-dimensional heterogeneous media with a Gaussian covariance of log hydraulic conductivity, *Water Resour. Res.*, 34, 8, 1929-1934.
- Zhang, Y.K. and Lin, J., 1998, Numerical simulations of transport of non-ergodic plumes in heterogeneous aquifers, *Stochastic Hydrology and Hydraulics*, 12, 2, 117-140.
- Zhang, Y.K. and Federico, D.V., 2000, Nonergodic solute transport in heterogeneous porous media: Influence of multiscale structure, in Zhang, D., and Winter, C.L., eds., *Theory, Modeling, and Field Investigation in Hydrology: A Special Volume in Honor of Shlomo P. Neuman's 60th Birthday*: Boulder, Colorado, Geological Society of America Special Paper, 348, 61-72.
- Zhang, Y.K. and Seo, B., 2004, Numerical simulations of non-ergodic solute transport in three-dimen-

sional heterogeneous porous media, Stochastic
Environmental Research and Risk Assessment, 18, 205-215.

투 고 일 2005년 7월 3일
심 사 일 2005년 7월 4일
심사완료일 2005년 8월 30일

서병민(Byong-min Seo)
충남대학교 기초과학연구소
305-764, 대전광역시 유성구 궁동 220
Tel: 042-821-6115
E-mail: byongseo@hotmail.com
