

## 도심의 다중매질 모델에 근거한 오염물질의 거동 연구

신현철, 신치범, 이종협\*  
아주대학교 화학공학과, 서울대학교 응용화학부\*

### A Study for the Pollutant Fate Based on Multimedia Urban Model

Hyun Cheol Shin, Chee Burm Shin, Jong Heop Yi\*  
Dept. of Chem. Eng., Ajou University,  
School of Chem. Eng., Seoul National University\*

#### 서론

환경 중에 분포하는 유해화합물의 농도는 극미량으로 존재하고 인간에게 해롭기 때문에 실측을 통한 연구가 어려운 경우가 많다. 또한 이러한 환경 오염물질은 수질, 대기, 토양 등의 한 매질에 국한되어 존재하는 것이 아니라 다중매질(multimedia)에 존재하며 서로 이동하면서 여러 경로를 통해 생태계에 영향을 미치게 된다. 그리고 종류에 따라 다른 물질로 분해 또는 변환되기 전까지의 이동거리 및 이동 속도가 다르기 때문에 다중매질에서의 공간적 이동 범위(spatial range)와 잔류성(persistence)은 환경 생태계 내의 생물과 인간이 노출되는 오염 물질의 농도 및 노출 시간을 결정하는 오염 물질 유해성 평가의 주요한 특성이 된다. 환경 오염 물질의 잔류성과 이동 범위는 다중매질 내에서의 대상 물질의 물리·화학적 성질, 화학반응, 전달현상 및 매질간의 분배(partitioning)등에 복합적으로 관계되며, 이들 특성은 오염 물질의 배출지점 분포, 배출빈도 및 지속시간과 같은 배출 특성과 계절에 따른 기온 및 강수량의 변화와 같은 기후특성에 의해서도 영향을 받는다[1].

본 연구에서는 서울시 성동구를 대상으로하여 장기간에 걸친 오염물질의 거동을 추정하기 위해 fugacity 접근법을 이용한 정상상태 다중매질 모형을 개발하였다. 본 모형에서는 매질을 대기(air), 물(surface water), 토양(soil), 침전물(bottom sediment), 식생(vegetation)과 도시지역의 유출과 분배현상을 포함하기 위한 포장도로(pavement)를 포함하여 총 6개의 매질로 구성하였다. 오염물질의 유입량은 연간 배출량을 기준으로 하였고, 대류(advection)와 대기를 오염물질의 주된 유입경로로 하였다. 매질간의 이동은 확산과 대류에 의한 흐름, deposition등으로 계산하였다[2].

#### 본론

##### 1. Level III model

일반적으로 화학평형에서 어떤 분자들의 확산 정도를 파악하기 위해서 chemical potential이라는 개념을 이용한다. 즉 화합물은 chemical potential이 높은 매질에서 낮은 매질로 이동하며 chemical potential이 같게 되면 평형에 도달하게 되어 더이상의 변화가 발생하지 않게 된다. Fugacity는 chemical potential을 나타내는 하나의 척도로 이상기체 거동으로부터 벗어난 정도를 보정한 기체압력을 나타낸다. 따라서 본 모델에서는 보다 현실적인 계산을 위해 partial pressure 대신 fugacity를 도입하여 식(1)과 같이 나타낸다[3].

$$fV = nRT \quad \frac{n}{V} = \frac{f}{RT} \quad C = fZ \quad Z = \frac{1}{RT} \quad (1)$$

$Z$ 는  $Z$  value 또는 fugacity capacity( $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$ )라 하고 각각의 매질에서의 오염물질의 fugacity capacity 값은 각 매질별 분배평형계수를 이용함으로써 쉽게 유도해 낼 수 있다.

본 연구의 Level III model은 매질사이의 평형상태를 가정하지 않는다. 또한 매질간 오염물질의 이동을 고려함으로써 오염물질의 매질간 분포를 결정짓는 중요한 기작을 규명할 수 있다. 이때 매질들 사이의 교환은 확산(diffusion)과 대류(advection)같은 전달저항(transfer resistance)에 의해 이루어진다. 본 모델을 Figure 1에 나타내었다.

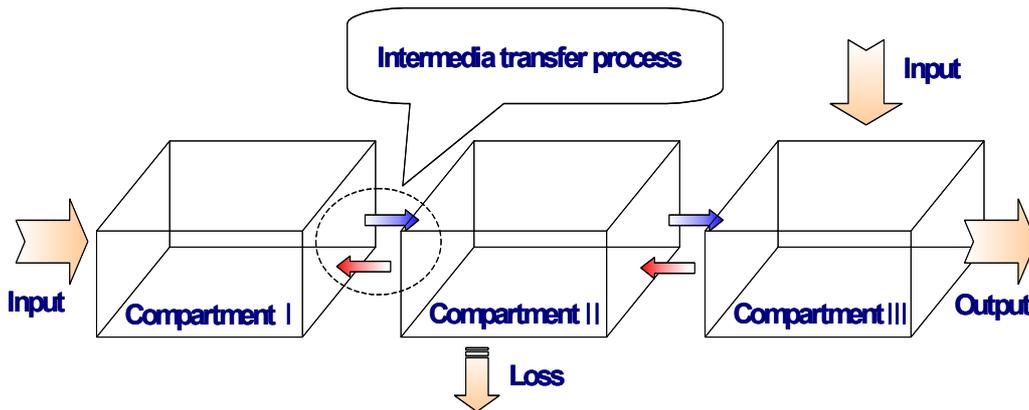


Figure 1. Schematic of level III model

식(2)는 확산(diffusion)에 의한 질량변화를 나타낸다.

$$N_{ij} = -Ag_{ij}(C_i - C_i/K_{ij}) = -N_{ji} \quad (2)$$

여기서  $N_{ij}$ 는 매질  $i$ 와  $j$ 사이의 확산흐름(diffusive flux,  $\text{m}^2/\text{s}$ )을 나타낸다.  $A$ 는 두 매질 간 경계면의 면적(interface area,  $\text{m}^2$ )이며  $g_{ij}$ 는 이때 boundary를 통과하는 확산교환(diffusive exchange)을 위한 overall conductance이다.

식(3)은 대류(advection)에 의한 질량변화를 나타낸다.

$$N_i = Q_i(C_{i(in)} - C_{i(out)}) \quad (3)$$

$N_i$ 는 매질  $i$ 에서의 대류에 의한 질량흐름(mass flux by advection,  $\text{m}^2/\text{s}$ )이며  $Q_i$ 는 매질 내에서의 흐름(flux,  $\text{m}^3/\text{s}$ )을 나타낸다. 따라서 본 모델에서의 물질수지식은 식(4)로 나타낼 수 있다.

$$\text{Input} + \text{Advection} + \text{Diffusion} - \text{Degradation} = \text{Zero}$$

$$V_i dC_i/dt = I_i + N_i + \sum_j N_{ij} - C_i V_i \lambda_i = 0 \quad (4)$$

## 2. Environmental media

모델의 복잡성을 규명하기 위해서 매질의 구조를 선택하는 것이 요구되며, 서울의 성동

구 지역은 전지역이 100m이하로 중랑천과 청계천이 흘러와 합류하여 다시 한강본류에 유입하면서 생겨난 범람원에 해당하는 저지로 시가지 발달과 교통발달에 유리한 지형조건을 가지고 있는 도시의 조건을 충분히 갖추고 있으므로 성동구 지역을 대상으로 매질별 오염물질의 농도 분포를 추정하였다. 본 연구에서는 매질을 대기(air), 물(surface water), 토양(soil), 침전물(bottom sediment), 식생(vegetation), 포장도로(pavement)의 6개 매질로 구분하여 오염물질의 거동을 살펴보았다. 매질간의 이동은 확산, deposition, runoff, resuspension, reaction, advection등에 의해 발생한다[4].

### 3. Physico-chemical property

본 모델의 해를 계산하기 위해서는 분배계수와 확산계수 등이 필요하며 이러한 값들은 물질의 물리·화학적인 특성에 근거하여 계산할 수 있다. 분배계수의 경우 물질의 종류와 용해도, 분자량 및 온도에 의해 그 값을 계산할 수 있다. 확산계수를 계산하기 위해서는 fugacity capacity가 필요하며 대기와 수질을 제외한 나머지 매질에 관하여 fugacity capacity는 분배계수의 함수이므로 일반적으로 물질의 물리·화학적 특성치를 필요로 한다[5].

### 결론

본 연구에서는 Level III fugacity model을 사용하여 매질과 매질 사이의 오염물질 농도변화를 계산하였다. 오염물질은 대기와 대류(advection)로부터 유입된다고 가정하였다. Fugacity capacity와 transport parameter를 구하는 방법은 Mackay의 방법을 따랐으며, 물질수지식으로부터 Gauss-elimination method를 이용하여 fugacity를 계산하였다. 각 매질의 특성치와 매질별 오염물질의 분해속도 상수는 Mackay et. al.[6]로부터 얻었으며, 기상과 관련된 풍속, 유속, 강우량 등의 자료는 연평균치를 사용하였다. 대류에 의해 유입되는 오염물질의 농도는 알 수 없기 때문에 임의로 하였다. 유입농도가 0일 때 모델링한 결과를 Figure 2에 나타내었다. 본 모델에서는 오염물질의 유입경로와 기상인자를 단순화시켰다. 따라서 본 연구에서 오염물질의 거동을 보다 정확하게 예측하기 위해서는 오염물질의 월별 유입량, 유입경로, 풍속, 유속 등의 정보가 고려될 필요가 있다.

### 참고문헌

- [1] Andress Beyer, Donald Mackay, Michael Matthies, Frank Wania and Eva Webster, Assessing Long-Range Transport Potential of Persistent Organic Pollutants, *Environ. Sci. Technol.*, 2000, 34, 699-703.
- [2] David A. Priemer and Miriam L. Diamond, Application of the Multimedia Urban Model To Compare the Fate of SOCs in an Urban and forested Watershed, *Environ. Sci. Technol.*, 2002, 36, 1004-1013.
- [3] Donald Mackay, 1991, *Multimedia Environmental Models: The Fugacity Approach*, Lewis Publisher, Chelsea, MI, USA.
- [4] J. Devillers and S. Bintein, ChemFrance : A Regional Level III Fugacity Model Applied to France, *Chemosphere*. 30, 457-476.
- [5] <http://www.chemfinder.com/>.
- [6] D. Mackay, W. Y. Shiu, K. C. Ma, 1992, *Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Volume I,III,IV*, Lewis Publishers, Boca Raton, Florida.

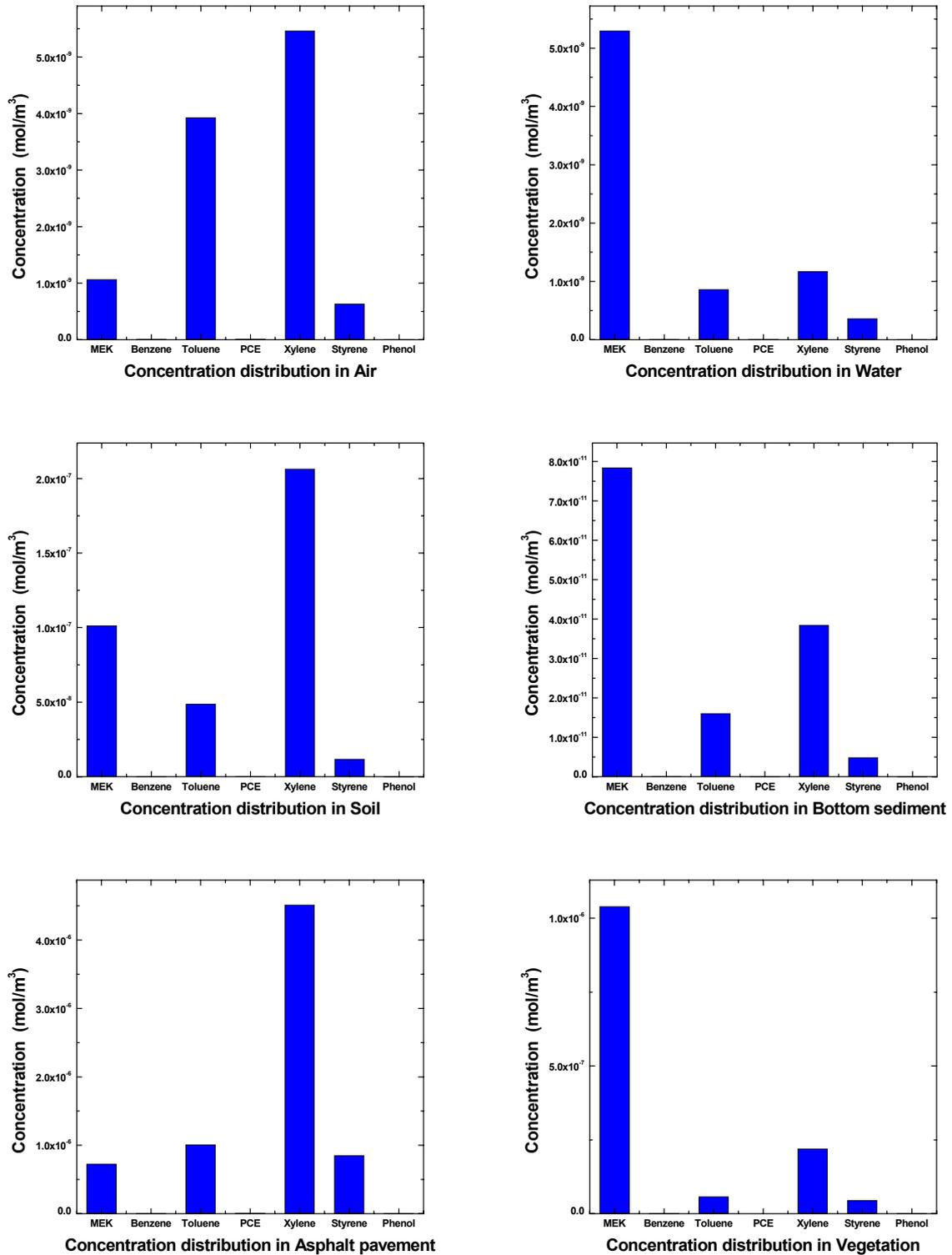


Figure 2. Concentration distribution in six compartment.