

첨단 전자산업 폐수처리시설의 Water Digital Twin(I): e-ASM 모델 개발과 Digital Simulation 구현

심예림^{1,†}, 이나희^{1,†}, 정찬혁¹, 허성구², 김상윤², 남기전², 유창규^{1,2,*}

¹경희대학교 공과대학 환경학 및 환경공학과
17104 경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732

²경희대학교 공과대학 환경학 및 환경공학과 융합공학전공
17104 경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732

(2021년 12월 1일 접수; 2022년 1월 4일 수정본 접수; 2022년 1월 12일 채택)

Water Digital Twin for High-tech Electronics Industrial Wastewater Treatment System (I): e-ASM Development and Digital Simulation Implementation

Yerim Shim^{1,†}, Nahui Lee^{1,†}, Chanhyeok Jeong¹, SungKu Heo², SangYoon Kim²,
KiJeon Nam², and ChangKyoo Yoo^{1, 2,*}

¹Department. of Environmental Science and Engineering College of Engineering, Kyung Hee University,
1732, Deogyong-daero, Giheung-gu, Yongin-si, Gyeonggi-do 17104, Korea

²Integrated engineering, Department. of Environmental Science and Engineering College of Engineering, Kyung Hee University,
1732, Deogyong-daero, Giheung-gu, Yongin-si, Gyeonggi-do 17104, Korea

(Received for review December 1, 2021; Revision received January 4, 2022; Accepted January 12, 2022)

요 약

첨단 전자산업 폐수 처리시설에서 발생하는 유기 폐수는 고농도의 유기물질 및 20가지 이상의 유독 난분해성 물질을 포함하고 있으며, 이를 효율적으로 처리하는 것은 첨단 전자산업의 당면 과제이다. 따라서, 첨단 전자산업 유기폐수 처리시설을 CPS (Cyber physical system)상 Water digital twin으로 구축하여 COD (Chemical Oxygen Demand), TN (Total Nitrogen), TP (Total Phosphorous) 및 TMAH (Tetramethylammonium hydroxide) 등 유기 오염물질의 제거 효율 평가가 가능한 전자산업 폐수 특화 모델 개발이 필요하다. 본 연구에서는 첨단전자산업 유기폐수 제거 메커니즘에 대한 분해 미생물의 성장과 사멸의 이론적인 반응속도식에 기반한 첨단 전자산업 폐수 특화 활성슬러지 모델(Electronics industrial wastewater activated sludge model, e-ASM)을 개발하였다. 개발한 e-ASM은 전자산업 폐수처리공정에서 발생하는 유기물 산화, 질산화, 및 탈질화 과정뿐만 아니라 TMAH 등 난분해성 유기물질의 분해과정 중 발생하는 질산화미생물의 저해(Inhibition) 작용 등 복잡한 생물학적 분해 메커니즘이 모사 가능하다. 이를 활용하여 실제 전자산업 유기폐수 처리시설을 Water Digital Twin으로 구현하여 CPS (Cyber physical system) 상에서 전자산업 폐수처리장에 폐수 유입 성상에 따라 공정 모델링, 유출수 예측, 공법 선정, 설계 효율 평가 등 다양한 목적으로 활용될 수 있다.

주제어 : 워터 디지털 트윈, 전자산업 폐수 처리, 디지털 전환, e-ASM, CPS (cyber physical system)

Abstract : Electronics industrial wastewater treatment facilities release organic wastewaters containing high concentrations of organic pollutants and more than 20 toxic non-biodegradable pollutants. One of the major challenges of the fourth industrial revolution era for the electronics industry is how to treat electronics industrial wastewater efficiently. Therefore, it is necessary to develop an electronics industrial wastewater modeling technique that can evaluate the removal efficiency of organic pollutants, such as chemical oxygen demand (COD), total nitrogen (TN), total phosphorous (TP), and tetramethylammonium hydroxide (TMAH), by digital twinning an electronics industrial organic wastewater treatment facility in a cyber physical system (CPS). In

[†] The first and second authors Equally contributed to this paper.

* To whom correspondence should be addressed

E-mail: ckyoo@khu.ac.kr; Tel: +82-31-201-3824; Fax: +82-31-202-8854

이 논문은 우희철 교수님의 정년을 기념하여 투고되었습니다.

doi: 10.7464/kst.2022.28.1.63 pISSN 1598-9712 eISSN 2288-0690

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

this study, an electronics industrial wastewater activated sludge model (e-ASM) was developed based on the theoretical reaction rates for the removal mechanisms of electronics industrial wastewater considering the growth and decay of micro-organisms. The developed e-ASM can model complex biological removal mechanisms, such as the inhibition of nitrification micro-organisms by non-biodegradable organic pollutants including TMAH, as well as the oxidation, nitrification, and denitrification processes. The proposed e-ASM can be implemented as a Water Digital Twin for real electronics industrial wastewater treatment systems and be utilized for process modeling, effluent quality prediction, process selection, and design efficiency across varying influent characteristics on a CPS.

Keywords : Water digital twin, High-tech electronics industrial wastewater treatment, Digital transformation, e-ASM, Cyber-physical system (CPS)

1. 서론

4차 산업혁명(Industrial Revolution, IR 4.0)의 대두와 함께 글로벌 제조 혁신의 바람이 전세계적으로 거세며[1] ICT (Information and Communication Technology)를 바탕으로 제조 산업 공장 내 생산, 관리, 물류 등을 통합 관리하는 스마트 팩토리 (smart factory)가 주목받고 있다[2]. 첨단 기술의 기반이 되는 전자 산업(Electronics industry)의 기하급수적인 성장으로, 제조화학산업에서는 기존의 물리적 기술과 디지털 기술이 통합된 수소 연료전지 모빌리티, 청정 수소 생산, AI (Artificial Intelligence), 반도체 등의 4차 산업혁명 핵심 산업이 더욱 각광받고 있다[3].

전자산업의 핵심 업종인 반도체의 세계 시장 규모는 Figure 1(a)와 같이 2016년에 4차 산업혁명이 선언된 이후 급속히 증가했으며, 2020년 기준 4,498억 달러로, 전년 대비 약 7.6% 상승하였다[4]. 국내 반도체 시장의 경우, 총 수출액이 2010년 기준 61.3조 원에서 2020년 기준 115.5조 원으로 약 2배 증가하였다[5]. 이처럼 반도체는 우리나라 총 수출의 약 20%를 차지하는 최대 수출 품목이며 산업연구원에 따르면 2025년까지 메모리 반도체 산업은 연평균 9.7%, 시스템반도체 산업은 3.4% 성장할 것으로 전망했다[6]. 또한 대한민국 정부는 산업 데이터와 5G 및 AI 기술을 융합하기 위해 ‘디지털 뉴딜’ 플랫폼과 ‘K-반도체 벨트’ 구축을 발표하였으며, 이에 따라 지속적인 반도체 제조시설 증설이 필요할 것으로 예상된다[6].

전자산업 발전에 따라 대량의 반도체 생산량 확보를 위해 공정의 디지털 전환(Digital transformation)이 가속화되고 있으며, 이에 따른 첨단 전자산업 내 반도체 등 제품 생산 공정의 미세화로 인하여 전자산업 폐수의 발생량과 유해화학물질의 오염 부하가 증가하고 있다. 일례로, 2018년 기준 국내 첨단전자산업 중 반도체 업종의 폐수 발생량은 886,000 m³ d⁻¹로 한국 표본산업분류 기준 14개의 업종 중 제일 높은 것으로 나타났다[7]. 전자 제조 과정에서 발생하는 폐수는 성분에 따라 무기폐수와 유기폐수로 분류된다. 전자산업 폐수에는 식각 공정과 세정 공정에 투입되는 불산과 인산으로 인해 다량의 무기물질이 포함되어 있다. 일반적으로 무기 폐수는 물리 화학적 방법으로 제거되며, 불소 제거에는 Ca(OH)₂나 CaCl₂를 이용한 침전법, 가스공크리트와 희토류 금속 등을 이용한 흡착법, membrane을 이용한 여과법 등이 사용되고, 인은 알루미늄염, 철염, 석회 등을 사용해 침전 제거한다[8,9].

전자산업 유기 폐수의 경우 1차 처리 후 생물학적 처리

(Biological wastewater treatment) 시설을 이용해 고도처리하고 있다[10]. 특히 고농도의 질소폐수의 경우, 1차 물리화학적 처리로 암모니아를 탈기시키고, 화학 응집 침전 과정인 2차 화학적 처리를 거쳐 최종적으로 생물학적 처리를 한다[11]. 또한 전자산업 유기 폐수는 주요 수질 측정 항목 중 COD (Chemical Oxygen Demand), TN (Total Nitrogen), TP (Total Phosphorous)가 일반적인 하수에 비해 높은 오염부하와 큰 변동을 보이는 특징이 있다. 일례로, 우리나라 전자산업 제조시설 중 세종시에 소재한 G사의 식각 공정에서 발생한 폐수의 COD는 7,010 mg L⁻¹로, 수질오염물질 배출 허용 기준의 약 175배 이상으로 보고되었으며, TP는 2400~2600 ppm으로 보고되었다[12]. 또한 H사는 3,000~5,000 ppm의 고농도 TN이 포함된 폐수를 배출하고 있다[10].

이와 같이 첨단 전자산업 유기 폐수는 일반적인 하 폐수에 비해 고농도의 유기물질을 함유하고 있을 뿐만 아니라, TMAH (Tetramethylammonium hydroxide), DMSO (Dimethyl Sulfoxide), IPA (Isopropyl Alcohol) 등 20가지 이상의 유독 난분해성 물질을 포함하고 있다[13]. 후면 연삭 및 현상 공정에서 사용되는 TMAH는 노출 시 호흡기와 눈, 피부를 자극하며, 중추신경계 등에 장애를 일으키는 등 인체에 직접적으로 유해한 물질이다. DMSO의 경우 PR (Photoresist) 박리 용매로 사용되며 피부 투과도를 증대 시키며, 체내에서 세포독성을 일으킨다[14]. IPA는 세정과 도금을 포함한 대부분의 공정에서 세척액으로 사용되고 있는데, 높은 산소 수요와 막 파괴 특성으로 인해 대부분의 미생물에 독성을 가지며, 장시간 노출 시 자연 유산을 발생시키는 영향을 주는 것으로 보고되었다[15]. 이처럼 전자 제조 공정에서 사용되는 난분해성 물질들은 높은 독성을 띠고 분해가 느려 환경과 인체에 유해한 영향을 준다. 따라서, 첨단 전자산업 폐수의 COD, TN, TP와 함께 TMAH 등 난분해성 유기물질들을 효율적으로 처리하는 것은 4차 산업혁명에서 첨단 전자산업의 당면 과제이다.

기존의 전자산업 폐수 처리 연구는 폐수의 특정 물질 각각의 분해 및 처리에 집중하였으며, 폐수의 난분해성 유기물질의 동시 처리와, 구성에 따른 질산화 및 탈질 효율과 인 제거율을 함께 고려한 연구는 미비하다. 또한, 첨단 전자산업 업종 별 발생하는 폐수의 유기물질 조성은 각기 다르기 때문에 업종별로 폐수에 특화된 생물학적 제거과정을 정형화하는 것은 현실적으로 매우 어려운 실정이다. 따라서 이러한 문제를 해결하기 위해, 첨단 전자산업 폐수처리공정의 전과정을 Digital Twin으로 구

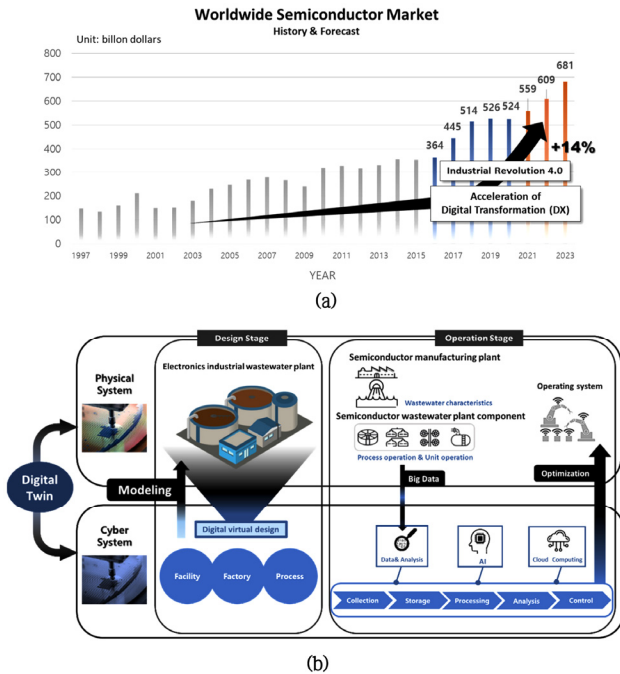


Figure 1. (a) Global trend of semiconductor market from 1997 to 2023 and (b) conceptual diagram of digital twin from physical to cyber systems in high-tech electronics industry.

현하여 COD, TN, TP 및 난분해성 유기 물질의 제거효율을 평가할 수 있는 전자산업 폐수에 특화된 모델링 기법 개발이 필요하다. 이는 Figure 1(b)와 같이 Digital Twin을 기반으로 하여 실제 폐수처리장의 물리 시스템(physical system, PS)을 가상물리시스템(cyber physical system, CPS)으로 모델링하고 폐수처리의 물리적 현상을 모사함으로써 물리 시스템의 문제를 해결할 수 있다. 또한, dynamic modeling의 개념을 넘어서 Digital Twin을 활용한 새로운 유입 조건에 따른 공정 진단 및 최적화로 추후 응용이 가능하여, 공정 운영자에게 유출수 수질 악화 등의 리스크를 감소시킬 수 있는 가이드 라인을 제공할 수 있다. 따라서, 전자 제조 공정 미세화 및 유해화학물질의 오염 부

하 증가에 대응하여 첨단 전자산업 폐수 특화 운영 솔루션 제공을 위한 Digital Twin의 개발 필요성은 더욱 대두되고 있다.

일반적인 하수 처리 모델링 방법으로는 1987년 IWA (International Water Association)에서 개발한 활성슬러지모델(activated sludge model, ASM)이 있다. ASM은 미생물의 성장 및 사멸에 따른 질소와 인을 포함한 유기물의 생물학적 제거 메커니즘을 수학적으로 모사할 수 있으며, 하수처리공정의 모델링, 제어, 최적화에 사용되고 있다[16]. Kim and Yoo [17]은 ASM 모델을 활용하여 네 가지 고도처리 공정에 대해 공정별 반응조 사이즈 및 운전조건을 최적화하고, 각 공정에 대한 환경성 및 경제성 평가를 실시하였고, Choi [18]는 A2/O (Anaerobic, anoxic, aerobic) 공정에서 방류수 수질 기준을 만족할 수 있는 반응조의 부피를 최적화하였다. 그러나 ASM 모델 관련 연구들은 일반적인 하수처리 공정 최적화에 한정되어 있으며, ASM을 전자산업 폐수의 처리에 적용하여 연구한 사례는 미비하다.

본 연구에서는 전자산업 폐수 처리 공정을 모사할 수 있는 e-ASM (Electronics industrial wastewater Activate sludge model)을 개발하여, 전자산업 유기폐수 처리시설의 Digital Twin 구현 방안을 제시하였다. 본 연구는 전자산업 폐수처리시설의 Water digital Twin 시리즈 논문으로서 첫번째 논문에서는 전자산업 폐수의 특성, 난분해성 전자산업 폐수의 제거 메커니즘을 파악하였으며, COD, TN, TP 및 난분해성 유기물질의 동력학적 제거 메커니즘에 기반한 e-ASM 개발 방법을 제시하였다. 또한 하·폐수 처리공정 모사 프로그램인 GPS-X (General purpose simulator) Model developer를 통해 제안한 e-ASM을 이용한 전자산업 유기폐수처리장 내 유기물 및 질소, TMAH 등 난분해성 물질 제거 메커니즘 해석 및 모사가 가능한 폐수처리시설 가상물리시스템(cyber physical system, CPS)인 Water Digital Twin을 구현하였다.

2. 전자산업 폐수 특성

첨단 전자산업의 제조공정은 웨이퍼 제조, 산화 공정, 포토 공정, 식각 공정, 금속배선 공정, EDS (Electrical Die Sorting)

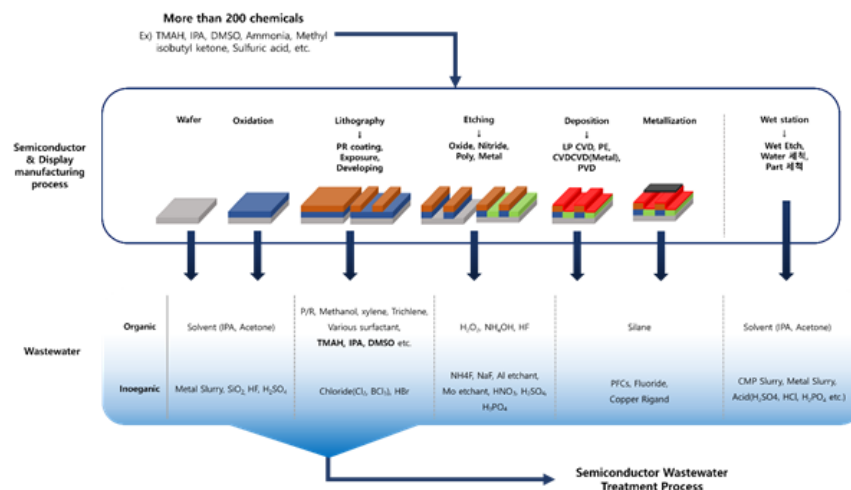


Figure 2. Emerging inorganic and organic wastewater across semiconductor and display manufacturing processes.

공정, 패키징 공정을 포함한 공정들로 이루어지며, 각 공정 사이에 세정 공정(wet station)이 진행된다[19]. Figure 2는 대표적으로 반도체 및 디스플레이 제조 공정과 각 공정별 발생하는 폐수 내 오염물질의 종류를 나타낸다[13]. 전자소재 제조에는 초순도의 유기화합물과 무기화합물이 200가지 이상 투입되며, 사용되는 화학물질에 의해 다양한 성상의 고농도 폐수가 발생한다[13]. 배출되는 발생 폐수는 크게 유기폐수, 무기폐수로 구분되며, 산폐수, 과산화폐수, 할로젠 폐수, 비할로젠 폐수, 금속 등을 포함하고 있다[19].

반도체 제조 공정의 각 과정의 기능에 따라 투입되는 화학물질이 다르며 그에 따라 폐수도 다양한 성상으로 배출된다[19]. 8대 공정 중 웨이퍼 제조 공정과 산화 공정은 실리콘 웨이퍼를 제조하고 표면에 산화막인 실리콘 디옥사이드(SiO₂)를 얻는 공정이며 세척 용매인 IPA, Acetone, SiO₂, HF 등이 폐수로 배출된다[19]. 포토 공정에서는 웨이퍼 위에 정확한 패턴을 형성하기 위해 PR 도포, 노광, 현상 과정을 거치는데, 이 과정에서 사용되는 TMAH, IPA, DMSO를 포함한 고농도의 유기폐수가 발생되어 배출된다. 식각 공정에서는 PR에 의해 덮여지지 않은 부분을 웨이퍼로 녹여내는 단계로, 식각제와 세정제로 투입된 불소가 화합물 형태로 배출된다[20]. 증착 공정과 금속화 공정에서는 복잡한 패턴의 금속을 웨이퍼 위에 증착 시키기 위해 사용된 금속물질들이 폐수로 배출된다[19]. 무기폐수는 주로 부품 표면에 부착된 오염물질의 세척 과정 중 발생하며, 높은 농도의 구리와 불소가 포함된다[21]. 웨이퍼 공정에서 제거된 구리 13,000 ~ 14,000 mg L⁻¹와 세정 등에 사용되는 불소 158 ~ 816 mg L⁻¹을 함유하며, 세정 및 식각 공정 등에 사용되는 인산 및 염산에 의해 pH가 2.3 ~ 2.8로 강한 산을 띄고 있고 질산염, 브롬, 규소, 등을 포함하고 있다[13].

유기폐수는 반도체 제조 공정의 핵심인 포토 공정과 세정 공정에 의해 대량 발생한다. 반도체 유기 폐수는 평균 TN 300 mg L⁻¹, TP 340 mg L⁻¹, COD 4,000 mg L⁻¹를 함유하고 있으며, 일반적인 폐수에 비해 오염부하가 높고 생물분해성을 나타내는 BOD (biological oxygen demand)/COD 비가 약 0.2 이하로 매우 낮으며 고농도 난분해성 물질이 미생물 활성의 저해인자(Inhibition factor)로 작용하여 반도체 폐수의 생물학적 처리가

Table 1. Statistics of the semiconductor wastewater components [12-14,21,22,24-36]

Component		Statistics (mg L ⁻¹)				
		Min	Max	Average	SD	Skewness
C/N/P	COD	73.6	5085	1299.9	1740.63	1.58
	TN	15	3000	493.55	860.67	2.94
	TKN	70	300	140.14	79.27	1.37
	NH ₃ -N	0.1	720	125.63	197.32	2.43
	TP	1.063	203.5	37.438	81.42	2.44
	PO ₄ -P	26.77	432	213.09	138.92	-0.01
Non-biodegradable Organic matter	TMAH	154	1800	734.75	637.11	1.00
	IPA	200	4000	1575	1705.62	1.44
	DMSO	20	908	276.57	291.64	2.14

어렵다[22]. 반도체 유기 폐수의 주요 난분해성 물질은 TMAH, IPA, DMSO로 세정공정과 포토공정에서 세정제, 감광제, 현상액 등 화학용매로 대량 사용되어 고농도 폐수로 배출된다. 포토 공정의 박리과정에서 DMSO와 TMAH는 각각 PR의 박리 용매와 현상액으로 사용되며, TMAH는 현상과정에서 가장 많이 발생되는 대표적 난분해성 유기 폐수물질이다[19]. IPA는 세정 공정 중 건식세정액으로 사용되며, 세정 공정은 전체 반도체 제조 공정에서 15%를 차지하는 주요 공정으로써 다량의 IPA가 투입된다.

Table 1은 16개의 선형 연구에서 제시된 34개 반도체 공장 폐수의 조성을 나타낸다. 평균 COD, TN 농도는 1299.9, 493.55 mg L⁻¹으로 C/N (Carbon/Nitrogen) ratio가 2.63으로 일반적인 하수의 C/N ratio가 4.23인데 비해 낮다[23]. 또한 대표적인 유독 난분해성 물질인 TMAH, IPA, DMSO의 농도는 평균 734.75 mg L⁻¹, 1575 mg L⁻¹, 276.57 mg L⁻¹으로 일반적인 하수에 미량으로 존재하는 것에 비해 고농도로 포함되어 있다[12-14,21,22,24-36].

Figure 3는 Table 1의 반도체 폐수 조성 자료의 평균, 표준편차, 왜도(skewness)를 이용해 생성한 자료를 보여준다. 왜도는 -0.01에서 2.94 사이의 값을 보이며, 인산성 인을 제외한 나머지 성분의 왜도는 1 이상이다. 특히 총 질소의 경우 왜도 값이

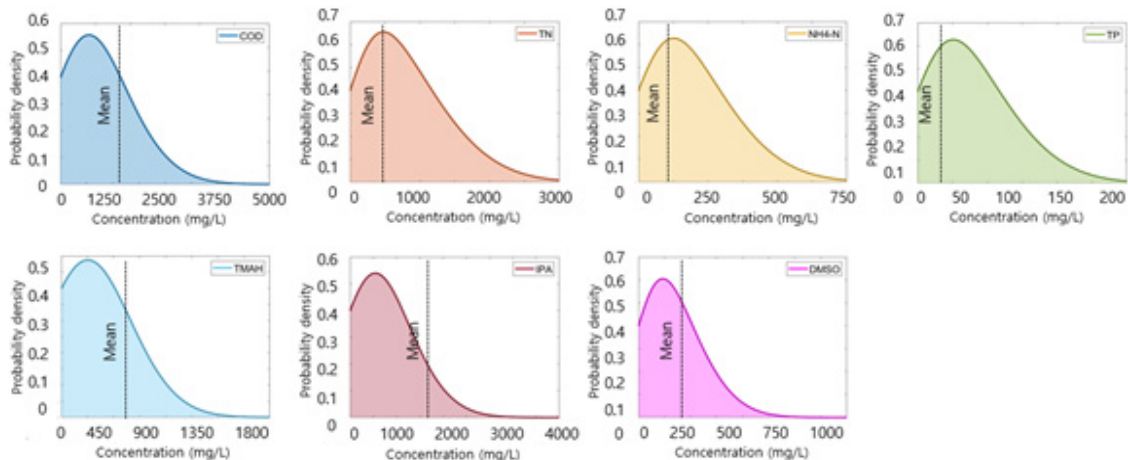


Figure 3. Normal distributions for experimental dataset of the semiconductor wastewater components.

2.94인데, 이는 Figure 2와 같이 자료들이 평균치에 비해 좌측으로 치우쳐져 오른쪽으로 긴 꼬리를 가지는 분포를 가지고 있음을 의미하며, 동시에 유입수 성분의 변동이 비선형임을 의미한다[37]. 이와 같이, 반도체로 대표되는 첨단 전자산업의 폐수는 공정별 사용되는 물질의 종류에 따라 성상이 다르기 때문에 일반적인 하수에 비해 성분의 표준 편차가 큰 특징을 가진다[11,23]. 이러한 반도체 폐수 효율적인 처리를 위해서는 첨단 전자산업 폐수 성상 및 특성을 고려한 폐수 성상별 제거 메커니즘 파악이 우선되어야 한다.

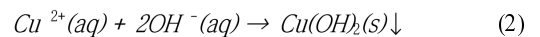
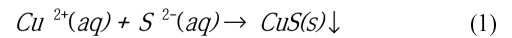
3. 전자산업 폐수 성상 별 제거 메커니즘

첨단 전자산업의 제조 공정에서 발생하는 폐수는 성상에 따라 산폐수, 알칼리폐수, 무기폐수, 유기폐수 등으로 구분된다. 무기폐수는 물리·화학적 방법을 통해 처리되며, 유기폐수는 물리·화학적 처리 이후에 분해 미생물을 이용한 생물학적 처리 공정을 적용하여 처리된다[8]. Figure 4는 대표 첨단 전자산업인 반도체와 디스플레이 제조 공정에서 사용되고 있는 폐수 처리시설의 계통도를 나타냈다. 첨단 전자산업 폐수에는 유기폐수와 무기폐수가 혼합되어 있으므로, Figure 4와 같이 무기폐수 처리 이후 유기폐수를 처리함으로써 활성슬러지의 작용을 저해하는 유해 무기물질을 사전에 제거하여 유기폐수 처리 효율을 증진시킬 수 있다. 특히 첨단 전자산업 제조 공정에서 발생하는 유기폐수에는 자연적으로 잘 분해되지 않고 활성 슬러지를 이용한 생물학적 처리로도 분해되기 어려운 TMAH, DMSO, IPA 같은 난분해성 유기물이 존재하므로, 생물학적 공정의 경우 처리 유입 폐수의 수리학적 체류 시간(Hydraulic retention time, HRT)을 증가시켜 느리게 분해되는 난분해성 물질을 제거하는 방식으로 대부분 운전하고 있다[12].

3.1. 무기폐수 물리화학적 제거 메커니즘

첨단 전자산업 중 반도체 및 디스플레이 제조 과정에 발생하

는 무기폐수는 산·알칼리 폐수, 구리 폐수, 불소 폐수 등으로 구분된다[13]. 무기폐수 내 불소 처리는 물리적, 화학적 처리 방법을 이용하며 흡착 및 침전, 이온교환, 여과 처리 방법이 있다. 대표적으로 흡착 및 침전법은 알루미늄, 칼슘, 철, 금속산화물 및 금속수산화물, 탄소를 흡착제로 이용하여 표면화학반응을 통해 불소를 불용성 형태로 변화시킨 후 응고 침전시키는 화학적 처리 방법이다. 구리 폐수는 황화물 및 수산화물을 이용한 화학적 침전법과 흡착법을 통해 제거된다[38]. 황화물 침전법은 Equation (1)과 같이 구리이온을 황화수소(H₂S), 황화소다(Na₂S) 등을 사용해 황화구리를 형성한 후 물리적으로 침전시켜 제거한다. 수산화물 침전법의 경우 황화물 침전법과 마찬가지로 pH 9~10의 알칼리 환경에서 Equation (2)와 같이 수산화구리를 형성시켜 침전 제거하는 화학적 처리 방법이다.



3.2. 유기폐수의 생물학적 분해 메커니즘

3.2.1. 유기물, 질소, 인의 생물학적 분해 메커니즘

첨단 전자산업 제조공정에서 발생한 폐수의 유기물은 일반적인 하수처리공정과 마찬가지로 호기성, 혐기성, 무산조 조건에서 미생물의 분해작용에 따라 생물학적으로 제거된다. 호기성 조건에서는 유기물이 산화와 함께 종속영양생물(Heterotrophs)의 성장에 필요한 기질로써 분해되며, 혐기성 조건에서는 미생물 작용뿐만 아니라 가수분해(Hydrolysis)와 발효(Fermentation)를 통해 분해된다.

전자산업 폐수 내 생물학적 질소 제거는 질산화(Nitrification)와 탈질화(Denitrification) 과정으로 구분된다. 질산화 과정은 암모니아성 질소가 질산성 질소로 산화되는 과정으로, 암모니아성 질소가 다량 포함된 전자산업 폐수처리의 핵심 제거 메커니즘이다. 대표적인 질산화 미생물인 *Nitrosomonas*와 *Nitrobacter*의

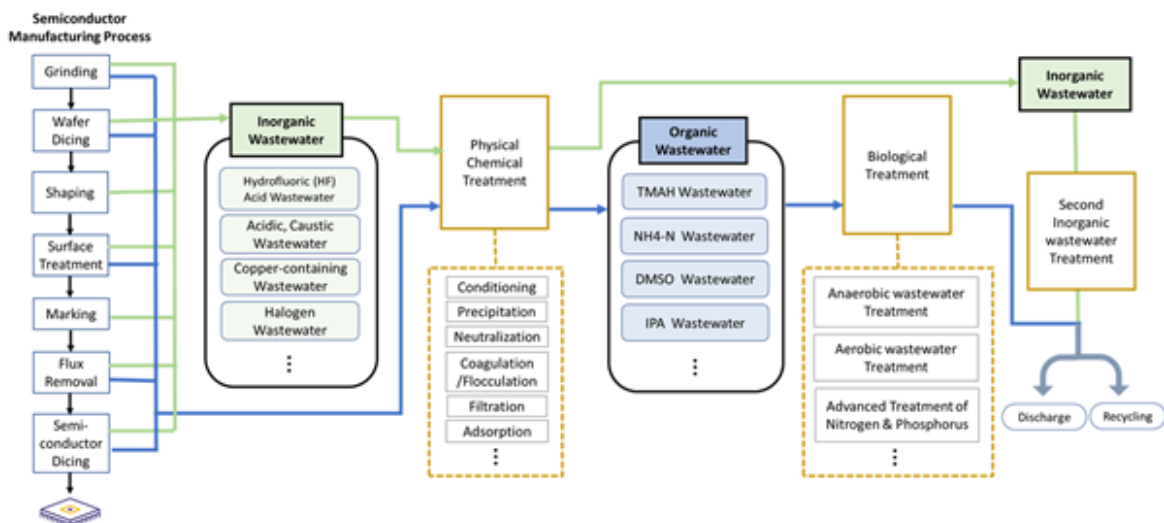
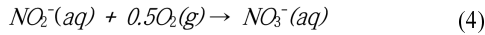
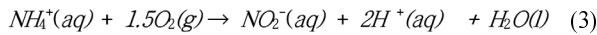
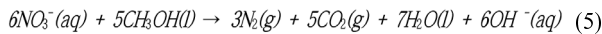


Figure 4. Semiconductor and display wastewater treatment processes for inorganic and organic wastewater from semiconductor and display manufacturing facilities.

호기성 조건에서의 질산화 반응식은 Equation (3)과 Equation (4)와 같다.



C/N ratio는 질산화 과정의 주요 영향 인자로서, 일반적으로 3 이하의 C/N ratio에서 낮은 질산화율이 나타난다[39]. 전자산업 폐수의 C/N ratio는 약 0.5이므로, 이를 보완하기 위하여 폐수 내 질소 처리를 위해 내부 반송과 슬러지 반송, 그리고 외부 탄소원의 주입이 필요하다. 낮은 C/N ratio에서 질산화 과정 중 유기물 과잉 소모로 인해 탄소원이 부족할 경우 외부 탄소원 주입이나 내부 반송을 이용해 탄소원을 보충하여 Equation (5)의 무산소 조건에서의 탈질화 과정을 진행한다.



생물학적 인 제거는 미생물이 인을 섭취하여 세포 구성성분으로 이용하거나, 과잉 섭취(Luxury uptake) 후 Polyphosphate 형태로 세포 내에 축적하는 두가지 방법에 의해 이루어진다. 생물학적 인 제거 공정은 혐기성 조건과 호기성 조건을 연속적으로 운전할 때 발생하며, 혐기성 조건에서 Poly-P bacteria (or PAOs) 들은 폐수로부터 탄소원을 섭취하여 PHB (Poly-β-hydroxybutyrate) 형태로 합성한다. 호기조건에서는 저장된 PHB를 분해하여 PAOs의 성장이 이루어지며, 동시에 Poly-P를 합성하기 위한 인의 섭취로 제거된다[40].

3.2.2. 난분해성 TMAH의 생물학적 분해 메커니즘

TMAH는 반도체 및 디스플레이 제조 공정 중 PR의 현상액으로 사용되는 질소 성분으로 화학적으로 안정적인 화합물이지만, 생물학적 분해가 어려운 난분해성 물질이며 고농도에서 독성을 배출한다. 배출된 독성물질은 미생물 성장의 저해 인자로 유기물 제거효율을 감소시키며, 또한 TMAH에는 질소가 포함되어 있으므로 TMAH가 분해될 때 생성되는 암모니아성 질소로 인하여 질소 처리 메커니즘에도 영향을 미친다[41,42]. 유기폐수 내 TMAH는 물리화학적 방법과 생물학적 방법을 통해 처리된다. 물리화학적 방법으로는 촉매 산화, 이온 교환, 역삼투 등이 사용되지만 경제적 비용이 높기 때문에, 비교적 적은 비용으로 안정적으로 TMAH를 처리할 수 있는 생물학적 방법이 주로 사용된다[29]. Figure 4와 같이, TMAH의 생물학적 처리는 *methylophilic*, *Paracoccus spp.*, *Kluyveromyces delphensis*, *Bacillus circus*, *Acinetobacter sp.* 미생물 등에 의해 혐기성 조건과 호기성 조건에서 동시에 분해될 수 있다[43,44].

혐기성 조건의 TMAH 분해 미생물은 *methylophilic metanogen*이며 TMAH를 유일한 기질로 이용한다. TMAH는 TMA (trimethylamine), DMA (dimethylamine), MMA (monomethylamine)를 거쳐 최종적으로 NH_4 의 형태로 분해된다[43]. TMAH의 제거 과정 중 중간물질들은 매우 미량으로 생성되며 암모니아 이온이 주로 생성된다[43]. 혐기성 조건에서 TMAH

제거 효율은 70~90%로 높지만, 메탄, 메탄올, 이산화탄소가 부산물로 생성된다[43]. 호기성 조건에서 TMAH는 TMA, DMA, MMA를 거쳐 최종적으로 NH_4^+ 로 분해되며, 혐기성 조건과 달리 모든 과정에서 폼알데하이드가 생성되고, 이는 빠르게 산화되어 이산화탄소와 물로 전환된다[44]. TMAH의 최종 분해 산물로 NO_3^- 물질이 배출된다. 550 mg L⁻¹ 이상인 고농도의 TMAH는 호기성 조건에서 질산화 및 탈질 미생물의 성장에 저해인자로 작용하며 TMAH의 초기 농도에 비례하여 질산화로 NH_4 가 제거되는 시간이 지체된다[44]. Figure 5(a)는 앞서 설명한 TMAH의 혐기성 및 호기성 조건에서 분해 반응의 과정을 나타낸다.

3.2.3. DMSO의 생물학적 분해 메커니즘

DMSO (Dimethyl Sulfoxide)는 전자 산업에서 널리 사용되는 무색의 유기용매로, 높은 흡습성을 가지며 열역학적으로 안정하다. 또한 분자구조상 2개의 C-S 결합을 갖는 유기 황화합물로 유기물과 무기물을 모두 용해시킬 수 있기 때문에 반도체를 비롯한 다양한 산업에서 널리 사용되고 있다. 그러나 DMSO의 난분해성 특징으로 인하여 DMSO 함유 폐수는 별도 수거 및 처리 방법의 고비용 처리가 필요하다.

DMSO의 생물학적 분해 메커니즘에 대한 선행연구에 따르면 DMSO 분해 미생물은 중속영양미생물로 DMSO를 탄소 및 에너지원으로 사용할 수 있다[35]. DMSO를 DMS (Dimethyl sulfide)로 분해하는 주요 박테리아 종은 *Escherichia coli*, *Pseudomonas spp.*를 포함해 많은 종이 있지만, DMS를 황산염으로 산화 가능한 종은 적은 수가 있다[35]. DMS의 산화세균으로는 호기성 미생물인 *Hyphomicrobium spp.*, *Thiobacillus sp.*가 대표적인 종으로 확인되었으며, *Hyphomicrobium spp.*가 *Thiobacillus sp.*에 비하여 DMSO에서 황산염까지의 산화반응에 의한 분해과정에 크게 관여한다[45]. 또한, DMS는 질산화 미생물인 AOB (Ammonia oxidizing bacteria)에 대한 저해 작용으로 질산화 과정을 지체시킨다[35].

Figure 5(b)에 전자산업 폐수의 DMSO가 혐기성 및 호기성 조건에서 생물학적으로 분해되는 일련의 과정을 나타냈다. DMSO는 무산소 또는 혐기성, 호기성 조건에서 환원효소를 통해 전자 수용체(electronic acceptor) 로써 미생물에 의하여 DMS로 환원되고, 생성된 DMS는 분해되어 폼알데하이드와 황화물을 생성한다. DMS는 호기성 조건에서 황화물인 Methanethiol (MT)가 된 후 다시 황화수소(H_2S)로 분해되어, 최종적으로 황산염(SO_4^{2-})를 생성한다[35]. 폼알데하이드는 CO_2 로 변환되거나 세포 합성에 사용된다. DMSO 제거에 대한 선행 연구에 따르면 800 mg L⁻¹의 DMSO 함유 폐수를 활성슬러지법을 통해 24시간의 HRT (0.8 kg DMSO m⁻³ d⁻¹)로 운영했을 때 90%의 DMSO 제거율로 분해되었다. 또한, 1925 mg L⁻¹의 DMSO는 72 시간 HRT(부하율 0.64 kg DMSO m⁻³ d⁻¹)일 때 가장 잘 분해되는 것으로 보고되었다[46].

3.2.4. IPA의 생물학적 분해 메커니즘

IPA는 전자산업, 특히 반도체 및 디스플레이 세정 공정에서

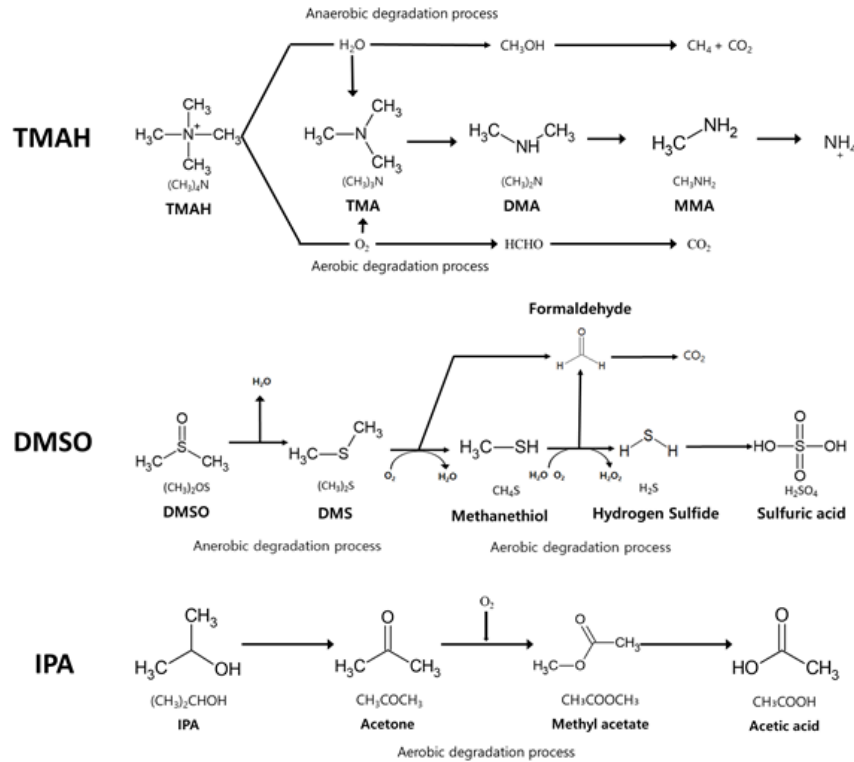


Figure 5. Biological degradation pathway of (a) TMAH, (b) DMSO, and (c) IPA in electronics industrial wastewater treatment.

주로 사용되며 환경부가 2015년에 휘발성유기화합물(volatile organic compounds, VOCs)로 지정한 난분해성 물질이다. IPA는 무극성 용매로 같은 극성을 띠는 무극성 물질을 용해시키고, 휘발성이 커서 반도체 산업을 포함한 다양한 첨단 전자산업에서 세정액으로 이용된다[47]. IPA는 에탄올보다 살균작용이 뛰어난 것으로 알려져 있으며, 생물학적 처리를 할 경우 세균을 제거하는 유기성 독성을 나타낸다[47]. IPA 분해 공정의 중간물질인 아세톤은 지용성으로 세포 표면에 잘 흡수되며, 질산화균의 성장에 저해요인으로 작용한다. 아세톤의 농도가 2 g L^{-1} 이상일 때 질산화 작용은 50% 이상 저해된다[48].

Figure 5(c)은 호기성 조건에서 발생하는 IPA의 생물학적 분해 과정을 나타낸다. IPA는 호기성 조건에서 분해미생물 체내에 있는 alcohol dehydrogenase에 의해 아세톤으로 분해되며, 아세톤은 *Clostridium acetobutylicum*, *Rhodobacter capsulatus* 등의 미생물에 의해 methylglyoxal, acetoacetate 등 중간물질을 거쳐 최종적으로 휘발성 지방산(Volatile Fatty Acids, VFAs)으로 분해된다[49]. 선행연구에 따르면 HRT가 8시간인 폐수 처리 공정에서 IPA 분해효율을 측정된 결과, 90%의 처리효율에 도달하는데 12일 소요된다[50].

4. 첨단 전자산업 폐수 특화 모델링을 위한 e-ASM 개발

첨단 전자산업 폐수에는 일반적인 하수 성상과는 다르게 TMAH, IPA, DMSO 등의 난분해성 물질이 고농도로 존재하며 유기물, 질소, 인의 분해과정과 관련한 미생물 작용에 저해 요인으로 작용하고 폐수 처리 효율을 감소시킨다[48]. 일반 하수

처리 공정 모사를 위해 개발된 활성슬러지모델(activated sludge model, ASM)은 하수처리 공정 내에서 유기오염물질을 분해하는 과정에서 발생하는 미생물 반응을 수학적 공식으로 정리한 것으로, 물질수지식에 기초하여 하수처리 공정에서 발생하는 미생물의 성장, 사멸, 수화반응 등 다양한 물리적, 화학적, 생물학적 현상을 고려했다. ASM 모델은 질소와 인의 고도처리 방법에 따라 크게 ASM1, 2, 3으로 구분된다. ASM1은 유기물과 질소 처리에 초점을 맞추어 호기성 및 혐기성 조건에서 발생하는 유기물의 분해과정과 질산화, 탈질 과정을 고려한 모델이다. 이후 인의 제거 메커니즘을 고려하기 위하여 ASM2가 개발되었고, 이는 인 축적 유기체(PAO)의 탈질 반응을 고려한 ASM2D, 세포 내 기질의 축적을 고려한 ASM3으로 확장되었다.

기존의 ASM 모델들은 대표 유기오염물질의 분해과정을 높은 정합성으로 모사할 수 있지만, 이외의 유기오염물질에 관한 제거 메커니즘이 포함되어 있지 않다는 한계점이 존재한다. 특히 전자기기 수요의 증가에 따라 첨단 전자산업 제조공정에서 발생하는 오염물질 제거의 중요성이 대두되지만 이와 관련한 수학적 모델 구축연구가 미비하여 전자산업 폐수의 난분해성 물질 분해를 모사하고 이를 기반으로 하여 첨단 전자산업 폐수 처리시설의 Digital Twin을 구현하는데 현실적으로 불가능한 실정이다. 따라서, 본 연구에서는 유기물, 질소 인의 일반적인 폐수 성상 이외에 TMAH 등 첨단 전자산업 제조 공정에서 발생하는 난분해성 물질의 생물학적 분해 메커니즘을 고려한 e-ASM 모델을 개발하였다.

e-ASM 모델을 개발하기 위하여 반영된 분해미생물의 성장 및 사멸 과정을 중심으로 첨단 전자산업 폐수 성상 내 입자성

및 수용성 성분들의 생물학적 제거 메커니즘과 미생물 동역학적 특성 파악이 중요하다. Figure 6은 e-ASM 모델 분해 메커니즘이 제시되어 있으며, 크게 종속 및 독립영양 미생물에 의한 COD, 질소, 인 제거 메커니즘, 그리고 첨단 전자산업 난분해성 물질인 TMAH, DMSO, IPA의 생물학적 분해 메커니즘이 포함되어 있다. 또한 Table 2와 같이 e-ASM의 내 오염물질의 분해 메커니즘은 반응속도식 형태로, 동력학적 파라미터 및 화학양론적 계수도 함께 Table 2와 같이 행렬의 형태로 표현된다.

4.1. COD, 질소, 인의 생물학적 분해 메커니즘 모델링

e-ASM 모델의 COD, 질소 인의 분해 메커니즘은 생물학적 질소 및 인 제거 공정을 모사할 수 있는 Activated sludge model no.2d (ASM2d)를 기반으로 개발하였다. ASM2d는 생물학적 질소 및 인 제거 공정을 모사할 수 있는 Activated sludge model no.2 (ASM2)에 무산소 조건에서도 인을 과량 섭취할 수 있는 DPAOs (Denitrifying Phosphorus Accumulation Organisms)를 도입한 모델로, 독립영양미생물(X_{AUT})과 종속영양미생물(X_{HET})의 성장과 사멸, 가수분해를 포함하여 21개의 공정과 18개의 성분(용해성 성분과 입자성 성분)으로 이루어져 있다[16]. 본 연구에서는 전자산업 폐수에서 발생하는 다량의 질소와 인의 처리를 고려하기 위해 ASM2d를 기본 모델로 사용하였고 관련 생물학적 제거 과정은 Table 2의 Process 1~21에 나타냈

다[16].

COD와 질소의 생물학적 분해 메커니즘을 모사하기 위하여, Process 1~3은 생분해 가능한 기질의 수화 반응을 나타내며, Process 4~5는 X_{HET} 의 호기성 및 혐기성 조건에서의 성장을 의미하고, Process 6~7은 탈질화 반응, Process 8은 발효 반응, Process 9는 X_{HET} 의 용해(lysis) 반응, Process 10~11은 X_{AUT} 의 성장 및 용해 반응을 나타낸다. Process 12~19는 생물학적 인 제거 메커니즘을 나타내며, Process 12~14는 PAO 내 다인산염 (Poly-P)의 저장 메커니즘을 의미하며, Process 15~16은 PAO의 성장, Process 17~19는 PAO의 용해 반응, Process 20~21은 인의 화학적 침전 및 용해 반응을 의미한다.

4.2. TMAH의 생물학적 분해 메커니즘 모델링

TMAH는 호기성 TMAH 분해 미생물(X_{TAO})과 혐기성 TMAH 분해 미생물(X_{TNO})에 의해 생물학적 분해된다. e-ASM 모델링에 필요한 동력학적 매개변수 값은 선행연구를 참조하여 TMAH 분해 미생물의 성장과 사멸에 대한 생물학적 실험 결과값을 이용하였다[43,44]. 이를 적용한 TMAH 분해 메커니즘의 주요 고려사항은 다음과 같다.

1. TMAH는 자연적으로 분해되지 않으며, 활성슬러지 내의 X_{TAO} 와 X_{TNO} 에 의해서만 분해된다. X_{TAO} 와 X_{TNO} 의 성장은 기질과 용존 산소의 농도에 의해 영향을 받으며, 그 외 환경 인자

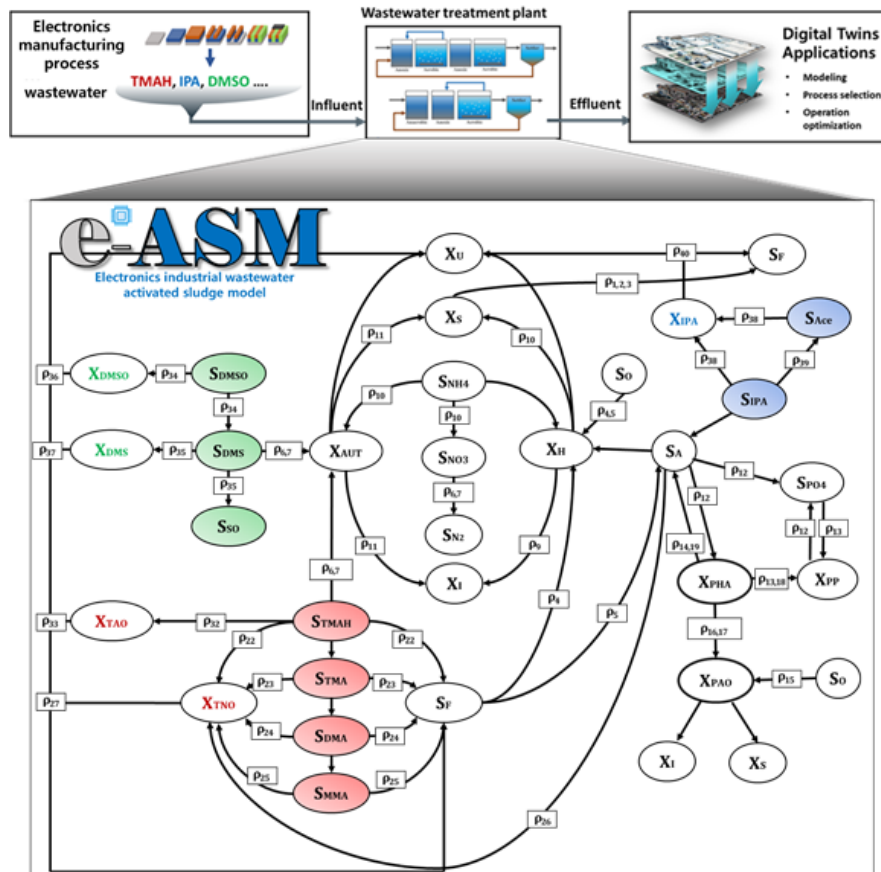


Figure 6. Metabolic pathways of the proposed e-ASM including TMAH, DMSO, and IPA compounds in electronics industrial wastewater treatment system.

는 분해 미생물의 성장을 촉진하거나 저해하지 않는다. TMAH 분해 미생물의 성장은 Equation (6)과 같이 Monod 식으로 표현되며, TMAH 분해 미생물의 사멸은 1차 반응속도 식을 따른다.

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K+S} \quad (6)$$

Equation (6)에서 μ 와 μ_{\max} 는 각각 미생물의 비성장속도와 최대비성장속도를 의미하며, S는 용액의 기질 농도를, 그리고 K는 비성장속도가 최대비성장속도의 반일 때 기질 농도인 반포화상수를 의미한다.

2. TMAH는 호기성 조건에서 Equation (7)과 같이 TAO (TMAH Aerobic-degradation organism) 성장에 의해 분해되며 부산물로 폼알데하이드를 생성하고 최종 산물로 NH_4^+ 를 생성한다. TAO의 세포 생성속도 dX_{TAO}/dt 는 Equation (7)로 표현된다.

$$\frac{dX_{TAO}}{dt} = \mu_{TAO} \cdot \frac{S_{TMAH}}{S_{TMAH} + K_{TMAH}} \cdot \frac{S_O}{S_O + K_O} \cdot X_{TAO} - b_{TAO} \cdot X_{TAO} \quad (7)$$

Equation (7)에서 μ_{TAO} , X_{TAO} , b_{TAO} 는 각각 TAO의 비성장속도, 반응조 내의 농도, 사멸속도를 의미하며, S_{TMAH} 와 K_{TMAH} 는 반응조 내의 TMAH의 농도와 반포화상수를, 그리고 S_O 와 K_O 는 각각 용존 산소농도와 산소 반포화상수를 의미한다.

3. 혐기성 조건에서 TMAH의 분해는 TNO (TMAH anaerobic-degradation organism)에 의해 발생하며 TMAH가 TMA, DMA, MMA를 거쳐 메탄올로 분해된다. TNO는 성장을 위한 기질로 메탄올을 사용하고 부산물로 메탄을 생성한다. e-ASM에서는 각 단계별로 다른 TNO의 성장률 μ , 반포화상수 K를 고려하였으며, 혐기성 조건에서 TNO의 성장은 Equation (8)을 따른다.

$$\frac{dX_{TNO}}{dt} = \mu_{TNO} \cdot \frac{S_{TMAH}}{S_{TMAH} + K_{TMAH}} \cdot \frac{K_O}{S_O + K_O} \cdot X_{TNO} - b_{TNO} \cdot X_{TNO} \quad (8)$$

Equation (8)에서 μ_{TNO} , X_{TNO} , b_{TNO} 는 각각 TNO의 비성장속도, 반응조 내의 농도, 사멸속도를 의미한다.

4. 탈질과 질산화 반응식은 ASM2d에 따라 발효 가능한 기질 (S_F)과 휘발성 지방산(S_{VFA})을 탄소원으로 이용하며, TMAH 농도에 의한 Equation (9)-(10)의 부분과 같이 저해될 수 있다. e-ASM에서 암모니아성 질소와 질산성 질소의 제거율은 각각 Equation (9)와 (10)으로 나타낸다.

$$\frac{dS_{NH_4}}{dt} = -\mu_{AUT} \cdot \frac{S_{O_2}}{S_{O_2} + K_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{S_{NH_4} + K_{NH_4}} \cdot \frac{S_{PO_4}}{S_{PO_4} + K_{PO_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot \frac{K_{TMAH}}{S_{TMAH} + K_{TMAH}} \cdot X_{AUT} \quad (9)$$

$$\frac{dS_{NO_3}}{dt} = -\mu_H \cdot \eta_{NO_3} \cdot \frac{K_{O_2}}{S_{O_2} + K_{O_2}} \cdot \frac{K_{NO_3}}{S_{NO_3} + K_{NO_3}} \cdot \frac{S_F}{S_F + K_F} \cdot \frac{S_A}{S_F + S_A} \cdot \frac{S_{NH_4}}{S_{NH_4} + K_{NH_4}} \cdot \frac{S_{PO_4}}{S_{PO_4} + K_{PO_4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot \frac{K_{TMAH}}{S_{TMAH} + K_{TMAH}} \cdot X_H \quad (10)$$

Equation (9)와 (10)에서 μ_{AUT} , X_{AUT} 는 독립영양미생물의 비성장속도와 농도, S_{NH_4} 와 S_{PO_4} , S_{ALK} 는 각각 반응조 내의 암모니아성 질소와 인산염인, 알칼리 성분의 농도를, K_{NH_4} 와 K_{PO_4} , K_{ALK} 는 암모니아성 질소와 인산염인, 알칼리 성분의 반포화상수를 나타낸다. η_{NO_3} 는 탈질감소인자이며, μ_H , X_H 는 종속영양

미생물의 비성장속도와 농도이다. e-ASM의 TMAH 분해 메커니즘을 Table 2의 Process 22 ~ 33에 나타내었다. Process 22 ~ 25는 TMAH에서 MeOH까지 분해 과정을 나타내며, Process 26 ~ 29는 TMAH 분해미생물의 성장 및 사멸 과정을 의미한다. 마찬가지로, Process 30 ~ 33은 메탄생성미생물과 관련한 성장 및 사멸 과정을 나타낸다.

4.3. DMSO의 생물학적 분해 메커니즘 모델링

e-ASM에서 고려된 DMSO 분해 메커니즘은 Table 2의 Process 34 ~ 37에 나타내었다. e-ASM에서 DMSO는 혐기성 조건에서 DMSO 분해 미생물(X_{DMSO})에 의해 생물학적으로 분해된다. DMSO의 분해 메커니즘 및 주요 고려사항은 다음과 같다.

1. DMSO는 자연적으로 분해되지 않으며, 슬러지 내의 X_{DMSO} 에 의해서 분해된다. 또한, X_{DMSO} 는 혐기성 조건에서 DMSO를 유일한 기질로 섭취하여 성장하고 DMSO를 DMS로 분해하며 DMSO 분해 미생물의 성장과 사멸은 Equation (11)를 따른다.

$$\frac{dX_{TNO}}{dt} = \mu_{DMSO} \cdot \frac{S_{DMSO}}{S_{DMSO} + K_{DMSO}} \cdot \frac{K_O}{S_O + K_O} \cdot X_{DMSO} - b_{DMSO} \cdot X_{DMSO} \quad (11)$$

여기서, μ_{DMSO} , X_{DMSO} , b_{DMSO} 는 각각 DMSO 분해 미생물의 비성장속도, 반응조 내의 농도, 사멸속도를 의미한다.

2. DMSO는 DMS으로 분해되며 DMS 분해 미생물(X_{DMS})에 의하여 황산염으로 분해된다. DMS 분해 미생물은 타 미생물에 비해 제거효율이 62% 이상 높은 *Hyphomicrobium spp.*으로 가정하였다[35].

3. DMSO의 농도는 질산화 공정에 관여하는 독립영양미생물의 성장에 저해인자로 Equation (12)과 같이 작용한다.

$$\frac{dX_{AUT}}{dt} = \mu_{AUT} \cdot \frac{S_{NH_3}}{S_{NH_3} + K_{NH_3}} \cdot \frac{S_O}{S_O + K_O} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot \frac{S_{PO_4}}{S_{PO_4} + K_{PO_4}} \cdot \frac{K_{TMAH}}{S_{TMAH} + K_{TMAH}} \cdot \frac{K_{DMSO}}{S_{DMSO} + K_{DMSO}} \cdot X_{AUT} - b_{AUT} \cdot X_{AUT} \quad (12)$$

e-ASM에서 고려된 DMSO 분해 메커니즘은 Table 2의 Process 34 ~ 37에 나타내었다. Process 34 ~ 35는 DMSO 분해 미생물의 성장 과정, Process 36 ~ 37은 분해 과정을 나타낸다.

4.4. IPA의 생물학적 분해 메커니즘 모델링

e-ASM에서 고려한 IPA 분해 메커니즘은 Table 2의 Process 38 ~ 40와 같다. e-ASM에서 IPA는 IPA 분해 미생물(X_{IPA})에 의하여 호기성 조건에서 생물학적으로 분해되며 주요 메커니즘 및 고려사항은 다음과 같다.

1. IPA는 자연적으로 분해되지 않으며, 슬러지 내의 X_{IPA} 에 의해서 분해된다. 또한, X_{IPA} 는 IPA를 유일한 기질로 섭취하여 성장한다. 분해 미생물의 성장은 Equation (13)의 Haldane식으로 표현된다. Haldane 식은 Monod 식의 분모에 S^2/K_I 가 추가된 형태이다.

$$\mu = \frac{\mu_{\max} S}{K_s + S + \left(\frac{S^2}{K_I}\right)} \quad (13)$$

Table 2. Stoichiometry matrix and process rates for e-ASM

j	component → i Process ↓	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Process Rate, ρ_j [ML ⁻³ T ⁻¹]
		S _I	S _F	X _S	S _{NH4}	S _{PO4}	S _{ALK}	X _H	S _{O2}	S _A	S _{N2}	S _{NO3}	X _I	
1	Aerobic hydrolysis of slowly biodegradable substrate	f _{SI}	1-f _{SI}	-1	v _{1,NH4}	v _{1,PO4}	V _{1,ALK}							$K_A \cdot \frac{S_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{X_S/X_H}{X_S/X_H + K_X} \cdot X_H$
2	Anoxic hydrolysis of slowly biodegradable substrate	f _{SI}	1-f _{SI}	-1	v _{2,NH4}	v _{2,PO4}	V _{2,ALK}							$K_A \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{K_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{S_{NO3}}{S_{NO3} + K_{NO3}} \cdot \frac{X_S/X_H}{X_S/X_H + K_X} \cdot X_H$
3	Anaerobic hydrolysis of slowly biodegradable substrate	f _{SI}	1-f _{SI}	-1	v _{3,NH4}	v _{3,PO4}	V _{3,ALK}							$K_A \cdot \eta_{Fe} \cdot \frac{K_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{K_{NO3}}{S_{NO3} + K_{NO3}} \cdot \frac{X_S/X_H}{X_S/X_H + K_X} \cdot X_H$
4	Aerobic growth of heterotrophs on fermentable substrates		$-\frac{1}{Y_H}$					1	$\frac{1}{Y_H}$ -1					$\mu_H \cdot \frac{S_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{S_F}{S_F + K_F} \cdot \frac{S_F}{S_F + S_A} \cdot \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH4}} \cdot \frac{S_{PO4}}{S_{PO4} + K_{PO4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot X_H$
5	Aerobic growth of heterotrophs on fermentation products							1	$\frac{1}{Y_H}$ -1	$-\frac{1}{Y_H}$				$\mu_H \cdot \frac{S_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{S_F}{S_F + K_F} \cdot \frac{S_A}{S_{PO4}} \cdot \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot X_H$
6	Denitrification with fermentable substrates		$-\frac{1}{Y_H}$					1			$\frac{1 - Y_H}{2.86 \cdot Y_H}$	$-\frac{1 - Y_H}{2.86 \cdot Y_H}$		$\mu_H \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{K_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{K_{NO3}}{S_{NO3} + K_{NO3}} \cdot \frac{S_F}{S_{NH4} + K_{NH4}} \cdot \frac{S_A}{S_{PO4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot X_H$
7	Denitrification with fermentation products							1		$-\frac{1}{Y_H}$	$\frac{1 - Y_H}{2.86 \cdot Y_H}$	$-\frac{1 - Y_H}{2.86 \cdot Y_H}$		$\mu_H \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{K_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{K_{NO3}}{S_{NO3} + K_{NO3}} \cdot \frac{S_A}{S_{NH4} + K_{NH4}} \cdot \frac{S_A}{S_{PO4} + K_{PO4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot X_H$
8	Fermentation		-1							1				$q_{Fe} \cdot \frac{K_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{K_{NO3}}{S_{NO3} + K_{NO3}} \cdot \frac{S_F}{S_F + K_F} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot X_H$
9	Lysis of heterotrophs			f _{XI}				-1					1 - f _{XI}	$b_{AUT} \cdot X_{AUT}$
10	Aerobic growth of autotrophs		v _{18,NH4}				$\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$			-i _{PBM}		f _{XI}		$\mu_{AUT} \cdot \frac{S_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH4}} \cdot \frac{S_{PO4}}{S_{PO4} + K_{PO4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot X_{AUT}$
11	Lysis of autotrophs	1 - f _{XI}										f _{XI}		$b_{AUT} \cdot X_{AUT}$
12	storage of PHA by poly-P accumulating biomass				Y _{PO4}			-1					-Y _{PO4}	$q_{PHA} \cdot \frac{S_A}{S_A + K_A} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot \frac{X_{PP}/X_{PAO}}{X_{PP}/X_{PAO} + K_{PP}} \cdot X_{PAO}$
13	Aerobic storage of poly-P by poly-P accumulating biomass				-1		-Y _{PHA}					1	-Y _{PH A}	$q_{PP} \cdot \frac{S_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{S_{PO4}}{S_{PO4} + K_{PO4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot \frac{X_{PHA}/X_{PAO}}{X_{PHA}/X_{PAO} + K_{PP}} \cdot X_{PAO}$
14	Anoxic storage of poly-P by poly-P accumulating biomass				-1			1-f _{SI}	-V _{12,NO3}	V _{12,NO3}		1	-Y _{PH A}	$\rho_{12} = \rho_{11} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{K_{O2}}{S_{O2}} \cdot \frac{S_{NO3}}{S_{NO3} + K_{NO3}}$
15	Aerobic growth of poly-P accumulating biomass on PHA						V _{13,O2}						$-\frac{1}{Y_H}$	$\mu_{PAO} \cdot \frac{S_{O2}}{S_{O2} + K_{O2}} \cdot \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH4}} \cdot \frac{S_{PO4}}{S_{PO4} + K_{PO4}} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}} \cdot \frac{X_{PHA}/X_{PAO}}{X_{PHA}/X_{PAO} + K_{PP}} \cdot X_{PAO}$
16	Anoxic growth of poly-P accumulating biomass on PHA								-V _{14,NO3}	V _{14,NO3}			$-\frac{1}{Y_H}$	$\rho_{14} = \rho_{13} \cdot \eta_{NO3} \cdot \frac{K_{O2}}{S_{O2}} \cdot \frac{S_{NO3}}{S_{NO3} + K_{NO3}}$

Table 2. Stoichiometry matrix and process rates for e-ASM (Continued)

17	Lysis of poly-P accumulating biomass	1-f _{XI}		V _{15,PO4}			1		f _{XI}			$b_{PAO} \cdot X_{PAO} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}}$	
18	Lysis of polyphosphates			1						-1		$b_{PP} \cdot X_{PP} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}}$	
19	lysis of poly-hydroxy-alkanoates						1				-1	$b_{PHA} \cdot X_{PHA} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}}$	
20	Precipitation of phosphates with metal hydroxides			-1	V _{20,ALK}							$k_{PRE} \cdot S_{PO4} \cdot X_{MeOH}$	
21	Redissolution of metal phosphates			1	V _{21,ALK}							$k_{RED} \cdot X_{MeP} \cdot \frac{S_{ALK}}{S_{ALK} + K_{ALK}}$	
22	TMA production from TMAH	0.25	-1	0.75								$\mu_{TMAH} \frac{S_{TMAH}}{S_{TMAH} + K_{TMAH}} X_{TNO}$	
23	DMA production from TMA	0.33		-1	0.67							$\mu_{TMAH} \frac{S_{TMAH}}{S_{TMAH} + K_{TMAH}} X_{TNO}$	
24	MMA production from DMA	0.5			-1	0.5						$\mu_{DMA} \frac{S_{DMA}}{S_{DMA} + K_{DMA}} X_{TNO}$	
25	MeOH production from MMA	1				-1						$\mu_{MMA} \frac{S_{MMA}}{S_{MMA} + K_{MMA}} X_{TNO}$	
26	Growth of anaerobic TMAH-degraders		$-\frac{1}{Y_{TNO}}$				1				$\frac{1}{Y_{TNO}}$	$\mu_{TNO} \frac{S_F}{S_F + K_{TNO}} \frac{K_O}{S_O + K_O} X_{TNO}$	
27	Decay of anaerobic TMAH-degraders	1-f _U					-1	f _U				$b_{TNO} X_{TNO}$	
28	Growth of aerobic TMAH degraders		$\frac{1}{Y_{TAO}} - 1$		1							$\mu_{TNO} \frac{S_{TMAH}}{S_{TMAH} + K_{TMAH}} \frac{S_O}{S_O + K_O} X_{TNO}$	
29	Decay of aerobic TMAH degraders	1-f _U		f _U	-1							$b_{TNO} X_{TNO}$	
30	Growth of acetotrophic methane producing organisms		$-\frac{1}{Y_{AMO}}$						1		$\frac{1}{Y_{AMO}}$	$\mu_{AMO} \frac{S_A}{S_A + K_{AMO}} X_{AMO}$	
31	Decay of acetotrophic methane producing organisms	1-f _U						f _U		-1		$b_{AMO} X_{AMO}$	
32	Growth of hydrogenotrophic methane producing organisms								$-\frac{1}{Y_{HMO}}$		1	$\frac{1}{Y_{HMO}}$	$\mu_{AMO} \frac{S_A}{S_A + K_{AMO}} X_{AMO}$
33	Decay of hydrogenotrophic methane producing organisms	1-f _U						f _U			-1	$\frac{1}{Y_{HMO}}$	$b_{HMO} X_{HMO}$
34	Growth of anaerobic DMSO degraders						$-\frac{1}{Y_{DMSO}}$	$-\frac{1}{Y_{DMSO}}$		1			$\mu_{DMSO} \frac{S_{DMSO}}{S_{DMSO} + K_{DMSO}} \frac{K_O}{S_O + K_O} X_{DMSO}$
35	Growth of aerobic DMS degraders						$-\frac{1}{Y_{DMS}}$	$-\frac{1}{Y_{DMS}}$		1			$\mu_{DMS} \frac{S_{DMS}}{S_{DMS} + K_{DMS}} \frac{S_O}{S_O + K_O} X_{DMS}$
36	Decay of anaerobic DMSO degraders	1-f _U		f _U						-1			$b_{TNO} X_{TNO}$
37	Decay of aerobic DMS degraders	1-f _U		f _U							-1		$b_{TNO} X_{TNO}$

Table 2. Stoichiometry matrix and process rates for e-ASM (Continued)

38	Growth of IPA degraders									1	$-\frac{1}{Y_{IPA}}$	$\mu_{IPA} \frac{S_{IPA}}{K_{IPA} + S_{IPA} + \left(\frac{S_{O_2}^2}{K_{II}}\right) + K_{IA} \cdot S_{ACE}} \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} X_{IPA}$
39	Decay of IPA degraders	$1 - f_U$								-1		$b_{AMO} X_{AMO}$
40	Acetone degradation									1		$\mu_{ACE} \frac{S_{ACE}}{K_{ACE} + S_{ACE} + \left(\frac{S_{O_2}^2}{K_{II}}\right) + K_{AI} \cdot S_{IPA}} \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} X_{IPA}$

Equation (13)에서, K_I 는 기질 과포화 상태에서의 평형상수이다.

2. IPA의 분해는 2단계 과정으로 이루어지며, IPA 분해 미생물은 *Bacillus pallidus*, *Sphingobacterium mixutae* 등의 호기성균으로 가정한다. 첫번째 단계에서는 IPA 분해 미생물의 성장을 위한 기질로 IPA를 사용하고 아세트산이 부산물로 생성된다. 아세트산은 IPA 분해 미생물에 의해 아세트산으로 분해되며 아세트산은 발효 부산물인 휘발성 지방산으로 최종 분해된다. 위 분해과정을 통해 IPA 분해 미생물은 Equation (14)와 같이 성장한다.

$$\frac{dX_{IPA}}{dt} = \mu_{IPA} \cdot \frac{S_{IPA}}{K_{IPA} + S_{IPA} + \left(\frac{S_{O_2}^2}{K_{II}}\right) + K_{IA} \cdot S_{ACE}} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2} + S_{O_2}} \cdot X_{IPA} - b_{IPA} \cdot X_{IPA} \quad (14)$$

Equation (14)에서, μ_{IPA} , X_{IPA} , b_{IPA} 는 각각 IPA 분해 미생물의 비성장속도, 반응조 내의 농도, 사멸속도를 의미한다. S_{IPA} 와 S_{ACE} 는 각각 IPA와 아세트산의 농도이며, K_{IPA} 는 IPA의 반포화상수, K_{IA} 는 아세트산에 의한 IPA 분해 미생물 성장의 저해상수이다. e-ASM에서 반영된 IPA 분해 메커니즘은 Table 2의 Process 38 ~ 40와 같다. Process 38 ~ 39는 IPA 분해미생물의 성장 및 사멸 과정을 나타내며, Process 40은 IPA의 최종 분해물질인 아세트산의 분해과정을 나타낸다.

5. GPS-X 기반 첨단 전자산업 폐수처리시설의 Digital Twin 구현

본 연구에서 개발한 e-ASM을 실제 구현하고 모사하기 위해 동력학적 모델링 소프트웨어인 GPS-X (Hydromantis Inc, Canada)를 이용하였다. GPS-X는 생활하수 및 산업폐수 처리장을 모델링 및 시뮬레이션 할 수 있는 공정 모사 프로그램으로써, 대상 공정의 정적(steady-state) 및 동적(dynamic) 상태로 모사할 수 있는 프로그램인 동시에, 플랜트를 운전하고 설계하는데 기본이 되는 유입조건, 활성슬러지 특성 등 많은 parameter의 특징을 반영할 수 있다. 특별히 본 연구에서는 제한한 e-ASM 모델 구현을 위해 GPS-X의 model developer를 이용하여 COD, TN, TP 등 유기물질과 TMAH, DMSO, IPA 등 난분해성 유기물질을 포함한 혼합 첨단 전자산업 폐수의 처리 메커니즘 모델식을 reference model로 추가하였다. 이를 통해, e-ASM 모델과 GPS-X model-developer를 통한 첨단 전자산업 폐수처리시설의 가상물리시스템(CPS)을 구현하였다. 구축된 가상물리시스템으로 첨단 전자산업 폐수 측정 데이터와 전자산업 공장에 설계된 제조공정 라인별 처리 공정의 설계인자를 고려하면 e-ASM 모델링을 통해 각 전자산업 제조시설에 특화

한 폐수처리시설의 Water Digital Twin 구현이 가능하다.

e-ASM 모델 기반 Water Digital Twin에 다양한 전자산업 폐수 처리시설의 정보를 입력하고 입자성 및 수용성 성분에 대한 화학양론적(Stoichiometric), 동력학적(Kinetic) 파라미터를 보정하여, 전자산업 폐수 처리 메커니즘의 정확한 모사가 가능하다. 이를 활용하면 유기물 산화, 질산화, 탈질화 및 난분해성 유기물질의 복잡한 제거 메커니즘을 pilot plant의 설치 없이 파악할 수 있으며, 원료 변화와 제품변화에 따른 다양한 유입폐수 변화에 적합한 최적 운전조건 설정, 그리고 새로운 첨단 전자산업 제조시설 설립 시 최적 공법 선정이 가능하게 되어 막대한 시간과 비용을 절감할 수 있다.

Figure 7과 Figure 8은 e-ASM과 GPS-X를 이용한 실제 첨단 전자산업 폐수처리시설의 Digital Twin 구현 방법과 실제 물리 시스템인 전자산업 폐수처리시설에서 CPS인 Water Digital Twin 상으로 구현을 위한 상세 과정을 나타내었다. 대상 전자산업 폐수처리시설에서 발생하는 폐수의 유량, COD, TN, TP 등 유기오염물질 및 TMAH 등 난분해성 물질의 발생량과 유입성상, 난분해성 물질조성, C/N 비 등 유의미한 측정 데이터 확보가 필요하다. 그리고 대상 시설의 공정과 반응조 크기 등 설계인자와 외부 탄소원 및 화학 약품 투입량, 폭기량, HRT 및 슬러지 발생량 등 운전 정보가 필요하다. 이를 기반으로, 전자산업 폐수처리공정의 layout을 설정하고 유입수부터 반응조, 침전조, 그리고 유출수까지의 물 수지(water balance)를 맞추어 실제 실규모 전자산업 폐수처리시설의 Water Digital Twin을

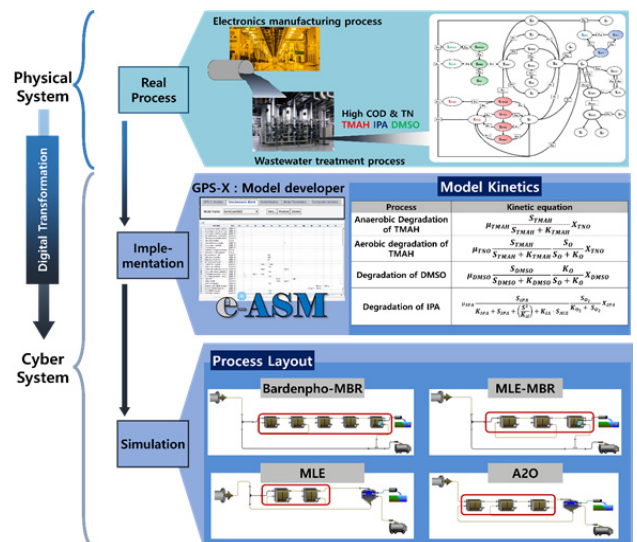


Figure 7. e-ASM development for digital twin of electronics industrial wastewater treatment plant using GPS-X.

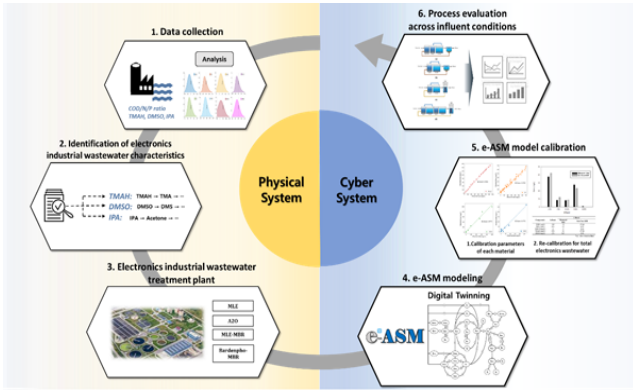


Figure 8. Water Digital Twin implementation procedure of electronics industrial wastewater treatment plant from physical to cyber systems (CPS).

구축할 수 있다. 실제 전자산업 폐수처리시설에서 Water Digital Twin 상으로의 구현 과정을 통해 physical to cyber systems (CPS)인 e-ASM 기반 Water Digital Twin 구현이 가능하다.

구축된 Water Digital Twin를 통해 첨단 전자산업 폐수처리의 분해과정, 분석, 공법 별 제거효율 비교 등, 실제 물리시스템에서 수행하기엔 막대한 시간과 비용을 들이는 일을 수행할 수 있다. 본 연구에서 제시한 e-ASM 모델은 수학적 모델을 기반으로 개발되었고 대상 전자산업 폐수처리시설에서 측정된 데이터를 확보한다면 이를 활용해 모델 내 계수 값을 보정 (Calibration)할 수 있으므로 각 전자산업 제조시설별 특화 폐수처리시설 Digital Twin 구축이 가능하다. 나아가 각 전자산업 제조시설별 발생하는 유기폐수를 환경 편익과 경제적 이익을

Table 3. List of kinetic parameters and yield coefficients in the e-ASM

Parameter	Unit	Value	Reference	Parameter	Unit	Value	Reference		
maximum specific growth rate	μ_{H_1}	d^{-1}	6	[16]	Half-Saturation coefficient	K_h	d^{-1}	3	[16]
	μ_{AUT}	d^{-1}	1	[16]		K_X	$gCOD\ gCOD^{-1}$	0.1	[16]
	μ_{PAO}	d^{-1}	1	[16]		K_F	$gCOD\ m^{-3}$	4	[16]
	μ_{TMAH}	d^{-1}	2-5.04	[42, 43]		K_{Fe}	$gCOD\ m^{-3}$	20	[16]
	μ_{TMA}	d^{-1}	2	[43]		K_A	$gCOD\ m^{-3}$	4	[16]
	μ_{DMA}	d^{-1}	2.5	[43]		K_{NH_4}	$gN\ m^{-3}$	0.05	[16]
	μ_{MMA}	d^{-1}	1.4	[43]		K_P	$gP\ m^{-3}$	0.01	[16]
	μ_{TNO}	d^{-1}	0.37	[43]		K_{ALK}	$moleHCO_3\ m^{-3}$	0.1	[16]
	μ_{AMO}	d^{-1}	0.33	[43]		K_{TMAH}	$gCOD\ m^{-3}$	15	[43]
	μ_{HMO}	d^{-1}	2	[43]		K_{TMA}	$gCOD\ m^{-3}$	0.06	[43]
	μ_{TAO}	d^{-1}	0.924-1.106	[44, 51]		K_{DMA}	$gCOD\ m^{-3}$	2.50×10^{-4}	[43]
	μ_{DMSO}	$mg\ gVSS^{-1}\ h^{-1}$	45	[52]		K_{MMA}	$gCOD\ m^{-3}$	0.15	[43]
	μ_{DMS}	$mg\ gVSS^{-1}\ h^{-1}$	2.6	[53]		K_{TNO}	$gCOD\ m^{-3}$	0.2	[43]
	μ_{IPA}	hr^{-1}	0.0227-0.337	[54-56]		K_{AMO}	$gCOD\ m^{-3}$	0.04	[43]
μ_{ACE}	d^{-1}	9.59	[55]	K_{HMO}	$gCOD\ m^{-3}$	1.00×10^{-6}	[43]		
Inhibition rate constant	K_{O_2}	$g\ m^{-3}$	0.2	[16]	K_{TAO}	$gCOD\ m^{-3}$	800	[51]	
	K_{NO_3}	$g\ m^{-3}$	0.5	[16]	K_{DMSO}	$g\ m^{-3}$	10-190	[52]	
	K_{IPP}	$g\ g^{-1}$	0.02	[16]	K_{DMS}	$g\ m^{-3}$	10	[52]	
	K_{IT}	$g\ m^{-3}$	2	[55]	K_{IPA}	$g\ m^{-3}$	241.6-733	[54-56]	
	K_{II}	$g\ m^{-3}$	270.75-898.87	[54-56]	K_{ACE}	$g\ m^{-3}$	94.8	[55]	
	K_A	$g\ m^{-3}$	544	[54-56]	Cross-inhibition rate constant	K_{AI}	-	2.58×10^{-3}	[54-56]
Decay rate	b_H	d^{-1}	0.4	[16]		K_{IA}	-	4.37×10^{-4}	[54-56]
	b_{AUT}	d^{-1}	0.15	[16]	Biomass yield	Y_H	$gCOD\ gCOD^{-1}$	0.63	[16]
	b_{PAO}	d^{-1}	0.2	[16]		Y_{AUT}	$gCOD\ gN^{-1}$	0.63	[16]
	b_{PP}	d^{-1}	0.2	[16]		Y_{PAO}	$gP\ gCOD^{-1}$	0.24	[16]
	b_{PHA}	d^{-1}	0.2	[16]		Y_{TNO}	$gCOD\ gCOD^{-1}$	0.065	[43]
	b_{TNO}	d^{-1}	0.017	[43]		Y_{AMO}	$gCOD\ gCOD^{-1}$	0.026	[43]
	b_{AMO}	d^{-1}	0.017	[43]		Y_{HMO}	$gCOD\ gCOD^{-1}$	0.05	[43]
	b_{HMO}	d^{-1}	0.017	[43]		Y_{TAO}	$g\ g^{-1}$	0.34	[30, 51]
	b_{TAO}	d^{-1}	0.017	[51]		Y_{DMSO}	$g\ g^{-1}$	0.08	[45]
	b_{DMSO}	d^{-1}	0.017	[28]		Y_{DMS}	$g\ g^{-1}$	0.1	[53]
	b_{DMS}	d^{-1}	0.017	[28]		Y_{IPA}	$g\ g^{-1}$	0.29	[55]
	b_{IPA}	d^{-1}	0.016	[57]		Y_{ACE}	$g\ g^{-1}$	0.40	[55]

고려한 공정 효율 분석을 통해 최적의 생물학적 처리 공법을 선정할 수 있다. e-ASM을 이용한 Water Digital Twin 응용 분야로 실규모 첨단 전자산업 폐수처리시설의 특화 모델링, 변수 보정, 수질 예측, 운전조건탐색, 그리고 공법 비교평가에 대한 자세한 논의는 Part 2에 설명하였다.

6. 결론

본 논문에서는 난분해성 물질을 포함한 첨단 전자산업 폐수 내 오염물질의 생물학적 분해 메커니즘을 모사할 수 있는 e-ASM (Electronics industrial wastewater Activate sludge model) 을 개발하고, GPS-X를 활용한 전자산업 폐수처리시설의 Digital Twin 구축 방안을 제시하였다. e-ASM은 ASM2d를 바탕으로 하여, 난분해성 유기물질인 TMAH, DMSO, IPA 분해 미생물의 성장 및 사멸 과정을 중심으로 전자산업 폐수 성상 내 입자성 및 수용성 성분을 포함한 40개의 반응속도식, 70개의 동력학적 파라미터를 고려하여 개발하였다. e-ASM을 통해 유입수 측정 데이터와 전자산업 공장에 설계된 폐수처리 공정의 설계인자를 반영하고 모델 보정을 통해 각 전자산업 제조시설에 특화한 폐수처리공정의 Digital Twin을 구현할 수 있다. Digital Twin을 통해 대상 공정의 특화 모델링부터 최적 공법 선정 및 최적 운전 탐색이 가능하여 지속가능한 첨단 전자산업을 위한 폐수처리공정의 기초 모델로 활용될 수 있을 것으로 사료된다.

감사

이 논문은 2021년도 과학기술정보통신부의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구로 이에 감사를 드립니다 (No. 2021R1A2C2007838).

Reference

- Park, H. W. "Trends in Production and Manufacturing Technologies Related to Smart Factories". *Journal of the KSME.*, **57**(8), 24-29. (2015).
- Kim, S. J., "The 4th Industrial Revolution and smart manufacturing," *Korean J. Constr. Eng. Manag.*, **18**(3), 19-22 (2017).
- National Academy of Engineering of Korea, "A study on the Competencies and Education Required for Chemical Engineering Engineers in the Era of the 4th Industrial Revolution," 1-15 (2018).
- Kim, M. S., "Trends of information and communications industry," *KIDIS*, No. 43, 3-13 (2020).
- Lee, E. M., "Trends of information and communications industry," *KIDIS*, No. 20, 52-59 (2012).
- Ministry of Trade, Industry and Energy, "Korean-semiconductor strategy to realize a comprehensive semiconductor power nation," **13** (2021).
- Ministry of Environment, "2020 Generation and Treatment of industrial wastewater," 1-608 (2020).
- Lee, J. S., Kim, S. J. and Gil, D. S., "Treatment system according to wastewater characteristics discharged from each process of semiconductor facilities," K.R. Patent No. 10-2241014 (2020).
- Kim, J. H., & Jun, S. J. "Treatment of phosphorous in sewage and wastewater". *KIC News*, **14**(5), 13-21. (2011).
- Heo, Y. T., "A Study for optimum treatment of TN wastewater including TMAH in LCD industry," Graduate School of Industry, Kyungbook National University Daegu, 13-24 (2011).
- National Institute of Environmental Research, "Guidelines on Best Available Techniques for Environmental Pollution Prevention and Integrated Management in Semiconductor Manufacturing Industry," 1-570 (2020).
- Kim, M. K., "Study on Phosphorus Removal and Denitrification of Etchant Wastewater," M.Sc. Dissertation. Myongji University Graduate School: Environmental Energy Engineering, 33-35 (2014).
- Kang, C. K., "Technological consideration on the domestic production of high quality recycled semiconductor wastewater for industrial purpose," M.Sc. Dissertation. Major Environ. Eng. Dep. Environ. Eng. Grad. Sch. Environ. Public Heal. Youngnam University, 45-50 (2017).
- He, S. Y., Lin, Y. H., Hou, K. Y., & Hwang S. C. J. "Degradation of dimethyl-sulfoxide-containing wastewater using airlift bioreactor by polyvinyl-alcohol-immobilized cell beads". *Bioresour. Technol.*, **102**(10), 5609-5616 (2011).
- Eskenazi, B., Gold, E. B., Lasley, B. L., Samuels, S. J., Hammond, S. K., Wight, S., ... & Schenker, M. B. "Prospective monitoring of early fetal loss and clinical spontaneous abortion among female semiconductor workers". *Am. J. Ind. Med.*, **28**(6), 833-846 (1995).
- Henze, M., Gujer, W., Mino, T., & van Loosdrecht, M. C. "Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3". IWA publishing. (2000).
- Yoo, C. K., Kim, M. H., "Design and Environmental/Economic Performance Evaluation of Wastewater Treatment Plants Using Modeling Methodology," *Korean Chem. Eng. Res.*, **46**(3), 610-618 (2008).
- Choi, T. H., "A Study on the Optimization of Sewage Treatment Plant Using ASM No.2d Simulation," Ph.D. Dissertation. *Dep. Environ. Eng. Grad. Sch. Suwon Univ.*, 17-19 (2019).
- Lee, H. and Yi, J., "Waste Minimization Technology Trends in Semiconductor Industries," *CLEAN TECHNOLOGY* **4**(1), 6-23 (1998).
- Jeon, E. T., "A Study on the Decision of Process for Nitrogen Removal in Semiconductor Rinsing Wastewater," M.Sc. Dissertation, Hanyang University Graduate School: Environmental Energy Engineering, 1-46 (2011).
- Park, J. Y., Kim, S. J., Choi, K. K., Lee, Y. W., Lee, J. J., Hwang, K. W. and Lee, W. K., "High-Efficient Fluoride Removal and Minimization of Residual Calcium Using Hydrodynamic Cavitation in Inorganic Electronics Wastewater," *Environmental*

- Engineering Research.*, 2-3 (2007).
22. Lin, S. H. and Kiang C. D., "Combined physical, chemical and biological treatments of wastewater containing organics from a semiconductor plant," *J. Hazard. Mater.*, **97**(1-3), 159-171 (2003).
 23. Lee, G. C., Park, Y. J., Kang, K. H., Jung, M. O., Ryu, D. H., Jung, S. S., & Lee, W. "Characteristics of organic matters in influents and effluents of sewage treatment plants in Gyeongsanbuk-do". *Journal of Korean Society of Environmental Engineers*, **43**(5), 367-376. (2021).
 24. Che, T. K., Ni, C. H., Chan, Y. C., and Lu, M. C., "MBR/RO/ozone processes for TFT-LCD industrial wastewater treatment and recycling," *Water Sci. Technol.*, **51**(6-7), 411-419 (2005).
 25. Chuang, S. H., Chang, W. C., Huang, Y. H., Tseng, C. C., and Tai, C. C., "Effects of different carbon supplements on phosphorus removal in low C/P ratio industrial wastewater," *Bioresour. Technol.*, **102**(9), 5461-5465 (2011).
 26. Huang, H., Liu, J., Zhang, P., Zhnag, D., and Gao, F., "Investigation on the simultaneous removal of fluoride, ammonia nitrogen and phosphate from semiconductor wastewater using chemical precipitation," *Chem. Eng. J.*, **307**, 696-706 (2017).
 27. Chung, S., Chung, J., and Chung, C., "Enhanced electrochemical oxidation process with hydrogen peroxide pretreatment for removal of high strength ammonia from semiconductor wastewater," *J. Water Process Eng.*, **37**(4), 101-425 (2020).
 28. T. Fukushima, L. M. Whang, P. C. Chen, D. W. Putri, M. Y. Chang, Y. J. Wu and Y. C. Lee., "Linking TFT-LCD wastewater treatment performance to microbial population abundance of *Hyphomicrobium* and *Thiobacillus* spp.," *Bioresour. Technology*, **141**, 131-137 (2013).
 29. Kang, C. K. "Technological consideration on the domestic production of high quality recycled semiconductor wastewater for industrial purpose", M.Sc. Dissertation. Major in Environmental Engineering Department of Environmental Engineering Graduate School of Environment & Public Health Youngnam University, 16-33 (2017).
 30. Chae, S., "Study for Optimization of Semiconductor Wastewater Treatment Process Including High Concentration of Nitrogen in Denitrification Tanks Using GPS-X Simulator," *J. KSET*, **16**(4), 269-278 (2015).
 31. Ryu, H. D., Lim, C. S., Kang, M. K., & Lee, S. I. "Evaluation of struvite obtained from semiconductor wastewater as a fertilizer in cultivating Chinese cabbage". *J. Hazard. Mater.* **221**, 248-255 (2012).
 32. An, M. K., Woo, G. N., Kim, J. H., Kang, M. K., Ryu, H. D. and Lee, S. I., "Optimum Condition for Fluoride Removal Prior to the Application of Struvite Crystallization in Treating Semiconductor Wastewater," *Journal of KSWE*, **25**(6), 916-921 (2009).
 33. An, B. M., Jeong, J. Y., Kim, J. H. and Park, J. Y., "Treatment of Semiconductor Wastewater using Bipolar ZVI Packed Bed Electrolytic Cell," *KSCE Journal*, 9-11 (2012).
 34. Chen, S. Y., Lu, L. A., and Lin, J. G., "Biodegradation of tetramethylammonium hydroxide (TMAH) in completely autotrophic nitrogen removal over nitrite (CANON) process," *Bioresour. Technol.*, **210**, 88-93 (2016).
 35. Innocenzi, V., Zueva, S., Prisciandaro, M., De Michelis, I., Di Renzo, A., Di Celso, G. M., & Vegliò, F. "Treatment of TMAH solutions from the microelectronics industry: A combined process scheme". *J. Water Process Eng.*, **31**, 100780. (2019).
 36. Ferella, F., Innocenzi, V., Zueva, S., Corradini, V., Ippolito, N. M., Birloaga, I. P., ... & Vegliò, F. "Aerobic treatment of waste process solutions from the semiconductor industry: From lab to pilot scale". *Sustainability*, **11**(14), 3923. (2019).
 37. Heo, S. K., Nam, K. J., Loy-Benitez, and Yoo, C. K., "Data-Driven Hybrid Model for Forecasting Wastewater Influent Loads Based on Multimodal and Ensemble Deep Learning," *IEEE Trans. Ind. Informatics*, **17**(10), 6925-6934 (2021).
 38. Cho, B., "Synthesis of Removal Agent and Development of Treatment Technology on Copper," *Journal of the Korean Society of Industry Convergence*, **16**(2), 35-39 (2013).
 39. Jeong, G. T., Park, S. H., Park, J. H., Lim, E. T., Bang, S. H., & Park, D. H. "Effect of factors of nitrification process in wastewater treatment". *KSBB Journal*, **24**(3), 296-302. (2009).
 40. Bowker, R. P. G. and Stensel, D. H., "Design Manual Phosphorus Removal," EPA, 125-126 (1987).
 41. Park, H., "Improvement of the advanced treatment process in the present sewage treatment plants in Korea," M.Sc. Dissertation. Grad. Sch. Public Heal. Yonsei University, 38-47 (2009).
 42. Choi H. Y. and Park D. W., "A Study on Oxidation of Tetramethylammonium Hydroxide(TMAH) using UV/Persulfate," *J. Korean Soc. Environ. Eng.*, **42**(10), 443-451 (2020).
 43. B. Liu, K. Yoshinaga, J. Wub, W. Chen, M. Terashima, R. Goel, D. Pangallo and H. Yasui., "Kinetic analysis of biological degradation for tetramethylammonium hydroxide (TMAH) in the anaerobic activated sludge system at ambient temperature," *Biochem. Eng. J.*, **114**, 42-49 (2016).
 44. Wu, Y. J., Irmayani, L., Setiyawan, A. A. and Whang, L. M., "Aerobic degradation of high tetramethylammonium hydroxide (TMAH) and its impacts on nitrification and microbial community," *Chemosphere*, **258**, 3-11 (2020).
 45. H. Cheng, C. Liu, Y. Lei, Y. Chiu, J. Mangalidan, C. Wu, Y. Wu and L. Whang., "Biological treatment of DMSO-containing wastewater from semiconductor industry under aerobic and methanogenic conditions," *Chemosphere*, **236**, 2-23 (2019).
 46. Park, S. J., Yoon, T. J., Bae, J. H., Seo, H. J., and H. J. Park, "Biological treatment of wastewater containing dimethyl

- sulphoxide from the semi-conductor industry,” *Process Biochem.*, **36**(6), 579-589 (2001).
47. Park, Y. S., “Study on Computer Simulations of Wastewater Treatment Process for Recovery of Isopropyl Alcohol (IPA) from Wafer Cleaning,” Ph.D. Dissertation. Dep. Environ. Eng. Grad. Sch. Suwon University, 1-129 (2017).
 48. Hockenbury, M. R. and Grady, C. P. L., “Inhibition of nitrification: effects of selected organic compounds,” *J. Water Pollut. Control Fed.*, **49**(5), 768-777 (1977).
 49. Steffan, R. J., McClay, K., Vainberg, S., Condee, C. W. and Zhang, D., “Biodegradation of the gasoline oxygenates methyl tert-butyl ether, ethyl tert-butyl ether, and tert-amyl methyl ether by propane-oxidizing bacteria,” *Appl. Environ. Microbiol.*, **63**(11), 4216-4222 (1997).
 50. Weon, K., “A Study on the Pre-treatment of Biological Processes for High-concentration Semiconductor Cleaning Wastewater,” M.Sc. Dissertation. Major in Environmental Engineering Department of Process Engineering Graduate School of industry Chungbuk National University, 55-56 (2018).
 51. Michelis, D. I., Renzo, D. A., Saraullo, M. and Veglio, F., “Kinetic Study of Aerobic Degradation of Tetramethylammonium Hydroxide (Tmah) Waste Produced in Electronic Industries,” *DEStech Transactions on Environment, Energy and Earth Sciences*, 27-32 (2017).
 52. Lei, C., Whang, L., Chen, P., Lei, C., Whang, L. and Chen, P., “Biological treatment of thin-film transistor liquid crystal display (TFT-LCD) wastewater using aerobic and anoxic / oxic sequencing batch reactors Chemosphere Biological treatment of thin-film transistor liquid crystal display (TFT-LCD) wastewater usi,” *Chemosphere.*, **81**(1), 57-64 (2010).
 53. Hayes, A. C., Liss, S. N., and Allen, D. G., “Growth kinetics of Hyphomicrobium and Thiobacillus spp. in mixed cultures degrading dimethyl sulfide and methanol,” *Appl. Environ. Microbiol.*, **76**(16), 5423-5431 (2010).
 54. Geng, Y., Deng, Y., Chen, F., Jin, H., Tao, K. and Hou, T., “Biodegradation of isopropanol by a solvent-tolerant paracoccus denitrificans strain,” *Prep. Biochem. Biotechnol.*, **45**(5), 491-499 (2015).
 55. Lu, C., Chang, K. and Hsu, S., “A model for treating isopropyl alcohol and acetone mixtures in a trickle-bed air biofilter,” *Process Biochem.*, **39**(12), 1849-1858 (2004).
 56. Raghuvanshi, S. and Gupta, S., “Growth Kinetics of Acclimated Mixed Culture for Degradation of Isopropyl Alcohol (IPA),” *J. Biotechnol. Biomater.*, **13**(2), 3-13 (2013)
 57. Carrero-Colón, M., Nakatsu, C. H. and Konopka, A., “Effect of nutrient periodicity on microbial community dynamics,” *Appl. Environ. Microbiol.*, **72**(5), 3175-3183 (2006).