

## D-3

### 오존최대농도지표를 이용한 오존단기예측모형 개발

#### Development of a Short-term Model for Photochemical Oxidants using OPI

전의찬, 김정옥

동신대학교 환경공학과

\*서울대학교 환경대학원

#### I. 서론

최근 원인물질의 주배출원인 자동차의 급격한 증가로 질소산화물과 휘발성유기화합물 등 원인물질이 증가하고 있으므로, 이들의 대기 중 광화학반응으로 발생하는 광화학산화제에 대한 관리대책이 보다 중요성을 갖게 되었다.

정부에서도 광화학산화제 관리의 중요성을 인식하여, 1995년 7월 1일 서울지역에 '오존경보제'를 도입한 것을 시작으로, 1997년 현재 광역시 및 수도권지역에 확대 실시하고 있다. 이러한 대기오염경보제를 효율적으로 운영하는데 필수적인 단기예측모형의 수립이 광화학산화제의 경우에는 대단히 어렵다. 그것은, 일반 대기예측모형의 경우에는 이류(移流)와 난류 확산만을 고려하면 되지만, 광화학산화제 예측모형의 경우에는 수십개 반응물질의 백개 이상의 광화학반응을 고려하여야 하기 때문이다.

그동안 우리나라에서의 광화학산화제에 대한 연구들이 주로, 오염도 현황, 오존과 영향인자들 사이의 관계 분석, 통계모형의 개발, 그리고, 수치모형의 민감도 분석 등을 중심으로 이루어졌다. 그러나, 개발된 통계모형들은 오존 농도에 영향을 미치는 인자들에 대한 설명이 불충분하고, 모형의 예측 성능이 떨어지는 결함이 있다. 또, 외국에서 주로 개발된 수치모형들은 현실적으로 우리나라에서 작성하기 어려운 상세한 입력자료를 필요로 하고 있으므로, 현실에 적용하기에는 어려움이 있다.

본 연구에서는 모형의 예측성능을 높이고, 현실적으로 입력자료를 확보할 수 있는 모형을 작성하기 위하여, 대기오염측정망의 자료로서 산출할 수 있는 오존최고농도지표(OPI)를 개발하여 광화학산화제 단기예측모형을 작성하였다.

#### II. 연구방법

본 연구에서 개발한 오존최대농도지표(OPI: Ozone Peak Indicator)는 혼합고와 일사량의 변화가 없는 가상적인 조건에서, 즉, 원인물질만이 제한인자로 작용하는 조건에서, 원인물질의 양 및 그 비에 따라 발생할 수 있는 예측일의 오존 최대 농도이다. 3차원 적합 기법인 표면 적합 기법을 이용하여 OPI와 원인물질들인 질소산화물 초기치 및 탄화수소 초기치 사이의 관계로서 그날의 OPI를 산출할 수 있으며, 예측일의 시간별 오존 농도는 그날의 오존 최대농도 지표를 기준으로 혼합고와 일사량의 영향을 고려하여 산정하였다. 오존 농도 예측에 사용되는 시간별 일사량은 태양상수를 기준으로 여러 가지 감쇄 요인을 고려하여 예측하였으며, 시간별 혼합고는 안정도를 고려하여 추정하였다.

광화학산화제 특성을 분석하기 위한 자료는 환경부 및 서울시에서 운영하고 있는 20개소 대기오염자동측정소의 시간별 측정자료를 이용하였다. 기상자료는 기상청 서울측후소의 일 기상자료와 대기오염자동측정소 관측자료를 이용하였고, 3시간 간격으로 측정된 풍속 및 기온 등은 내삽하여 시간별 측정치로 환산하였다.

이렇게 개발된 예측모형은 검증과 이용에 용이하도록 전산모형으로 작성하고, 대상지역인 서울시에 적용하여, 모형의 예측성능을 평가하였다.

#### III. 결과 및 고찰

##### 1. 오존최대농도지표(OPI)

'오존최대농도지표'(OPI: Ozone Peak Indicator)는 경험적으로 원인물질 유입량 및 원인물질간의 비에 따른 잠재적인 일 최대 오존 농도를 추정하기 위한 지표로서 식(1)과 같이 정의된다.

$$OPI = \left\{ \frac{(O_3)_{\max} \cdot (H_{\text{eff}})_{\max}}{(Rad)_{\max}} \right\} \quad (1)$$

또, 식(1)로 계산한 일별 OPI값과 질소산화물 및 탄화수소의 초기치 사이의 관계를 도출하여, NO<sub>x</sub> 초기농도(NO<sub>x</sub><sub>initial</sub>) 및 THC 초기농도(THC<sub>initial</sub>)에 따라 OPI를 예측할 수 있는 모형을 구성하였다. 그런데, 이들 원인물질들은 그 양뿐 아니라 비에 따라서도 OPI에 미치는 영향이 달라지므로, 식(2)와 같이 3차원 적합 방법을 이용하여 OPI 예측 모형을 구성하였다.

$$OPI = \text{SUFFIT}(NO_{x\text{initial}}, THC_{\text{initial}}) = \sum C_{j,i} \{ NO_{x\text{initial}} \}^i \cdot \{ THC_{\text{initial}} \}^j \quad (2)$$

여기서, C<sub>j,i</sub>는 3차원 적합 함수의 계수인데, 서울지역을 대상으로 산출한 값은 Table 1과 같다

Table 1 Coefficients of surface fitting function in Seoul

C <sub>j,i</sub>	j=0	j=1	j=2	j=3
i=0	19.2507	-0.216703	0.000527096	-2.17357 · e <sup>-7</sup>
i=1	-0.746017	0.0544103	-0.000301837	4.51298 · e <sup>-7</sup>
i=2	-0.00434176	-0.00112879	7.86991 · e <sup>-6</sup>	-1.35286 · e <sup>-8</sup>
i=3	0.000177657	4.97900 · e <sup>-6</sup>	-4.94502 · e <sup>-8</sup>	9.73864 · e <sup>-11</sup>

## 2. 예측모형의 기본식 및 구성

대기를 하나의 광화학반응로라고 할 때, 에너지원인 태양 복사는 2시간 후의 오존 농도와 정비례 관계에 있는 것으로 분석되었다. 또, 혼합고도 반응로의 크기를 결정하는 인자중의 하나로서, 반비례 관계에 있는 변수로 설정하였다.

이와 같은 분석 결과를 중심으로, 시간별 오존 농도를 예측하기 위한 예측모형의 기본식을 식(3)과 같이 수립하였다.

$$O_3(t) = \left\{ \frac{(OPI) \cdot Rad(t-2)}{H_{\text{eff}}} \right\} \quad (3)$$

식(3)의 기본식을 이용하여, 광화학산화제의 시간별 농도를 예측할 수 있는 예측모형을 Fortran을 이용하여 개발하고 SEOM(Seoul Empirical Oxidants Model)이라고 하였다.

SEOM에서는 입력자료중 원인물질의 농도로는 오전 7시~9시의 질소산화물 및 탄화수소 농도를 입력하도록 하였고, 모형내에서 이들 값을 이용하여 초기치를 계산하도록 하였다. 최대 오존 농도 지표인 OPI는 원인물질의 초기치를 이용하여, 사용자의 선택에 따라서 3차원 적합 함수를 이용하여 산출하거나, 자료 배열에서 직접 읽어들이도록 하였다.

일사량은 외부에서 입력자료로 입력하거나, SEOM모형내에서 계산하도록 하였고, 혼합고도 SEOM모형내에서 안정도에 따라서 계산하거나, 외부에서 입력자료로 입력하거나, 또는 PBM모형에서 사용하는 특성곡선에 따라 산출할 수 있도록 하였다.

## 3. 예측모형의 평가

1993년의 자료중, SEOM모형에 의하여 총 1696시간 자료에 대한 오존 농도를 예측하고, 측정 농도와 상관정도를 산출한 결과의 상관계수는 0.815였으며, 선형회귀식은 O<sub>3</sub>=0.72(O<sub>3</sub>)<sub>pred</sub>+0.012였다. 그런데, 상관계수는 '1'에 가까울수록 강한 상관관계를 나타내며, 선형회귀식의 경우에는 독립변수의 계수가 '1'에 가까울수록, y절편이 '0'에 가까울수록, 예측모형의 성능이 우수한 것으로 평가되므로, 본 연구에서 작성한 SEOM은, 예측 성능이 우수한 것으로 평가할 수 있다.

오존 측정 농도와 SEOM모형에 의한 예측 농도의 평균값을 분석한 결과, 산술평균치는 측정 농도가 예측 농도에 비하여 약 5% 정도 높게 나타나고 있고, 중앙값은 예측 농도가 측정 농도에 비하여 약 5% 정도 높게 나타나고 있다. 오존 측정 농도와 예측 농도의 산포도를 분석한 결과, 최대값은 예측 농도가 측정 농도에 비하여 2.8ppb 컸으며, 최소값은 측정 농도보다 예측 농도가 2.6ppb 작았다.

#### IV. 결론

광화학산화제 예측모형의 예측성능을 향상시키고, 현실적으로 입력자료들을 확보할 수 있는 광화학산화제 단기예측모형을 개발하기 위하여, 원인물질만이 제한인자로 작용할 경우의 잠재적인 일 최대 오존 농도에 해당하는 오존최대농도지표(OPI: Ozone Peak Indicator)를 개발하고, 개발된 모형을 실제 어느 지역의 광화학산화제 오염도 예측에 적용할 수 있도록, 기본식의 구성인자인 일사량과 혼합고도 함께 예측할 수 있는 전산프로그램 'SEOM'(Seoul Empirical Oxidants Model)을 개발하였다.

이 모형을 서울지역에 적용하고 상관관계, 평균값, 산포도 분석에 의하여 모형의 정합도를 검정한 결과, SEOM의 예측 성능이 우수한 것으로 평가되었다.

개발된 SEOM은 광화학산화제 농도를, 원인물질 초기치와 일사량 및 혼합고도의 변화를 고려하여 산출하는 대도시형 광화학산화제 단기예측모형이다. SEOM은 어느 지역의 지역적 특성을 반영할 수 있으며, 간단한 입력자료에 의하여 비교적 우수한 예측 결과를 얻을 수 있도록 개발된 모형이다.

#### 참고문헌

- Alan M.D., "A Comparison of Chemical Mechanisms Used in Atmospheric Models", *Atmos. Environ.*, Vol.18, No.2, 1984.
- Carter, W.P.L., "Development of Ozone Reactivity Scales for Volatile Organic Compounds", *JAWMA*, Vol.44, 1994.
- Carter, W.P.L., F.W. Lurmann, R. Atkinson, and A.C. Lloyd. 1986a. Development and Testing of a Surrogate Species Chemical Reaction Mechanism. EPA/600/3-86-031. U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, N.C. 690 pp.
- Chock, D.P. and N. Barbara, "A Monte-Carlo Simulation of the Ozone Attainment Process", *JAWMA*, Vol.43, 1993.
- Christian S. and S. Dradeep, "The Impact of Cloud Chemistry on Photochemical Oxidant Formation, Water, Air and Soil Pollution", Vol.24, 1985.
- David Fairley, "Photochemical Model Bias", *JAWMA*, Vol.43, 1993.
- Finlayson-pitts, B.J., J.N., Jr. Pitts, "Atmospheric Chemistry of Tropospheric Ozone Formation: Scientific and Regulatory Implications", *JAWMA*, Vol.43, 1993.
- Gery, M.W. and R.R. Croude, "User's Guide for Executing OZIPR", U.S. Department of Commerce, 1991.
- Gery, M.W., G.Z. Whitten, J.P. Killus, and M.C. Dodge. 1989. A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling. *J. Geophys. Res.* 94:12925-12956.
- Iqbal, Muhammad, "An Introduction to solar Radiation..Canada:Academic Press, 1983.
- Isidorov, Valerii A., "Organic Chemistry of the Earth's Atmosphere, Library of Congress, 1990.
- 박옥현, "부산에 있어서 광화학 오염의 제어를 위한 통계학적 접근", 「화학공업과 기술」, Vol. 4, 1985, pp. 62 -70
- 윤경임, 「시계열분석을 이용한 광화학 스모그 물질의 변화특성조사」, 서울대학교 환경대학원 석사학위논문, 1993
- 장영기, 「서울지역의 문오염원에 의한 대기오염 단기예측모형개발」, 서울대학교 대학원 박사학위논문, 1992
- 전의찬, 정진희, 조규탁, 김성미, 「대기질 측정방법의 효율화 방안에 관한 연구」, 서울시정개발연구원, 1994.