

## DR2) 독성 기체상 물질의 확산 및 대응 분석을 위한 라그랑지안 입자모델의 개발

### Development of a Lagrangian Stochastic Dispersion Model for Toxic Gas Release

이강웅, 장유운, 이미혜<sup>1)</sup>, 조성억<sup>2)</sup>, 조승현<sup>2)</sup>  
한국의국어대학교 환경학과, 기상연구소 응용기상실<sup>1)</sup>  
(주) 환경과학기술부설 환경과학기술연구소<sup>2)</sup>

#### 1. 서론

우리 나라의 경우에 산업화가 가속화되면서 유해 독성 기체상 물질의 누출사고 위험성이 점점 높아져 가고 있는 실정이다. 우리 나라는 특히 산업인력의 조달과 지방경제 발달을 목적으로 중소도시 근방에 대규모 공단이 건설되어 있는 경우가 많다. 이러한 공단에는 위험물을 취급하는 공장과 위험물이 수송 및 이동되는 사례가 매우 많을 것으로 추정되며 이러한 경로를 통하여 유독가스 누출사고가 발생할 경우 바로 인근 주민 및 작업 인원들의 생명을 위협할 수 있다. 이미 선진국에서는 이와 같은 유독성 기체의 누출 사고에 대응하여 다양한 응급대치 모델을 개발 제작하여 이용하고 있다. 이와 같은 유독성 기체 누출의 응급 대응 모델로 ALOHA, DEGADIS, HGSYSTEM, SLAB 등이 가장 널리 사용되고 있다. 이와 같은 모델의 특징은 입력 인자를 최소화하면서 유독 물질의 확산 및 이동을 빠른 시간 내에 모사할 수 있게 개발된 것이 특징이다. 하지만 이들 모델의 경우 그 적용 지형이 평탄 지형을 가정한 것으로 지형의 굴곡이 매우 심한 우리 나라의 실정에 적합하지 않는 경우가 많다. 우리 나라에서도 복잡지형에 따른 대기확산 모델을 적용하고 비교한 연구가 있지만 대부분의 경우 1 시간 이상의 평균 농도 산출에 사용되는 모델들로 누출사고와 같은 단시간 모사에는 적합하지 않다 (김영성 외 1998). 더욱이 우리 나라에서 사업장에서의 일반적인 현장 인력이 일상적으로 사용하기에는 용이하지 않은 것도 이들 모델의 사용을 제한하는 점이다. 또한 아직 우리 나라에서는 독성물질의 확산 및 이동을 모사하는 모델의 독자적인 개발이 매우 부족한 현실이며, 우리 나라의 복잡 지형을 고려하고 사용이 용이한 모델의 개발이 이제 절실한 상황이다(이종범 1995; 장영기 외 1995; 전의찬, 1999).

#### 2. 연구방법

10 km 이상의 거리에서는 일반적으로 충분한 확산에 의한 희석이 이루어 질 수 있기 때문에 유독성 기체상 물질의 누출시 확산 대응을 위한 모델은 보통 수 km 정도 규모로 이루어진다. 기체의 확산을 복잡지형에 모사하기 위해서 가장 많이 이용되는 방식은 가우시안 퍼프 모델이다. 하지만 퍼프모델의 경우에 복잡지형에서 흔히 나타날 수 있는 높이에 따른 풍향과 풍속의 차이와 건성침착과 증력침착 등을 고려하기가 힘들기 때문에 라그랑지안 입자 모델을 선택하였다. 라그랑지안 모델의 경우에는 계산 시간이 상대적으로 오래 걸리고 복잡한 화학반응을 고려하기가 힘들지만 짧은 거리와 시간에서 발생하는 확산의 경우 화학반응이 중요한 농도 변화 요인이 되지 않을 뿐 만 아니라 최근에는 PC의 연산속도가 매우 빨라졌기 때문에 과거에 적용하기 힘든 라그랑지안 방식을 응급대응 모델에 적용이 가능한 상태이다. 본 연구에 사용된 라그랑지안 모델은 아래와 같은 Stochastic Differential Langevin 식의 해에 기초하였다(Luhar and Rao, 1994; Weil, 1994; Hernandez, et al., 1995; Nguyen, et al., 1997)

$$du(t) = -\alpha u(t)dt + \lambda d\xi(t)$$

$u$  : 입자의 속도벡터

$\alpha$  : 라그랑지안 timescale vector의 역함수

$\lambda d\xi(t)$  ; random increments vector

입자의 움직임은 Monte\_Carlo 방법으로 재현된 random 속도 벡터로 모사하였다. 입자의 속도 벡터는

$$u = \bar{u} + \acute{u} \quad \bar{u} : \text{mean wind velocity} \quad \acute{u} : \text{turbulent fluctuation}$$

로 표시할 수 있으며, turbulent term은 아래와 같이 autocorrelation term ( $R$ )과 uncorrelated zero average Gaussian noises ( $\acute{u}''$ )를 고려하여 계산하였다.

$$\acute{u}(t + \Delta t) = R(\Delta t)\acute{u}(t) + \acute{u}''(t + \Delta t)$$

### 3. 결과 및 고찰

작성된 라그랑지안 모델의 평가를 위하여 그 결과를 가우시안 해 (analytical)를 이용하여 구한 것과 비교하여 보았다. 아래 그림에서 1000g의 가스상의 물질이 풍속 5m/sec, 안정도 c 등급에서 일시에 배출(instantaneous source)되었을 경우 풍하 방향의 15분 평균 농도 분포 비교를 analytical 한 해와 stochastic한 해를 이용하여 계산한 결과를 나타낸 것으로 figure 1은 지상 0 m에서, figure 2는 지상 100m에서 누출이 발생했을 때 플룸의 중심부 ( $y=0$ )에서의 농도를 비교한 것이다. 전체적으로 500 m 이내에서는 (near field) 라그랑지안 방법이 가우시안 해보다 30% 정도 과소 평가 되고 그 이후에는 오히려 약 30% 정도 높게 나타나는 것으로 나타났다.

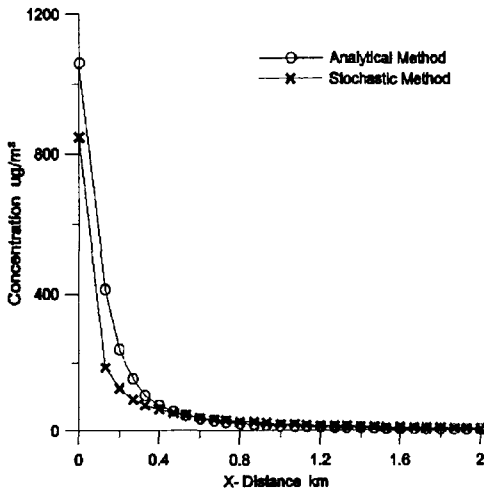


Figure 1. Instantaneous release at 0 m

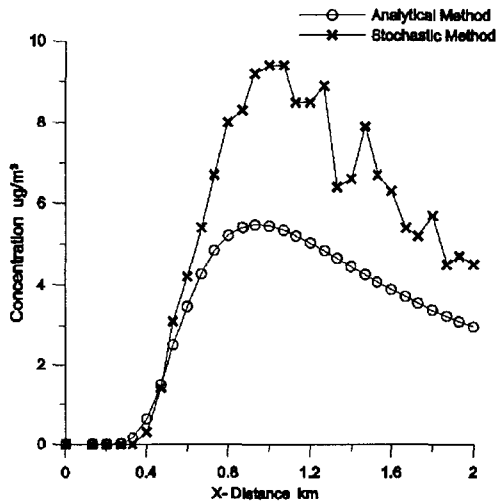


Figure 2. Instantaneous release at 100 m

아래의 두 그림에는 매초 1000g의 가스상의 물질이 같은 기상조건에서 연속적으로 배출(continuous source)되었을 경우 풍하 방향의 농도 분포 비교 결과를 나타낸 것이다. figure 3은 지상 0 m에서, figure 4는 지상 100m에서 누출이 발생했을 때 플룸의 중심부 ( $y=0$ )에서의 농도를 비교한 결과이다. Instantaneous 배출과는 약간 다른 농도 비교를 보여 주었는데 0 m 배출의 경우 400 보다 가까운 거리에서 농도 차이가 크게 나타난 반면 그 이상에서 차이는 상당히 작게 나타났다. 100 m 배출원의 경우 모든 거리에서 전반적으로 농도의 차이가 가장 크게 나타났다. near field에서 나타나는 가우시안 해와 라그랑지안 연산의 차이는 라그랑지안 연산의 경우 한 grid (67 m x 67 m x 20)에서의 평균 농도를 가지고 그 지점의 농도를 환산하기 때문에 전체적으로 near field에서 농도의 과소평가 현상이 나타났다. 이 문제를 해결하기 위해서는 near field에서 격자의 간격을 매우 좁혀 계산하는 것이 필요하다. 전반적인 far field에서 라그랑지안 연산 결과가 약간 높은 농도를 주는 것은 시간이 갈수록 (거리가 멀어질수록) 라그랑지안 연산에서 속도의 표준편차를 ( $\sigma_u, \sigma_w$ ) 가우시안 풀림의 경우 연기 확산 표준편차( $\sigma_y, \sigma_z$ )를 사용한 결과로 사료된다. 이와 같은 차이를 줄이기 위해서는 대기의 안정도에 따라 속도의 표준편차를 정량적으로 산정하는 정확한 방법이 고려되어야 할 것이다.

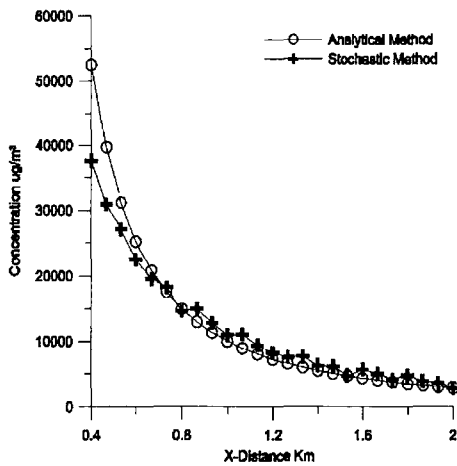


Figure 3. Continuous release at 0 m

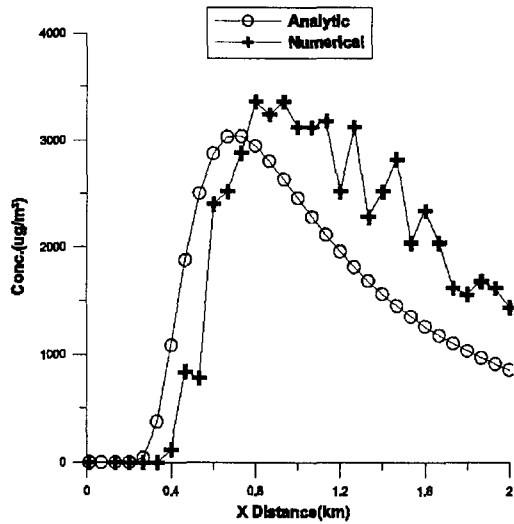


Figure 4. Continuous release at 100 m

#### 참고문헌

김영성, 오현선, 윤도영, 장영수 (1998), 복잡지형에서의 대기확산모델비교, 14(2), 81-93.  
 이종범 (1995), 우리나라에 적합한 국지확산모델의 개발방향, 한국대기보전학회지, 11(1), 15-28.  
 장영기, 송동웅 (1995), 국내 대기오염모델링의 현황과 과제, 한국대기보전학회지, 11(1), 1-14.  
 전의찬 (1999), 우리나라 대기질 모델링의 현황과 발전방향, 대기 모델링의 현황 및 문제점, 한국대기 환경학회 확산 및 반응 분과회 주최 Workshop.

Hernandez, J.F., L. Cremades, and J.M. Baldasano (1995), Dispersion Modelling of a Tall st Plume in the Spanish Mediterranean Coast by a Particle Model, Atmos. Environ., 29, 1331-134

Luhar, A.K., and K. S. Rao (1994), Lagrangian Stochastic Dispersion Model Simulations of Tra data in Nocturnal Flows over Complex Terrain, Atmos. Environ., 28, 3417-3431.

Nguyen, K.C., J.A. Noonan, I.E. Galbally and W.L. Physick (1997), Predictions of Plu Dispersion in Complex Terrain : Eulerian versus Lagrangian Models, Atmos. Environ., 947-958.

Weil, J.C. (1994), A Hybrid Lagrangian Dispersion Model for elevated Sources in the Convect Boundary layer, Atmos. Environ., 28, 3433-3448.

## DR3) 부산광역시에서 회귀모델링에 의한 이산화질소 농도 예측 Regression Modelling of NO<sub>2</sub> Concentrations in Pusan Metropolitan City

이 화 운 · 장 난 심 · 이 용 희  
 부산대학교 대기과학과

### 1. 서 론

NO<sub>2</sub>는 가장 중요한 대기 오염 물질 중 하나 이다. 도시 대기 중 자동차 배출가스와 다른 연소 방출이 NO<sub>2</sub>의 주원인 물질이다. 대부분 초기 NO<sub>x</sub>은 NO로 방출되고 결국에 가서는 대기 중 오존과 반응하여 NO<sub>2</sub>로 바뀐다.

NO<sub>2</sub> 예측을 위해서 그리고 제어 방법을 개발하기 위해서는 NO<sub>x</sub> 제어 요소를 알아내는 것과 어떤 지점의 NO<sub>2</sub> 농도를 알아내는 것이 매우 중요하다.

이에 본 연구에서는 Ordinary Least Squares(OLS)모델과 first-order autocorrelation(AR)모델을 NO<sub>2</sub> 회귀 분석을 수행하는데 사용했다.

### 2. 연구 방법

본 연구는 3년간(1996년 - 1998년)의 부산광역시의 환경부 산하 대기질 측정망 자료(NO<sub>x</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> 시간 평균농도)와 부산 지방기상청의 기상자료를 이용하여 회귀분석을 수행하였다.

#### 2.1 모델링 입력 데이터

모델링 입력 자료 중 오염자료는 NO<sub>x</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> 시간 평균농도자료가 사용되었으며 NO<sub>x</sub> 농도는 시간별 NO 농도 자료를 활용하였다. 기상자료는 풍속(WS), 풍향(WD), 기온(Temp), 상대습도(rh), 일사량(TotRad), Pasquill Stability Category(Stab)가 사용되었다.

#### 2.2 설명변수

농도와 설명변수와의 일반적인 관계는 다음과 같다.

$$C = F(X_1, \dots, X_k)$$

여기서  $X_i (i = 2, \dots, k)$  은 설명변수이며 NO<sub>2</sub>에 대한 설명변수는 표 1에서와 같다.

Table 1. Explanatory variables for NO<sub>2</sub> regression

Vareiable	Name	Defintion
X <sub>1</sub>	CONST	Constant term; X <sub>1</sub> =1
X <sub>2</sub>	q	NO <sub>x</sub> emission factor
X <sub>3</sub>	WS	Wind Speed(m/s)
X <sub>4</sub>	Temp	Temperature(℃)
X <sub>5</sub>	Stab	Pasquill Stability Category
X <sub>6</sub>	rh	Relative Humidity(%)
X <sub>7</sub>	O <sub>3</sub> NO	NO × O <sub>3</sub> each sites
X <sub>8</sub>	TotRad	Total Radiation (W/m <sup>2</sup> )

### 2.3 Ordinary Least Squares(OLS) Model

농도와 농도에 영향을 주는 설명변수사이의 관계는 다음과 같다.

$$C = F(X_1, \dots, X_k) = e^{B_1} X_1^{B_2} \dots X_k^{B_k}$$

여기서 k는 설명변수의 수를 나타내며 양변에 자연 대수를 취하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\ln(C) = B_1 + B_2 \ln(X_1) + \dots + B_k \ln(X_k)$$

여기서  $B_1 \sim B_k$ 는 회귀모수이다.

### 2.4 Autoregression(AR) Model

$$\ln(C_j) = B_1 + \sum_{i=2}^k B_i \ln(X_{ij}) + u_j$$

$$u_j = \phi u_{j-1} + e_j \quad j = 1, \dots, N$$

여기서  $e_j$ 는 백색잡음이다.

$$\ln(C_j) = B_1 + \sum_{i=2}^k B_i \ln(X_{ij}) + B_{k+1} \text{Lag}1_j + e_j$$

여기서 Lag 1은 새 변수로 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\text{Lag}1_j = \ln(C_{j-1}) - B_1 - \sum_{i=2}^k \beta_i \ln(X_{i,j-1})$$

## 3. 결과 및 고찰

부산광역시외의 대기질 측정망이 있는 6개 지역을 공업지역(신평동, 감전동), 상업지역(범천동, 광복동), 주거지역(대연동, 덕천동)으로 나누어서 OLS모델과 AR모델을 수행하였다. 다양한 설명변수를 사용하여 모델을 수행한 결과 NO<sub>2</sub>에 영향을 주는 중요 요소를 알 수 있었으며 각 측정지점에 적합한 예측식을 산출할 수 있었다.

## 참 고 문 헌

- Derwent, R. G., Middleton, D. R., Field, R. A., Goldstone, M. E., Lester, J. N. and Perry, R.(1995) Analysis and interpretation of air quality data from an urban roadside location in central London over the period from July 1991 to July 1992, Atmos. Environ., 29(8), 923-946
- Ji Ping Shi and Harrison, Roy M.(1997) Regression modelling of hourly NO<sub>x</sub> and NO<sub>2</sub> concentrations in urban air in London, Atmos. Environ., 24, 4081-4094
- Bower, J. S., Broughton, G. F. J. and Stedman, J. R.(1994) A winter NO<sub>2</sub> smog episode in the U.K. Atmos. Environ., 28(3), 461-475
- Harrison, R. M., Shi, J. P. and Grenfell, J. L.(1997) Novel nighttime free radical chemistry in severe nitrogen dioxide pollution episodes. Atmos. Environ., 32(16), 2769-2774
- Inoue, T., Hoshi, M. and Taguri, M.(1986a) Regression analysis of nitrogen oxide concentration. Atmos. Environ., 20(1), 71-85
- Inoue, T., Hoshi, M. and Taguri, M.(1986b) Prediction of nitrogen oxide concentration by a regression model. Atmos. Environ., 20(12), 2325-2337
- Milionis, A. E. and Davies, T. D.(1994) Regression and stochastic models for air pollution - I. Review, comments and suggestions, Atmos. Environ., 28(17), 2801-2810