

CA2) 화학반응 메커니즘에 따른 대기질 모델링 결과 비교 Comparison of Air Quality Modeling Results from Different Chemical Reaction Mechanisms

이시혜¹⁾ · 김영성 · 김진영 · 김용표¹⁾

한국과학기술연구원 지구환경연구센터, ¹⁾이화여자대학교 환경학과

1. 서 론

가스상 물질만을 대상으로 하여도 대기 중에서 일어나는 화학반응은 20,000개를 넘고 관여하는 물질도 수천을 넘는다. 대기화학 반응이 대기질 모델링에 포함되기 시작한 이래 지난 20-30년간 이들 반응들의 특성을 보전하면서 모델링에서 취급이 가능한 형태로 축약하기 위한 노력이 계속되고 있다. 그러나 축약 자체가 불완전을 감수하면서 전체적인 효율을 추구하는 과정이기 때문에 관점에 따라 방법이 다를 수밖에 없고, 또한 실측 자료로써 메커니즘의 개발과 검증에 주로 이용되는 스모그 챔버 실험도 결국은 실제 대기 현상의 일부분을 대표한 것이기 때문에 메커니즘들은 각각 다른 특성을 지니게 되고 일정 부분 불완전함을 내포하고 있다. 이에 따라 1980년대까지 다양한 방법들이 제안되었고 이들을 평가하기 위한 작업도 활발하였다 (예를 들면, Leone and Seinfeld, 1985). 그러나 1990년대 이후 대기 중 오염물질 변환에 대한 이해가 깊어지면서 많이 이용되는 화학반응 메커니즘은 SAI (Systems Applications International)의 CB (Carbon Bond), UCR (UC Riverside)의 SAPRC (Statewide Air Pollution Research Center), 그리고 미국 EPA의 RADM (Regional Acid Deposition Model)에 포함되었던 RADM 등으로 압축되었다 (Dodge, 2000).

SAPRC과 RADM 메커니즘은 대표물질을 내세우거나 몇 개 물질의 특성을 대변할 수 있는 물질을 가상하는, 물질 단위로 화학반응을 묶는 'lumped molecule' 방식을 택하고 있다. 그러나 CB는 물질의 구조적 특성에 따라 화학반응을 묶는 'lumped structure' 방식을 택하고 있다. CB는 화학적으로 보다 합리적인 축약 방법으로 평가받았으나 포함된 물질이 PAR, OLE 등 실제 물질과 차이가 있어 모델 입력과정에서 환산이 복잡하고 모델 결과도 실제 농도와 직접 연관되지 않는 점들이 단점으로 작용하여 현재는 EPA의 UAM 등 외에는 거의 이용되지 않고 있다. 반면 SAPRC는 초기 형태 중 하나인 LCC (Lurmann, Carter, and Coyner) 메커니즘이 CIT (California Institute of Technology) 모델에 이용되는 등 다양한 모델에 채택되었고, RADM은 유럽의 EUMAC (European Modeling of Atmospheric Constituents)의 기초가 되는 등 이용이 활발하다.

2. RACM (Regional Atmospheric Chemistry Mechanism)

SAPRC 메커니즘은 다양한 변형이 존재하고 현재도 개정되고 있으나 LCC에서 볼 수 있는 것과 많은 형태들이 캘리포니아의 도시규모 모델링을 위하여 개발되었다. 반면 RADM은 기본적으로 지역규모 모델링을 위하여 개발된 것이다. 이와 같은 사실은 이들 메커니즘이 오염된 도시지역이나 혹은 넓은 지역의 평균 특성을 반영하도록 구성되었음을 의미한다. 1990년대 대기질 연구에서 특징적인 현상은 광화학 오존의 지역규모 변화 혹은 다중 (multi-scale) 변화에 대한 새로운 이해와, 전원지역 등 도시 외 지역의 오존을 주목하게 됨으로써 부각된 생물학적 VOC의 중요성에 대한 인식이다. 만일 최근의 모델링이, 생물학적 VOC의 영향이 큰 전원지역부터 인위적 배출의 영향이 큰 도시지역까지 다양한 변화를 정확하게 조사하기 위한 것이라면 화학반응 메커니즘 역시 이에 적합하도록 고안되어야 한다. Stockwell 등 (1997)은 최근의 이와 같은 모델링의 경향을 반영할 수 있도록 생물학적 VOC 성분과 유기래디칼 반응 부분을 크게 보완한 RACM을 발표하였다.

국내에서도 대기질 연구를 위하여 CIT 모델, STEM-II, UAM, RADM, Models-3 등 다양한 모델들이 시도되고 있다. 아직 배출량과 경계 조건 등 많은 부분이 미흡하여 정확한 결과를 얻기 힘든 것이 사실이나, 부족하나마 우리 나라의 대기 조건에서 어떠한 화학반응 메커니즘이 어떠한 결과를 주는가를 살펴볼 필요가 있

다. 본 연구에서는 SAPRC와 RADM, RACM 등 메커니즘의 선택에 따라 서울 수도권 지역의 광화학 오존 예측이 어떻게 변하는가를 조사하였다.

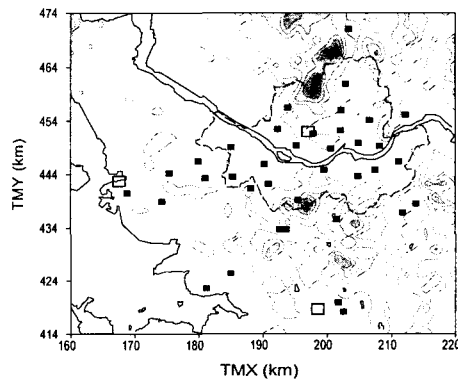
3. 모델링

변수를 줄이고 반응 메커니즘의 변화에 따른 모델링 결과를 비교하기 위하여 상자 모델을 이용하였다. 대상 영역은 그림 1에서 볼 수 있는 것과 같이 서울을 중심으로 한 60 km x 60 km이며, 대상 기간은 오존 농도가 최고 149 ppb까지 상승하였던 7월 27일부터 8월 1일까지이다. 배출 등 입력자료는 김진영과 김영성 (2001)의 자료를 평균하여 이용하였다.

그림 1. 대상 영역. 검은 점은 대기질 측정소, 흰 사각형은 기상관측소. 상자 모델을 이용하여 대상영역의 평균 변화를 비교.

표 1. 화학반응 메커니즘의 비교 (Dodge, 2000)

	SAPRC	RADM	RACM
반응 수	약 158	156	236
구성 성분			
무기성분	14	14	14
안정된 유기성분			
알칸	다양	4	4
알켄	다양	3	4
방향족	다양	2	2
생물 기원	-	1	3
카보닐	10	6	9
유기질산염	5	3	3
유기과산화물	1	3	3
유기산	-	2	2
기타	3	1	1
유기 래디칼	14	16	24
총 성분수	약 54	55	69



감사의 글

본 연구는 21세기 프론티어 연구개발사업인 수자원의 지속적 확보기술개발사업 (과제번호 5-7-1)과 과학기술부 국가지정연구실 사업인 스모그 챔버를 이용한 스모그 생성 메커니즘 규명 연구 (과제 번호 2000-N-NL-01-C-184)의 일환으로 수행되었습니다.

참고 문헌

- 김진영, 김영성 (2001) 상세한 기상관측 자료를 이용한 1997년 서울·수도권 고농도 오존 사례의 모델링, 한국대기환경학회지, 17, 1-17.
- Dodge, M.C. (2000) Chemical oxidant mechanisms for air quality modeling: critical review, Atmospheric Environment, 34, 2103-2130.
- Leone, J.A. and J.H. Seinfeld (1985) Comparative analysis of chemical reaction mechanisms for photochemical smog, Atmospheric Environment, 19, 437-464.
- Stockwell, W.R., F. Kirchner, M. Kuhn, and S. Seefeld (1997) A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling, J. Geophys. Res., 102, 25847-25879.