

3B1) 서울의 고농도 오존사례 연구를 위한 관측기반모형의 개발과 적용

Development and Application of Observation Based Model to the Ozone Episode in Seoul, Korea

신성수, 조석연
 인하대학교 환경공학과

1. 서론

우리나라의 급속한 산업발전에 따른 산업구조의 변화와 자동차 수의 증가에 따라서 오존 전구물질인 VOC와 NO_x의 배출량이 크게 증가하고 있다. 이에 따라서 고농도 오존 현상이 발생하는 빈도가 증가하는 추세에 있다. 오존은 VOC와 NO_x간의 광화학반응으로 형성하므로, VOC와 NO_x중의 하나는 제한종(limiting species)로 작용하게 되므로, 광화학 반응을 분석하여 제한종을 규명하여야만 효율적 오존 저감대책을 세울 수 있다. 광화학반응을 실험적으로 분석하기는 어렵기 때문에 대기 이동/확산/광화학반응/침착을 모사할 수 있는 수치모형을 사용하여 제한종을 규명하게 된다.

수치모형을 사용하기 위해서는 질소산화물은 물론이고 VOC 배출량을 정확히 파악하여야 한다. 이러한 오존 전구물질은 광화학반응적으로 비교적 안정되기 때문에 오존과는 달리 중장거리 이동을 하므로 고농도 오존 현상이 발생하는 도시뿐 만 아니라, 도시의 풍상방향으로 수백 여 km에 달하는 지역의 배출량을 파악하여 한다. 즉, 서울의 고농도 오존 현상을 규명하기 위해서는 서울은 물론이고 인천과 경기도의 배출량은 물론, 중국동부지역의 배출량을 파악하여야 한다. 정확도에 개선에 여지가 많기는 하지만, NO_x 배출량자료는 여러 기관에서 구축하였지만 사용 가능한 VOC 배출량자료는 극히 제한되어 있고 일부 사용 가능한 자료도 모형에 사용하기에는 불확실성이 너무 크다. 이러한 문제를 해결하기 위해서 기존에 배출량을 기반으로 한 모형(emission based model)에서 탈피하여 관측치를 기반으로 한 모형(observation based model)을 이용하여(Kleinman 2000) 오존 광화학 반응의 특성을 조사하는 연구가 활발하게 진행 중이다. 본 연구에서는 국내 오존 농도 현상 및 국내 측정 자료에 적합한 관측치 기반 모형인 OBM을 개발하였다.

2. 연구 방법

관측기반모형은 상자모형을 주 대상으로 하고 있으나, 다차원모형에도 적용될 수 있다. 본 연구에서는 단순 상자 모형을 대상으로 한 관측치 기반 단순 상자 모형(Observed Based Simple Box Model: OB-SBM)을 개발하였다. 단순 상자 모형의 주식은 다음과 같다.

$$\frac{dC_i}{dt} = R_i(C_1, C_2, \dots, C_n) + E_i + D_i \quad i=1, 2, \dots, n$$

다음식에서 C_i는 i번째 화학종의 농도, R_i는 i번째 화학종의 화학반응속도, E_i는 i번째 화학종의 배출속도, D_i는 i번째 화학종의 상자의 누출속도이다.

배출량 기반 모형에서는 위 식을 주식으로 한 단순상자모형의 해를 구하는 반면, 관측치 기반 모형에서는 자유기를 제외한 화학적으로 안정한 물질은 관측치를 제한 조건으로 사용한다. 즉, 안정한 화학물질에 대해서는 다음과 같은 제한조건을 부가한다.

$$\frac{dC_i}{dt} = 0 \quad \text{for stable species}$$

관측기반 모형을 사용하기 위해서는 NO, NO₂, O₃과 GC로 분석되는 광화학적으로 안정된 VOC 뿐만 아니라, PAN, HCHO와 H₂O₂ 등과 같이 반응성이 비교적 높은 물질도 측정하여야 한다. 그러나, 우리나라에서 이러한 물질에 대한 측정자료는 크게 미비한 한 것은 물론이고, NO₂의 농도의 측정자료도 크게 미비한 상태이다. 따라서 본 연구에서는 이러한 측정자료의 미비를 고려할 수 있도록 다음과 같은 균별 제한 조건을 사용할 수 있는 관측기반 모형을 개발하였다.

$$\sum_i \frac{C_i}{dt} = 0$$

관측기반모형은 상세한 광화학반응 분석을 목적으로 하므로 수치효율을 중요시한 3차원 광화학 모델에서 사용하는 단순 화학종을 사용하기보다는 상세한 explicit 기작을 사용한다. 본 연구에서는 181개의 화학종과 387개의 화학반응을 갖춘 Carter 기작을 사용하였다(Carter, W.P.L. 1990).

3. 결과 및 고찰

관측기반모형이 성공적으로 운영되기 위해서는 비평형 상태에 있는 물질과 가평형 상태에 있는 물질을 정확히 분리하여야 한다. 일반적으로 자유기는 가평형상태로 분류할 수 있고, 일부 산화제도 가평형상태로 분류 가능하다. 아래 그림은 대표적인 자유기인 OH, HO₂와 대표적 산화제인 H₂O₂에 대하여 관측기반모형을 적용시켰을때에 정상상태에 도달하는 거동을 보여주고 있다. 반응성이 높은 자유기인 OH와 HO₂는 1분 이내에 정상상태에 도달하지만, 반응성이 높은 H₂O₂도 40시간이 넘어야만 정상상태에 도달함을 알 수 있다. 따라서 H₂O₂에 대해서는 모형에서 직접계산하기 보다는 관측치를 사용하여야만 하겠다.

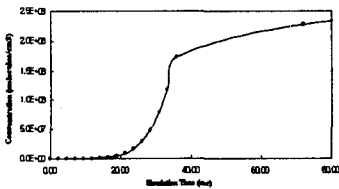


Fig. 1. The temporal variations of OH radical concentrations.

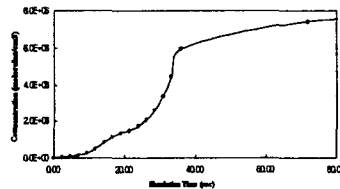


Fig. 2. The temporal variations of HO₂ radical concentrations.

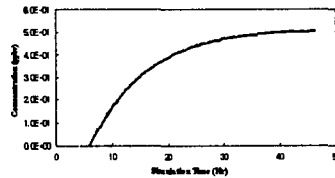


Fig. 3. The temporal variations of H₂O₂ radical concentrations.

본 연구에서는 이와 같이 개발한 관측기반모형을 이용하여 서울지역에 고농도 오존 현상시 시간에 따른 오존 생성속도를 산출하고, NO_x의 농도를 변화시키면서 오존 생성속도의 변화를 산출하여 NO_x가 제한 화학종으로 작용하는가를 검토하였다.

참고 문헌

Carter, W.P.L.(1990) Detailed mechanism for the gas phase atmospheric reactions of organic compounds, Atmospheric Environment, vol.24A, 481~518.
 Lawrence I. Kleinman(2000) Ozone process insights from field experiments - part II Observation based analysis for ozone production, Atmospheric Environment, Vol.34, Issues 12-14, 2023-2033