



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2009-0068884
(43) 공개일자 2009년06월29일

(51) Int. Cl.

B01D 53/00 (2006.01) G06F 19/00 (2006.01)

F01N 11/00 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2007-0136682

(22) 출원일자 2007년12월24일

심사청구일자 2007년12월24일

(71) 출원인

부경대학교 산학협력단

부산 남구 용당동 산 100번지 부경대학교내

(72) 발명자

김도용

부산 남구 대연동 874-1, 플러스빌투 302호

김재진

부산 남구 용호동 176-30 LG메트로시티 112동 1502호

김희중

대구 북구 복현2동 청구아파트 102동 1502호

(74) 대리인

특허법인다울

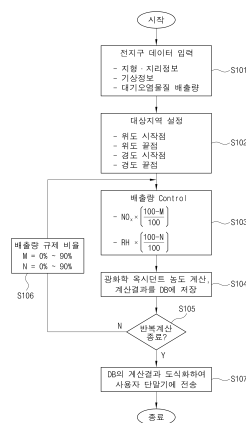
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량규제기준 평가시스템 및 방법

(57) 요약

본 발명은 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템 및 방법에 관한 것으로, 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 저장하는 데이터베이스; 사용자 단말기로부터 입력되는 1차 원인물질 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보에 대응하여, 상기 데이터베이스에 저장된 대상지역의 지형·지리정보, 기상정보를 토대로 1차 원인물질의 배출원별 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 산출하여 데이터베이스에 저장하거나 그 도식화된 자료를 네트워크를 통해 상기 사용자 단말기에 제공하는 배출량 규제기준 평가서버; 1차 원인물질 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보를 상기 평가서버에 전송하며 상기 평가서버에서 제공되는 대상지역의 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 수신하여 디스플레이하는 사용자 단말기;를 포함하는 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템 및 그에 의한 평가방법을 제공하여, 2차 대기오염물질인 광화학 옥시던트(Ox) 저감정책을 수립하고 시행하는데 있어 1차 원인물질(전구물질)인 질소산화물(NOx)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량을 경제적이고 효율적으로 규제하기 위한 규제기준을 제공한다.

대표도 - 도2



이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 CATER 2007-3307

부처명 기상청

연구사업명 기상지진기술개발사업

연구과제명 도시 지역 대기환경 평가를 위한 3차원 전산유체역학 모델개발

주관기관 (재)기상지진기술개발사업단

연구기간 2007년 05월 16일~2008년 01월 31일

특허청구의 범위

청구항 1

전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 저장하는 데이터베이스;

전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 입력받아 데이터베이스를 구축하거나, 온라인 네트워크를 통해 접속된 사용자단말기로부터 입력되는 1차 원인물질 배출량 규제를 위한 대상지역의 위/경도 정보에 대응하여, 상기 데이터베이스에 저장된 대상지역의 지형·지리정보, 기상정보를 토대로 1차 원인물질의 배출원별 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 대기화학 수치 산출을 위한 시물레이션 모델을 통해 산출하여 데이터 베이스에 저장하거나 그 도식화된 자료를 네트워크를 통해 상기 사용자 단말기에 제공하는 배출량 규제기준 평가서버;

온라인 네트워크를 통하여 상기 배출량 규제기준 평가서버에 연결되어 사용자가 입력하는 1차 원인물질의 배출량 규제를 위한 대상지역의 위/경도 정보를 상기 평가서버에 전송하며, 상기 평가서버에서 제공되는 대상지역의 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 수신하여 디스플레이하는 적어도 하나의 사용자 단말기;를 포함하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 배출량 규제기준 평가서버는,

사용자 단말기로부터 입력되는 배출량 규제 대상지역의 위/경도정보에 대응하여, 상기 데이터베이스에 저장된 대상지역의 지형·지리정보, 기상정보를 토대로 배출원별 1차 원인물질 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 각각 산출하는 광화학 옥시던트 농도 산출모듈;

상기 산출된 각각의 배출원별 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 도식화하는 광화학 옥시던트 농도 도식화모듈을 포함하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 배출량 규제기준 평가서버는,

배출량 규제 대상지역의 질소산화물(NO_x)에 대한 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)에 대한 배출량 규제비율(N)에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 각각 산출하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템.

청구항 4

제3항에 있어서, 상기 배출량 규제기준 평가서버는,

상기 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)을 각각 0% ~ 90% 범위 내에서 변경하면서 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 산출하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템.

청구항 5

제1항에 있어서, 상기 배출량 규제기준 평가서버는,

관리자 권한으로 접속되는 사용자에게 의해 주기적으로 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 입력받아 상기 데이터베이스를 업데이트하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템.

청구항 6

제1항에 있어서, 상기 배출량 규제기준 평가서버는,

대기화학 수치 산출을 위한 시물레이션 모델을 적어도 한개 이상 탑재하며,

온라인 네트워크를 통하여 연결되는 단말기로부터 사용자 입력에 의해 상기 대기화학 수치 산출을 위한 시물레이션 모델 중의 어느 하나가 설정되도록 구성한 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질

배출량 규제기준 평가시스템.

청구항 7

- (a) 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 입력받아 데이터베이스를 구축하는 단계;
- (b) 온라인 네트워크를 통해 접속된 단말기로부터 입력되는 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보에 대응하여, 1차 원인물질의 배출원별 배출량 규제비율에 따른 대상지역의 광화학 옥시던트 농도 예측치를 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델로부터 산출하는 단계;
- (c) 상기 산출되는 각각의 배출원별 배출량 규제비율에 대한 광화학 옥시던트 농도변화 예측치들을 데이터베이스에 저장하고, 상기 DB화된 총 계산결과를 도식화하여 상기 사용자 단말기로 전송하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법.

청구항 8

제 7항에 있어서, 상기 (a) 데이터 베이스 구축단계는,

전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 관리자 권한으로 접속되는 사용자에게 의해 주기적으로 업그레이드하여 데이터베이스의 저장내용을 갱신하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법.

청구항 9

제7항에 있어서, 상기 (b) 광화학 옥시던트 농도변화 예측치 산출단계는,

배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보가 입력된 이후에, 온라인 네트워크를 통하여 연결되는 단말기로부터 사용자 입력에 의해 상기 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델 중의 어느 하나를 선택하는 단계를 더 포함하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법.

청구항 10

제7항에 있어서, (b) 광화학 옥시던트 농도변화 예측치 산출단계는,

1차 원인물질 배출원별로, 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)을 각각 0% ~ 90% 범위 내에서 변경하면서 각각의 변경된 규제비율에 대한 농도를 산출하는 것을 특징으로 하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법.

명세서

발명의 상세한 설명

기술 분야

- <1> 본 발명은 2차 대기오염물질인 광화학 옥시던트 저감정책을 수립하고 시행하는데 있어서, 1차 원인물질(전구물질)인 질소산화물(NO_x)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량을 경제적이고 효율적으로 규제하기 위한 규제기준을 제정할 수 있는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템 및 방법에 관한 것이다.

배경 기술

- <2> 광화학 옥시던트(O_3)는 1차 원인물질(전구물질)인 질소산화물(NO_x)과 반응성 탄화수소(RH) 등의 대기오염물질이 대기 중에 배출되어 일련의 광화학 반응에 의해 생성되는 2차 대기오염물질이며, 점막의 자극 및 호흡기 질환 등의 인체 및 농작물 등에 악영향을 미친다. 그러나 광화학 옥시던트 생성의 광화학 반응과정은 상당히 복잡하며, 기상학적 조건이나 지형 및 지리학적 조건에도 의존하기 때문에 광화학 옥시던트 농도의 저감정책은 매우 어려운 실정이다.
- <3> 이러한 광화학 반응 메커니즘의 규명을 위하여 수많은 연구가 이루어져 왔으며, 광화학 옥시던트 농도의 예측을 위한 대기화학 수치모델이 개발되어 왔고, 대상지역의 지형·지리학적 특성, 기상조건, 배출성향 등의 차이에 따라 1차 원인물질의 규제에 따른 광화학 옥시던트 농도 변화가 다양함이 밝혀졌다. 심지어 1차 원인물질의 규

제에 의하여 광화학 옥시던트 농도가 저감되지 않고 반대로 증가하는 지역의 경우도 있음이 밝혀졌다. 그러므로 어떤 지역에서 광화학 옥시던트 농도를 저감시키기 위한 1차 원인물질 규제 정책을 시행하기 위해서는 그 지역의 광화학 옥시던트와 1차 원인물질과의 상호관계 및 민감도를 파악할 필요가 있다.

- <4> 그러기 위해서는 대상지역의 지형·지리학적 정보와 기상학적 정보를 토대로 조사된 1차 원인물질의 배출량을 입력하여, 실제의 조건하에서 대기화학 수치모델을 이용하여 광화학 옥시던트 농도를 예측하여야 하고, 뿐만 아니라 입력 자료인 1차 원인물질의 배출량 데이터를 임의의 비율로 규제하여 입력시켰을 경우의 시뮬레이션을 실시함으로써 대상지역의 1차 원인물질 규제에 따른 광화학 옥시던트 농도의 변화를 예측할 수 있어야 하며, 이를 통하여, 광화학 옥시던트 농도 저감을 위한 1차 원인물질 배출량의 경제적이고 효율적인 규제기준을 평가할 수 있어야 한다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

- <5> 따라서 본 발명은 대상지역의 지형·지리학적 정보와 기상학적 정보를 토대로 1차 원인물질의 배출량에 대한 광화학 옥시던트 농도 예측치를 산출해내는 지역별 대기화학 수치 예측모델을 이용한 시뮬레이션을 실시함으로써 상기의 1차 원인물질의 배출량 규제에 따른 광화학 옥시던트 농도의 변화를 실제와 동일한 조건하에서 예측하여 1차 원인물질 배출량의 규제기준을 평가할 수 있는, 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템 및 방법을 제공함에 목적이 있다.
- <6> 또한 본 발명은 상기 지역별 대기화학 수치 예측모델을 이용한 시뮬레이션 시스템을 온라인 네트워크를 통하여 연결되는 사용자 및 관리자 단말기로부터 접속하여 대상지역의 범위 설정 정보의 입력으로 용이하게 필요한 정보를 획득할 수 있도록 하여 시간과 공간의 제약성을 탈피할 수 있도록 한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템 및 방법을 제공함에 있다.

과제 해결수단

- <7> 상기의 목적을 달성하기 위하여 본 발명은, 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 저장하는 데이터베이스; 관리자 권한을 가진 사용자로부터 입력되는 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터로 데이터베이스를 구축하거나, 온라인 네트워크를 통해 접속된 사용자단말기로부터 입력되는 1차 원인물질 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보에 대응하여, 상기 데이터베이스에 저장된 대상지역의 지형·지리정보, 기상정보를 토대로 1차 원인물질의 배출원별 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 산출하여 데이터베이스에 저장하거나 그 도식화된 자료를 네트워크를 통해 상기 사용자 단말기에 제공하는 배출량 규제기준 평가서버; 온라인 네트워크를 통하여 상기 배출량 규제기준 평가서버에 연결되어 사용자가 입력하는 1차 원인물질 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보를 상기 평가서버에 전송하며, 상기 평가서버에서 제공되는 대상지역의 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 수신하여 디스플레이하는 적어도 하나의 사용자 단말기;를 포함하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템을 제공한다.
- <8> 상기 본 발명에서 배출량 규제기준 평가서버는, 배출량 규제 대상지역의 질소산화물(NOx)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 산출하는 광화학 옥시던트 농도 산출모듈; 상기 산출된 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 질소산화물(NOx)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)을 지정 범위 내에서 도식화하는 광화학 옥시던트 농도 도식화모듈을 포함하는 특징을 갖는다.
- <9> 또한 본 발명은 (a) 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 입력받아 데이터베이스를 구축하는 단계; (b) 온라인 네트워크를 통해 접속된 단말기로부터 입력되는 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보에 대응하여 배출원별 배출량 규제비율에 따른 대상지역의 광화학 옥시던트 농도 예측치를 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델로부터 산출하는 단계; (c) 상기 산출되는 각각의 배출원별 배출량 규제비율에 대한 광화학 옥시던트 농도변화 예측치들을 데이터베이스에 저장하고, 상기 DB화된 총 계산결과를 도식화하여 상기 사용자 단말기로 전송하는 단계; 를 포함하는 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법을 제공한다.
- <10> 상기 본 발명의 각 실시예에서, 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델은 적어도 한개 이상 탑재될 수 있으며, 이 경우 온라인 네트워크를 통하여 연결되는 단말기로부터 사용자 입력에 의해 상기 대기화학 수치 산출

을 위한 시뮬레이션 모델 중의 어느 하나가 설정되도록 구성하는 것이 바람직하다.

효 과

<11> 본 발명에 의하면, 전지구 관측 데이터로부터의 대상지역의 지형·지리학적 정보, 기상학적 정보, 1차 원인물질의 배출량 등을 입력 데이터로 하여, 1차 원인물질별 배출량 및 발생원별 배출량을 임의의 비율로 규제하면서 광화학 옥시던트의 농도를 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델을 이용하여 시뮬레이션을 실시할 수 있게 되므로, 이를 통하여 대상지역에서 정책적으로 저감하고자 하는 광화학 옥시던트의 농도 기준을 만족시키기 위한 1차 원인물질의 배출량 규제 기준 및 규제 대상 발생원을 평가하고, 대기오염물질 배출총량 규제 정책 시행에 있어서의 효율적인 기준치 및 기초자료를 제공할 수 있는 이점이 있다.

<12> 또한, 본 발명에 의하면, 사용자가 온라인 네트워크를 통하여 연결되는 사용자 단말기 또는 관리자 단말기로 부터 시스템에 접속하여 대상지역의 범위 설정 등의 간단한 조작으로 시뮬레이션을 실행시키고 정보를 얻을 수 있도록 하므로, 시간과 공간의 제약성을 해결하고 대기오염물질의 배출총량 규제 정책 시행에 있어서의 경제적 효과를 기대할 수 있게 한다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

<13> 이하, 첨부한 도면을 참조하여 본 발명의 바람직한 실시예를 보다 구체적으로 설명한다.

<14> 도 1은 본 발명의 일 실시예에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템을 나타내는 개략구조도이다.

<15> 도 1에 도시된 바와 같이, 본 발명에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템은, 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 저장하는 데이터베이스(200)와, 배출량 규제 대상지역의 위/경도정보를 입력받아 상기 데이터베이스의 지형·지리정보, 기상정보를 토대로 대상지역의 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 산출하는 배출량 규제기준 평가서버(100)와, 온라인 네트워크를 통해 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보를 입력하고 대상지역의 광화학 옥시던트 농도변화 도표를 수신하여 디스플레이하는 적어도 하나의 사용자 단말기(11,12)를 포함하여 구성된다.

<16> 데이터 베이스(200)는 배출량 규제기준 평가서버(100)에 의해 구축되며, 관리자 권한을 가진 사용자로부터 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 주기적으로 입력받아 저장 내용을 업그레이드한다.

<17> 배출량 규제기준 평가서버(100)는 관리자 권한을 가진 사용자로부터 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 입력받아 상기 데이터베이스를 구축하며, 온라인 네트워크를 통해 접속된 사용자단말기로부터 입력되는 1차 원인물질 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보에 대응하여, 상기 데이터베이스에 저장된 지형·지리정보, 기상정보를 토대로 배출량 규제 대상지역의 배출원별 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 산출한다. 또한 그 산출결과를 데이터베이스에 저장하거나 또는 미리 설정된 형태로 도식화하여 네트워크를 통해 상기 사용자 단말기에 제공한다. 이때 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치 산출동작은 전체적으로 도 2와 같은 동작 흐름으로 이루어지는 기본 모드와 도 3과 같은 동작 흐름으로 이루어지는 확장 모드로 구분될 수 있다. 기본모드는 사용자가 단순히 1차 원인물질 배출량과 광화학 옥시던트와의 상호관계 및 민감도를 신속하게 파악하기 위해 선택하여 평가 시스템을 운용하는 것이고, 확장모드는 시뮬레이션 모델의 선택 및 배출원별 규제 등의 확장된 옵션을 원할 시에 선택하여 운용하는 것이다.

<18> 사용자 단말기(11,12)는 온라인 네트워크를 통해 상기 배출량 규제기준 평가서버에 연결될 수 있는 적어도 하나 이상의 단말기로 구성되며, 사용자가 임의로 입력하는 1차 원인물질 배출량 규제 대상지역의 위/경도 정보를 상기 평가서버에 전송하며, 상기 평가서버에서 제공되는 1차 원인물질 배출량 규제 대상지역의 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 수신하여 디스플레이한다.

<19> 배출량 규제기준 평가서버(100)는, 광화학 옥시던트 농도 산출모듈(110)과 광화학 옥시던트 농도 도식화모듈(120)을 포함하여 구성된다.

<20> 광화학 옥시던트 농도 산출모듈(110)은 1차 원인물질인 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)을 입력 데이터로 사용하여 광화학 옥시던트 농도를 산출해내는 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델이 한 개 또는 다수 개 탑재되어 있으며, 사용자 단말기로부터 배출량 규제를 위한 대상지역의 위/경도정보가 입력되면, 상기 탑재된 한개의 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델, 또는 상

기 탑재된 다수 개의 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델 중에서 사용자에게 의해 선택된 어느 하나를 통해 위/경도 정보에 대응하는 대상 지역의 1차 원인물질인 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)을 각각 0%에서 90%까지 변경하면서 상기 데이터베이스에 저장된 대상지역의 지형·지리정보, 기상정보를 토대로 배출원별 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 산출해 낸다.

<21> 상기 시뮬레이션 모델이라 함은 대기화학 수치 예측모델로서 기존의 개발되어 있는 CMB-II, CBM-III, CBM-IV, CAL, RADM 등이 있을 수 있으며, 확장모드에서는 사용자가 시스템에 탑재되어 있는 이들 모델 중에 하나를 지정할 수 있다. 이러한 모델들은 기본적인 대기화학반응 메커니즘은 유사하나 화학반응속도, 구성된 화학반응식의 종류, 및 화학반응의 그룹핑, 확장, 간략화 등의 부분이 상이하다. 이에 따라 예측되는 광화학 옥시던트의 농도가 다소 다를 수 있다.

<22> 이러한 광화학 옥시던트의 생성메커니즘을 간략하게 도식화하면, 도 5와 같으며, 여기에 참여하는 주요 광화학 반응식은 도 6과 같다. 또한 도 5의 반응과정에 도 6의 주요 반응식들이 어떻게 관계하고 있는지를 도식화하면 도 7과 같다. 즉, 간략하게 도식화된 도 5의 광화학 옥시던트의 대기화학반응은 각 반응들 간에 매우 복잡하게 얽혀 있는 것을 알 수 있다. 또한, 실제 대기화학 모델에서는 이보다 더 복잡하고 많은 화학반응들로 구성되어 있다.

<23> 여기에서 위에서 언급한 대기화학 모델 중에서, 예를 들어 CBM-IV의 경우에 대해서 간략히 설명하면, CBM-IV는 Carbon Bond Mechanism 시리즈 IV로써 Gery et al. (1989)에 의해서 개발되었고 미국 EPA(Environment Protection Agency)에서 사용 및 제공하는 광화학 반응 모델이다. 이 모델은 총 33개의 반응물질 도 8과 81개의 반응식 도 9a 내지 도 9d로 구성되어 있고, 특히 탄소결합법에 의하여 반응성 탄화수소를 그룹핑 처리한 특징을 가지고 있다.

<24> 광화학 옥시던트 농도 도식화모듈(120)은 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율(M)의 변화를 X 축으로 하고 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)의 변화를 Y 축으로 하여, 미리 지정된 그래픽 프로그램에 따라 0%에서 90% 범위 내에서 상기 산출된 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)의 0%에서 90% 범위 내에서 대응되게 도식화(도 4a 및 도 4b 참조)한다.

<25> 도 2와 도 3은 본 발명에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법을 예시한 동작 흐름도로서, 도 2는 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델이 하나의 모델로 미리 지정된 경우 상기 배출량 규제기준 평가서버(100)에 의해 이루어지는 동작 흐름의 일 실시예이고, 도 3은 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델이 여러 개 탑재된 경우 상기 배출량 규제기준 평가서버(100)에 의해 이루어지는 동작 흐름의 다른 실시예이다.

<26> 도 2에 도시된 바와 같이, 본 발명에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법의 기본 모드는, 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 관리자 권한으로 접속되는 사용자에게 의해 입력받아 데이터베이스를 구축하는 단계(S101)와, 온라인 네트워크를 통해 접속된 사용자 단말기로부터 위/경도 정보를 입력받아 배출량 규제 대상지역을 설정하는 단계(S102)와, 규제대상지역의 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)을 각각 지정된 범위 내에서 변경하면서 대기화학 수치 산출을 위해 기 설정된 시뮬레이션 모델로부터 각각의 배출원별 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 차례로 산출하여 데이터 베이스에 저장하는 단계(S103~S106)와, 상기 산출되는 각각의 배출원별 배출량 규제비율에 대한 광화학 옥시던트 농도변화 예측치들을 도식화하여 상기 사용자 단말기로 전송하는 단계(S107)를 포함하여 구성된다.

<27> 도 3에 도시된 바와 같이, 본 발명에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법의 확장모드는, 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 관리자 권한으로 접속되는 사용자에게 의해 입력받아 데이터베이스를 구축하는 단계(S201)와, 온라인 네트워크를 통해 접속된 사용자 단말기로부터 위/경도 정보를 입력받아 배출량 규제 대상지역을 설정하는 단계(S202)와, 온라인 네트워크를 통해 접속된 사용자 단말기로부터 시뮬레이션 모델 설정값을 입력받아 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델 중의 어느 하나를 설정하는 단계(S203)와, 배출량 규제 대상지역의 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N) 및 질소산화물(NO_x)의 배출원 종류(m) 및 반응성 탄화수소(RH)의 배출원 종류(n)를 각각 지정된 범위 내에서 변경하면서 대기화학 수치 산출을 위해 기 설정된 시뮬레이션 모델로부터 각각의 배출원별 배출량 규제비율에 따른 광화학 옥시던트 농도변화 예측치를 차례로 산출하여 데이터 베이스에 저장하는 단계(S204~S207)와, 상기 산출되는 각각의 배출원별 배출량 규제비율에 대한 광화학 옥시던트 농

도변화 예측치들을 도식화하여 상기 사용자 단말기로 전송하는 단계(S208)를 포함하여 구성된다.

- <28> 상기 각각의 실시예에 의한 동작 모드에서, 데이터 베이스 구축단계에서는, 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 1차 원인물질 배출량 데이터를 관리자 권한으로 접속되는 사용자에게 의해 주기적으로 업그레이트하여 데이터베이스를 갱신하도록 구성되며, 1차 원인물질인 상기 질소산화물(NOx)의 배출량 규제비율(M)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(N)은 각각 0% ~ 90% 로 지정된 범위 내에서 변경 가능하도록 설정된다. 특히 확장모드에서 질소산화물(NOx)의 배출원 종류(m)와 반응성 탄화수소(RH)의 배출원 종류(n)도 각각 0% ~ 90% 로 지정된 범위내에서 변경 가능하도록 설정된다.
- <29> 이상과 같이 구성되는 본 발명에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템 및 방법에서, 먼저 관리자 권한을 가진 사용자는 전지구의 지형·지리정보, 기상정보, 배출량 데이터를 평가시스템의 데이터 베이스에 저장하는 작업을 실시하여 데이터 베이스를 구축(S101)한다. 이때 상기 관리자 권한을 가진 사용자는 데이터 베이스 저장 내용을 주기적으로(예를 들면, 최소 1년 단위로) 업그레이트하여 갱신할 수 있게 된다.
- <30> 이후, 네트워크를 통해 접속된 사용자가 1차 원인물질 배출량 규제를 원하는 대상 지역의 위도정보와 경도정보를 입력하여 규제 대상지역의 범위를 설정하는 것으로 기본 모드에 의한 동작 또는 확장 모드에 의한 동작이 개시된다.
- <31> 기본 모드에 의한 동작은 도 2에 도시된 바와 같이, 데이터 베이스가 구축된 상태에서 온라인 네트워크를 통해 접속된 사용자 단말기로부터 사용자가 배출량 규제 대상으로 하고자 하는 지역의 위도정보와 경도정보, 즉 위도의 시작점과 끝점 정보, 경도의 시작점과 끝점정보로 각각 입력하게 되면, 배출량 규제기준 평가서버(100)는 상기 사용자에게 의해 입력된 위도정보와 경도정보를 기준으로 배출량 규제대상이 되는 지역의 범위를 설정(S102)하게 된다.
- <32> 이와 같이 배출량 규제 대상지역의 범위가 설정되면, 배출량 규제기준 평가서버(100)는 광화학 옥시던트 농도 산출모듈(110)을 통해 그에 내장되어 있는 대기화학 수치 산출모델로부터 1차 원인물질인 질소산화물(NOx)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(M,N)을 각각 0%~90%까지(100% 규제는 현실성이 없으므로 제외하는 것이 바람직함) 순차적으로 변경하면서 반복 시뮬레이션을 실시(S103-S106)함으로써, 각각의 질소산화물(NOx)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(M,N)에 따른 광화학 옥시던트 농도 변화 예측치를 계산한다. 상기 도 2에서 M은 질소산화물(NOx)의 배출량 규제비율이고, N은 반응성 탄화수소(RH)의 규제비율이다.
- <33> 상기와 같은 반복 계산을 실시하는 동안 그 계산결과를 DB화하여 저장하고, 계산이 끝나게 되면(S105의 Y분기) 상기 배출량 규제기준 평가서버(100)는 광화학 옥시던트 농도 도식화모듈(120)을 통해 상기 DB화된 총 계산결과를 미리 지정된 그래픽 프로그램에 의해, 예를 들어 도 4a 및 도 4b와 같은 도표로 도식화하여 상기 사용자 단말기(11 또는 12)로 전송(S107)함으로써, 규제 대상지역에서 1차 원인물질 배출량 규제에 따른 광화학 옥시던트의 농도 변화 예측치를 상기 도표를 통해 한 눈에 알 수 있게 한다.
- <34> 이러한 기본 모드에 의한 동작에서는 사용자가 배출량 규제를 대상으로 하는 지역의 위/경도 정보를 입력하는 것만으로 1차 원인물질 배출량 규제 비율에 따른 광화학 옥시던트 농도 변화가 도식화되어 출력됨으로써, 경제적이고 효율적인 1차 원인물질 배출량의 규제기준을 매우 쉽고 간단하게 평가할 수 있게 된다. 예를 들어, 도 4b의 경우 임의의 규제 대상지역에서 현재 질소산화물(NOx) 배출총량을 50%로 규제하도록 정책을 시행하고 있다면, 이에 광화학 옥시던트를 현재 농도인 80[ppb]에서 70[ppb]까지 10[ppb] 저감시키기 위해서는, 도식화된 결과로부터 반응성 탄화수소(RH)는 60%로 규제해야 함을 알 수 있다. 이러한 도 4b의 이해를 돕기보다 상세히 설명하면, 질소산화물(NOx)의 배출총량 50% 규제에 해당하는 지점에 세로의 줄을 긋고 반응성 탄화수소(RH) 60% 규제에 해당하는 지점에 가로의 줄을 그어서 만나는 지점의 광화학 옥시던트농도가 약 70[ppb]임을 알 수 있다. 즉, 광화학 옥시던트 농도 저감을 위한 효율적인 질소산화물(NOx)과 반응성 탄화수소(RH)의 규제비율을 도식화된 결과로부터 판명할 수 있게 된다.
- <35> 확장 모드에 의한 동작은 도 3에 도시된 바와 같이, 데이터 베이스가 구축된 상태에서 온라인 네트워크를 통해 접속된 사용자 단말기로부터 사용자가 배출량 규제 대상으로 하고자 하는 지역의 위도정보와 경도정보, 즉 위도의 시작점과 끝점 정보, 경도의 시작점과 끝점정보로 각각 입력하게 되면, 배출량 규제기준 평가서버(100)는 상기 사용자에게 의해 입력된 위도정보와 경도정보를 기준으로 배출량 규제 대상이 되는 지역의 범위를 설정(S202)하게 되며, 이 단계까지의 동작은 기본 모드에서의 동작과 같다.
- <36> 이와 같이 배출량 규제 대상지역의 범위가 설정되면, 배출량 규제기준 평가서버(100)는 광화학 옥시던트 농도

산출모듈(110)을 통해 그에 내장되어 있는 다수개의 대기화학 수치 산출모델들 중의 어느 하나를 사용자가 선택할 수 있도록 하며, 사용자에게 의해 선택되는 대기화학 수치 산출모델 중의 하나를 광화학 옥시던트 농도 산출을 위한 시뮬레이션 모델로 설정(S203)한다. 이때 시뮬레이션 모델은 관리자 권한을 가진 사용자에게 의해 그 버전이 갱신되거나 시뮬레이션 추가에 의해 신규 시뮬레이션 모델이 새로이 탑재될 수 있다. 예를 들어 디스플레이과정을 통해 사용자가 원하는 하나의 대기화학 수치 산출모델을 선택하게 되면, 배출량 규제기준 평가서버(100)에서는 이 과정에서 사용자에게 의해 선택되는 대기화학 수치 산출모델로부터 1차 원인물질인 질소산화물(NO_x)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(M,N) 및 질소산화물(NO_x)의 배출원 종류(m)와 반응성 탄화수소(RH)의 배출원 종류(n)를 각각 0%~90%까지(100% 규제는 현실성이 없으므로 제외하는 것이 바람직함) 순차적으로 변경하면서 반복 시뮬레이션을 실시(S204~S207)함으로써, 각각의 질소산화물(NO_x)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제비율(M,N) 및 배출원의 종류(m,n)에 따른 광화학 옥시던트 농도 변화 예측치를 계산한다. 상기 도 3에서도 M은 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제비율이고, N은 반응성 탄화수소(RH)의 규제비율이고, m은 질소산화물(NO_x)의 배출원 종류이고, n은 반응성 탄화수소(RH)의 배출원 종류를 나타낸다.

<37> 상기와 같은 확장모드에서도 시뮬레이션에 의한 반복 계산을 실시하는 동안 그 계산결과를 DB화하여 저장하고, 계산이 끝나게 되면(S206의 Y분기) 상기 배출량 규제기준 평가서버(100)는 광화학 옥시던트 농도 도식화모듈(120)을 통해 상기 DB화된 총 계산결과를 미리 지정된 그래픽 프로그램에 의해 도식화하여 상기 사용자 단말기(11 또는 12)로 전송(S208)함으로써, 규제 대상지역에서 1차 원인물질 배출량 규제에 따른 광화학 옥시던트의 농도 변화 예측치를 상기 도표를 통해 한 눈에 알 수 있게 한다.

<38> 이러한 확장 모드에 의한 동작에서는 사용자가 대상지역의 범위 설정뿐만 아니라, 내장되어 있는 대기화학 수치 산출을 위한 시뮬레이션 모델을 변경하여 설정할 수 있고, 1차 원인물질의 배출량을 배출원별로 규제할 수 있도록, 기본 MODE를 확장할 수 있게 된다. 이러한 확장모드의 평가시스템을 통하여 사용하는 대기화학 수치모델에 따른 차이점을 도출할 수 있고, 배출원별 1차 원인물질 배출량 규제 비율에 따른 광화학 옥시던트 농도 변화가 도식화되어 출력됨으로써, 경제적이고 효율적인 1차 원인물질 배출량 규제기준 및 규제 대상 배출원을 매우 쉽고 간단하게 평가할 수 있다. 이 시스템의 경우, 예를 들어 질소산화물(NO_x)의 배출원별 규제 비율이 모두 10%인 경우가 도 2의 기본 모드에서 질소산화물(NO_x) 배출총량을 10%규제한 경우와 동일하다.

<39> 도 4a 및 도 4b는 두 개의 다른 규제 대상지역에 대한 기본 모드에서의 도식화된 결과를 보인다. 도표의 가로축은 질소산화물(NO_x)의 규제비율(%), 세로축은 반응성 탄화수소(RH)의 규제비율(%), 내부의 수치는 광화학 옥시던트 농도(ppb)를 나타낸다.

<40> 도 4a의 지역은 질소산화물(NO_x)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제에 따라 광화학 옥시던트의 농도가 점차적으로 저감하는 경우로서, 이 지역의 경우는 질소산화물(NO_x)가 좀 더 효과적이며, 예를 들어 반응성 탄화수소(RH)의 배출량을 단독으로 약 50% 규제하면 광화학 옥시던트를 55[ppb]까지 저감시킬 수 있지만, 질소 산화물(NO_x)의 배출량을 단독으로 약 50% 규제하면 광화학 옥시던트를 50[ppb]까지 저감시킬 수 있다.

<41> 도 4b의 지역은 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제에 따라 광화학 옥시던트의 농도가 점차적으로 저감하고 질소산화물(NO_x)의 배출량 규제에 따라 광화학 옥시던트의 농도는 반대로 증가하는 경향이 있는 경우로서, 이 지역의 경우는 정부가 만약 질소산화물(NO_x)의 배출총량을 정책적으로 50% 규제할 계획을 가지고 있다고 가정하면, 질소산화물(NO_x)의 배출총량을 단독으로 50%규제할 경우 옥시던트 농도는 80[ppb]에서 90[ppb]로 10[ppb] 증가할 수 있다. 이 경우 옥시던트 농도를 현재 농도 80[ppb]이하로 저감시키기 위해서는 질소산화물(NO_x)의 배출총량 50% 규제와 동시에 반응성 탄화수소(RH)의 배출총량을 30% 이상 규제를 해야 한다.

<42> 이상의 본 발명에 의한 평가시스템 및 방법에 의하면, 상기 배출량 규제기준 평가서버(100)에 의해 도식화되어 단말기로 제공되는 정보로부터 사용자는 규제 대상지역의 질소산화물(NO_x)과 반응성 탄화수소(RH)의 배출량 규제 밸런스를 평가하고 그 기준을 정할 수 있게 된다.

<43> 이상에서는 본 발명을 특정의 바람직한 실시예에 대해서 도시하고 설명하였다. 그러나, 본 발명은 상술한 실시예에만 국한되는 것은 아니며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 다음의 청구범위에 기재된 본 발명의 기술적 사상을 벗어나지 없이 얼마든지 다양하게 변경실시할 수 있을 것이다.

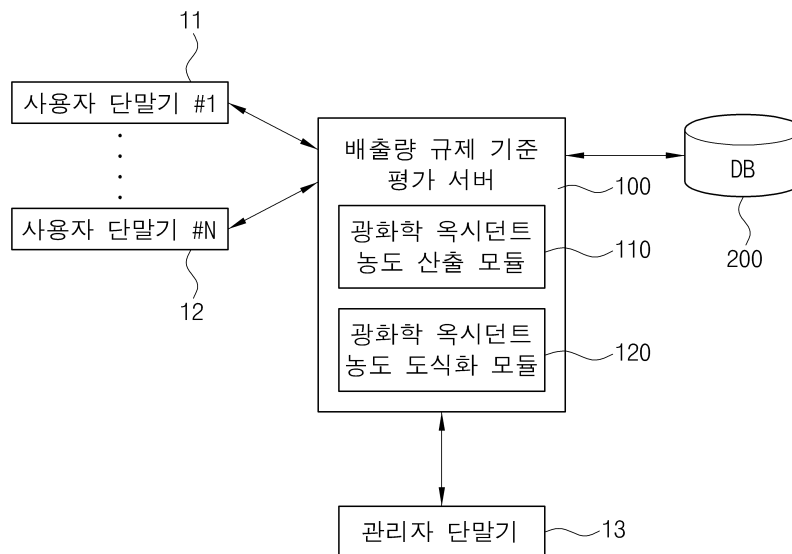
도면의 간단한 설명

<44> 도 1은 본 발명의 일 실시예에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가시스템을 나타내는 개략구조도이다.

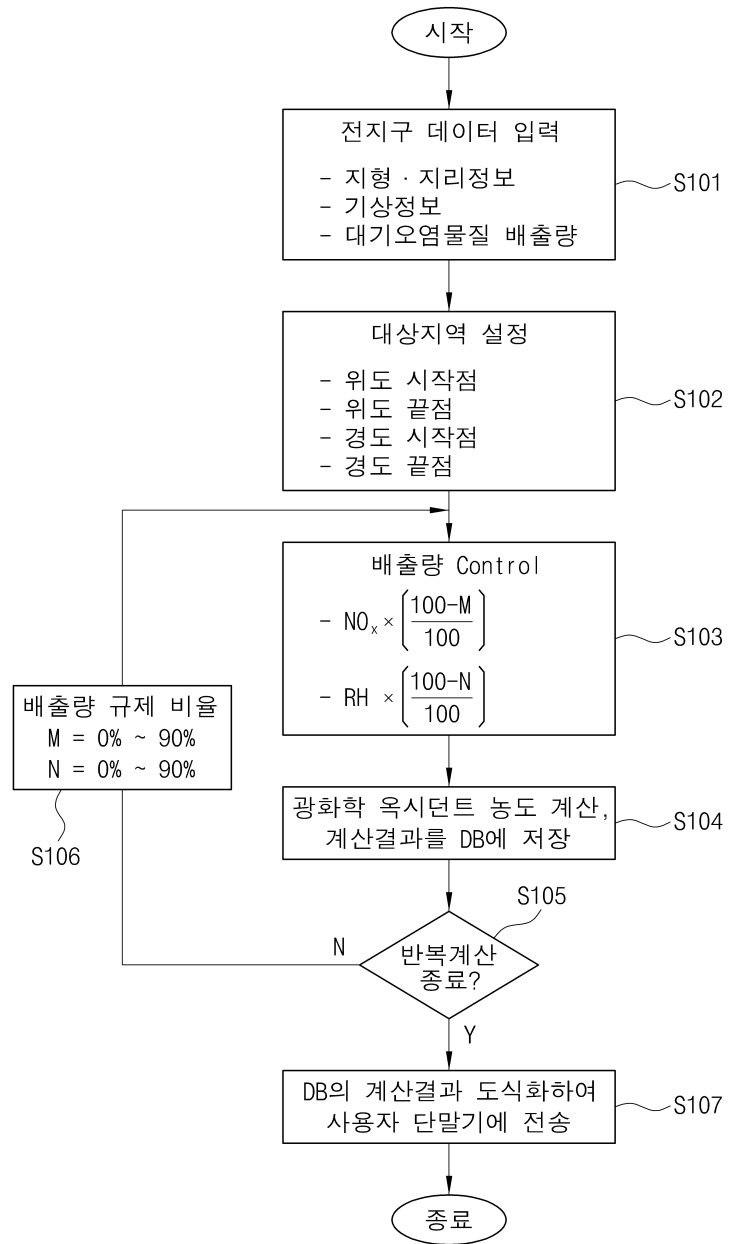
- <45> 도 2는 본 발명에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법의 일 실시예를 예시한 동작 흐름도이다.
- <46> 도 3은 본 발명에 의한 광화학 옥시던트 저감을 위한 1차 원인물질 배출량 규제기준 평가방법의 다른 실시예를 예시한 동작 흐름도이다.
- <47> 도 4a 및 도 4b는 두 개의 다른 규제 대상지역에 대한 기본 모드에서의 도식화된 결과를 예시한 도표이다.
- <48> 도 5는 광화학 옥시던트의 대기화학반응에 의한 생성메커니즘을 간략하게 도식화한 도면이다.
- <49> 도 6은 상기 도 5의 반응에 참여하는 주요 광화학 반응식을 나타낸 표이다.
- <50> 도 7은 도 5의 반응과정에 도 6의 주요 반응식들이 어떻게 관계하고 있는지를 도식화한 도면이다.
- <51> 도 8 및 도 9a 내지 도 9d는 CBM-IV에 의한 33개의 광화학 반응물질과 81개의 반응식을 예시하고 있다.
- <52> <도면의 주요 부분에 대한 부호의 설명>
- <53> 11, 12 : 사용자 단말기 13 : 관리자 단말기
- <54> 100 : 배출량 규제기준 평가서버 110 : 광화학옥시던트농도 산출모듈
- <55> 120 : 광화학옥시던트농도 도식화모듈 200 : 데이터 베이스

도면

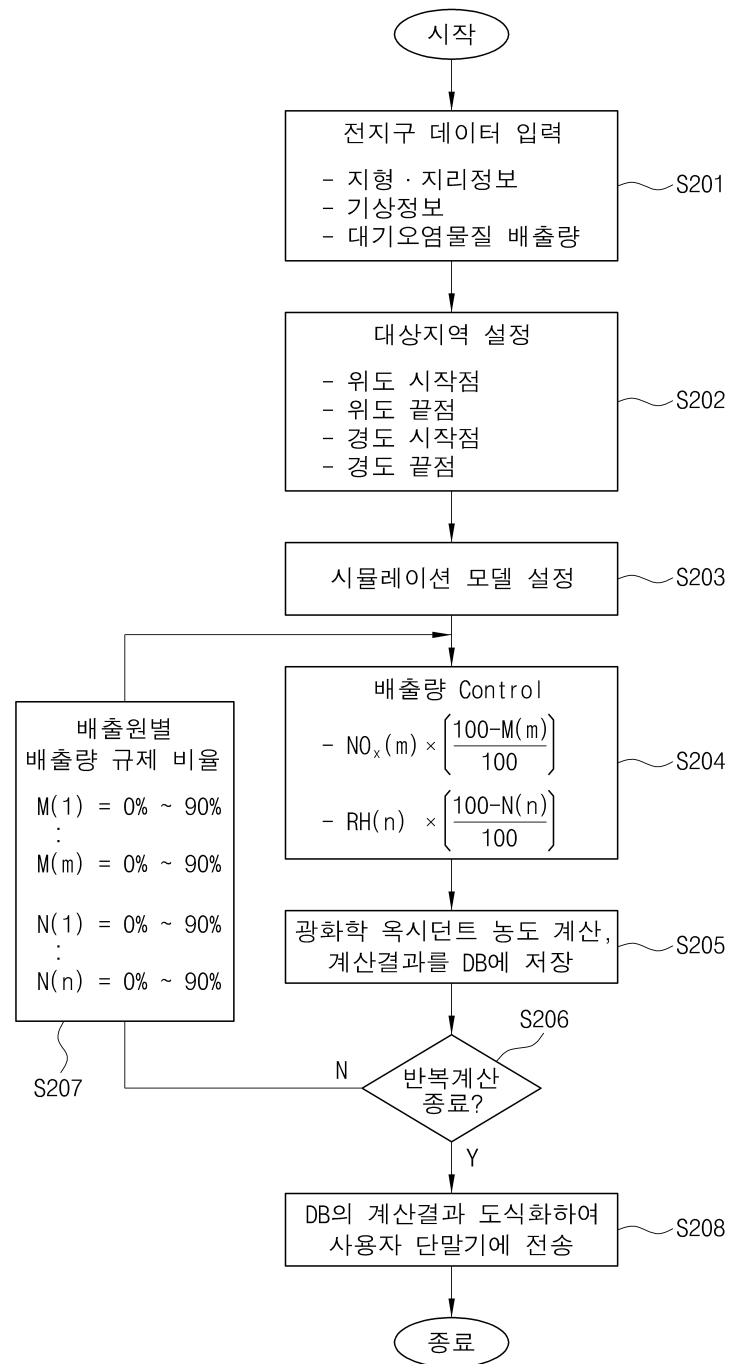
도면1



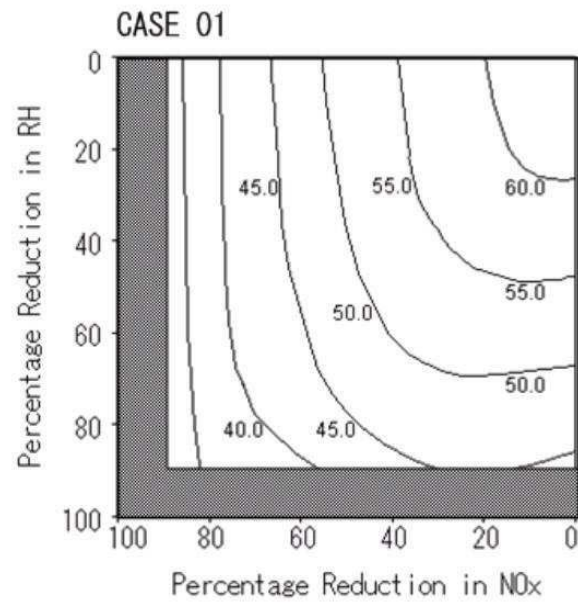
도면2



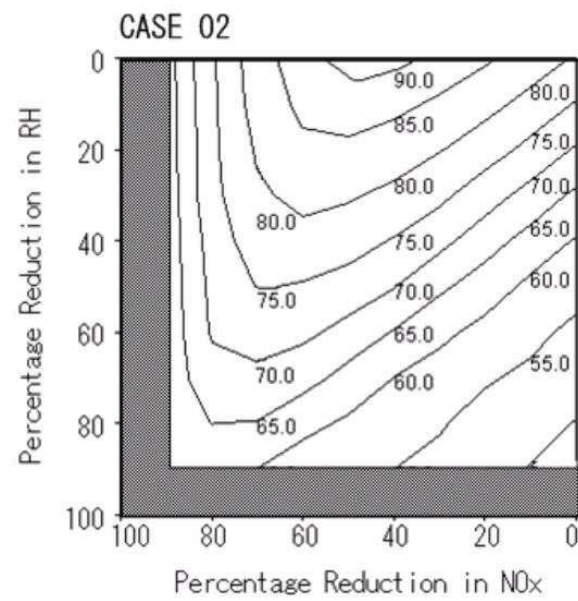
도면3



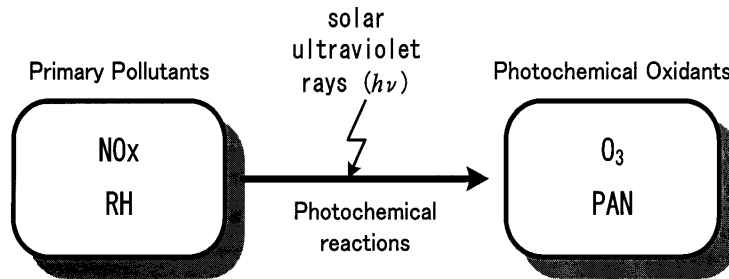
도면4a



도면4b



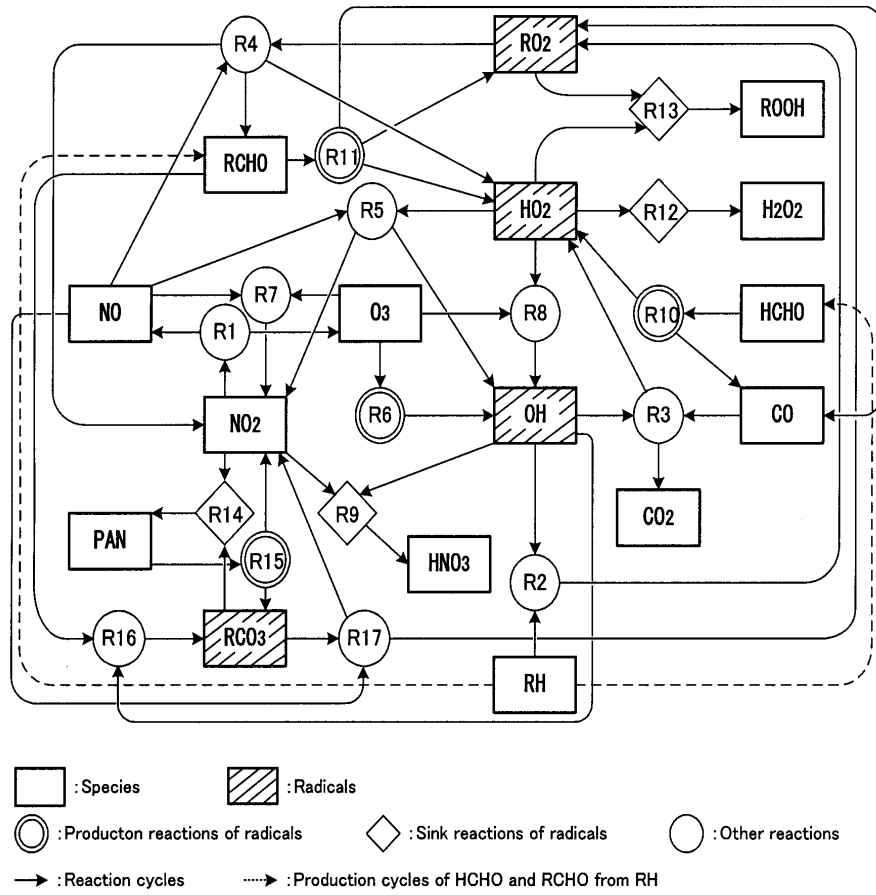
도면5



도면6

No.	Reactions
Major O₃ Production Reactions	
(R1)	$\text{NO}_2 + h\nu + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{O}_3$
(R2)	$\text{RH} + \text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{RO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
(R3)	$\text{CO} + \text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{CO}_2$
(R4)	$\text{RO}_2 + \text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{RCHO} + \text{HO}_2 + \text{NO}_2$
(R5)	$\text{HO}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{OH} + \text{NO}_2$
Major O₃ Sink Reactions	
(R6)	$\text{O}_3 + h\nu + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{OH} + \text{O}_2$
(R7)	$\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$
(R8)	$\text{HO}_2 + \text{O}_3 \rightarrow \text{OH} + 2\text{O}_2$
(R9)	$\text{OH} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{HNO}_3$
Others	
(R10)	$\text{HCHO} + h\nu + 2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{HO}_2 + \text{CO}$
(R11)	$\text{RCHO} + h\nu + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{RO}_2 + \text{HO}_2 + \text{CO}$
(R12)	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$
(R13)	$\text{RO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{ROOH} + \text{O}_2$
(R14)	$\text{RCO}_3 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{PAN}$
(R15)	$\text{PAN} \rightarrow \text{RCO}_3 + \text{NO}_2$
(R16)	$\text{RCHO} + \text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{RCO}_3 + \text{H}_2\text{O}$
(R17)	$\text{RCO}_3 + \text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{RO}_2 + \text{NO}_2 + \text{CO}_2$

도면7



도면8

Species	
NO	Nitric oxide
NO ₂	Nitrogen dioxide
NO ₃	Nitrogen trioxide
N ₂ O ₅	Dinitrogen pentoxide
HONO	Nitrous acid
HNO ₃	Nitric acid
PNA	Peroxynitric acid (HO ₂ NO ₂)
O ¹ D	Oxygen atom (singlet)
O	Oxygen atom (triplet)
OH	Hydroxyl radical
H ₂ O	Water
O ₃	Ozone
HO ₂	Hydroperoxy radical
H ₂ O ₂	Hydrogen peroxide
CO	Carbon monoxide
FORM	Formaldehyde (CH ₂ =O)
ALD2	High molecular weight aldehyde (RCHO, R>H)
C ₂ O ₃	Peroxyacyl radical
PAN	Peroxyacyl nitrate (CH ₃ C(O)O ₂ NO ₂)
PAR	Paraffinic carbon bond (C-C)
ROR	Secondary organic oxy radical
OLE	Olefinic carbon bond (C=C)
ETH	Ethene (CH ₂ =CH ₂)
TOL	Toluene (C ₆ H ₅ -CH ₃)
CRES	Cresol and higher molecular weight phenols
TO ₂	Toluene - hydroxyl radical adduct
CRO	Methylphenoxy radicals
OPEN	Aromatic ring fragment acid
XYL	Xylene (C ₆ H ₆ -(CH ₃) ₂)
MGLY	Methyl glyoxal (CH ₃ C(O)C(O)H)
ISOP	Isoprene
XO ₂	NO - to - NO ₂ operation
XO ₂ N	NO - to - NO ₃ operation

도면9a

No.	Reaction	Rate constant (k) [cm ³ ·molecule ⁻¹ ·s ⁻¹]
<u>Inorganic Reactions</u>		
1	$\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}$	Radiation dependent
2	$\text{O} + (\text{O}_2 + \text{M}) \rightarrow \text{O}_3$	$1.4 \times 10^3 e^{1175/T}$
3	$\text{O}_3 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2$	$1.8 \times 10^{-12} e^{-1370/T}$
4	$\text{O} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{NO}$	9.3×10^{-12}
5	$\text{O} + \text{NO}_2 + (\text{M}) \rightarrow \text{NO}_3$	$1.6 \times 10^{-13} e^{687/T}$
6	$\text{O} + \text{NO} + (\text{M}) \rightarrow \text{NO}_2$	$2.2 \times 10^{-13} e^{602/T}$
7	$\text{O}_3 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{NO}_3$	$1.2 \times 10^{-13} e^{-2450/T}$
8	$\text{O}_3 + h\nu \rightarrow \text{O}$	Radiation dependent
9	$\text{O}_3 + h\nu \rightarrow \text{O}^1\text{D}$	Radiation dependent
10	$\text{O}^1\text{D} + (\text{M}) \rightarrow \text{O}$	$1.9 \times 10^8 e^{390/T}$
11	$\text{O}^1\text{D} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{OH}$	2.2×10^{-10}
12	$\text{O}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{HO}_2$	$1.6 \times 10^{-12} e^{-940/T}$
13	$\text{O}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{OH}$	$1.4 \times 10^{-14} e^{-580/T}$
14	$\text{NO}_3 + h\nu \rightarrow 0.89 \text{NO}_2 + 0.89 \text{O} + 0.11 \text{NO}$	Radiation dependent
15	$\text{NO}_3 + \text{NO} \rightarrow 2 \text{NO}_2$	$1.3 \times 10^{-11} e^{250/T}$
16	$\text{NO}_3 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{NO}_2$	$2.5 \times 10^{-14} e^{-1230/T}$
17	$\text{NO}_3 + \text{NO}_2 + (\text{M}) \rightarrow \text{N}_2\text{O}_5$	$5.3 \times 10^{-13} e^{256/T}$
18	$\text{N}_2\text{O}_5 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{HNO}_3$	1.3×10^{-21}
19	$\text{N}_2\text{O}_5 + (\text{M}) \rightarrow \text{NO}_3 + \text{NO}_2$	$3.5 \times 10^{14} e^{-10897/T}$
20	$\text{NO} + \text{NO} + (\text{O}_2) \rightarrow 2 \text{NO}_2$	$1.8 \times 10^{-20} e^{530/T}$
21	$\text{NO} + \text{NO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{HONO}$	4.4×10^{-40}
22	$\text{OH} + \text{NO} + (\text{M}) \rightarrow \text{HONO}$	$4.5 \times 10^{-13} e^{806/T}$
23	$\text{HONO} + h\nu \rightarrow \text{OH} + \text{NO}$	Radiation dependent
24	$\text{OH} + \text{HONO} \rightarrow \text{NO}_2$	6.6×10^{-12}
25	$\text{HONO} + \text{HONO} \rightarrow \text{NO} + \text{NO}_2$	1.0×10^{-20}
26	$\text{OH} + \text{NO}_2 + (\text{M}) \rightarrow \text{HNO}_3$	$1.0 \times 10^{-12} e^{713/T}$
27	$\text{OH} + \text{HNO}_3 + (\text{M}) \rightarrow \text{NO}_3$	$5.1 \times 10^{-15} e^{1000/T}$
28	$\text{HO}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{OH} + \text{NO}_2$	$3.7 \times 10^{-12} e^{240/T}$

도면9b

No.	Reaction	Rate constant (k) [cm ³ ·molecule ⁻¹ ·s ⁻¹]
<u>Inorganic Reactions (continued)</u>		
29	HO ₂ + NO ₂ + (M) → PNA	1.2×10 ⁻¹³ e ^{749/T}
30	PNA + (M) → HO ₂ + NO ₂	4.8×10 ¹³ e ^{-10121/T}
31	OH + PNA → NO ₂	1.3×10 ⁻¹² e ^{380/T}
32	HO ₂ + HO ₂ → H ₂ O ₂	5.9×10 ⁻¹⁴ e ^{1150/T}
33	HO ₂ + HO ₂ + H ₂ O → H ₂ O ₂	2.2×10 ⁻³⁸ e ^{5800/T}
34	H ₂ O ₂ + h _v → 2 OH	Radiation dependent
35	OH + H ₂ O ₂ → HO ₂	3.1×10 ⁻¹² e ^{-187/T}
36	OH + CO + (O ₂) → HO ₂	2.2×10 ⁻¹³
<u>Formaldehyde Reactions</u>		
37	FORM + OH + (O ₂) → HO ₂ + CO	1.0×10 ⁻¹¹
38	FORM + h _v + (2 O ₂) → 2 HO ₂ + CO	Radiation dependent
39	FORM + h _v → CO	Radiation dependent
40	FORM + O → OH + HO ₂ + CO	3.0×10 ⁻¹¹ e ^{-1550/T}
41	FORM + NO ₃ + (O ₂) → HNO ₃ + HO ₂ + CO	6.3×10 ⁻¹⁶
<u>High Molecular Weight Aldehyde Reactions</u>		
42	ALD2 + O + (O ₂) → C ₂ O ₃ + OH	1.2×10 ⁻¹¹ e ^{-986/T}
43	ALD2 + OH → C ₂ O ₃	7.0×10 ⁻¹² e ^{250/T}
44	ALD2 + NO ₃ + (O ₂) → C ₂ O ₃ + HNO ₃	2.5×10 ⁻¹⁵
45	ALD2 + h _v + (2 O ₂) → FORM + XO ₂ + CO + 2HO ₂	Radiation dependent
46	C ₂ O ₃ + NO + (O ₂) → FORM + XO ₂ + HO ₂ + NO ₂	5.4×10 ⁻¹² e ^{250/T}
47	C ₂ O ₃ + NO ₂ → PAN	8.0×10 ⁻²⁰ e ^{5500/T}
48	PAN → C ₂ O ₃ + NO ₂	9.4×10 ¹⁶ e ^{-14000/T}
49	C ₂ O ₃ + C ₂ O ₃ → 2 FORM + 2 XO ₂ + 2 HO ₂	2.0×10 ⁻¹²
50	C ₂ O ₃ + HO ₂ → 0.79 FORM + 0.79 XO ₂ + 0.79 HO ₂ + 0.79 OH	6.5×10 ⁻¹²
<u>Alkane Reactions</u>		
51	OH → FORM + XO ₂ + HO ₂	1.1×10 ² e ^{-1710/T}

도면9c

No.	Reaction	Rate constant (k) [cm ³ ·molecule ⁻¹ ·s ⁻¹]
<u>Alkane Reactions (continued)</u>		
52	PAR + OH → 0.87 XO2 + 0.13 XO2N + 0.11 HO2 + 0.11 ALD2 + 0.76 ROR - 0.11 PAR	8.1×10 ⁻¹³
53	ROR → 1.10 ALD2 + 0.96 XO2 + 0.94 HO2 + 0.04 XO2N + 0.02 ROR - 2.10 PAR	1.0×10 ¹⁵ e ^{-8000/T}
54	ROR → HO2	1.6×10 ³
55	ROR + NO2 →	1.5×10 ⁻¹
<u>Alkene Reactions</u>		
56	O + OLE → 0.63 ALD2 + 0.38 HO2 + 0.28 XO2 + 0.30 CO + 0.20 FORM + 0.02 XO2N + 0.22 PAR + 0.20 OH	1.2×10 ⁻¹¹ e ^{-324/T}
57	OH + OLE → FORM + ALD2 + XO2 + HO2 - PAR	5.2×10 ⁻¹² e ^{504/T}
58	O3 + OLE → 0.50 ALD2 + 0.74 FORM + 0.33 CO + 0.44 HO2 + 0.22 XO2 + 0.10 OH - PAR	1.4×10 ⁻¹⁴ e ^{-2105/T}
59	NO3 + OLE → 0.91 XO2 + FORM + ALD2 + 0.09 XO2N + NO2 - PAR	7.7×10 ⁻¹⁵
60	O + ETH → FORM + 0.70 XO2 + CO + 1.70 HO2 + 0.30 OH	1.0×10 ⁻¹¹ e ^{-792/T}
61	OH + ETH → XO2 + 1.56 FORM + HO2 + 0.22 ALD2	2.0×10 ⁻¹² e ^{411/T}
62	O3 + ETH → FORM + 0.42 CO + 0.12 HO2	1.3×10 ⁻¹⁴ e ^{-2633/T}
<u>Aromatic Reactions</u>		
63	OH + TOL → 0.08 XO2 + 0.36 CRES + 0.44 HO2 + 0.56 TO2	2.1×10 ⁻¹² e ^{322/T}
64	TO2 + NO → 0.90 NO2 + 0.90 OPEN + 0.90 HO2	8.1×10 ⁻¹²
65	TO2 → HO2 + CRES	4.2
66	OH + CRES → 0.40 CRO + 0.60 XO2 + 0.60 HO2 + 0.30 OPEN	4.1×10 ⁻¹¹

도면9d

No.	Reaction	Rate constant (k) [cm ³ ·molecule ⁻¹ ·s ⁻¹]
<u>Aromatic Reactions (continued)</u>		
67	NO ₃ + CRES → CRO + HNO ₃	2.2×10 ⁻¹¹
68	CRO + NO ₂ →	1.4×10 ⁻¹¹
69	OH + XYL → 0.70 HO ₂ + 0.50 XO ₂ + 0.20 CRES + 0.80 MGLY + 1.10 PAR + 0.30 TO ₂	1.7×10 ⁻¹¹ e ^{116/T}
70	OH + OPEN → XO ₂ + C ₂ O ₃ + 2 HO ₂ + 2 CO + FORM	3.0×10 ⁻¹¹
71	OPEN + h _v → C ₂ O ₃ + CO + HO ₂	Radiation dependent
72	O ₃ + OPEN → 0.03 ALD ₂ + 0.62 C ₂ O ₃ + 0.70 + 0.03 XO ₂ + 0.69 CO + 0.08 OH + 0.76 HO ₂ + 0.20 MGLY	5.4×10 ⁻¹⁷ e ^{-500/T}
73	OH + MGLY → XO ₂ + C ₂ O ₃	1.7×10 ⁻¹¹
74	MGLY + h _v → C ₂ O ₃ + CO + HO ₂	Radiation dependent
<u>Isoprene Reactions</u>		
75	O + ISOP → 0.60 HO ₂ + 0.80 ALD ₂ + 0.55 OLE + 0.50 XO ₂ + 0.50 CO + 0.45 ETH + 0.90 PAR	1.8×10 ⁻¹¹
76	OH + ISOP → FORM + XO ₂ + 0.67 HO ₂ + 0.40 MGLY + 0.20 C ₂ O ₃ + ETH + 0.20 ALD ₂ + 0.13 XO ₂ N	9.6×10 ⁻¹¹
77	O ₃ + ISOP → FORM + 0.40 ALD ₂ + 0.55 ETH + 0.20 MGLY + 0.06 CO + 0.10 PAR + 0.44 HO ₂ + 0.10 OH	1.2×10 ⁻¹⁷
78	NO ₃ + ISOP → XO ₂ N	3.2×10 ⁻¹³
<u>Operator Reactions</u>		
79	XO ₂ + NO → NO ₂	8.1×10 ⁻¹²
80	XO ₂ + XO ₂ → (Out of the mechanism)	1.7×10 ⁻¹⁴ e ^{1300/T}
81	XO ₂ N + NO → (Out of the mechanism)	6.8×10 ⁻¹³