

동아시아지역의 CMAQ 대류권 오존 모의에 화학적 측면 경계조건이 미치는 효과

The Effect of the Chemical Lateral Boundary Conditions on CMAQ Simulations of Tropospheric Ozone for East Asia

홍성철 · 이재범 · 최진영 · 문경정¹⁾ · 이현주 · 홍유덕 · 이석조 · 송창근*
국립환경과학원 기후변화연구과, ¹⁾영산강물환경연구소
(2012년 7월 3일 접수, 2012년 8월 28일 수정, 2012년 8월 30일 채택)

Sung-Chul Hong, Jae-Bum Lee, Jin-Young Choi, Kyung-Jung Moon¹⁾,
Hyun-Ju Lee, You-Deog Hong, Suk-Jo Lee and Chang-Keun Song*
*Climate Change Research Division, Climate and Air Quality Research Department,
National Institute of Environmental Research*
¹⁾*Measure Analysis Division, Yeongsan River Basin Environment Office,
National Institute of Environmental Research*

(Received 3 July 2012, revised 28 August 2012, accepted 30 August 2012)

Abstract

The goal of this study is to investigate the effects of the chemical lateral boundary conditions (CLBCs) on Community Multi-scale Air Quality (CMAQ) simulations of tropospheric ozone for East Asia.

We developed linking tool to produce CLBCs of CMAQ from Goddard Earth Observing System-Chemistry (GEOS-Chem) as a global chemistry model. We examined two CLBCs: the fixed CLBC in CMAQ (CLBC-CMAQ) and the CLBC from GEOS-Chem (CLBC-GEOS). The ozone fields by CMAQ simulation with these two CLBCs were compared to Tropospheric Emission Spectrometer (TES) satellite data, ozonesonde and surface measurements for May and August in 2008.

The results with CLBC-GEOS showed a better tropospheric ozone prediction than that with CLBC-CMAQ. The CLBC-GEOS simulation led to the increase in tropospheric ozone concentrations throughout the model domain, due to be influenced high ozone concentrations of upper troposphere and near inflow western and northern boundaries. Statistical evaluations also showed that the CLBC-GEOS case had better results of both the index of Agreement (IOA) and mean normalized bias. In the case of IOA, the CLBC-GEOS simulation was improved about 0.3 compared to CLBC-CMAQ due to the better predictions for high ozone concentrations in upper troposphere.

Key words : CMAQ, CLBCs, Tropospheric ozone, Linking tool, GEOS-Chem

*Corresponding author.
Tel : +82-(0)32-560-7303, E-mail : cksong@korea.kr

1. 서 론

대기질 예측을 위하여 다양한 시·공간적인 모의가 가능한 3차원 오일러리안(Eulerian) 대기질 모델이 널리 사용되고 있으며, 지역규모의 오일러리안 대기질 모델은 화학적 경계 조건을 필요로 한다(Jiménez *et al.*, 2007; Liu *et al.*, 2001). 화학적 경계 조건은 모델링 관심 영역의 외부의 대기오염물질의 영향을 고려해 주는 부분이기 때문에 적절한 경계 조건의 설정은 대기질 예측에 있어 매우 중요하다.

일반적으로 관측자료를 기반으로 한 화학적 경계 조건 설정이 가장 바람직하지만, 현실적으로 모든 화학종에 대하여 시·공간적인 분해능을 가지는 관측 자료를 얻는 것은 불가능하다. Seinfeld and Pandis (1997)에 의하면, 대기질 모델에서 화학적 경계조건 설정을 위하여 다음과 같은 세 가지 방법을 제시하고 있다. (1) 관심지역 내 대기오염물질에 영향을 줄 수 있는 모든 배출원이 포함되도록 모델 영역을 넓게 설정하는 방법, (2) 배출원의 효과를 화학적 경계 조건에 통계적으로 포함시키는 방법, (3) 관심 영역보다 더 큰 규모의 대기질 모델의 예측 정보를 화학적 경계조건에 공급하는 역학적 상세화 방법이다. 이러한 방법들 중에서, 컴퓨팅 자원의 과도한 사용을 요구하는 첫 번째 방법보다는 두 번째와 세 번째 방법이 일반적으로 사용되어지고 있다. 그러나 두 번째 방법은 시간적으로 동일한 경계조건을 처방한다는 단점을 지니고 있다(Eder *et al.*, 2006; Hogrefe *et al.*, 2004). 하지만, 세 번째 방법인 역학적 상세화 방법은 시·공간적으로 동일한 경계조건이 설정되는 단점을 보완하면서도 컴퓨팅 자원을 효율적으로 활용함에 따라 경계조건의 설정의 가장 현실적인 방법으로 알려져 있다(Samaali *et al.*, 2009; Hogrefe *et al.*, 2006; Jonson *et al.*, 2001).

최근 동아시아 지역의 모델링을 통한 대기질 연구에 있어서, 많은 연구들이 위의 두 번째 방법의 일종으로 사용되는 CMAQ 내 미리 통계적으로 정의된 프로파일을 측면 경계조건으로 사용하고 있다. 이러한 연구들은 모델 경계에서 시·공간적으로 변화하지 않는 측면 경계조건을 사용함으로써 관심 영역의 외부의 영향을 적절하게 반영하지 못하는 단점을 지니게 된다(Song *et al.*, 2008; In *et al.*, 2007).

따라서 본 연구에서는 CMAQ 모델에서 미리 정의된 측면 경계조건과 전구규모 대기화학 모델(GEOS-Chem)에서 얻어진 측면 경계조건을 각각 처방하여 CMAQ 모델을 수행한 후, 관측 자료들과 비교·분석을 통해 화학적 측면 경계조건이 동아시아 지역의 대류권 오존 농도 모의에 미치는 효과에 대하여 알아보고자 한다.

2. 모델 개요 및 연구 방법

CMAQ 모의에 필요한 화학적 측면 경계조건은 전구 대기화학모델인 GEOS-Chem에서 생산된 프로파일과 CMAQ 내에서 미리 정의된 프로파일을 사용하였으며, 기상 자료는 Fifth-Generation NCAR/Penn State Mesoscale Model (MM5)의 결과를 사용하였다. 대류권 오존 모의 결과 검증을 위해 위성 관측, 오존존데 그리고 지상 관측 자료를 사용하였다.

2.1 GEOS-Chem

지역규모 대기화학 모델의 경계조건을 생성하기 위해서 사용된 전구 대기화학 모델인 GEOS-Chem(Bey *et al.*, 2001)은 하버드대학교 대기화학 모델링 그룹에서 개발한 3차원 전구 대기화학 수송 모델로서 오존을 포함한 여러 기체상의 화학 물질들과 에어로졸에 대한 시·공간 분포의 모의가 가능하여 많은 연구에 활용되고 있다(<http://www.as.harvard.edu/chemistry/trop/geos/>). 본 연구에서 사용된 GEOS-Chem의 구동을 위하여 사용된 기상자료는 미국 National Aeronautics and Space Administration (NASA)의 Global Modeling and Assimilation Office (GMAO) 그룹에서 자료동화를 통해 생산하고 있는 GEOS 기상자료와 Goddard Institute for Space Studies (GISS) 기후모델의 기상자료를 사용하였다. $2^{\circ} \times 2.5^{\circ}$ 의 수평해상도와 성층권까지 포함하는 47개의 연직층수를 가지고 있으며 55개의 화학종으로 구성되어 있다. 에어로졸모의에는 O_3 - NO_x -VOC-Oxidant 화학구조를 적용하며 에어로졸의 열역학적 평형계산과 대기복사 및 광화학반응에 끼치는 에어로졸의 영향은 Park *et al.* (2004)의 방법을 따른다. 또한 Secondary Organic Aerosol (SOA)의 생성은 Chung and Seinfeld (2002)의 방법을 사용하며 근래에 새로 규명되고 있는

Table 1. Configurations of GEOS-Chem, MM5 and CMAQ used in this study.

GEOS-Chem	
Horizontal resolution	2° × 2.5°
Number of vertical layers	47
Aerosol	Park <i>et al.</i> (2004)
	Chung and Seinfeld (2002)
	Henze and Seinfeld (2006)
Emission	EDGAR and TRACE-P
MM5	
Number of horizontal grid	105 × 65
Number of vertical layers	23
Spatial resolution	54 km
FDDA	3D analysis nudging
Explicit moisture scheme	Simple ice
Cumulus scheme	KF
Radiation scheme	RRTM
PBL scheme	MRF
LSM scheme	NOAH LSM
CMAQ	
Advection	PPM
Chemical mechanism	CB-4
Aerosol module	AERO3
Emission	INTEX-B (2006)

isoprene의 SOA 에어로졸에 대한 기여는 Henze and Seinfeld (2006)의 방법을 이용한다. 배출량자료는 전 구자료인 Olivier *et al.* (2001)의 EDGAR와 동아시아 자료는 Streets *et al.* (2003)에 의해 기체 및 에어로졸의 오염원 별로 상세하게 개발된 자료인 Transport and Chemical Evolution over the Pacific (TRACE-P)를 이용한다(표 1).

2. 2 MM5

CMAQ 구동을 위한 기상장은 MM5를 통해 모의된 결과를 사용하였다. 모델에 사용된 옵션들은 표 1에 자세히 제시하였다. MM5 (Grell *et al.*, 1994)의 도메인 영역은 동아시아 지역에 대하여 105 (동서) × 65 (남북) × 23 (연직)개 격자로 구성되어 있으며 수평 격자의 크기는 54 km이다. 수평으로는 Arakawa-B 격자체계를 사용하며 연직격자로는 지형을 따라가는 시그마 좌표계(σ-coordinate)로써 비압축성 비정수계 운동방정식을 사용한다. 사용된 물리과정으로는 미세 물리과정은 Reisner mixed-phase 방안 (Reisner *et al.*, 1998, 1993), 적은 모수화 방법은 Kain-Fritsch (KF) 방안 (Kain and Fritsch, 1993), 행성경계층 모수화 방

법으로는 Medium-Range Forecast (MRF) 방안 (Hong and Pan, 1996), 그리고 대기복사 과정으로 Rapid Radiative Transfer Model (RRTM) (Mlawer *et al.*, 1997)을 사용하였다. 자료동화는 6시간마다 National Centers for Environmental Prediction (NCEP)'s NCAR 재분석 자료를 사용한다.

2. 3 CMAQ

본 연구에서 사용된 지역규모 대기화학모델은 미국 Environmental Protection Agency (EPA)에서 개발한 3차원 오일러리안(Eulerian) 대기질 모델인 Model-3/CMAQ v4.6을 이용하였다(Byun and Ching, 1999). 사용된 화학반응 메커니즘으로 기체상과 입자상 반응을 모두 고려하였으며, 기체상 반응으로는 CB-4 (Carbon-Bond Chemical Mechanism Version IV) 메커니즘을 (Gery *et al.*, 1989), 입자상 반응으로는 AERO3 모듈을 이용하였다. CMAQ은 건성침적, 습성침적 등 여러 가지 과정들뿐만 아니라 화학반응 모듈을 통하여 대기 중에서 발생하는 광화학 반응을 고려하고 있어, 오존과 같은 광화학 오염물질에 대한 모의에 적합한 것으로 알려져 있다(Byun and Schere, 2006). 배출량 자료는 2006년 Intercontinental Chemical Transport Experiment Phase B (INTEX-B) Project를 통해 산출된 아시아 최신 배출량 자료(0.5° × 0.5°)를 적용하였다.

2. 4 실험내용 및 관측 자료

화학적 측면 경계조건이 동아시아 지역의 오존 농도 모의에 미치는 효과를 살펴보고자 두 가지 실험에 대하여 2008년 5월과 8월에 대하여 각각 모델링을 수행하였다. 두 실험은 경계조건 처방 방법에 따라 다음과 같이 구분된다. CMAQ에서 미리 정의된 측면 경계조건을 이용한 CLBC-CMAQ 실험과 전구 규모 대기질 모델 (GEOS-Chem)에서 얻어진 프로파일을 이용하여 측면 경계조건 처방한 CLBC-GEOS 실험을 각각 수행하였다. 하지만 CLBC-GEOS 실험을 위해서는 두 모델의 수평 및 연직격자와 화학 메커니즘이 다르므로 두 모델을 연결해 줄 수 있는 역학적·화학적 linking tool이 필요하다. GEOS-Chem과 CMAQ을 연결하는 중요한 과정은 수평·연직 내삽(interpolation)과 Chemical mapping으로 이루어진다 (Song *et al.*, 2008). 먼저, 위·경도 좌표계로 이루어진

Table 2. Chemical mapping table between CMAQ and GEOS-chem to set up chemical lateral boundary conditions of CMAQ.

CMAQ (CB-4)	GEOS-Chem	CMAQ (CB-4)	GEOS-Chem
NO ₂	NO _x	ISPD	MACR+MVK
O ₃	O _x -NO _x	TERP	ALPH+LIMO+ALCO
CO	CO	SO ₂	SO ₂ +DMS
N ₂ O ₅	N ₂ O ₅	NH ₃	NH ₃
HNO ₃	HNO ₃	ASO4J	SO ₄
PNA	HNO ₄	ANH4J	NH ₄
H ₂ O ₂	H ₂ O ₂	ANO3J	NIT
UMPH	MP	AORGPJ	0.0545 × OCPI+0.0545 × OCPO
NTR	R _i N ₂	AORGBJ	0.847 × SOA1+0.904 × SOA2+1.24 × SOA3
FORM	CH ₂ O	AECJ	BCPI+BCPO
ALD2	0.5 × ALD2+RCHO	ACORS	0.18 × DST2+0.29 × DST3+0.29 × DST4
PAR	0.333 × PRPE+ALK4+0.5 × C ₃ H ₈ + 0.2 × C ₂ H ₈ +ACET+MEK+RCHO	ASEAS	0.621 × SALC
OLE	0.333 × PRPE	ASOIL	0.29 × DST3+0.29 × DST4
PAN	PAN+PPN+PMN	A25J	0.145 × DST1+0.145 × DST2
ISOP	0.2 × ISOP		

GEOS-Chem 결과를 Lambert-Conformal 좌표계로, hybrid-vertical coordinate를 CMAQ의 generalized-vertical coordinate로 바꾸는 것이 수평·연직 내삽 과정이다. 그리고 GEOS-Chem에서 고려하는 화학종들과 CMAQ이 고려하는 화학종들이 서로 일치하지 않기 때문에 화학적 메커니즘을 고려한 Chemical mapping이 필요하다. 본 연구에서는 표 2와 같이 CMAQ의 화학적 메커니즘 중 CB-4와 GEOS-Chem 사이의 mapping 하였으며, 좌표계 변환과 수평·연직 내삽을 통해 GEOS-Chem의 결과를 CMAQ의 화학적 경계 조건으로 처방하였다.

각 실험 결과의 검증을 위하여 사용된 관측 자료들은 다음과 같다. 오존존데자료는 World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre (WOUDC) (<http://www.woudc.org>) 자료를 사용하였다. WOUDC는 캐나다 Meteorological Service of Canada (MSC)의 Experimental Studies Division에 의해 운영되는 Global Atmosphere Watch (GAW) 프로그램 중의 일부분으로 오존존데와 라이다 관측을 통한 오존의 연직분포 등 다양한 종류의 오존자료를 제공한다(<http://www.wmo.int/pages/prog/arep/gaw/ozone-uv.html>). 본 연구에서는 CMAQ 모델 영역에 포함되는 WOUDC 관측소 중에서 3개의 관측소(Sapporo, Tateno, 그리고 Naha) 자료를 사용하였다(그림 1).

위성자료는 2004년 7월에 발사된 National Aeronautics and Space Administration (NASA)의 Association

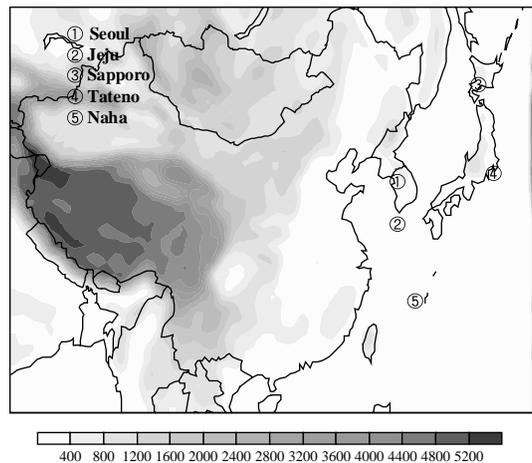


Fig. 1. Model domain, topography (m) and locations of surface and WOUDC ozonesonde sites.

of Universities for Research in Astronomy (Aura) 위성에 탑재되어 있는 4개의 탑재체 중의 하나로 대류권의 이산화탄소, 오존, 수증기, 그리고 메탄의 농도를 연속적으로 측정할 수 있는 TES 자료를 사용하였다(<http://tes.jpl.nasa.gov/mission/whatistes/>).

지상 오존농도의 관측 자료는 국가대기오염정보관리시스템 (National Ambient air Monitoring Information System, 이하 NAMIS) 자료 중 서울(37.4°N~37.7°N, 126.8°E~127.2°E)의 27개 지점별 자료와 제

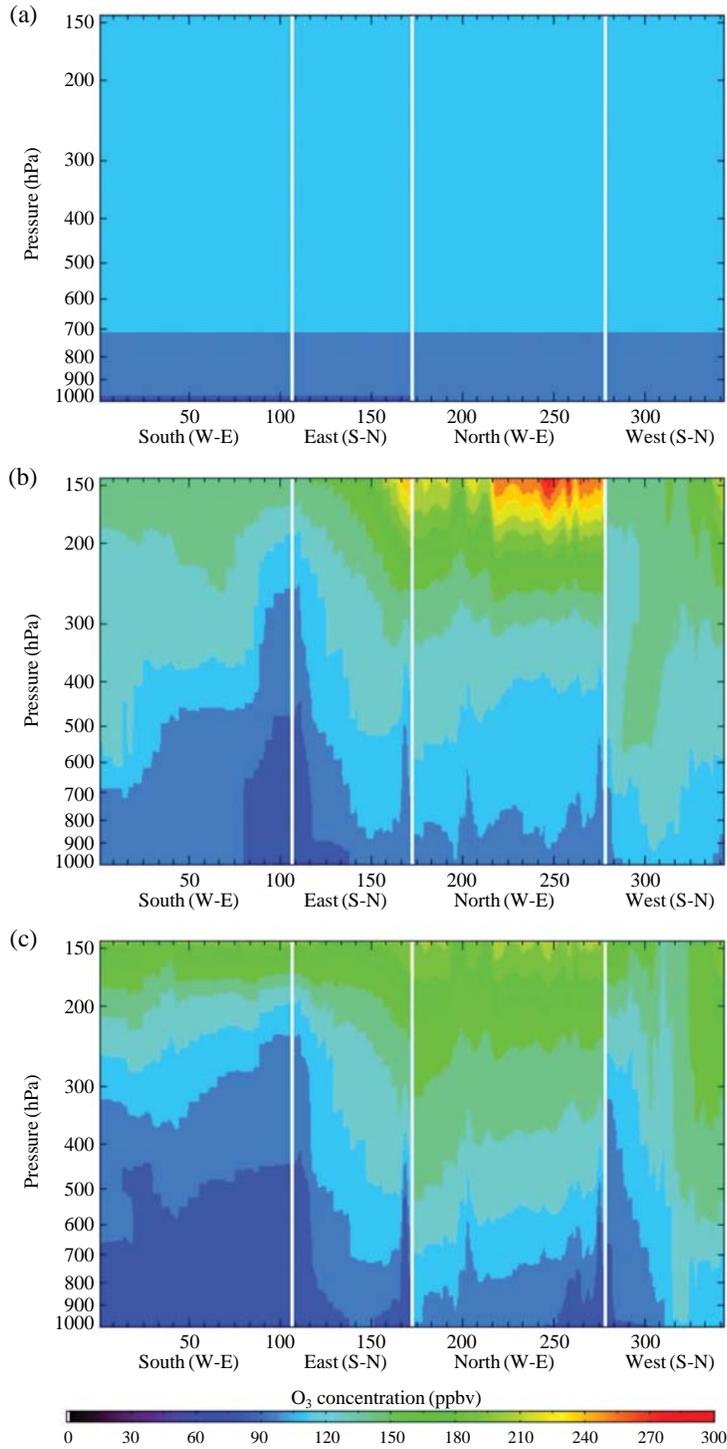


Fig. 2. Mean ozone vertical distributions of lateral boundary conditions on (a) CLBC-CMAQ and CLBC-GEOS (May: (b), August: (c)) at northern, southern, western and eastern boundaries of CMAQ in 2008.

주도 고산(33.2°N, 126.1°E)의 지상관측 자료를 사용하였다(그림 1).

3. 결 과

3.1 화학적 측면 경계 조건

그림 2는 모델 영역의 측면 경계의 5월과 8월에 대한 평균값으로 오존 농도의 연직 분포를 나타낸 것이다. CMAQ에서 정의되어 있는 프로파일의 경우, 각각의 경계에서 위·경도 및 시간에 상관없이 유사한 연직 농도분포를 보인다. 특히 오존의 경우, 지표에서는 30~35 ppb 정도의 값을 나타내고 대류권 상층에서는 65~70 ppb 수준으로 일정한 연직 분포를

가지고 있는 것으로 나타났다. 반면, linking tool을 통해 생성된 결과는 위·경도 및 시간에 따라 다른 연직 분포를 보였으며, 특히 모든 경계의 대류권 상층에서는 오존농도가 35~150 ppb 수준으로 기존 프로파일에 비해 높은 농도를 보였다. 남쪽보다는 북쪽, 동쪽보다는 서쪽 경계에서 오존 농도의 증가가 뚜렷하게 나타났다. 또한 남쪽 경계를 제외한 모든 경계에서 오존의 지표 농도가 5~25 ppb의 증가를 보였으며, 특히 서쪽경계에서 가장 큰 증가를 보이는 것으로 나타났다. 전반적으로 고위도 상층에서 오존농도가 높게 나타났으며, 이는 Song *et al.* (2008)에서 제시한 결과와 일치하는 것으로 위도에 따른 대류권 계면의 높이 차이와 대류권과 성층권 오존 교환에 기인하는 것으로 판단된다.

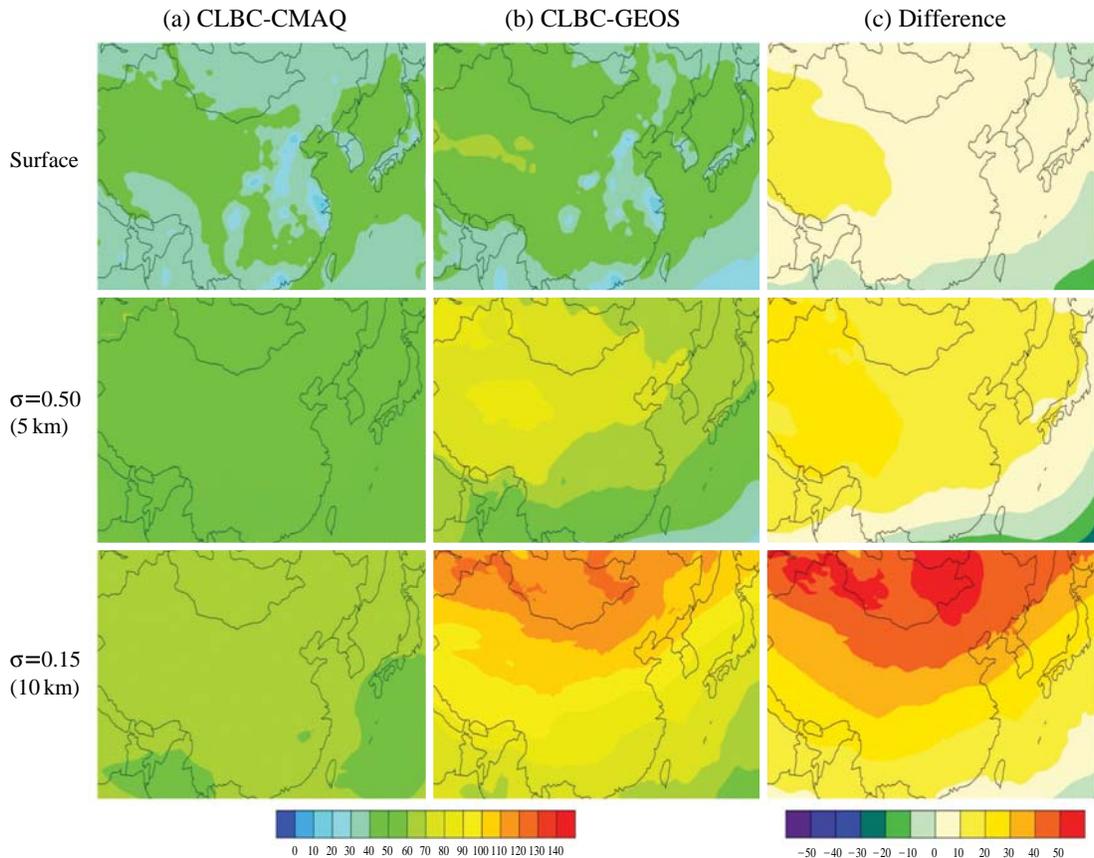


Fig. 3. Horizontal distributions of two months (May and August 2008) averaged ozone concentrations (ppb) at the surface (1st row), about sigma 0.50 level (2nd row), and about sigma 0.15 level (3rd row) of CMAQ simulations (a) CLBC-CMAQ and (b) CLBC-GEOS, and (c) Differences of two experiments.

3. 2 화학적 경계조건에 따른 대류권 오존 모의

그림 3과 표 3은 경계조건에 대하여 프로파일을 이용한 실험 (CLBC-CMAQ)과 GEOS-Chem의 결과의 프로파일을 이용한 실험 (CLBC-GEOS), 그리고

Table 3. Vertical mean O₃ concentrations and difference of two CMAQ simulations in May and August 2008.

Level	CLBC-CMAQ	CLBC-GEOS	Difference
Sigma	O ₃ (ppb)		
1.0	39.1	43.2	4.0
0.99	40.4	44.5	4.1
0.98	41.8	46.0	4.2
0.96	43.0	47.2	4.3
0.93	43.9	48.3	4.4
0.89	45.0	49.6	4.6
0.85	45.9	50.8	5.0
0.80	46.6	52.2	5.6
0.75	47.4	53.8	6.3
0.70	48.3	55.6	7.2
0.65	49.5	57.6	8.2
0.60	50.6	59.9	9.3
0.55	51.8	62.4	10.6
0.50	53.1	65.1	12.0
0.45	54.5	67.9	13.4
0.40	55.9	70.8	14.9
0.35	57.4	74.0	16.6
0.30	58.9	77.4	18.5
0.25	60.4	81.3	20.9
0.20	62.0	86.3	24.4
0.15	63.5	93.4	29.9
0.10	65.0	102.9	37.9
0.05	66.6	113.0	46.4

두 실험의 차이에 대하여 지표와 대류권 중층($\sigma=0.50$; 약 5 km)과 상층($\sigma=0.15$; 약 10 km)에 해당하는 수평 분포와 연직 오존 농도의 두 달 평균값(2008년 5월과 8월)을 나타낸 것이다. CLBC-GEOS 실험이 CLBC-CMAQ 실험에 비해 평균 오존 농도가 지표에서 4 ppb, 대류권 중층에서 12 ppb, 그리고 대류권 상층에서는 약 30 ppb가 증가하는 것으로 나타났으며, 상층으로 갈수록 그 농도의 증가가 커졌다. 특히 모델의 최 상층부에서 오존 농도는 CLBC-CMAQ의 경우에는 약 67 ppb로 나타난 반면, CLBC-GEOS의 경우에는 약 113 ppb 수준으로 두 실험 간 약 46 ppb의 차이를 보였다. CLBC-GEOS 실험의 지표 오존 농도는 서쪽 경계지역에 위치한 티벳 고원에서 CLBC-CMAQ 실험보다 높은 오존농도를 보였으며, 남쪽 경계지역에서는 오존농도가 감소하는 모습을 보였다. 상층 오존 농도는 CLBC-GEOS 실험이 CLBC-CMAQ 실험보다 남쪽경계 지역을 제외한 모든 지역에서 전반적으로 높은 오존 농도 증가를 보였다. CLBC-GEOS 실험에서 지상과 상층의 오존 농도 증가는 북쪽과 서쪽 경계에서의 높은 오존 농도 유입에 기인하는 것으로 분석되었다.

그림 4는 중국 (115°E), 한국 (126°E), 그리고 일본 (140°E)을 기준으로, 경도별 평균 연직 오존 농도를 나타낸다. 두 실험 모두 동쪽으로 갈수록 오존농도가 감소하는 경향을 보였다. 이는 편서풍의 영향으로 서쪽 경계에서 유입된 오존이 동쪽으로 이동 확산되는 과정에서 농도가 감소함에 기인한 것으로 판단된다.

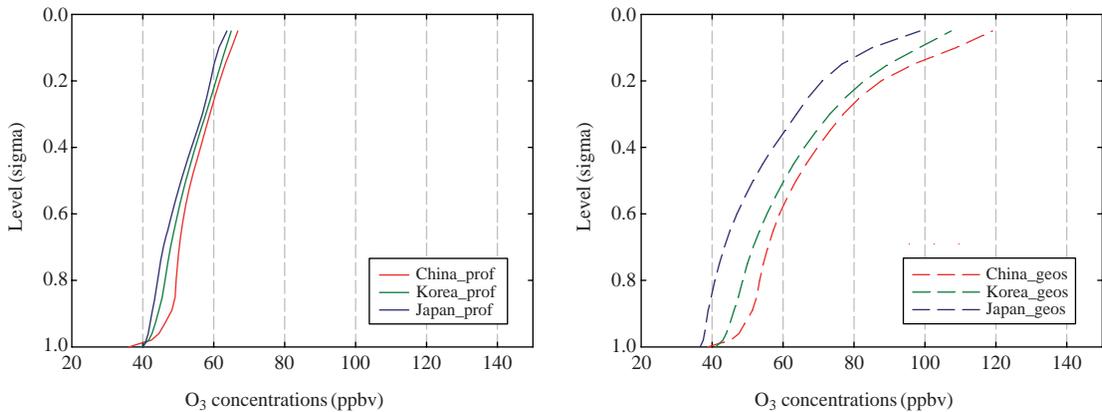


Fig. 4. Vertical distributions of two months (May and August 2008) averaged ozone concentrations of CMAQ simulations with CLBC-CMAQ (left panel) and CLBC-GEOS (right panel).

경도에 따른 연직분포를 살펴보면, CLBC-CMAQ 실험의 경우에는 지표와 대류권 상층에서 경도별 오존 농도의 변화는 1~3 ppb 정도로 크게 변화하지 않았으나, CLBC-GEOS 실험의 경우에는 대류권 상층에

서 경도별 변화가 8~20 ppb 정도로 크게 변화하는 모습을 보였다. 두 실험의 지표 오존 농도는 중국, 한국, 그리고 일본 지역에서 35~40 ppb 수준을 보였으나, CLBC-GEOS 실험의 상층 오존 농도는 CLBC-

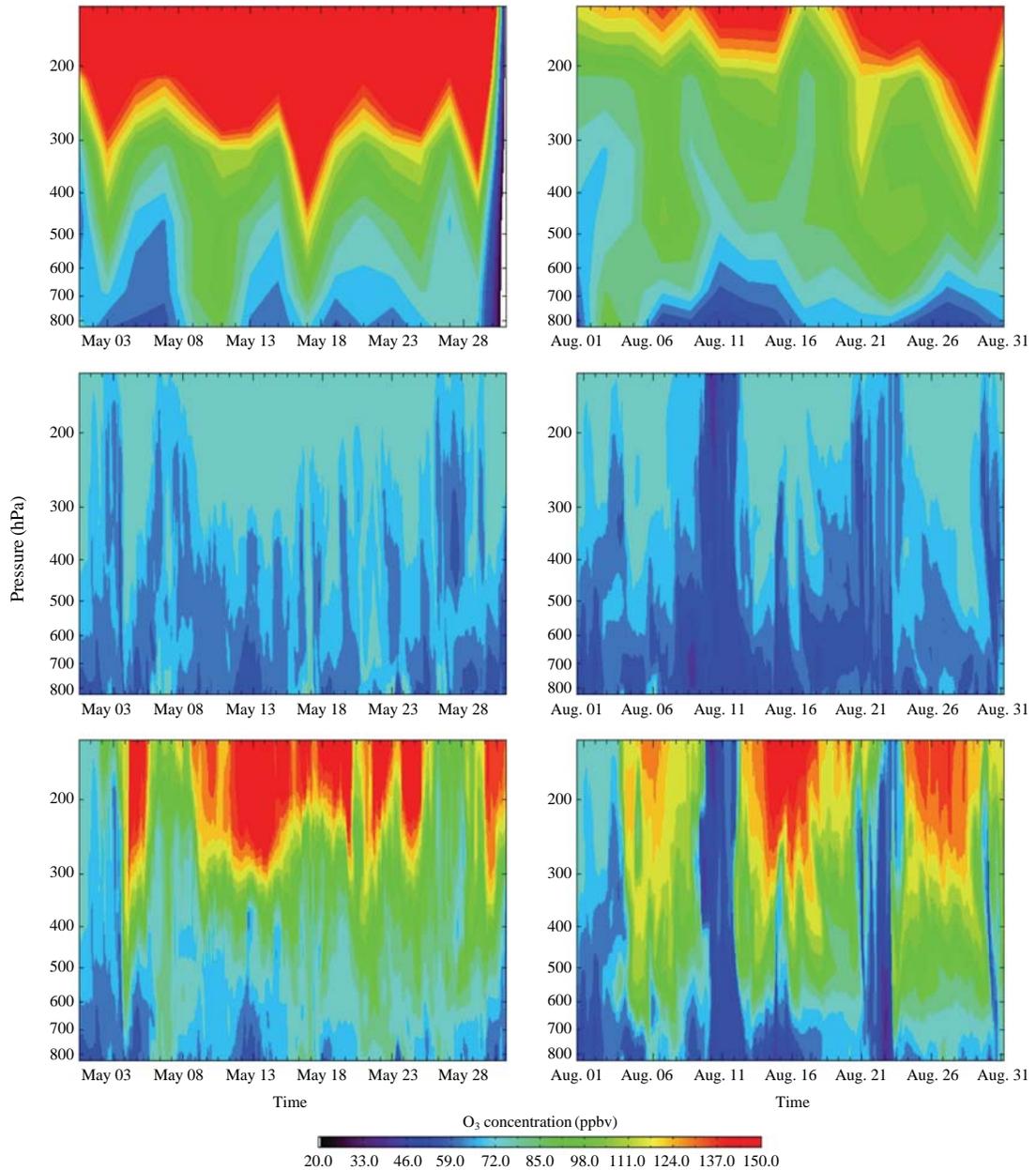


Fig. 5. Time-height cross sections for ozone distributions of satellite (upper) and two CMAQ simulations (CLBC-CMAQ (middle) and CLBC-GEOS (lower)) of Seoul in May (left) and August (right) 2008.

CMAQ 실험의 64~67 ppb 수준보다 크게 증가한 99~119 ppb 수준으로 나타났다.

GEOS-Chem의 결과를 이용하여 화학적 측면 경계조건을 처방한 경우, 기존 CMAQ 프로파일을 이용한 경우보다 전반적으로 오존 농도가 상승하는 것으로 나타났으며, 지표보다는 상층에서, 저위도 지역보다는 고위도 지역에서 오존농도가 높게 나타났다.

3.3 경계조건이 상층 오존농도에 미치는 효과

그림 5는 위성자료와 CMAQ 모의 결과로서, 서울 지역의 오존 농도에 대한 연직분포를 시계열로 나타낸 것이다. CLBC-CMAQ 실험의 경우는 위성에서 관측된 상층의 고농도 오존을 모의하지 못하는 것으로 나타났다. 특히 5월 경우, 위성자료는 200 hPa 이상의 고도에서 120 ppb 이상의 고농도가 나타나는 반면 CLBC-CMAQ 실험의 경우에는 80 ppb 수준의 농도를 나타내었다. CLBC-GEOS 실험의 경우, 200 hPa 이상의 고도에서의 고농도를 CLBC-CMAQ 실험에 비해 비교적 잘 모의하였으나 위성 관측에 비해서는 과소 모의하는 것으로 나타났다. 8월 경우도 5월 경우와 마찬가지로 CLBC-CMAQ 실험보다 CLBC-GEOS 실험이 향상된 모의 결과를 나타내었다. 특히 8월 14일과 28일 기간에 위성 자료에서 관측된 대기 상층의 고농도 오존을 CLBC-GEOS 실험에서도 유사하게 모의하였다. 그림 6은 TES 관측 자료와 CMAQ 모의 결과에 대한 선형회귀 분석 결과를 나타낸 것으로, 2008년 5월과 8월 사례기간 동안

CLBC-GEOS 실험과 관측 자료와의 상관도(R^2)는 각각 0.64와 0.41로 CLBC-CMAQ 실험의 상관계수인 0.42와 0.33보다 높은 수준을 보였다.

그림 7에 일본의 Sapporo, Tateno, 그리고 Naha 측정소의 오존 존재와 CMAQ를 통해 모의된 오존 농도를 나타내었다. 오존 존재에서 관측된 상층 오존 농도는 전반적으로 약 100 ppb를 초과하였다. 특히, Sapporo 지역의 경우, 상층 오존 농도는 약 140 ppb를 초과하였으며 5월의 Tateno 지역의 오존 농도는 약 140 ppb를 초과하였다. 그러나 CLBC-CMAQ 실험에서 모의된 상층 오존 농도는 약 80 ppb 수준으로 상층의 고농도 오존을 모의하지 못하였으나, CLBC-GEOS 실험은 상층의 오존 농도가 증가하여 존재에서 관측된 상층의 고농도 오존을 유사하게 모의하는 것으로 나타났다. 그러나 지표 근처에서의 오존 농도는 두 실험 모두가 약 40~60 ppb 수준으로 두 실험 간의 차이는 크지 않았다. CLBC-GEOS 실험이 CLBC-CMAQ 실험에 비해 오존 존재에서 관측된 연직 분포를 유사하게 모의하는 것으로 나타났다.

표 4에 관측과 두 실험의 통계적 분석 지표를 나타내었다. CLBC-GEOS 실험이 CLBC-CMAQ 실험보다 전반적으로 통계적 지표가 개선되는 것으로 나타났다. 평균 오존 농도는 45~55 ppb 수준에서 46~72 ppb 수준으로 증가하였으며, 일치도 지수(IOA)는 0.3~0.6 수준에서 0.6~0.9 수준으로 개선되었으며, 또한 편차(BIAS)도 -0.8~-0.1 수준에서 -0.5~0.2 수준으로 개선되었다.

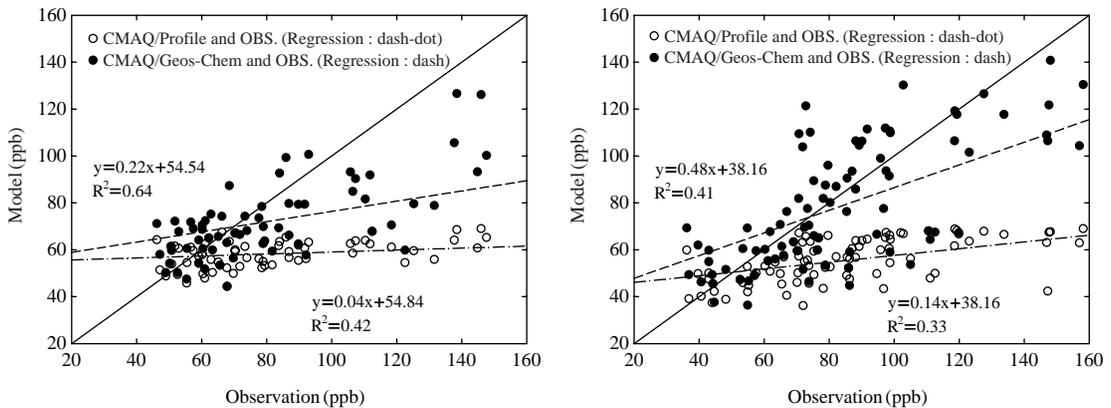


Fig. 6. Regressions of O₃ concentrations between satellite and two CMAQ simulations (CLBC-CMAQ and CLBC-GEOS) of Seoul in May (left) and August (right) 2008.

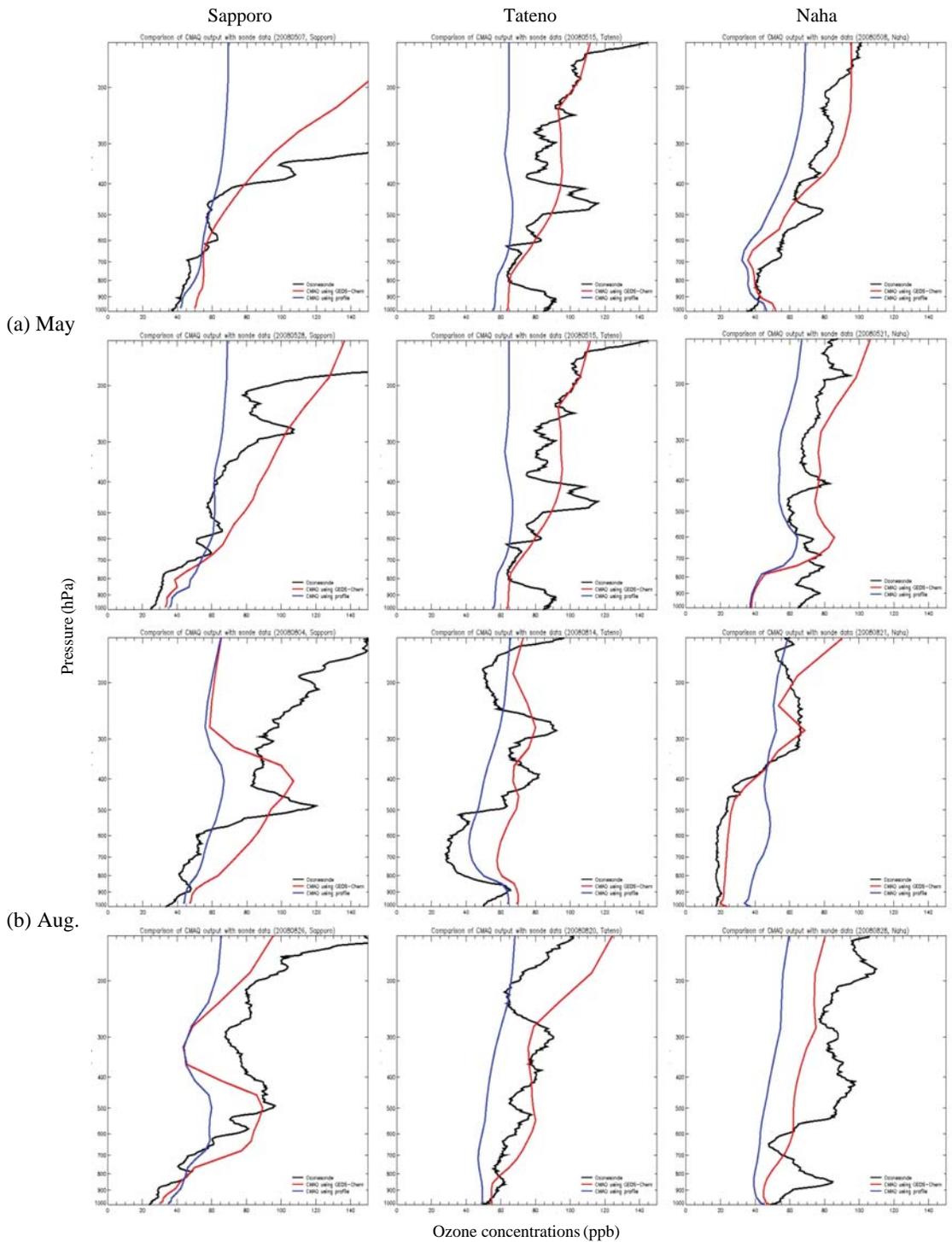


Fig. 7. Comparison of the ozone vertical profiles for ozonesonde data (black), CLBC-CMAQ (blue), and CLBC-GEOS (red) at Sapporo (first column), Tateno (second column), and Naha (third column) in (a) May and (b) August 2008.

Table 4. Statistics of observational and simulated O₃ concentrations in May and August 2008.

Station	Month	OBS		CLBC-CMAQ					CLBC-GEOS				
		AVG	STD	AVG	STD	COR	IOA	BIAS	AVG	STD	COR	IOA	BIAS
Sapporo	May	93.4	116.0	54.4	10.7	0.6	0.3	-0.8	71.2	32.5	0.8	0.6	-0.5
	August	65.9	32.3	52.2	9.2	0.8	0.6	-0.3	64.3	21.4	0.6	0.7	0.0
Tateno	May	82.0	20.0	53.0	13.1	0.4	0.5	-0.6	69.5	20.7	0.5	0.7	-0.3
	August	64.4	21.2	54.6	8.0	0.6	0.5	-0.2	71.9	13.8	0.7	0.7	0.2
Naha	May	64.0	16.0	49.3	11.3	0.7	0.6	-0.3	62.1	21.6	0.7	0.8	0.0
	August	51.0	28.1	45.0	6.3	0.6	0.5	-0.1	46.3	19.8	0.9	0.9	-0.1

*OBS: Observation of ozonesonde, CLBC-CMAQ: simulation using CLBC of CMAQ profile, CLBC-GEOS: simulation using CLBC of GEOS-Chem, AVG: Arithmetic average, STD: Standard Deviation, COR: Correlation, IOA: Index of Agreement (0=no agreement, 1=exact agreement), BIAS: Mean Normalized Bias

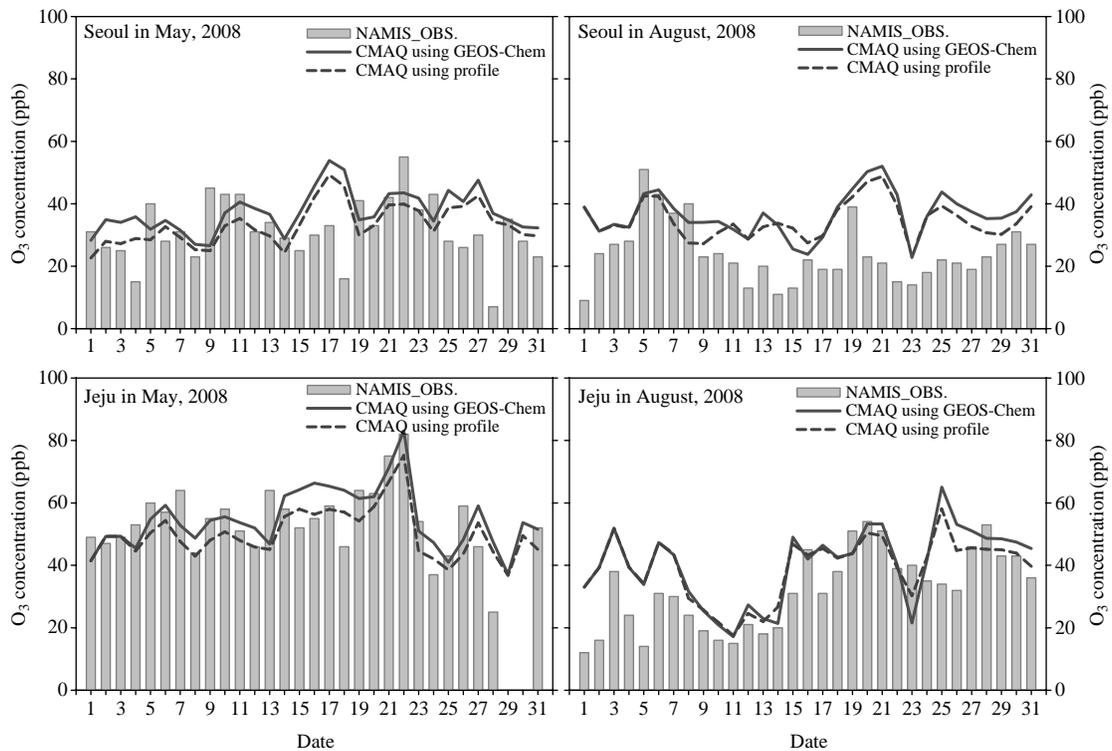


Fig. 8. Daily averaged surface ozone concentrations for two CMAQ simulations (CLBC-CMAQ (dash) and CMAQ-GEOS (line)) and NAMIS data (grey) at Seoul (upper) and Jeju (lower) in May (left) and August (right) 2008.

3. 4 경계조건이 지표 오존농도에 미치는 효과

그림 8은 서울과 제주도지역의 2008년 5월과 8월의 기간에 대해 지표 일평균 오존 농도를 시계열로 나타낸 것이다. 전반적으로 CMAQ 모의 결과가 관측에 비해 다소 과대 모의하는 경향을 보이지만 관측

에서 나타나는 일변화는 잘 모의하고 있음을 알 수 있다. 대기오염물질 배출이 많은 도심지역(서울)보다는 배경지역인 제주도가 관측과 좋은 상관성을 보이는 것으로 나타났다.

표 5는 사례기간 동안의 모델 결과와 관측 결과의

Table 5. Statistics of observational and simulated O₃ concentrations for May and August 2008.

Station	Month	OBS		CLBC-CMAQ					CLBC-GEOS				
		AVG	STD	AVG	STD	COR	IOA	BIAS	AVG	STD	COR	IOA	BIAS
Seoul	May	30.2	12.3	30.9	6.7	0.4	0.6	0.2	32.4	6.4	0.4	0.7	0.1
	August	24.5	9.4	34.7	6.0	0.5	0.6	0.3	36.6	7.0	0.5	0.6	0.4
Jeju	May	50.5	17.2	50.2	8.2	0.6	0.6	0.0	54.8	9.7	0.6	0.7	0.1
	August	32.3	12.6	39.1	10.0	0.7	0.7	0.2	40.2	11.9	0.7	0.7	0.3

통계적 분석을 나타낸 것이다. 일치도 지수(IOA)는 두 실험 모두 0.6~0.7 수준이며, 편의(BIAS)도 비교적 낮은 수준으로 두 모델실험 결과가 관측과 비교하여 비교적 신뢰할 수준임을 알 수 있었다. 하지만 CLBC-GEOS 실험은 시계열에서 보인 바와 같이 평균농도가 CLBC-CMAQ 실험보다 약 1~5 ppb 증가하였다. 이는 앞서 3.2절에서 언급한 바와 같이 CLBC-GEOS을 이용한 경우 전반적인 상층 오존농도의 증가뿐만 아니라 지표 오존농도도 증가시키는 것으로 나타났다.

4. 결 론

CMAQ의 화학적 측면 경계조건이 대류권 오존 모의에 미치는 효과를 알아보기로 두 가지를 실험을 수행하였다. 기존 연구에서 주로 사용되어 온 CMAQ 내에 미리 정의된 프로파일을 경계조건으로 처방한 실험(CLBC-CMAQ)과 전구규모 대기화학모델(GEOS-Chem) 결과를 경계조건으로 처방한 실험을 수행하였다. 이를 위해 본 연구에서는, 전구규모 대기화학모델(GEOS-Chem)의 결과를 CMAQ의 화학적 측면 경계조건으로 처방할 수 있도록 할 수 있는 Linking tool을 개발하였으며, 두 실험의 결과들을 오존 관측 자료들과 비교·분석하였다.

경계조건을 달리한 두 실험은 지표에서 오존 농도가 약 35~40 ppb 정도로 비슷한 수준을 보였으나 상층으로 갈수록 그 차이가 커지는 것으로 분석되었다. CLBC-GEOS 실험에서의 평균 오존 농도가 CLBC-CMAQ 실험보다 지표에서 4 ppb, 대류권 중층(약 5 km)에서 12 ppb, 그리고 대류권 상층(약 10 km)에서는 약 30 ppb가 증가하는 것으로 나타났다. 특히 모델의 top에서 오존 농도는 CMAQ 내 정의된 프로파

일을 이용한 실험(CLBC-CMAQ)의 경우에는 약 67 ppb로 나타난 반면, GEOS-Chem 프로파일을 이용한 실험(CLBC-GEOS)의 경우에는 약 113 ppb 수준으로 두 실험 간 약 46 ppb의 차이를 보였다. 또한 오존존데 및 위성자료와의 비교 분석을 수행한 결과, 전체적으로 CLBC-GEOS의 결과가 관측과 유사한 연직분포를 보였다. CLBC-CMAQ의 경우, 상층에서의 고농도 오존을 모의하지 못하는 단점이 CLBC-GEOS의 경우에는 크게 개선되는 것으로 나타났다. 오존존데자료와의 일치도 지수(IOA)는 0.3~0.6 수준에서 0.6~0.9 수준으로 개선되는 것으로 분석되었다. 위성자료의 경우에도 상층에서 관측된 오존 농도 모의에 대한 개선이 있었으며, 회귀분석을 통한 상관 계수(R²)가 0.33~0.42에서 0.41~0.64로 유의수준이 높아지는 것으로 나타났다. 서울과 제주도지역에 대한 지상관측자료와 비교 분석 결과, 전반적으로 모델 결과가 약 2~12 ppb 정도 과대 모의하는 경향을 보이지만 관측에서 나타나는 일변화를 모델이 잘 반영하고 있음을 알 수 있었다. 또한 통계분석 결과 두 모델실험 결과가 관측과 비교하여 비교적 신뢰할 수준임을 알 수 있었으며, CLBC-GEOS의 경우 CLBC-CMAQ보다 평균 오존농도가 약 1~5 ppb 증가하는 것으로 분석되었다.

CLBC-GEOS 실험은 CLBC-CMAQ 실험보다 모델 영역 내 대류권 오존 농도를 전반적으로 증가시켰으며, 하층보다는 상층의 농도를 크게 증가시켰다. 또한 서쪽과 북쪽의 경계에서의 농도 증가가 뚜렷하게 나타났다. 이는 관측과의 비교에서도 CLBC-CMAQ 실험이 보다 관측에 가까운 모의 성능을 보였다. 따라서 위·경도, 고도 및 시간에 따라 변화하는 경계조건을 적절히 처방하는 것이 동아시아 대류권 오존 모의에 있어 중요한 부분인 것으로 평가되었다.

참 고 문 헌

- Bey, I., D.J. Jacob, R.M. Yantosca, J.A. Logan, B.D. Field, A.M. Fiore, Q. Li, H.Y. Liu, L.J. Mickley, and M.G. Schultz (2001) Global modeling of tropospheric chemistry with assimilated meteorology: Model description and evaluation, *J. Geophys. Res.*, 106(D19), 23,073-23,095.
- Byun, D.W. and J.K.S. Ching (1999) Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, United States Environmental Protection Agency Rep. EPA-600/R-99/030, 727.
- Byun, D.W. and K.L. Schere (2006) Review of the governing equations, computational algorithms, and other components of the models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system, *Appl. Mech. Rev.*, 59, 51-77.
- Chung, S.H. and J.H. Seinfeld (2002) Global distribution and climate forcing of carbonaceous aerosols, *J. Geophys. Res.*, 107(D19), 4407, doi:10.1029/2001JD001397.
- Eder, B., D. Kang, R. Mathur, S. Yu, and K. Schere (2006) An operational evaluation of the Eta-CMAQ air quality forecast model, *Atmos. Environ.*, 40, 4894-4905.
- Gery, M.W., G.Z. Whitten, J.P. Killus, and M.C. Dodge (1989) A photochemical kinetic mechanism for urban and regional scale computer modeling, *J. Geophys. Res.*, 94, 12,925-12,956.
- Grell, G.A., J. Dudhia, and D.R. Stauffer (1994) A Description of the Fifth-Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5), NCAR Technical Note. NCAR/TN-398+STR, National center for atmospheric research, 122.
- Henze, D.K. and J.H. Seinfeld (2006) Global secondary organic aerosol from isoprene oxidation, *Geophys. Res. Lett.*, 33, L09812, doi:10.1029/2006GL025976.
- Hogrefe, C., J. Biswas, B. Lynn, K. Civerolo, J.Y. Ku, J. Rosenthal, C. Rosenzweig, R. Goldberg, and P.L. Kinney (2004) Simulating regional-scale ozone climatology over the eastern United States: model evaluation results, *Atmos. Environ.*, 38, 2627-2638.
- Hogrefe, C., P.S. Porter, E. Gego, A. Gilliland, R. Gilliam, J. Swall, J. Irwin, and S.T. Rao (2006) Temporal features in observed and simulated meteorology and air quality over the eastern United States, *Atmos. Environ.*, 40, 5041-5055.
- Hong, S.-Y. and H.-L. Pan (1996) Nonlocal boundary layer vertical diffusion in a Medium-Range Forecast model, *Mon. Wea. Rev.*, 124, 2322-2339.
- In, H.J., D.W. Byun, R.J. Park, N.K. Moon, S. Kim, and S. Zhong (2007) Impact of trans-boundary transport of carbonaceous aerosols on the regional air quality in the United States: A case study of the South American wildland fire of May 1998, *J. Geophys. Res.*, 112, D07201, doi:10.1029/2006JD007544.
- Jiménez, P., R. Parra, and J.M. Baldasano (2007) Influence of initial and boundary conditions for ozone modeling in very complex terrains: a case study in the north-eastern Iberian Peninsula, *Environmental Modelling & Software*, 22, 1294-1306.
- Jonson, J.E., J.K. Sundet, and L. Tarrasón (2001) Model calculations of present and future levels of ozone and ozone precursors with a global and a regional model, *Atmos. Environ.*, 35, 525-537.
- Kain, J.S. and J.M. Fritsch (1993) Convective parameterization for mesoscale models: The Kain-Fritsch scheme. The representation of cumulus convection in numerical models, Edited by Emanuel, K.A. and D.J. Raymond, *Amer. Meteor. Soc.*, Boston, U.S.A., 165-170.
- Liu, T.H., F.T. Jeng, H.C. Huang, E. Berger, and J.S. Chang (2001) Influences of initial condition and boundary conditions on regional and urban scale Eulerian air quality transport model simulations, *Chemosphere-Global Change Sci.*, 3, 175-183.
- Mlawer, E.J., S.J. Taubman, P.D. Brown, M.J. Iacono, and S.A. Clough (1997) Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave, *J. Geophys. Res.*, 102, 16,663-16,682.
- Olivier, J.G.J., J.J.M. Berdowski, J.A.H.W. Peters, J. Bakker, A.J.H. Visschedijk, and J.P.J. Bloos (2001) Applications of EDGAR. Including a description of EDGAR 3.0: reference database with trend data for 1970~1995. RIVM, Bilthoven. RIVM report no. 773301 001/NOP report no. 410200 051.
- Park, R.J., D.J. Jacob, B.D. Field, R.M. Yantosca, and M. Chin (2004) Natural and transboundary pollution influences on sulfate nitrate ammonium aerosols in the United States: Implications for policy, *J. Geophys. Res.*, 109, D15204.
- Reisner, J., R.T. Bruintjes, and R.M. Rasmussen (1993) Preliminary comparisons between MM5 NCAR/Penn State model generated icing forecasts and observations. Preprints, the 5th International Conference

- on Aviation Weather Systems, Vienna, VA, August 2-6, 5 pp.
- Reisner, J., R. Rasmussen, and R. Bruintjes (1998) Explicit forecasting of supercooled liquid water in winter storms using the MM5 mesoscale model, Q.J.R. Meteor. Soc., 124, 1071-1107.
- Samaali, M., D.M. Michael, V.S. Bouchet, R. Pavlovic, S. Cousineau, and M. Sassi (2009) On the influence of chemical initial and boundary conditions on annual regional air quality model simulations for North America, Atmos. Environ., 43, 4873-4885.
- Seinfeld, J.H. and S.N. Pandis (1997) Atmospheric Chemistry and Physics. Wiley, New York, 1326.
- Song, C.K., D.W. Byun, R.B. Pierce, J.A. Alsaadi, T.K. Schack, and F. Vukovich (2008) Downscale linkage of global model output for regional chemical transport modeling: Method and general performance, J. Geophys. Res., 113, D08308, doi:10.1029/2007JD008951.
- Streets, D.G., T.C. Bond, G.R. Carmichael, S.D. Fernandes, Q. Fu, D. He, Z. Klimont, S.M. Nelson, N.Y. Tsai, M.Q. Wang, J.-H. Woo, and K.F. Yarber (2003) An inventory of gaseous and primary aerosol emissions in Asia in the year 2000, J. Geophys. Res., 108(D21), 8809, doi:10.1029/2002JD003093.