

## 공기과 역궤적 분석을 위한 FLEXPART Lagrangian Particle Dispersion 모델의 최적화 및 자동화

김주일<sup>1),3)</sup> · 박선영<sup>4)</sup> · 박미경<sup>1),2)</sup> · 리선란<sup>1)</sup> · 김재연<sup>1),2)</sup> · 조춘옥<sup>4)</sup> · 김지윤<sup>1)</sup> · 김경렬<sup>1),2),\*</sup>

<sup>1)</sup>서울대학교 지구환경과학부

<sup>2)</sup>서울대학교 해양연구소

<sup>3)</sup>미국 캘리포니아 대학교 스크립스 해양연구소

<sup>4)</sup>경북대학교 생태환경대학 해양학과

(접수:2012년 12월 11일, 게재확정일:2012년 12월 30일)

## Parameter Optimization and Automation of the FLEXPART Lagrangian Particle Dispersion Model for Atmospheric Back-trajectory Analysis

Jooil Kim<sup>1),3)</sup>, Sunyoung Park<sup>4)</sup>, Mi-Kyung Park<sup>1),2)</sup>, Shanlan Li<sup>1)</sup>, Jae-Yeon Kim<sup>1),2)</sup>,  
Chun Ok Jo<sup>1)</sup>, Ji-Yoon Kim<sup>1)</sup>, and Kyung-Ryul Kim<sup>1),2),\*</sup>

<sup>1)</sup>School of Earth and Environmental Sciences, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea

<sup>2)</sup>Research Institute of Oceanography, Seoul National University, Seoul, Seoul 151-742, Korea

<sup>3)</sup>Scripps Institution of Oceanography, UC San Diego, U.S.A.

<sup>4)</sup>Department of Oceanography, Kyungpook National University, Sangju 742-711, Korea

(Received: 11 December 2012, Accepted: 30 December 2012)

**Abstract** Atmospheric transport pathway of an air mass is an important constraint controlling the chemical properties of the air mass observed at a designated location. Such information could be utilized for understanding observed temporal variabilities in atmospheric concentrations of long-lived chemical compounds, of which sinks and/or sources are related particularly with natural and/or anthropogenic processes in the surface, and as well as for performing inversions to constrain the fluxes of such compounds. The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART provides a useful tool for estimating detailed particle dispersion during atmospheric transport, a significant improvement over traditional “single-line” trajectory models that have been widely used. However, those without a modeling background seeking to create simple back-trajectory maps may find it challenging to optimize FLEXPART for their needs. In this study, we explain how to set up, operate, and optimize FLEXPART for back-trajectory analysis, and also provide automatization programs based on the open-source R language. Discussions include setting up an “AVAILABLE” file (directory of input meteorological fields stored on the computer), creating C-shell scripts for initiating FLEXPART runs and storing the output in directories designated by date, as well as processing the FLEXPART output to create figures for a back-trajectory “footprint” (potential emission sensitivity within the boundary layer). Step by step instructions are explained for an example case of calculating back trajectories derived for Anmyeon-do, Korea for January 2011. One application is also demonstrated in interpreting observed variabilities in atmospheric CO<sub>2</sub> concentration at Anmyeon-do during this period.

\*Corresponding Author: Kyung-Ryul Kim, School of Earth and Environmental Sciences, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea.

Phone : +82-2-880-6741, Fax: +82-2-885-7164

E-mail : krkim@snu.ac.kr

Back-trajectory modeling information introduced in this study should facilitate the creation and automation of most common back-trajectory calculation needs in atmospheric research.

**Key words:** FLEXPART, air mass transport, back-trajectory analysis, East Asia, Anmyeon-do, lagrangian particle dispersion model

## 1. 서 론

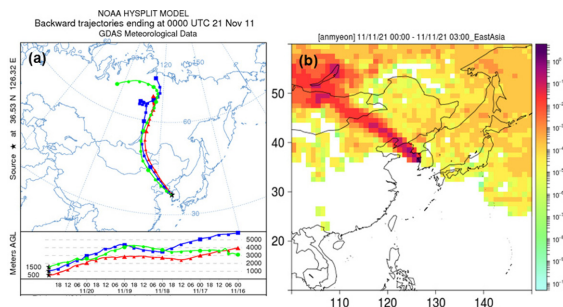
특정 지점에 도달한 공기과 궤적 추정 (air-mass trajectory) 모델은 해당지점에서 관측되는 다양한 현상을 설명하는 데 중요하게 기여할 수 있다. 예를 들어, 안면도에 위치한 기상청 기후변화감시센터는 세계기상기구 지역관측소 (GAW, Global Atmosphere Watch) 의 하나로 대기 중 이산화탄소 ( $\text{CO}_2$ ) 농도 변화를 연속적으로 측정하고 있다. 이때 관측되는 농도의 변동 원인을 이해하는 데 공기과 역계적 (air-mass back-trajectory) 분석은 유용한 도구로 활용될 수 있다. 예컨대 안면도에서 관측된 고농도의 이산화탄소는 많은 경우 중국의 산업지역에서 기원한 공기과가 직접 유입된 것임을 공기과 역계적 분석을 통해 알 수 있다. 역계적 모델과는 달리 궤적 추정 (air-mass forward-trajectory)은 특정 지점에서 발생한 오염 물질이 시간에 따라 움직이는 이동 경로를 예측하는 데 쓰인다.

기존 연구에서 많이 사용된 도구는 단일 궤적추정 (single trajectory) 모델로써, HYbrid Single Particle Lagrangian Integrated Trajectory (HYSPLIT) 모델이 단일 궤적 추정법을 이용한 대표 모델로 들 수 있다 (Fig. 1(a)) (박상진 등, 2008). 단일궤적추정 모델의 장점은 모델 운영이 비교적 쉽다는 점이고, HYSPLIT의 경우는 미 국립 해양 대기청 (NOAA)이 제공하는 웹페이지 (<http://ready.arl.noaa.gov/HYSPLIT.php>)를 통해 곧바로 궤적을 얻을 수도 있다. 그러나 단일궤적추정

모델은 실제적인 공기과 이동을 표현하기에는 부족할 수 있으며, 이는 특히 대기 경계층 (boundary layer) 내의 난류 (turbulence)를 표현함에 있어서 큰 오차를 유발할 수 있다 (Stohl *et al.*, 1998).

이후 개발된 입자 확산 (particle dispersion) 모델은 기존 단일 궤적추정 모델과 달리 공기과의 확산을 자세한 입자 분포로 표현하며, 이는 공기과 궤적의 불확실성 감소에 크게 기여한다. 대표적인 입자 확산 모델인 STILT 모델 (Stochastic Time-Inverted Lagrangian Transport model; <http://www.stilt-model.org>), NAME 모델 (Numerical Atmospheric-dispersion Modelling Environment; <http://www.metoffice.gov.uk/research/modelling-systems/dispersion-model>)과 함께, 최근에는 노르웨이 대기연구소 (NILU)에서 개발된 오픈 소스 모델인 FLEXPART 모델이 (<http://transport.nilu.no/flexpart>, Stohl *et al.*, 1998; Stohl *et al.*, 2005) 활발하게 사용되고 있다 (Fig. 1(b)) (Hirdman *et al.*, 2009; Cooper *et al.*, 2010; Kim *et al.*, 2010; Li *et al.*, 2011; Miller *et al.*, 2012). 그러나 FLEXPART 모델의 경우 이것이 오픈 소스 프로그램이 공개되어 있다는 이유로 인해 실제 모델을 사용함에 있어 필요한 문서화 작업이 미흡하여, 모델이 생성한 사용자들이 운영하기에는 어려운 면이 있으며, 특히 모델 결과 처리와 모델 운영의 자동화 부분에서는 정보가 매우 부족한 실정이다.

따라서 본 기술 논문에서는 FLEXPART 모델의 설정과 운영에 대해 설명하고, FLEXPART 운영의 자동화를 위한 R 프로그램 언어 (오픈 소스로 제공되는 프로그래밍 언어, <http://www.r-project.org>)를 활용하는 방안을 설명하고자 한다. R은 직관적인 통계 분석을 위해 처음 개발된 언어이지만, 최근에는 바이오 정보 해석이나 지리 정보 분석 등 다양한 분야에서 활용되고 있으며, R에 기능을 더하는 다양한 패키지들이 전 세계 과학자들에 의해 제공되고 있다. 특히 본 논문에서는 FLEXPART 기상장 입력 자료의 선택 및 획득 방법, 역계적 모의를 위해 통상적으로 사용할 수 있는 구체적인 설정조건 (파라미터)을 제시하였다. 이를 통해 FLEXPART에 관심 있는 연구자들이 보다 쉽게 역계적 분석을 이용할 수 있을 것으로 생각한다. 본 논문의 내용은 FLEXPART 사용자서 (<http://zardoz.nilu.no/~flexpart/flexpart82.pdf>)를 보조하면서 FLEXPART를 이용한 공기과 역계적 계산을 도울 수 있을 것이며, 또한 Bayesian 방식의 배출량 산정 (Stohl *et al.*, 2009;



**Fig. 1.** Comparison between single line trajectory (HYSPLIT) (a) and particle dispersion (FLEXPART) model outputs for Nov. 21<sup>th</sup> 00:00 (UTC) in 2011 at Anmyeon-do in Korea (b).

Saito *et al.*, 2010; Stohl *et al.*, 2010)이나 오염물질의 장기 이동 경로 추정 (Cooper *et al.*, 2010)과 같은 다양한 연구에 응용될 것이다.

## 2. FLEXPART 운영기반

### 2.1. 기반 시스템과 구성

FLEXPART 운영을 위해서는 먼저 FLEXPART를 위한 리눅스 기반 컴퓨터에 소스 코드가 컴파일 되어야 하며, 이는 입력 기상장 처리에서 필요한 GRIB, JASPER 두 개의 Application Programming Interface (API) 라이브러리 설치를 필요로 한다 (부록 1). 컴퓨터 사양은 64 bit 기반의 multi-core CPU 및 리눅스 OS, 8 G 이상의 RAM, 필요에 따라 다량의 기상장 입력 자료 (meteorological input data fields)를 저장할 수 있는 1 TB 이상의 하드 용량을 권장한다. 컴파일러는 오픈 소스인 gfortran의 사용이 가능하며, Ubuntu 계열의 리눅스에서는 API 라이브러리가 미리 컴파일 된 형태로 쉽게 설치가 가능하다. 따라서 FLEXPART를 처음

접하는 사용자도 비교적 쉽게 운영 기반 시스템을 구축할 수 있다.

Ubuntu 10.04 LTS 버전 하에서 gfortran 및 GRIB, JASPER 라이브러리를 설치하고, 이에 맞추어 makefile을 설정하여 FLEXPART를 컴파일 하는 자세한 방법에 대해서는 부록 3에서 설명하도록 하였다.

FLEXPART 운영 기반이 확립되면, 구체적으로 FLEXPART 모델 연동 시기를 정한 후 이에 맞추어 기상장 입력 자료 및 운영 조건 (COMMAND, RELEASES, AGECLASS 등) 설정이 필요하다. 전체 과정은 Fig. 2의 개요도에 설명되어 있으며, 각 요소에 대한 구체적인 설명은 이어지는 2.2.절부터 3.3.절에 있다.

### 2.2. 기상장 입력 자료

FLEXPART를 운영하기 위해서는 반드시 기상장 입력 자료가 필요하며, 현재 FLEXPART 사용자들은 유럽의 ECMWF (European Center for Medium-range Weather Forecasts) 모델의 기상장 또는 미국 NCEP (National Centers for Environmental Prediction)의 Global Forecast System (GFS) 모델의 기상장을 주로 사용하고 있다 (Table 1). 유럽에서는 ECMWF 모델의 기상장이 대부분 연구 기관에 저렴하게 제공되기 때문에 FLEXPART 모델 또한 ECMWF 기상장 위주로 개발이 되었지만, FLEXPART에 사용될 수 있는 1°×1° 이상, 3시간 단위 현업 (operational) 모델 기상장은 비유럽권에서는 얻기 힘든 실정이다. 최근 비유럽권 FLEXPART 사용자의 증가로 미국 NCEP NOMADS 웹사이트에서는 무료 다운로드가 가능한 GFS 기상장의 사용을 지원하고 있다 ([http://nomads.ncdc.noaa.gov/data.php#hires\\_weather\\_datasets](http://nomads.ncdc.noaa.gov/data.php#hires_weather_datasets)). 따라서 본 논문에서는 한국에서 비교적 손쉽게 얻을 수 있는 GFS 기상장을 이용하는 방법을 설명하고자 한다.

GFS 기상장은 두 종류로 제공이 되는데, 2004년 3월부터 최근까지의 GFS 현업 모델 예보 중 0시간, 3시간, 6시간 예보 기상장만이 저장된 analysis (ANL)와, GFS 현업 모델의 ~180시간 기상장 예보 전체가 저장된 forecast (FCT)이다. ANL과 FCT는 근본적으로는

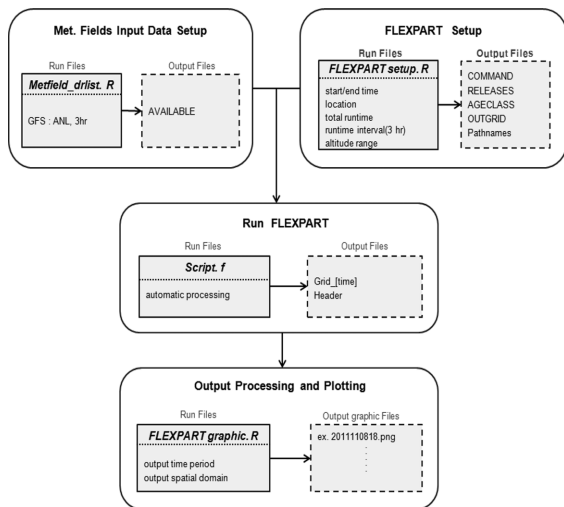


Fig. 2. Flowchart of back-trajectory analysis in FLEXPART.

Table 1. Summary of ECMWF and GFS meteorological input data.

Meteorological fields	Download link	Specifications	Notes
European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF) operational atmospheric model	<a href="http://www.ecmwf.int/products/data/archive/descriptions/od/oper/index.html">http://www.ecmwf.int/products/data/archive/descriptions/od/oper/index.html</a>	1°×1° (−179°-180°E, −90S°-90°N) 90 vertical levels 3 hr interval (0 hr, 3 hr forecast) based on 6-hour model runs	Difficult to obtain outside Europe
Global Forecast System (GFS) operational model	<a href="http://nomads.ncdc.noaa.gov/data.php#hires_weather_datasets">http://nomads.ncdc.noaa.gov/data.php#hires_weather_datasets</a>	1°×1° (0°-359°E, 90°-S90°N) 26 vertical levels 3 hr interval (0 hr, 3 hr forecast) based on 6-hourly model runs	Long-term archive in GFS-ANL, recent archive in GFS

동일한 자료이며, ANL의 경우 데이터 전체가 바로 접속 가능한 반면, FCT의 경우 서버 용량 관리를 위해 최근 2년의 예보만 홈페이지에서 바로 다운로드가 허용된다. 이전 FCT의 경우, NCEP의 FTP4u 서비스를 통해서 보조 저장장치에 저장된 데이터를 요청하면 한시적으로 다운받을 수 있다. 이론적으로 FLEXPART 운영은 ANL 데이터만으로도 충분하지만, 단 NCEP의 데이터 서버 관리 중 일부 ANL 데이터가 소멸되거나 모델 운영 사정으로 기상장이 존재하지 않는 시기는 FCT 자료로 보완할 수 있다.

모든 기상장 자료를 확보한 후, 이 기상장들이 저장된 경로를 FLEXPART 모델에 지정해 줄 필요가 있다. FLEXPART의 운영시간에 대응하는 각 입력 기상장의 경로를 수록한 파일이 바로 AVAILABLE 파일이다. 물론 수작업으로 이 파일을 만들 수도 있지만,

편의를 높이고 오류의 가능성을 줄이기 위해, 지정된 경로에 저장된 기상장에 대해서 AVAILABLE 파일을 제작할 수 있는 R 코드를 제작하였고, 사용방법은 부록 4에 첨부한다.

### 3. FLEXPART 운용 체계

#### 3.1. 초기화 및 설정

FLEXPART 프로그램의 설치파일 및 R script의 저장 경로에 대한 자세한 설명은 부록 2에 제시하였다. FLEXPART의 실행 설정은 보통 *OPTIONS* 폴더 안에 있는 파일들 (COMMAND, RELEASES, AGECLASS, OUTGRID, pathnames)에서 이루어진다. 이 중 COMMAND 파일과 RELEASES 파일에서 가장 핵심적인 설정들을 진행하여야 한다. 두 파일 모두 정식으로 작성되

**Table 2.** List of input parameters and optimal values in file COMMAND (Stohl *et al.*, 2010).

Parameter Name	Type	Suggested Value	Notes
LDIRECT	1 OR -1	-1	1 for forward simulations, -1 for backward simulations
Begin date	YYYYMMDD HHMISS	At least 20 days before the start of earliest back-trajectory	
End date	YYYYMMDD HHMISS	At least after the start of the latest back-trajectory	
Data output	seconds	86400	
Time average	seconds	86400	
Sampling rate	seconds	900	
Particle splitting	seconds	9999999	No splitting of particles in general air mass trajectories
lsynctime	seconds	900	
CTL	number	-5.0	
IFINE	number	4	
IOUT	1, 2, 3, 4, OR 5	5	FLEXPART output type, residence time + plume.
IPOUT	0, 1, OR 2	0	
LSUBGRID	0 OR 1	1	
LCONVECTION	0 OR 1	1	
LAGESPECTRA	0 OR 1	1	
IPIN	0 OR 1	0	
IOFR	0 OR 1	1	
IFLUX	0 OR 1	0	
MDOMAINFILL	0, 1, OR 2	0	
IND_SOURCE	1 OR 2	1	FLEXPART output units, $s\ m^3\ kg^{-1}$
IND_RECEPTOR	1 OR 2	2	FLEXPART output units, $s\ m^3\ kg^{-1}$
MQUASILAG	0 OR 1	0	
NESTED_OUTPUT	0 OR 1	0	
LINIT_COND	0, 1, OR 2	0	

는 “reference” 형식이나 약식으로 작성된 “alternative” 형식으로 작성될 수 있는데, 두 형식에서 실제 포함 되는 설정 사안은 동일하므로 형식의 선택은 사용자의 편의를 따르도록 하며, 최종적으로는 *OPTIONS* 폴더 안에 반드시 “COMMAND”와 “RELEASES”로 명명 된 파일이 존재하여야 한다.

이와 같이 FLEXPART 모델을 돌리기 위한 setup 단계에서 사용하는 R 코드를 제작하였고, 사용방법은 부록 4에 첨부한다.

**COMMAND 파일:** COMMAND 파일에서는 FLEXPART 모델이 실행되는 전체적인 시간 구간을 설정하며, FLEXPART 모델이 수행되는 주기, 출력값 생성 주기 등을 함께 규정한다. COMMAND파일에는 계산하고자 하는 모든 역궤적의 계산 기간을 포괄하는 충분한 시간이 지정되어야 한다. 보편적으로 각 역궤적의 계산 기간을 20일로 설정하는 경우, COMMAND 파일의 설정조건의 권장값을 Table 2에 명시하였다.

**RELEASES 파일:** RELEASES 파일에서는 COMMAND 파일에서 지정된 시간 내에서 역궤적 계산의 시공간 지정을 명시하는데, 한 RELEASES 파일에는 88번 이하의 역궤적 계산 지정이 가능하다. 따라서, 한 번에 계산할 수 있는 역궤적의 수는 컴퓨터의 RAM에 따라 제한될 수도 있으므로, 계산하고자 하는 역궤적의 개수가 컴퓨터에서 한 번에 계산할 수 있는 역궤적 수보다 많을 경우, 기간을 적절하게 나누어 복수의 COMMAND, RELEASES 파일을 만들어 복수

의 FLEXPART 계산을 수행해야 한다.

RELEASES 파일에는 입자 종류의 개수와, 입자의 질량이라는 두 조건을 설정하는데, 각각 1 (한 종류의 입자를 사용 할 경우)과 24 (공기입자를 사용할 경우 : *SPECIES* 폴더 설명 참조)의 값을 권장한다. 이외에도 각 역궤적에 대한 12가지 지정값들이 반복적으로 이어지는데, 보편적으로 40,000개의 대기 입자가 직육면체로 정의된 공간 (역궤적 시작점)에서 3시간 동안 순차적으로 배출될 수 있도록 설정한다. 각 설정값에 대해서는 Table 3에서 설명하였다.

**AGECLASS 파일:** AGECLASS 파일은 입자가 release된 이후 지정된 시간에 따른 위치 추적을 가능하게 하며, AGECLASS 파일의 마지막 설정 시간 후에는 입자가 소멸된다. 단, AGECLASS의 설정만큼 FLEXPART 출력값 matrix의 규모가 커지게 되므로, 보통은 입자 소멸시기만을 규정하는 간단한 AGECLASS 설정을 사용한다. 각 역궤적의 계산 기간도 AGECLASS 파일에서 설정되는데, 즉 마지막 AGECLASS 설정을 20일로 할 경우 20일 이후 입자가 소멸되면서 역궤적 계산이 실질적으로 중단되는 것이다. AGECLASS 파일에는 20일 (1,728,000초) 설정을 권장한다.

**SPECIES 폴더:** *OPTIONS* 폴더 내의 *SPECIES* 폴더에는 FLEXPART trajectory에 들어가는 각 입자가 가지는 성질이 규정된 다양한 설정파일들이 있다 (*SPECIES\_001-025*). 설정 가능한 입자 성질에는 방사능, 습식침적, 건식침적, OH 반응성 등이 있다. 역

**Table 3.** List of input parameters and optimal values in file RELEASE (Stohl *et al.*, 2010).

Parameter Name	Type	Recommended Values	Notes
RELEASE START	YYYYMMDD HHMMSS	0 hr, 3 hr, 6 hr, 9 hr, 12 hr, 15 hr, 18 hr, 21 hr	3-hourly release to match time specifications in input meteorological fields.
RELEASE END	YYYYMMDD HHMMSS	3 hr, 6 hr, 9 hr, 12 hr, 15 hr, 18 hr, 21 hr, 0 hr (+1day)	3-hourly release to match time specifications in input meteorological fields.
LON, lower left	up to 4 decimal places (ex. 126.32)	Exact coordinates	Decimal degrees
LAT, lower left	up to 4 decimal places (ex. 36.53)	Exact coordinates	Decimal degrees
LON, upper right	up to 4 decimal places (ex. 126.32)	Exact coordinates	Decimal degrees
LAT, upper right	up to 4 decimal places (ex. 36.53)	Exact coordinates	Decimal degrees
Z-level, type	1 OR 2	2	Above sea level, meters
Z-level, lower limit	up to 4 decimal places	Exact height - 10 m	
Z-level, upper limit	up to 4 decimal places	Exact height + 10 m	
total particle num	integers	40000	
Total mass	scientific notation	1.0000E00	Average air mass

계에서 사용되는 입자는 대기 중 화학 반응이 없고 대기 평균 분자량을 가진 평균 공기 입자로 설정되어 있으며, 이는 SPECIES\_24에 규정되어 있다.

**OUTGRID 파일:** OUTGRID 파일에서는 전체적인 FLEXPART 계산의 공간적인 분포를 정의한다. 보통 위경도 범위는 입력 기상장의 분포와 동일하게 설정하며, 고도의 경우 간단한 계산을 위해 100 m, 3,000 m, 50,000 m만을 설정한다. 이때, 지표면의 영향을 나타내는 “footprint”의 계산에는 첫 100 m로 표현되는 최저 고도만을 사용한다.

**pathnames 파일:** 마지막으로, pathnames 파일에서는 1) COMMAND, RELEASES 등의 실행 설정이 포함된 OPTIONS 폴더의 경로, 2) FLEXPART 실행 후 출력값이 저장될 경로, 3) 입력 기상장의 경로가 정의된 AVAILABLE 파일의 경로를 규정한다. 특히, 최근 버전의 FLEXPART 소스 코드에서는 pathnames에 대한 예제 파일을 포함하지 않기 때문에, 새로운 pathnames 파일 제작이 반드시 필요하다.

3.2. FLEXPART 실행

일반적으로 FLEXPART 프로그램은 적당하게 구성된 pathnames 파일을 FLEXPART 프로그램과 동일한 경로로 복사한 후 리눅스 시스템의 FLEXPART의 실행창에서 실행하면 된다. FLEXPART 실행의 성공적인 완료는 마지막 줄에 “CONGRATULATIONS YOU HAVE SUCCESSFULLY COMPLETED A FLEXPART RUN” 이라는 메시지로 확인할 수 있다.

본 연구에서 제시된 자동화 FLEXPART 실행과정은 3.3. 절에서 설명된 초기화 단계에서 만들어진 자동실행 파일 (.script 파일명의 csh script, FLEXPART\_setup.R을 실행하면 출력값 저장 폴더 내에서 “scripts” 폴더에 자동 생성)을 통하여 이루어진다. Ubuntu에서 이 .script 파일을 실행하는 가장 쉬운 방법은 직접 double-click한 후 나타나는 창에서 “Run in Terminal”을 클릭하는 것이다.

보통 한 번의 FLEXPART 계산이 실행되면 (예를 들면 ~88개의 역궤적을 계산하기 시작) 컴퓨터의 CPU core 1개를 100% 사용하게 된다. 따라서 multi-core CPU를 갖는 컴퓨터를 사용할 경우, core의 개수만큼 동시에 여러 FLEXPART 계산을 실행하는 것이 효율적이다.

3.3. FLEXPART 결과 처리

FLEXPART의 출력값은 5차원 행렬로써, 각 차원의 값은 RELEASES 번호, AGECLASS 설정수, 고도, 경도, 위도가 된다. AGECLASS를 1개의 값만 설정할 경우 실질적으로 1차원이 없어지며, 이에 따라 출력값 처리도 크게 수월해진다 (Fig. 3).

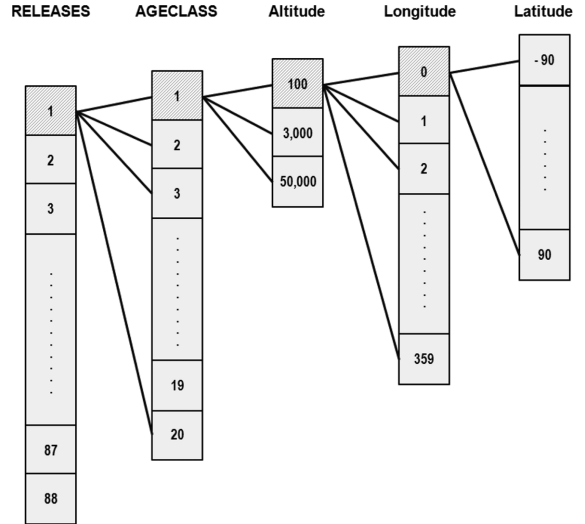
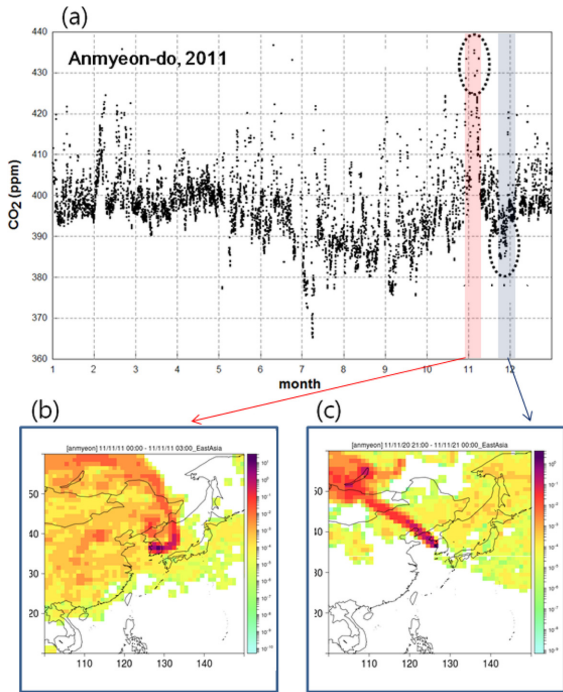


Fig. 3. Illustration of FLEXPART output format in 5-D matrix.

FLEXPART의 5차원 출력 행렬은 FLEXPART 실행 중 사용된 OPTIONS 폴더의 COMMAND, RELEASES, AGECLASS, OUTGRID 설정에 따라 결정되며, 이들 설정은 출력값과 함께 생성되는 “header” 파일에 명시되어 있다. 실제 출력되는 5차원 행렬은 “grid\_[time]” 형식의 파일들에 일정 시간 간격으로 나누어 저장되며, 이때 저장 시간 주기는 COMMAND 설정 중 “Data output”에 의해 결정된다. 또한 각 FLEXPART 파일의 행렬 값에는 보통 0이 많으므로, 공간 절약을 위해 sparse-matrix 형식의 압축 알고리즘이 적용되어 있다. 따라서 FLEXPART 출력값을 읽기 위해서는 “header” 및 각 “grid” 파일을 정확하게 읽어 들일 수 있어야 하며, 이를 위해서 “read\_header.f”와 “read\_grid.f”의 fortran 서브루틴이 제공되지만, 이를 활용한 실제 프로그램은 사용자가 직접 제작하여야 한다.

FLEXPART 출력값의 단위는 COMMAND 파일의 IND\_SOURCE, IND\_RECEPTOR 값에 의해 정의되며, 본 논문에서 설명된 통상적인 설정에서는 [s m<sup>3</sup> kg<sup>-1</sup>]의 단위로 출력된다. 여기서, 지표면의 영향만을 고려하는 footprint sensitivity를 계산할 경우, FLEXPART 출력값 중 대류권의 영향을 나타내는 하위 격자만을 감안하며, 이 하위 격자의 부피를 적용하여 출력값은 [s kg<sup>-1</sup>]의 단위로 전환된다.

FLEXPART 출력값의 처리를 돕기 위해, “header” 및 각 “grid” 파일을 읽어 들인 후 각 역궤적을 그림으로 그릴 수 있는 R코드를 제작하였고, 사용방법은 부록 4에 첨부한다.



**Fig. 4.** (a) Atmospheric CO<sub>2</sub> concentrations observed at Anmyeon-do GAW station (36°32', 125°19') in Nov. 2011. (b) and (c) back-trajectory analysis outcomes of FLEXPART corresponding to pollution events pointed by arrow (b) and clean period by arrow (c), respectively. They show that the air mass with high concentration of CO<sub>2</sub> pass through Korea and clean air mass with low CO<sub>2</sub> was originated from Siberia. The color bars in (b) and (c) denote footprint sensitivity, in  $\text{s kg}^{-1}$ .

#### 4. FLEXPART의 응용 사례

본 논문에서 소개된 방법에 따라 얻어진 역궤적 추정 결과는 해당 공기괴의 화학 성분 분포와 변화를 해석하는 데 다양하게 활용될 수 있다. 그 일례로 공기 중 체류시간이 상대적으로 긴 온실기체를 특정 지점에서 연속 관측할 때, 농도 분포가 보이는 시간 변동성은 해당 공기괴의 역궤적 경로와 기원지에 의해 어느 정도 설명이 가능하다.

Fig. 4(a)는 GAW에 보고된 2011년도 안면도 이산화탄소 배경농도 (<http://ds.data.jma.go.jp/gmd/wdcgg/pub/data/current/co2/hourly/y2011/amy236n00.kma.as.cn.co2.nl.hr2011.dat>) 분포를 보여주는 그림이다. 안면도는 지정학적 위치로 인하여 여름을 제외한 대부분의 시기에 중국과 한반도를 중심으로 하는 오염원의 영향을 직접적으로 받게 된다. 안면도 기후변화 감

시센터에서 비분산형 적외선분석법 (NDIR)에 의해 매 시간 연속 측정된 이산화탄소의 배경농도는 370-440 ppm의 범위에서 분포함을 알 수 있다. 7월에서 9월까지 여름철은 비교적 낮은 농도 분포를 나타내지만, 11월은 불과 한 달 동안 고농도와 저농도의 관측치가 동시에 나타나는 변동성을 볼 수 있다.

1년 동안 관측된 이산화탄소 연속자료 가운데서 고농도, 저농도가 함께 관측된 최근 결과를 비교하기 위해 9월부터 12월까지 FLEXPART 역궤적 분석을 실시하였다. 11월 11일 CO<sub>2</sub> 농도는 약 430 ppm의 높은 배경농도 값 (Fig. 4(a))을 보여주고, 11월 20일 경에는 상대적으로 약 385 ppm의 낮은 값 (Fig. 4(a))을 보인다. 약 10일 사이에 50 ppm 가까운 농도차이를 보여주는데, 이러한 현상은 해당 관측점의 공기괴 시간 변동성과 큰 관련이 있다. 따라서 이를 잘 추적할 수 있는 정밀한 역궤적 분석의 필요성이 강조된다.

이산화탄소 농도 430 ppm과 385 ppm을 기록한 시기의 공기괴 역궤적 분석을 실시한 결과, Fig. 4(b)와 (c)가 보여주는 것처럼, 11월 11일에 관측된 이산화탄소 농도가 매우 높은 오염된 공기괴는 주로 한반도를 통과하였으며, 20일 경의 깨끗한 공기괴는 시베리아에서 기원한 북반부 배경대기임을 알 수 있다. 특히, 11월 20일 무렵에 관측되는 조밀한 back-trajectory 양상은 보통 공기의 이동이 빠르게 일어나고 있음을 나타내며, 이와 같이 북부 시베리아 지역으로부터 빠르게 이동하는 경우 나타나는 배경대기는 제주도 고산에서도 관측된 바 있다 (Kim *et al.*, 2010).

이처럼, 역궤적 분석이 제공하는 공기괴의 이동 경로, 이동시간 및 기원에 대한 정보는 관측 결과를 심도 있게 이해하는 데 많은 도움을 준다. 따라서 본 연구에서 그 최적화와 자동화의 방법이 제시된 FLEXPART 공기괴 역궤적 추정법은 다양한 분야에서 응용될 것으로 기대된다.

#### 부 록

부록에는 1. FLEXPART 기반 시스템 설정, 2. FLEXPART 저장경로 설정, 3. FLEXPART “makefile”, “par\_mod.f” 설정 및 컴파일, 4. FLEXPART R script 사용 방법을 첨부하였다. FLEXPART 모델의 편리와 자동화를 위하여 본 연구실에서 직접 설계한 자동화 프로그램 코드는 서울대학교 지구환경과학부 지구환경화학연구실 웹사이트 (<http://plaza.snu.ac.kr/~krkim>)에서 제공하고 있다.

##### 1. FLEXPART 기반 시스템 설정

FLEXPART를 운영하기 위한 컴퓨터 기본 설정을 위해서는 gfortran 컴파일러 및 JASPER, GRIB API의

설치가 필요하다. 이들을 설치하는 가장 간단한 방법은, apt-get을 통해서 이미 컴파일이 완료된 프로그램을 바로 설치하는 것이다. 이어지는 내용에서는 각 요소의 설치를 위한 실행창 명령어들을 기술하였다.

#### 1) gfortran 컴파일러 설치

FLEXPART 컴파일을 위해 필요한 gfortran 컴파일러 설치 명령어는 다음과 같다.

```
sudo apt-get install build-essential
sudo apt-get install gfortran
sudo apt-get install autoconf
```

#### 2) JASPER, GRIB API 설치

비슷한 방법으로 FLEXPART 실행에서 사용되는 JASPER와 GRIB API의 설치 명령어는 다음과 같다.

```
sudo apt-get install libjasper-dev
sudo apt-get install libjasper-runtime
sudo apt-get install libgrib-api-data
sudo apt-get install libgrib-api-tools
sudo apt-get install libgrib-api-dev
```

## 2. FLEXPART 디렉토리 설정

다음은 본 논문에서 제공되는 R code를 실행하기 위해 권장되는 저장 경로이다. FLEXPART를 사용하는 사용자 경로에 “FLEXPART” 라는 최상위 폴더를 만든 후, 이 폴더 안에 다음의 폴더를 구성한다.

- FLEXPART\_Source: <http://transport.nilu.no/flexpart> 에서 최신 FLEXPART (v90.02) 소스코드를 다운로드 한 후, 이 폴더 안에 압축을 푼다.
- R scripts: 본 논문에서 제공되는 R 코드를 이 폴더 안에 저장하도록 한다.
- FLEXPART\_Output: FLEXPART 실행 후 출력 값이 자동으로 저장되는 최상위 폴더이다.
- Windfields: GFS에서 다운로드 받은 입력 기상장을 폴더에 저장한다. ANL과 FCT 폴더를 따로 만들고, 필요에 따라 이들 폴더 안에 년, 월에 따른 하위 경로를 추가로 만들 수도 있지만, 반드시 필요하지는 않다 (년 단위 하위 경로 권장).

위의 구조를 도면으로 나타내면 다음과 같다.

```
/home/(username)/FLEXPART
    /FLEXPART_Source
    /Rscripts
    /FLEXPART_Output
    /Windfields
        /ANL
        /FCT
```

## 3. FLEXPART “makefile”, “par\_mod.f” 설정 및 컴파일

FLEXPART 소스 코드를 컴파일하기 위해서는 먼저 makefile을 설정해야 한다. makefile의 기본 포맷은 FLEXPART의 소스 코드와 함께 제공되며, 본 논문의 설정 (GFS 기상장 사용, gfortran 컴파일러 사용)을 따를 경우 “makefile.gfs\_gfortran”을 사용한다. 기본 제공되는 “makefile.gfs\_gfortran”을 열어 INCPATH, LIBPATH1, LIBPATH2를 다음과 같이 수정한다 (apt-get을 통해 API를 저장했을 경우 가정):

```
INCPATH = /usr/include
LIBPATH1 = /usr/lib
LIBPATH2 = /usr/lib/
```

다음, “par\_mod.f90” 파일은 FLEXPART 내부의 각종 파라미터의 최대값을 지정하는 파일로써, 이 설정들은 FLEXPART 실행이 확보되어야 하는 RAM의 양을 결정하는 파라미터들이기 때문에 반드시 FLEXPART 컴파일 전에 설정되어야 하고, 이들 설정을 변경할 경우 FLEXPART를 다시 컴파일 해야 한다. 사용자의 변경이 필요한 요소는 다음과 같다.

- Lines 123-125:  $1^{\circ} \times 1^{\circ}$  기상장을 사용하므로,  $nx_{max} \geq 360$ ,  $ny_{max} \geq 181$ , 또 GFS의 고도에 따라  $nuvz_{max}$ ,  $nwz_{max}$ ,  $nz_{max} \geq 26$ 이 설정되어있는 것을 확인한다. “!” 시작되는 줄은 주석 처리되어 읽혀지지 않으므로, 적절한 설정 앞에 “!” 없는 것을 확인한다. 기본으로 제공되는 설정에서 굳이 바꿀 필요는 없지만, 컴퓨터 RAM의 양에 제약이 있을 경우 최소값으로 줄이는 것이 도움이 될 수도 있다.
- Lines 126-127:  $nx_{shift}$  파라미터는 ECMWF와 GFS의 경도 표기 방식이 동일하지 않은 것을 보완하기 위한 설정으로써, GFS를 사용할 경우 line 126이 주석처리 되어있고 (“!”) line 127이 정상 인 것을 확인한다.
- Line 196:  $maxpart$  파라미터는 FLEXPART에서 계산하는 공기 입자의 최대 개수를 제한하는 파라미터로써, 각 RELEASE 파일당 88개의 역계적 계산을 사용할 경우  $40,000 \times 88 = 3,520,000$ 으로 변경하면 된다. 단, FLEXPART 실행 중 “SEGMENTATION ERROR” 발생할 경우 컴퓨터의 RAM이 부족할 가능성이 있으며, 이 때에는 각 RELEASES 파일의 역계적 계산 숫자를 줄이면서  $maxpart$ 도 줄여야 할 수 있다 (예, 52개의 역계적을 계산할 경우,  $maxpart = 40,000 \times 52 = 2,080,000$ ).

마지막으로, FLEXPART를 컴파일하는 명령어는 다음과 같다.



```
make -f makefile.gfs_gfortran
```

컴파일이 여러 없이 정상적으로 완료되면 FLEXPART 실행 파일 (“FLEXPART\_GFS\_GFORTRAN”)이 소스 코드의 경로에 만들어졌는지 확인한다. “par\_mod.f90” 파일 수정 후 FLEXPART를 다시 컴파일 해야 할 때에는 다음의 명령어를 사용한다 (기존 object 파일 및 실행파일 제거 후 다시 컴파일).

```
rm *.o FLEXPART_GFS_GFORTRAN
make -f makefile.gfs_gfortran
```

#### 4. FLEXPART R script 사용 방법

본 논문에 첨부된 FLEXPART R script를 사용하기 위해서는 컴퓨터에 R 프로그래밍 언어가 설치되어야 한다. 컴퓨터 설치 방법 및 R에 대한 정보는 [www.r-project.org](http://www.r-project.org)에서 얻을 수 있다. 각 R script 파일의 사용법은 다음과 같다.

##### 1) MetfieldDirlist.R

이 파일은 입력 기상장의 경로를 FLEXPART에서 처리 가능한 형태로 정리하여 AVAILABLE 파일을 저장하는 프로그램이다. 이 프로그램은 두 경로 (ANL, FCT)에 있는 기상장 파일들을 날짜에 맞추어 검색하며, 이 두 경로의 위치는 “~/FLEXPART/Windfields” 폴더 내에 각각 ANL, FCT라는 이름의 폴더가 되는 것을 권장한다. 각 ANL, FCT 폴더 안의 기상장 정리를 위해 추가적으로 하위경로를 둘 수 있는데, 이 하위경로의 형식에는 제한이 없다 (예, 2009, 2010, 2011 등).

##### 2) FLEXPART\_setup.R

이 파일은 주어진 기간 내 3시간 단위의 역궤적을 FLEXPART로 계산하는 자동 실행 파일 (flexpart#.script 형식)을 만드는 R 프로그램이다. 본 코드에서 사용자에게 의해 변경 되어야 하는 부분은 다음과 같다.

**FPRun.VersionName:** 수행될 FLEXPART의 출력값이 저장될 최상위 폴더의 이름. 되도록이면 수행되는 FLEXPART의 특징적인 부분이 부각되도록 한다 (ex. 관측점 이름, 사용된 기상장의 특징 등).

**StartTime, EndTime:** FLEXPART 수행의 시작, 종료 시기 지정. 이 설정에 맞추어 최상위 경로 하에 년, 월, 분기에 따라 FLEXPART 저장 경로 및 실행 script가 생성된다.

**Station\_name:** 관측점의 이름을 표기한다. 이 이름은 이후 출력값 처리에서도 사용된다.

**RELEASES.lonLowLeft/.latLowLeft/.lonUpRight/.latUpRight:** 관측 지점, 즉 back-trajectory 계산 시발점의 위경도 정보를 소수점 형식으로 표기한다. 보통

은 관측 지점의 정확한 정점으로 입력한다.

**RELEASES.agl\_asl/.lowZ/.highZ:** 관측 지점, 즉 back-trajectory 계산 시발점의 고도를 나타내며, 이 때 고도가 해발고도인 경우 .agl\_asl을 “2” 설정한다. 고도의 범위 (.lowZ, .highZ)는 실제 지점에서  $\pm 10$  m로 설정한다 (ex. 실제 고도가 47 m인 경우 하위 고도를 37 m, 상위 고도를 57 m로 설정).

**RELEASES.particleNum:** 각 back-trajectory 계산에서 사용되는 particle의 수로써, 통상적으로 40,000개로 설정한다. 설정되는 particle의 양에 따라 계산의 정밀성 및 계산량이 결정되게 된다.

**RELEASES.totalMass:** 각 particle의 평균 분자량을 변경할 수 있는 설정값이며, 공기 평균 분자량을 그대로 사용할 경우 “1.0000”으로 설정한다.

위의 값들을 back-trajectory 계산에 맞추어 설정한 후, 파일 전체를 복사하여 R 창에 입력한 후 enter를 누르면 R code가 실행되며, 실행 후 생성되는 출력값 저장 경로 하에 *scripts* 폴더에는 c-shell로 작성된 FLEXPART 실행 파일이 생성되어 있다. 각 .script 형식의 실행파일에는 8개의 FLEXPART run을 이어서 자동 실행하도록 하는 script가 작성되어 있다. 각 .script의 실행은 .script 파일을 더블 클릭한 후, 띄어지는 창에서 “Run in Terminal” 선택하면 되면 (Ubuntu 기준), 이 때 8개의 FLEXPART run이 순차적으로 실행되는 동안 1개의 CPU가 100% 활용된다. 컴퓨터에서 사용 가능한 CPU가 여러 개일 경우, 여러 .script를 동시에 실행하여, 계산 효율을 높일 수 있다.

각 .script가 실행되기 시작하면 .script 번호와 동일한 “output #” 형식의 텍스트 파일이 생성되며, 이 파일 내에는 FLEXPART 실행 중 화면의 output이 기록되어서, FLEXPART run의 정상 종료 여부를 확인할 수 있다.

##### 3) FLEXPART\_graphic.R

이 파일은 FLEXPART의 출력값을 읽은 후, 각 RELEASE에 대한 역궤적을 그림으로 나타내는 프로그램이다. FLEXPART 출력값 경로 중 어느 경로에서 역궤적 계산을 할 것인지를 지정하기 위해서 “dirlist” 파일이 필요하며, 이 파일의 예제로는 FLEXPART\_setup.R을 실행한 후 만들어지는 출력 경로 내에 “dirlist” 파일이 만들어진다.

## 감사의 글

본 연구는 기상청 기후변화 감시, 예측 및 국가정책지원강화 사업 (CATER 2012-3010)의 지원으로 수행되었습니다.

## 참고문헌

- 박상진, 이종범, 김재철, 2008: GDAS와 MM5를 이용한 HYSPLIT\_4 모델의 결과 비교. 한국대기환경학회 2008 춘계학술대회 논문집, 555-556
- Cooper, O. R. and Coauthors, 2010: Increasing springtime ozone mixing ratios in the free troposphere over western North America. *Nature*, **463(7279)**, 344-348. doi:10.1038/nature08708.
- Hirdman, D., K. Aspmo, J. F. Burkhart, S. Eckhardt, H. Sodemann, and A. Stohl, 2009: Transport of mercury in the Arctic atmosphere: Evidence for a spring-time net sink and summer-time source. *Geophys. Res. Lett.*, **36(12)**, L12814.
- Kim, J. and Coauthors, 2010: Regional atmospheric emissions determined from measurements at Jeju Island, Korea: Halogenated compounds from China. *Geophys. Res. Lett.*, **37(12)**, L12801.
- Li, S. and Coauthors, 2011: Emissions of Halogenated Compounds in East Asia Determined from Measurements at Jeju Island, Korea. *Environ. Sci. Technol.*, **45(13)**, 5668-5675.
- Miller, J. B. and Coauthors, 2012: Linking emissions of fossil fuel CO<sub>2</sub> and other anthropogenic trace gases using atmospheric <sup>14</sup>CO<sub>2</sub>. *J. Geophys. Res.*, **117(D8)**, D08302.
- Saito, T., Y. Yokouchi, A. Stohl, S. Taguchi, and H. Mukai, 2010: Large Emissions of Perfluorocarbons in East Asia Deduced from Continuous Atmospheric Measurements. *Environ. Sci. Technol.*, **44(11)**, 4089-4095. doi:10.1021/es1001488.
- Stohl, A., 1998: Computation, accuracy and applications of trajectories - A review and bibliography. *Atmos. Environ.*, **32(6)**, 947-966.
- \_\_\_\_\_, M. Hittenberger, and G. Wotawa, 1998: Validation of the Lagrangian particle dispersion model FLEXPART against large-scale tracer experiment data. *Atmos. Environ.*, **32(24)**, 4245-4264.
- \_\_\_\_\_, C. Forster, A. Frank, P. Seibert, and G. Wotawa, 2005: Tech Note: The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2. *Atmos. Chem. Phys.*, **5(9)**, 2461-2474.
- \_\_\_\_\_, and Coauthors, 2009: An analytical inversion method for determining regional and global emissions of greenhouse gases: Sensitivity studies and application to halocarbons. *Atmos. Chem. Phys.*, **9(5)**, 1597-1620.
- \_\_\_\_\_, and Coauthors, 2010: Hydrochlorofluorocarbon and hydrofluorocarbon emissions in East Asia determined by inverse modeling. *Atmos. Chem. Phys.*, **10(8)**, 3545-3560. doi:10.5194/acp-10-3545-2010.