

ORIGINAL ARTICLE

양상블 제공근 필터의 민감도 분석을 통한 화학 수송 모델의 PM_{2.5} 자료 동화 연구

박순영*

대구교육대학교 과학교육과

Sensitivity of Key Parameters in Ensemble Square Root Filter to PM_{2.5} Prediction in Air Quality Data Assimilation

Soon-Young Park*

Department of Science Education, Daegu National University of Education, Daegu 42411, Korea

Abstract

The accurate forecasting of fine particulate matter (PM_{2.5}) is critical for public health and policy-making in Northeast Asia. Ensemble-based data assimilation (DA) has shown promise in improving chemical transport model (CTM) predictions; however, the system performance is highly sensitive to its parameters. This study conducted a comprehensive sensitivity analysis of the Ensemble Square Root Filter (EnSRF) combined with the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model. Using the KORUS-AQ 2016 campaign as a test case, we evaluated the impacts of (1) the inflation factor, (2) horizontal localization width, (3) vertical localization width, and (4) ensemble size on PM_{2.5} simulations. The results demonstrate that an inflation factor of 1.0 effectively prevents filter divergence by maintaining adequate background error variance. The optimal localization widths were identified as 200 km horizontally and 2.0 km vertically, enabling realistic spatial propagation of ground-level observation information throughout the planetary boundary layer. Prediction performance improved with increasing ensemble size, with the highest accuracy achieved using 40 members; however, gains became marginal beyond 30 members, indicating saturation effect. Considering computational efficiency, an ensemble size of 30 was suggested for a operational purposes. Compared with a control run without DA and with a three-dimensional variational(3DVAR) DA, the optimized EnSRF system significantly reduced the root mean square error (RMSE). This also increased the index of agreement (IOA). These findings provide essential guidelines for optimizing ensemble-based DA systems for operational air quality forecasting.

Key words : Ensemble square root filter, Data assimilation, Air quality, Chemical transport model, PM_{2.5}

1. 서 론

초미세먼지(PM_{2.5})는 인체 건강과 직결된 핵심 대기 오염 물질로, 특히 대량의 배출원과 복잡한 기상 조건이 공존하는 동북아시아 지역에서 그 농도 예측

의 정확성은 공공 보건 정책 수립의 필수 전제 조건이다. 대기질 예측을 위해 널리 사용되는 화학 수송 모델(chemical transport model, CTM)은 배출량 입력 자료의 불확실성, 초기 조건 및 경계 조건의 오차로 인해 실제 관측치와 상당한 괴리를 보이기도 한다(Park

Received 16 April, 2026; Revised 16 May, 2026;

Accepted 26 May, 2026

*Corresponding author : Soon-Young Park, Department of Science Education, Daegu National University of Education, Daegu 42411, Korea

Phone : +82-53-620-1342

E-mail : spark@dnue.ac.kr

© The Korean Environmental Sciences Society. All rights reserved.

© This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

et al., 2022a). 이러한 한계를 극복하기 위해 관측 자료를 모델에 통계적으로 융합하는 자료 동화 기술이 필수적으로 요구된다(Bocquet et al., 2015).

초기 연구들에서 주로 사용된 3차원 변분 자료 동화(3DVAR)는 계산 효율성이 높으나, 시공간적으로 고정된 배경 오차 공분산(background error covariance, BEC)을 사용하기 때문에 실시간으로 변화하는 대기 흐름을 반영하지 못한다는 제약이 있다. 반면, 앙상블 칼만 필터(ensemble Kalman filter, EnKF)는 앙상블 멤버를 통한 단기 예보를 바탕으로 대기에 흐름을 반영한 BEC를 산출하여 보다 입체적인 보정을 가능케 한다(Park et al., 2022b). 또한, 동북아시아 PM_{2.5} 예보에서 앙상블 기반의 자료 동화는 초기장 개선뿐 아니라 배출량 자료도 보정하여 예보 정확도를 더욱 높일 수 있음을 보였다(Wu et al., 2023). 특히 앙상블 제공근 필터(ensemble square root filter, EnSRF)는 관측 자료에 인위적인 노이즈를 추가하지 않는 결정론적 접근 방식을 통해, 앙상블 멤버 수의 제한으로 발생하는 샘플링 오차를 획기적으로 줄여 EnKF 보다 안정적인 예측 성능을 입증하였다(Dash et al., 2023).

자료 동화 시스템의 성능은 시스템 구축 시 설정되는 다양한 조절 파라미터의 설정값에 극도로 민감하다(Skachko et al., 2014). 특히, 앙상블 기반 자료 동화의 고도화를 위해 다음 세 가지 요소의 최적화가 필요하다. 첫째, 팽창 계수(inflation factor)는 앙상블 멤버의 분산이 실제 오차보다 작아져 관측치를 무시하게 되는 필터 발산 문제를 해결하는 핵심 요소이며, 적응형 팽창 기법을 통한 최적화가 가능하다(Whitaker and Hamil, 2012). 둘째, BEC의 국지화 규모(localization length scales)를 설정하여 물리적으로 상관관계가 없는 원거리 관측의 영향을 차단함으로써 가짜 상관을 제거할 수 있다(Gaspari and Cohn, 1999). Park et al.(2022b)의 연구에 따르면 수평 길이 척도(horizontal length width, HLW)는 지상 풍속과 상관성이 높으며, 수직 길이 척도(vertical length width, VLW)는 행성 경계층 높이와 밀접한 상관관계를 가짐을 보였다. 따라서 이들의 최적화가 자료 동화의 신뢰도를 높일 수 있다. 셋째, 앙상블 멤버 수는 계산 비용과 오차 수렴 사이의 최적점을 찾는 현업 예보 시스템 구축의 관건이다(Lin et al., 2008).

본 연구에서는 국내에서 가장 활발하게 사용 중인 화학 수송 모델, CMAQ (community multiscale air

quality)의 자료 동화 기법에 대한 비교 연구에서 한 단계 나아가, CMAQ-EnSRF 시스템의 예측 정확도를 결정짓는 세 가지 핵심 파라미터(inflation, localization, ensemble number)에 대한 정밀한 민감도 실험을 수행하였다. 특히 동북아시아 KORUS-AQ 기간의 복합적인 기상 조건에서 각 파라미터가 PM_{2.5} 예측 성능에 미치는 영향을 분석함으로써, 앙상블 기반 대기질 자료 동화 시스템의 최적 운영 가이드라인을 제시하고자 한다.

2. 연구 방법

2.1. 앙상블 제공근 필터(EnSRF) 자료 동화

EnSRF의 수학적 표현과 설명은 Whitaker and Hamil(2002)에 제시되어 있다. 핵심 내용만 요약하면 아래와 같다.

$$\bar{\mathbf{x}}_k^a = \bar{\mathbf{x}}_k^f + \mathbf{K}_k(\mathbf{y}_k - \mathbf{H}\bar{\mathbf{x}}_k^f) \dots\dots\dots (1)$$

$$\mathbf{x}_{i,k}'^a = \mathbf{x}_{i,k}'^f - \tilde{\mathbf{K}}_k \mathbf{H} \mathbf{x}_{i,k}'^f, \quad i = 1, 2, \dots, N \dots\dots\dots (2)$$

$$\bar{\mathbf{x}}_k^f = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_{i,k}^f \dots\dots\dots (3)$$

$$\mathbf{x}_{i,k}'^f = \mathbf{x}_{i,k}^f - \bar{\mathbf{x}}_k^f, \quad i = 1, 2, \dots, N \dots\dots\dots (4)$$

여기서 아래 첨자 i 와 k 는 k 번째 시간의 i 번째 앙상블 멤버를 뜻한다. 위 줄(̄)은 전체 앙상블 수, N 개 앙상블 평균을 의미한다. 식 (1)에서 $\bar{\mathbf{x}}_k^f$ 는 수치모델의 앙상블 예측장(또는 배경장)의 앙상블 평균이고 식 (3)과 같이 구한다. EnSRF는 자료 동화를 통해 앙상블 평균 분석장($\bar{\mathbf{x}}_k^a$)을 구하고 이 분석장의 편차($\mathbf{x}_{i,k}'^a$)를 식 (2)를 통해 구한다. 식 (2)에서 배경장의 앙상블 편차($\mathbf{x}_{i,k}'^f$)는 식 (4)와 같이 구할 수 있다. 다음 앙상블 예측을 위한 초기장은 식 (1)과 (2)의 합을 통해 아래와 같이 구할 수 있다.

$$\mathbf{x}_{i,k}^a = \bar{\mathbf{x}}_k^a + \mathbf{x}_{i,k}'^a, \quad i = 1, 2, \dots, N \dots\dots\dots (5)$$

자료 동화에 사용된 관측 자료는 k 번째 시간에 수집

된 값으로 식 (1)에서 y_k 이다. H 는 관측 연산자로서 관측 지점이 정확히 모델 격자에 위치하지 않기 때문에 관측 위치에 해당하는 모델 결과를 얻기 위한 선형 연산자에 해당한다. 본 연구에서는 관측 지점에 가장 가까운 주변 4개의 모델 격자의 모델값을 사용하여 거리 가중 내삽이 가능하도록 H 를 구축하였다. 식 (1)은 통상의 EnKF 칼만 이득 행렬(Kalman gain matrix, K_k)을 사용하면 되지만, EnSRF 자료 동화의 핵심이라고 할 수 있는 분석 양상블의 편차를 구하는 식 (2)의 축소된 칼만 이득 행렬(reduced Kalman gain matrix, $\tilde{K}_k$)은 아래와 같다.

$$K_k = P_k^f H^T (H P_k^f H^T + R_k)^{-1} \dots\dots\dots (6)$$

$$\tilde{K}_k = (1 + \sqrt{R_k / H P_k^f H^T R_k})^{-1} K_k \dots\dots\dots (7)$$

$$P_k^f H^T = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_{i,k}^f - \bar{x}_k^f) (H x_{i,k}^f - H \bar{x}_k^f)^T \dots\dots (8)$$

$$H P_k^f H^T = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (H x_{i,k}^f - H \bar{x}_k^f) (H x_{i,k}^f - H \bar{x}_k^f)^T \dots\dots\dots (9)$$

K_k 는 매번의 자료 동화 시점에 새로 만들어지는 것으로 관측 오차 공분산(observation error covariance, OEC) 행렬인 R_k 과 배경 오차 공분산(BEC) 행렬인 P_k^f 로 식 (6)과 같이 구할 수 있다. BEC는 모델 격자들 사이의 오차 상관성을 의미하는 값으로 양상블 기반의 자료 동화에서는 식(8)과 (9)를 사용하여 명시적으로 추정하여 구한다. 즉, 모델의 오차는 양상블 평균을 참으로 가정하여 여기서 떨어진 값으로 정의하여 구한다는 의미이다. $\tilde{K}_k$ 는 0과 1사이의 값으로 축소된 칼만 이득 행렬이고 식 (7)을 통해 계산한다.

관측 오차는 측정기기 오차와 관측값이 특정 영역을 대표하지 못하여 발생하는 대표성 오차의 합으로 정의한다(Peng et al., 2017; Chen et al., 2019). 본 연구에서 정의한 OEC 행렬(R_k)은 이어지는 2.3절에서 모델의 입력자료 설명 부분에서 자세히 정리하였다.

2.2. 양상블 팽창법과 오차상관 국지화 방안

화학 수송 모델에서 대기 조성물질의 화학 반응은 매우 안정적이고 빠르게 진행되는 경향이 있어 모델의 불확실성을 정량적으로 고려한 초기 양상블 멤버를 잘 구축하더라도 시간에 따른 모델 계산 과정에서 양상블 스프레드는 유지되기가 어렵다(Constantinescu et al., 2007). 또한, 자료 동화 후 얻을 수 있는 분석장의 오차는 관측과 모델이 기존에 가지고 있던 오차의 크기보다 작아지는 것이 자료 동화의 기본 원리이다(Kalnay, 2002). 양상블 자료 동화에서 분석장의 오차가 줄어드는 것은 양상블 스프레드가 양상블 평균을 중심으로 모인다는 뜻이다. 예측-자료 동화-예측의 단계로 반복되는 과정을 겪을수록 모델의 불확실성은 결국 관측의 오차 크기보다 줄어들어 관측의 영향이 없어지는 필터 발산이 나타난다. 따라서 미리 산정한 오차 크기를 유지하기 위한 양상블 스프레드는 매우 중요하다. 본 연구에서는 모델의 초기장의 불확실성을 50%, 그리고 화학 수송 모델의 중요 입력자료인 배출량 자료에 대한 불확실성을 50%로 고려하여 랜덤 노이즈를 더한 양상블을 구축하였다. 그럼에도 여전히 필터 발산이 발생하여 양상블을 팽창시키는 처방을 적용하였다. 여러 팽창법이 시도되었으나 여기서는 Whitaker and Hamil(2012)이 제안한 이전 스프레드로 완화(relaxation-to-prior spread, RTPS)하는 방안을 적용하였다. RTPS는 아래와 같은 식으로 작동한다.

$$x_{i,k}^f = \bar{x}_k^f + \left(\beta \frac{\sigma_{k-1} - \sigma_k}{\sigma_k} \right) (x_{i,k}^f - \bar{x}_k^f), \quad i = 1, 2, \dots, N \dots\dots\dots (10)$$

여기서 σ 는 $k-1$ 시간과 k 시간의 양상블 멤버 사이의 표준편차로 스프레드 정도를 나타내는 값이다. 자료 동화 전 양상블 예측장의 양상블 평균에서 떨어진 정도를 예측 기간 이전(예를 들어, 6시간 간격의 자료 동화 간격이라고 할 때, 6시간 전)의 스프레드로 유지하는 방법이다. β 는 팽창 계수로써 완화 강도를 조절하는 중요한 파라미터로 작동한다. 양상블 예측장의 팽창 전과 후를 구분하기 위해 팽창법을 적용한 양상블 예측장은 식 (10)에서 대문자인 $X_{i,k}^f$ 로 표시하였다.

앞서 언급하였지만, 양상블 자료 동화는 이론적으로 무한대의 양상블 멤버일 경우 이론적으로 완벽한

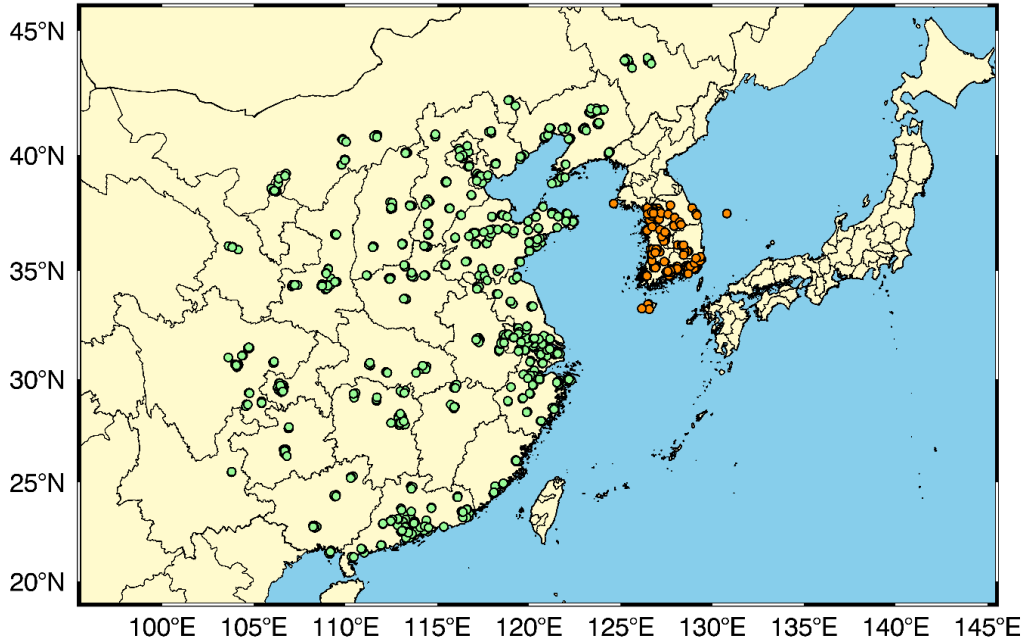


Fig. 1. Study domain for the CMAQ model simulations. Green, red, blue, and purple circles indicate the ground-based observational stations in China (790 sites), while orange circles represent those in South Korea (165 sites).

자료 동화가 가능하다. 수치모델의 계산 비용으로 제한적인 앙상블 멤버를 설정할 수밖에 없는데, 이 경우 관측 지점에서 멀리 떨어진 지역에서 모델의 오차 상관관계 발생하여 물리적 상관관계가 없는 지역에 관측 영향이 발생한다. 이러한 현상은 가짜 상관관계라고 하는 샘플링 오차의 한 종류이다. 이를 해결하기 위한 간단한 방법은 관측 지점 주변 일정 범위로 오차 상관을 제한 또는 제거하는 오차상관 국지화 방안이다. 본 연구에서는 많은 앙상블 기반 자료 동화에서 효과성이 입증된 Gaspari and Cohn(1999)의 방안을 적용하였다.

$$\mathbf{K}_k = \left\{ \boldsymbol{\rho}_v \circ \boldsymbol{\rho}_h \circ (\mathbf{P}_k^T \mathbf{H}^T) \right\} \left\{ \boldsymbol{\rho}_v \circ \boldsymbol{\rho}_h \circ (\mathbf{H} \mathbf{P}_k^T \mathbf{H}^T) + \mathbf{R}_k \right\}^{-1} \quad (11)$$

여기서 $\boldsymbol{\rho}_v$ 와 $\boldsymbol{\rho}_h$ 는 각각 연직 방향과 수평 방향으로 거리 함수에 기반한 간단한 다항식에 해당한다. 이 함수의 정의는 Gaspari and Cohn(1999)에서 참고할 수 있다. 각 함수에서 중요한 파라미터는 함수의 값이 e^{-1} 로 감소하는 연직 및 수평 길이 값으로 본 연구에서는

VLW와 HLW으로 정의하였다.

2.3. 화학 수송 모델 및 입력 자료

시간별 기상 입력 자료는 weather research and forecasting (WRF) 수치모델 v3.8.1 (Skamarock et al., 2008)을 사용하였다. 수평 해상도 27 km 격자와 연직 33개 층으로 모델의 최상층은 50 hPa이다. NCEP의 재분석 자료(FNL)를 WRF 모델의 초기 및 경계장으로 사용하였고, FNL의 수평 해상도와 시간 간격은 각각 0.25°와 6시간이다. 화학 수송 모델은 CMAQ v5.2.1 (Byun and Schere, 2006)을 활용하였다.

Fig. 1은 CMAQ 모델 수치 실험을 수행한 전체 영역을 표시한 그림이다. 27 km 해상도로 구성된 도메인의 전체 동서 및 남북 격자수는 144×105 이고 연직층은 14층으로 설정하였다. 각 층별 평균 고도는 28, 69, 122, 246, 413, 626, 977, 1481, 2062, 2835, 3923, 5566, 8490, 13880 m로 구성하였다. 자세한 WRF 및 CMAQ의 모수화 방안은 Park et al.(2022a)와 Dash et al.(2023)을 따르고 있다.

화학 수송 모델의 중요한 입력 자료 중 하나는 대기

오염 물질의 배출량이다. 본 연구에서는 KORUS v5.0의 배출량 인벤토리(Jang et al., 2020)가 인위적 배출량으로 사용되었다. 기체상 및 입자상 자연 배출량은 MEGAN (model of emissions of gases and aerosols from nature) v2.1을 적용하였다(Guenther et al., 2012). 산불 발생에 의한 자연 배출량은 NCAR의 FINN v1.5 (Wiedinmyer et al., 2011)을 활용하였다.

자료 동화에 사용된 지상 측정 PM_{2.5} 농도 자료는 중국과 우리나라에서 수집된 자료를 사용하였다. 중국의 경우 중국 생태 환경부에서 제공하는 실시간 수집 플랫폼(<http://106.37.208.233:20035>)과 웹사이트(<https://www.pm25.in>)에서 확보한 대기질 관측 정보를 적용하였다. 수집된 지상 측정망의 위치가 Fig. 1에 초록색 원으로 표시되어 있다. 우리나라의 지상 측정망은 환경부와 지역 보건환경연구원에서 운영 중인 대기질 측정망 자료(Fig. 1, 주황색 원)를 사용하였다(<https://www.airkorea.or.kr>). 중국과 우리나라의 지상 측정망 수는 각각 790개와 165개이다.

OEC 행렬 구축을 위해 Chen et al.(2019)의 연구를 참고하였다. PM_{2.5}에 대한 측정기기의 오차는 $\epsilon_o = 1 + 0.0075\Pi_0$ 의 식으로 구하였다. 여기서 Π_0 는 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 단위의 관측 PM_{2.5} 농도를 뜻한다. 관측 자료의 대표성 오차는 $\epsilon_r = \gamma\epsilon_o\sqrt{\Delta x/L}$ 로 산정하였고, 여기서 γ 는 조절 계수(본 연구에서는 0.5를 적용), Δx 는 수평 격자 크기(27 km), L 은 영향 반경을 의미한다. L 은 관측 지점이 위치한 지역의 지형적 복잡성을 나타낼 수 있는데(Elbern et al., 2007), 중국과 우리나라 대부분의 측정망의 위치는 도시이기 때문에 최근의 연구 결과인 Peng et al.(2017)과 Ha et al.(2020)의 연구와 마찬가지로 3 km를 적용하였다. 따라서, 총 관측 오차는 측정기기 오차와 대표성 오차를 합친 $\epsilon_t = \sqrt{\epsilon_o^2 + \epsilon_r^2}$ 식으로 적용하였다. 관측 지점간에는 오차 상관성이 없음을 가정하기 때문에 OEC 행렬($\mathbf{R}$)은 정의된 관측 오차(ϵ_t)를 사용하여 $\mathbf{R} = \overline{\epsilon_t(\epsilon_t)^T}$ 식으로 구축하였다.

2.4. 실험 설계

CMAQ 모델링의 분석 기간은 2016년 진행된 KORUS-AQ 캠페인 기간으로 2016년 5월 1일부터 6월 12일까지 총 6주간이다. 시뮬레이션 기간은

WRF-CMAQ의 spin-up 기간과 하루 4회 수행된 EnSRF 자료 동화 적용 기간을 고려하여 4월 25일 00 UTC부터 실시되었다. 자료 동화를 수행하지 않은 42일 연속 모델링은 대조군으로써 실험명은 CTR이다. 6시간 간격으로 EnSRF가 수행되었으며, 00 UTC에 확보된 각 에어로졸 성분별 농도를 초기값으로 하여 매일 48시간의 예보가 별도로 수행되었다. EnSRF의 성능을 객관적으로 평가하기 위해 자료 동화를 적용하지 않은 실험과 함께 3DVAR를 적용한 예측성을 서로 비교하였다. 미국의 국립 환경 예측 센터(NCEP)의 3DVAR 기법을 적용할 수 있는 GSI (grid-point statistical interpolation) v3.6을 기반으로 CMAQ 모델의 3DVAR 자료 동화를 위해 개발된 Lee et al.(2022)에서 소개한 방법론을 사용하였다.

본 연구의 핵심 목적인 EnSRF 자료 동화 시스템의 최적화 및 주요 파라미터가 PM_{2.5} 예측 성능에 미치는 영향을 평가하기 위해 다음과 같이 네 가지 요소에 대한 정밀 민감도 실험을 설계하였다. 또한, 필요한 파라미터가 총 4종류이므로 동시에 민감도 실험을 할 경우 실험 조건이 과도하게 증가한다. 따라서, 다음의 순서에 따라 단계적으로 민감도 실험 후 최적화를 진행하였다. 양상불 멤버 기반의 BEC 추정에는 관측 자료 동화를 수행하면서 오차 분산이 줄어든다. 식 (10)에서 설명한 RTPS 팽창법의 팽창 계수(β)에 대한 민감도 실험을 우선 수행하였다. 팽창 계수는 0(팽창 기법 사용하지 않음), 1.0, 1.02, 1.04, 1.06, 1.08, 1.10의 7단계로 설정하여, 팽창 강도가 필터의 수렴도 및 관측 자료 반영률에 미치는 영향을 분석하였다. 두 번째로, 관측 자료의 수평적 영향 범위를 결정하고 허위 상관을 제어하기 위해 식 (11)에 나타난 수평 국지화 함수(ρ_h)의 수평 국지화 규모(HLW) 실험을 진행하였다. 국지화 반경은 100 km, 150 km, 200 km, 400 km의 네 가지 시나리오를 설정하여 지상 풍속 등 기상 조건에 따른 최적 영향 반경을 고찰하였다. 셋째, 연직 방향으로의 관측 정보 전파 범위를 최적화하기 위해 HLW가 적용된 바와 같은 식 (11)의 ρ_v 에서 연직 국지화 규모(VLW)를 고려한 실험을 수행하였다. 연직 규모는 0.5 km, 1.0 km, 2.0 km, 4.0 km로 설정하였으며, 이는 행성 경계층(PBL) 내외에서의 오차 교정 성능을 정량적으로 평가하기 위함이다. 특히, 자료 동화에 사용한 관측 자료는 오직 지상 측정망의 PM_{2.5} 관측 농도만을 사용했기 때문에 CTM의 최하층에 해당하는 관측 자료 동화 영향이 상

Table 1. Key parameters of EnSRF data assimilation for PM_{2.5} predictions in this study

Parameters	Experimental values
Inflation factor, β	0, 1.0, 1.02, 1.04, 1.06, 1.08, 1.10
Horizontal localization width HLW (km)	100, 150, 200, 400
Vertical localization width, VLW (km)	0.5, 1.0, 2.0, 4.0
Ensemble number, N	10, 20, 30, 40

Table 2. Statistical metrics from the sensitivity experiments for the different prior inflation factor(β) with a fixed horizontal localization width of 100 km and an ensemble size of 40

Exp.	Prior inflation factor, β	Horizontal localization width, HLW (km)	RMSE	IOA
1	0	100	13.665	0.578
2	1.0	100	9.642	0.680
3	1.02	100	9.597	0.682
4	1.04	100	9.542	0.685
5	1.06	100	9.557	0.684
6	1.08	100	9.53	0.691
7	1.10	100	9.513	0.692

Table 3. Statistical metrics from the sensitivity experiments for the horizontal localization width

Exp.	Horizontal localization width, HLW (km)	RMSE	IOA
1	100	9.642	0.680
2	150	9.862	0.741
3	200	9.798	0.744
4	400	9.727	0.746

Table 4. Same as Table 3 except for the vertical localization width

Exp.	Horizontal localization width, HLW (km)	Vertical localization width, VLW (km)	RMSE	IOA
1	200	0.5	9.775	0.741
2	200	1.0	9.382	0.756
3	200	2.0	9.268	0.761
4	200	4.0	9.269	0.761

층으로 어느 높이까지 전파시킬지에 대한 강도로 이해할 수 있다. 마지막으로, 자료 동화의 통계적 신뢰도와 계산 효율성 사이의 최적점을 찾기 위해 앙상블 멤버수 (N) 민감도 실험을 수행하였다. 멤버 수는 10, 20, 30, 40으로 변화시키며, 멤버수 증가에 따른 오차 수렴 속

도 및 예측 정확도 향상 폭을 비교 분석하였다. 해당 민감도 실험에서는 산술적으로 앙상블 수가 증가함에 따라 거의 선형적으로 계산 비용이 증가하기 때문에 예측 성능의 증가폭을 판단하여 합리적인 멤버 수를 확정하였다.

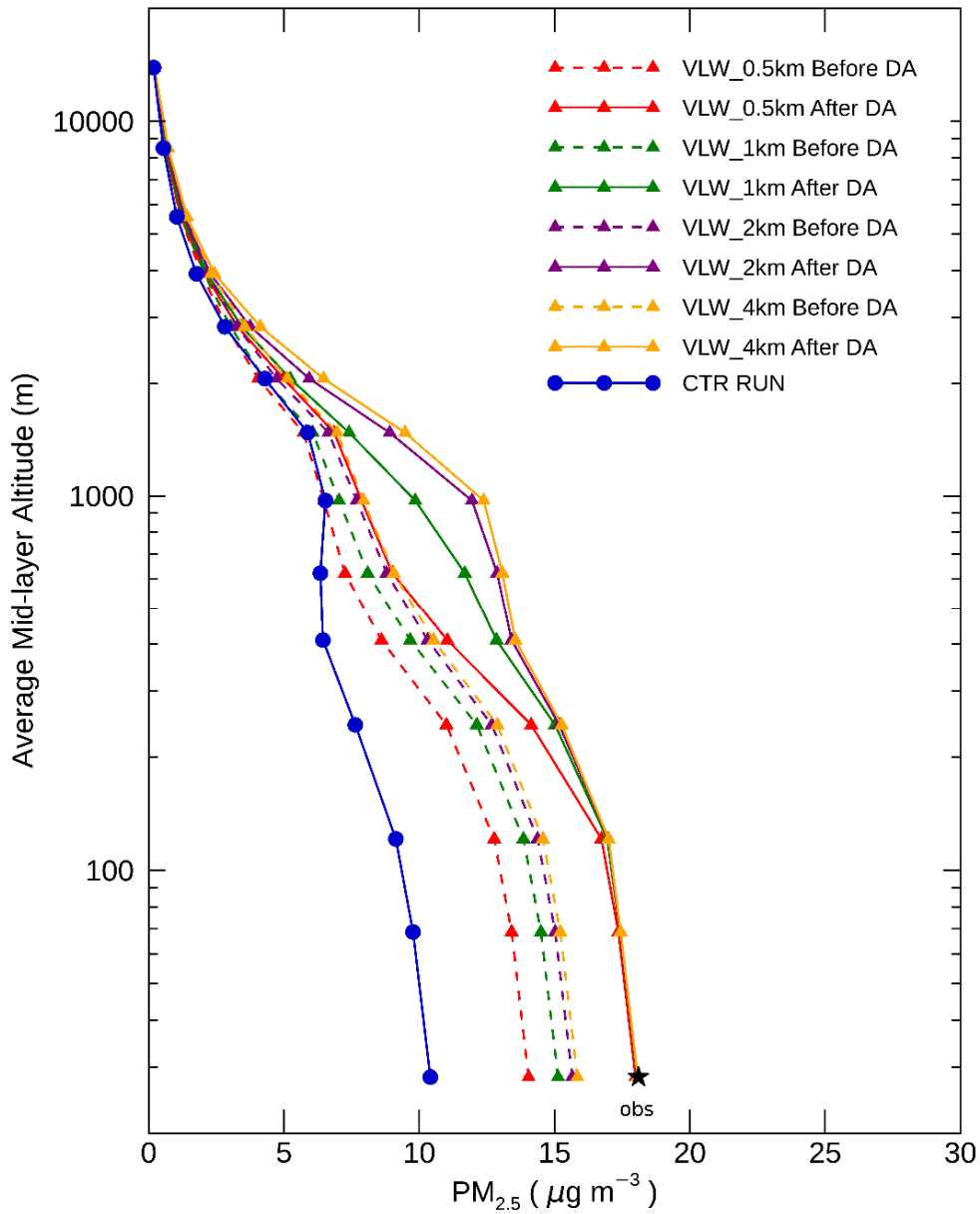


Fig. 2. Average vertical distributions of PM_{2.5} at all the observation sites in South Korea at all the data assimilation times (00, 06, 12, and 18 UTC) for the control run and the EnSRF DA experiments with the vertical localization width of 0.5, 1, 2, and 4 km. These experiments were performed for 6 days from May 1 to May 6, 2016. The dashed and solid lines for the DA experiments indicate the periods before(dashed lines) and after DA(solid lines), indicating the background (or +06 h prediction) and analysis (or +00 h), respectively. The mean PM_{2.5} observed at the ground level is marked with star symbols.

앞서 언급한 네 가지 파라미터에 대한 구체적인 설정 값들은 Table 1에 정리하였다. 민감도 실험은 5월 1일부터 7일까지 일주일 동안 6시간 간격으로 실시된 EnSRF 자료 동화의 PM_{2.5} 예측 성능을 근거로 각 파라미터의 최적값을 도출한 후, 5월 1일 00 UTC부터 수치 실험을 다시 시작하였다.

3. 연구 결과

3.1. 팽창 계수 최적화

본 연구에서는 앙상블 멤버 수의 제한으로 발생하는 배경 오차 공분산의 과소산정 문제를 해결하기 위해 RTPS 팽창 기법을 적용하고, 팽창 계수(β) 변화에 따른 민감도 실험을 수행하였다. 수평 국지화 규모를 100 km, 앙상블 멤버 수를 40명으로 고정된 상태에서 수행된 실험 결과는 Table 2와 같다. 먼저 팽창 계수를 적용하지 않은 경우($\beta = 0$, Exp.1) RMSE는 $13.665 \mu\text{g}/\text{m}^3$, IOA는 0.578로 가장 낮은 성능을 보였다. 이는 대기질 모델의 강한 비선형성과 배출량의 불확실성으로 인해 앙상블 스프레드가 급격히 감소하며 필터 발산이 발생했음을 의미한다. 반면, 팽창 계수를 1.0에서 1.10까지 증가시킴에 따라 RMSE는 9.642에서 $9.513 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 로 점진적으로 감소하였으며, IOA는 0.680에서 0.692로 개선되었다. β 가 1.0 이상으로 설정됨에 따라 RMSE와 IOA는 소폭 개선되는 경향을 보였다. 비록 β 가 1.0보다 클 경우 단기 통계 지표는 소폭 개선되었으나, 자료 동화가 반복됨에 따라 분석장이 관측에 과도하게 수렴하는 과대 추정(over-fitting) 현상이 나타났다. 따라서 본 연구에서는 한 번의 자료 동화 단계에서 이전의 앙상블 퍼짐 정도를 유지하는 방식($\beta = 1.0$)의 RTPS 팽창법을 적용하기로 결정하였다. 이는 단기 성능보다 장기적인 안정성을 고려한 것이다.

3.2. 수평 및 연직 국지화 규모 최적화

자료 동화 시 관측 정보의 공간적 영향 범위를 결정하는 국지화 규모에 대한 민감도 실험 결과는 Table 3과 Table 4에 제시되었다. 수평 국지화 규모(HLW) 실험에서, 영향 반경이 100 km에서 200 km로 확장됨에 따라 RMSE는 9.642에서 $9.798 \mu\text{g}/\text{m}^3$ 으로 소폭 증가하였으나, 관측치와의 전반적인 일치도를 나타내는 IOA는 0.680에서 0.744로 크게 향상되었다. 이는 수

평적으로 더 넓은 범위의 관측 정보를 동화 과정에 포함하는 것이 동북아시아와 같은 광역 PM_{2.5} 분포를 모의하는 데 유리함을 시사한다. HLW를 400 km로 설정한 경우 통계 검증에서 큰 변화가 없었으나 관측 자료가 없는 우리나라 주변 해상에서 분석 증분이 과도하게 발생하였다(그림 생략). 이는 전형적인 가짜 상관의 영향으로 판단되며, 장기 예측에서 오차를 증가시킬 가능성이 있다. 따라서 본 연구에서는 통계 성능과 물리적 타당성을 종합적으로 고려하여 HLW=200 km를 최적값으로 선정하였다.

연직 국지화 규모(VLW) 실험에서는 수평 규모를 200 km로 고정한 상태에서 VLW를 0.5 km부터 4.0 km까지 변화시키며 성능을 평가하였다(Table 4). 실험 결과, 연직 규모가 2.0 km일 때 RMSE $9.268 \mu\text{g}/\text{m}^3$, IOA 0.761로 가장 우수한 성과를 거두었다. 2.0 km 이상의 규모(4.0 km)에서는 통계 지표의 유의미한 변화가 나타나지 않아 성능이 포화되는 양상을 보였다. 이러한 연직 국지화 규모의 효과는 Fig. 2의 PM_{2.5} 연직 농도 프로파일을 통해 명확히 확인된다. 자료 동화 전(background, 점선) 모델은 지표 부근의 농도를 실제 관측치(obs, 별표)보다 낮게 모의하는 경향이 있으나, 자료 동화 수행 후(analysis, 실선) 농도 분포가 관측치에 매우 가깝게 교정되었다. 각 VLW 실험별 점선과 실선은 각각 6시간 예측과 이 예측을 배경장으로 자료 동화가 수행된 분석장이다. 지상 PM_{2.5} 농도 기준으로 VLW를 0.5 km나 1.0 km로 한 실험에 비해 2.0 km 또는 4.0 km로 설정한 실험의 성능이 우수하다. VLW가 2.0 km 이상으로 설정될 경우 지상 관측 정보가 행성 경계층 상부까지 효과적으로 전달되어 하층 대기 구조를 충분히 보정할 수 있는 것으로 나타났다. 반면 4.0 km에서는 추가적인 성능 개선이 나타나지 않아, 관측 정보의 유효 영향 범위가 경계층 규모 내에 제한됨을 시사한다. 앙상블 팽창계수를 1로 설정하여($\beta = 1.0$) 단계적인 민감도 실험 결과 HLW와 VLW는 각각 200 km와 2.0 km로 결정하였다.

3.3. 앙상블 멤버 수 민감도

앞선 민감도 실험을 통해 EnSRF 자료 동화 시스템의 최적 파라미터는 팽창 계수 1.0, 수평 국지화 규모 200 km, 그리고 연직 국지화 규모 2.0 km로 도출되었다. 본 연구에서는 이러한 최적 조건을 기반으로, 앙상블 기반 자료 동화의 핵심 요소인 앙상블 멤버 수

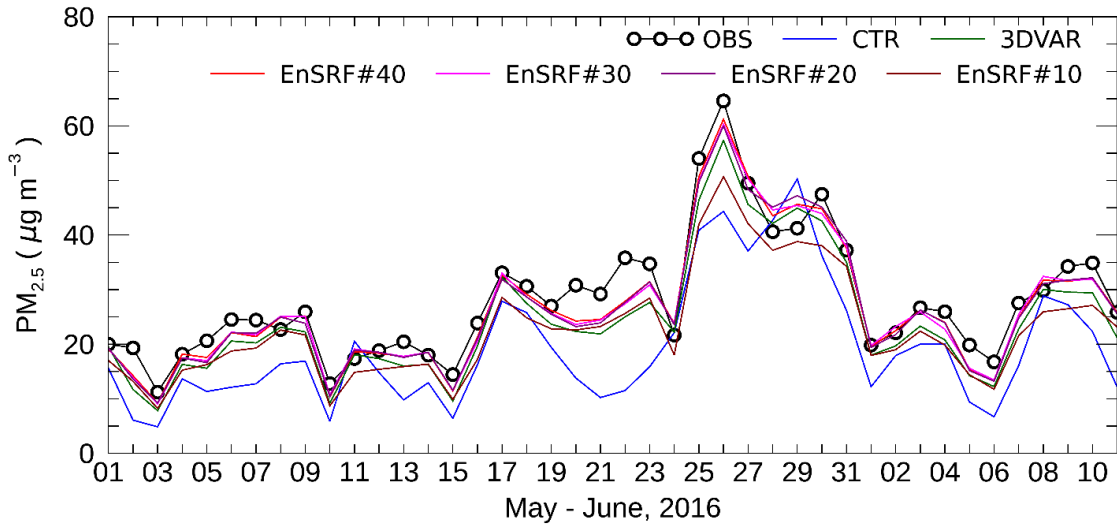


Fig. 3. Daily variations of PM_{2.5} during the period of the KORUS-AQ campaign. CMAQ output for the 6 h reanalysis experiments with the EnSRF methods for the ensemble members of 40, 30, 20, and 10 are plotted with red line, pink line, purple line, and maroon line, respectively. The same experiment with the 3DVAR method are plotted with green line. The control experiment (CTR) and observations (OBS) are shown with black line with open circles, and blue line, respectively. Values were prepared by the aggregation of daily averages at all the observation sites in South Korea.

($N = 10, 20, 30, 40$)가 PM_{2.5} 분석장 산출 및 예측 성능에 미치는 영향을 상세히 분석하였다. Fig. 3은 전체 연구 기간인 KORUS-AQ 기간 동안 우리나라 지상 165개 관측소에서 수집된 PM_{2.5} 농도의 일평균 시계열 변화를 보여준다. 자료 동화를 수행하지 않은 대조군(CTR, 파란색 실선)은 관측치(OBS, 검은색 원)를 지속적으로 과소 산정하는 경향을 보였으나, 모든 EnSRF 실험군과 3DVAR는 이를 획기적으로 개선하였다. 특히 5월 중순 이후 발생하는 고농도 사례(5월 25~31일)에서 양상블 멤버 수가 증가할수록 고농도 모의 성능이 향상됨을 확인할 수 있다. 양상블 멤버가 10인 경우(EnSRF#10, 갈색)는 3DVAR와 유사한 수준의 보정 성능을 보였으나, 멤버 수가 40(EnSRF#40, 빨간색)으로 증가함에 따라 관측치와의 오차가 가장 작게 나타났다.

Fig. 4는 최적화된 초기 조건을 바탕으로 수행된 48시간 예측 실험 결과를 1일차(Fig. 4a)와 2일차(Fig. 4b)로 구분하여 제시하고 있다. 예보 1일차에서는 양상블 기반 기법들이 3DVAR보다 월등히 높은 예측 정확도를 유지하는 반면, 예보 시간이 경과하여 2일차에 접어들면 초기 조건 개선 효과가 서서히 감

쇄하며 모든 실험군이 대조군(CTR) 방향으로 수렴하는 경향을 보인다. 그러나 주목할 점은 EnSRF#40과 #30 케이스가 2일차 예보에서도 타 실험군 대비 상대적으로 낮은 오차를 유지한다는 것이다. 이는 충분한 수의 양상블 멤버가 확보될 때 초기 오차 공분산의 통계적 신뢰도가 높아져 예보 성능의 지속성이 향상됨을 의미한다

재분석 및 예측 과정에서의 초미세먼지의 평균 일 변화 특성을 Fig. 5와 Fig. 6에 상세히 나타내었다. 모델은 공통적으로 대기 혼합고가 높아지는 주간(00~06 UTC)에 농도가 낮고, 대기가 안정화되는 야간(12~18 UTC)에 농도가 높아지는 전형적인 패턴을 보였다. 하루 4회 자료 동화를 수행한 재해석 실험(또는 6시간 예측)은 양상블 멤버 수가 많을수록 주간의 과소평가 문제가 효과적으로 해소되었으나, 야간에는 모든 실험군에서 실제 관측보다 농도를 높게 모의하는 경향이 관찰되었다(Fig. 5). 이는 기상 모델(WRF)의 야간 경계층 높이(PBLH) 과소산정에 따른 계통적 오차로 판단되며, 자료 동화를 통한 초기 조건 개선만으로는 완전히 해결되지 않는 물리적

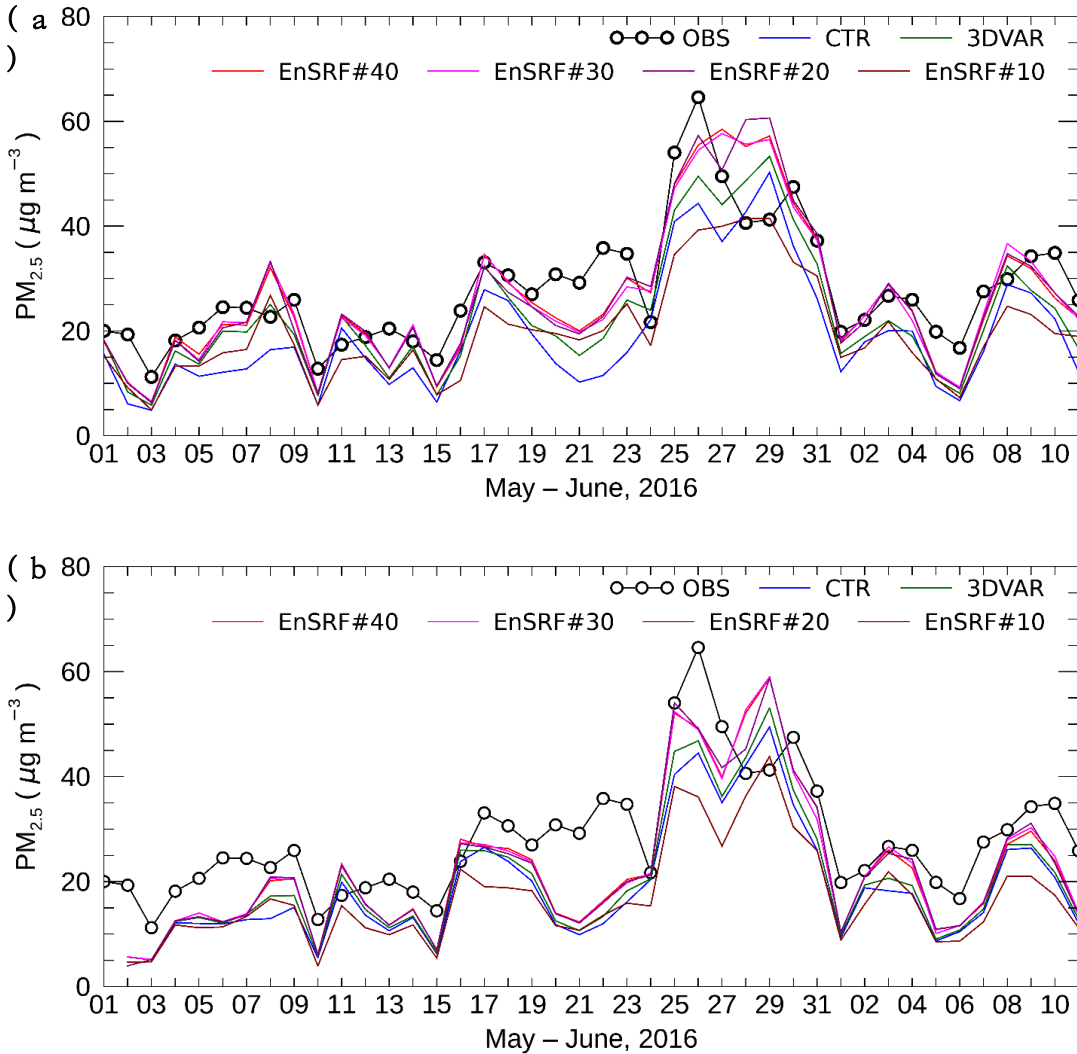


Fig. 4. The same as in Fig. 3, except for the 48 h prediction experiments. (a) Predictions for the first 24 h, and (b) Predictions for the last 24 h.

한계를 보여준다. 하지만, 여기서 확인할 수 있는 명확한 결론은 앙상블 멤버가 최소 20개 이상은 되어야 한다는 점이다. EnSRF#10의 경우 야간(12UTC와 18UTC)에는 자료 동화를 수행하지 않은 CTR에 비해 예측 정확도가 떨어졌다.

48시간 예보 실험(Fig. 6)에서는 예보 시간이 흐름에 따라 앙상블 멤버 수에 따른 성능 차이가 주간 시간대에 더욱 극명하게 드러나며, EnSRF#40이 가장 안정적인 일변화 곡선을 산출하였다. 48시간 예

측은 하루 중 00UTC에 수행된 자료 동화 결과를 초기장으로 하여 진행된다. EnSRF#10의 경우 관측을 상당히 과소 예측하여 자료 동화를 수행했음에도 초미세먼지 농도 예측을 실패하는 결과를 보였다. 앙상블 수가 20개 이상인 모든 경우에서 3DVAR의 지상 $PM_{2.5}$ 농도에 비해 높은 농도를 유지하며 전반적으로 관측에 가까운 결과를 보였다. 특히, 2일차 예측성에 있어 3DVAR에 비해 좋은 성능이 나타났다.

예보 시간(0~48시간)에 따른 주요 통계 지표의 변화

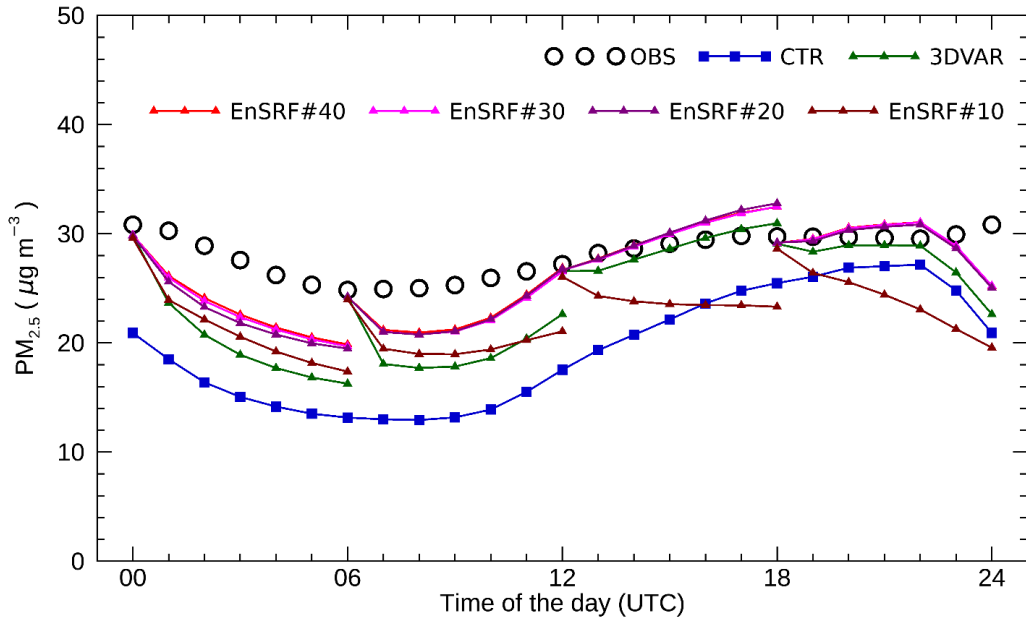


Fig. 5. Diurnal variations of the averaged $PM_{2.5}$ for the 6 h reanalysis experiments. Model data were extracted from all the observation locations in South Korea during the period of the KORUS-AQ campaign. The color labels are the same as in Fig. 3, except for the symbols.

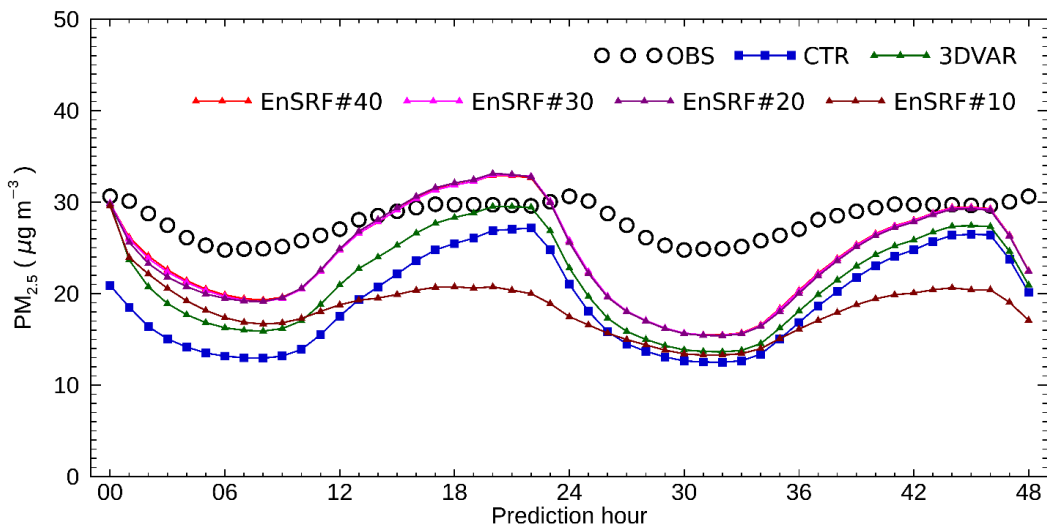


Fig. 6. The same as in Fig. 5, except for the 48 h prediction experiments. Here, the diurnal averaged observations (OBS) were used for the evaluation of 48 h predictions.

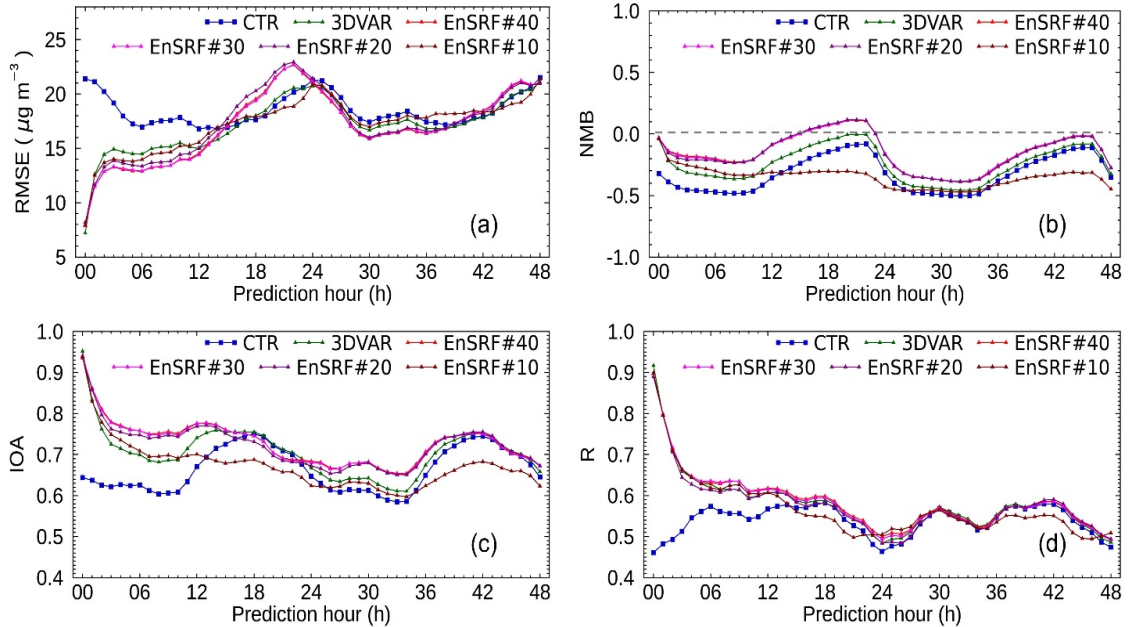


Fig. 7. The 48 h variations of (a) Root-mean-square errors (RMSE), (b) Normalized mean biases (NMB), (c) Index of agreements (IOA), and (d) Correlation coefficients (R). Blue lines with squares, green lines with triangles, red lines with triangles, pink lines with triangles, purple lines with triangles, and maroon lines with triangles represent the statistical metrics estimated from the outputs from control experiment (CTR) without the DA, 3DVAR, EnSRF runs with the ensemble size of 40, 30, 20, and 10, respectively.

를 분석한 Fig. 7은 멤버 수 증가에 따른 정량적 개선 효과를 뒷받침한다. RMSE (Fig. 7a)는 예보 초기 00시부터 멤버 수에 비례하여 뚜렷한 차이를 보이며, EnSRF#40이 전 구간에서 최저 오차를 기록하였다. 특히 NMB (Fig. 7b) 분석 결과, EnSRF#10은 예보 중기 이후 3DVAR보다 더 큰 음의 편차를 보이기도 하였으나, 멤버 수가 20명 이상 확보될 경우 일관되게 3DVAR보다 우수한 편차 보정 성능을 나타냈다. IOA (Fig. 7c)와 상관계수(R, Fig. 7d) 역시 멤버 수 40에서 가장 높은 값을 보였으며, 이는 앙상블 멤버 수가 늘어날수록 흐름 의존적 배경오차 공분산의 샘플링 오차가 감소하여 모델 격자 간의 상관관계가 보다 현실적으로 모의되었기 때문으로 해석된다. 모든 통계 지표(RMSE, NMB, IOA, R)에서 앙상블 멤버 수가 20이상으로 수행되어야만 우수한 예측 성능을 보이는 것으로 나타났다. 특히 EnSRF#40은 재해석 단계에서 3DVAR 대비 약 20% 이상의 추가적인 오차 감소를 달성하였다. 앙상블 멤버 수가 증가함에 따라 예측 성능

은 전반적으로 향상되었으며, 40개 멤버에서 가장 낮은 RMSE와 높은 IOA를 기록하였다. 그러나 30개 이상의 멤버 구성에서는 성능 향상이 제한적으로 나타나는 포화 현상이 확인되었다. 따라서 계산 비용 대비 효율성을 고려할 때, 현업 예보의 운영 관점에서 30개 이상의 앙상블 멤버를 구성하는 것이 가장 합리적인 선택이다.

4. 결론

본 연구에서는 CMAQ-EnSRF 자료 동화 시스템의 고도화를 위해 $PM_{2.5}$ 예측 성능에 결정적인 영향을 미치는 네 가지 핵심 파라미터에 대한 정밀 민감도 실험을 수행하였다. 2016년 동북아시아 KORUS-AQ 기간을 대상으로 수행된 실험을 통해 다음과 같은 결론을 도출하였다. 첫째, 앙상블 팽창 계수(β)의 최적화는 필터 발산을 방지하고 자료 동화의 안정성을 확보하는데 필수적이다. 실험 결과, 팽창 계수를 적용하지 않았

을 때보다 1.0으로 설정했을 때 RMSE가 약 30% 이상 감소하였으며, 이는 대기질 모델의 비선형성으로 인해 급격히 감소하는 배경 오차 분산을 효과적으로 보정했기 때문으로 분석된다. 둘째, 수평 및 연직 국지화 규모(HLW와 VLW)는 관측 정보의 공간적 전파 범위를 결정짓는 핵심 요소이다. 수평적으로는 200 km의 영향 반경을 설정할 때 광역적인 오염원 분포 모의에 가장 적합한 IOA 수치를 보였다. 특히 연직 국지화 규모를 2.0 km로 설정할 경우, 지상 관측 정보가 대기 하층뿐만 아니라 행성 경계층 상부까지 물리적으로 타당하게 전달되어 연직 농도 프로파일의 계통적 오차를 효과적으로 개선함을 확인하였다. 셋째, 앙상블 멤버 수의 증가에 따라 자료 동화 시스템의 통계적 신뢰도가 향상되었다. 앙상블 멤버가 10에서 40으로 증가함에 따라 RMSE, 상관계수(R) 등 모든 통계 지표가 점진적으로 개선되었으며, 특히 40개의 멤버로 앙상블을 사용할 때 3DVAR 대비 약 20% 이상의 추가적인 예보 성능 향상을 달성하였다. 다만, 멤버 수가 30개 이상이 되면 예보 성능의 개선 폭이 완만해지는 경향이 나타나 계산 비용의 효율성을 고려한다면 30개의 앙상블 수가 합리적인 것으로 판단한다.

본 연구의 결과는 앙상블 기반 대기질 자료 동화 시스템을 구축하고 운영하는 데 있어 구체적인 파라미터 가이드라인을 제공한다는 점에서 학술적이고 실용적인 가치가 있다. 이를 통해, 대기질 예측 시스템의 정확도 향상뿐만 아니라, 실시간 운영이 가능한 자료동화 체계 구축이 가능하다. 하지만, 자료동화의 파라미터를 결정할 수치 실험 기간이 특정 기간(KORUS-AQ)과 지상 관측 자료에 국한되어 수행되었으므로, 다양한 계절 및 다른 지역에 대한 추가 검증이 필요하다. 향후 연구에서는 고정된 파라미터 값을 넘어 기상 조건에 따라 실시간으로 변화하는 적응형 오차 공분산 국지화 및 앙상블 팽창 기법을 도입함으로써 예보 시스템의 정확도를 더욱 향상시킬 수 있는 방안을 고려하고 있다. 또한, 예보 대상 영역 및 물질이 달라질 경우에 대한 추가 민감도 실험도 요구된다.

감사의 글

이 연구는 2024년도 대구교육대학교 교내 연구비 지원에 의해 수행되었습니다.

REFERENCES

- Bocquet, M., Elbern, H., Eskes, H., Hirtl, M., Žabkar, R., Carmichael, G. R., Flemming, J., Inness, A., Pagowski, M., Pérez Camacho, J. L., Saide, P. E., San Jose, R., Sofiev, M., Vira, J., Baklanov, A., Carnevale, C., Grell, G., Seigneur, C., 2015, Data assimilation in atmospheric chemistry models: Current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models, *Atmos. Chem. Phys.*, 15, 5325–5358.
- Byun, D., Schere, K. L., 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.
- Chen, D., Liu, Z., Ban, J., Zhao, P., Chen, M., 2019, Retrospective analysis of 2015–2017 wintertime PM_{2.5} in China: Response to emission regulations and the role of meteorology, *Atmos. Chem. Phys.*, 19, 7409–7427.
- Constantinescu, E. M., Sandu, A., Chai, T., Carmichael, G. R., 2007, Assessment of ensemble-based chemical data assimilation in an idealized setting, *Atmos. Environ.*, 41, 18–36.
- Dash, U. K., Park, S. Y., Song, C. H., Yu, J., Yumimoto, K., Uno, I., 2023, Performance comparisons of the three data assimilation methods for improved predictability of PM_{2.5}: Ensemble Kalman filter, ensemble square root filter, and three-dimensional variational methods, *Environ. Pollut.*, 322, 121099.
- Elbern, H., Strunk, A., Schmidt, H., Talagrand, O., 2007, Emission rate and chemical state estimation by 4-dimensional variational inversion, *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 3749–3769.
- Gaspari, G., Cohn, S. E., 1999, Construction of correlation functions in two and three dimensions, *Q. J. R. Meteor. Soc.*, 125, 723–757.
- Guenther, A. B., Jiang, X., Heald, C. L., Sakulyanontvittaya, T., Duhl, T., Emmons, L. K., Wang, X., 2012, The model of emissions of gases and aerosols from nature version 2.1 (MEGAN2.1): An Extended and updated framework for modeling biogenic emissions, *Geosci. Model Dev.*, 5, 1471–1492.
- Ha, S., Liu, Z., Sun, W., Lee, Y., Chang, L., 2020, Improving air quality forecasting with the assimilation of GOCI aerosol optical depth (AOD) retrievals during the KORUSAQ period, *Atmos. Chem. Phys.*, 20, 6015–6036.

- Jang, Y., Lee, Y., Kim, J., Kim, Y., Woo, J. H., 2020, Improvement China point source for improving bottom-up emission inventory, Asia-Pac. J. Atmos. Sci., 56, 107–118.
- Kalnay, E., 2002, Atmospheric modeling, data assimilation and predictability, 1st ed., Cambridge University Press, Cambridge.
- Lee, S., Song, C. H., Han, K. M., Henze, D. K., Lee, K., Yu, J., Woo, J. H., Jung, J., Choi, Y., Saide, P. E., Carmichael, G. R., 2022, Impacts of uncertainties in emissions on aerosol data assimilation and short-term PM_{2.5} predictions over Northeast Asia, Atmos. Environ., 271, 118921.
- Lin, C., Wang, Z., Zhu, J., 2008, An Ensemble Kalman filter for severe dust storm data assimilation over China, Atmos. Chem. Phys., 8, 2975–2983.
- Park, S. Y., Dash, U. K., Yu, J., Yumimoto, K., Uno, I., Song, C. H., 2022a, Implementation of an ensemble Kalman filter in the community multiscale air quality model (CMAQ model v5.1) for data assimilation of ground-level PM_{2.5}, Geosci. Model Dev., 15, 2773–2790.
- Park, S. Y., Dash, U. K., Yu, J., 2022b, Length scale analyses of background error covariances for EnKF and EnSRF data assimilation, Atmosphere, 13, 160.
- Peng, Z., Liu, Z., Chen, D., Ban, J., 2017, Improving PM_{2.5} forecast over China by the joint adjustment of initial conditions and source emissions with an ensemble Kalman filter, Atmos. Chem. Phys., 17, 4837–4855.
- Skachko, S., Errera, Q., Ménard, R., Christophe, Y., Chabrilat, S., 2014, Comparison of the ensemble Kalman filter and 4D-Var assimilation methods using a stratospheric tracer transport model, Geosci. Model Dev., 7, 1451–1465.
- Skamarock, W. C., Klemp, J. B., Dudhia, J., Gill, D. O., Barker, D., Duda, M. G., Huang, X., Wang, W., Powers, J. G., 2008, A Description of the advanced research WRF Version 3, University Corporation for Atmospheric Research, no. NCAR/TN475+STR.
- Whitaker, J. S., Hamill, T. M., 2002, Ensemble data assimilation without perturbed observations, Mon. Weather Rev., 130, 1913–1924.
- Whitaker, J. S., Hamill, T. M., 2012, Evaluating methods to account for system errors in ensemble data assimilation, Mon. Weather Rev., 140, 3078–3089.
- Wiedinmyer, C., Akagi, S. K., Yokelson, R. J., Emmons, L. K., AlSaadi, J. A., Orlando, J. J., Soja, A. J., 2011, The Fire INventory from NCAR (FINN): A High resolution global model to estimate the emissions from open burning, Geosci. Model Dev., 4, 625–641.
- Wu, H., Kong, L., Tang, X., Zhu, L., Zhu, J., Wang, J., 2023, Air quality forecasting with inversely updated emissions for China, Environ. Sci. Technol. Lett., 10(8), 655–661.

• Professor. Soon-Young Park
Department of Science Education, Daegu National
University of Education
spark@dnue.ac.kr