

Utilization of explainable machine learning to quantify the relative roles of rain and pollutant concentration in wet deposition

Young-Hee Ryu¹, Seung-Ki Min²

¹Yonsei University

²POSTECH

Wet deposition is an important removal process of aerosols and soluble gases in the atmosphere, and so a solid understanding of wet deposition is critical to accurately assess the influence of atmospheric trace elements (e.g., gases and metals) on ecosystem and regulate them. The amount of wet deposition flux reaching the ground broadly depends on two variables, rainfall amount and pollutant concentration in the atmosphere. Over East Asia, neither rainfall nor pollutant concentration sufficiently explains the magnitude of wet deposition or its interannual variability. Therefore, this study aims to unravel how rain and atmospheric pollutant concentrations contribute to wet deposition and its variation across East Asia. The Weather Research and Forecasting model coupled with Chemistry (WRF-Chem) is used to simulate 17 spring seasons (2003–2019) air quality over East Asia. The model evaluation against Acid Deposition Monitoring Network in East Asia (EANET) shows reasonable performance in reproducing sulfate, nitrate, and ammonium wet deposition fluxes and their interannual variations. By taking the advantage of high spatially- and -temporally resolved model outputs, we develop 21 random forest models for 21 EANET stations that predict 3-hourly wet deposition flux; and employ the SHapley Additive exPlanations (SHAP) to understand the quantitative contributions of rain and pollutant concentrations to wet deposition flux. Rain and liquid water path (grouped as rain, hereafter) is found to be the most influential variable for almost all stations as expected. However, the contribution of rain relative to that of pollutant concentration (including surface concentration and total-column values) greatly varies across sites. For heavily polluted stations, the contribution of rain is much larger (up to 4 times) than that of pollutant concentration. For remote stations, the ratio is close to 1, meaning that rain and pollutant concentration are almost equally important. This study sheds light on integrating an atmospheric model, a machine learning model, and an XAI method to better understand how complicated physical processes are influenced by many variables in an atmospheric model.

Key words: wet deposition, WRF-Chem, machine learning, XAI, SHAP

Nonlinear changes in urban heat island intensity, urban breeze intensity, and urban air pollutant concentration with roof albedo: Idealized ensemble simulations

Kyeongjoo Park, Jong-JinBaik

School of Earth and Environmental Sciences, Seoul National University

Understanding how the urban heat island (UHI) intensity and urban air quality change with roof albedo is important to comprehensively assess cool-roof effects on health risks for urban residents. This study systematically examines changes in UHI intensity and urban breeze circulation (UBC) with roof albedo and their effects on air pollutant dispersion in urban areas. For this, idealized ensemble simulations with various roof albedos from 0.10 to 0.95 are conducted using the Weather Research and Forecasting (WRF) model. As the roof albedo increases from 0.20 to 0.65, the daytime mean UHI intensity, UBC intensity, and planetary boundary layer (PBL) height in the urban area decrease by 47%, 36%, and 6%, respectively. Due to the decreases in the UBC intensity and PBL height in the urban area, the daytime mean near-surface passive tracer concentration in the urban area increases by 115%. Changes in daytime UHI intensity, UBC intensity, and near-surface tracer concentration in the urban area with roof albedo (α_r) are nonlinear: For $0.10 \leq \alpha_r \leq 0.80$, the sensitivities of daytime UHI intensity, UBC intensity, and near-surface tracer concentration in the urban area to α_r overall increase with increasing α_r . On the other hand, for $\alpha_r > 0.80$, the daytime UHI intensity, UBC intensity, and near-surface tracer concentration in the urban area do not exhibit significant changes with α_r .

Key words: Roof albedo, Urban heat island, Urban breeze circulation, Pollutant dispersion, Cool roof

The dynamics of concentration fluctuations within passive scalar plumes in a turbulent neutral boundary layer

Massimo Cassiani¹, Hamid Ardeshiri², Ignacio Pizzo¹, Pietro Salizzoni³, Massimo Marro³,
Andreas Stohl⁴, Kerstin Stebel¹, Soon-Young Park⁵

¹NILU-Norwegian Institute for Air Research

²Safetec Nordic AS

³University of Lyon

⁴University of Vienna, ⁵Daegu National University of Education

We investigate the concentration fluctuations of passive scalar plumes emitted from small, localised (point-like) steady sources in a neutrally stratified turbulent boundary layer over a rough wall. The study utilises high-resolution Large-Eddy Simulations for sources of varying sizes and heights. The numerical results, which show good agreement with wind-tunnel studies, are used to estimate statistical indicators of the concentration field, including spectra and moments up to the fourth order. These allow us to elucidate the mechanisms responsible for the production, transport, and dissipation of concentration fluctuations, with a focus on the very near field, where the skewness is found to have negative values—an aspect not previously highlighted. The Gamma probability density function is confirmed to be a robust model for the one-point concentration at sufficiently large distances from the source. However, for ground-level releases in a well-defined area around the plume centreline, the Gaussian distribution is found to be a better statistical model. As recently demonstrated by laboratory results, for elevated releases, the peak and shape of the pre-multiplied scalar spectra are confirmed to be independent of the crosswind location for a given downwind distance. Using a stochastic model and

theoretical arguments, we demonstrate that this is due to the concentration spectra being directly shaped by the transverse and vertical velocity components governing the meandering of the plume. Finally, we investigate the intermittency factor, i.e. the probability of non-zero concentration, and analyse its variability depending on the thresholds adopted for its definition.

Key words: Large Eddy Simulation, concentration fluctuation, neutral boundary layer, high-order statistics

※ 본 연구는 2021년도 정부(교육부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업임
(No.2021R1I1A1A01056379)

실제 도시 지표의 공기역학 거칠기 파라미터 산출 방안 평가

이두일, 이상현

공주대학교 대기과학과

공기역학 거칠기 길이와 영면 변위 높이는 지표와 대기 사이의 운동량 교환 과정의 모수화에 주요한 파라미터이다. 도시 기상 모델에 활용하기 위해 다양한 산출 방안이 제시되어 오고 있다. 일본 도쿄와 나고야 지역의 큰에디모사 (Large Eddy Simulation: LES) 모델링을 기반으로 한 Kanda et al. (2013), 무작위적으로 생성한 건물 배치와 LES를 기반으로 한 Zhu et al. (2016), 그리고 이상적인 건물 형태와 이론적 기반으로 제안된 Millward-Hopkins et al. (2013)은 실제 도시 지표에 적용 가능한 대표적인 산출 방안들이다. 이들 산출 방안은 다양한 연구에 활용되고 있으나 산출 방안의 정량적 평가는 연구가 필요하다. 본 연구에서는 LES 모델링을 통해 실제 도시 지표에서 나타날 수 있는 다양한 형태에서 공기역학 거칠기 파라미터를 얻어내고, 이를 이용하여 기존에 제안된 산출 방안의 정확도를 정량적으로 평가하고자 한다. 실제 도시 지표의 다양한 형태 특성을 반영하기 위해 수도권 도시 지역을 대상으로 852 지역을 선정하고 해당 지역의 LES 모델링을 통해 난류에 의한 도시 지표 항력과 거칠기 파라미터들을 산출하였다. 영면 변위 높이 파라미터는 평가한 산출 방안 모두 과대모의 경향을 보였으며, 특히 낮은 영면 변위 높이 범위에서 그 오차가 크게 나타났다. Millward-Hopkins et al. (2013)은 상대적으로 높은 정확도를 보였으나 거칠기 길이 파라미터의 크기가 커질수록 오차가 증가하는 경향을 보였다. Kanda et al. (2013)은 낮은 거칠기 길이 범위에서 과대모의 경향을 보였고, 거칠기 길이 크기가 커질수록 과소모의 하였다. 한편, Zhu et al. (2016)은 평가한 산출 방안들 중 가장 큰 오차를 보였다.

Key words: 지표 항력, 공기역학 거칠기 파라미터, 도시 형태 변수, 큰에디모사

Hybrid Mass balance/4D-Var 역모델링 기법을 이용한 NO_x 배출량 시공간 분포 보정

문정혁¹, 전원배², 박재형¹, 김동진¹, 최현식¹, 양채영¹, 허민¹, 김우진²

¹부산대학교 지구환경시스템학부

²부산대학교 대기환경과학과

NO_x는 대기 중 오존과 미세먼지 등의 2차 오염물질 생성에 관여하는 주요 전구물질로, 2차 오염물질 농도의 정확한 진단 및 예보를 위해서는 NO_x 배출량의 시공간 분포를 정확하게 산정하는 것이 필수적이다. 배출량 산정 방법에는 크게 상향식 방법과 하향식 방법이 존재한다. 상향식 방법은 배출원에 대한 직접적인 조사를 통해 배출량을 산정하지만 파악되지 않은 배출원에 대한 불확실성이 존재한다. 최근에는 이러한 불확실성을 보완하기 위해 하향식 역모델링 방법을 이용한 연구가 활발히 수행되고 있다. 하향식 역모델링 방법은 관측 자료와 수치 모델 결과를 이용하여 배출량을 역으로 추정하는 방법으로, 상향식 방법에서 파악되지 않은 배출원에 대한 추정이 가능하다. 대표적인 역모델링 방법에는 Mass balance와 4D-Var 방법이 존재한다. Mass balance 방법은 적은 비용으로 배출량의 평균적인 공간 분포에 대한 보정이 가능하지만, 배출량의 시간 변동 보정에는 한계가 있다. 반면, 4D-Var 방법은 adjoint model이 필요하여 많은 계산 비용이 요구되지만 배출량의 시간 변동 보정에 효과적이다. 따라서, 본 연구에서는 Mass balance와 4D-Var 방법의 장점을 결합한 Hybrid 방법을 이용하여 NO_x 배출량의 시공간분포를 보정하고자 하였다. 실제 관측 자료를 이용한 역모델링에 앞서, 가상의 관측 자료를 이용하여 배출량의 시공간 보정 효과를 정량적으로 평가하고자 하였다. 본 연구의 역모델링을 위해 기상 수치모델로는 WRF 3.8.1 모델과 대기질 수치모델로는 최근에 개발된 CMAQ 5.0 버전의 adjoint 모델을 이용하였다. 결과적으로, Mass balance 방법을 통해 NO_x 배출량의 공간 분포에 대한 오차가 감소하였고, 4D-Var 방법을 통해 NO_x 배출량의 시간적 변화에 대한 보정이 가능하였다. 본 연구는 가상 실험을 기반으로 한 이상적인 역모델링 결과를 제시하였으며, 향후 실제 관측 자료를 활용한 역모델링 연구에 기여할 것으로 기대된다.

Key words: 배출량 보정, 역모델링, CMAQ, 자료동화, NO_x

※ 이 연구는 2024년 대한민국 교육부와 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임 (NRF-2023R1A2C1002608).

중국 농작물 연소에 의한 황산염 생성 및 수송 특성 분석

김동진¹, 전원배², 박재형¹, 문정혁¹, 허민¹, 김우진²

¹부산대학교 지구환경시스템학부

²부산대학교 대기환경과학과

세계적으로 발생하는 biomass burning 중 약 23%가 농작물 연소의 형태로 발생한다. 농작물 연소로 인해 배출되는 많은 NO_x , SO_x , NH_3 등의 오염물질은 대기 중 $\text{PM}_{2.5}$ 를 생성하며 주변 국가로 수송될 수 있다. 이러한 $\text{PM}_{2.5}$ 가 대기 중 $\text{PM}_{2.5}$ 농도 상승에 미치는 영향에 대한 연구는 많이 수행되었지만, $\text{PM}_{2.5}$ 의 주요 구성 물질 (NO_3^- , SO_4^{2-} , NH_4^+ 등)의 생성 메커니즘 분석은 부족하다. 농작물 연소에서 배출된 NO_x , SO_x , NH_3 은 NO_3^- , SO_4^{2-} , NH_4^+ 의 전구물질이기 때문에, 대기 중 $\text{PM}_{2.5}$ 농도에 중요한 역할을 한다. 따라서, 본 연구에서는 2015년 11월 제주도의 고농도 미세먼지 사례에 대해 중국의 농작물 연소에서 배출된 오염물질이 수송되면서 나타난 황산염의 생성 과정과 수송 특성을 분석하였다. 농작물 연소 배출량은 1 km 해상도의 전 지구 biomass burning 배출량 인벤토리인 Fire INventory from NCAR (FINN) 1.5 버전을 활용하였으며, 농작물 연소로 분류된 배출량만을 추출해 사용하였다. 농작물 연소 배출량을 Community Multi-scale Air Quality (CMAQ) 5.3.2 버전의 입력 자료로 사용해 대기질 수치 모의를 수행하였다. 대기질 수치 모의 결과, $\text{PM}_{2.5}$ 의 주요 성분 중 $\text{PM}_{2.5}$, NO_3^- , NH_4^+ , OC, EC의 농도는 농작물 연소가 가장 많이 발생한 중국 북동부 지역에서 높게 나타났다. 하지만, 이와 달리 SO_4^{2-} 의 농도는 산둥 반도와 황해에서 증가하는 모습을 보였다. 이를 분석하기 위해 CMAQ에서 제공하는 Sulfur Tracking Model (STM)과 Integrated Reaction Rate (IRR) 분석을 활용하였다. SO_4^{2-} 농도 변화에 대한 STM 분석을 수행한 결과, H_2O_2 에 의한 산화 반응 ($\text{H}_2\text{O}_2 + \text{S(IV)} = \text{S(VI)} + \text{H}_2\text{O}$)에 의해 대부분의 SO_4^{2-} 가 생성된 것으로 밝혀졌다 (1.44, 80.49%). 이 때, H_2O_2 는 농작물 연소 시 직접 배출되는 오염물질이 아니기 때문에 H_2O_2 에 대한 IRR 분석을 수행하였다. H_2O_2 는 HO_2 에 의한 자가 반응 ($\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O}_2$)으로 주로 생성되었다. 또한, H_2O_2 와 마찬가지로 HO_2 에 대한 IRR 분석을 수행한 결과, HO_2 는 농작물 연소 시 배출된 NO_x 에 의해 생성된 PNA의 분해 반응 ($\text{PNA} = \text{NO}_2 + \text{HO}_2$)으로 생성되었다. 선행 연구에 따르면 인위적 배출량에 의해 국내로 수송되는 SO_4^{2-} 의 생성은 주로 OH에 의한 SO_2 에 산화 반응 ($\text{OH} + \text{SO}_2 = \text{H}_2\text{SO}_4 + \text{HO}_2$)에 기인하는 것으로 알려져있다. 하지만, 본 연구에서는 농작물 연소에서 배출된 다량의 NO_x 가 대기 중 HO_2 , H_2O_2 을 생성하였으며, H_2O_2 는 SO_2 를 산화시켜 SO_4^{2-} 을 생성해 인위적 배출량에 의한 SO_4^{2-} 생성 메커니즘과 다른 결과를 보였다.

Key words: CMAQ, FINN, 농작물 연소, Sulfate, $\text{PM}_{2.5}$

※ 이 연구는 2024년 대한민국 교육부와 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임(NRF-2023R1A2C1002608)