



논문

주성분분석방법을 이용한 복사휘도 시뮬레이션 기반 산출 파장구간 변화에 따른 화산지역 고농도 이산화황 원격측정 정확도 조사 연구

Investigation of the Effect of Spectral Fitting Windows on the SO₂ Retrieval Based on the Radiance Simulation Using Principle Component Analysis

양지원, 최원이, 박준성, 김대원, 강형우, 이한림*

부경대학교 지구환경시스템과학부 공간정보시스템공학전공

접수일 2018년 11월 16일
 수정일 2018년 11월 23일
 채택일 2018년 11월 26일

Received 16 November 2018
 Revised 23 November 2018
 Accepted 26 November 2018

*Corresponding author
 Tel : +82-(0)51-629-6688
 E-mail : hllee@pknu.ac.kr

Jiwon Yang, Wonei Choi, Junsung Park, Daewon Kim, Hyeongwoo Kang, Hanlim Lee*

Division of Earth Environmental System Science Major of Spatial Information Engineering, Pukyong National University

Abstract In order to quantify the SO₂ retrieval error induced by the spectral fitting windows, we, for the first time, carried out the retrieval of high level SO₂ emitted from volcanic site based on the synthetic hyperspectral radiances and Principle component analysis (PCA). Multiple spectral windows with various centers of wavelengths have been used to investigate the optimized spectral fitting window for the PCA method. Synthetic radiances were generated using the radiative transfer model with the inputs of the column information of SO₂ and O₃ as well as aerosol optical depth (AOD) obtained from the real OMI measurements. The slant column retrieval errors tend to decrease with increasing the interval of spectral fitting windows from 10 to 20 nm due to the effects of various effective absorption light path lengths. The relationship between central wavelengths and retrieval errors is found to be negligible compared to the effect of the spectral fitting window length. It is revealed that the spectral fitting range from 325 to 337 nm is optimal for the slant column density (SCD) retrieval of high level SO₂ using the PCA method. The SCD retrieval error is found to be 18% in the optimal fitting range from 325 to 337 nm, which is lower than 22% to 31% found in other spectral fitting windows. When the optimal fitting range is used, the linear regression between true SO₂ SCD and those retrieved shows the correlation coefficient of 1.00 and the slope of 0.97. The optimal spectral fitting range, found in this present study, is expected to be useful for the high SO₂ SCD retrieval, especially, from the many volcanic sites using the recently launched TROPOspheric Monitoring Instrument (TROPOMI) as well as other future GEO sensors such as Geostationary Environment Monitoring Spectrometer (GEMS), Sentinel-4, and Tropospheric Emissions: Monitoring of Pollution (TEMPO).

Key words: Sulfur dioxide, Hyperspectral remote sensing, OMI, Trace gas retrieval, Principle component analysis

1. 서론

이산화황(Sulfur dioxide; SO₂)은 화석연료의 연소 및 금속 용융과 같은 인위적 요인 및 화산 폭발과 같은 자연적 요인에 의해 대기 중에 주입되며, 황산염 에어로졸의 전구물질로 작용한다(Theys *et al.*, 2017;

Bobrowski *et al.*, 2010; McCormick *et al.*, 1995). 황산염 에어로졸은 대기 중에서 구름 응결핵으로 작용함으로써 단기적인 대기 질 오염뿐만 아니라 직간접적으로 장기적 대기의 복사균형에 영향을 미친다(Bobrowski *et al.*, 2010; Lohmann and Feichter, 2005). 전 지구 이산화황 발생량의 70% 이상은 인위적 요인

에 의해 지표 부근에 분포하지만, 그 농도는 매우 낮고 대류권 내 이산화황의 생존기간은 대략 1~2일로 비교적 짧다(Rix *et al.*, 2009). 이에 반해, 화산 폭발로부터 배출된 고농도의 이산화황은 전체 이산화황 발생량 중 적은 부분을 차지하고 있지만, 직접적으로 성층권에 주입됨으로써 수 일 간 대기 중에 부유하며 장거리로 수송되게 된다. 이로부터 생성된 많은 양의 성층권 황산염 에어로졸은 냉각효과를 일으키며 전 지구 기후 시스템 및 대기 순환에 큰 영향을 미칠 수 있다(Robock *et al.*, 2007; Lohmann and Feichter, 2005; Stenchikov *et al.*, 2002; Robock and Mao, 1995; McCormick *et al.*, 1995; Krueger, 1983). 따라서 화산지역에서의 현장 측정 기술의 한계점을 극복하고, 전구규모의 이산화황 관측을 통해 화산지역의 이산화황 배출량을 정량화하기 위해 위성을 이용한 이산화황 원격 측정이 활발히 이루어지고 있다. 화산지역의 이산화황 측정은 Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS; Krueger, 1983) 위성 센서를 시작으로, 초분광 센서인 Global Ozone Monitoring Experiment (GOME; Burrows *et al.*, 1999; Eisinger and Burrows, 1998), GOME-2 (Nowlan *et al.*, 2011; Rix *et al.*, 2009), Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Chartography (SCIAMACHY; Lee *et al.*, 2008)는 대기 중 다양한 미량기체의 총적분농도 산출에 이용되고 있는 차등흡수분광(Differential Optical Absorption Spectroscopy; DOAS) 기법을 적용하여 이산화황의 총적분농도를 산출한다. 그리고 미국우주항공국(National Aeronautics and Space Administration; NASA) EOS-Aura 위성에 탑재된 Ozone Monitoring Instrument (OMI; Li *et al.*, 2017; Yang *et al.*, 2007)는 오존의 흡수와 같은 강한 산란 및 흡수에 의해 이산화황의 흡수특성이 뚜렷하지 않은 점을 보완하고자 고안해낸 주성분분석(Principle Component Analysis; PCA)방법을 이용하여 이산화황 총적분농도를 산출해오고 있다.

대부분의 위성으로부터 이산화황을 산출할 때 이용되고 있는 차등흡수분광 기법은 이산화황의 흡수

특성이 가장 뚜렷하게 나타나는 300~325 nm 파장구간을 이용하여 화산지역에서 발생하는 대량의 이산화황을 산출할 경우, 고농도 이산화황의 강한 흡수로부터 발생하는 비선형성과 이산화황 흡수의 포화로 인해 이산화황을 과소 추정하는 결과를 야기하는 것으로 보고 된 바 있다(Theys *et al.*, 2015; Richter *et al.*, 2009; Yang *et al.*, 2007). 최근 발사된 Sentinel-5p의 TROPospheric Monitoring Instrument (TROPOMI; Veefkind *et al.*, 2012) 센서는 이러한 문제를 극복하기 위하여 이산화황 경사층적분농도(Slant column density; SCD)에 따라 산출 파장구간(Fitting window)을 다르게 적용하는 Multi-window DOAS 이산화황 산출 알고리즘을 개발하였으며, 화산지역에서의 약 15 DU 이상의 이산화황 경사층적분농도 산출에는 325~335 nm, 약 250 DU 이상의 이산화황 경사층적분농도 산출에는 360~390 nm의 파장구간을 이용한다. 이러한, Multi-window DOAS을 이용한 고농도 이산화황 산출에서는 20%의 산출에러를 갖는 것으로 나타났다(Theys *et al.*, 2017). 하지만, 최근 OMI 센서의 원시자료로부터 이산화황을 산출하기 위해 개발된 주성분분석방법을 이용한 이산화황 산출에는 다중 파장구간이 적용된 바가 없으며, 특히 주성분분석방법을 이용한 화산지역의 이산화황 경사층적분농도를 산출한 연구는 수행된 바가 없다.

위성기반의 원격 측정은 넓은 영역을 짧은 시간 동안에 관측할 수 있지만, 대기 중 많은 간섭과 우주 공간에서의 매우 낮은 주변 온도, 강한 우주 방사선에 노출되는 등의 관측 환경으로 지상 기반의 원격측정에 비해 큰 불확실성을 갖는 것으로 알려져 있다(Lee, 2013). 이러한 이유로, 위성 관측 자료의 검증을 통해 위성 산출물의 정확도를 이해하는 것이 필수적이지만(Lee, 2013; Boersma *et al.*, 2007), 위성 기반 이산화황 산출물 검증을 위한 화산지역에서의 지상 기반 원격측정 자료는 부재한 실정이다. 따라서, 본 연구에서는 처음으로 주성분분석방법을 이용하여 복사 전달모델로부터 모의된 위성 관측 기반의 복사휘도로부터 화산지역의 이산화황 경사층적분농도 산출을

시도하였으며, 주성분분석방법에서 고농도 이산화황 산출에 최적화된 산출 파장구간을 적용하기 위해 다양한 산출 파장구간에 대한 이산화황 산출 민감도를 조사하였다.

2. 연구 방법

2.1 주성분분석방법 (Principle component analysis; PCA)

본 연구에서 이산화황 산출을 위하여 사용된 주성분분석방법은 이산화황 산출에 이용되는 자외선 구간에서 대기 중 오존의 흡수와 같은 강한 산란 및 흡수에 의해 이산화황의 흡수특성이 뚜렷하게 나타나지 않는 점을 개선하기 위하여 개발되었다(Li *et al.*, 2013). 차등흡수분광 기법에서는 실험실에서 측정한 이산화황 및 오존의 흡수단면적과 회전 라만 산란 (Rotational Raman scattering)에 의해 나타나는 스펙트럼 특성 정보를 이산화황 산출에 이용한다. 주성분분석방법 또한 차등흡수분광 기법을 기반으로 하지만, 주성분분석방법을 이용한 이산화황 산출에서는 다변량 통계 분석방법 중의 하나인 주성분분석방법을 이용하여 매우 낮은 농도의 이산화황이 포함된 다수의 복사휘도 값들로부터 주성분(Principle component, PC)을 직접적으로 추출한다. 이러한 주성분들을 이산화황 산출에 사용함으로써 물리적으로 설명하기 어려운 스펙트럼 특성에 의해 발생하는 이산화황 산출 불확실성을 감소시키고자 하였다. 주성분분석방법에 의하여 추출된 주성분들은 복사휘도 값들을 가장 대표하는 스펙트럼 특성뿐만 아니라, 오존 흡수 또는 회전 라만 산란과 같은 자외선 파장구간에서 간섭이 크게 나타나는 물리적 과정 또는 파장 이동(Wavelength shift)과 같은 관측 기기에 대한 측정 세부사항을 나타낼 수 있다. 주성분들과 이산화황 흡수단면적을 이용한 이산화황의 경사층적분농도를 산출하는 식은 차등흡수분광법의 식을 기반으로 하여 식(1)과 같이 표현될 수 있다.

$$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = \sum_{i=1}^{n_v} \omega_i v_i - S_{SO_2} \sigma_{SO_2}, \quad (1)$$

식(1)에서, 왼쪽 항은 대기 상한에서의 태양 복사조도 (I_0)와 센서로부터 관측된 지구 복사휘도 (I)의 비의 자연로그함수로서 정의되며, n_v 는 주성분분석방법으로부터 추출된 n_v 개의 주성분을 나타내며, ω 는 식(1)의 오른쪽 항과 왼쪽 항의 선형 피팅으로부터 계산된 주성분들의 계수를 나타낸다. σ_{SO_2} 은 이산화황의 흡수단면적을 나타내며, S_{SO_2} 는 ω 와 마찬가지로 식(1)의 선형 피팅으로부터 계산된 이산화황 흡수단면적의 계수, 즉 이산화황의 경사층적분농도를 나타낸다. 식(1)을 이용한 선형 피팅은 이산화황 경사층적분농도 산출에 대하여 최적화된 산출 파장을 이용하게 되며, 본 연구에서는 주성분분석방법에 최적화된 화산지역 고농도 이산화황 산출 파장을 적용하기 위하여 다양한 파장구간 사용에 따른 산출 민감도 조사를 실시하였다.

2.2 연구자료 및 방법

본 연구의 흐름도는 그림 1에 나타나며, 본 연구에서는 위에서 언급한 바와 같이 참값과의 정확한 비교를 통한 산출 파장구간별 이산화황 산출 정확도를 조사하기 위하여 복사전달모델로부터 생산된 모의 복사휘도를 이용하였다. 본 연구의 연구 기간 및 지역은 화산 폭발로부터 대량의 이산화황 가스가 배출된 2008년 8월 카사토치 섬(Kasatochi Island)으로부터 이동한 고농도 이산화황농도가 분포하는 지역(48°N~51°N, 170°W~173°E)으로 설정하였으며, 실제 화산지역의 대기 환경을 반영하기 위하여 표 1에 나타난 바와 같이 OMI 위성센서로부터 관측된 이산화황 연직층적분농도(SO₂ Vertical column density; SO₂ VCD), 오존 연직층적분농도(O₃ VCD), 에어로졸광학두께(Aerosol optical depth; AOD), 지표반사도(Surface reflectance)의 값을 0.05×0.1의 공간해상도에 맞게 공간 내삽한 후, 복사전달모델인 Linearized pseudo-spherical scalar and vector discrete ordinate radiative transfer (VLIDORT) version 2.6 (Spurr,

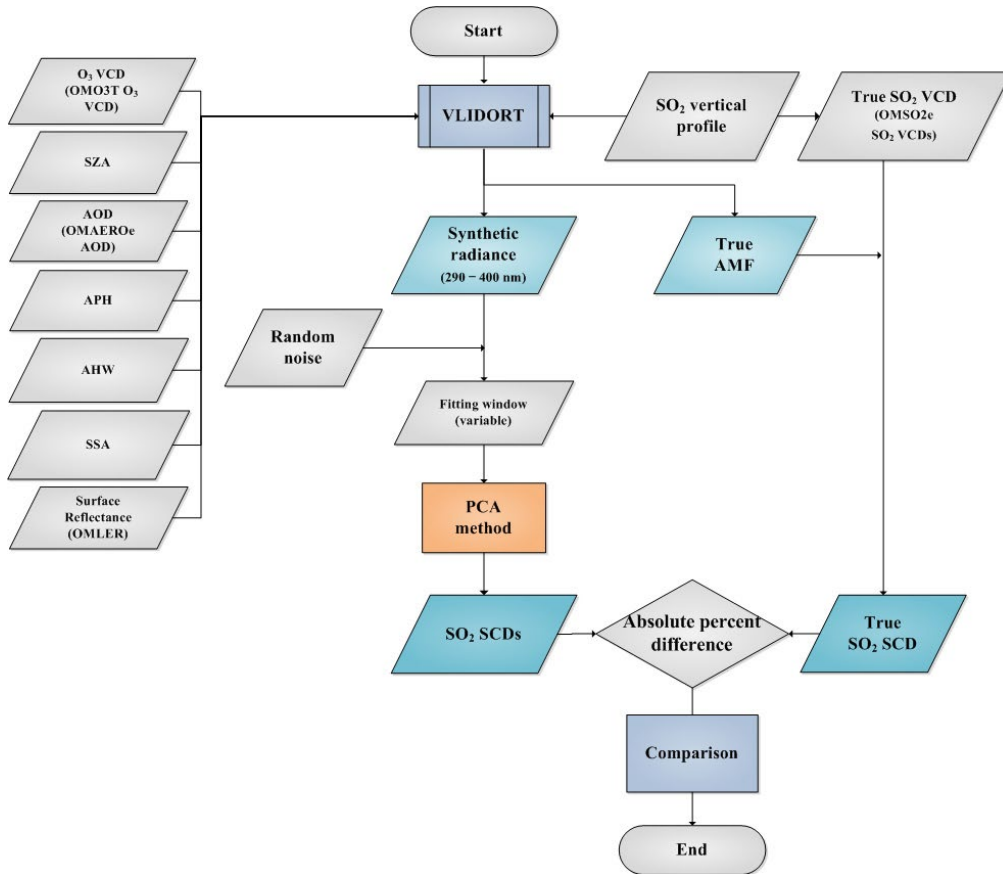


Fig. 1. A flowchart of an investigation of the effect of spectral fitting windows on the SO₂ SCD retrieval using PCA based on the real synthetic data.

Table 1. Variables used to calculate synthetic radiances.

Variable	Value	
	Input data	Range
SO ₂ VCD	OMSO2e (OMI L3)	0~100 DU
O ₃ VCD	OMSO2e (OMI L3)	315~700 DU
AOD	OMAEROe (OMI L3)	0.10~0.15
Surface reflectance	OMLER (OMI L3)	0.06~0.10
Fixed value		
SO ₂ layer height	10~13 km	
Aerosol peak height (APH)	11 km	
Aerosol half width (AHW)	3 km	
Single scattering albedo (SSA)	0.95	

2008)의 입력자료로 사용하였다. 이산화황의 연직분포 모양은 카사토치 섬의 화산 폭발로 인해 발생한

화산 플룸의 고도에 따라 10 km에서 13 km 사이의 상자 모양으로 설정하였으며 (Krotkov *et al.*, 2010), 이산화질소 및 포름알데히드와 같은 다른 미량기체들의 연직분포는 Discover-AQ 캠페인에 관측된 연직분포 정보로부터 획득하였다 (Flynn *et al.*, 2014; <https://www-air.larc.nasa.gov/missions/discover-aq/discover-aq.html>). 또한, 에어로졸의 연직분포는 3 km의 반폭너비 (Aerosol half width; AHW)를 갖는 가우시안 함수 모양으로 설정하였으며, 유효고도는 선행 연구 (Hoffmann *et al.*, 2010; Mattis *et al.*, 2010)에 따라 11 km로 설정하였다. 에어로졸 반폭너비와 유효고도에 의해 결정되는 에어로졸의 가우시안 분포 함수는 식 (2)와 식 (3)으로 정의된다 (Hong *et al.*,

2017; Jeong *et al.*, 2016).

$$\text{GDF} = \int_{z_{n1}}^{z_{n2}} W \frac{e^{-h(z-z_p)}}{[1+e^{-h(z-z_p)}]^2} dz, \quad (2)$$

$$\eta = \frac{\ln(3+\sqrt{8})}{h}, \quad (3)$$

식(2)에서 z_{n1} 과 z_{n2} 는 각각 에어로졸의 하한 및 상한 고도를 나타내며, W 는 전체 에어로졸 양과 관련

한 정규화 상수를 나타낸다. h 는 에어로졸 반쪽너비를 나타내는 η 와 관련한 상수이며, z_p 는 에어로졸 유효고도를 나타낸다.

이러한 입력자료를 사용하여 1800개의 픽셀에 대한 모의 복사휘도가 파장 0.2 nm 간격으로 생성되었으며, 모의된 복사휘도는 대기 환경 관측을 위해 2019년 발사 예정인 환경위성탐재체(GEO-KOPSAT-2B)에 탑재된 Geostationary Environment Monitor-

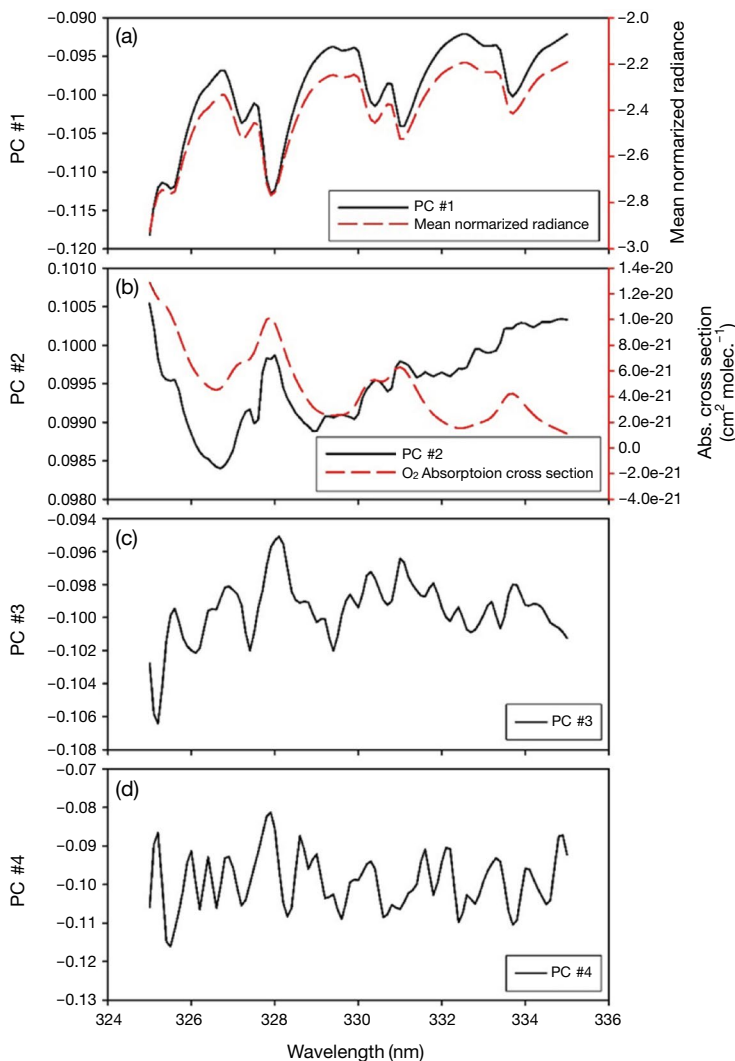


Fig. 2. An example of PCs extracted using the PCA method from synthetic radiance data generated for Kasatochi Island in August 2008: (a) the first PC (black) and the mean of the natural logarithm of normalized radiance data (red); (b) the second PC (black) and the O₃ absorption cross section (red); (c) the third PC; (d) the fourth PC.

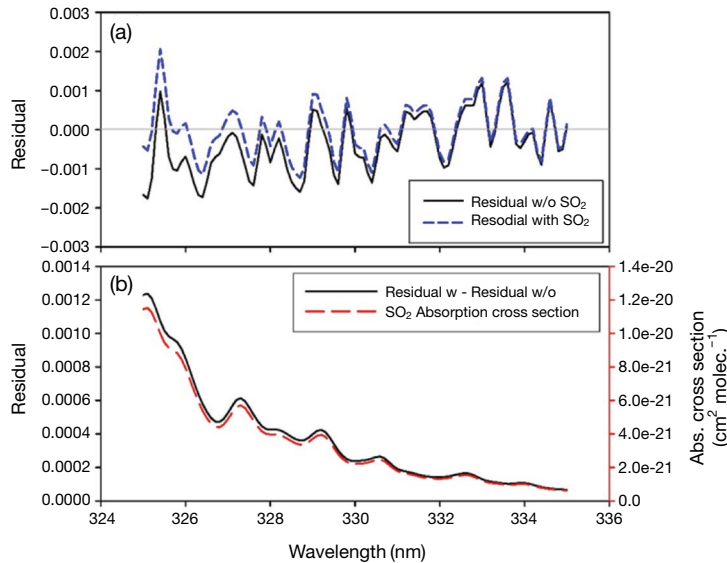


Fig. 3. (a) The two fitting residuals, with (blue) and without (black) the SO₂ absorption term in equation (1), using the spectral fitting windows from 325 nm to 335 nm for the specific pixel with true SO₂ SCD of 1.5×10^{16} molecules cm⁻², and (b) the difference between fitting residuals with and without the SO₂ absorption cross section (black) and the SO₂ absorption cross section (blue).

ing Spectrometer (GEMS) 센서 및 TROPOMI 센서의 기기합수를 고려하여 0.6 nm의 반치폭 (Full width half maximum; FWHM)을 갖는 가우시안 함수로 콘볼루션되었다 (Kim *et al.*, 2018; Theys *et al.*, 2017). 추가적으로 위성센서의 기기적 특성을 고려하기 위하여 1000의 신호 대 잡음비에 대한 랜덤 잡음신호를 추가하였다.

다음으로, 주성분분석방법을 이용하여 모의된 복사휘도로부터 2008년 8월 카사토치 섬에서 발생한 화산폭발 주변 지역에 대한 이산화황 경사층적분농도를 산출하였다. 그림 2는 식 (1)에서 ν 로 정의된 주성분분석방법으로부터 추출된 주성분들에 대한 예시 그림이다. 1800개의 모의 복사휘도 중 이산화황 연직층적분농도 참값이 0.5 DU 이하인 값을 포함하고 있는 약 100개의 픽셀에 대한 복사휘도 값들을 주성분 분석하여 추출하였으며, 산출 파장구간은 기존 Theys *et al.* (2015)에서 일반적인 화산지역 이산화황 산출에 이용되는 325~335 nm으로 설정하였다. 그림 2의 (a)에서 검정색 선은 주성분분석방법으로 추출

된 첫 번째 주성분을 나타내며, 이는 붉은색 선으로 나타난 평균한 정규화된 모의 복사휘도의 값과 유사하게 나타나는 것을 확인할 수 있으며, 이는 추출된 첫 번째 주성분이 정규화된 모의 복사휘도를 가장 대표하는 스펙트럼 특징을 잘 반영한다는 것을 의미한다. 두 번째 주성분은 자외선 구간에서 가장 큰 흡수 특성을 나타내는 오존의 흡수단면적과 유사하게 나타나는 것을 확인할 수 있으며, Li *et al.* (2013)에 따르면, 세 번째 주성분과 네 번째 주성분은 각각 지표 반사에 대한 특성과 잡음에 대한 특성을 나타내는 것으로 추측할 수 있다고 보고되었다. 그림 2와 같이 추출된 주성분들은 이산화황이 없는 지역의 다양한 스펙트럼 특성들을 대변하는 것으로 나타나며, 식 (1)에 나타난 바와 같이 이러한 주성분들과 이산화황의 흡수단면적을 각 픽셀의 모의 복사휘도와 선형 피팅함으로써 각 주성분들의 계수와 이산화황 흡수단면적의 계수를 계산할 수 있으며, 이산화황 흡수단면적의 계수는 결과적으로 이산화황 경사층적분농도를 의미한다.

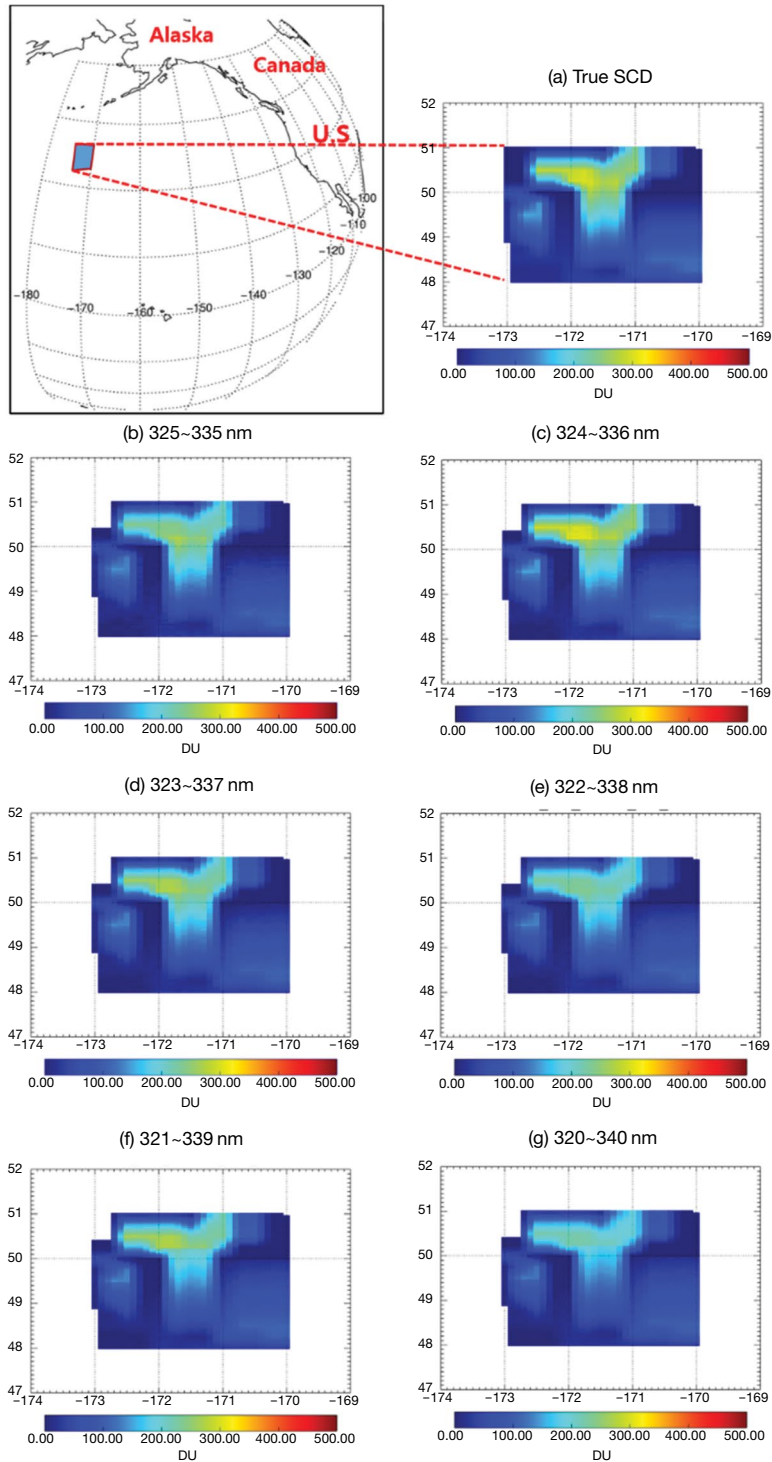


Fig. 4. (a) True SO₂ SCD and those retrieved by the PCA method using the fitting window of (b) 325~335 nm, (c) 324~336 nm, (d) 323~337 nm, (e) 322~338 nm, (f) 321~339 nm, and (g) 320~340 nm, respectively.

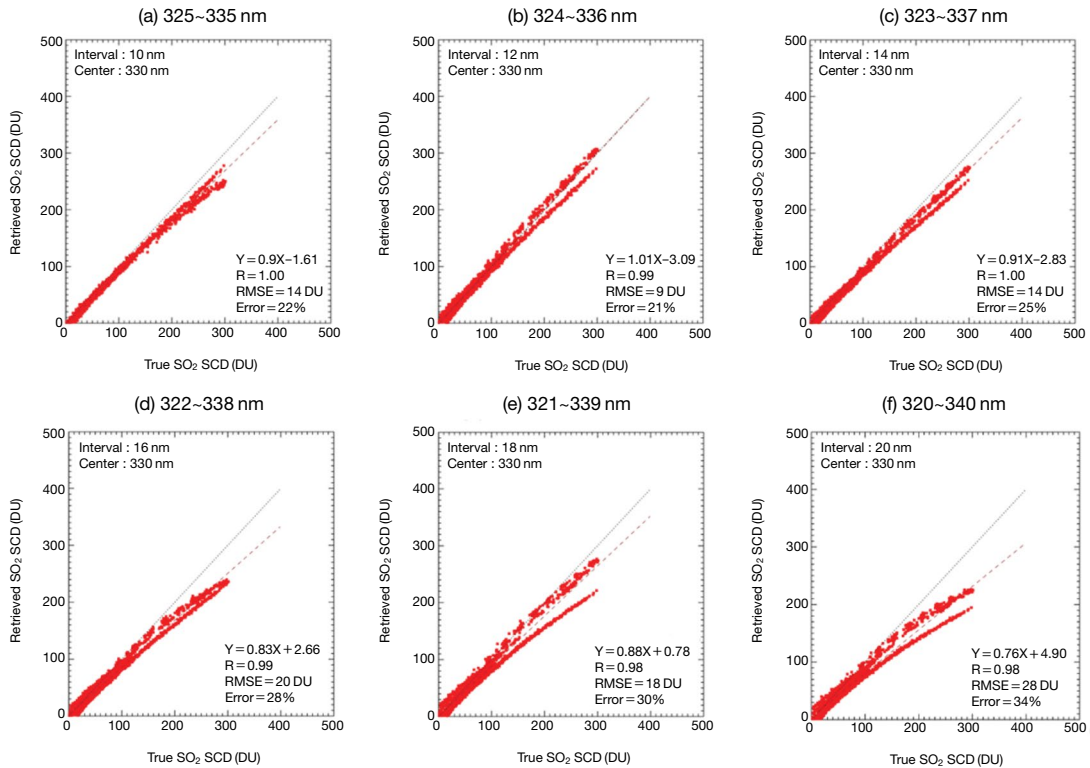


Fig. 5. Scatter plots between true SO₂ SCDs and those retrieved by the PCA method using the fitting window of (a) 325~335 nm, (b) 324~336 nm, (c) 323~337 nm, (d) 322~338 nm, (e) 321~339 nm, (f) 320~340 nm, respectively.

그림 3의 (a)와 (b)는 이산화황 흡수단면적을 포함한 피팅 잔차와 포함하지 않았을 때의 피팅 잔차를 나타내며, 이산화황 흡수단면적을 포함한 피팅 잔차의 절대값 합과 포함하지 않은 피팅 잔차의 절대값 합은 각각 0.0004와 0.0016으로 이산화황의 흡수단면적을 포함한 피팅 잔차가 비교적 0 값에 가깝게 나타나며, 이로부터 주성분들과 이산화황 흡수단면적을 이용한 선형피팅이 잘 이루어졌다는 것을 확인할 수 있다. 위와 같은 방식을 이용하여 325~335 nm 뿐만 아니라 파장간격은 10, 12, 14, 16, 18, 20 nm, 중심파장은 328, 329, 330, 331, 332 nm를 갖는 30개의 산출 파장구간을 이용하여 화산지역 고농도 이산화황 경사층적분농도를 산출하였다. 또한 각 파장구간에 대하여 산출된 이산화황 경사층적분농도를 모의 복사휘도와 함께 복사전달모델로부터 계산된 중심파장

328, 329, 330, 331, 332 nm에 대한 대기질량인자(Air mass factor; AMF)와 입력자료로 사용된 이산화황 원격측정분농도의 곱으로 계산된 이산화황 경사층적분농도 참값과 비교함으로써 파장구간에 대한 산출 민감도 조사를 수행하였다.

3. 결 과

본 연구에서는 주성분분석방법을 이용하여 화산지역의 고농도 이산화황 산출에 있어서 다양한 파장간격과 중심파장을 갖는 30개의 산출 파장구간을 이용하여 각 파장구간에 대한 화산지역 고농도 이산화황 경사층적분농도 산출 민감도 조사를 수행하였으며, 이산화황 경사층적분농도 산출 결과에 대한 예시 그

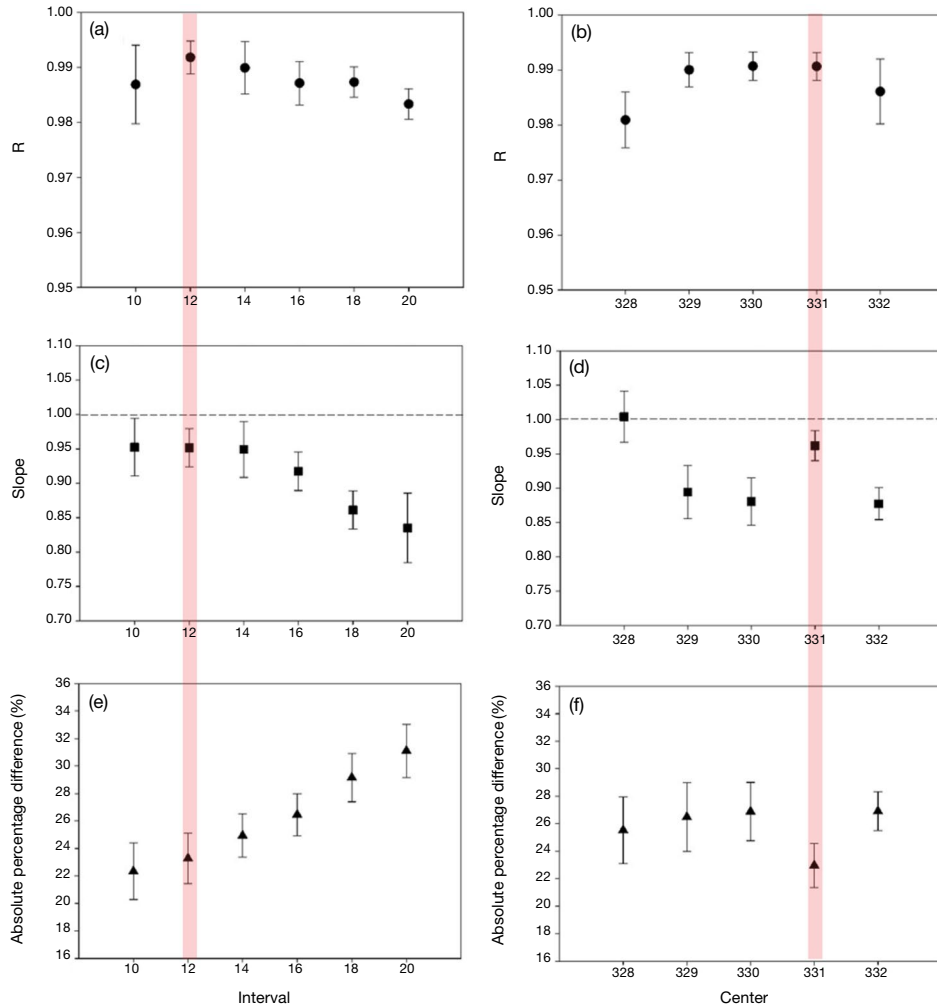


Fig. 6. Statistical analysis summary of between true SO_2 SCDs and those retrieved by the PCA method using various intervals ((a), (c), and (e)) and centers ((b), (d), and (f)) of fitting windows as function of the interval and center of fitting window.

림은 그림 4에 나타난다.

그림 4는 중심파장 330 nm에 대하여 파장간격 10, 12, 14, 16, 18, 20 nm로 설정된 파장구간을 이용하여 산출된 이산화황 경사칼럼농도 결과 그림이다. 그림 4의 (a)는 연구방법에서 언급된 바와 같이 330 nm의 대기질량인자와 복사전달모델에 입력자료로 사용된 이산화황 연직층적분농도 참값을 곱함으로써 계산된 이산화황 경사층적분농도 참값이다. 그림 4의 (b)~(g)는 파장간격을 최소 10 nm에서 최대 20 nm 까지 2 nm씩 증가시킨 파장구간으로 산출된 이산화

황 경사층적분농도 결과이다. 그림 4에서 볼 수 있듯이 324~326 nm의 파장구간을 이용하여 산출된 결과 그림 4(c)의 공간적인 분포가 그림 4(a)와 가장 유사하게 나타나는 것을 확인할 수 있다. 보다 정량적인 산출 민감도 조사를 위하여 이산화황 경사층적분농도 참값과 산출된 이산화황 경사층적분농도 사이의 회귀분석을 실시하였다.

그림 4(a)와 그림 4(b), (c), (d), (e), (f), (g) 사이의 회귀분석 결과는 각각 그림 5(a), (b), (c), (d), (e)에 나타난다. 그림 5에서 볼 수 있듯이, 325~335 nm,

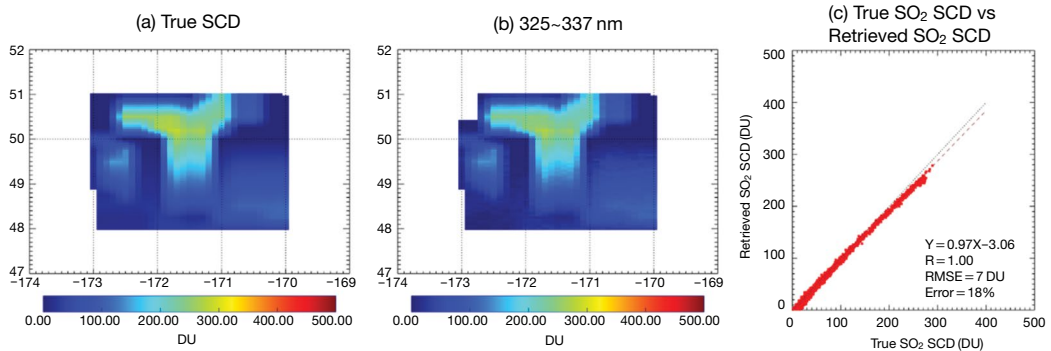


Fig. 7. (a) True SO₂ SCD and (b) those retrieved by the PCA method using the fitting window of (b) 325~337 nm; (c) Scatter plots between true SO₂ SCDs and those retrieved by the PCA method using the fitting window of 325~337 nm.

324~336 nm, 323~337 nm, 322~338 nm의 사용에 대한 이산화황 경사층적분농도 산출오차는 각각 22%, 21%, 25%, 28%로 나타났으며, 이러한 산출오차들은 Global Monitoring for Environment and Security (GMES) Sentinels 4/5 및 5p 임무 요구사항 문서 (Mission Requirement Document; Langen *et al.*, 2011)와 Sentinels-4 / 5에 대한 사용자 요구 사항 검토 보고서 (Report of The Review Of User Requirements Document; Bovensmann *et al.*, 2011) 및 TROPOMI를 위한 과학 요구 사항 문서 (Science Requirements Document; Van Weele *et al.*, 2008)에서 종합적으로 제시된 성층권 내 0.5 DU 이상의 이산화황 산출 정확도 요구 사항인 산출오차 30%를 만족하는 것으로 나타났다. 하지만 Theys *et al.* (2017)에서 제시된 Multi-windows DOAS의 이산화황 경사층적분농도 산출 오차인 20%에 비하여 큰 것으로 나타났다.

322~338 nm, 321~339 nm, 320~340 nm의 파장구간을 이용한 이산화황 경사층적분농도 산출에러는 각각 28%, 30%, 34%로 파장간격이 넓어짐에 따라서 이산화황 경사층적분농도 산출 정확도가 감소하는 것으로 나타났다. 그림 5의 (d), (e), (f)에서 볼 수 있듯이, 322~338 nm, 321~339 nm, 320~340 nm의 파장구간을 이용하였을 때, 100 DU 이상의 고농도 이산화황 경사층적분농도에서 과소추정하는 결과를 보였다. 산출 파장구간의 간격이 넓어짐에 따라서 일반적으로는 각 미량기체별 흡수단면적 사이의 상관성이

줄어들게 된다. 하지만 산출 파장구간의 간격이 넓어질수록 Beer-Lambert 법칙의 가정에 따라 전체 파장에 대하여 하나로 정의되어야 하는 유효 흡수 광경로 길이가 다양하게 나타남으로써 이러한 가정이 전적으로 성립하지 않게 되고, 이는 그림 5의 (e)와 (f)와 같이 산출오차를 증가시키는 결과를 야기한다 (Theys *et al.*, 2017; Pukite *et al.*, 2016). 그림 5에서 두 갈래로 나타나는 회귀분석 결과는 구역별로 오존 농도의 차이가 발생함에 따라 나타나는 차이인 것으로 나타났다.

그림 4와 그림 5에서 나타난 중심파장 330 nm일 때와 동일한 방식으로 중심파장 328, 329, 331, 332 nm에 대한 산출 파장구간을 다양한 파장간격으로 설정하였으며, 이를 이용하여 각각의 이산화황 경사층적분농도를 산출하였다. 각 산출 결과에 대한 정량적인 평가를 위하여 통계분석을 수행하였으며, 이산화황 경사층적분농도 참값과 각각의 산출 파장구간을 이용하여 산출된 결과 사이의 상관계수, 기울기 및 절대백분율오차를 계산한 결과는 그림 6에 나타난다. 그림 6의 (a), (c), (e)는 파장간격 변화에 대한 참값과 산출값 사이의 회귀분석 결과이며, 각 파장간격에 따른 통계 결과는 중심파장 5개에 대한 모든 통계 수치를 평균하였으며, 표준편차는 그림 6의 예리 바로 확인할 수 있다. 참값과 산출값 사이의 상관계수의 경우 모든 경우에서 1에 가까운 값이 나타났으나, 파장간격이 10 nm인 경우에서 상관계수의 표준

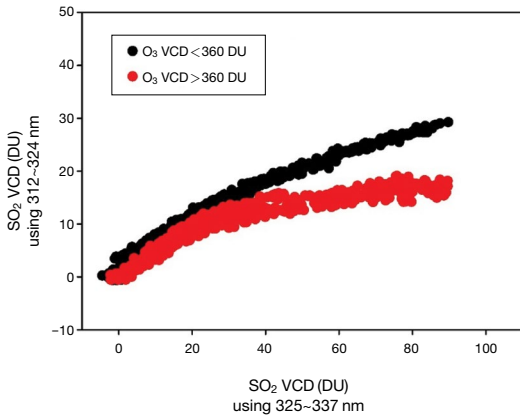


Fig. 8. A scatter plot between the SO_2 VCDs retrieved using the fitting window of 325~337 nm and those retrieved using that of 312~324 nm.

편차가 0.01로 나타났으며, 표준편차가 0.01 이하로 매우 작게 나타나는 다른 파장간격의 상관관계 표준편차에 비해 높은 값을 보였다. 참값과 산출된 이산화황 경사층적분농도 값 사이의 기울기의 경우 파장간격이 10~16 nm 사이에서 0.90 이상의 값을 보였으나, 파장간격을 20 nm로 증가시켰을 때 0.83으로 낮은 값을 보였다. 이와 마찬가지로 절대백분율 오차 또한 파장간격이 10~16 nm 사이에서 30% 미만으로 파장간격이 좁을 때 낮은 산출 에러를 보였다. 이러한 결과는 그림 5에서 언급한 바와 같이 산출 파장구간의 간격이 넓어짐에 따라서 다양한 유효 흡수 광경로 길이에 대한 영향에 의해 발생하는 오차인 것으로 사료된다.

그림 6의 (b), (d), (f)는 중심파장 변화에 대한 참값과 산출된 이산화황 경사층적분농도 사이의 회귀분석 결과이며, 각 산출 파장구간의 중심파장에 따른 통계 결과는 파장간격 6개에 대한 모든 통계 수치를 평균한 결과이며, 에러바는 표준편차를 나타낸다. 그림 6에서 볼 수 있듯이 파장구간의 중심파장과 이산화황 경사층적분농도 산출오차 사이의 상관관계는 나타나지 않았다. 중심파장이 328 nm인 경우 기울기는 1.00으로 가장 좋은 결과를 보였지만, 절대백분율 오차는 25.52%로 중심파장이 331 nm일 때의 절대백

분율오차인 22.95% 보다 높은 수치를 보였다. 그림 6의 통계결과로부터 화산지역의 고농도 이산화황 산출을 위한 최적의 산출 파장구간을 결정하였다. 파장간격은 12 nm, 중심파장은 331 nm으로 산출 파장구간은 325~337 nm로 결정하였으며, 선택된 파장구간을 이용하여 산출된 이산화황 경사층적분농도 결과는 그림 7에 나타난다.

그림 7의 (a)와 (b)는 각각 2008년 8월 화산폭발이 일어난 카사토치 섬 주변지역에 대한 이산화황 경사층적분농도 참값과 325~327 nm 파장구간을 사용하여 산출된 이산화황 경사층적분농도 결과이며, 그림 7의 (c)는 이산화황 경사층적분농도 참값과 결과값 사이의 회귀분석 결과이다. 참값과 산출된 이산화황 경사층적분농도 사이의 기울기는 0.97, y절편은 -3.06 DU이며 상관계수는 1.00으로 참값과 산출된 값 사이의 상관관계는 매우 좋은 것으로 나타났으며, 산출 오차 또한 18%로 가장 낮게 나타났다. 또한, Theys *et al.* (2017)에서 제시된 이산화황 경사층적분농도 산출 오차인 20%보다 낮은 수치를 보였으며, 본 연구를 통해 조사된 파장구간을 사용함으로써 오존농도 차이에 따라 발생하는 편차(그림 5) 또한 매우 감소한 것으로 확인되었다.

그림 8은 저농도 이산화황 산출을 위해 일반적으로 이용되는 312~324 nm의 산출 파장구간을 주성분 분석방법에 적용한 이산화황 연직층적분농도 결과와 본 연구로부터 결정된 325~337 nm의 파장구간을 주성분분석방법에 적용하여 산출된 이산화황 연직층적분농도 결과를 비교한 그림이다. 기존 저농도 이산화황 산출에 사용된 파장구간은 Theys *et al.* (2015)에서 사용된 312~326 nm를 기반으로 하여 파장별 테스트를 통해 주성분분석방법에 맞는 312~324 nm의 파장구간으로 설정하였다. 또한, 파장별 대기질량인자 값의 변화에 따라 이산화황 경사층적분농도 범위가 상이하게 나타남으로 본 비교는 앞선 결과와 달리 이산화황의 연직층적분농도 간의 비교를 수행하였다. 그림 8에서 볼 수 있듯이, 이산화황 연직층적분농도가 10 DU 이상으로 증가할 경우 312~324 nm 파장구간

을 사용하여 산출된 이산화황 연직층적분농도는 325~337 nm를 사용하였을 때의 결과에 비해 매우 과소추정하는 경향을 보였다. 325~337 nm 파장구간을 이용하여 산출된 이산화황 연직층적분농도가 10DU 미만일 때, 312~324 nm와 325~337 nm 파장구간을 이용하여 산출된 이산화황 연직층적분농도의 차이는 22%로 나타났으며, 10 DU 이상일 때, 두 파장구간을 이용하여 산출된 이산화황 연직층적분농도의 차이는 99%로 4배 이상 증가하는 것을 확인하였다. 이러한 결과는 앞서 언급한 하였듯이 이산화황의 흡수특성이 가장 뚜렷하게 나타나는 300~325 nm 파장구간을 이용하여 화산지역에서 발생하는 대량의 이산화황을 산출할 경우, 고농도 이산화황의 강한 흡수로 인한 이산화황 흡수의 포화 현상 때문에 이산화황을 과소추정하는 것으로 사료된다.

추가적으로, 그림 8에서 볼 수 있듯이, 312~324 nm와 325~337 nm 파장구간을 이용하여 산출된 이산화황 연직층적분농도의 차이는 오존의 연직층적분농도에 따라 다른 경향을 보이는 것을 알 수 있다. 오존의 양이 360 DU 미만일 경우 두 산출 파장을 이용한 이산화황 경사층적분농도 산출값 사이의 차이는 35%로 나타났으며, 오존의 양이 360 DU 이상일 경우 78%로 오존의 양이 많을 때 312~324 nm 파장구간의 사용은 이산화황 농도의 과소추정 경향이 심화되는 것으로 나타났다. 이러한 결과로부터 312~324 nm 파장구간을 사용하여 고농도의 이산화황 연직층적분농도를 산출할 때, 300 nm 초반 자외선 파장영역에서 이산화황 흡수의 포화뿐만 아니라 고농도 오존에 의한 간섭이 크게 작용함을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 처음으로 주성분분석방법을 이용하여 복사전달모델로부터 모의된 위성 관측 기반의 복사휘도로부터 화산지역에서의 고농도 이산화황 경사층적분농도를 산출하였다. 또한, 주성분분석방법에 최적화된 산출 파장구간을 결정하기 위하여 10 nm에

서 20 nm의 파장간격 및 328~332 nm 범위의 중심파장을 갖는 다양한 파장구간을 사용하여 고농도 이산화황을 산출하고, 복사전달모델에 입력자료로 사용된 이산화황 참값과 비교함으로써 파장구간에 대한 산출 민감도 조사를 수행하였다. 모의 복사휘도는 실제 화산지역의 대기 환경을 반영하기 위하여 OMI 위성으로부터 관측된 이산화황 및 오존 정보와 에어로졸 광학두께 정보를 복사전달모델인 VLIDORT 입력값으로 하여 생성되었으며, 실제 위성의 기기 함수를 반영하였다.

모의된 복사휘도로부터 주성분분석방법을 이용하여 산출된 이산화황 연직층적분농도의 산출 오차는 사용된 파장구간의 파장간격이 최소 10 nm에서 최대 20 nm로 증가함에 따라 평균 22.33%에서 31.10%까지 증가하는 것으로 나타났다. 이러한 결과는 파장간격이 넓어짐에 따라서 다양한 유효 흡수 광경로 길이의 영향에 의해 나타나는 것으로 사료된다. 이에 반해, 산출 파장구간의 중심파장과 이산화황 경사층적분농도 산출오차 사이의 상관관계는 크지 않은 것으로 나타났다. 본 연구에서 수행된 산출 파장구간에 대한 이산화황 경사층적분농도 산출 민감도 조사 결과를 기반으로, 주성분분석방법에서 화산지역 고농도 이산화황 산출에 최적화된 파장구간은 315~327 nm인 것으로 조사되었으며, 본 연구에서 선택된 파장구간을 이용한 이산화황 경사층적분농도 산출 오차는 18%로 최소로 나타났다.

본 연구에서는 처음으로 주성분분석방법을 이용한 고농도 이산화황 산출을 위한 최적의 파장구간에 대하여 조사하였으며, 본 연구로부터 조사된 최적의 파장구간은 최근 발사된 TROPOMI 및 향후 발사 예정인 GEMS, TEMPO와 같은 정지궤도 위성 원시자료로부터 주성분분석방법을 이용한 화산지역 이산화황 산출에 사용될 수 있을 것으로 기대된다.

감사의 글

이 연구는 기상청 “기상·지진See-At기술개발연구”

(KMI2018-02610)의 지원으로 수행되었습니다.

References

- Bobrowski, N., Kern, C., Platt, U., Hörmann, C., Wagner, T. (2010) Novel SO₂ spectral evaluation scheme using the 360-390 nm wavelength range, *Atmospheric Measurement Techniques*, 3(4), 879-891.
- Boersma, K.F., Eskes, H.J., Veefkind, J.P., Brinksma, E.J., Van Der A, R.J., Sneep, M., Van den Oord, G.H.J., Levelt, P.F., Stammes, P., Gleason, J.F., Bucsela, E.J. (2007) Near-real time retrieval of tropospheric NO₂ from OMI, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7(8), 2103-2118.
- Bovensmann, H., Peuch, V.H., van Weele, M., Erbertseder, T., Veihelmann, B. (2011) Report Of The Review Of User Requirements For Sentinels-4/-5, ESA (No. 2.1). EO-SMA-/1507/JL.
- Burrows, J.P., Weber, M., Buchwitz, M., Rozanov, V., Ladstätter-Weißmayer, A., Richter, A., Debeek, R., Hoogen, R., Bramstedt, K., Eichmann, K., Eisinger, M. (1999) The global ozone monitoring experiment (GOME): Mission concept and first scientific results, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 56(2), 151-175.
- Eisinger, M., Burrows, J.P. (1998) Tropospheric sulfur dioxide observed by the ERS-2 GOME instrument, *Geophysical Research Letters*, 25(22), 4177-4180.
- Flynn, C.M., Pickering, K.E., Crawford, J.H., Lamsal, L., Krotkov, N., Herman, J., Weingeimer, A., Chen, G., Liu, X., Szykman, J., Loughner, C., Hains, J., Lee, P., Dickerson, R., Stehr, J.W., Brent, L., Tsay, S.C. (2014) Relationship between column-density and surface mixing ratio: Statistical analysis of O₃ and NO₂ data from the July 2011 Maryland DISCOVER-AQ mission, *Atmospheric Environment*, 92, 429-441.
- Hoffmann, A., Ritter, C., Stock, M., Maturilli, M., Eckhardt, S., Herber, A., Neuber, R. (2010) Lidar measurements of the Kasatochi aerosol plume in August and September 2008 in Ny-Ålesund, Spitsbergen, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 115(D2).
- Hong, H., Kim, J., Jeong, U., Han, K.S., Lee, H. (2017) The Effects of Aerosol on the Retrieval Accuracy of NO₂ Slant Column Density, *Remote Sensing*, 9(8), 867.
- Jeong, U., Kim, J., Ahn, C., Torres, O., Liu, X., Bhartia, P.K., Spurr, R.J.D., Haffner, D., Chance, K., Holben, B.N. (2016) An optimal-estimation-based aerosol retrieval algorithm using OMI near-UV observations, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16(1), 177-193.
- Kim, M., Kim, J., Torres, O., Ahn, C., Kim, W., Jeong, U., Go, S., Liu, X., Moon, K., Kim, D.R. (2018) Optimal Estimation-Based Algorithm to Retrieve Aerosol Optical Properties for GEMS Measurements over Asia, *Remote Sensing*, 10(2), 162.
- Krotkov, N.A., Schoeberl, M., Morris, G., Carn, S., Yang, K. (2010) Dispersion and lifetime of the SO₂ cloud from the August 2008 Kasatochi eruption, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 115(D2).
- Krueger, A.J. (1983) Sighting of El Chichon sulfur dioxide clouds with the Nimbus 7 total ozone mapping spectrometer, *Science*, 220(4604), 1377-1379.
- Langen, J., Meijer, Y., Brinksma, E., Veihelmann, B., Ingmann, P. (2011) GMES Sentinels 4 and 5 Mission Requirements Document (MRD), ESA (No. 3). EO-SMA-/1507/JL.
- Lee, C., Richter, A., Weber, M., Burrows, J.P. (2008) SO₂ retrieval from SCIAMACHY using the Weighting Function DOAS (WFDOS) technique: Comparison with standard DOAS retrieval, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 8(20), 6137-6145.
- Lee, H. (2013) Comparison of Nitrogen Dioxide Retrieved by MAX-DOAS and OMI measurements in Seoul, *Korean Journal of Remote Sensing*, 29(2), 235-241. (in Korean with English abstract)
- Li, C., Joiner, J., Krotkov, N.A., Bhartia, P.K. (2013) A fast and sensitive new satellite SO₂ retrieval algorithm based on principal component analysis: Application to the ozone monitoring instrument, *Geophysical Research Letters*, 40(23), 6314-6318.
- Li, C., Krotkov, N.A., Carn, S., Zhang, Y., Spurr, R.J., Joiner, J. (2017) New-generation NASA Aura Ozone Monitoring Instrument (OMI) volcanic SO₂ dataset: Algorithm description, initial results, and continuation with the Suomi-NPP Ozone Mapping and Profiler Suite (OMPS), *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(2), 445-458.
- Lohmann, U., Feichter, J. (2005) Global indirect aerosol effects: a review, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5(3), 715-737.
- Mattis, I., Siefert, P., Müller, D., Tesche, M., Hiebsch, A., Kanitz, T., Schmidt, J., Finger, F., Wandinger, U., Ansmann, A. (2010) Volcanic aerosol layers observed with multi-wavelength Raman lidar over central Europe in 2008-2009, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 115(D2).
- McCormick, M.P., Thomason, L.W., Trepte, C.R. (1995) Atmospheric effects of the Mt Pinatubo eruption, *Nature*, 373(6513), 399.

- Nowlan, C.R., Liu, X., Chance, K., Cai, Z., Kurosu, T.P., Lee, C., Martin, R.V. (2011) Retrievals of sulfur dioxide from the Global Ozone Monitoring Experiment 2 (GOME-2) using an optimal estimation approach: Algorithm and initial validation, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 116(D18).
- Pukite, J., Wagner, T. (2016) Quantification and parametrization of non-linearity effects by higher-order sensitivity terms in scattered light differential optical absorption spectroscopy, *Atmospheric Measurement Techniques*, 9(5), 2147-2177.
- Richter, A., Wittrock, F., Schönhardt, A., Burrows, J.P. (2009) Quantifying volcanic SO₂ emissions using GOME-2 measurements *Geophys. Res. Abstr.*, EGU2009-7679, EGU General Assembly 2009, Vienna, Austria.
- Rix, M., Valks, P., Hao, N., Van Geffen, J., Clerbaux, C., Clarisse, L., Coheur, P., Loyola, D.G., Erbetseder, T., Zimmer, W., Emmadi, S. (2009) Satellite monitoring of volcanic sulfur dioxide emissions for early warning of volcanic hazards, *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 2(3), 196-206.
- Robock, A., Mao, J. (1995) The volcanic signal in surface temperature observations, *Journal of Climate*, 8(5), 1086-1103.
- Robock, A., Oman, L., Stenchikov, G.L. (2007), Nuclear winter revisited with a modern climate model and current nuclear arsenals: Still catastrophic consequences, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 112(D13).
- Spurr, R. (2008) LIDORT and VLIDORT: Linearized pseudo-spherical scalar and vector discrete ordinate radiative transfer models for use in remote sensing retrieval problems, In *Light Scattering Reviews 3*, pp. 229-275.
- Stenchikov, G., Robock, A., Ramaswamy, V., Schwarzkopf, M.D., Hamilton, K., Ramachandran, S. (2002) Arctic Oscillation response to the 1991 Mount Pinatubo eruption: Effects of volcanic aerosols and ozone depletion, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 107(D24), 4803, ACL-28.
- Theys, N., De Smedt, I., Van Gent, J., Danckaert, T., Wang, T., Hendrick, F., Stavrakou, T., Bauduin, S., Clarisse, L., Li, C., Krotkov, N. (2015) Sulfur dioxide vertical column DOAS retrievals from the Ozone Monitoring Instrument: Global observations and comparison to ground-based and satellite data, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 120(6), 2470-2491.
- Theys, N., Smedt, I.D., Yu, H., Danckaert, T., Gent, J.V., Hörmann, C., Wagner, T., Hedelt, P., Bauer, H., Romahn, F., Loyola, D., Pedernana, M., Van Roozendaal, M. (2017) Sulfur dioxide retrievals from TROPOMI onboard Sentinel-5 Precursor: algorithm theoretical basis, *Atmospheric Measurement Techniques*, 10(1), 119-153.
- Van Weele, M., Levelt, P., Aben, I., Veefkind, P., Dobber, M., Eskes, H., Noordhoek, R. (2008) Science Requirements Document for TROPOMI, Volume 1, KNMI & SRON (No. 2.0). RS-TROPOMI-KNMI-017.
- Veefkind, J.P., Aben, I., McMullan, K., Förster, H., De Vries, J., Otter, G., Claas, J., Eskes, H.J., de Hann, J.F., Kleipool, Q., Van Weele, M., Hasekamp, O., Hoogeveen, R., Landgraf, J., Snel, R., Tol, P., Ingmann, P., Voors, R., Kruizinga, B., Vink, R., Visser, H., Levelt, P.F. (2012) TROPOMI on the ESA Sentinel-5 Precursor: A GMES mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications, *Remote Sensing of Environment*, 120, 70-83.
- Yang, K., Krotkov, N.A., Krueger, A.J., Carn, S.A., Bhartia, P.K., Levelt, P.F. (2007) Retrieval of large volcanic SO₂ columns from the Aura Ozone Monitoring Instrument: Comparison and limitations, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 112(D24S43).

Authors Information

- 양지원 (부경대학교 지구환경시스템과학부 공간정보시스템공학전공 대학원생)
- 최원이 (부경대학교 지구환경시스템과학부 공간정보시스템공학전공 대학원생)
- 박준성 (부경대학교 지구환경시스템과학부 공간정보시스템공학전공 대학원생)
- 김대원 (부경대학교 지구환경시스템과학부 공간정보시스템공학전공 대학원생)
- 강형우 (부경대학교 지구환경시스템과학부 공간정보시스템공학전공 대학원생)
- 이한림 (부경대학교 지구환경시스템과학부 공간정보시스템공학전공 교수)