

Numerical case study of spatial-temporal variations of surface nitrogen dioxide and ozone concentrations over Tehran using WRF-Chem model

Shirin, M.¹  | Gharaylou, M.¹   | Aliakbari-Bidokhti, A. A.¹  | Pegahfar, N.² 

1. Department of Space Physics, Institute of Geophysics, University of Tehran, Tehran, Iran.

2. Atmospheric Science Research Center, Iranian National Institute for Oceanography and Atmospheric Science, Tehran, Iran.

Corresponding Author E-mail: gharaylo@ut.ac.ir

(Received: 25 July 2022, Revised: 5 Sep 2022, Accepted: 4 Oct 2022, Published online: 30 Aug 2023)

Summary

This study aimed to evaluate the performance of the WRF-Chem model in estimating the amount of NO₂ and O₃ in the Tehran region during recent summers (2019 to 2021). First, by investigating the NO₂ and O₃ concentrations (including hourly and daily averages) from the Air Quality Control stations in Tehran city, the days of maximum ozone concentration in summer were selected for which run the Weather Research and Forecasting Chemistry (WRF-Chem) model. The simulations were performed for 36-hours, and the first 12 hours were considered spin-up times. The simulations were conducted using two nests with 30 and 10 km resolutions, respectively, so that the second domain covered the Tehran region. Also, in the model settings, 35 levels were considered in the vertical direction, and the pressure at the highest level was 50 hPa. In these simulations, the Global Forecast System (GFS) data with a spatial resolution of 0.5 degrees and 6-hours time step was used as the initial and boundary conditions. Physical parameterization schemes that performed well in previous studies in simulating atmospheric pollutants dispersion were used in the model configuration. The Rapid Radiation Transfer Model (RRTM) and the Goddard Shortwave schemes were also used to simulate the long-and short-wave radiation, respectively. The Monin-Obukhov scheme was used to simulate surface layer fluxes and the Yonsei University (YSU) PBL scheme was also used to simulate boundary layer fluxes. The land surface fluxes were obtained from the NOAH model. In addition, the Grell and Devenyi ensemble scheme was used to parameterize moist convection and the WRF-Single-Moment-Microphysics 5-class scheme was used to parameterize microphysical processes. The RADM2 chemical mechanism was also used in this configuration. The PREP-CHEM-SRC emissions preprocessor (version 1.5) was used to produce anthropogenic, biogenic and biomass burning gridded emission over the user-specified simulation domain. The global emission data comes from RETRO and GOCART background emission data. Anthropogenic emissions of greenhouse gases and air pollutants including CO, NH₃, NO_x, SO₂, NMVOC and CH₄, were derived from the EDGAR-HTAP v5.0 Emissions Database with 0.1 horizontal resolution. Primary anthropogenic aerosol emissions of BC, OC and DMS from GOCART model databases were also used. Biogenic emissions were calculated using the MEGAN model. Also, 3BEM fire emissions which are prepared using PREP-CHEM-SRC are used. Evaluation of the results of WRF-Chem model simulations was performed by two methods of horizontal distribution and station evaluation. The evaluation results of the simulated horizontal distribution of NO₂ and the one is taken from the OMI satellite data showed that considering the slight spatial displacement in the model results, the WRF-Chem model had good performance in simulating the maximum surface NO₂ in all cases. Considering the spatial distribution of O₃ in days with maximum ozone pollution, the model has simulated areas of maximum ozone in the Tehran. However, in most cases, no comment can be made on the accuracy of the simulated maximum areas because of the not precisely coinciding of the results maps with satellite transits. The station evaluation showed an overestimate of ozone concentration and a high underestimate of NO₂ concentration by the WRF-Chem model.

Keywords: WRF-Chem model, OMI satellite data, NO₂, O₃, evaluation.

Cite this article: Shirin, M., Gharaylou, M., Aliakbari-Bidokhti, A. A., & Pegahfar, N. (2023). Numerical case study of spatial-temporal variations of surface nitrogen dioxide and ozone concentrations over Tehran using WRF-Chem model. *Journal of the Earth and Space Physics*, 49(2), 471-490. DOI: <http://doi.org/10.22059/jesphys.2022.346020.1007449>

E-mail: (1) mozghan.shirin@ut.ac.ir | bidokhti@ut.ac.ir. (2) bidokhti@ut.ac.ir



Publisher: University of Tehran Press.

DOI: <http://doi.org/10.22059/jesphys.2022.346020.1007449>

Print ISSN: 2538-371X

Online ISSN: 2538-3906

مطالعه عددی موردی تغییرات زمانی-مکانی غلظت‌های سطحی دی اکسید نیتروژن و ازون در تهران با استفاده از مدل WRF-Chem

مژگان شیرین^۱ | مریم قرایلو^۱ ✉ | عباسعلی علی‌اکبری بیدختی^۱ | نفیسه پگاه‌فر^۲

۱. گروه فیزیک فضا، مؤسسه ژئوفیزیک، دانشگاه تهران، تهران، ایران.

۲. پژوهشکده علوم جوی، پژوهشگاه ملی اقیانوس‌شناسی و علوم جوی، تهران، ایران.

رایانامه نویسنده مسئول: gharaylo@ut.ac.ir

(دریافت: ۱۴۰۱/۵/۳، بازنگری: ۱۴۰۱/۶/۱۴، پذیرش نهایی: ۱۴۰۱/۷/۱۲، انتشار آنلاین: ۱۴۰۲/۶/۸)

چکیده

پژوهش حاضر با هدف ارزیابی عملکرد مدل WRF-Chem در برآورد مقدار ایستگاهی و توزیع مکانی NO_2 و O_3 در منطقه تهران در طی تابستان‌های ۱۳۹۸-۱۴۰۰ انجام شد. در ابتدا، با بررسی داده‌های غلظت ساعتی و روزانه آلاینده‌های NO_2 و O_3 از مرکز کنترل کیفیت هوای شهرداری تهران برای ایستگاه‌های سنجش آلودگی، روزهای رخداد بیشینه غلظت O_3 در فصل تابستان برای اجرای مدل WRF-Chem انتخاب شدند. در پیکربندی اجرای مدل از سازوکار شیمی RADM2 استفاده شد. برای تولید گسیل‌های شبکه‌بندی‌شده در دامنه شبیه‌سازی از پیش‌پردازشگر گسیل PREP-CHEM-SRC استفاده شد. داده‌های گسیل جهانی از داده‌های گسیل RETRO و GOCART و گسیل‌های انسان‌زاد گازهای گلخانه‌ای و آلاینده‌های هوا از جمله CO ، NH_3 ، NO_x ، SO_2 ، NMVOC و CH_4 از پایگاه داده EDGAR-HTAP v5.0 اخذ شدند. گسیل‌های اولیه هواویزهای انسان‌زاد کربن سیاه، کربن آلی و دی متیل سولفید از پایگاه داده مدل GOCART، گسیل‌های زیست‌زاد از مدل MEGAN و گسیل‌های NO_x ناشی از آذرخش با استفاده از پارامترسازی بر اساس ارتفاع قله ابر به‌دست آمده‌اند. نتایج ارزیابی پهنه NO_2 شبیه‌سازی شده و پهنه برگرفته از داده‌های ماهواره‌ای OMI نشان داد که با در نظر گرفتن کمی جابه‌جایی مکانی، مدل توانسته میزان بالای آلاینده NO_2 روی منطقه تهران را شبیه‌سازی کند. مدل همچنین بیشینه آلاینده O_3 سطحی را در تهران شبیه‌سازی می‌کند اما گذر ماهواره در اکثر روزهای اجرا، از روی منطقه تهران به گونه‌ای است که داده‌ای از O_3 در اختیار ما نمی‌گذارد. در ارزیابی ایستگاهی، نتایج بیانگر فراتخمین غلظت O_3 و فروتخمین زیاد غلظت NO_2 توسط مدل WRF-Chem بود.

واژه‌های کلیدی: مدل WRF-Chem، داده‌های ماهواره‌ای OMI، NO_2 ، O_3 ، ارزیابی.

۱. مقدمه

نیتروژن ($\text{NO}_x = \text{NO} + \text{NO}_2$) و ترکیبات آلی فرار (VOCs) بستگی دارد. بیشترین مقادیر O_3 در شرایط آفتابی تشکیل می‌شود. با افزایش دمای هوا غلظت O_3 و ردسپهری افزایش پیدا می‌کند و این مقدار در فصل تابستان به بیشترین مقدار می‌رسد (گوو و همکاران، ۲۰۲۰).

گسیل‌های NO_x بیشتر تحت تأثیر سهم انسان‌زاد ناشی از احتراق سوخت‌های فسیلی برای حمل‌ونقل، تولید برق و صنعت است. در تابستان، عوامل دیگر از جمله گسیل از

ازون (O_3) یکی از آلاینده‌های هوا است که بر سلامت انسان و زیست‌بوم تأثیر می‌گذارد (اینزورث و همکاران، ۲۰۱۲؛ لیلولد و همکاران، ۲۰۱۵). این گاز به‌صورت مستقیم به‌عنوان گاز گلخانه‌ای (IPCC، ۲۰۱۳) و به‌صورت غیرمستقیم با تأثیر بر جذب کربن زیست‌بوم (Ecosystem) از طریق نهشت بر واداشت تابشی تأثیر می‌گذارد (سیچ و همکاران، ۲۰۰۷). تشکیل O_3 در وردسپهر زیرین یک فرایند نورشیمیایی است که به‌طور غیرخطی به غلظت گونه‌های پیش‌ساز آن، اکسیدهای

استناد: شیرین، مژگان؛ قرایلو، مریم؛ علی‌اکبری بیدختی، عباسعلی و پگاه‌فر، نفیسه (۱۴۰۲). مطالعه عددی موردی تغییرات زمانی-مکانی غلظت‌های سطحی دی اکسید نیتروژن و ازون در تهران با استفاده از مدل WRF-Chem. مجله فیزیک زمین و فضا، ۴۹(۲)، ۴۷۱-۴۹۰.

DOI: <http://doi.org/10.22059/jesphys.2022.346020.1007449>

رایانامه: (۱) mozghan.shirin@ut.ac.ir | (۲) bidokhti@ut.ac.ir | pegahfar@inio.ac.ir



ناشر: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران.

DOI: <http://doi.org/10.22059/jesphys.2022.346020.1007449>

مدل WRF-Chem مطالعه کردند. آنها یک طرحواره تحلیل فرایند ساده به WRF-Chem اضافه کردند که سهم فرایندهای نورشیمیایی و فیزیکی در شکل‌گیری O_3 را محاسبه می‌کرد. ارزیابی مدل توسط آنها نشان داد که نتایج شبیه‌سازی شده با مشاهدات همخوانی نسبی دارد. جورجیو و همکاران (۲۰۱۸) از مدل WRF-Chem برای مطالعه آلودگی هوا در تابستان، فعالیت شدید نورشیمیایی و تأثیر آنها بر کیفیت هوا در شرق مدیترانه استفاده کردند. آنها از سه دامنه تو در تو با توان تفکیک افقی ۸۰، ۱۶ و ۴ کیلومتر با تمرکز بر جزیره قبرس در ژوئیه ۲۰۱۴ استفاده کردند. در آن تحقیق گسیل‌های انسان‌زاد بر اساس داده‌های جهانی HTAP - EDGAR بود در حالی که گردوخاک و گسیل‌های زیستی به‌صورت برخط محاسبه شدند. آنها سه شبیه‌سازی با استفاده از سازوکارهای فاز گازی و هواویز CBMZ-MOSAIC، MOZART- و MOSAIC و RADM2-MADE/SORGAM انجام دادند و نتایج آنها را با اندازه‌گیری‌های شبکه مشاهداتی م تراکمی از ۱۴ ایستگاه زمینی در قبرس مقایسه کردند. غلظت‌های O_3 توسط هر سه سازوکار در مقایسه با مشاهدات دارای فراتخمین بودند و کمترین میانگین آریبی مربوط به سازوکار RADM2-MADE/SORGAM بود. تفاوت در غلظت O_3 را می‌توان به رفتار VOC با سه سازوکار نسبت داد. ویسر و همکاران (۲۰۱۹) از مشاهدات ستون NO_2 از حسگر ماهواره‌ای اندازه‌گیری O_3 (OMI) برای به‌دست آوردن میزان گسیل بالا به پایین NO_x (top-down) در مدل WRF-Chem استفاده کردند و تأثیر آن بر شبیه‌سازی O_3 سطحی را با استفاده از مشاهدات درجا ارزیابی کردند. آنها نشان دادند که شبیه‌سازی با گسیل‌های NO_x به‌روزرسانی‌شده توسط ماهواره، آریبی سامانمند بین NO_2 حاصل از WRF-Chem و OMI را کاهش می‌دهد. از آنجایی که به‌دنبال تغییرات گسیل NO_x ، O_3 در روز به‌شدت تحت تأثیر قرار می‌گیرد، شبیه‌سازی O_3 سطحی نیز با به‌روز کردن گسیل‌های NO_x توسط مشاهدات ماهواره‌ای منجر به نتایج همخوان با مشاهدات می‌شود. در این راستا، مطالعاتی نیز در منطقه

خاک و آذرخش نیز در گسیل NO_x نقش دارند (سینفلد و پندیس، ۲۰۱۶). گسیل‌های NO_x از خاک دارای یک جزء انسان‌زاد است، زیرا بخشی از کودهای حاوی نیتروژن به‌عنوان NO_x به جو گسیل می‌شوند.

مدل‌های کیفیت هوای منطقه‌ای ابزار مهمی برای مطالعه و پیش‌بینی آلودگی O_3 هستند. بنابراین این مدل‌ها می‌توانند برای شبیه‌سازی شرایط آلوده در یک منطقه شهری یا اطراف آن استفاده شوند. مدل‌های جفت‌شده شیمی و هواشناسی نیز می‌توانند هواشناسی، انتقال، تبدیل‌های شیمیایی و حذف آلاینده‌ها را با همان توان تفکیک مکانی و زمانی آشکارسازی کنند. این مدل‌ها به‌طور رضایت‌بخشی توزیع فضایی O_3 را در تابستان شبیه‌سازی می‌کنند (ترنور و همکاران، ۲۰۱۵). با این وجود، بسته به مدل و سازوکار شیمیایی فروتخمین یا فراتخمین از میانگین O_3 را ارائه می‌دهند.

یرامیری و همکاران (۲۰۱۰) از مدل WRF-Chem برای شبیه‌سازی کیفیت هوا برای منطقه ساحلی خلیج می‌سی‌سی‌پی استفاده کردند. در این مطالعه حساسیت مدل با استفاده از سه طرحواره لایه مرزی سیاره‌ای و چهار مدل سطح زمین و مقایسه نتایج مدل با مشاهدات ایستگاه‌های پایش برای آلاینده‌های O_3 و NO_2 مورد ارزیابی قرار گرفته است. این مدل، غلظت O_3 را در حوزه مورد مطالعه کم برآورد کرده است. کومار و همکاران (۲۰۱۲) تغییرات مکانی و زمانی O_3 وردسپهری و گونه‌های مربوط به آن را با استفاده از شبیه‌سازی‌های مدل WRF-Chem برای منطقه جنوب آسیا در سال ۲۰۰۸ بررسی کردند. آنها O_3 ، CO و NO_x شبیه‌سازی شده را با مشاهدات زمینی، بالون و حسگر ماهواره‌ای اندازه‌گیری O_3 (OMI) مقایسه کردند. مقایسه نتایج مدل با مشاهدات O_3 سطحی از هفت ایستگاه و مشاهدات CO و NO_x از سه ایستگاه نشان‌دهنده توانایی مدل در بازتولید تغییرات فصلی O_3 و CO در مطالعه آنها بود، ولی تفاوت‌هایی در تغییرات فصلی NO_x به‌ویژه در فصل بهار نشان داد. جیانگ و همکاران (۲۰۱۲) شکل‌گیری O_3 وردسپهری فصل بهار در شرق چین در آوریل ۲۰۰۸ را با استفاده از

ایران صورت گرفته است. کریمی (۱۳۹۳) در یک پژوهش با تکیه بر رویکرد محیطی، اقدام به شناخت وضعیت O_3 و ردسپهری در دوره زمانی ۲۰۱۱-۲۰۰۱ کرد. او نشان داد که بیشترین غلظت و شدت این آلاینده در دوره گرم سال یعنی ماه‌های ژوئیه و اوت اتفاق می‌افتد که مهم‌ترین الگوهای گردشی تبیین‌کننده آن کم‌فشار سطحی و پرفشار جنب حاره هستند. اگرچه در فصول دیگر سال نیز پیشینه O_3 مشاهده شده است. نیک‌فال و رنجبر (۱۳۹۵) غلظت آلاینده‌های معیار جوی را با استفاده از مدل WRF-Chem و داده‌های EDGAR-HTAP که شامل مقادیر گسیل جهانی مهم‌ترین آلاینده‌های جوی می‌باشد، بررسی کردند. نتایج ارزیابی خروجی مدل توسط آنها نشان داد که برای چهار آلاینده SO_2 ، O_3 ، $PM_{2.5}$ و PM_{10} غلظت برآوردشده از نظر بزرگی در مقایسه با داده‌های اندازه‌گیری‌شده دارای مقادیر قابل‌قبولی است. اما مقادیر برآوردشده برای دو آلاینده CO و NO_2 دارای فروتخمین شدیدی نسبت به داده‌های اندازه‌گیری‌شده می‌باشد. نیک‌فال و همکاران (۲۰۲۲) توانایی مدل WRF-Chem در شبیه‌سازی برخی آلاینده‌های معیار هوا، طی یک رویداد شدید آلودگی هوا بین ۱۶ و ۲۱ دسامبر ۲۰۱۷ را بررسی کردند. آنها با استفاده از داده‌های گسیل جهانی EDGAR-HTAP_v2 در مدل WRF-Chem، شبیه‌سازی نسبت‌های اختلاط سطحی NO_2 ، SO_2 و CO ارزیابی کردند. سازوکار شیمیایی RADM2 با طرحواره هواویز MADE-SORGAM به‌عنوان گزینه شیمیایی مدل WRF-Chem برای شبیه‌سازی استفاده شد. تغییرات سری زمانی آلاینده‌ها و مقایسه نتایج تهران با داده‌های مشاهداتی نشان داد که اگرچه شبیه‌سازی مدل WRF-Chem در تهران فراتخمین‌های قابل‌توجهی را نشان می‌دهد، اما عملکرد مدل با توجه به تغییرات زمانی غلظت عوامل گازی در قسمت آلوده قابل قبول است. بنابراین، مدل WRF-Chem می‌تواند در سامانه‌های عملیاتی کیفیت هوا در نظر گرفته شود.

در چند سال اخیر، غلظت O_3 در طی ماه‌های گرم افزایش

قابل‌توجهی در منطقه تهران داشته است. از آنجایی که O_3 اثرات مخربی بر سلامت انسان و زیست‌بوم دارد، بنابراین مطالعه تغییرات غلظت آن ضروری است. استفاده از مدل‌های عددی جفت‌شده هواشناسی و شیمی یکی از روش‌های پیش‌بینی و مطالعه غلظت O_3 و همچنین غلظت NO_2 به‌عنوان پیش‌ساز O_3 است. در این مطالعه، در ابتدا غلظت‌های NO_2 و O_3 سطحی با استفاده از مدل WRF-Chem در فصل اوج مقدار O_3 (تابستان) در منطقه تهران شبیه‌سازی شد. سپس ارزیابی از نتایج مدل با مشاهدات برخی ایستگاه‌های کنترل کیفیت هوا در منطقه تهران صورت گرفت. مطالب این تحقیق در ادامه بدین صورت ارائه می‌شوند که در ابتدا در بخش دوم، داده‌ها و روش کار بیان می‌شوند. در بخش سوم بحث و نتایج و در خاتمه جمع‌بندی نتایج ارائه خواهند شد.

۲. روش پژوهش

۲-۱. داده‌ها

در این مطالعه از چهار دسته داده استفاده شده است که عبارت‌اند از (۱) داده‌های آلودگی از مرکز کنترل آلودگی ایستگاه‌های شهر تهران شامل NO_2 و O_3 ، (۲) داده‌های GFS با توان تفکیک ۰/۵ درجه در راستای طول و عرض جغرافیایی در روزهای مورد مطالعه برای تأمین شرایط مرزی و اولیه در اجرای مدل، (۳) داده‌های ماهواره‌ای گرفته‌شده از ابزار OMI و (۴) داده‌های گسیل که هر یک در ادامه توضیح داده می‌شود.

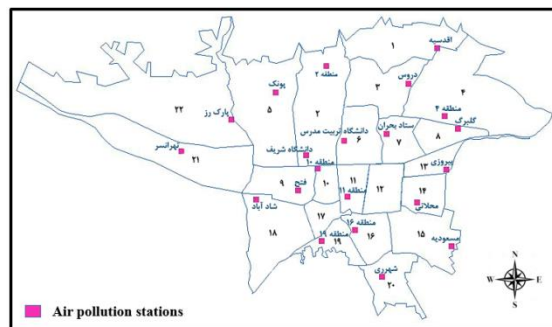
۲-۱-۱. داده‌های ایستگاهی

داده‌های غلظت آلاینده‌های NO_2 و O_3 (شامل میانگین‌های ساعتی و روزانه) از وبگاه مرکز کنترل کیفیت هوای شهرداری تهران (<https://air.tehran.ir>) برای ایستگاه‌های سنجش آلودگی در سطح شهر تهران اخذ می‌شوند. در شکل ۱ موقعیت این ایستگاه‌ها در شهر تهران مشخص شده است. برای انتخاب روزهای اجرای مدل، سری زمانی میانگین ۲۴ ساعته غلظت آلاینده O_3 در سال‌های ۱۳۹۸ تا ۱۴۰۰ در ۲۵ ایستگاه بررسی شده است.

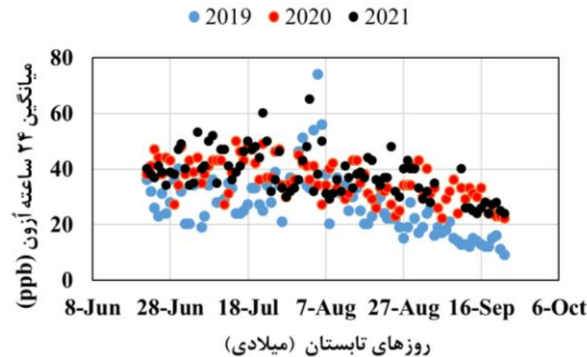
به کار رفته در این مطالعه، میانگین ۲۴ ساعته است و حد استاندارد برای این میانگین، مقدار ۴۰ ppb است. بنابراین، هشت روز برای اجرای مدل WRF-Chem انتخاب شدند که در جدول ۱ فهرست شده‌اند. لازم به ذکر است که مطابق جدول ۱، تعداد موارد انتخابی در سال ۱۴۰۰ بیش از دو سال دیگر است و بالاترین مقدار میانگین ۲۴ ساعته O_3 در روزهای ۵ آگوست ۲۰۱۹ و ۳ آگوست ۲۰۲۱ به ترتیب با مقادیر ۷۴ و ۶۵ (ppb) به ثبت رسیده است. همچنین بیشتر موارد انتخابی در مردادماه رخ داده است.

در شکل ۲ یک مورد برای نمونه برای ایستگاه ستاد بحران (منطقه ۷) آورده شده است.

برای انتخاب روزهای رخداد بیشینه غلظت O_3 تاریخ‌هایی مدنظر قرار گرفته‌اند که در اغلب ایستگاه‌ها مقدار بیشینه برای غلظت O_3 در فصل تابستان برای سال مورد بررسی ثبت شده است. حد استاندارد مورد استفاده برای O_3 برگرفته از استانداردهای تدوین‌شده توسط سازمان حفاظت محیط‌زیست آمریکا (USEPA) برای آزون ۸ ساعته مقدار ۷۵ ppb است (USEPA, ۲۰۲۰). مقادیر



شکل ۱. نقشه منطقه مورد مطالعه (شهر تهران) که روی آن ایستگاه‌های سنجش آلودگی هوا در شهر تهران مشخص شده‌اند.



شکل ۲. تغییرات غلظت O_3 (میانگین ۲۴ ساعته) در ایستگاه ستاد بحران در تابستان‌های سال‌های ۱۳۹۸، ۱۳۹۹ و ۱۴۰۰ (۲۰۱۹، ۲۰۲۰ و ۲۰۲۱).

جدول ۱. روزهای منتخب در سال‌های ۱۳۹۸، ۱۳۹۹ و ۱۴۰۰ (۲۰۱۹، ۲۰۲۰ و ۲۰۲۱) برای اجرای مدل WRF-Chem.

سال	۱۳۹۸ (۲۰۱۹)			۱۳۹۹ (۲۰۲۰)			۱۴۰۰ (۲۰۲۱)		
ردیف	خورشیدی	میلادی	میانگین ۲۴ ساعته O_3 (ppb)	خورشیدی	میلادی	میانگین ۲۴ ساعته O_3 (ppb)	خورشیدی	میلادی	میانگین ۲۴ ساعته O_3 (ppb)
۱	۱۳۹۸/۰۴/۹	۲۰۱۹/۶/۳۰	۴۰	۱۳۹۹/۴/۱۹	۲۰۲۰/۷/۹	۴۳	۱۴۰۰/۰۴/۹	۲۰۲۱/۶/۳۰	۴۷
۲	۱۳۹۸/۰۵/۱۴	۲۰۱۹/۸/۵	۷۴	—	—	—	۱۴۰۰/۴/۱۷	۲۰۲۱/۷/۸	۵۰
۳	—	—	—	—	—	—	۱۴۰۰/۴/۱۸	۲۰۲۱/۷/۹	۵۲
۴	—	—	—	—	—	—	۱۴۰۰/۴/۲۰	۲۰۲۱/۷/۱۱	۴۷
۵	—	—	—	—	—	—	۱۴۰۰/۰۵/۱۲	۲۰۲۱/۸/۳	۶۵

۲-۱-۲. داده‌های بازتحلیل

در تحقیق حاضر برای اجرای مدل WRF-Chem از داده‌های بازتحلیل سامانه پیش‌بینی جهانی GFS برای شرایط اولیه و مرزی استفاده شده است. توان تفکیک مورد استفاده در این مطالعه ۰/۵ درجه در راستای طول و عرض جغرافیایی است.

۲-۱-۳. داده‌های مشاهداتی ماهواره‌ای

یکی از اصلی‌ترین کاربردهای داده‌های ماهواره‌ای در سنجش کیفیت هوا است. در بررسی آلودگی هوا، با وجودی که دقت مکانی و زمانی داده‌های ماهواره‌ای اغلب کمتر از داده‌های مشاهدات زمینی توسط ایستگاه‌های سنجش آلودگی هوا هستند، ولی برای مناطقی که از نظر تعداد سنجنده‌های آلودگی هوا دارای محدودیت می‌باشند، گزینه مناسبی است. در این مطالعه، از داده‌های سنجنده OMI برای ارزیابی خروجی مدل WRF-Chem استفاده شده است. این سنجنده بر ماهواره Aura (از نوع ماهواره‌های مدار قطبی) نصب شده است که توسط سازمان فضایی ایالات متحده در مدار زمین قرار گرفته است. OMI، ابزار طیف‌سنج نگاشت ازون کلی (TOMS) را برای ثبت ازون کلی و سایر فراسنج‌های جوی مربوط به شیمی O_3 و اقلیم به کار می‌برد. داده‌های ماهواره‌ای NO_2 از وبگاه https://disc.gsfc.nasa.gov/datasets/OMNO2d_003/summary گرفته شده است. OMNO2d، محصول دی‌اکسیدنیتروژن با شبکه جهانی روزانه (۰/۲۵×۰/۲۵) درجه در راستای طول و عرض جغرافیایی است. این محصول حاوی ستون کل NO_2 و ستون کل وردسپهری NO_2 برای همه شرایط جوی و برای شرایط آسمان که کسر ابر کمتر از ۳۰ درصد باشد، است. داده‌های ماهواره‌ای O_3 از وبگاه https://disc.gsfc.nasa.gov/datasets/OMTO3e_003/summary گرفته شده است. گروه علمی OMI، محصول شبکه‌بندی شده سطح ۳ ستون کل O_3 جهانی (TOMS-Like) را تولید می‌کند (شبکه‌های ۰/۲۵ درجه در راستای طول و عرض جغرافیایی).

۲-۱-۴. داده‌های گسیل

داده‌های گسیل جهانی از داده‌های بازتحلیل وردسپهری (RETRO؛ <http://retro.enes.org>) با توان تفکیک فضایی ۰/۵ درجه از گسیل پایه ماهانه ۱۹۶۰-۲۰۰۰ و داده‌های گسیل زمینه مدل تابش و انتقال هواویز گودارد شیمی (GOCART) حاصل شده‌اند. گسیل‌های انسان‌زاد گازهای گلخانه‌ای و آلاینده‌های هوا شامل مونوکسیدکربن (CO)، آمونیاک (NH_3)، اکسیدهای نیتروژن (NO_x)، دی‌اکسیدگوگرد (SO_2)، ترکیبات آلی فرار غیر متان (NMVOC) و متان (CH_4) از پایگاه داده گسیل برای تحقیقات جوی جهانی (EDGAR-HTAP v5.0؛ <http://edgar.jrc.ec.europa.eu>) با توان تفکیک فضایی ۰/۱ درجه اخذ می‌شوند (اولیویر و همکاران، ۲۰۰۵). گسیل‌ها بر اساس گسیل‌های سال ۲۰۱۵ است. گسیل‌های اولیه هواویزهای انسان‌زاد کربن سیاه (BC)، کربن آلی (OC) و دی‌متیل‌سولفید (DMS) از پایگاه داده مدل GOCART اخذ شده‌اند. گسیل‌های زیست‌زاد با استفاده از مدل گسیل گازها و هواویزها از طبیعت محاسبه شده‌اند (MEGAN؛ گونتر و همکاران، ۲۰۰۶).

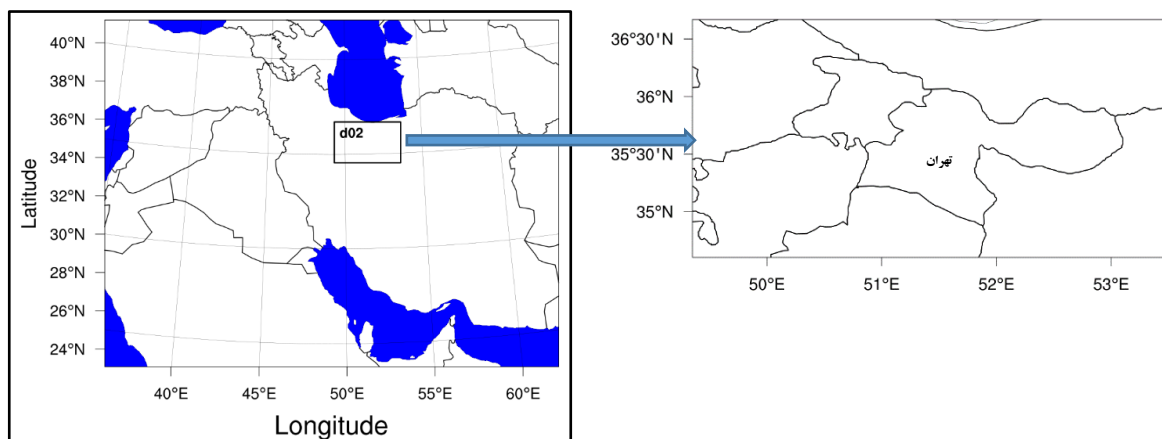
۲-۲. توصیف مدل WRF-Chem و پیکربندی اجرای مدل

WRF-Chem مدل تحقیق و پیش‌بینی وضع هوا (WRF) همراه با شیمی است. این مدل گسیل و انتقال، مخلوط‌شدن و تبدیل شیمیایی گازهای کمیاب و هواویزها را به‌طور همزمان با هواشناسی شبیه‌سازی می‌کند. این مدل برای بررسی کیفیت هوا در مقیاس منطقه‌ای، تجزیه و تحلیل برنامه میدانی و برهم‌کنش‌های در مقیاس ابر بین ابرها و شیمی استفاده می‌شود. توصیف کاملی از این مدل را به‌طور کامل در مطالعه گرل و همکاران (۲۰۰۵) می‌توان یافت.

در این مطالعه، شبیه‌سازی‌ها با مدل جفت‌شده هواشناسی و شیمی (WRF-Chem)، نسخه 4.1 انجام شده است.

طرحواره‌ها، امکان انتخاب پیکربندی‌های متعددی برای استفاده در اجرای مدل وجود دارد. در این مطالعه، طرحواره‌های پارامترسازی فیزیکی که عملکرد مناسبی در مطالعات پیشین در شبیه‌سازی آلاینده‌های جوی داشتند، در اجرای مدل استفاده شدند. جزئیات بیشتر درباره تنظیمات استفاده شده در مدل، در جدول ۲ آمده است. در این پیکربندی از سازوکار شیمی RADM2 استفاده می‌شود. RADM2 برای مدل‌سازی کیفیت هوای منطقه‌ای (استاک‌ول و همکاران، ۱۹۹۰) استفاده می‌شود و شامل ۵۹ گونه شیمیایی و ۱۵۷ واکنش است. RADM2 سازوکاری است که به‌طور گسترده در دامنه اروپایی مورد استفاده قرار می‌گیرد و با دینامیک هواویز MADE جفت شده است (آکرمین و همکاران، ۱۹۹۸). MADE با مدل هواویز آلی ثانویه (SORGAM) جفت شده است (شل و همکاران، ۲۰۰۱). RADM2، RACM، CB-4، MOZART و CBMZ از جمله طرحواره‌های شیمی و MADE/SORGAM، MADE/VBS، MAM و GOCART نمونه‌ای از طرحواره‌های هواویز هستند.

شبیه‌سازی‌ها برای روزهای منتخب ۳۶ ساعته انجام شده است. بازه زمانی شبیه‌سازی‌های مربوط به هر روز، از ساعت ۱۲ UTC روز قبل تا ۰۰ UTC روز بعد می‌باشد و ۱۲ ساعت اول اجرای مدل به‌عنوان spin-up در نظر گرفته شد. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از ۲ شبکه تو در تو به‌ترتیب با تفکیک‌های ۳۰ و ۱۰ کیلومتر انجام شده است. تعداد نقاط شبکه در راستای طول و عرض جغرافیایی در اولین دامنه 90×69 و در داخلی‌ترین دامنه 40×25 است. گام زمانی انتگرال‌گیری برای دامنه بیرونی ۱۸۰ ثانیه می‌باشد. دامنه دوم، منطقه تهران را پوشش داده است (شکل ۳). در پیکربندی مدل از طرح نقشه لامبرت استفاده شده و دامنه هر شبکه به‌صورت یک‌طرفه با شبکه بیرونی خود برهم‌کنش دارد. همچنین در تنظیمات مدل، تعداد ۳۵ تراز در راستای قائم در نظر گرفته شده که فشار در بالاترین تراز آن برابر hPa ۵۰ است. مدل WRF-Chem شامل تعداد زیادی طرحواره‌های پارامترسازی فیزیکی (خردفیزیک، همرفت، سطح زمین، لایه مرزی سطحی، لایه سطحی، تابش موج کوتاه و موج‌بلند و شیمی) است. بنابراین با ترکیب این



شکل ۳. تصویر دو دامنه تو در توی استفاده شده در شبیه‌سازی‌های مدل WRF-Chem به‌ترتیب با تفکیک‌های افقی ۳۰ و ۱۰ کیلومتر به‌همراه مشخصات جغرافیایی دامنه دوم که استان تهران روی آن مشخص شده است.

جدول ۲. تنظیمات مورد استفاده در مدل که برای تمام اجراها ثابت در نظر گرفته شده است.

D ₂	D ₁	دامنه
۴۰×۲۵	۹۰×۶۹	نقاط شبکه (x,y)
۱۰	۳۰	گام شبکه (km)
۱۰	۶۰	فاصله زمانی خروجی ها (دقیقه)
Monin-Obukhov (MM5) (جانجیک، ۱۹۹۶)		طرحواره لایه سطحی
Yonsei University scheme (YSU) (هونگ و همکاران، ۲۰۰۶؛ هونگ، ۲۰۱۰)		طرحواره لایه مرزی سیاره‌ای
Grell and Devenyi ensemble scheme (GD) (گرل و دونی، ۲۰۰۲)		طرحواره همرفت
WRF-Single-Moment-Microphysics 5-class scheme (WSM5) (هونگ و همکاران، ۲۰۰۴)		طرحواره خردفیزیک
Rapid Radiative Transport Model (RRTM) (مالور و همکاران، ۱۹۹۷)		طرحواره تابش طول موج بلند
Goddard (چو و سوارز، ۱۹۹۴)		طرحواره تابش طول موج کوتاه
NOAH land surface model (چن و دودیا، ۲۰۰۱؛ لیو و همکاران، ۲۰۰۶)		طرحواره سطح زمین
RADM2 chemical mechanism (استاکول و همکاران، ۱۹۹۰)		طرحواره شیمی
GOCART (چین و همکاران، ۲۰۰۰)		پارامترسازی هواویز

اخیر مبتنی بر ماهواره (پیکرینگ و همکاران، ۲۰۱۶) شبیه‌سازی می‌شوند (پرایس و ریند، ۱۹۹۳؛ وُنگ و همکاران، ۲۰۱۳).

۲-۳. روش ارزیابی

برای ارزیابی و درستی‌سنجی داده‌های حاصل از شبیه‌سازی‌های مدل WRF-Chem از سنج‌های آماری استفاده می‌شود. این سنج‌ها عمدتاً شامل ضریب همبستگی پیرسون (CC)، خطای جذر میانگین مربعات (RMSE)، اُریبی (Bias) و میانگین خطای مطلق (MAE) است که در ادامه به ترتیب معرفی می‌شوند. ضریب همبستگی به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$CC = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{M_i - \bar{M}}{STD_M} \right) \left(\frac{O_i - \bar{O}}{STD_O} \right) \quad (1)$$

که در آن N تعداد داده، M و O نیز به ترتیب نتایج حاصل از شبیه‌سازی توسط مدل و داده‌های مشاهداتی را نشان می‌دهند. مقدار CC همیشه بین ۱+ و ۱- است. ضریب همبستگی پیرسون بین دو متغیر تصادفی برابر با کوواریانس آنها تقسیم بر انحراف معیار (STD) آنها تعریف می‌شود. جذر میانگین مربعات خطا میزان خطا بین دو مجموعه داده را تعیین می‌کند. از آنجایی که خطاها قبل از میانگین‌گیری مجذور می‌شوند، RMSE وزن نسبتاً

در این مطالعه، برای تولید گسیل‌های شبکه‌بندی شده انسان‌زاد، زیست‌زاد و سوختن زیست‌توده در دامنه شبیه‌سازی از پیش‌پردازشگر گسیل PREP-CHEM-SRC (نسخه ۱/۵) استفاده شده است (فریتاس و همکاران، ۲۰۱۱). PREP-CHEM-SRC ابزاری جامع با هدف آماده‌سازی میدان‌های گسیل گازهای کمیاب و هواویزها برای استفاده در مدل‌های انتقال جو-شیمی است. گسیل‌های در نظر گرفته شده از جدیدترین پایگاه‌های داده شهری/صنعتی، زیست‌زاد، سوختن زیست‌توده‌ها، آتشفشانی، کاربرد سوخت زیستی و سوختن حاصل از چشمه‌های پسماند کشاورزی است (توضیحی از این داده‌ها در بخش ۲-۱-۴ ارائه شده است). برای سوختن زیست‌توده‌ها، گسیل‌ها را می‌توان به طور مستقیم از آشکارسازهای ماهواره‌ای آتش‌سوزی با استفاده از مدل گسیل آتش موجود در ابزار تخمین زد. PREP-CHEM-SRC میدان‌های گسیل را در شبکه مدل انتقال درونیایی می‌کند. از مدل سوختن زیست‌توده‌های برزیلی (BEM3) که با استفاده از PREP-CHEM-SRC تهیه شده است، استفاده می‌شود. گسیل‌های NO_x ناشی از آذرخش با استفاده از پارامترسازی بر اساس ارتفاع قله ابر با استفاده از آهنگ درخش $mol.flash^{-1}$ ۸۰ برگرفته از برآوردهای

و O_3 حاصل از آشیانه درونی مدل WRF-Chem و توزیع مکانی NO_2 و O_3 مستخرج از ماهواره OMI) (۲) ارزیابی ایستگاهی (مقایسه بین خروجی‌های درونی‌ترین آشیانه مدل WRF-Chem و مقادیر ایستگاه‌های سنجش آلودگی در سطح شهر تهران) انجام شده است.

۳-۱. ارزیابی پهنه

عملکرد سنجنده OMI به گونه‌ای است که تعداد مولکول‌های NO_2 را در یک ستون از وردسپهر برآورد می‌کند. اکثر مقادیر برآوردشده به دلیل پایداری کم NO_2 (بین چند ساعت تا حدود یک روز) در نزدیکی چشمه‌های گسیل این گاز بر سطح زمین، به‌ویژه مناطق صنعتی و پرجمعیت یافت می‌شود. بنابراین غلظت NO_2 اندازه‌گیری شده در سطح زمین با تعداد مولکول‌های NO_2 برآوردشده توسط ماهواره در ستون‌های وردسپهری متناسب است (آناند و مونکس، ۲۰۱۷). از این ویژگی در درستی‌سنجی نتایج خروجی مدل WRF-Chem استفاده شده است.

نتایج شبیه‌سازی در ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹ بیشینه NO_2 در شمال غرب منطقه تهران به میزان حدود 0.00034 ppmv را نشان می‌دهد (شکل ۴-الف) که بیشینه NO_2 شبیه‌سازی شده در این منطقه با بیشینه $10^{16} \text{ molec/cm}^2$ 1.08915 برگرفته از داده‌های ماهواره‌ای OMI سازگاری دارد (شکل ۴-ب). نتایج شبیه‌سازی در ۵ آگوست ۲۰۱۹ نیز بیشینه NO_2 در شمال غرب منطقه تهران به میزان 0.00039 ppmv را نشان می‌دهد که با داده‌های ماهواره‌ای (بیشینه $10^{16} \text{ molec/cm}^2 \times 1/832$) همخوانی دارد (شکل‌های ۴-ج و ۴-د).

همان‌طور که شکل ۵ (مقایسه قسمت‌های الف و ب) نشان می‌دهد مدل به‌خوبی بیشینه NO_2 تاریخ ۹ ژوئیه ۲۰۲۰ برگرفته از داده‌های OMI به‌میزان $10^{16} \text{ molec/cm}^2 \times 1/1510$ را شبیه‌سازی کرده است.

بالایی به خطاهای بزرگ می‌دهد. هرچه RMSE کمتر باشد، مقادیر شبیه‌سازی شده و مشاهدات نزدیک‌تر است.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2} \quad (2)$$

به انحراف سامانمند برآوردهای انجام‌شده از مقدار واقعی آن، اُریبی گفته می‌شود. سامانمند به این معنی که برآوردها یا همواره کمتر از واقعیت و یا بیشتر از آن هستند.

$$Bias = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i) \quad (3)$$

میانگین خطای مطلق سنجه نشان‌دهنده میزان خطای مدل می‌باشد که بهترین مقدار آنها برابر صفر است و از طریق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^N |M_i - O_i|}{N} \quad (4)$$

۲-۴. تبدیل واحد

از آنجایی که غلظت NO_2 و O_3 شبیه‌سازی شده بر حسب بخش در میلیون حجم (ppmv) است، برای تبدیل آن به تعداد در میلیارد (ppb) که واحد اندازه‌گیری غلظت مشاهداتی است از روابط زیر استفاده شده است:

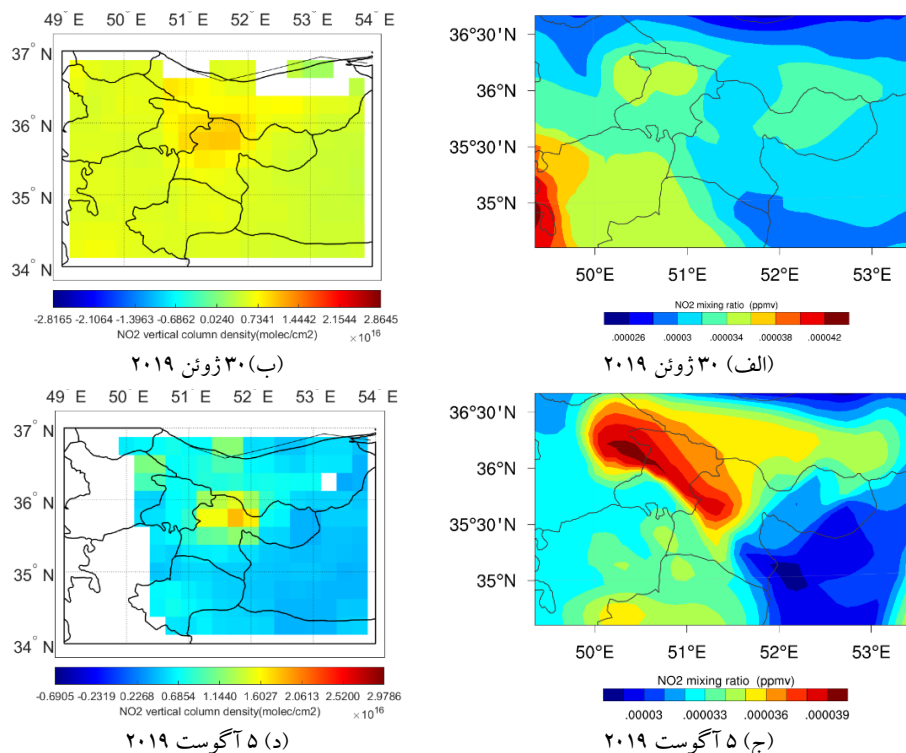
$$NO_2 (\text{ppb}) = NO_2 (\text{ppmv}) * 46 * \frac{P(\text{Pa}) * 273.15 / 22.4 / 101325}{T(K) * 1000} \quad (5)$$

$$O_3 (\text{ppb}) = O_3 (\text{ppmv}) * 48 * \frac{P(\text{Pa}) * 273.15 / 22.4 / 101325}{T(K) * 1000} \quad (6)$$

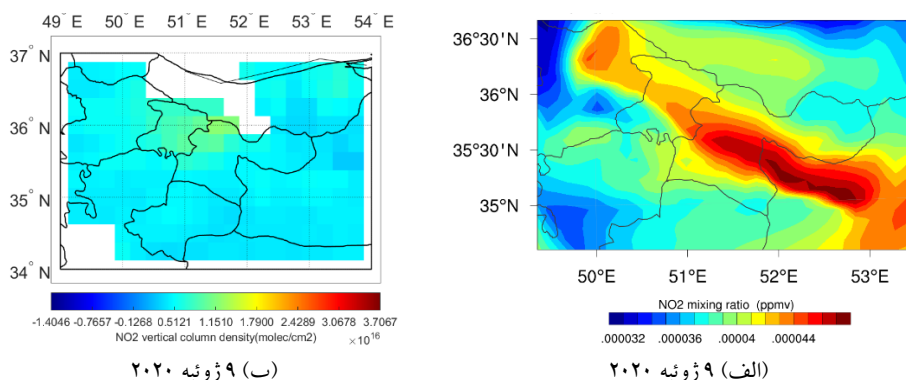
این تبدیل‌ها بر اساس وزن مولکولی ماده شیمیایی است. در این روابط، T ، دما بر حسب کلوین و P ، فشار جو بر حسب پاسکال است که مقادیر سطحی آنها در این محاسبه در نظر گرفته می‌شود.

۳. نتایج و بحث

در این بخش عملکرد مدل WRF-Chem در شبیه‌سازی NO_2 و O_3 بررسی می‌شود. ارزیابی نتایج در دو مرحله (۱) ارزیابی پهنه (مقایسه بین توزیع مکانی NO_2



شکل ۴. توزیع مکانی NO_2 برگرفته از شبیه‌سازی مدل WRF-Chem (الف و ج) و داده‌های OMI (ب و د) در روزهای بیشینه O_3 در تابستان سال ۲۰۱۹ (۱۳۹۸).



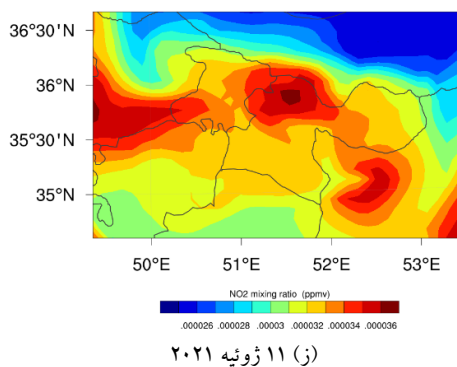
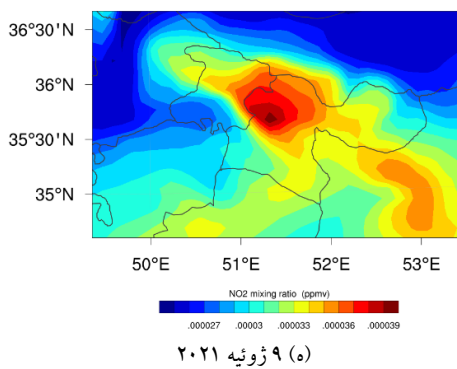
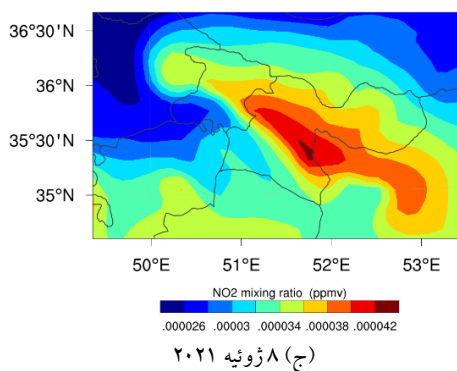
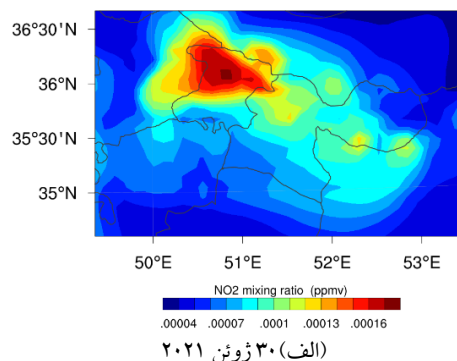
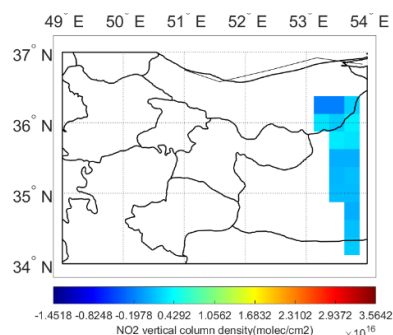
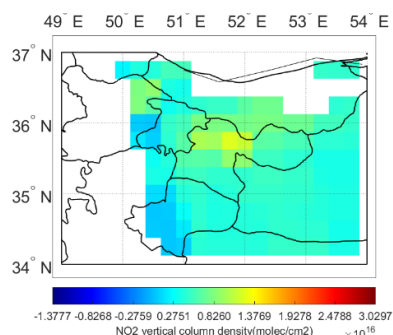
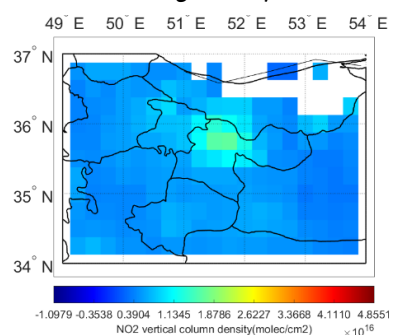
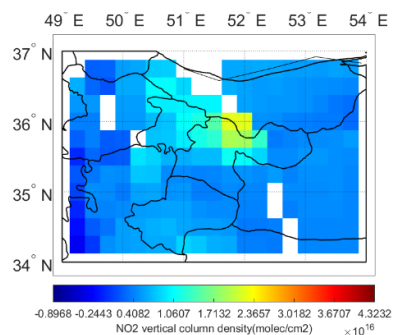
شکل ۵. توزیع مکانی NO_2 برگرفته از شبیه‌سازی مدل WRF-Chem (الف) و داده‌های OMI (ب) در روزهای بیشینه O_3 در تابستان سال ۲۰۲۰ (۱۳۹۹).

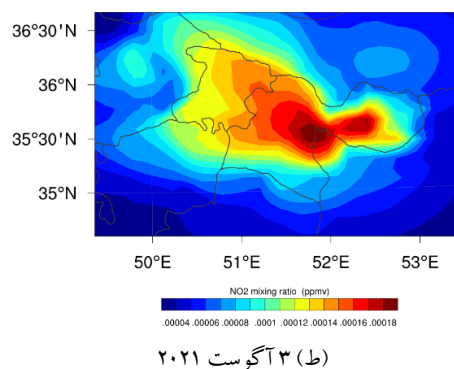
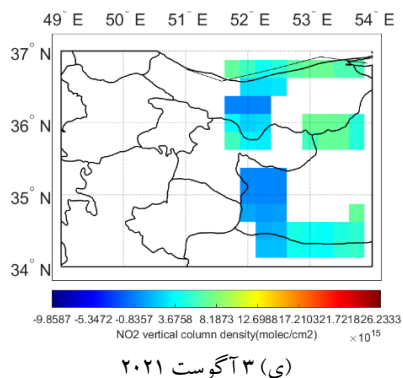
شبیه‌سازی بیشینه NO_2 را در ۹ ژوئیه ۲۰۲۱ در شمال غرب تهران به میزان $2/3657 \times 10^{16} \text{ molec/cm}^2$ را روی منطقه تهران نشان می‌دهد (شکل ۶-ب) که مدل این بیشینه را شبیه‌سازی کرده است (شکل ۶-الف). همچنین، بیشینه NO_2 شبیه‌سازی شده در ۸ ژوئیه ۲۰۲۱ روی منطقه تهران توسط مدل به خوبی نشان داده شده است (شکل ۶-ج). در این مورد، داده‌های ماهواره‌ای بیشینه‌ای به میزان $1/8786 \times 10^{16} \text{ molec/cm}^2$ را روی منطقه تهران نشان می‌دهد (شکل ۶-د). مطابق شکل‌های ۶-ه و ۶-و، نتایج

در ۳۰ ژوئن ۲۰۲۱، داده‌های ماهواره‌ای بیشینه NO_2 به میزان $2/3657 \times 10^{16} \text{ molec/cm}^2$ را روی منطقه تهران نشان می‌دهد (شکل ۶-ب) که مدل این بیشینه را شبیه‌سازی کرده است (شکل ۶-الف). همچنین، بیشینه NO_2 شبیه‌سازی شده در ۸ ژوئیه ۲۰۲۱ روی منطقه تهران توسط مدل به خوبی نشان داده شده است (شکل ۶-ج). در این مورد، داده‌های ماهواره‌ای بیشینه‌ای به میزان $1/8786 \times 10^{16} \text{ molec/cm}^2$ را روی منطقه تهران نشان می‌دهد (شکل ۶-د). مطابق شکل‌های ۶-ه و ۶-و، نتایج

کمی جابه‌جایی مکانی، مدل WRF-Chem پیشینه آلاینده NO₂ در روزهای مورد نظر در منطقه تهران را به‌خوبی شبیه‌سازی کرده است.

۰/۰۰۰۱۸ نشان می‌دهند (شکل ۶-ط) که در این تاریخ نیز گذر ماهواره به گونه‌ای است که داده‌ای در اختیار ما نمی‌گذارد (شکل ۶-ی). در مجموع، با در نظر گرفتن

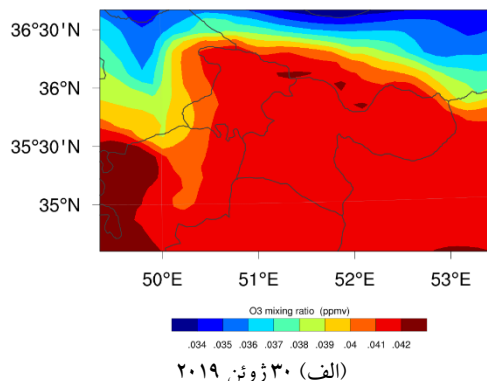
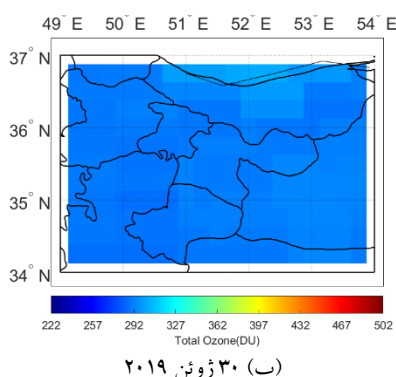




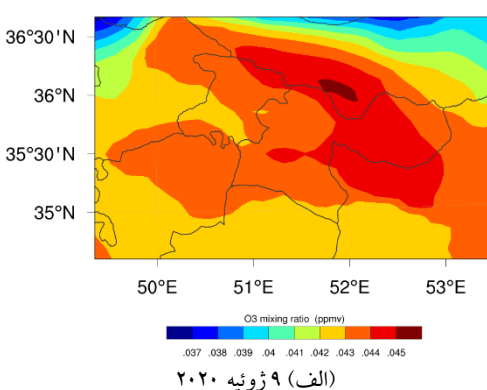
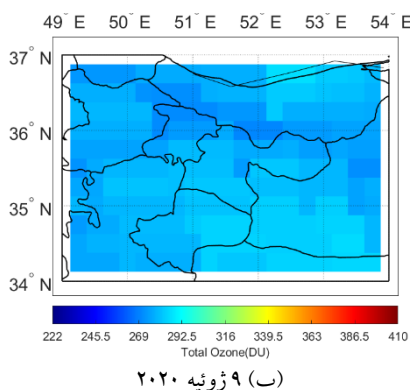
شکل ۶. توزیع مکانی NO_2 برگرفته از شبیه‌سازی مدل WRF-Chem (الف، ج، ه، ز و ط) و داده‌های OMI (ب، د، و، ح و ی) در روزهای بیشینه O_3 در تابستان سال ۲۰۲۱ (۱۴۰۰).

تهران در روزهای مورد بررسی را نشان می‌دهد. گذر ماهواره در اکثر روزها به گونه‌ای است که برای ارزیابی نتایج شبیه‌سازی مدل داده‌ای در اختیار قرار نمی‌دهد. تنها در تاریخ ۹ ژوئیه ۲۰۲۰، نتایج شبیه‌سازی با داده‌های ماهواره‌ای OMI همخوانی خوبی دارند (شکل‌های ۸-الف و ۸-ب).

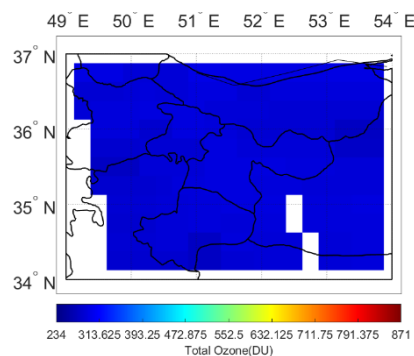
مطابق شکل‌های ۷-الف و ۸-الف، ۹-الف، ۹-ج و ۹-ه، مدل بیشینه O_3 سطحی روی منطقه تهران را در این روزها به خوبی شبیه‌سازی کرده است. خروجی مدل، بیشینه O_3 را مقداری بین ۰/۰۴۶-۰/۰۴۱ ppmv نشان می‌دهد. این مقادیر در مقایسه با مقادیر استاندارد میانگین ۲۴ ساعته O_3 (USEPA، ۲۰۲۰)، مقادیر بالای غلظت O_3 در منطقه



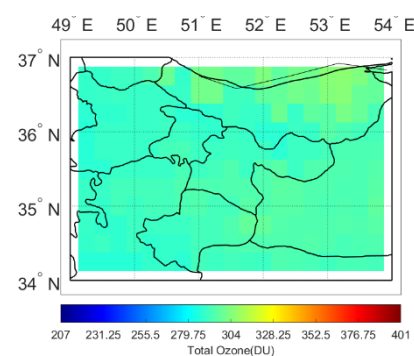
شکل ۷. توزیع مکانی O_3 برگرفته از شبیه‌سازی مدل WRF-Chem (الف) و داده‌های OMI (ب) در روزهای بیشینه O_3 در تابستان سال ۲۰۱۹ (۱۳۹۸).



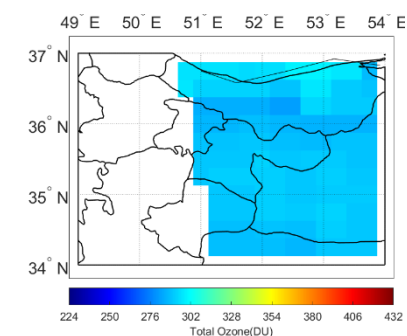
شکل ۸. توزیع مکانی O_3 برگرفته از شبیه‌سازی مدل WRF-Chem (الف) و داده‌های OMI (ب) در روزهای بیشینه O_3 در تابستان سال ۲۰۲۰ (۱۳۹۹).



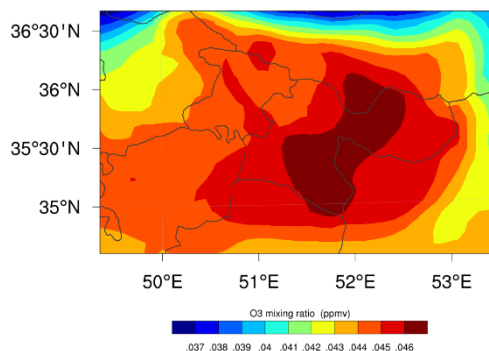
(ب) ۳۰ ژوئن ۲۰۲۱



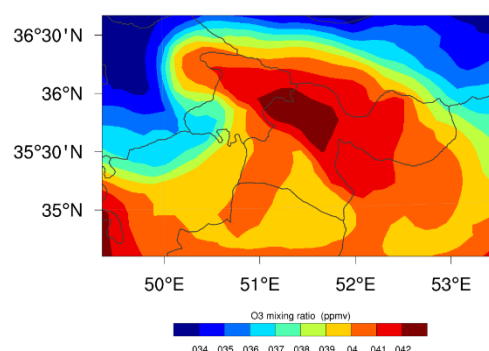
(د) ۸ ژوئیه ۲۰۲۱



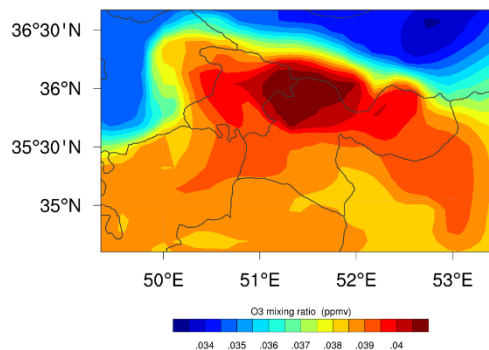
(و) ۹ ژوئیه ۲۰۲۱



(الف) ۳۰ ژوئن ۲۰۲۱



(ج) ۸ ژوئیه ۲۰۲۱



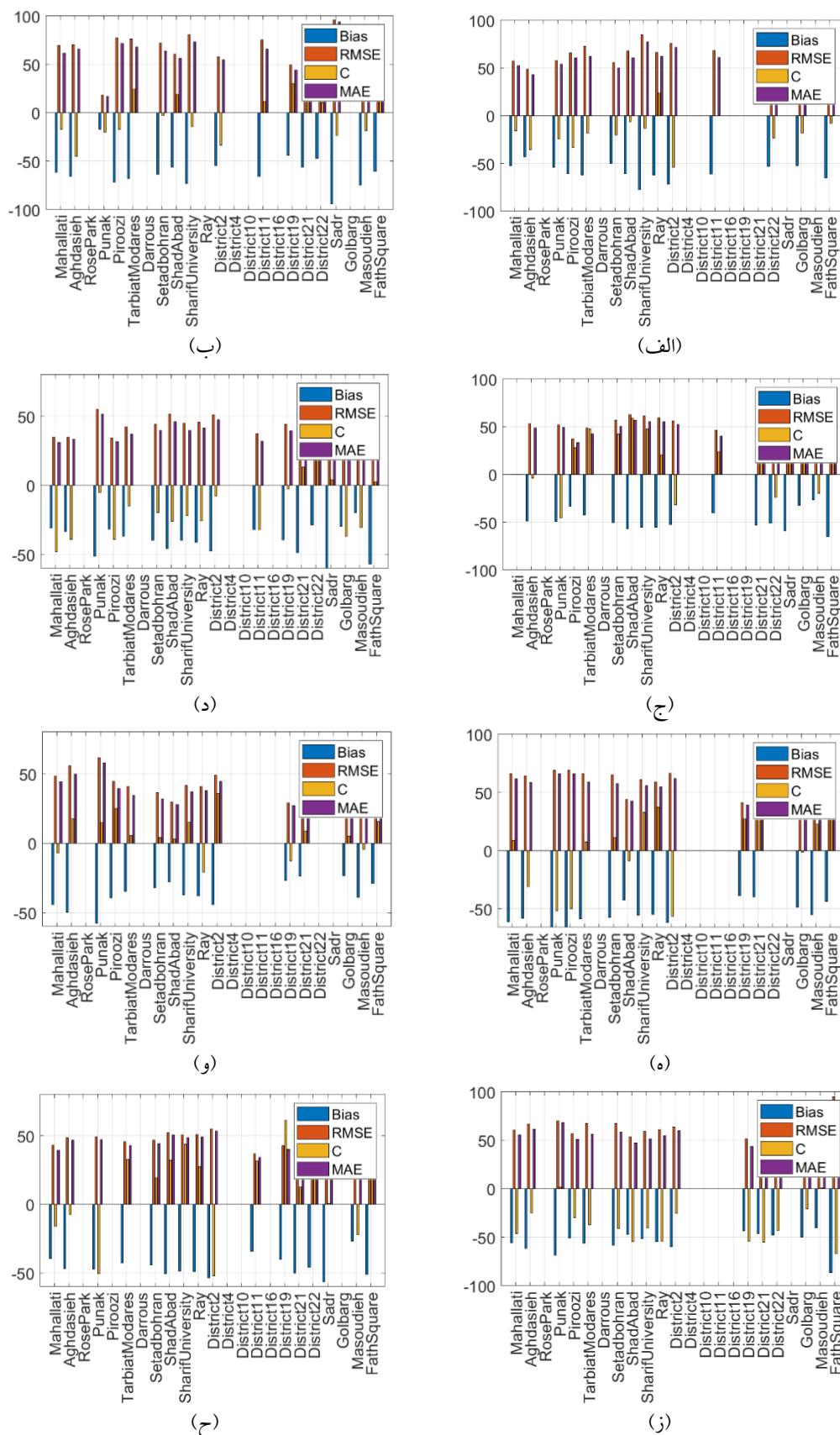
(ه) ۹ ژوئیه ۲۰۲۱

شکل ۹. توزیع مکانی O_3 برگرفته از شبیه‌سازی مدل WRF-Chem (الف، ج و ه) و داده‌های OMI (ب، د و و) در روزهای بیشینه O_3 در تابستان سال ۲۰۲۱ (۱۴۰۰).

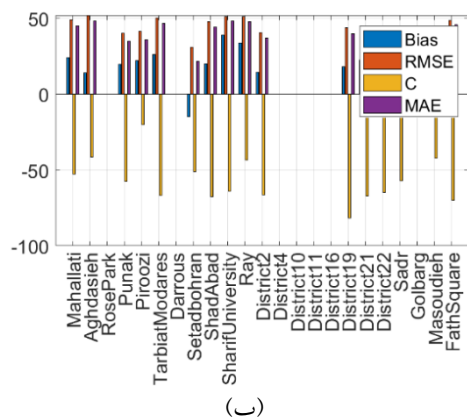
۲-۳. ارزیابی ایستگاهی

ppb و مقادیر ایستگاهی این غلظت‌ها (برای ایستگاه‌هایی که در تاریخ مورد بررسی داده ثبت کرده‌اند) به ترتیب در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ ارائه شده است. لازم به ذکر است که در این شکل‌ها همبستگی (C) بر حسب درصد بیان شده تا مقادیر آن در شکل‌ها مشخص باشد.

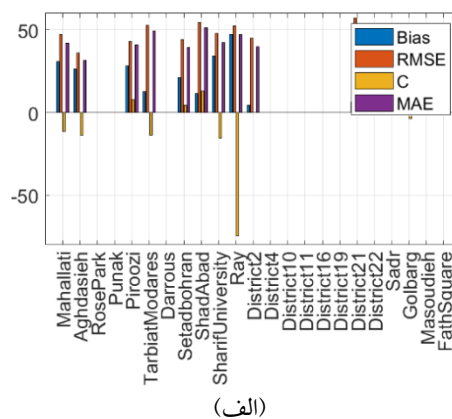
برای روزهای بیشینه O_3 در سال‌های ۲۰۱۹ و ۲۰۲۰ و ۲۰۲۱ (۱۳۹۸، ۱۳۹۹ و ۱۴۰۰)، مقادیر شاخص‌های آماری شامل Bias، RMSE، CC و MAE میان نتایج شبیه‌سازی مدل WRF-Chem برای غلظت‌های O_3 و NO_2 بر حسب



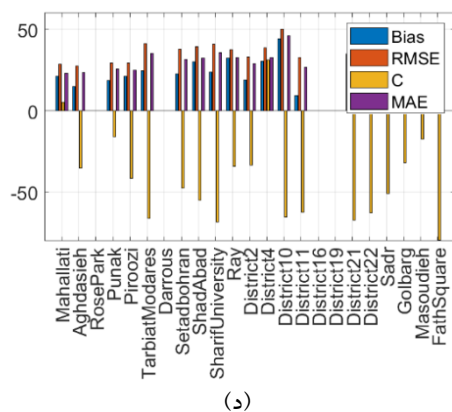
شکل ۱۰. نمودار میله‌ای شاخص‌های آماری (همبستگی پیرسون (C)، خطای جذر میانگین مربعات (RMSE)، اریبی (Bias) و میانگین خطای مطلق (MAE)) برای آلاینده NO_2 در (الف) ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹، (ب) ۵ آگوست ۲۰۱۹، (ج) ۹ ژوئیه ۲۰۲۰، (د) ۳۰ ژوئن ۲۰۲۱، (ه) ۸ ژوئیه ۲۰۲۱، (و) ۹ ژوئیه ۲۰۲۱، (ز) ۱۱ ژوئیه ۲۰۲۱ و (ح) ۳ آگوست ۲۰۲۱.



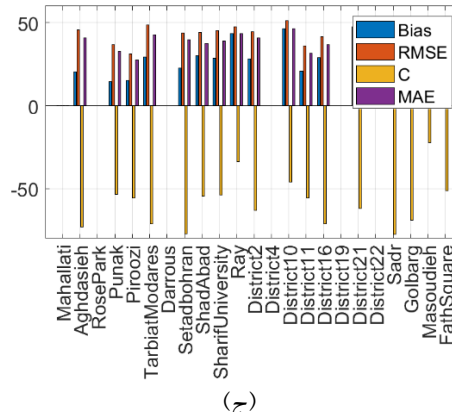
(ب)



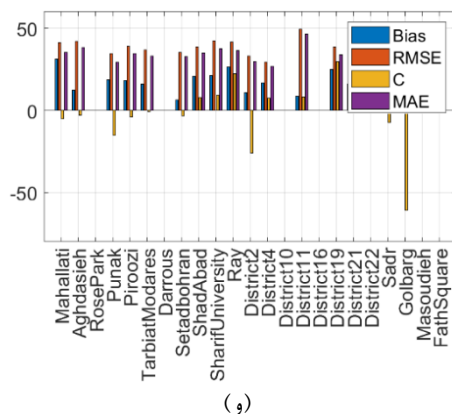
(ف)



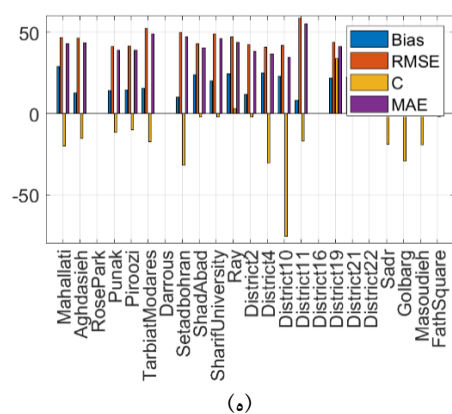
(د)



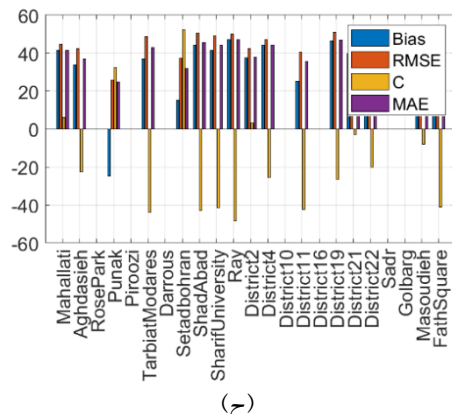
(ج)



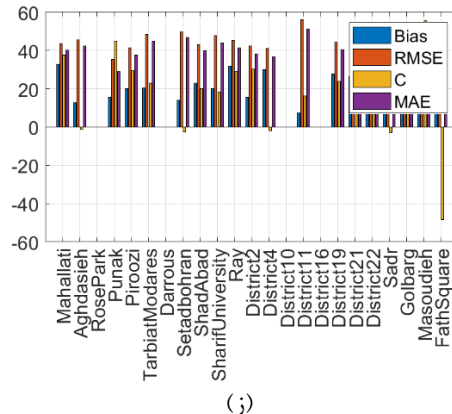
(و)



(ه)



(ح)



(ز)

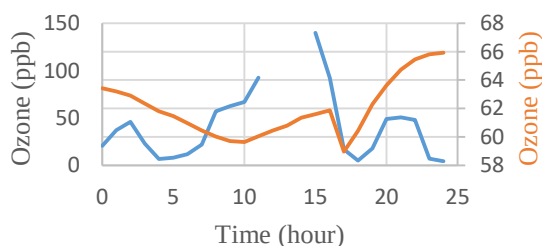
شکل ۱۱. نمودار میله‌ای شاخص‌های آماری (همبستگی پیرسون (C)، خطای جذر میانگین مربعات (RMSE)، آریبی (Bias) و میانگین خطای مطلق (MAE)) برای آلاینده O_3 در (الف) ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹، (ب) ۵ آگوست ۲۰۱۹، (ج) ۹ ژوئیه ۲۰۲۰، (د) ۳۰ ژوئن ۲۰۲۱، (ه) ۸ ژوئیه ۲۰۲۱، (و) ۹ ژوئیه ۲۰۲۱، (ز) ۱۱ ژوئیه ۲۰۲۱ و (ح) ۳ آگوست ۲۰۲۱.

بررسی مقادیر آریبی حاصل از مقایسه بین غلظت‌های شبیه‌سازی شده NO_2 و O_3 و مقادیر اندازه‌گیری شده این غلظت‌ها برای تمامی روزهای بیشینه در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نشان می‌دهد که مقادیر آریبی برای O_3 مثبت بوده و این نشان‌دهنده فراتخمین غلظت O_3 توسط مدل WRF-Chem است. در حالی که در این بررسی مقادیر بالای آریبی منفی برای NO_2 به دست آمده است که حاکی از فروتخمین زیاد مدل در شبیه‌سازی غلظت NO_2 است.

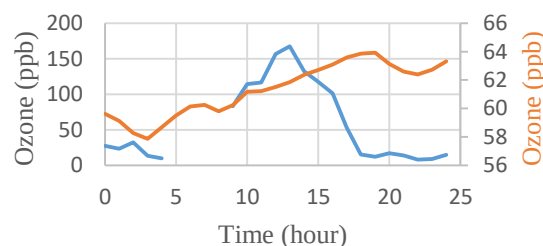
بیشینه غلظت O_3 در روزهای مورد بررسی در ایستگاه‌های با بالاترین همبستگی مثبت، بین ۷۰/۳۷ تا ۱۳۹/۷۷ ppb متغیر است که این بیشینه از نتایج حاصل از مدل بین ۶۳/۲۴ تا ۷۶/۱۷ ppb بوده است و بنابراین مقادیر بالای آریبی برای O_3 دور از انتظار نیست.

با بررسی شکل‌های ۱۰ و ۱۱ برای ایستگاه‌هایی که در آنها بالاترین ضرایب همبستگی مثبت به دست آمده است، تغییرات ساعتی O_3 شبیه‌سازی شده و مشاهداتی در ادامه در شکل ۱۲ ترسیم شده‌اند. نکته مورد توجه در این شکل

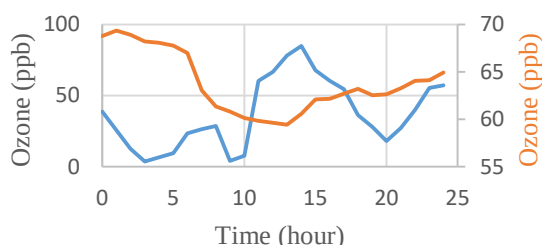
این است که بیشینه غلظت O_3 که در بعدازظهر اتفاق می‌افتد، توسط مدل فروتخمین شده است در حالی که در ساعت‌های ابتدایی و انتهایی روز فراتخمین شده است. همان‌طور که شکل ۱۲ نشان می‌دهد، تغییرات ساعتی O_3 شبیه‌سازی شده و مشاهداتی در ایستگاه شهرداری منطقه ۲۲ در ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹ (شکل ۱۲-الف) و در ایستگاه ستاد بحران در ۳ آگوست ۲۰۲۱ (شکل ۱۲-ح) از روند تقریباً مشابهی برخوردارند. اما یکی از دلایل برآورد بیشتر یا کمتر غلظت O_3 در طول دوره شبیه‌سازی این است که خروجی‌های شبیه‌سازی در ابتدای هر ساعت استخراج می‌شوند، در حالی که اندازه‌گیری‌ها به‌طور میانگین گزارش می‌شوند. دلیل دیگر می‌تواند برآوردهای شار انسان‌زاد و زیستی باشد. استفاده از داده‌های جهانی انتشار نقش بارزی بر نتایج خروجی مدل دارد (نیک‌فال و رنجبر، ۱۳۹۵). همچنین اختلاط لایه مرزی و تأثیر آن در بودجه O_3 خالص در فراتخمین غلظت O_3 سطحی توسط مدل نقش دارد (تراویس و همکاران، ۲۰۱۶).



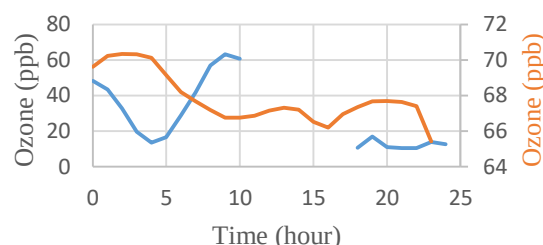
(ب)



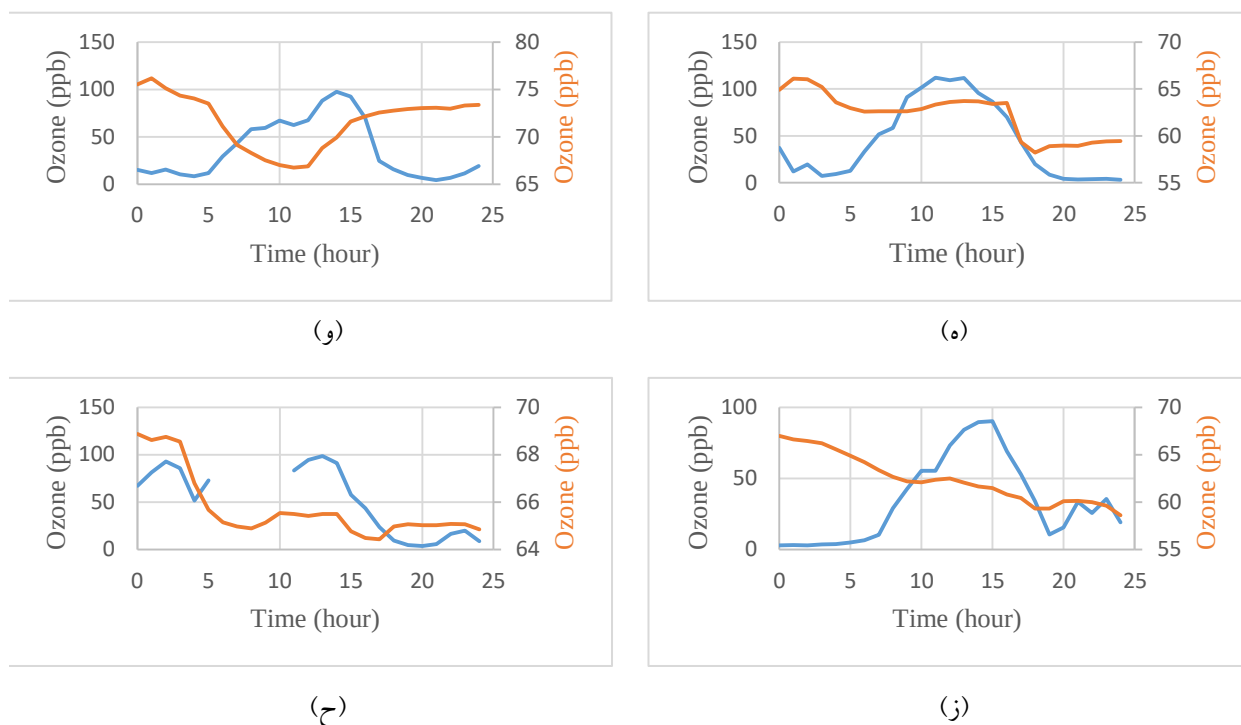
(الف)



(د)



(ج)



شکل ۱۲. تغییرات زمانی (ساعتی) O_3 شبیه‌سازی شده (منحنی نارنجی‌رنگ) و مشاهداتی (منحنی آبی‌رنگ) (الف) در ایستگاه شهرداری منطقه ۲۲ در ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹ ($CC=0.44$)، (ب) در ایستگاه پیروزی در ۵ آگوست ۲۰۱۹ ($CC=0.20$)، (ج) در ایستگاه شهرداری منطقه ۲۲ در ۹ ژوئیه ۲۰۲۰ ($CC=0.10$)، (د) در ایستگاه شهرداری منطقه ۴ در ۳۰ ژوئن ۲۰۲۱ ($CC=0.31$)، (ه) در ایستگاه شهرداری منطقه ۲۲ در ۸ ژوئیه ۲۰۲۱ ($CC=0.36$)، (و) در ایستگاه شهرداری منطقه ۱۹ در ۹ ژوئیه ۲۰۲۱ ($CC=0.30$)، (ز) در ایستگاه شهرداری مسعودیه در ۱۱ ژوئیه ۲۰۲۱ ($CC=0.56$) و (ح) در ایستگاه ستاد بحران در ۳ آگوست ۲۰۲۱ ($CC=0.52$).

۴. خلاصه و نتیجه‌گیری

پژوهش حاضر با هدف ارزیابی عملکرد مدل WRF-Chem در برآورد مقدار ایستگاهی و پهنه O_3 و NO_2 در منطقه تهران در طی تابستان‌های ۱۳۹۸-۱۴۰۰ انجام شده است. ارزیابی نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های مدل WRF-Chem در دو مرحله (۱) ارزیابی پهنه (مقایسه بین توزیع مکانی O_3 و NO_2 حاصل از آشیانه درونی مدل WRF-Chem و توزیع مکانی O_3 و NO_2 مستخرج از ماهواره OMI) و (۲) ارزیابی ایستگاهی (مقایسه بین خروجی‌های داخلی‌ترین آشیانه مدل WRF-Chem و مقادیر ایستگاه‌های سنجش آلودگی در سطح شهر تهران) انجام شد.

نتایج ارزیابی پهنه NO_2 شبیه‌سازی شده و پهنه برگرفته از داده‌های ماهواره‌ای OMI نشان داد که مدل بیشینه NO_2 در روزهای ۵ آگوست ۲۰۱۹، ۸ ژوئیه ۲۰۲۱، ۹ ژوئیه ۲۰۲۱ و ۳ آگوست ۲۰۲۱ در منطقه تهران را به‌خوبی

شبیه‌سازی کرده است. در ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹، ۹ ژوئن ۲۰۲۰ و ۳۰ ژوئن ۲۰۲۱ هم با در نظر گرفتن کمی جابه‌جایی مکانی می‌توان گفت که مدل در شبیه‌سازی بیشینه غلظت NO_2 روی تهران عملکرد خوبی داشته است. در مورد ارزیابی توزیع مکانی O_3 در روزهای بیشینه آلاینده O_3 در سال‌های مورد بررسی نتایج حاصل از شبیه‌سازی غلظت O_3 سطحی و آزون کلی برگرفته از OMI برحسب دابسون نتایج حاکی از این است که در تمامی روزهای اجرا، مدل بیشینه O_3 سطحی را روی تهران نشان می‌دهد. گذر ماهواره در اکثر روزهای اجرا به‌گونه‌ای است که داده‌ای در اختیار ما نمی‌گذارد.

در ارزیابی ایستگاهی، برای روزهای بیشینه O_3 در سال‌های مورد بررسی، مقادیر شاخص‌های آماری شامل Bias، RMSE، و CC میان نتایج شبیه‌سازی مدل WRF-Chem برای غلظت‌های O_3 و NO_2 بر حسب ppb و مقادیر ایستگاهی این غلظت‌ها مقایسه صورت گرفت.

بیشتر غلظت O_3 ممکن است به دلیل اختلاط لایه مرزی و تأثیر آن در بودجه ازون خالص در مدل باشد. بررسی این موضوع مطالعه دیگری در راستای بررسی متغیرهای هواشناسی لایه مرزی مرتبط و نقش آنها در بودجه ازون را می‌طلبد که توسط نگارندگان دنبال خواهد شد.

منابع

کریمی، ص. (۱۳۹۳). تحلیل همدیدی تغییرات غلظت ازون و ردسپهری کلانشهر تهران، فصلنامه تحقیقات کاربردی علوم جغرافیایی، ۱۴(۳۲)، ۷-۲۶.
نیک‌فال، ا.، و رنجبر، ع. (۱۳۹۵). برآورد غلظت آلاینده‌های معیار جوی با استفاده از مدل WRF-Chem و داده‌های جهانی انتشار-مطالعه موردی تهران. فصلنامه علوم محیطی، ۱۴(۳)، ۱۲۳-۱۳۰.

Anand, J. S., & Monks, P. S. (2017). Estimating daily surface NO_2 concentrations from satellite data—a case study over Hong Kong using land use regression models. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 17(13), 8211-8230.
Ackermann, I. J., Hass, H., Memmesheimer, M., Ebel, A., Binkowski, F. S., & Shankar, U. M. A. (1998). Modal aerosol dynamics model for Europe: Development and first applications. *Atmospheric environment*, 32(17), 2981-2999.
Ainsworth, E. A., Yendrek, C. R., Sitch, S., Collins, W. J., & Emberson, L. D. (2012). The effects of tropospheric ozone on net primary productivity and implications for climate change. *Annual review of plant biology*, 63, 637-661.
Chen, F., & Dudhia, J. (2001). Coupling an advanced land surface-hydrology model with the Penn State-NCAR MM5 modeling system. Part I: Model implementation and sensitivity. *Monthly weather review*, 129(4), 569-585.
Chin, M., Rood, R. B., Lin, S. J., Müller, J. F., & Thompson, A. M. (2000). Atmospheric sulfur cycle simulated in the global model GOCART: Model description and global properties. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 105(D20), 24671-24687.
Chou, M. D., & Suarez, M. J. (1994). An efficient thermal infrared radiation parameterization for use in general circulation models.
Freitas, S. R. D., Longo, K. M., Alonso, M. A.,

نتایج بیانگر فراتخمین غلظت O_3 و فروتخمین زیاد غلظت NO_2 توسط مدل WRF-Chem است. در ادامه برای ایستگاه‌هایی که در آنها بالاترین ضرایب همبستگی مثبت به‌دست آمده بود، تغییرات ساعتی O_3 شبیه‌سازی شده و مشاهداتی ترسیم شدند. نکته موردتوجه در این شکل‌ها این است که بیشینه غلظت O_3 که در بعدازظهر اتفاق می‌افتد، توسط مدل فروتخمین شده است در حالی که در ساعت‌های ابتدایی و انتهایی روز فراتخمین شده است. شاید بتوان این‌گونه بیان کرد که یکی از دلایل برآورد بیشتر یا کمتر غلظت O_3 در طول دوره شبیه‌سازی این است که خروجی‌های شبیه‌سازی در ابتدای هر ساعت استخراج می‌شوند، درحالی‌که اندازه‌گیری‌ها به‌طور میانگین گزارش می‌شوند. دلیل دیگر می‌تواند برآوردهای شار انسان‌زاد و زیستی باشد. استفاده از داده‌های جهانی گسیل نقش بارزی بر نتایج خروجی مدل دارد. همچنین برآورد

Pirre, M., Marecal, V., Grell, G., Stockler, R., Mello, R. F., & Sánchez Gácita, M. (2011). PREP-CHEM-SRC-1.0: a preprocessor of trace gas and aerosol emission fields for regional and global atmospheric chemistry models. *Geoscientific Model Development*, 4(2), 419-433.
Georgiou, G. K., Christoudias, T., Proestos, Y., Kushta, J., Hadjinicolaou, P., & Lelieveld, J. (2018). Air quality modelling in the summer over the eastern Mediterranean using WRF-Chem: chemistry and aerosol mechanism intercomparison. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18(3), 1555-1571.
Grell, G. A., & Dévényi, D. (2002). A generalized approach to parameterizing convection combining ensemble and data assimilation techniques. *Geophysical Research Letters*, 29(14), 38-1.
Grell, G. A., Peckham, S. E., Schmitz, R., McKeen, S. A., Frost, G., Skamarock, W. C., & Eder, B. (2005). Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment*, 39(37), 6957-6975.
Gu, Y., Li, K., Xu, J., Liao, H., & Zhou, G. (2020). Observed dependence of surface ozone on increasing temperature in Shanghai, China. *Atmospheric Environment*, 221, 117108.
Guenther, A., Karl, T., Harley, P., Wiedinmyer, C., Palmer, P. I., & Geron, C. (2006). Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of

- Emissions of Gases and Aerosols from Nature). *Atmospheric Chemistry and Physics*, (6)11, 3181-3210.
- Hong, S. Y. (2010). A new stable boundary-layer mixing scheme and its impact on the simulated East Asian summer monsoon. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 136(651), 1481-1496.
- Hong, S. Y., Dudhia, J., & Chen, S. H. (2004). A revised approach to ice microphysical processes for the bulk parameterization of clouds and precipitation. *Monthly weather review*, 132(1), 103-120.
- Hong, S. Y., Noh, Y., & Dudhia, J. (2006). A new vertical diffusion package with an explicit treatment of entrainment processes. *Monthly weather review*, 134(9), 2318-2341.
- IPCC (2013). Climate Change 2013, the Physical Science Basis. Working Group I contribution to the fifth assessment report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, Cambridge University Press, Cambridge.
- Janjic, Z. I. (1996). The Mellor-Yamada level 2.5 turbulence closure scheme in the NCEP Eta Model. *World Meteorological Organization-Publications-WMO TD*, 4-14.
- Jiang, F., Liu, Q., Huang, X., Wang, T., Zhuang, B., & Xie, M. (2012). Regional modeling of secondary organic aerosol over China using WRF/Chem. *Journal of aerosol science*, 43(1), 57-73.
- Kumar, R., Naja, M., Pfister, G. G., Barth, M. C., Wiedinmyer, C., & Brasseur, G. P. (2012). Simulations over South Asia using the Weather Research and Forecasting model with Chemistry (WRF-Chem): chemistry evaluation and initial results. *Geoscientific Model Development*, 5(3), 619-648.
- Lelieveld, J., Evans, J. S., Fnais, M., Giannadaki, D., & Pozzer, A. (2015). The contribution of outdoor air pollution sources to premature mortality on a global scale. *Nature*, 525(7569), 367-371.
- Liu, Y., Chen, F., Warner, T., & Basara, J. (2006). Verification of a mesoscale data-assimilation and forecasting system for the Oklahoma City area during the Joint Urban 2003 field project. *Journal of applied meteorology and climatology*, 45(7), 912-929.
- Mlawer, E. J., Taubman, S. J., Brown, P. D., Iacono, M. J., & Clough, S. A. (1997). Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 102(D14), 16663-16682.
- NASA: OMNO2d, available at: https://disc.gsfc.nasa.gov/datasets/OMNO2d_003/summary, last access: 30 June 2019.
- Nikfal, A. H., Ranjbar Saadat Abadi, A., Rahnama, M., Tajbakhsh Mosalman, S., & Moradi, M. (2022). Contribution of source emissions in the air pollution modeling-a WRF/Chem case study. *Journal of the Earth and Space Physics*, 47(4), 143-156.
- Olivier, J. G., Van Aardenne, J. A., Dentener, F. J., Pagliari, V., Ganzeveld, L. N., & Peters, J. A. (2005). Recent trends in global greenhouse gas emissions: regional trends 1970-2000 and spatial distribution of key sources in 2000. *Environmental Sciences*, 2(2-3), 81-99.
- Pickering, K. E., Bucsela, E., Allen, D., Ring, A., Holzworth, R., & Krotkov, N. (2016). Estimates of lightning NO_x production based on OMI NO₂ observations over the Gulf of Mexico. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 121(14), 8668-8691.
- Price, C., & Rind, D. (1993). What determines the cloud-to-ground lightning fraction in thunderstorms?. *Geophysical Research Letters*, 20(6), 463-466.
- Schell, B., Ackermann, I. J., Hass, H., Binkowski, F. S., & Ebel, A. (2001). Modeling the formation of secondary organic aerosol within a comprehensive air quality model system. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 106(D22), 28275-28293.
- Seinfeld, J. H., & Pandis, S. N. (2016). *Atmospheric Chemistry and Physics*. Wiley.
- Sitch, S., Cox, P. M., Collins, W. J., & Huntingford, C. (2007). Indirect radiative forcing of climate change through ozone effects on the land-carbon sink. *Nature*, 448(7155), 791-794.
- Stockwell, W. R., Middleton, P., Chang, J. S., & Tang, X. (1990). The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 95(D10), 16343-16367.
- Terrenoire, E., Bessagnet, B., Rouil, L., Tognet, F., Pirovano, G., Letinois, L., Beauchamp, M., Colette, A., Thunis, P., Amann, M., & Menut, L. (2015). High-resolution air quality simulation over Europe with the chemistry transport model CHIMERE. *Geoscientific Model Development*, 8(1), 21-42.
- Travis, K. R., Jacob, D. J., Fisher, J. A., Kim, P. S., Marais, E. A., Zhu, L., Yu, K., Miller, C. C., Yantosca, R. M., Sulprizio, M. P., & Thompson, A. M. (2016). Why do models overestimate surface ozone in the Southeast United States?. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16(21), 13561-13577.
- U.S. EPA. Integrated Science Assessment (ISA) for Ozone and Related Photochemical Oxidants (Final Report, Apr 2020). U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, EPA/600/R-20/012, 2020.
- Visser, A. J., Boersma, K. F., Ganzeveld, L. N., &

- Krol, M. C. (2019). European NO_x emissions in WRF-Chem derived from OMI: impacts on summertime surface ozone. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19(18), 11821-11841.
- Wong, J., Barth, M. C., & Noone, D. (2013). Evaluating a lightning parameterization based on cloud-top height for mesoscale numerical model simulations. *Geoscientific Model Development*, 6(2), 429-443.
- Yerramilli, A., Challa, V. S., Dodla, V. B. R., Myles, L., Pendergrass, W. R., Vogel, C. A., Tului, F., Baham, J. M., Hughes, R., Patrick, C. & Young, J. (2012). Simulation of surface ozone pollution in the Central Gulf Coast region during summer synoptic condition using WRF/Chem air quality model. *Atmospheric Pollution Research*, 3(1), 55-71.