

## مطالعه عددی موردی تغییرات مکانی و زمانی اکسیدهای نیتروژن و اوزون در منطقه تهران

مژگان شیرین<sup>۱</sup>، مریم قرایلو<sup>۲</sup>، عباسعلی علی اکبری بیدختی<sup>۳</sup> و نفیسه پگاه فر<sup>۴</sup>  
<sup>۱</sup> دانش‌آموخته کارشناسی ارشد هواشناسی، گروه فیزیک فضا، موسسه ژئوفیزیک دانشگاه تهران، تهران، ایران  
<sup>۲</sup> دانشیار، گروه فیزیک فضا، موسسه ژئوفیزیک دانشگاه تهران، تهران، ایران  
<sup>۳</sup> استاد، گروه فیزیک فضا، موسسه ژئوفیزیک دانشگاه تهران، تهران، ایران  
<sup>۴</sup> استادیار، پژوهشگاه علوم جوی، پژوهشگاه ملی اقیانوس‌شناسی و علوم جوی، تهران، ایران

### چکیده

اوزون ( $O_3$ ) یکی از آلاینده‌های هوا است که بر سلامت انسان و زیست‌بوم تأثیر می‌گذارد. تشکیل اوزون در وردسپهر زیرین یک فرایند نورشیمیایی است که گونه‌های پیش‌ساز آن اکسیدهای نیتروژن ( $NO_x = NO + NO_2$ ) و ترکیبات آلی فرار هستند. پژوهش حاضر با هدف ارزیابی عملکرد مدل WRF-Chem در برآورد پهنه و مقدار ایستگاهی  $NO_2$  و  $O_3$  در منطقه تهران در یکی از روزهای رخداد بیشینه غلظت اوزون در فصل تابستان ۱۳۹۸ انجام شد. ارزیابی‌ها در دو مرحله ارزیابی پهنه و ارزیابی ایستگاهی صورت گرفت. در ارزیابی پهنه، نتایج شبیه‌سازی بیشینه نسبت اختلاط سطحی  $NO_2$  روی منطقه تهران با داده‌های ماهواره‌ای OMI همخوانی دارد. همچنین مدل به‌خوبی منطقه بیشینه اوزون روی تهران را شبیه‌سازی کرده است. در ارزیابی ایستگاهی، مقادیر شاخص‌های آماری میان نتایج شبیه‌سازی مدل و مقادیر ایستگاهی برای غلظت‌های  $NO_2$  و  $O_3$  محاسبه شد. ارزیابی ایستگاهی بیانگر فراتخمین غلظت اوزون و فروتخمین زیاد غلظت  $NO_2$  توسط مدل WRF-Chem است.

واژه‌های کلیدی: مدل WRF-Chem، شهر تهران،  $O_3$ ،  $NO_2$

### Numerical case study of spatial and temporal changes of nitrogen oxides and ozone over Tehran city

Mozhgan Shirin<sup>1</sup>, Maryam Gharaylou<sup>2</sup>, AbbasAli A. Bidokhti<sup>3</sup> and Nafiseh Pegahfar<sup>4</sup>

<sup>1</sup> M.Sc. graduate, Institute of Geophysics, University of Tehran, Tehran, Iran

<sup>2</sup> Associate professor, Institute of Geophysics, University of Tehran, Tehran, Iran

<sup>3</sup> Professor, Institute of Geophysics, University of Tehran, Tehran, Iran

<sup>4</sup> Assistant Professor, Atmospheric Science Research Center, Iranian National Institute for Oceanography and Atmospheric Science, Tehran, Iran

### Abstract

Ozone ( $O_3$ ) is an air pollutant that affects human health and the ecosystem. Ozone formation in the lower troposphere is a photochemical process, and nitrogen oxides and volatile organic compounds are its precursor species. This study aimed to evaluate the performance of the WRF-Chem model in estimating the amount of  $NO_2$  and  $O_3$  in Tehran city during a day in summer 2019 with high  $O_3$  concentration. Evaluations were performed in two stages: (I) area evaluation and (II) station evaluation. The area evaluation showed that the simulated maximum  $NO_2$  in the Tehran region was consistent with OMI satellite data. Also, the WRF-Chem model showed good performance in simulating the maximum  $O_3$  in Tehran. In the station evaluation, the values of statistical indices were calculated between the model simulation results and the station values for  $NO_2$  and  $O_3$  concentrations. The station evaluation showed the WRF-Chem model overestimates surface ozone concentration and underestimates surface  $NO_2$  concentration.

**Keywords:** WRF-Chem, Tehran city,  $NO_2$ ,  $O_3$

## ۱ مقدمه

مدل WRF-Chem یک مدل تحقیق و پیش‌بینی وضع هوا (WRF) همراه با معادلات شیمیایی (Chemistry) است (گرل و همکاران، ۲۰۰۵). این مدل گسیل، انتقال، مخلوط شدن و تبدیل شیمیایی گازهای کمیاب و هواویزها را به طور همزمان با هواشناسی شبیه‌سازی می‌کند. این مدل برای بررسی کیفیت هوا در مقیاس منطقه‌ای، تجزیه و تحلیل میدانی و برهم‌کنش‌هایی در مقیاس ابر استفاده می‌شود. این مدل توسط NOAA توسعه یافته است و در حال حاضر، هنوز هم به طور فعال به‌روز می‌شود. نیک فال 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 برآورده شده از نظر بزرگی در مقایسه با داده‌های اندازه‌گیری شده مقادیر قابل قبولی دارد، اما مقادیر برآورد شده برای دو آلاینده  $CO$  و  $NO_2$  دارای فروتخمین شدیدی نسبت به داده‌های اندازه‌گیری شده می‌باشد. جورجیو و همکاران (۲۰۱۸) از مدل WRF-Chem برای مطالعه آلودگی هوا در تابستان در شرق مدیترانه استفاده کردند. آن‌ها از سه دامنه تو در تو با توان تفکیک افقی ۴، ۱۶ و ۸۰ کیلومتر با تمرکز بر جزیره قبرس در ژوئیه ۲۰۱۴ استفاده کردند. در تحقیق آنها گسیل‌های انسان‌زاد بر اساس داده‌های جهانی EDGAR-HTAP بود، در حالی که گردوخاک و گسیل‌های زیستی به صورت برخط محاسبه شدند. آن‌ها سه شبیه‌سازی با استفاده از سازوکارهای مختلف فاز گاز و هواویز انجام دادند و نتایج آن‌ها را با اندازه‌گیری‌های شبکه مشاهداتی متراکمی از ۱۴ ایستگاه زمینی در قبرس مقایسه کردند. غلظت‌های آزون توسط این سازوکارها در مقایسه با مشاهدات دارای فراتخمین بودند. هدف از پژوهش حاضر، ارزیابی عملکرد مدل WRF-Chem در شبیه‌سازی غلظت آلاینده‌های  $O_3$  و  $NO_2$  و مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های ماهواره‌ای و ایستگاهی است.

## ۲ روش تحقیق

منطقه مورد بررسی در پژوهش حاضر، شهر تهران می‌باشد. در ابتدا، با بررسی 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 ۲۵ ایستگاه سنجش آلودگی در سطح شهر تهران، یکی از روزهای رخداد بیشینه غلظت آزون در فصل تابستان ۱۳۹۸ برای اجرای مدل WRF-Chem انتخاب شد. شبیه‌سازی برای روز منتخب (۹ تیر ۱۳۹۸ برابر با ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹) ۳۶ ساعته انجام شد. ۱۲ ساعت اول اجرای مدل به عنوان spin-up در نظر گرفته شد. شبیه‌سازی با استفاده از ۲ شبکه تو در تو به ترتیب با تفکیک‌های ۳۰ و ۱۰ کیلومتر انجام شد. در تنظیمات مدل، تعداد ۳۵ تراز در راستای قائم در نظر گرفته شده که فشار در بالاترین تراز آن برابر ۵۰ hPa است. در این شبیه‌سازی، داده‌های سامانه پیش‌بینی جهانی عملیاتی NCEP (GFS) با تفکیک مکانی ۰/۵ درجه در راستای طول و عرض جغرافیایی و گام زمانی ۶ ساعته، به عنوان شرایط اولیه و شرایط مرزی در دامنه اول مدل به کار گرفته شد. طرحواره‌ها و تنظیمات استفاده شده در مدل WRF-Chem در جدول ۱ آورده شده است. در این مطالعه از پیش‌پردازشگر PREP-CHEM-SRC با هدف آماده‌سازی میدان‌های گسیل گازهای کمیاب و هواویزها استفاده شده است. نوع گسیل و پایگاه داده در جدول ۲ فهرست شده‌اند. در این مطالعه، در ارزیابی توزیع مکانی  $NO_2$  و  $O_3$  حاصل از اجرای مدل WRF-Chem از داده‌های سنجنده OMI (<https://disc.gsfc.nasa.gov/datasets>) با توان تفکیک مکانی ۰/۲۵ درجه استفاده شده است.

جدول ۱. تنظیمات مورد استفاده در اجرای مدل

D <sub>2</sub>	D <sub>1</sub>	دامنه
۴۰×۲۵	۹۰×۶۹	نقاط شبکه (x,y)
۱۰	۳۰	گام شبکه (km)
Monin-Obukhov (MM5)		طرحواره لایه سطحی
Yonsei University scheme (YSU)		طرحواره لایه مرزی سیاره‌ای
Grell and Devenyi ensemble scheme (GD)		طرحواره همرفت
WRF-Single-Moment-Microphysics 5-class scheme (WSM5)		طرحواره خردفیزیک
Rapid Radiative Transport Model (RRTM)		طرحواره تابش طول موج بلند
Goddard		طرحواره تابش طول موج کوتاه
NOAH land surface model		طرحواره سطح زمین
RADM2 chemical mechanism		طرحواره شیمی
GOCART		طرحواره هواویز

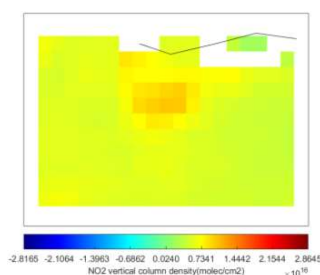
جدول ۲. نوع گسیل گازهای کمیاب و هواویزها و پایگاه داده مورد استفاده در اجرای مدل

پایگاه داده	نوع گسیل
GOCART و RETRO	داده‌های گسیل جهانی
EDGAR-HTAP	گسیل‌های انسان‌زاد گازهای گلخانه‌ای و آلاینده‌های هوا
GOCART	گسیل‌های اولیه هواویزهای انسان‌زاد BC, OC و DMS
MEGAN	گسیل‌های زیست‌زاد
BEM3	سوختن زیست‌توده‌ها
پارامترسازی براساس ارتفاع قله ابر/ برگرفته از برآوردهای اخیر مبتنی بر ماهواره	گسیل‌های NO <sub>x</sub> ناشی از آذرخش

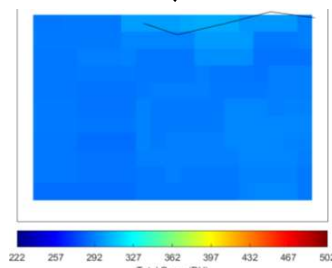
### ۳ نتایج

در ارزیابی پهنه، مقایسه بین توزیع مکانی NO<sub>2</sub> و O<sub>3</sub> حاصل از آشیانه درونی مدل WRF-Chem و توزیع مکانی NO<sub>2</sub> و O<sub>3</sub> مستخرج از ماهواره OMI انجام شد. عملکرد سنجنده OMI به گونه‌ای است که تعداد مولکول‌های NO<sub>2</sub> را در یک ستون از وردسپر برآورد می‌کند. نتایج شبیه‌سازی نسبت اختلاط سطحی NO<sub>2</sub> در روز مورد مطالعه، بیشینه OMI بر روی تهران را نشان می‌دهد (شکل ۱-الف) که در توافق با داده‌های ماهواره‌ای OMI است (شکل ۱-ب). از ابزار OMI، ستون کل O<sub>3</sub> برحسب دایسون استخراج شد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که منطقه تهران دارای بیشینه آزون است (شکل ۱-ج) که با توجه داده‌های مشاهداتی ماهواره (شکل ۱-د) مدل به خوبی منطقه بیشینه آزون روی تهران را شبیه‌سازی کرده است.

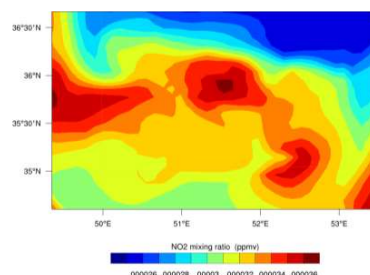
برای روز مورد مطالعه، مقادیر شاخص‌های آماری شامل آریبی (Bias)، خطای جذر میانگین مربعات (RMSE)، ضریب همبستگی پیرسون (CC) و میانگین خطای مطلق (MAE) میان نتایج شبیه‌سازی مدل WRF-Chem برای غلظت‌های NO<sub>2</sub> و O<sub>3</sub> بر حسب ppb و مقادیر ایستگاهی این غلظت‌ها در ۲۵ ایستگاه کنترل کیفیت هوای شهر تهران محاسبه شدند که برای نمونه برای ایستگاه شهرداری منطقه ۲۲ در جدول ۳ آورده شده است. بررسی مقادیر Bias حاصل از مقایسه بین غلظت‌های شبیه‌سازی شده NO<sub>2</sub> و O<sub>3</sub> و مقادیر اندازه‌گیری شده این غلظت‌ها نشان می‌دهد که مقادیر Bias برای O<sub>3</sub> مثبت بوده و این نشان‌دهنده فراتخمین غلظت آزون توسط مدل WRF-Chem است. در حالی که در این بررسی مقادیر بالای Bias منفی برای NO<sub>2</sub> به دست آمده است که حاکی از فروتخمین زیاد مدل در شبیه‌سازی غلظت NO<sub>2</sub> است.



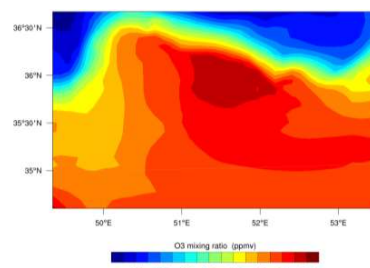
(ب)



(د)



(الف)



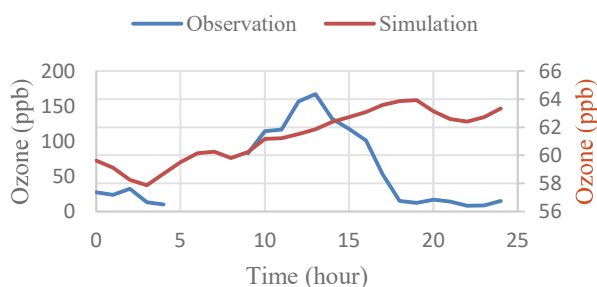
(ج)

شکل ۱. توزیع مکانی  $\text{NO}_2$  و  $\text{O}_3$  برگرفته از شبیه‌سازی مدل WRF-Chem (ستون سمت راست، به ترتیب الف و ج بر حسب ppmv) و داده‌های OMI (ستون سمت چپ، به ترتیب ب بر حسب  $\text{molec}/\text{cm}^2$  و د بر حسب دابسون) در روز ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹.

جدول ۳. شاخص‌های آماری مربوط به تاریخ ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹ برای ایستگاه شهرداری منطقه ۲۲.

NO <sub>2</sub> (ppb)				O <sub>3</sub> (ppb)				تاریخ
۳۰ ژوئن ۲۰۱۹				۳۰ ژوئن ۲۰۱۹				
MAE	CC	RMSE	Bias	MAE	CC	RMSE	Bias	ایستگاه
۵۲/۹۸	-۰/۲۳	۵۹/۰۳	-۵۲/۹۸	۴۹/۴۰	۰/۴۴	۵۳/۲۴	۴/۰۲	شهرداری منطقه ۲۲

در شکل ۲ تغییرات ساعتی آزون شبیه‌سازی شده و مشاهداتی در روز ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹ برای ایستگاه شهرداری تهران ترسیم شده است. نکته مورد توجه در این شکل این است که بیشینه غلظت آزون که در بعدازظهر اتفاق می‌افتد، توسط مدل فروتخمین شده است در حالی که در ساعات‌های ابتدایی و انتهایی روز فراتخمین شده است. یکی از دلایل برآورد بیشتر یا کمتر غلظت آزون در طول دوره شبیه‌سازی این است که خروجی‌های شبیه‌سازی در ابتدای هر ساعت استخراج می‌شوند، در حالی که اندازه‌گیری‌ها به طور میانگین ساعتی گزارش می‌شوند. دلیل دیگر می‌تواند برآوردهای نادرستی از تغییرات ساعتی شار انسان‌زاد و زیستی باشد. استفاده از داده‌های جهانی انتشار نقش بارزی بر نتایج خروجی مدل دارد (نیک فال و رنجبر، ۱۳۹۵؛ ویسر و همکاران، ۲۰۱۹).



شکل ۲. تغییرات زمانی (ساعتی) آزون شبیه‌سازی شده و مشاهداتی در ایستگاه شهرداری منطقه ۲۲ در ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹.

#### ۴ نتیجه‌گیری

در این پژوهش عملکرد مدل WRF-Chem در برآورد مقدار ایستگاهی و پهنه  $\text{NO}_2$  و  $\text{O}_3$  در منطقه تهران در ۳۰ ژوئن ۲۰۱۹ مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی‌های مدل با مشاهدات ماهواره‌ای و داده‌های ایستگاه‌های سنجش آلودگی هوا در تهران مقایسه شد. نتایج ارزیابی پهنه  $\text{NO}_2$  شبیه‌سازی شده و پهنه برگرفته از داده‌های ماهواره‌ای OMI نشان داد که مدل WRF-Chem در شبیه‌سازی بیشینه  $\text{NO}_2$  سطحی عملکرد خوبی دارد و نتایج همخوانی خوبی با بیشینه ستون و ردسپهری  $\text{NO}_2$  برگرفته از داده‌های ماهواره‌ای OMI دارد. در مورد ارزیابی توزیع مکانی  $\text{O}_3$ ، نتایج حاکی از این است که مدل به خوبی منطقه بیشینه آزون روی تهران را شبیه‌سازی کرده است. ارزیابی ایستگاهی بیانگر فراتخمین غلظت آزون و فروتخمین زیاد غلظت  $\text{NO}_2$  توسط مدل WRF-Chem است.

#### منابع

- نیک فال، 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.
- 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., 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.
- Visser, A. J., Boersma, K. F., Ganzeveld, L. N., & Krol, M. C. (2019). European  $\text{NO}_x$  emissions in WRF-Chem derived from OMI: impacts on summertime surface ozone. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19(18), 11821-11841.