فصلنامه علوم محیطی، دوره چهاردهم، شماره ۳، پاییز ۱۳۹۵

۱۳۰-۱۲۳

برآورد غلظت آلاینده‌های معیار جوی با استفاده از مدل WRF-Chem و داده‌های جهانی انتشار –مطالعه موردی تهران

امیرحسین نیک‌فال* و عباس رنجبر سعادت‌آبادی

پژوهشکده هواشناسی و علوم جو، تهران، ایران

تاریخ دریافت: ۹۴/۱۱/۱۸ تاریخ پذیرش: ۹۵/۷/۲۳

نیک فال، ا.ح.، و ع. رنجبر سعادت آبادی. ۱۳۹۵. برآورد غلظت آلاینده های معیار جوی با استفاده از مدل WRF-CHEM و داده های جهانی انتشار –مطالعه موردی تهران. فصلنامه علوم محیطی. ۱۴(۳): ۱۳۰-۱۲۳.

سابقه و هدف: در این پژوهش، استفاده از داده‌های جهانی انتشار ذرات معلق جوی در مدل‌سازی آلودگی هوای شهری مورد ارزیابی قرار گرفته است. داده‌های EDGAR-HTAP که شامل مقادیر گسیل جهانی مهمترین آلاینده‌های جوی می‌باشد در سال ۲۰۱۴ به‌روز شده است، با استفاده از مدل عددی جفت‌شده WRF-Chem در شبیه‌سازی آلاینده‌های معیار SO2، NO2، O3، CO، PM10، و PM2.5 مورد استفاده قرار گرفت. استفاده از مدل‌های هواشناسی برخط با فرآیندهای شیمی جو بیش از پیش در حال گسترش است. کاهش ناسازگاری و عدم هماهنگی بین فرآیندهای هواشناسی و شیمیایی جو به همراه واردسازی بازخوردهای ذرات معلق جوی بر پدیده‌های جوی از قابلیت‌های مهم مدل‌های برخط هواشناسی-شیمی جو می‌باشد

مواد و روش‌ها: در این پژوهش با استفاده از شبیه‌سازی برخط مدل WRF-Chem از فرآیندهای هواشناسی و شیمی جو و با استفاده از ماژول RADM2 برای مکانیسم‌های حالت گازی و اکسیداسیون نوری ترکیبات آلاینده جو و ماژول هواویز MADE/SORGAM، غلظت آلاینده‌های معیار هوای تهران برای سه روز ۲۹، ۳۰، و ۳۱ تیر سال ۱۳۹۳ برآورد شد. در این پژوهش از آخرین نسخه از داده‌های جهانی EDGAR-HTAP که در سال ۲۰۱۴ به‌روز شده است به همراه داده‌های جهانی RETRO استفاده شد. داده‌های HTAP از شبکه نقاط با دقت ۰٫۱×۰٫۱ تشکیل شده است که ترکیباتی از جمله CH_4، CO، SO_2، NOx، NMVOC، NH3، PM_{10}، $PM_{2.5}$، BC، و OC را در بر می‌گیرد. فهرست انتشار HTAP بر پایه اندازه‌گیری‌های سال‌های ۲۰۰۸ و ۲۰۱۰ و به صورت جهانی آماده شده است. فهرست انتشار EDGAR-HTAP، مقدار گسیل آلاینده‌های گازی را از منابعی مانند صنعت، انرژی، حمل و نقل، مناطق مسکونی و کشاورزی در اختیار قرار می‌دهد. واحد اندازه‌گیری شار آلاینده‌ها به جو بر حسب کیلوگرم بر متر مکعب بر ثانیه می‌باشد. فهرست انتشار RETRO نیز شامل مقدار گسیل آلاینده‌های بشرساخته و گازهای ناشی از فرآیندهای بیولوژیک و گیاهی است. به منظور صحت‌سنجی غلظت برآوردشده برای آلاینده‌های معیار، از داده‌های اندازه‌گیری‌شده توسط شرکت کنترل کیفیت هوای تهران استفاده شد.

نتایج و بحث: نتایج ارزیابی خروجی مدل نشان داد که برای چهار آلاینده‌ی SO_2، O_3، PM_{10}، و $PM_{2.5}$، غلظت برآوردشده از نظر بزرگی در مقایسه با داده‌های اندازه‌گیری‌شده دارای مقادیر قابل قبولی است. اما مقادیر برآوردشده برای غلظت دو آلاینده CO و NO_2 دارای کم‌برآورد شدیدی نسبت به داده‌های اندازه‌گیری‌شده می‌باشد. استفاده از رهیافت‌های شیمیایی گوناگون و همچنین داده‌های جهانی انتشار نقش بارزی بر نتایج خروجی مدل دارد. یکی از روش‌ها به منظور حصول برآوردهای بهتر از میزان غلظت آلاینده‌ها، تغییر در مقادیر داده‌های جهانی انتشار و تصحیح آن است. ثمربخش‌بودن این روش را می‌توان با اجرای مجدد مدل پس از تصحیح داده‌های گسیل ذرات و بررسی خروجی آن ارزیابی نمود. همچنین تغییر در رهیافت شیمیایی نیز می‌تواند منجر به برآورد دقیق‌تر برای برخی از پارامترها شود. در این حالت می‌توان شبیه‌سازی را با دو یا بیش از دو اجرا با انتخاب‌های متفاوت در رهیافت شیمی جو انجام داد به صورتی که هر یک از اجراها مخصوص شبیه‌سازی غلظت یک یا چند آلاینده خاص باشد.

* Corresponding Author. *E-mail Address*: ah.nikfal@gmail.com

نتیجه‌گیری: برآورد خروجی غلظت آلاینده‌های معیار با استفاده از داده‌های جهانی انتشار و به کمک مدل عددی WRF/Chem برای آلاینده‌های SO_2، O_3، PM_{10}، و $PM_{2.5}$ از نتایج قابل قبولی در قیاس با مشاهدات برخوردار بود. با توجه به نتایج به‌دست آمده، استفاده از سایر رهیافت‌های شیمیایی مدل WRF-Chem و همچنین تغییر هدفمند و تصحیح داده‌های جهانی انتشار آلاینده‌ها، از جمله روش‌هایی است که می‌توان به منظور دستیابی به برآورد دقیق‌تر و تصحیح کم‌برآورد شدید دو آلاینده CO و NO_2، استفاده نمود.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی عددی، آلاینده‌های معیار، داده‌های جهانی انتشار، WRF-Chem.

مقدمه

به دلیل تمرکز جمعیت در مناطق بزرگ شهری در کشورهای در حال توسعه، این شهرها دارای بیشترین مصرف انرژی به منظور استفاده در بخش حمل و نقل، استفاده‌های تجاری، فعالیت‌های صنعتی، و فرآیندهای گرمایشی و سرمایشی می‌باشند (Carnevale *et al*, 2006). آلاینده‌های ناشی از چشمه‌های گوناگون ذرات معلق جوی به ویژه آلاینده‌های بشرساخته به طور مستقیم به میزان مصرف انرژی و سوخت در منطقه مورد مطالعه بستگی دارد. از بین تمامی آلاینده‌های هوا، چند مورد از جمله دی‌اکسید گوگرد (SO2)، اکسیدهای نیتروژن (NOx)، مونوکسید کربن (CO)، و ازن (O3) به عنوان آلاینده‌های معیار جوی به دلیل اثرات مخربی که بر محیط‌زیست و همچنین پدیده گرمایش جهانی هوا دارند، از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند.

استفاده از مدل‌های هواشناسی برخط با فرآیندهای شیمی جو بیش از پیش در حال گسترش است. کاهش ناسازگاری و عدم هماهنگی بین فرآیندهای هواشناسی و شیمیایی جو به همراه واردسازی بازخوردهای ذرات معلق جوی بر پدیده‌های جوی از قابلیت‌های مهم مدل‌های برخط هواشناسی-شیمی جو می‌باشد (Baklanov *et al*., 2014). شبیه‌سازی برخط فرآیندهای هواشناسی و شیمی جو از قابلیت‌های اصلی مدل WRF-Chem است (Grell *et al*., 2006). مدل WRF-Chem دارای مکانیسم‌های شیمیایی و ماژول‌های هواویز گوناگونی می‌باشد از جمله مکانیسم شیمیایی RADM2[1] (نسل دوم مدل منطقه‌ای نشست اسیدی (Stockwell *et al*., 1990) برای مکانیسم‌های حالت گازی و ماژول هواویز MADE/SORGAM (مدل دینامیکی مودال هواویزها برای اروپا و مدل هواویز ذرات ارگانیک ثانویه) (Ackermann *et al*., 1998). مکانیسم RADM2 به منظور شبیه‌سازی اکسیداسیون نوری ترکیبات شیمیایی جو توسط استاک-ول (۱۹۹۰)، توسعه داده شده است. این مکانیسم از رهیافت "توده مولکولی" که در آن ترکیبات مشابه ارگانیک در رده مدل‌های گوناگون گروه‌بندی می‌شوند. مکانیسم RADM2 شامل ۶۳ ترکیب شیمیایی است که ۱۳۶ واکنش حالت گازی را در بر می‌گیرد. ماژول هواویز MADE-SORGAM با استفاده از روش مودال و دسته‌بندی توزیع قطر هواویزها در سه گروه به شکل توزیع آماری لوگ-نرمال مدل‌سازی هواویزها انجام می‌دهد. در هر دسته یا مد از ماژول MADE-SORGAM فرض شده است که ذرات از ترکیب شیمیایی یکسانی تشکیل شده‌اند (Zhao *et al*, 2010).

بخش شیمی جو مدل WRF-Chem

فرایندهای شیمیایی جو در نسخه دوم مدل منطقه‌ای نشست اسیدی (RADM2) توسط استاک-ول در ۱۹۹۰ توسعه داده شد. مولفه‌های موجود در RADM2، ترکیبی از جزئیات شیمیایی، پیش‌بینی‌های دقیق شیمیایی با کمک مدل‌سازی رایانه‌ای می‌باشد. فرایندهای ذرات غیر آلی موجود در RADM2، چهارده گونه جزء پایدار، ۴ جزء نیمه پایدار و ۳ جزء کاملا پایدار (اکسیژن، نیتروژن و آب) را در بر می‌گیرد. ذرات آلی جوی از ۲۶ جزء پایدار و ۱۶ جزء رادیکال پروکسی تشکیل شده است. اساس روش RADM2، در نظر گرفتن شیمی ذرات آلی از طریق محاسبه مولکول‌های حاصل از واکنش به صورت تجمعی می‌باشد (Middleton *et al*., 1990). دیگر اجزای آلی به صورت گروهی در دسته‌های مشخص وارد مدل می‌شوند. پارامترهای مربوط به مهمترین اجزای فرار آلی (VOC)[2] در تحقیقی توسط میدلتون (۱۹۹۰) در دسترس می‌باشد.

شار جریان ذرات گازی و ریزگردها از جو به سطح زمین تابعی از غلظت ذرات و تغییرات زمانی و مکانی سرعت نشست است که متناسب با سه خصوصیت مقاومت آیرودینامیکی، مقاومت زیر سطحی و مقاومت سطحی است. با در نظر داشتن مشخصات ریزگردها، سرعت نشست، $\hat{v}_{dk}$ برای k امین ریزگرد با رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\hat{v}_{dk} = (r_a + \hat{r}_{dk} + r_a \hat{r}_{dk} \hat{v}_{Gk})^{-1} + \hat{v}_{Gk} \quad (۱$$

ra مقاومت سطحی، $\hat{v}_{Gk}$ سرعت پخش یکنواخت[3] ذرات، و $\hat{f}_{dk}$ به عنوان میزان پخش غیر یکنواخت[4] ذرات در رابطه وارد می‌شود (Pleim *et al.*, 1984).

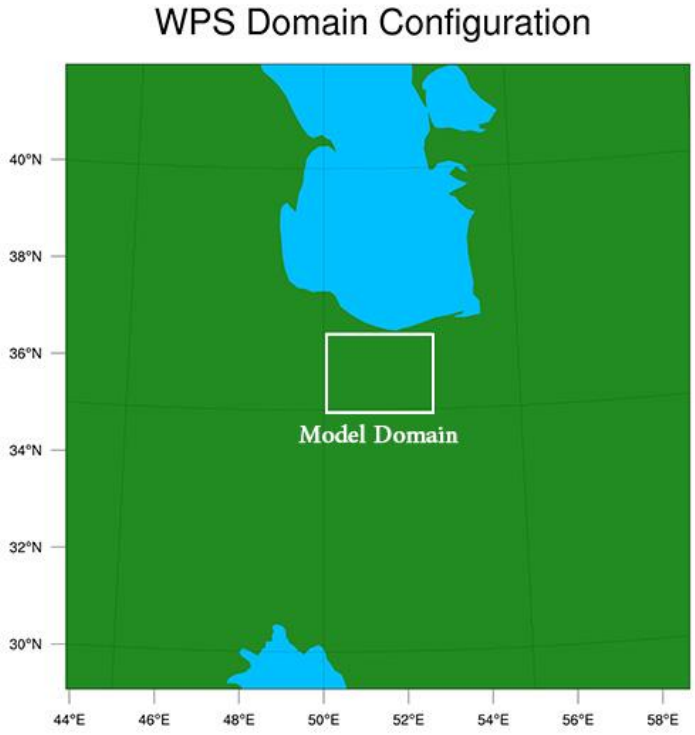
داده‌های جهانی انتشار آلاینده‌ها

فهرست انتشار آلاینده‌های جوی در شبیه‌سازی‌های کیفیت هوا از اهمیت بسیار بالایی برخوردار است. در واقع مدل‌سازی کیفیت هوا به ویژه هنگامی که برآورد آلاینده‌های گازی مد نظر باشد، با در نظر گرفتن میزان ورود آلاینده‌های جوی به درون اتمسفر قابل انجام است.

در این پژوهش از آخرین نسخه از داده‌های جهانی EDGAR-HTAP که در سال ۲۰۱۴ به‌روز شده است به همراه داده‌های جهانی RETRO استفاده شد. داده‌های HTAP از شبکه نقاط با دقت ۰٫۱×۰٫۱ تشکیل شده است که ترکیباتی از جمله CH4، CO، SO2، NOx، NMVOC، NH3، PM10، PM2.5، BC، و OC را در بر می‌گیرد. فهرست انتشار HTAP بر پایه اندازه‌گیری‌های سال‌های ۲۰۰۸ و ۲۰۱۰ و به صورت جهانی آماده شده است. این فهرست انتشار به کمک دریافت گزارش‌های مربوط به هر یک از کشورها در مورد میزان انتشار به همراه استفاده از پایگاه‌های انتشار منطقه‌ای به صورت شبکه نقاط تولید شده و در دسترس است (http://edgar.jrc.ec.europa.eu /htap_v2/index.php). فهرست انتشار EDGAR-HTAP، مقدار گسیل آلاینده‌های گازی را از منابعی مانند صنعت، انرژی، حمل و نقل، مناطق مسکونی و کشاورزی در اختیار قرار می‌دهد. واحد اندازه‌گیری شار آلاینده‌ها به جو بر حسب کیلوگرم بر متر مکعب بر ثانیه می‌باشد. فهرست انتشار RETRO نیز شامل مقدار گسیل آلاینده‌های بشرساخته و گازهای ناشی از فرآیندهای بیولوژیک و گیاهی است http://gcmd.gsfc.nasa.gov/records/GCMD_GEIA_RETRO.html.

پیکربندی مدل WRF-Chem

در این پژوهش، از تاریخ ۲۹ تا ۳۱ تیرماه سال ۱۳۹۳ به عنوان زمان شبیه‌سازی آلاینده‌های معیار جوی در نظر گرفته شد. از داده‌های GFS به منظور آغازگری شبیه‌سازی و واردسازی شرایط مرزی استفاده شد. حوضه شبیه‌سازی با تفکیک سه کیلومتر برای شبکه نقاط به تعداد 55×75 نقطه به گونه‌ای که استان تهران را پوشش دهد، انتخاب گردید. به دلیل دقت نسبتا بالا برای تفکیک مکانی، زمان ۱۵ ثانیه به منظور رعایت شرط کورانت در مدل‌سازی عددی انتخاب گردید. موقعیت مکانی حوضه شبیه‌سازی در شکل ۱ قابل ملاحظه است.



شکل۱- موقعیت حوضه شبیه‌سازی.

Fig. 1- The location of the simulation domain.

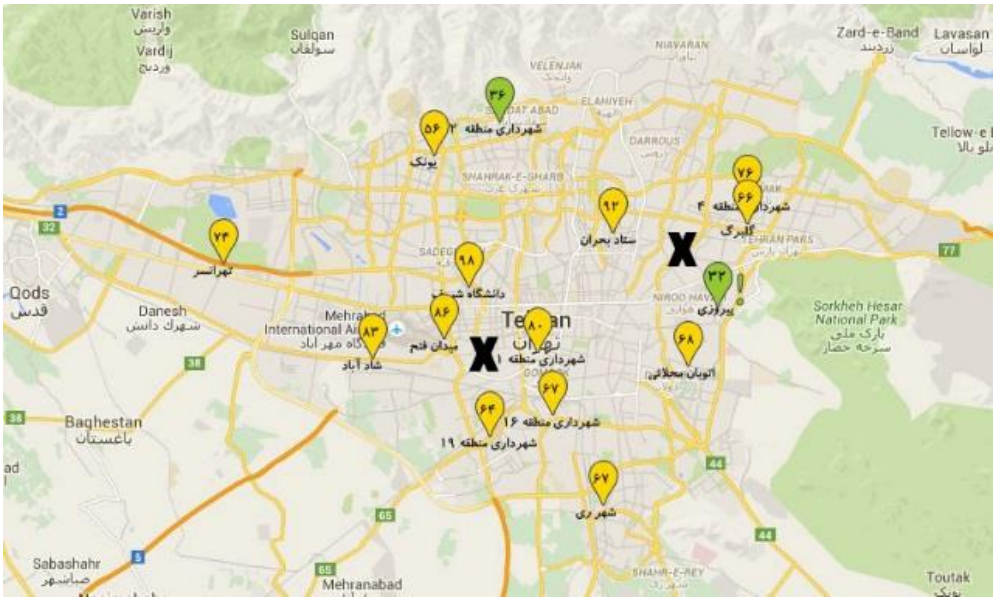
جدول ۱- برخی از طرحواره‌های مهم بخش شیمی جو مدل WRF-Chem
Table 1- Some of the important chemistry schemes of the model WRF-Chem.

طرحواره	رهیافت
شیمی جو Atmospheric chemistry	RADM2
هواویز aerosol	MADE/SORGAM
گسیل ذرات معلق Aerosol emission	GOCART
فوتوشیمیایی Photochemical	Madronich photolysis

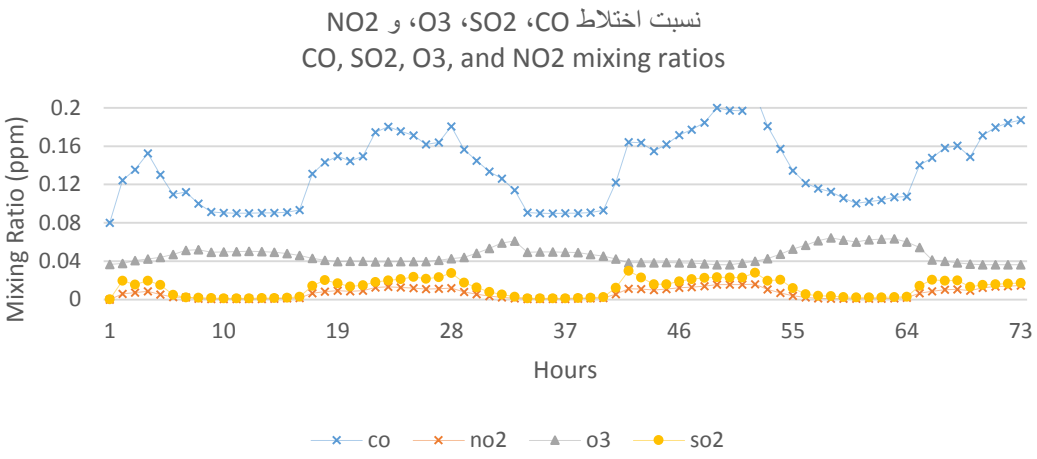
نتایج و بحث

در ابتدا، سری زمانی یک ساعته نتایج مدل برای تمامی آلاینده‌های معیار نمایش داده می‌شود. سپس میانگین روزانه غلظت آلاینده‌ها با مقدار غلظت اندازه‌گیری‌شده توسط ایستگاه‌های سنجش آلودگی شرکت کنترل کیفیت هوای تهران مقایسه می‌گردد. نقشه توزیع ایستگاه‌های سنجش آلودگی هوای تهران در شکل زیر نمایش داده شده است. به منظور داشتن میانگینی از کل غلظت آلودگی تهران برای هر یک از آلاینده‌ها، دو نقطه را به عنوان نماینده تمامی ایستگاه‌ها به صورتی که کمترین فاصله را با ایستگاه‌ها داشته باشد انتخاب می‌کنیم که موقعیت آنها با علامت ضربدر در شکل مشخص است.

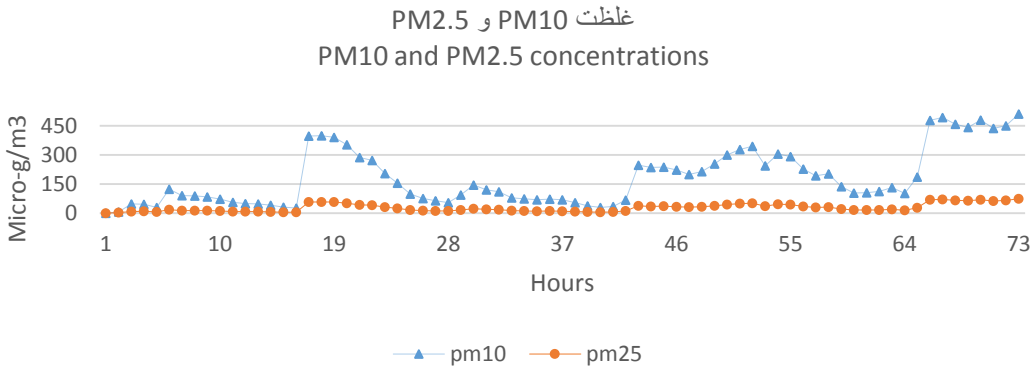
برآورد غلظت آلاینده مونوکسید کربن (CO) توسط مدل WRF-Chem، دچار کم‌برآورد شدیدی می‌باشد که از نظر کمی بررسی خواهد شد. در ادامه، نقشه‌های خروجی مدل برای برخی از آلاینده‌های معیار در ساعت ۲۱ و در تاریخ ۲۹ تیر ترسیم شده‌اند.



شکل۲- موقعیت ایستگاه‌های سنجش آلودگی هوای شرکت کنترل کیفیت هوای تهران.
Fig. 2- Location of the air pollution stations of the Tehran air quality control Company.

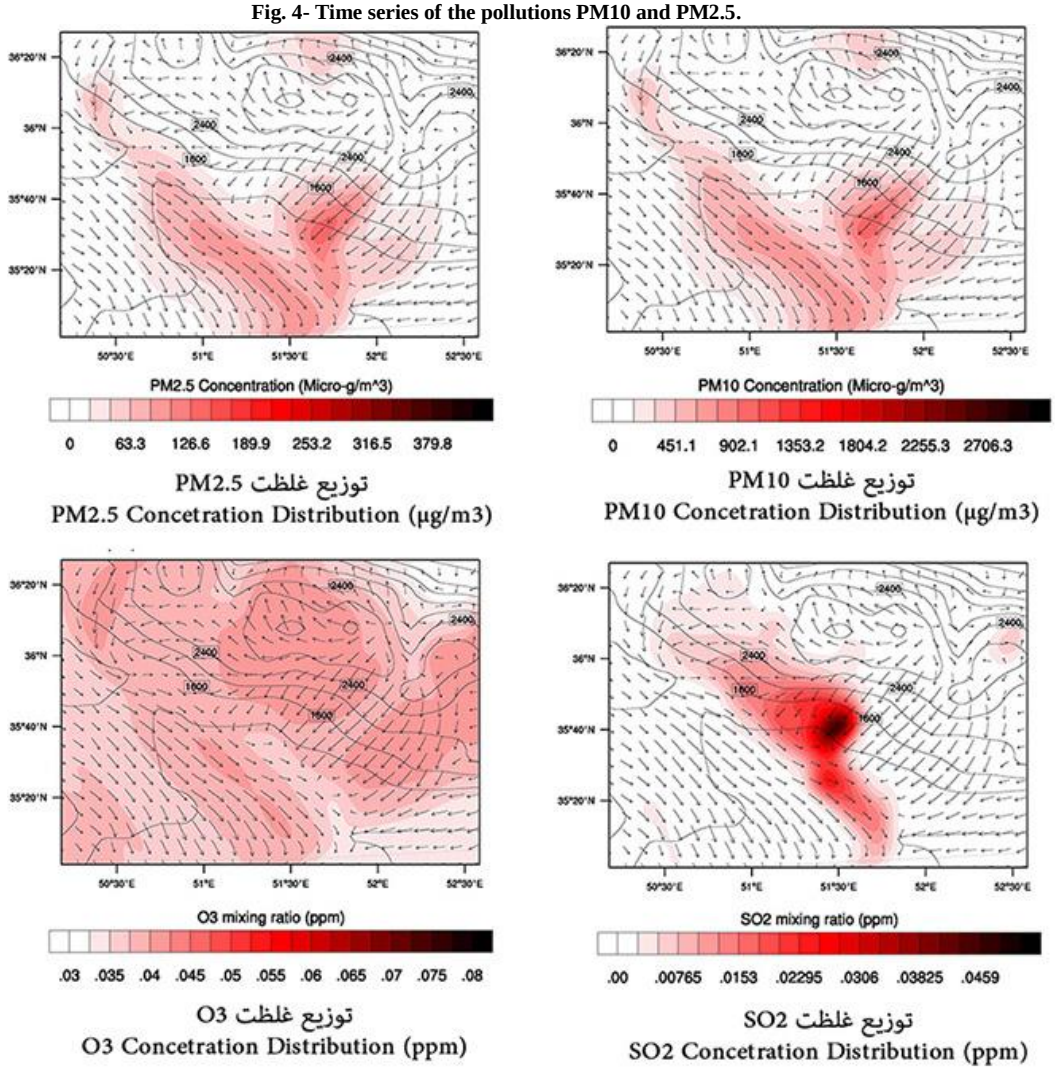


شکل ۳- سری زمانی آلاینده CO حاصل از خروجی مدل.
Fig. 3- Time series of the CO pollution agent of the model result.



شکل ۴- سری زمانی آلاینده PM10 و PM2.5.

Fig. 4- Time series of the pollutions PM10 and PM2.5.

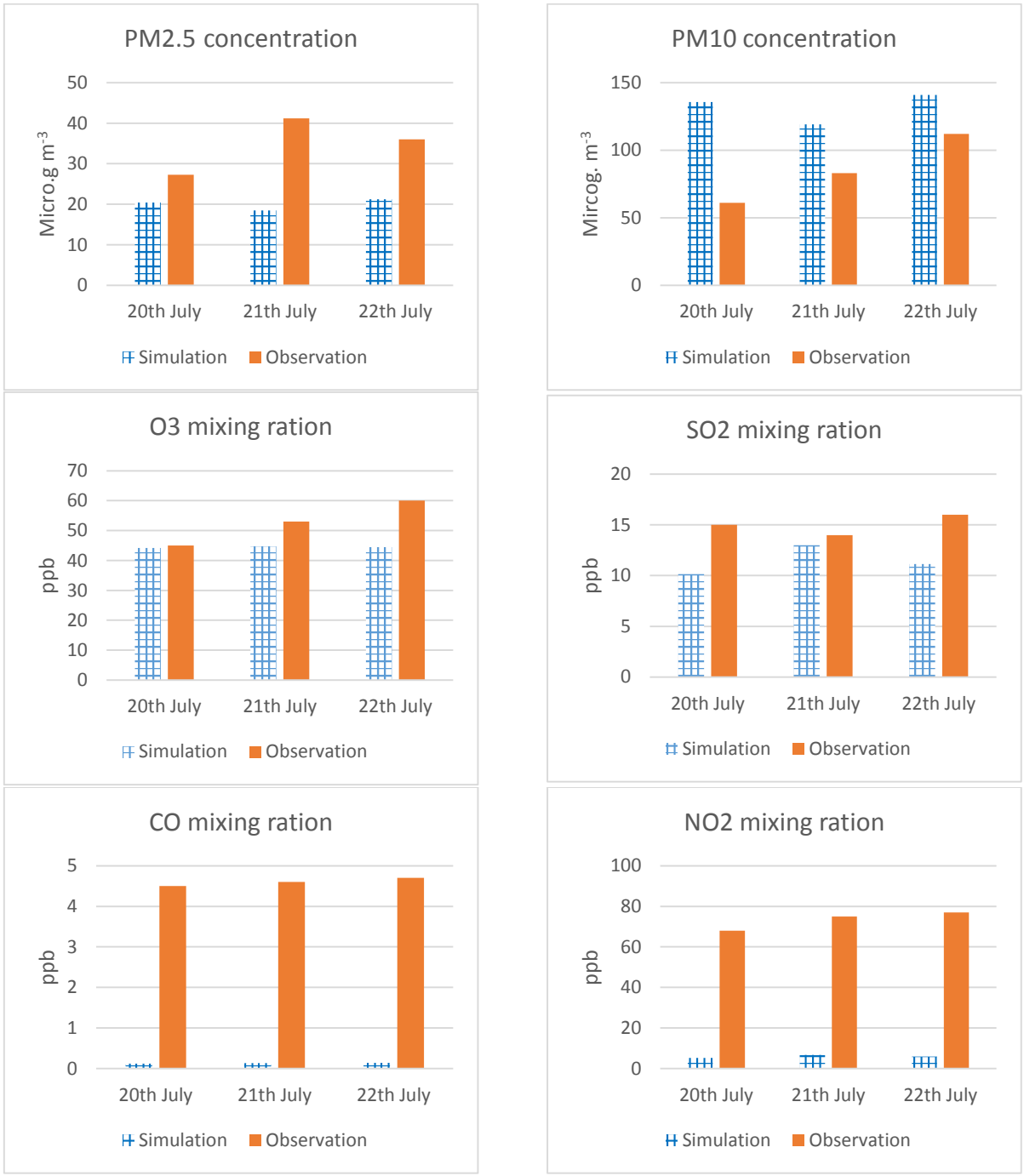


شکل ۵ - توزیع غلظت PM10 و PM2.5 و نسبت اختلاط گازهای SO2 و O3 در ساعت ۲۱ روز ۲۹ تیر.

Fig. 5- Density Distribution of PM10 and PM2.5 and mixing ratio of SO_2 and O3 on 20 July 2014.

با مقایسه مقادیر میانگین روزانه اندازه‌گیری‌شده هر یک از آلاینده‌ها با مقادیر برآوردشده توسط مدل، نتایج ارزیابی در شکل ۶ قابل مشاهده است.

با بررسی مقایسه بین مقادیر شبیه‌سازی و مقادیر اندازه‌گیری‌شده ایستگاهی در شکل ۶ ملاحظه می‌شود که نتایج مدل برای 4 آلاینده PM10، PM2.5، SO2، و O3 از نظر مقیاس دارای مقادیر قابل قبولی می‌باشد، اما با توجه به نمودارهای مربوطه، مدل نتوانسته است که برآوردی منطقی از آلاینده‌های NO2 و CO نشان دهد و مقادیر حاصل از شبیه‌سازی در مقایسه با مقادیر مشاهداتی دچار کم‌برآوردی شدید می‌باشد.



شکل ۶- مقایسه بین مقادیر شبیه‌سازی و مقادیر اندازه‌گیری‌شده ایستگاهی آلاینده‌های معیار در روز ۲۹ تیر.

Fig. 6- Comparison between the observed and measured quantities of the pollution agents on 20 July 2014.

نتیجه‌گیری

استفاده از رهیافت‌های شیمیایی گوناگون و همچنین داده‌های جهانی انتشار نقش بارزی بر نتایج خروجی مدل دارد. یکی از روش‌ها به منظور حصول برآوردهای بهتر از میزان غلظت آلاینده‌ها، تغییر در مقادیر داده‌های جهانی انتشار و تصحیح آن است. ثمربخش‌بودن این روش را می‌توان با اجرای مجدد مدل پس از تصحیح داده‌های گسیل ذرات و بررسی خروجی آن ارزیابی نمود. همچنین تغییر در رهیافت شیمیایی نیز می‌تواند منجر به برآورد دقیق‌تر برای برخی از پارامترها شود. در این حالت می‌توان شبیه‌سازی را با دو یا بیش از دو اجرا با انتخاب‌های متفاوت در رهیافت شیمی جو انجام داد به صورتی که هر یک از اجراها مخصوص شبیه‌سازی غلظت یک یا چند آلاینده خاص باشد.

پی‌نوشت‌ها

[1] The Regional Acid Deposition Model, version 2
[2] Volatile Organic Compounds
[3] polydisperse settling velocity
[4] brownian diffusivity

منابع

Ackermann, I.J., Hass, H., Memmesheimer, M., Ebel, A., Binkowski, F.S. and Shankar, U., 1998. Modal aerosol dynamics model for Europe: Development and first applications. Atmospheric Environment. 32(17), 2981–2999.

Baklanov, A., Schlünzen, K., Suppan, P., Baldasano, J., Brunner, D., Aksoyoglu, S. and Zhang, Y., 2014. Online coupled regional meteorology chemistry models in Europe: Current status and prospects. Atmospheric Chemistry and Physics. 14(1), 317–398.

Carnevale, C., Gabusi, V. and Volta, M., 2006. POEM-PM: An emission model for secondary pollution control scenarios. Environmental Modelling and Software. 21(3), 320–329.

Grell, G.A. and Peckham, S.E., 2006. Evolution of ozone, particulates, and aerosol direct radiative forcing in the vicinity of Houston using a fully coupled meteorology-chemistry-aerosol model. Journal of Geophysical Research. 111, 21305.

Middleton, P., Stockwell, W.R. and Carter, W.P.L., 1990. Aggregation and analysis of volatile organic compound emissions for regional modeling. Atmospheric Environment. General Topics. 24(5), 1107–1133.

Pleim, J.E., Venkatram, A. and Yamartino, R., 1984. ADOM/TADAP Model Development Program, the Dry Deposition Module, Ontario Ministry of the Environment, Canada,

Stockwell, W.R., Middleton, P., Chang, J.S. and Tang, X., 1990. The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. Journal of Geophysical Research. 95(10), 16343.

Zhao, C., Liu, L.R., Leung, B., Johnson, S.A., McFarlane, W.I., Gustafson, Jr., Fast, J.D. and Easter, R., 2010. The spatial distribution of mineral dust and its shortwave radiative forcing over North Africa: Modeling sensitivities to dust emissions and aerosol size treatments. Atmospheric Chemistry and Physics. 10, 8821-8838.

Estimation of the concentration of the atmospheric primary pollutants, using the global emissions dataset – A WRF-Chem case study for Tehran

Amirhossein Nikfal,* and Abbas Ranjbar Saadatabadi

Atmospheric Science and Meteorology Research Center, Tehran

Received: February 7, 2016 Accepted: October 14, 2016

Citation: Nikfal, A.H., and Ranjbar Saadatabadi, A., 2016. Estimation of the concentration of the atmospheric primary pollutants, using the global emissions dataset – A WRF-Chem case study for Tehran. Environmental Sciences. 14(3), 122-130.

Introduction: In this study, the use of a global emission dataset of particulate matters is evaluated for air quality modelling in a residential region. The EDGAR-HTAP dataset of global emissions, updated in the year 2014, is used in the model WRF-Chem to simulate the concentrations of primary pollutants, including SO_2, NO_2, O_3, CO, PM_{10}, and $PM_{2.5}$. The utilization of online meteorology-chemistry models has been more common in recent years.

Materials and methods: In this study, with the aid of WRF-Chem capability in online simulation of meteorology and chemistry processes and using the aerosol module MADE/SORGAM, the concentrations of the primary pollutants in Tehran for three days of 20, 21, and 22 June 2014 is estimated. In this study the latest version of EDGAR-HTAP dataset (updated in the year 2014) was applied along with the RETRO global dataset in the model. The HTAP dataset constitutes a grid network with the resolution of 0.1×0.1 which contains some compositions such as CH_4, CO, SO_2, NOx, NMVOC, NH_3, PM_{10}, $PM_{2.5}$, BC, and OC. The HTAP emission inventory is based on the measurement of the years 2008 and 2010 which is prepared globally. The EDGAR-HTAP emission inventory gives the amount of emissions from gaseous sources such as industry, energy, transportation, and agriculture. The measurement unit of the flow of the pollution into the atmosphere is kilogram per cubic meter per second. The RETRO emission inventory includes the amount of the anthropogenic pollution as well as the gases from biological and natural processes.

Results and discussion: For the verification of the output simulated concentration, the measured data from the air quality stations in Tehran is used. The verification of the model output shows that for four pollutant agents, including SO_2, NO_2, PM_{10}, and $PM_{2.5}$, the simulated concentration have acceptable values in comparison with the measured data. But the simulation for the two pollutants of CO and NO_2 shows a considerable under-estimation. The use of the chemistry schemes and global data has an important impact on the results. One of the approaches to obtain a better estimation from pollution concentrations is the enhancement in the amounts of the emissions dataset. The effectiveness of this approach can be verified by the repeated running of the model after modifying the emissions dataset.

Conclusion: In the current study, the results of the model WRF/Chem for air pollution gaseous agents for certain particles such as $PM_{2.5}$, PM_{10}, SO_2, and O_3 were acceptable in comparison to the observed data from the air pollution stations in Tehran. Regarding the results achieved, using other chemistry schemes of the model WRF-Chem and change and rectification of the global emission dataset are some considerable methods for approaching a more accurate result with less under-estimation for the agents CO and NO_2.

Keywords: Numerical simulation, Primary pollutants, Global emission dataset, WRF-Chem.

* Corresponding Author. *E-mail Address*: ah.nikfal@gmail.com