

ارزیابی دقت داده‌گواری در پیش‌بینی PM₁₀ کلان‌شهر تهران با استفاده از مدل WRF-Chem

ساویز صحت کاشانی، دانشیار، پژوهشگاه هواشناسی و علوم جو، تهران، ایران

نوشین خدام، دانش‌آموخته دکتری هواشناسی، تهران، ایران

مهدی رهنما (مسئول مکاتبات)، دانشیار، پژوهشگاه هواشناسی و علوم جو، تهران، ایران

E-mail: meh.rahnama@gmail.com

مهناز کریم‌خانی، کارشناس پژوهشی، پژوهشگاه هواشناسی و علوم جو، تهران، ایران

چکیده

با توجه به اهمیت پیش‌بینی آلاینده‌های جوی برای شهر تهران، در این پروژه به درستی‌سنجی پیش‌بینی غلظت PM₁₀ با استفاده از مدل WRF-Chem پرداخته شد. به این منظور برون‌داد مدل با داده‌های پایش دریافت‌شده از شرکت کنترل کیفیت هوای شهر تهران مورد مقایسه قرار گرفت. مدل در بازه زمانی ۲۰۲۳ مدل با داده‌گواری اجرا شد و نتایج پیش‌بینی مورد بررسی و درستی‌سنجی شد. در این پژوهش به ارزیابی دقت و کارایی یک مدل پیش‌بینی غلظت PM₁₀ در چهار ایستگاه پایش کیفیت هوای تهران (پیروزی، ستاد بحران، شهرری و مسعودیه) پرداخته شده است. نتایج نشان داد مدل در پیش‌بینی غلظت PM₁₀، به‌ویژه در مقادیر بیشینه غلظت و دوره‌های آلودگی، با چالش‌هایی چون کم‌برآورد سامانمند، خطای پیش‌بینی بالا و همبستگی ضعیف مواجه بوده است. باین‌حال، عملکرد مدل در غلظت‌های پایین‌تر PM₁₀ بهتر بوده و در ایستگاه مسعودیه توانسته الگوی تغییرات را با دقت بالاتری بازسازی کند. در مقابل، عملکرد مدل در ایستگاه‌های شهرری و ستاد بحران ضعیف‌تر ارزیابی شد. بر اساس نتایج، بهبود مدل در پیش‌بینی رخداد‌های شدید آلودگی و روندهای زمانی ضروری است.

واژه‌های کلیدی: PM₁₀، WRF-Chem، درستی‌سنجی، داده‌گواری

۱. مقدمه

واکنش‌های جوی هستند، اشاره کرد (سان و همکاران، ۲۰۰۶). ذرات 10OM همچنین می‌توانند حاوی ترکیبات آلی، هیدروکربن‌های آروماتیک چند حلقه‌ای (3PAH) و نشانگرهای سوزاندن زیست‌توده باشند که خواص سمی دارند (هوول و همکاران، ۲۰۱۸).

مقادیر 10PM دارای تغییرات فصلی قابل توجهی است که تحت تأثیر شرایط هواشناسی و فعالیت‌های انسانی هستند. غلظت 10PM در مناطق شهری در طول فصل زمستان می‌تواند مقادیر بالاتری نسبت به سایر فصول داشته باشد. این امر می‌تواند ناشی از افزایش پایداری جو، اختلاط کمتر و افزایش گازهای گلخانه‌ای و آلاینده‌های ناشی از گرمایش و سوزاندن زیست‌توده باشد (چاوهان و همکاران، ۲۰۲۲؛ خوبرگاد و اهیور، ۲۰۲۳). در فصل تابستان در هنگام باران‌های موسمی مقادیر 10PM می‌تواند به دلیل بارش شدید باران کاهش پیدا کند (ژنگ، ۲۰۱۳). باین‌حال در ایران ذرات 10PM معمولاً دارای شکل نامنظم هستند (جیانگ و همکاران، ۲۰۱۸). همچنین تحت تأثیر منبع آن‌ها مانند گردوخاک جاده‌ای یا انتشارات صنعتی، از نظر ریخت‌شناسی (مورفولوژی) متفاوت هستند (خانم و همکاران، ۲۰۲۰).

با توجه به اینکه آلودگی هوا یکی از موضوعات مهم زیست‌محیطی به شمار می‌رود و به‌طور قابل توجهی بر کیفیت زندگی و سلامت بشر تأثیرگذار است، مطالعه در این زمینه در سراسر جهان و به‌ویژه شهرهای پرجمعیت از اهمیت زیادی برخوردار است. ذرات گردوخاک معلق در جو به‌عنوان یکی از آلاینده‌های جوی، علاوه بر تغییر خواص نوری جو می‌توانند کیفیت هوا را در مقیاس محلی تا منطقه‌ای تغییر دهند (سونی و همکاران، ۲۰۲۲). پیش‌بینی دقیق غلظت آلاینده‌های جوی با استفاده از مدل‌های عددی می‌تواند سبب کاهش مشکلات مرتبط با آلودگی هوا و در نتیجه بهبود کیفیت زندگی و محیط‌زیست شود (چن و همکاران، ۲۰۱۴؛ سیکارد و همکاران، ۲۰۲۱).

به‌طور تقریبی $5/4$ میلیارد نفر در حال حاضر در معرض ذرات معلق با غلظتی دو برابر مقدار استاندارد سازمان بهداشت جهانی هستند (WMO, ۲۰۱۶). مطالعات نشان می‌دهد که قرارگیری در معرض 10PM علاوه بر اثرات نامطلوب سلامتی مانند بیماری‌های تنفسی و قلبی، امید به زندگی را در افراد کاهش می‌دهد. به‌طوری‌که با افزایش 10 میکروگرم بر مترمکعب، امید به زندگی در حدود $0/64$ سال کاهش پیدا می‌کند که دلیل عمده آن افزایش نرخ مرگ‌ومیر در این رابطه است (ابنشتاین و همکاران، ۲۰۱۷).

ذرات معلق با قطر کمتر از 10 میکرومتر ترکیبی از ذرات جامد و قطرات مایع معلق در جو هستند که از منابع مختلف مانند وسایل نقلیه، فرایندهای صنعتی و یا رویدادهای طبیعی مانند توفان گردوخاک منتشر می‌شوند. غلظت‌های بالای این ذرات می‌تواند سلامت انسان را به خطر بیندازد و منجر به بیماری‌های مزمن ریه و مرگ‌ومیر شود (خائفی و همکاران، ۲۰۱۷؛ جانداچکا و دورچانسکا، ۲۰۱۹). در مناطق شهری انتشار 10PM از وسایل نقلیه (اگزوز و غیر اگزوز) سهم قابل توجهی از آلودگی جوی را تشکیل می‌دهند. علاوه‌براین، گردوخاک معلق در جاده و نیز ناشی از فعالیت‌های ساختمانی از دیگر منابع اصلی انتشار 10PM است (مارادونیز و همکاران، ۲۰۲۳). سوزاندن زیست‌توده در فعالیت‌های کشاورزی و گرمایش منازل به‌ویژه در ماه‌های سرد سال از دیگر منابع انتشار 10PM است (جین و همکاران، ۲۰۲۱). در نزدیکی مراکز صنعتی نیز افزایش انتشار 10PM و فلزات سنگین مشاهده شده است (لی و همکاران، ۲۰۲۱).

ذرات 10PM از عناصر مختلفی از جمله آهن، منیزیم، آلومینیوم و پتاسیم و همچنین فلزات سمی مانند روی، سرب و کارمیوم تشکیل شده‌اند (خانم و همکاران، ۲۰۲۰). علاوه‌براین، از یون‌های رایج موجود در 10PM می‌توان به سولفات (42SO -)، نترات (3NO -) و آمونیوم (4NH +) که اغلب محصول

مدل تحقیق و پیش‌بینی وضع هوا (WRF) همراه با شیمی (WRF-Chem) (گرل و همکاران، ۲۰۰۵) برای شبیه‌سازی و پیش‌بینی فرایندهای جوی شامل وضع هوا و کیفیت هوا مورد استفاده قرار گرفته است (سونی و همکاران، ۲۰۲۲؛ وانگ و همکاران، ۲۰۲۳). با توجه به استفاده از طرح‌واره‌های مختلف مربوط به لایه‌مرزی سیاره‌ای، سطح زمین، تابش و سایر فرایندهای فیزیکی، انتخاب پیکربندی مناسب می‌تواند بر عملکرد دقت پیش‌بینی‌ها به‌طور قابل‌توجهی اثرگذار باشد (حسینی دهشیری و فیروزآبادی، ۲۰۲۳؛ فینیکس و همکاران، ۲۰۱۷؛ وانگ و همکاران، ۲۰۲۳).

ارزیابی مدل‌های عددی از جنبه‌های مختلف از جمله دقت مدل، بهبود مدل، سیاست‌گذاری و سلامت عمومی و نیز درک تغییرپذیری منطقه مورد مطالعه از اهمیت بسیاری برخوردار است. انجام راستی‌آزمایی و مقایسه برون‌داد مدل با داده‌های مشاهداتی میزان دقت پیش‌بینی انجام‌شده توسط مدل را نشان می‌دهد. این امر برای قابل‌اعتماد بودن پیش‌بینی مدل بسیار مهم است (اوخوو، ۲۰۲۰). همچنین با شناسایی میزان و نوع اختلاف بین مقادیر پیش‌بینی‌شده و داده‌های مشاهداتی می‌توان بخش‌های مختلف مدل را بهبود بخشید که منجر به پیش‌بینی‌های بهتر و دقیق‌تر خواهد شد (کومار، ۲۰۱۶). انجام پیش‌بینی‌های دقیق کیفیت هوا برای سیاست‌گذاری‌ها به‌ویژه در بخش سلامت عمومی حیاتی است. راستی‌آزمایی تضمین می‌کند که می‌توان با اعتماد و اطمینان خوبی از برون‌داد مدل برای تصمیم‌گیری در مورد مدیریت کیفیت هوا و کنترل آلودگی هوا استفاده کرد (پنگ، ۲۰۱۸)؛ بنابراین، راستی‌آزمایی گامی حیاتی در حصول اطمینان از اطلاعات قابل‌اعتماد، دقیق و عملی پیش‌بینی مدل‌های عددی برای مدیریت کیفیت هوا است.

در این پژوهش برون‌داد مدل WRF-Chem شامل غلظت PM₁₀ برای شهر تهران در دو بازه زمانی بدون انجام داده‌گذاری و با داده‌گذاری با استفاده از داده‌های مشاهداتی شرکت کنترل کیفیت هوای شهر تهران مورد ارزیابی و مقایسه قرار گرفت. در

این پژوهش سعی شده به این سؤالات پاسخ داده شود که آیا مدل WRF-Chem برای پیش‌بینی غلظت PM₁₀ برای شهر تهران کارایی مناسبی دارد و نیز داده‌گذاری انجام‌شده برای پیش‌بینی غلظت PM₁₀ با استفاده از مدل WRF-Chem دقت پیش‌بینی را افزایش می‌دهد یا خیر.

۲. ادبیات پژوهش

سانچز کویلو و همکاران (۲۰۱۸) با استفاده از الگوریتم آماری برون‌داد مدل (MOS) به بهبود پیش‌بینی غلظت PM₁₀ و PM_{2.5} برای شهر لیما-کالائو در پرداختند. نتایج نشان داد این الگوریتم مقادیر خطای اریبی نرمال‌شده را تا حدی افزایش داد، اما میانگین خطای نرمال‌شده در پیش‌بینی هر دو غلظت PM₁₀ و PM_{2.5} کاهش یافته است. وارنر و همکاران (۲۰۱۵) از مدل WRF-Chem برای پیش‌بینی غلظت PM₁₀ برای لهستان استفاده کردند. نتایج نشان داد عملکرد مدل در فصل زمستان نسبت به فصل تابستان ضعیف‌تر است. همچنین در برخی مناطق با توجه به ویژگی خاص مکانی آن پیش‌بینی مدل از دقت قابل‌قبولی برخوردار نیست. چوبری و همکاران (۲۰۱۲) حساسیت اثرات تابشی گردوخاک مرتبط با طرح‌های مختلف PBL و سطح زمین را مطالعه کرد.

کریم خانی و همکاران (۱۳۹۹) در مطالعه‌ای به تحلیل تأثیر استفاده از داده‌های راداری در فرآیند داده‌گذاری و بهبود شبیه‌سازی پدیده‌های جوی پرداخته‌اند. در این مطالعه با تمرکز بر روی اثر داده‌گذاری رادار در مدل‌های عددی پیش‌بینی وضعیت جو، نشان دادند که گنجاندن داده‌های راداری می‌تواند به بهبود دقت پیش‌بینی‌های مدل در شبیه‌سازی پدیده‌های هوانوردی حساس مانند خط تندوزه (گذر سریع و تند یک سامانه جوی) کمک کند. نتایج این مطالعه حاکی از آن است که زمان تشکیل و رشد سلول‌های همرفتی، توزیع افقی، ساختار قائم و زمان نابودی آن‌ها در شبیه‌سازی همراه با داده‌گذاری نسبت به اجرای مرجع به داده‌های دیدبانی نزدیک‌تر هستند.

دقت مدل WRF-Chem در شبیه‌سازی آلاینده‌های هوای امارات و تأثیر داده‌گذاری در بهبود پیش‌بینی‌های مدل توسط پاراگونتا و همکاران (۲۰۲۵) بررسی و ارزیابی شده است. نتایج نشان داد که داده‌گذاری با استفاده از داده‌های سطحی و ماهواره‌ای باعث کاهش خطای شبیه‌سازی غلظت آلاینده‌ها (مانند $PM_{2.5}$ و NO_2) شده و موجب انطباق بهتر مدل با مشاهدات واقعی می‌شود. همچنین، یافته‌ها نشان داد که داده‌گذاری تأثیر چشمگیری بر دقت پیش‌بینی کیفیت هوا در مناطق شهری امارات دارد و به مدل کمک می‌کند تا تغییرات فضایی و زمانی آلاینده‌ها را بهتر شبیه‌سازی کند.

طوبی و همکاران (۱۴۰۳) نیز یک توفان گردوخاک در کرمانشاه را شبیه‌سازی کرده و نقش داده‌گذاری در بهبود دقت مدل‌های عددی جوی را بررسی کرده‌اند. نتایج نشان داد که ترکیب داده‌های مشاهداتی با مدل‌های HYSPLIT و WRF-Chem دقت شبیه‌سازی گردوخاک را افزایش داده و به تطابق بهتری با داده‌های واقعی منجر می‌شود. داده‌گذاری به‌ویژه در بهبود مسیر حرکت گردوخاک و غلظت آن در لایه‌های مختلف جو مؤثر بوده است که نشان‌دهنده اهمیت این روش در پیش‌بینی بهتر پدیده‌های گردوخاکی است.

مژگان و همکاران (۱۴۰۲) در پژوهشی به بررسی عملکرد مدل WRF-Chem در شبیه‌سازی دو آلاینده مهم یعنی NO_2 و O_3 در کلان‌شهر تهران طی تابستان‌های ۱۳۹۸ تا ۱۴۰۰ پرداخته‌اند. در این پژوهش، مدل‌سازی با استفاده از داده‌های اولیه جوی و شیمیایی انجام شده و نتایج مدل با داده‌های مشاهداتی ایستگاه‌های سنجش آلودگی هوا مقایسه شده است. یافته‌ها نشان دادند که مدل WRF-Chem توانسته است الگوی تغییرات زمانی و مکانی غلظت NO_2 را به‌درستی شبیه‌سازی کند؛ اما مقدار آن را نسبت به مشاهدات کمتر برآورد کرده است. در مقابل، مدل بیشینه غلظت O_3 را در تهران به‌درستی تشخیص داده اما مقدار آن را بیش از مقدار واقعی پیش‌بینی کرده است. این اختلافات نشان‌دهنده ضرورت بهبود طرح‌های شیمیایی و

داده‌گذاری در مدل WRF-Chem برای افزایش دقت شبیه‌سازی آلاینده‌های هوا در مناطق شهری است.

۳. روش پژوهش

مهم‌ترین اهداف این پژوهش بررسی دقت مدل WRF-Chem برای پیش‌بینی PM_{10} برای شهر تهران و بررسی دقت داده‌گذاری در پیش‌بینی PM_{10} با استفاده از مدل WRF-Chem است.

مدل پیش‌بینی عددی و تحقیقاتی وضع هوا به همراه شیمی (WRF-Chem) در ویرایش سوم مدل WRF گنجانده شده است که یک مدل تحقیقاتی و عملیاتی برای شبیه‌سازی و پیش‌بینی غلظت هواویزهای موجود در جو ناشی از سازوکارهای طبیعی، فعالیت‌های بشری (آلاینده‌ها) و گردوخاک در اندازه‌های مختلف، نحوه انتشار و نهشت آن‌ها است. همچنین اثرات مستقیم هواویزها، به‌طور مثال بر بودجه تابشی جو و اثرات غیرمستقیم آن‌ها بر خردفیزیک ابرها قابل‌بررسی است. از طرفی در صورت در اختیار داشتن داده‌های گسیل، شبیه‌سازی گازهای شیمیایی موجود در جو (آلاینده‌های گازی) و برهمکنش آن‌ها با یکدیگر، با تابش و هواویزها امکان‌پذیر است. مدل WRF-Chem برخلاف بیشتر مدل‌های مشابه، نیازی به جفت شدن با یک مدل جوی و یا واردکردن کمیت‌های جوی ندارد و به‌صورت برخط کمیت‌های جوی موردنیاز خود را محاسبه می‌کند، بنابراین علاوه بر کمیت‌های مرتبط با شیمی جو، کمیت‌های جوی از قبیل باد در سطوح مختلف، فشار و ارتفاع ژئوپتانسیلی را نیز به‌عنوان خروجی مدل ارائه می‌دهد. این مدل ساختاری مشابه مدل WRF دارد و شامل بخش‌های سامانه پیش‌پردازش مدل (WPS)، سامانه داده‌گذاری (WRF-VAR) و سامانه پس‌پردازش و ابزارهای تصویرسازی است. تفاوت این مدل با WRF در بخش شیمی مدل است که نیاز به داده‌های ورودی اضافه‌ای برای گسیل دارد.

در این پژوهش از مدل WRF-Chem نسخه ۳-۹ برای شبیه‌سازی رخداد گردوخاک استفاده می‌شود. تفکیک افقی

داده‌های زمینی برای دامنه‌ی اول هر ۱۰ دقیقه (نوزده کیلومتر) تکرار و از نگاهت لامبرت در این مدل استفاده خواهد شد. برای شرایط مرزی و شرایط اولیه مدل WRF-Chem از داده‌های GFS تحلیل با تفکیک افقی ۰/۵ درجه استفاده می‌شود. داده‌گذاری فرآیندی است که در آن از تمام اطلاعات در دسترس برای به دست آوردن بهترین برآورد از حالت واقعی جو استفاده می‌شود (کالنی، ۲۰۰۳). در این پژوهش مدل WRF-Chem برای سال ۲۰۲۰ بدون داده‌گذاری و برای سال ۲۰۲۳ همراه با گوارد داده‌های سطح زمین و جو بالا با روش وردشی سه‌بعدی اجرا می‌شود.

در ادامه برونداد مدل در هر دو بازه زمانی با داده‌های پایش شرکت کنترل کیفیت هوای شهر تهران شامل غلظت PM₁₀ برای ایستگاه‌های پیروزی، ستاد بحران، شهرری و مسعودیه مورد مقایسه قرار گرفت.

۳-۱ منطقه مورد مطالعه

محدوده مورد مطالعه در این پروژه شهر تهران است. مدل WRF-Chem در بازه زمانی ۲۰۲۳ با داده‌گذاری برای پیش‌بینی غلظت PM₁₀ اجرا شده است.



شکل ۱. محدوده مورد مطالعه

۳-۲ داده‌ها

- داده‌های پایش: مقادیر غلظت PM₁₀ پایش شده از شرکت کنترل کیفیت هوای تهران

در این پروژه دو گروه داده در بازه زمانی ۲۰۲۳ برای شهر تهران تهیه و استخراج شد:

- برونداد مدل WRF-Chem: مقادیر غلظت PM₁₀ پیش‌بینی شده با داده‌گذاری

۴. تحلیل داده‌ها

در این فصل یافته‌های پژوهش با توجه به مراحل انجام کار ارائه شده است. نتایج حاصل از محاسبه شاخص‌های آماری برای چهار ایستگاه پیروزی، ستاد بحران، شهرری و مسعودیه به ترتیب در این فصل ارائه شده است.

۴-۱ ایستگاه مسعودیه

جدول ۱ مقایسه مشخصات آماری داده‌های دیدبانی و برون‌داد مدل برای ایستگاه مسعودیه را نشان می‌دهد. همان‌طور که

جدول ۱. مقایسه مشخصات آماری دیدبانی و پیش‌بینی برای ایستگاه مسعودیه

شاخص آماری	مشاهده	پیش‌بینی
تعداد داده‌ها	۸۰۷۳	۸۰۷۳
کمینه (Min)	۴/۶۲	۰/۰۰۰۰۱
بیشینه (Max)	۶۶۹/۵۶	۶۲۷/۵۳
میانگین (Mean)	۷۶/۷۹	۳۰/۷۲
انحراف معیار (SD)	۴۶/۸۷	۵۵/۲۲

نتایج محاسبات شاخص‌های آماری برای ایستگاه مسعودیه در جدول ۲ ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که مدل پیش‌بینی در این ایستگاه با وجود همبستگی آماری نسبتاً قابل قبول ($r = 0.308^{***}$) و بازسازی نسبتاً مناسب بیشینه‌ها، همچنان دچار ضعف ساختاری در دقت سطحی است. میانگین پیش‌بینی‌ها حدود ۴۶ واحد کمتر از مقدار واقعی بوده که نشان‌دهنده اریبی

سامانمند مدل و کم‌برآوردی پایدار است. همچنین، وجود مقادیر نزدیک به صفر در پیش‌بینی درحالی‌که مقدار مشاهده هیچ‌گاه به آن نزدیک نشده، قابل توجه است. شاخص توافق ($IoA = 0.356$) و R^2 پایین (0.095) نیز گویای آن است که اگرچه مدل توانسته بخشی از نوسانات و الگوها را بازسازی کند، اما در کل، عملکرد آن محدود و نیازمند اصلاح است.

جدول ۲. شاخص‌های آماری برای ایستگاه مسعودیه

Pearson's correlation coefficient	R^2	IoA	MAE	MBE	RMSE
۰/۳۰۸**	۰/۰۹۵	۰/۳۵۶	۶۰/۱۵۳	۴۶/۰۷	۷۵/۹۷۹

** : همبستگی در سطح اطمینان ۰/۰۱ معنی‌دار است.

۴-۲ ایستگاه پیروزی

مطابق با جدول ۳ مشخصات آماری داده‌های دیدبانی و برون‌داد مدل برای ایستگاه پیروزی با هم مقایسه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقادیر کمینه، بیشینه و میانگین توسط مدل کم

برآورد شده است، به‌ویژه در مقادیر بیشینه که بیش از ۴۰۰ واحد اختلاف وجود دارد. میانگین داده‌ها نیز حاکی از کم‌برآورد نسبتاً شدید توسط مدل برای این ایستگاه است. با توجه به مقادیر انحراف معیار، پراکندگی مقادیر پیش‌بینی شده تقریباً با مقادیر مشاهداتی برابر است.

جدول ۳. مقایسه مشخصات آماری دیدبانی و پیش‌بینی برای ایستگاه پیروزی

شاخص آماری	پیش‌بینی	مشاهده
تعداد داده‌ها	۷۱۶۱	۷۱۶۱
کمینه (Min)	۰/۰۰۰۰۱۰	۵/۰۸
بیشینه (Max)	۵۴۴/۸۲	۹۷۹/۱۸
میانگین (Mean)	۲۷/۰۸	۹۰/۰۱
انحراف معیار (SD)	۵۰/۰۷	۵۲/۳۲

مقادیر PM10 برای ایستگاه مذکور است. باین‌حال مقادیر ضریب همبستگی در سطح اطمینان ۹۹٪ معنی‌دار بوده هرچند از نظر مقدار کوچک است و همبستگی متوسط تا ضعیف را نشان می‌دهد.

نتایج محاسبات شاخص‌های آماری برای ایستگاه پیروزی در جدول ۴ ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که خطا نسبتاً زیاد بوده و به‌ویژه در پیش‌بینی مقادیر بیشینه مدل ضعیف عمل کرده است. همچنین اریبی منفی نشان‌دهنده کم برآورد مدل است. شاخص توافقی نیز مبین ضعیف بودن توانایی مدل در پیش‌بینی

جدول ۴. شاخص‌های آماری برای ایستگاه پیروزی

Pearson's correlation coefficient	R ²	IoA	MAE	MBE	RMSE
۰/۲۳۴**	۰/۰۵۵	۰/۲۳۵	۷۲/۴۵	۶۲/۹۳۳	۸۹/۳۱۳

** : همبستگی در سطح اطمینان ۰/۰۱ معنی‌دار است.

برآورد شده است، به‌ویژه در مقادیر بیشینه که در حدود ۳۰۰ واحد اختلاف وجود دارد. با توجه به مقادیر انحراف معیار، پراکندگی مقادیر پیش‌بینی شده نسبت به مقادیر مشاهداتی بیشتر است.

۳-۴ ایستگاه ستاد بحران

جدول ۵ مقایسه مشخصات آماری داده‌های دیدبانی و برونداد مدل برای ایستگاه ستاد بحران را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقادیر کمینه، بیشینه و میانگین توسط مدل کم

جدول ۵. مقایسه مشخصات آماری دیدبانی و پیش‌بینی برای ایستگاه ستاد بحران

شاخص آماری	مشاهده	پیش‌بینی
تعداد	۲۵۸۳	۲۵۸۳
کمینه (Min)	۱۵/۹۵	۰/۰۰۰۰۱
بیشینه (Max)	۸۳۸/۸۷	۵۳۳/۱۱
میانگین (Mean)	۷۶/۳۳	۳۶/۳۰
انحراف معیار (SD)	۴۳/۶۳	۵۷/۴۴

در حدود ۴۰ واحد حاکی از کم برآورد سامانمند مدل است؛ بنابراین اختلاف قابل‌توجهی بین مقادیر دیدبانی و مقادیر پیش‌بینی شده وجود داشته و همبستگی نسبتاً ضعیفی بین آن‌ها

نتایج محاسبات شاخص‌های آماری برای ایستگاه مسعودیه در جدول ۶ ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که مقادیر خطا برای پیش‌بینی مدل در این ایستگاه نسبتاً بالا بوده و به‌ویژه در پیش‌بینی مقادیر بیشینه ضعیف عمل کرده است. همچنین میانگین اریبی

وجود دارد. شاخص توافق نیز نشان می‌دهد مدل نه تنها خوب پیش‌بینی نکرده بلکه روند کلی را هم خوب برآورد نکرده است.

جدول ۶. شاخص‌های آماری برای ایستگاه ستاد بحران

Pearson's correlation coefficient	R ²	IoA	MAE	MBE	RMSE
۰/۰۸۷**	۰,۰۰۸	۰,۱۲۱	۶۰,۵۸۲	۴۰,۰۳۴	۷۹,۷۹۲
** همبستگی در سطح اطمینان ۰/۰۱ معنی‌دار است.					

۴-۴ ایستگاه شهری

شده است، به‌ویژه در مقادیر بیشینه که در حدود ۳۰ درصد کمتر پیش‌بینی کرده است. با توجه به مقادیر انحراف معیار، پراکندگی مقادیر پیش‌بینی شده نسبت به مقادیر مشاهداتی تقریباً مشابه است.

جدول ۷ مقایسه مشخصات آماری داده‌های دیدبانی و برون‌داد مدل برای ایستگاه شهری را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقادیر کمینه، بیشینه و میانگین توسط مدل کم برآورد

جدول ۷. مقایسه مشخصات آماری دیدبانی و پیش‌بینی برای ایستگاه شهری

ایستگاه شهری	تعداد	کمینه	بیشینه	میانگین	انحراف معیار
پیش‌بینی	۸۱۷۳	۰/۰۰۰۰۱۰	۶۹۷/۳۹۷۲۲۰	۳۲/۳۷۵۱۰۴	۶۰/۴۸۵۳۴۷
مشاهدات	۸۱۷۳	۶/۳۳	۹۸۵/۶۴	۹۹/۱۱۶۵۱۰	۶۰/۸۶۴۰۵۲

سامانمند مدل است؛ بنابراین اختلاف قابل توجهی بین مقادیر دیدبانی و مقادیر پیش‌بینی شده وجود داشته و همبستگی نسبتاً ضعیفی بین آن‌ها وجود دارد. شاخص توافق نیز نشان می‌دهد مدل به‌خوبی رفتار واقعی را پیش‌بینی نکرده است.

نتایج محاسبات شاخص‌های آماری برای ایستگاه مسعودیه در جدول ۸ ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که مقادیر خطا برای پیش‌بینی مدل در این ایستگاه نسبتاً بالا بوده است. همچنین میانگین اریبی در حدود ۶۶ واحد است که حاکی از کم برآورد

جدول ۸. شاخص‌های آماری برای ایستگاه شهری

Pearson's correlation coefficient	R ²	IoA	MAE	MBE	RMSE
۰/۱۱۴**	۰/۰۱۳	۰/۱۳۳	۸۳/۳۵۱	۶۶/۷۴۱	۱۰۴/۷۶۸
** همبستگی در سطح اطمینان ۰/۰۱ معنی‌دار است.					

۵. نتیجه‌گیری

کم برآورد سامانمند: در هر چهار ایستگاه، مدل به‌طور سامانمند مقادیر غلظت PM10 را به‌ویژه در مقادیر بالای آلودگی، کم برآورد کرده است. این موضوع در نتایج شاخص‌های آماری از جمله مقدار MBE (میانگین خطای بایاس) به‌وضوح مشاهده می‌شود.

این پژوهش با هدف ارزیابی دقت و کارایی مدل در پیش‌بینی غلظت PM10 با استفاده از روش‌های داده‌گواری، در چهار ایستگاه منتخب (پیروزی، ستاد بحران، شهری و مسعودیه) انجام شد. نتایج به‌طور کلی نشان داد که مدل در تخمین مقادیر غلظت PM10، به‌ویژه در مقادیر بیشینه تا حدودی با چالش‌هایی مواجه است.

خطای پیش‌بینی بالا: مقادیر RMSE و MAE در همه ایستگاه‌ها نسبتاً بالا بوده که نشان‌دهنده اختلاف چشمگیر بین مقادیر مشاهده‌شده و پیش‌بینی شده است.

از جمله یافته‌های اصلی می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

Environ. 61, 294–304. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.07.038>.

- Bocquet, M., Elbern, H., Eskes, H., Hirtl, M., Zabkar, R., Carmichael, G.R., Flemming, J., Inness, A., Pagowski, M., Perez Camaño, J.L., Saide, P.E., San Jose, R., Sofiev, M., Vira, J., Baklanov, A., Carnevale, C., Grell, G. & Seigneur, C., 2015, Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models. *Atmospheric Chemistry and Physics* 15: 5325-5358. <https://doi.org/10.5194/acp-15-5325-2015>

- Charney, J.G., Fjortoft, R. & von Neuman, J., 1950, Numerical integration of the barotropic vorticity equation. *Tellus* 2: 237-254. <https://doi.org/10.1111/j.2153-3490.1950.tb00336.x>

- Chen, D., Liu, Z., Schwartz, C.S., Lin, H.C., Cetola, J.D., Gu, Y. & Xue, L., 2014, The impact of aerosol optical depth assimilation on aerosol forecasts and radiative effects during a wildfire event over the United States. *Geoscientific Model Development* 7: 2709-2715. <https://doi.org/10.5194/gmd-7-2709-2014>

- Fountoukis, C., Ayoub, M.A., Ackermann, L., Perez-Astudillo, D., Bachour, D., Gladich, I. & Hoehn, R.D., 2018, Vertical ozone concentration profiles in the Arabian Gulf region during summer and winter: sensitivity of WRF-Chem to planetary boundary layer schemes. *Aerosol Air Qual. Res.* 18, 1183–1197. <https://doi.org/10.4209/aaqr.2017.06.0194>

- Grell, G.A., Peckham, S.E., Schmitz, R., McKeen, S.A., Frost, G. & Skamarock, W.C., 2005, Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmos. Environ.* 39, 6957–6975. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.04.027>

همبستگی ضعیف: ضرایب همبستگی پیرسون و مقادیر R^2 در تمامی ایستگاه‌ها کم بوده و بیشتر در محدوده "ضعیف" تا "بسیار ضعیف" قرار گرفته است، اگرچه از لحاظ آماری معنی‌دار بوده‌اند.

پیش‌بینی بهتر در مقادیر پایین: مدل در پیش‌بینی غلظت‌های پایین‌تر PM_{10} (زیر ۱۵۰ میکروگرم بر مترمکعب) عملکرد بهتری نسبت به غلظت‌های بالا داشته است.

ناتوانی در بازسازی رفتار رخداد‌های شدید: در شرایط افزایش شدید آلودگی، مدل دچار ضعف عملکرد شده و توانایی لازم برای پیش‌بینی دقیق رخدادها را نداشته است.

به‌طور کلی مقادیر پیش‌بینی برای ایستگاه مسعودیه با دقت بالاتر و برای شهرری با خطای بیشتر به دست آمده است. همچنین مقادیر بایاس در ایستگاه ستاد بحران و مسعودیه کمتر از سایر ایستگاه‌ها بوده است. مدل در ایستگاه مسعودیه رفتار کلی غلظت PM_{10} را بهتر پیش‌بینی کرده است. همچنین بالاترین مقادیر همبستگی نیز در ایستگاه مسعودیه مشاهده شد.

۶. مراجع

- کریم خانی، مهناز، آزادی، مجید، مشکوتی، امیر حسین و رنجبر سعادت آبادی، عباس. (۱۳۹۹). بررسی اثر داده‌گواری داده‌های رادار هواشناسی در شبیه‌سازی خط تندوزه. *مجله ژئوفیزیک ایران*. 82-63, 14(2).

doi: 10.30499/ijg.2020.106611

- Adedeji, A.R., Dagar, L., Petra, M.I., C.De Silva, L. & Tao, Zh., 2020, Sensitivity of WRF-Chem model resolution in simulating particulate matter in South-East Asia. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 1-29. <https://doi.org/10.5194/acp-2019-692>.

- Alizadeh Choobari, O., Zawar-Reza, P. & Sturman, A., 2012, Feedback between windblown dust and planetary boundary-layer characteristics: sensitivity to boundary and surface layer parameterizations. *Atmos.*

- Peng, Z., Lei, L., Liu, Z., Sun, J., Ding, A., Ban, J., Chen, D., Kou, X. & Chu, K., 2018, The impact of multi-species surface chemical observation assimilation on air quality forecasts in China. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18, 17387-17404.
doi:10.5194/acp-18-17387-2018
- Peng, Z., Lei, L., Liu, Z., Sun, J., Ding, A., Ban, J., Chen, D., Kou, X. & Chu, K., 2018, The impact of multi-species surface chemical observation assimilation on air quality forecasts in China. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18, 17387- 17404.
<https://doi.org/10.5194/acp-18-17387-2018>
- Richardson, L.F., 1922, *Weather prediction by numerical processes*. Cambridge University Press.
- Soni, M., Verma, S., Mishra, M.K., Mall, R.K. & Payra, S., 2022, Estimation of particulate matter pollution using WRF-Chem during dust storm event over India. *Urban Clim.* 44, 101202
<https://doi.org/10.1016/j.uclim.2022.101202>
- Ukhov, A., Mostamandi, S., Da Silva, A., Flemming, J., Alshehri, Y., Shevchenko, I. & Stenchikov, G., 2020, Assessment of natural and anthropogenic aerosol air pollution in Middle East using MERRA-2, CAMS data assimilation products, and high-resolution WRF-Chem model simulations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 20 (15), 9281-9310.
<https://doi.org/a0.5194/acp-2020-17>
- Wang, Y., Liu, H., Liu, Y., Wang, S., Wang, L. & Li, X., 2023, Effect of land-atmosphere process parameterizations on the PM simulation of a river valley city with complex topography. *Atmos. Res.* 281, 106505
<https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2022.106505>
- Yoon, J.W., Lee, E. & Park, S.K., 2024: Improving the Asian dust storm prediction using WRF-Chem through combinational
- Hosseini Dehshiri, S.S. & Firoozabadi, B., 2023, A multi-objective framework to select numerical options in air quality prediction models: a case study on dust storm modeling. *Sci. Total Environ.* 863, 160681
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.160681>
- Jiang, Z., Liu, Z., Wang, T., Schartz, C.S., Lin, H.C. & Jiang, F., 2013, Probing into the impact of 3DVAR assimilation of surface PM10 observations over China using process analysis. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 118: 6738-6749.
<https://doi.org/10.1002/jgrd.50495>
- Kumar, A., Jiménez, R., Belalcázar, L.C. & Roja, N.Y., 2016, Application of WRF-Chem Model to Simulate PM10 Concentration over Bogota. *Aerosol Air Qual. Res.* 16: 1206-1221.
<https://doi.org/10.4209/aaqr.2015.05.0318>
- Liu, Z., Liu, Q., Lin, H.C., Schwartz, C.S., Lee, Y.H. & Wang, T., 2011, Three-dimensional variational assimilation of MODIS aerosol optical depth: Implementation and application to a dust storm over East Asia. *Journal of Geophysical Research, Atmospheres*, 116 (D23).
<https://doi.org/10.1029/2011JD016159>
- Martinez-Sabari, E.E. & Garcia-Reynoso, J.A., 2021, Meteorological data assimilation for air quality modeling with WRF-Chem: Central Mexico case study. *Atmósfera* 34(3), 311-336.
<https://doi.org/10.20937/ATM.52804>
- Pagowski, M., Grell, G.A., McKeen, S.A., Peckham, S.E. & Devenyi, D., 2010, Three-dimensional variational data assimilation of ozone and fine particulate matter observations: some results using the Weather Research and Forecasting – Chemistry model and Grid-point Statistical Interpolation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 136, 2013-2024.
<https://doi.org/10.1002/qj.700>

<https://doi.org/10.5194/acp-23-10325-2023>, 2023

- Jaén, C., Villasclaras, P., Fernández, P., Grimalt, J. O., Udina, M., Bedia, C., & van Drooge, B. L. (2021). Source Apportionment and Toxicity of PM in Urban, Sub-Urban, and Rural Air Quality Network Stations in Catalonia. *Atmosphere*, 12(6), 744.
<https://doi.org/10.3390/atmos12060744>

- Li, J., Michalski, G., Olson, E. J., Welp, L. R., Larrea Valdivia, A. E., Larico, J. R., Zapata, F. A., & Paredes, L. M. (2021). Geochemical Characterization and Heavy Metal Sources in PM₁₀ in Arequipa, Peru. *Atmosphere*, 12(5), 641.
<https://doi.org/10.3390/atmos12050641>

- Jiang, N., Dong, Z., Xu, Y., Yu, F., Yin, S., Zhang, R. and Tang, X. (2018). Characterization of PM₁₀ and PM_{2.5} Source Profiles of Fugitive Dust in Zhengzhou, China. *Aerosol Air Qual. Res.* 18: 314-329.
<https://doi.org/10.4209/aaqr.2017.04.013>

- Khanum, F., Chaudhry MN, Skouteris G, Saroj D, Kumar P. Chemical composition and source characterization of PM₁₀ in urban areas of Lahore, Pakistan. *Indoor and Built Environment*. 2021;30(7):924-937.
doi:10.1177/1420326X20924073

- Sun, Y., Guoshun Zhuang, Aohan Tang, Ying Wang, and Zhisheng An, 2006, Chemical Characteristics of PM_{2.5} and PM₁₀ in Haze-Fog Episodes in Beijing. *Environmental Science & Technology*, 40 (10), 3148-3155. DOI: 10.1021/es051533g

- Van Den Heuvel, R., Staelens, J., Koppen, G., & Schoeters, G. (2018). Toxicity of Urban PM₁₀ and Relation with Tracers of Biomass Burning. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 15(2), 320.

optimization of physical parameterization schemes. *Atmospheric Environment*, 326, 120461, ISSN 1352-2310.

<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2024.120461>

- World Health Organization, 2016, Data from “Ambient Air Pollution Database.” Available at www.who.int/phe/health_topics/outdoorair/databases/cities-2014/en/.

- Ebenstein, M. Fan, M. Greenstone, G. He, M. Zhou, 2017, New evidence on the impact of sustained exposure to air pollution on life expectancy from China’s Huai River Policy, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 114 (39) 10384-10389.
<https://doi.org/10.1073/pnas.1616784114>

- Jandacka, D., & Durcanska, D. (2019). Differentiation of Particulate Matter Sources Based on the Chemical Composition of PM₁₀ in Functional Urban Areas. *Atmosphere*, 10(10), 583.
<https://doi.org/10.3390/atmos10100583>

- Khaefi, M., Geravandi, S., Hassani, G., Yari, A.R., Soltani, F., Dobaradaran, S., Moogahi, S., Mohammadi, M.J., Mahboubi, M., Alavi, N., Farhadi, M. and Khaniabadi, Y.O. (2017). Association of Particulate Matter Impact on Prevalence of Chronic Obstructive Pulmonary Disease in Ahvaz, Southwest Iran during 2009–2013. *Aerosol Air Qual. Res.* 17: 230-237.
<https://doi.org/10.4209/aaqr.2015.11.0628>

- Mardoñez, V., Pandolfi, M., Borlaza, L. J. S., Jaffrezo, J.-L., Alastuey, A., Besombes, J.-L., Moreno R., I., Perez, N., Močnik, G., Ginot, P., Krejci, R., Chrastny, V., Wiedensohler, A., Laj, P., Andrade, M., and Uzu, G.: Source apportionment study on particulate air pollution in two high-altitude Bolivian cities: La Paz and El Alto, *Atmos. Chem. Phys.*, 23, 10325–10347.

https://repository.library.noaa.gov/view/noaa/14945?utm_source=chatgpt.com

- WRF-Chem Tools for the Community. (n.d.). National Center for Atmospheric Research (NCAR). Retrieved from https://www2.aom.ucar.edu/wrf-chem/wrf-chem-tools-community?utm_source=chatgpt.com

- Evaluation of the WRF-Chem performance for the air pollutants over Europe. (2025). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 25(1685). Retrieved from https://acp.copernicus.org/articles/25/1685/2025/?utm_source=chatgpt.com

- Kalnay, E. (2003). *Atmospheric modeling, data assimilation, and predictability*. Cambridge University Press.

- Evensen, G. (2009). *Data assimilation: The ensemble Kalman filter*. Springer.

- Bonavita, M., Fisher, M., & Bouttier, F. (2016). The role of data assimilation in numerical weather prediction. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 97(5), 871-883. <https://doi.org/10.1175/BAMS-D-15-00093.1>

- Houtekamer, P. L., & Zhang, F. (2016). Review of the ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation. *Monthly Weather Review*, 144(12), 4479-4498. <https://doi.org/10.1175/MWR-D-15-0362.1>

- Bonavita, M., Fisher, M., & Bouttier, F. (2016). The role of data assimilation in numerical weather prediction. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 97(5), 871-883. <https://doi.org/10.1175/BAMS-D-15-00093.1>

- Houtekamer, P. L., & Zhang, F. (2016). Review of the ensemble Kalman filter for

<https://doi.org/10.3390/ijerph15020320>

- Chauhan, PK, Kumar A, Pratap V and Singh AK (2022) Seasonal characteristics of PM1, PM2.5, and PM10 over Varanasi during 2019–2020. *Front. Sustain. Cities* 4:909351. doi: 10.3389/frsc.2022.909351

- Khobragade, P.P., Ahriwar, A.V., 2023, Seasonal Variation and Source Identification of PM10 in an Industrialized City. Conference 2021 on Environmet Concerns and itd Remediation, 410 (1), <https://doi.org/10.1002/masy.202100217>

- Zheng, J., Che, W., Zheng, Z., Chen, L. and Zhong, L. (2013). Analysis of Spatial and Temporal Variability of PM10 Concentrations Using MODIS Aerosol Optical Thickness in the Pearl River Delta Region, China. *Aerosol Air Qual. Res.* 13: 862-876. <https://doi.org/10.4209/aaqr.2012.09.0234>

- Georgiou, G. K., Christoudias, T., Proestos, Y., Kushta, J., Pikridas, M., Sciare, J., Savvides, C., and Lelieveld, J.: Evaluation of WRF-Chem model (v3.9.1.1) real-time air quality forecasts over the Eastern Mediterranean, *Geosci. Model Dev.*, 15, 4129–4146, <https://doi.org/10.5194/gmd-15-4129-2022>, 2022

- Grell, G. A., et al. (2005). "Fully coupled 'online' chemistry within the WRF model." *Atmospheric Environment*, 39(37), 6957-6975.

- Fast, J. D., et al. (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: Atmospheres*, 111(D21).

- WRF-Chem User's Guide (Version 3.8.1). (n.d.). National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA). Retrieved from

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.07.374>

- Gong, X., & Liu, Z. (2018). Model validation of WRF-Chem for simulating PM_{2.5} and ozone levels in urban areas. *Atmospheric Pollution Research*, 9(5), 963-976.

<https://doi.org/10.1016/j.apr.2018.04.011>

- Wang, H., & Li, Z. (2020). Sensitivity analysis of model parameters in WRF-Chem simulations for air quality forecasting. *Journal of Environmental Sciences*, 89, 106-119.

<https://doi.org/10.1016/j.jes.2019.10.022>

- Szykman, J. J., & Campbell, D. E. (2016). Intercomparison of WRF-Chem and CMAQ for air quality forecasting in the U.S. *Environmental Modelling & Software*, 82, 159-172.

<https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2016.05.003>

- Zhang, Y., & Wang, Y. (2017). Evaluation of WRF-Chem simulations for air quality forecasting: Application to PM_{2.5} and ozone. *Atmospheric Environment*, 152, 1-15.

<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.11.046>

- Yarragunta, Y., Francis, D., Fonseca, R., and Nelli, N.: Evaluation of the WRF-Chem performance for the air pollutants over the United Arab Emirates, *Atmos. Chem. Phys.*, 25, 1685–1709.

<https://doi.org/10.5194/acp-25-1685-2025>, 2025.

atmospheric data assimilation. *Monthly Weather Review*, 144(12), 4479-4498.

<https://doi.org/10.1175/MWR-D-15-0362.1>

- Kalnay, E. (2003). *Atmospheric modeling, data assimilation, and predictability*. Cambridge University Press.

- Zhang, J., & Rao, P. (2015). Kalman filter data assimilation for WRF-Chem air quality forecasting. *Atmospheric Environment*, 112, 158-172.

<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.04.021>

- Skamarock, W. C., & Klemp, J. B. (2008). The Weather Research and Forecasting Model (WRF). *Journal of the Atmospheric Sciences*, 65(7), 2437-2461.

<https://doi.org/10.1175/2008JAS1551.1>

- Wang, Y., & Zhang, L. (2019). Implementation of variational data assimilation in WRF-Chem for air quality forecasting. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19(22), 13985-14006.

<https://doi.org/10.5194/acp-19-13985-2019>

- Gilleland, E., & Schwartz, M. (2017). Ensemble-based data assimilation for WRF-Chem: Application to air quality forecasting. *Environmental Modelling & Software*, 97, 148-161.

<https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2017.08.007>

- Liu, X., & Lin, J. (2020). Application of machine learning in data assimilation for WRF-Chem simulations. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 125(9), e2020JD033471.

<https://doi.org/10.1029/2020JD033471>

- He, H., & Wang, S. (2019). Evaluation of WRF-Chem for simulating air quality and atmospheric composition in China. *Science of the Total Environment*, 646, 820-831.