

# 地球系统数值模拟装置项目 (地球系统模式数值模拟系统) 分系统培训

## 大气气溶胶与大气化学模式 (IAP-AACM)

培训人：陈学舜

中国科学院大气物理研究所

2022年5月25日

# 大气气溶胶与大气化学模式IAP-AACM

01

背景介绍

---

02

模式原理和代码简介

---

03

模式输入和输出

---

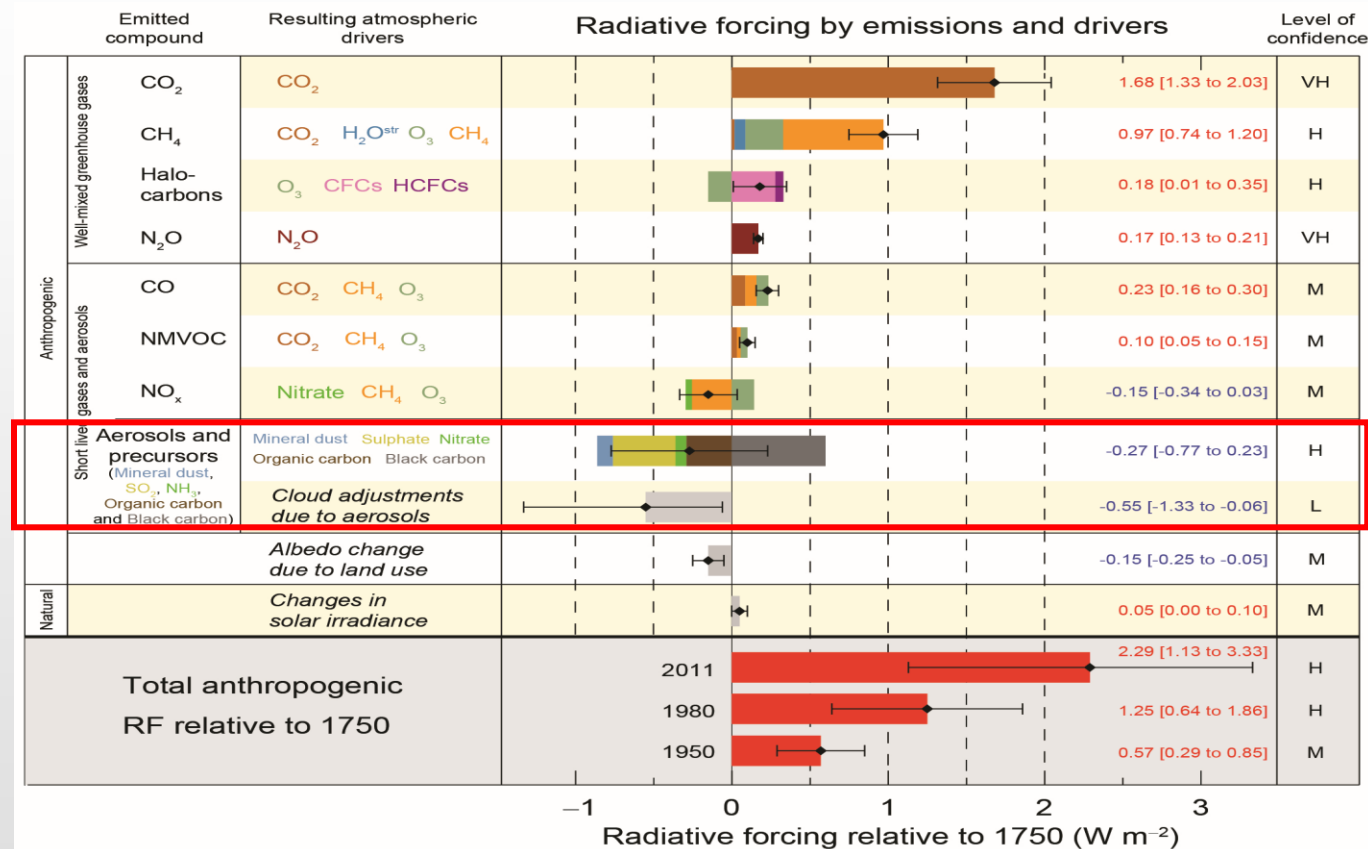
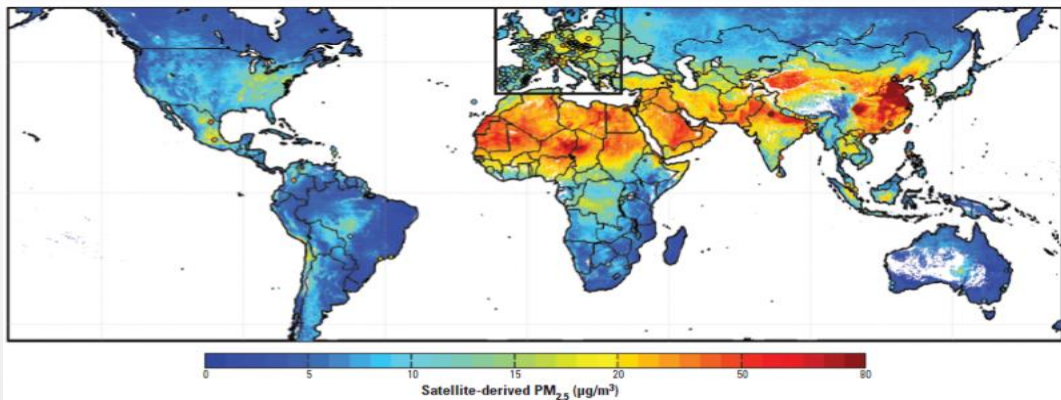
04

模式运行和应用案例

---



# 背景介绍



# 背景介绍



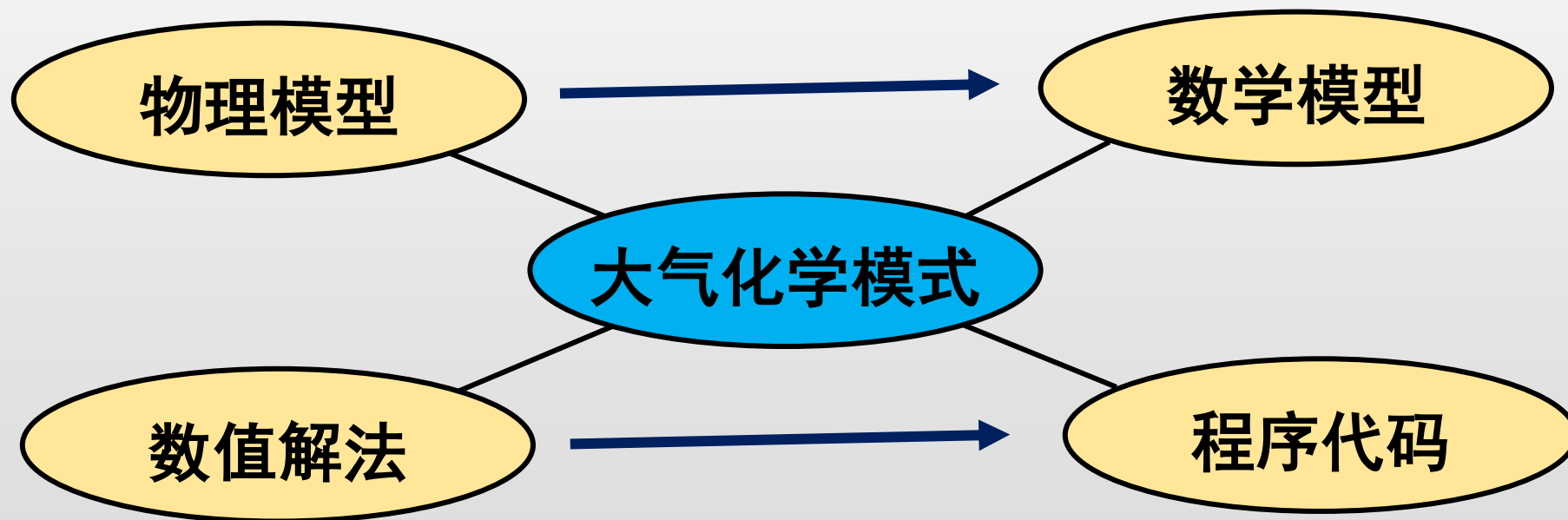
## 地球系统 数值模拟装置



分量模式	模式名称	研发单位	参考文献
大气	IAP AGCM5.0	大气所	Zhang et al. (2020)
海洋	LICOM2	大气所	Liu et al.(2012) Jin et al. (2020)
陆表物理和水文	CoLM	中山大学/北师大	Dai et al. (2003)
海冰	CICE5	LNAL, USA	
气溶胶和大气化学	IAP AACM	大气所	Wei et al. (2019)
植被动力学	IAP DGVM	大气所	Zeng et al. (2013) Zhu et al. (2018)
海洋生物地球化学	IAP OBGCM	大气所	Xu et al. (2013)
陆地生物地球化学	CoLM_BGC	北师大	Ji and Dai (2013)

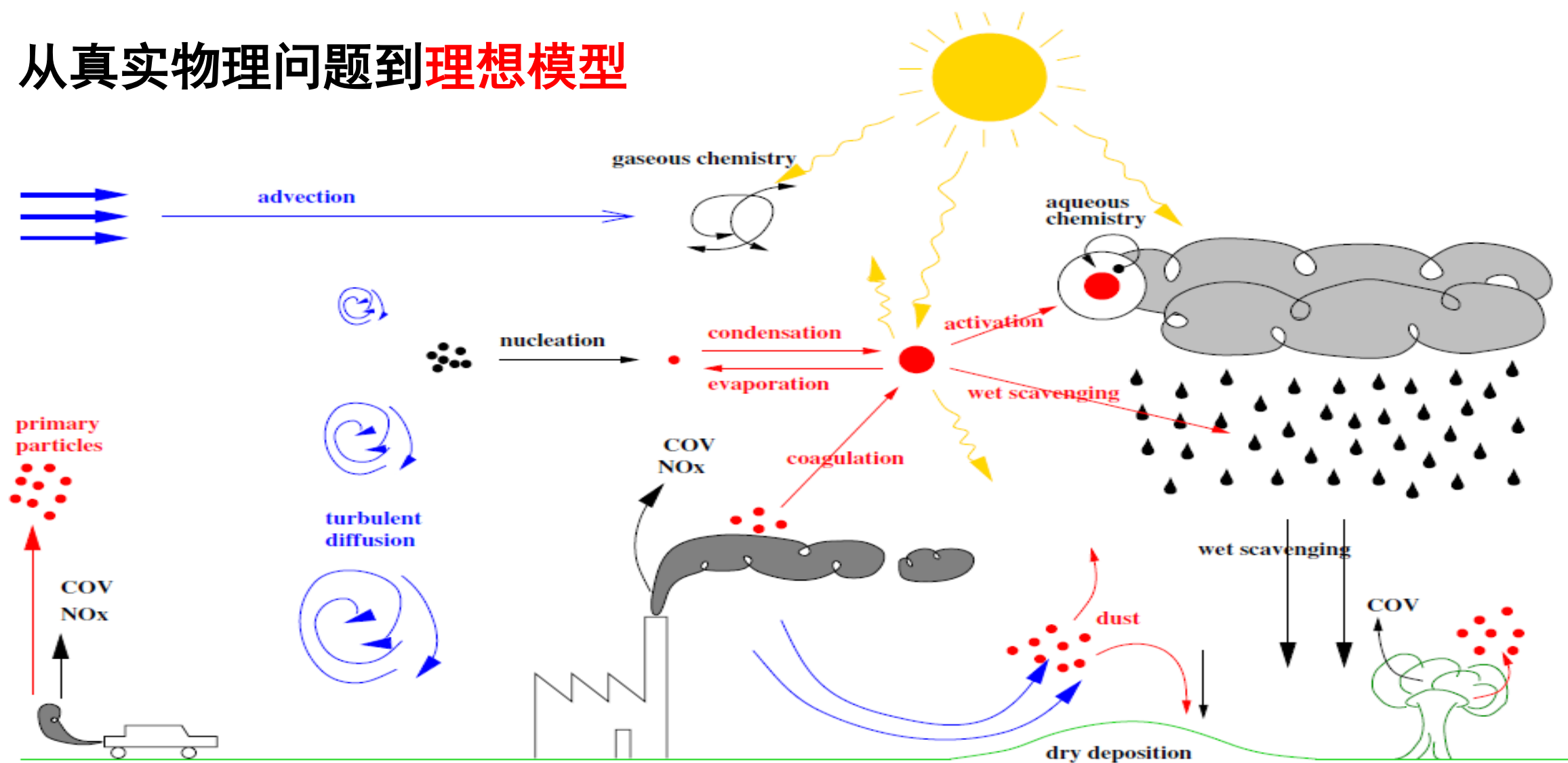
# 模式原理——什么是大气化学模式

大气化学模式是一种**数学工具**，建立在科学的**理论和假设**之上，用**数值方法**描述大气污染物的物理化学过程，用数值方法**模拟计算**得到大气化学组分的时空分布。



# 大气化学模式的物理模型

## 从真实物理问题到理想模型



# 大气化学模式的数学模型

## 欧拉坐标系中的物质守恒方程

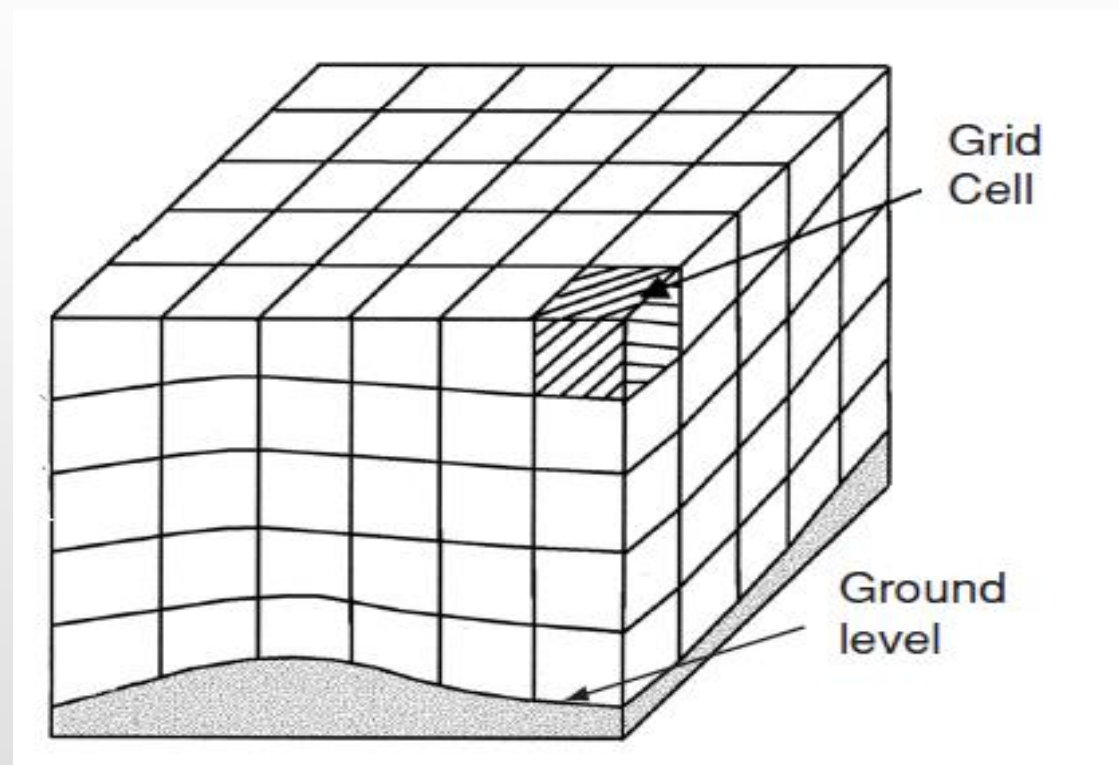
$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} + u \frac{\partial C_i}{\partial x} + v \frac{\partial C_i}{\partial y} + w \frac{\partial C_i}{\partial z} = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) + \\ S + P - R_d - W_{\text{ash}} \end{aligned}$$

难于求得解析解，需数值求解

# 基本方程的求解

## 方程的求解：时空离散化

- 1) 网格划分
- 2) 差分近似微分
- 3) 物理化学过程参数化
- 4) 算符分离



欧拉型模式网格划分（连续空间的离散化）



# 算符分离

排放

X方向平流

Y方向平流

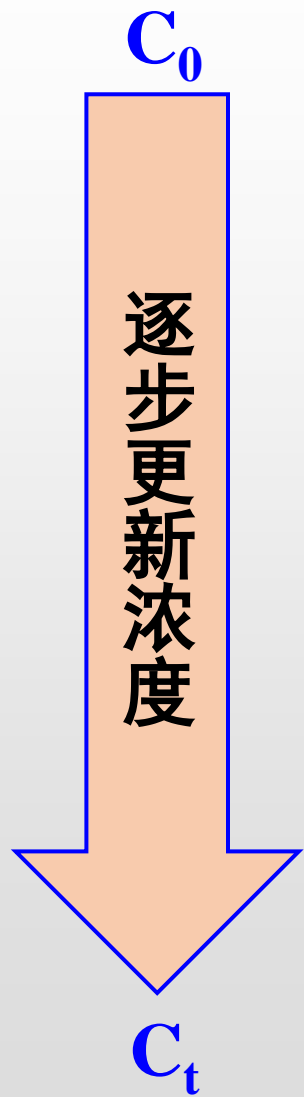
Z方向平流

Z方向扩散

XY方向扩散

湿清除

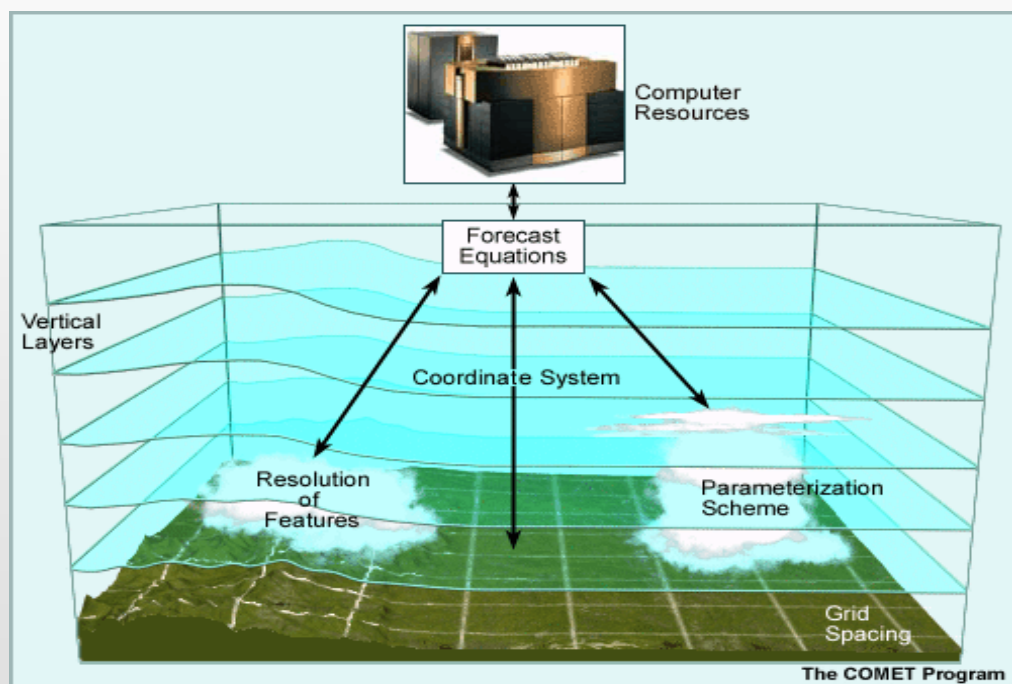
化学反应



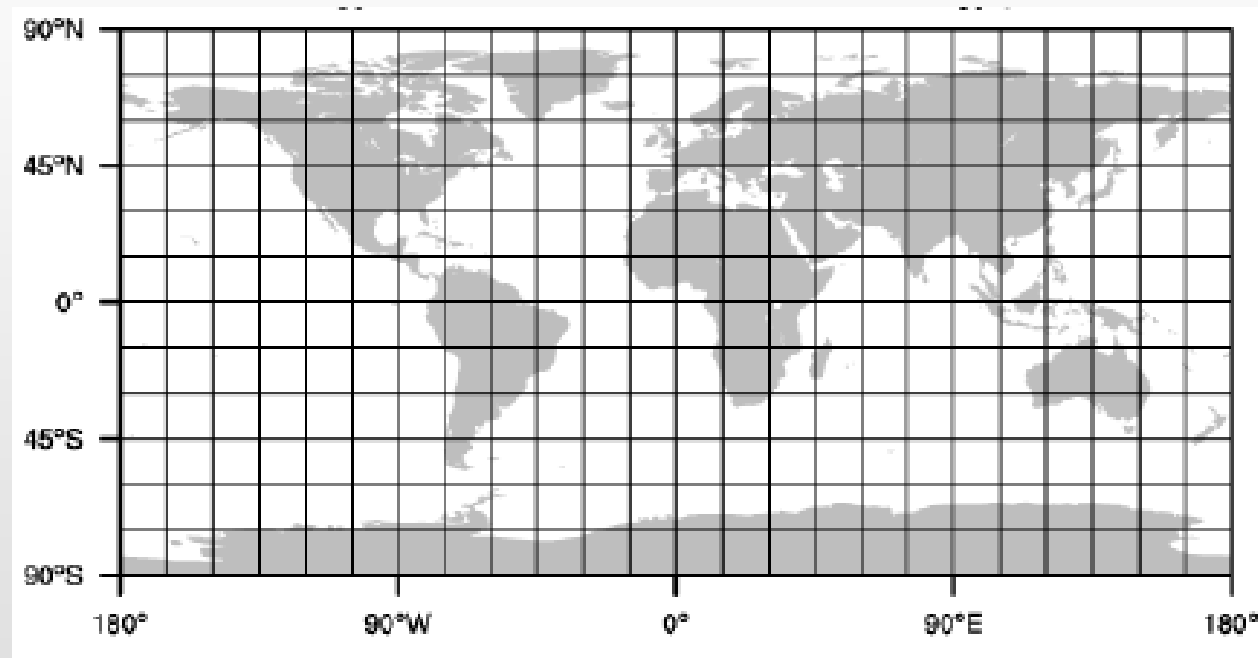
$\left. \frac{\partial c_1}{\partial t} \right _{Emission}$	$= m^2 \frac{E_1}{\partial x \partial y \partial z}$
$\left. \frac{\partial c_1}{\partial t} \right _{X \text{ advection}}$	$= -\frac{m^2}{A_{yz}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{u A_{yz} c_1}{m} \right)$
$\left. \frac{\partial c_1}{\partial t} \right _{Y \text{ advection}}$	$= -\frac{m^2}{A_{xz}} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{v A_{xz} c_1}{m} \right)$
$\left. \frac{\partial c_1}{\partial t} \right _{Z \text{ transport}}$	$= \frac{\partial(c_1 \eta)}{\partial z} - c_1 \frac{\partial^2 h}{\partial z \partial t}$
$\left. \frac{\partial c_1}{\partial t} \right _{Z \text{ diffusion}}$	$= \frac{\partial}{\partial z} \left[ \rho K_v \frac{\partial(c_1/\rho)}{\partial z} \right]$
$\left. \frac{\partial c_1}{\partial t} \right _{XY \text{ diffusion}}$	$= m \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ m \rho K_X \frac{\partial(c_1/\rho)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ m \rho K_Y \frac{\partial(c_1/\rho)}{\partial y} \right] \right\}$
$\left. \frac{\partial c_1}{\partial t} \right _{Wet \text{ Scavenging}}$	$= -\Lambda_1 c_1$
$\left. \frac{\partial c_1}{\partial t} \right _{Chemistry}$	$= \text{Mechanism - specific reaction equations}$

# 模式网格设置

垂直层：地形追随坐标

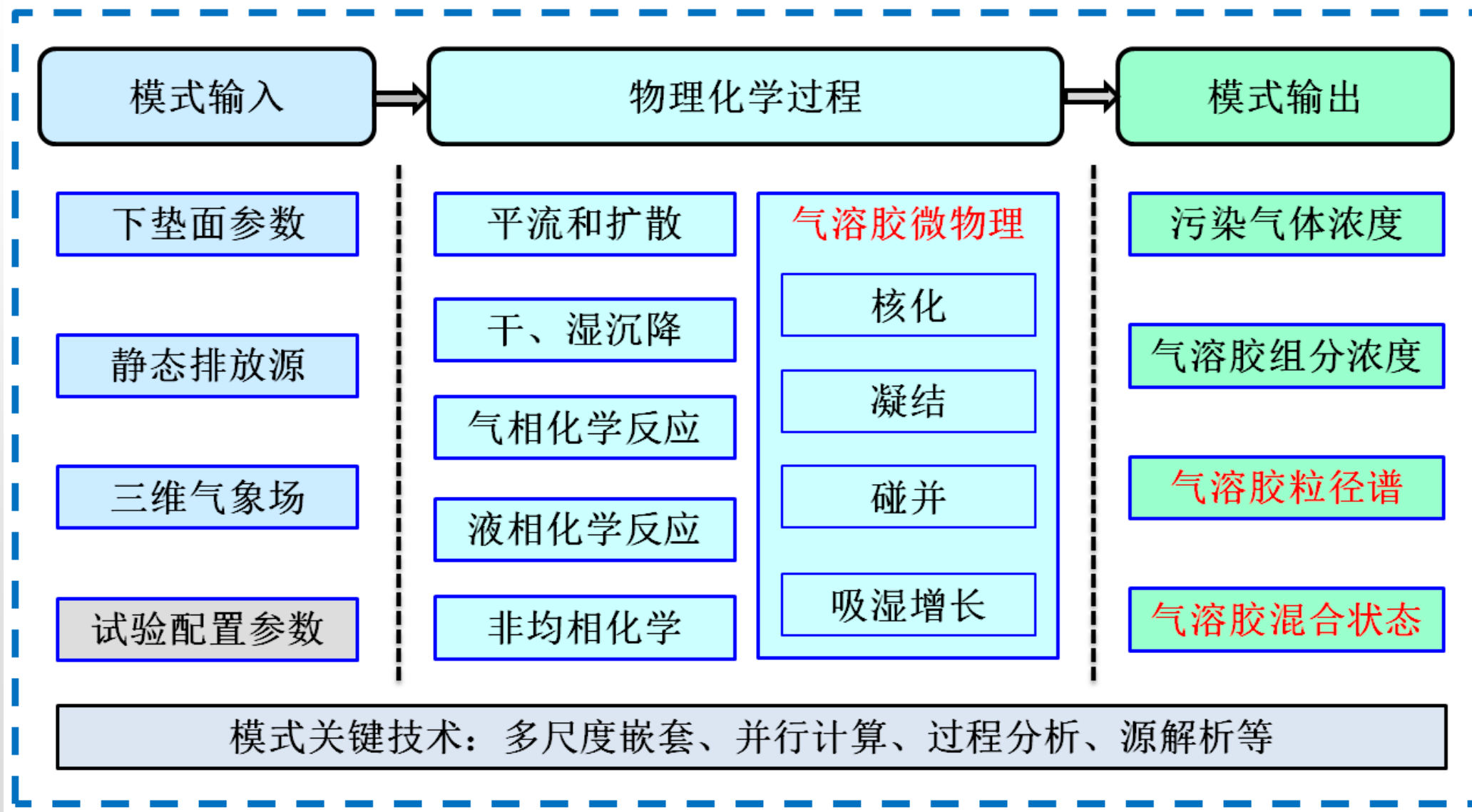


水平网格：等经纬度

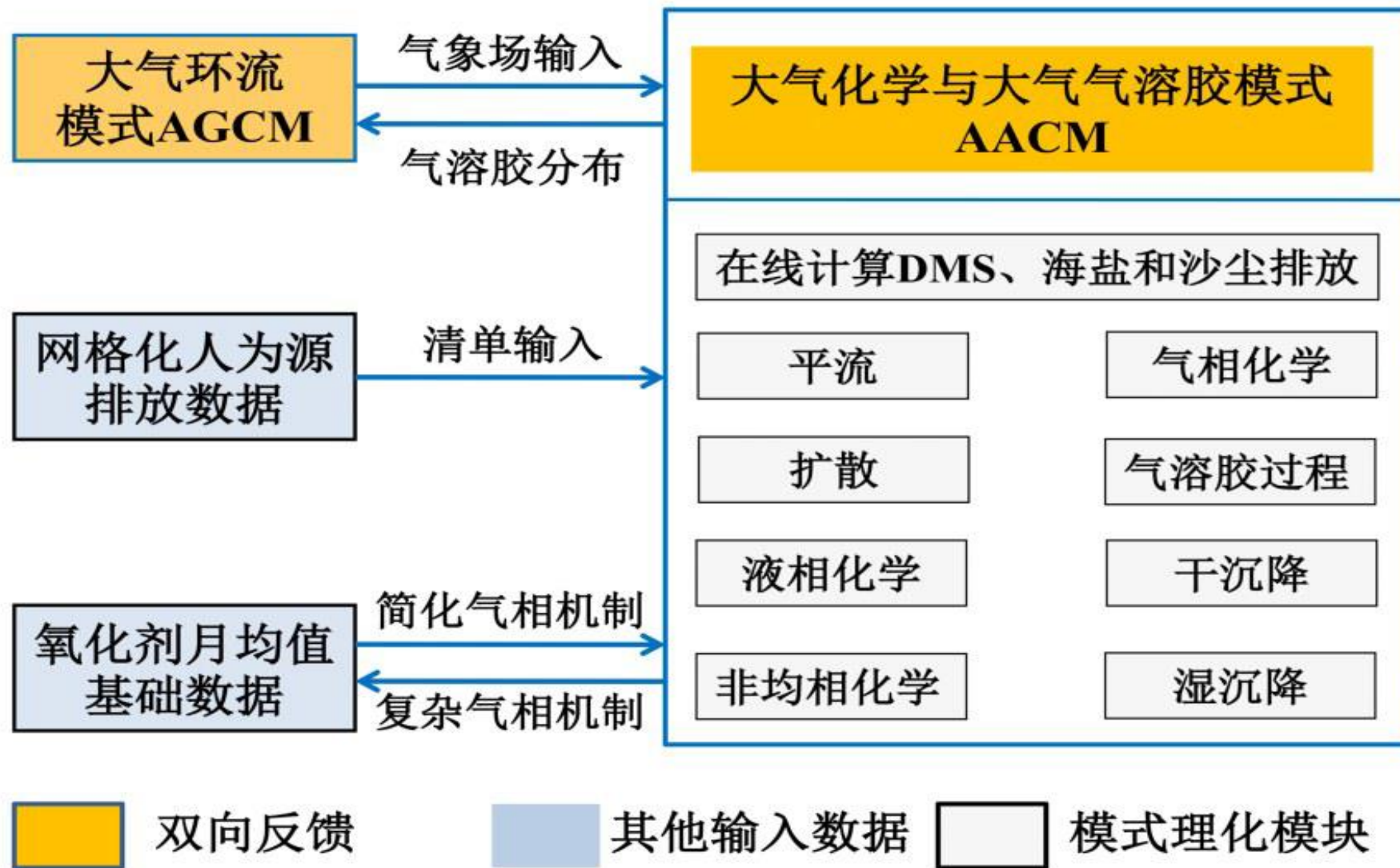




# 模式框架和主要物理化学过程



# 模式框架和主要物理化学过程



# 模式物理化学过程和计算代码——主程序结构

## 主程序main.f90

- (1) 变量声明
- (2) 读入设置参数
- (3) 划分并行区域
- (4) 分配变量内存
- (5) 设置或读入初值

## (6) DO it=1,ntt 时间积分

- 排放
- 平流和扩散
- 气相化学和非均相化学
- 液相化学
- 气溶胶过程
- 干湿沉降
- 模式输出

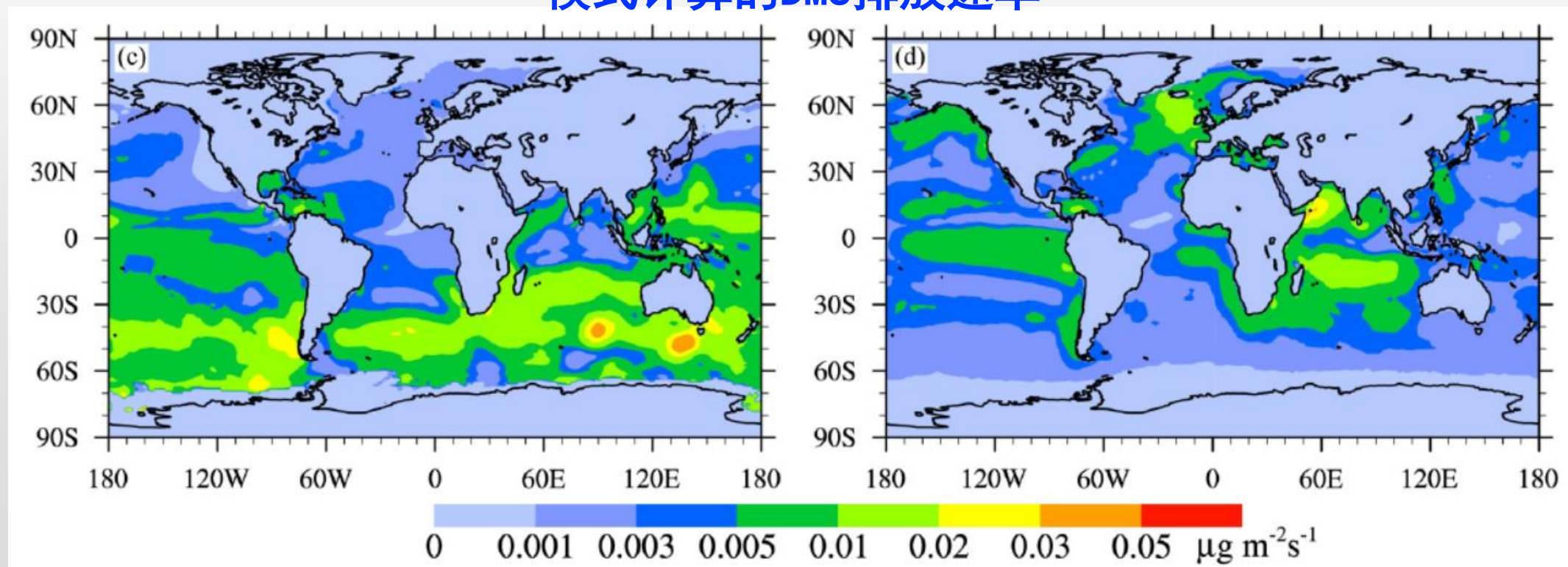
## ENDDO 时间积分

# 模式物理化学过程和计算代码——排放

在线计算：DMS、VOC、海盐、沙尘

外部输入：SO<sub>2</sub>、NO<sub>x</sub>、NH<sub>3</sub>、CO、VOC、BC、POC、一次PM<sub>2.5</sub>和PM<sub>10</sub>

模式计算的DMS排放速率



# 模式物理化学过程和计算代码——平流和扩散

## 输送

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial x}$$

$$u > 0$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial x} = \frac{C_i - C_{i-1}}{\delta x}$$

$$C_i < C_{i-1}$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} > 0$$

平流输送将周边污染物输送到当地，使当地污染物浓度升高。

## 扩散

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C_i}{\partial z} \right)$$

$$K_z = f(u, v, T, H_{PBL}) > 0$$

若  $C$  随  $z$  增加而减小，  
扩散使低层污染物浓度减小；

若  $K$  变小，意味着大气扩散能力差，低层  
污染物浓度增大。



# 模式物理化学过程和计算代码——平流和扩散

## 输送

输入变量：风速、温度、气压、**浓度**

```
call naqpms_3d_adv &  
& ( myid &  
& , imasskeep &  
& , ne, dtstep_syn(ne), nx, ny, nzz, nest, sy, ey, sx, ex &  
& , GC_MOLWT &  
& , mem3d, RatioMass &  
& , mem2d, ktop &  
& , igas, iaer, isize, nseacom, ndustcom &  
& , ifsm, idmSet, ismMax, igMark &  
& , hh )  
call end_timing('naqpms_3d_adv', ne, myid)
```

```
if(trim(flagadv).eq.'walcek') then  
  call advecld_walcek( sx(ne), ex(ne), Q0, QN, u1D, DEN0, DEN1, DXX, DD0, tstep &  
    , pld, tld, rhoa, mwgt, 'ugom3' )  
elseif(trim(flagadv).eq.'camx_ppm') then  
  call hadvppm(nndim, tstep, dxres, Q0, vel, area, areav, QN &  
    , pld, tld, rhoa, mwgt, 'ugom3' )  
endif
```

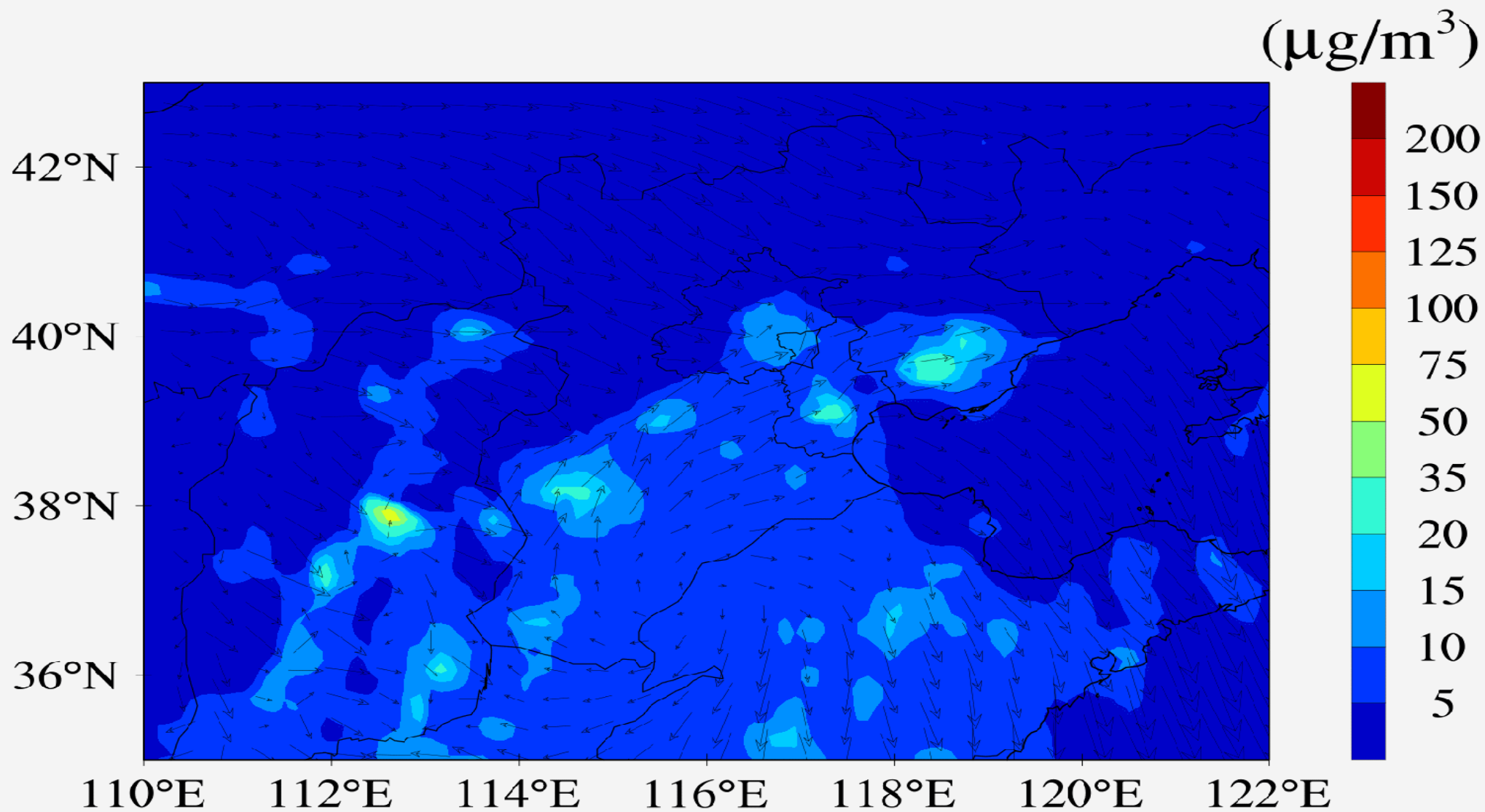
## 扩散

输入变量：扩散系数、**浓度**

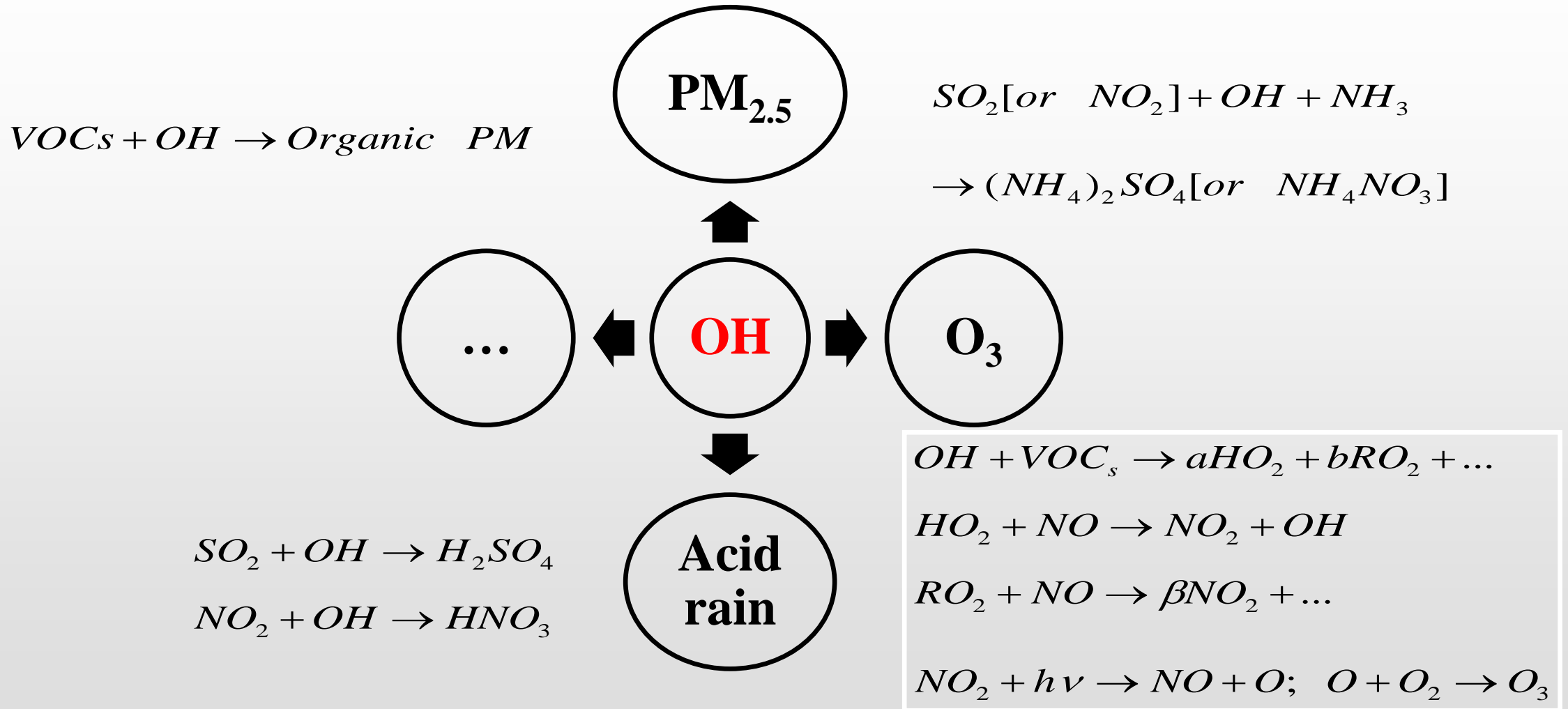
```
call naqpms_v_dif &  
& ( myid &  
& , ne, dtstep_syn(ne), nx, ny, nzz, nest, sy, ey, sx, ex &  
& , igasCBM &  
& , iwb, ieb, jsb, jeb &  
& , dzz &  
& , rkV, ttn, ppp, atm, kktop &  
& , igas, iaer, isize, nseacom, ndustcom &  
& , ifsm, idmSet, ismMax, igMark )  
call end_timing('naqpms_v_dif', ne, myid )
```

```
call diffus(myid, ispflag, iwb1, ieb1, jsb1, jeb1, nzz, dt, rkV, dzz, ttn, ppp, conc, atm, kktop)  
do j=sy(ne), ey(ne)  
do i=sx(ne), ex(ne)  
  ixy = (ex(ne)-sx(ne)+3)*(j -sy(ne)+1)+i-sx(ne)+1  
  do k=1, nzz-1  
    i04=ip4mem(k, ig, ne)  
    i03=ip3mem(k, ne)  
    gas(i04+ixy)=conc(i, j, k)  
  enddo !k  
enddo !i  
enddo !j
```

# PM<sub>2.5</sub>输送和扩散



# 模式物理化学过程和计算代码——气相化学



# 模式物理化学过程和计算代码——气相化学

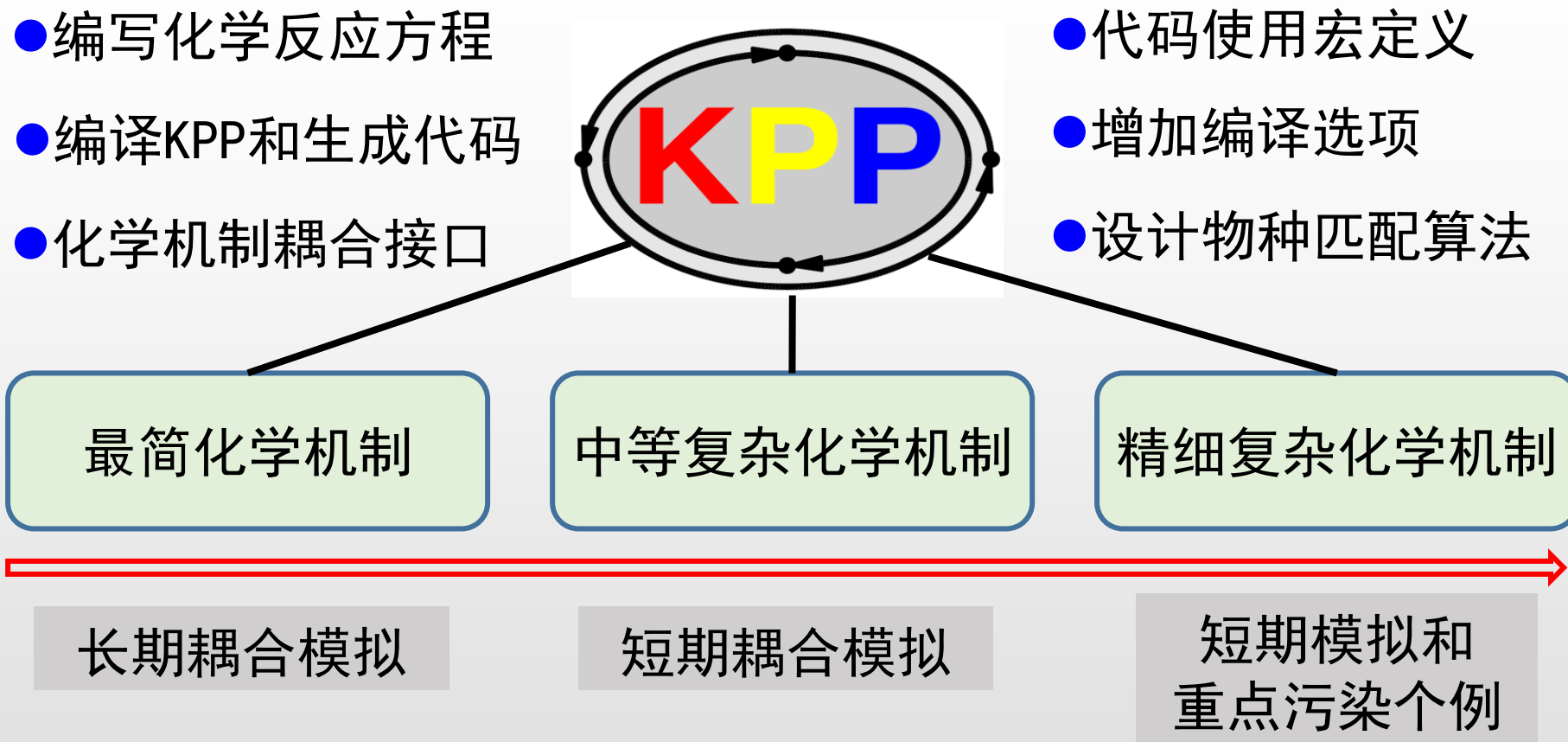
- 大体可分为特定化学机理[如MCM]和归纳化学机理[按分子结构(CBM)、VOCs与OH反应活性等(SAPRC、RADM、RACM)归纳]两大类。
- CBM、SAPRC、RADM、RACM、MCM均经大量烟雾箱实验数据验证(Dodge, 2000)。
- **IAP-AACM可选择使用CBMZ机制或简化化学机制（主要考虑硫化学）**

**多物种  
多化学反应**

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = P_{gaschem}(C)$$

**非线性  
高度刚性**

# KPP工具集成不同复杂程度气相化学机制



- ✓最简化学机制（读入氧化剂，主要考虑硫化学）
- ✓中等复杂机制（读入氧化剂，模拟硫酸盐、硝酸盐、铵盐）
- ✓详细化学机制（CBMZ机制，详细模拟气相化学）

# 模式物理化学过程和计算代码——气相化学

输入变量：温度、气压、反应速率、气体浓度

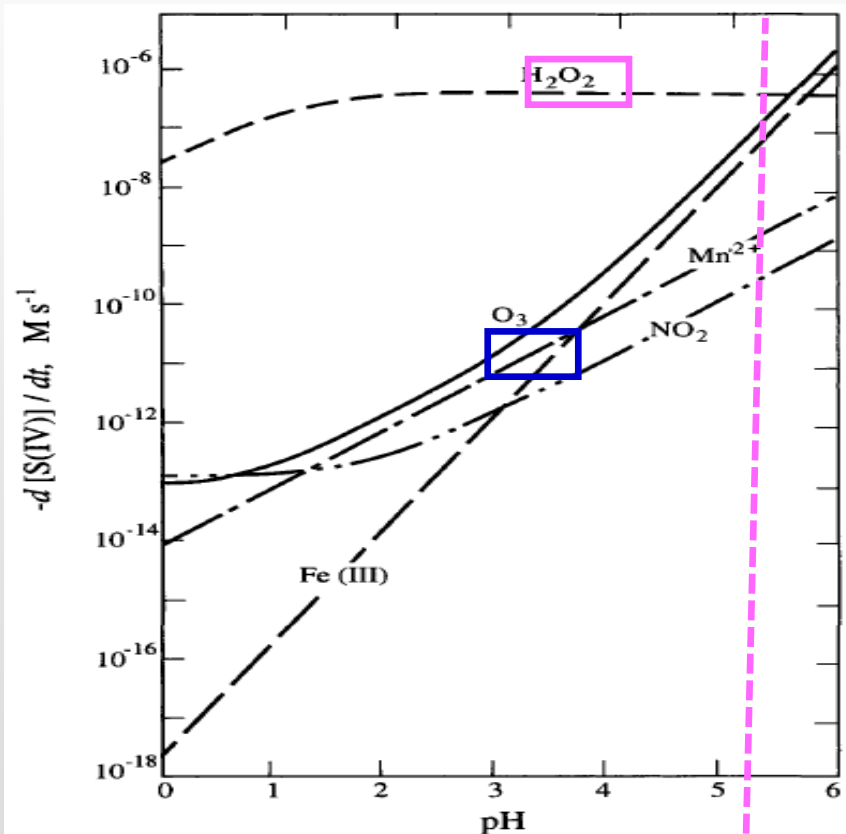
输出变量：气体浓度

```
call naqpms_drv_gaschem &  
& ( myid &  
& ,dt_cbmz &  
& ,lprocess,iPrintTermGas &  
& ,ne,dtstep_syn(ne),nx,ny,nzz,nest,sy,ey,sx,ex &  
& ,iyear2,imonth2,iday2,ihour2,iminute2 &  
& ,mem2d &  
& ,mem3d &  
& ,mem4d &  
& ,GC_MOLWT,GC_NAME &  
& ,igas,igasCBM,iaer,ysize,nseacom,ndustcom &  
& ,NLAY_EM,ig2iemt &  
& ,ifsm,ifsmt,idmSet,ismMax,igMark )
```

```
chxsh@mgmt02:smp_sna.lsode  
EQUATIONS { Simple Sulfate-Nitrate-Nmmonium Mechanism }  
  
<R1> H2O + H2O = H2O2 + O2 : ARR2(2.3e-13,660.0)+ARR2(1.7e-  
<R2> H2O2 + OH = H2O + H2O : ARR2(2.9e-12,-160.0);  
<R3> H2O2 + hv = 2OH : rk_H2O2();  
<R4> SO2 + OH = H2SO4 : FALL(3.0e-31*rC_M,0.0,-3.3,1.5  
<R5> DMS + OH = S02 : ARR2(9.6e-12,-234.0);  
<R6> DMS + OH = 0.5S02 + 0.5H02 : ARR2(1.7e-42,7810.0)*rC_M*0.21  
<R7> DMS + NO3 = S02 + HNO3 : ARR2(1.4e-13,500.0);  
<R8> NH3 + OH = H2O : ARR2(1.7e-12,-710.0);  
<R9> H02 + H02 + H2O = H2O2 : (ARR2(2.3e-13,660.0)+ARR2(1.7e  
<R10> NO + O3 = NO2 : ARR3(2.0D-12, 1400._dp, TEMP)  
<R11> NO + H02 = NO2 : 2.0*ARR3(3.5D-12, -250._dp, TE  
<R12> NO + NO3 = NO2 : ARR3(1.5D-11, -170._dp, TEMP)  
<R13> NO2 + NO3 = NO2 : ARR3(4.5D-14, 1260._dp, TEMP)  
<R14> NO2 + OH = HNO3 : TROEMS(2.5D-30, -4.4_dp, 1.6D-  
<R15> HNO3 + OH = H2O + NO3 : RK_OH_HNO3(TEMP, C_M );  
<R16> HNO3 + hv = OH + NO2 : rk_photo(Pj_hno3);  
<R17> NO2 + O3 = O2 + NO3 : ARR2(1.2e-13,-2450.0);  
<R18> NO2 + NO3 = 0.5 N2O5 : TROEMS(2.2D-30, -3.9_dp, 1  
<R19> N2O5 + H2O = 2.0 HNO3 : 2.0D-21 ;  
<R20> N2O5 = 2.0 NO2 : TROEMS(3.7D+26, 11000._dp, 2.2D  
<R21> HCl = HCl : 0.0 ;  
<R22> N2O5 + hv = 2.0 NO2 : rk_photo(Pj_n2o5) ;  
<R23> NO2 + hv = NO : rk_photo(Pj_no2) ;  
<R24> N2O5 + P504 = 2 HNO3 : rk_het(1) ;  
<R25> NO2 + PBC = 0.5 HNO3 : rk_het(2) ;  
<R26> NO3 + P504 = HNO3 : rk_het(3) ;  
<R27> HNO3 + PBC = NO2 : rk_het(9) ;  
<R28> N2O5 + PBC = 2 HNO3 : rk_het(10) ;  
<R29> HNO3 + PDUST = DUSTNO3 : rk_het(12) ;  
<R30> NO2 + PDUST = 0.5 HNO3 : rk_het(13) ;  
<R31> NO3 + PDUST = HNO3 : rk_het(14) ;  
<R32> N2O5 + PDUST = 2 HNO3 : rk_het(15) ;  
<R33> SO2 + PDUST = DUSTS04 : rk_het(19) ;  
<R34> N2O5 + PSSLT = 2 HNO3 : rk_het(23) ;  
<R35> NO3 + PSSLT = HNO3 : rk_het(24) ;  
<R36> SO2 + PSSLT = SSLT504 : rk_het(26) ;  
<R37> NO3 + PSSLT = SSLTNO3 : rk_het(27) ;  
<R38> HNO3 + PSSLT = SSLTNO3 : rk_het(28) ;
```

# 模式物理化学过程和计算代码——液相化学

## 液相化学是硫酸盐的主要生成途径



pH < 5, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>氧化途径起主导作用;

pH > 5, O<sub>3</sub>氧化起关键作用; pH = 6, O<sub>3</sub>比H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>氧化速率快10倍。pH较高时, O<sub>2</sub>经Fe和Mn催化氧化途径可能起重要作用。

NO<sub>2</sub>浓度较低时, 其对S(IV)氧化不重要。

SO<sub>2</sub>液相氧化速率为10~18% h<sup>-1</sup>, 气相氧化速率约0.4~3% h<sup>-1</sup>, 云和雨滴吸收SO<sub>2</sub>及随后的氧化对酸雨形成起重要作用。

# 模式物理化学过程和计算代码——液相化学

输入变量：温度、气压、云水含量、**气体和气溶胶浓度**

输出变量：**气体和气溶胶浓度**

```
call aqchem_driver &  
  & ( myid &  
    & ,lapm &  
    & ,lnaqpms_pso4 &  
    & ,dt_cbmz &  
    & ,ne,nx,ny,nzz,nest,sy,ey,sx,ex &  
    & ,ip3mem,mem3d &  
    & ,ip4mem,mem4d &  
    & ,ip5mem,mem5d &  
    & ,igas,gas,GC_MOLWT &  
    & ,iaer,ysize,aer &  
    & ,plev,t,qvapor,clw &  
    & ,ANA,ASO4,ANH4,ANO3,ACL )  
call end_timing('aqueous chemistry', ne, myid )
```

```
IF ( BB .GE. 4.0 ) THEN ! 4.0 < pH  
  
  IF ( SIV .LE. 1.0E-5 ) THEN  
    DSIVDT( 3 ) = -5000.0 * MN * HS03  
  ELSE IF ( SIV .GT. 1.0E-5 ) THEN  
    DSIVDT( 3 ) = -( 4.7 * MN * MN / AC  
    & + 1.0E7 * FE * SIV * SIV )  
  END IF ! end of first pass through SIV conc.  
  
  ELSE ! pH , + 4.0  
  
  IF ( SIV .LE. 1.0E-5 ) THEN  
    DSIVDT( 3 ) = -3.0 * ( 5000.0 * MN * HS03  
    & + 0.82 * FE * SIV / AC )  
  ELSE  
    DSIVDT( 3 ) = -( 4.7 * MN * MN / AC  
    & + ( 0.82 * FE * SIV / AC )  
    & * ( 1.0 + 1.7E3 * MN**1.5 / ( 6.3E-6 + FE ) ) )  
  END IF ! end of second pass through SIV conc.  
  
  END IF ! end of pass through pH
```



# 模式物理化学过程和计算代码——非均相化学

## 非均相化学反应及参数化

仅在颗粒物表面发生的反应, 反应速率与颗粒物表面积(表面积密度)有关。

$$k = A \left( \frac{r_p}{D_g} + \frac{4}{\omega \gamma} \right)^{-1}$$

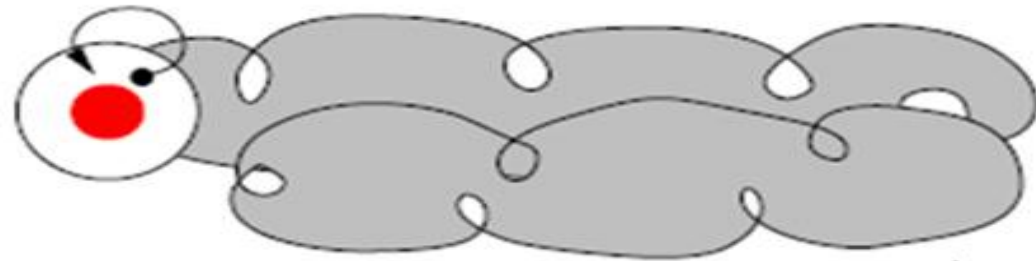
A: 单位体积空气中颗粒物表面积;  $r_p$ : 颗粒物半径;  $D_g$ : 某气体分子扩散系数;  $\omega$ : 某气体分子平均速度;  $\gamma$ : 摄取系数/表面反应概率。

Jacob D J (2000) AE, 34: 2131-2159.

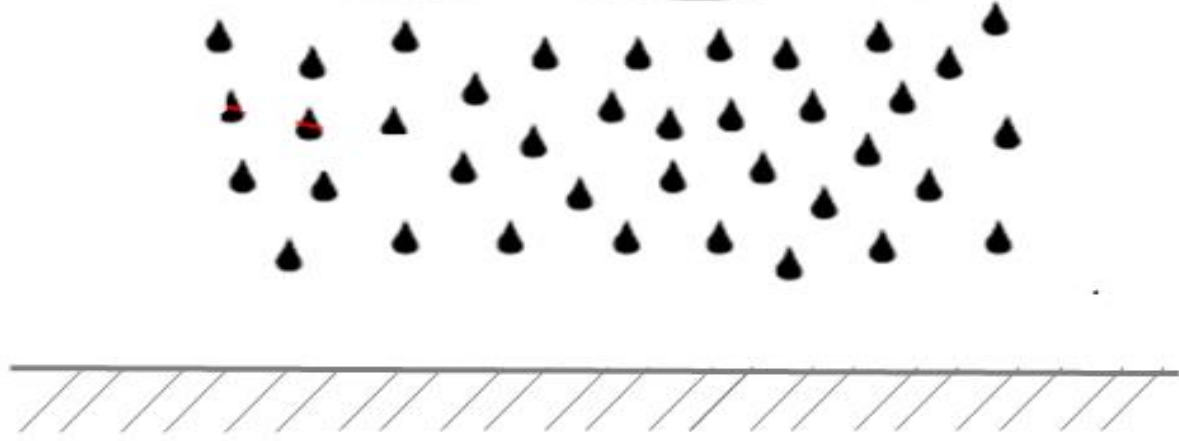
# 模式物理化学过程和计算代码——湿沉降

湿沉降：污染物通过降水或雾迁移到地表的过程

云中清除



云下清除



# 模式物理化学过程和计算代码——湿沉降

输入变量：温度、气压、云水和雨水含量、降水强度、**气体和气溶胶浓度**

输出变量：**气体和气溶胶浓度**

```
call naqpms_wet_dep &  
& ( myid &  
& ,itt &  
& ,dtstep_syn(ne) &  
& ,nhfq_output(ne)&  
& ,ne,nx,ny,nzz,nest,sy,ey,sx,ex &  
& ,CLW,RNW,t,Plev &  
& ,RAINCON,RAINNON &  
& ,mem2d &  
& ,mem3d &  
& ,igasCBM,igas,iaer,ysize,nseacom,ndustcom &  
& ,mem2dgas )
```

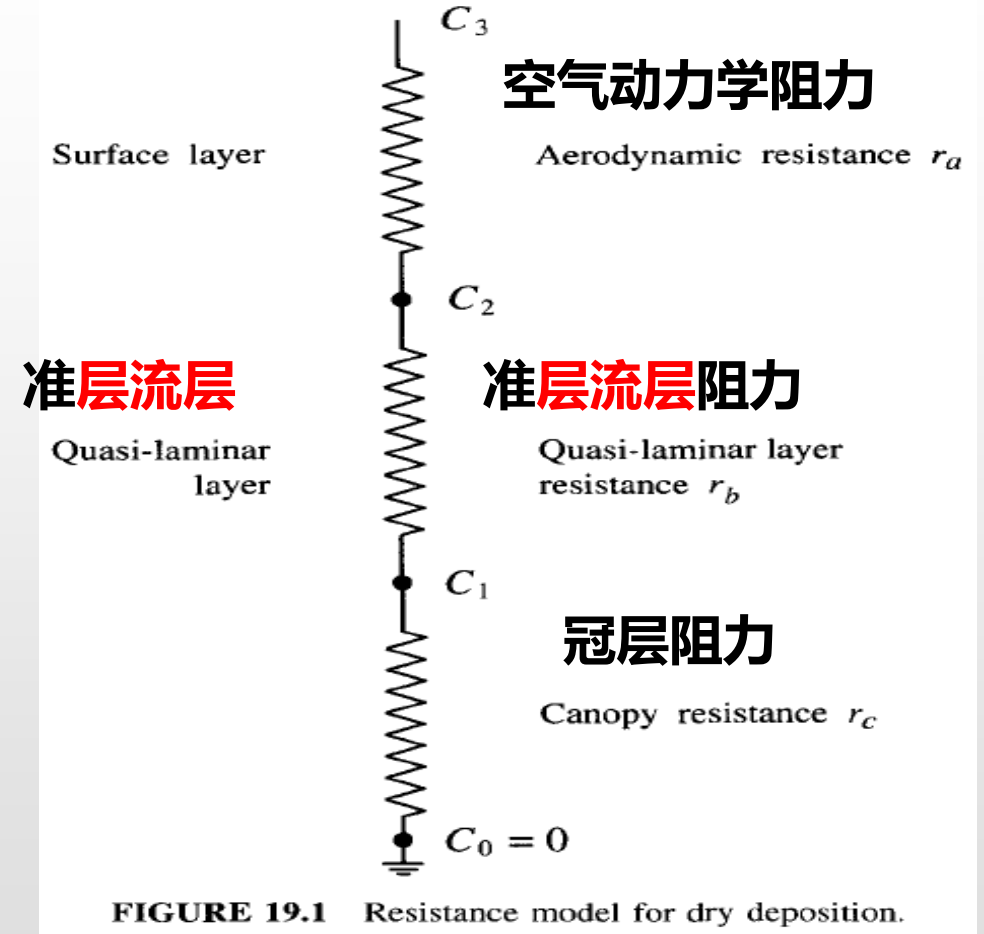
参数化公式：

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\Lambda C_i$$

```
call scavrat( .true., lcloud, lgraupl, tamin, rr, tempk, 0., &  
             depth, rhoair, 0., 0., 0., 0., psize, rhop, &  
             gscav, ascav, laerincl) &  
  
wcav=ascav &  
  
delr = 1. - exp(-ascav*deltat)
```

# 模式物理化学过程和计算代码——干沉降

- 通过计算干沉降速率 $V_d$ 来参数化
- 干沉积过程一般包含**三步**:
  - 1) 从**近地层**通过空气动力输送至准层流层(非常薄);
  - 2) **准层流层**中通过分子(气体)或布朗运动(颗粒物)输送至地表/冠层表面;
  - 3) 地表/冠层**表面吸收**。



# 模式物理化学过程和计算代码——干沉降

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -V_d C$$

输入变量：地面温度、气压、辐射通量、土壤和边界层参数、**气体和气溶胶浓度**

输出变量：**气体和气溶胶浓度**

```
call naqpm_s_dry_dep &
& ( myid &
& , dtstep_syn(ne) &
& , ne, nx, ny, nzz, nest, sy, ey, sx, ex &
& , igasCBM, igas, iaer, isize, nseacom, ndustcom &
& , MSIZDIS, MSIZDID &
& , iyear2, imonth2, iday2, ihour2, iminute2 )
```

```
call vd_gas(i,j,ig,m,istress,iwet,iflgs02,iflgo3,z0,&
deltaz,psih,ustar,diffrat(ig),henry,henso2,&
f0(ig),rscale(ig),temp0,dstress(0),solflux(i,j),&
rj(m,isesn),rlu(m,isesn),rac(m,isesn),&
rlcs(m,isesn),rlco(m,isesn),rgss(m,isesn),&
rgso(m,isesn),vd)
elseif(trim(cflag).eq.'Z03') then
! zl,pwc
! fcloud(i,j,1)=0.0
! print*, 'henso2=', henso2

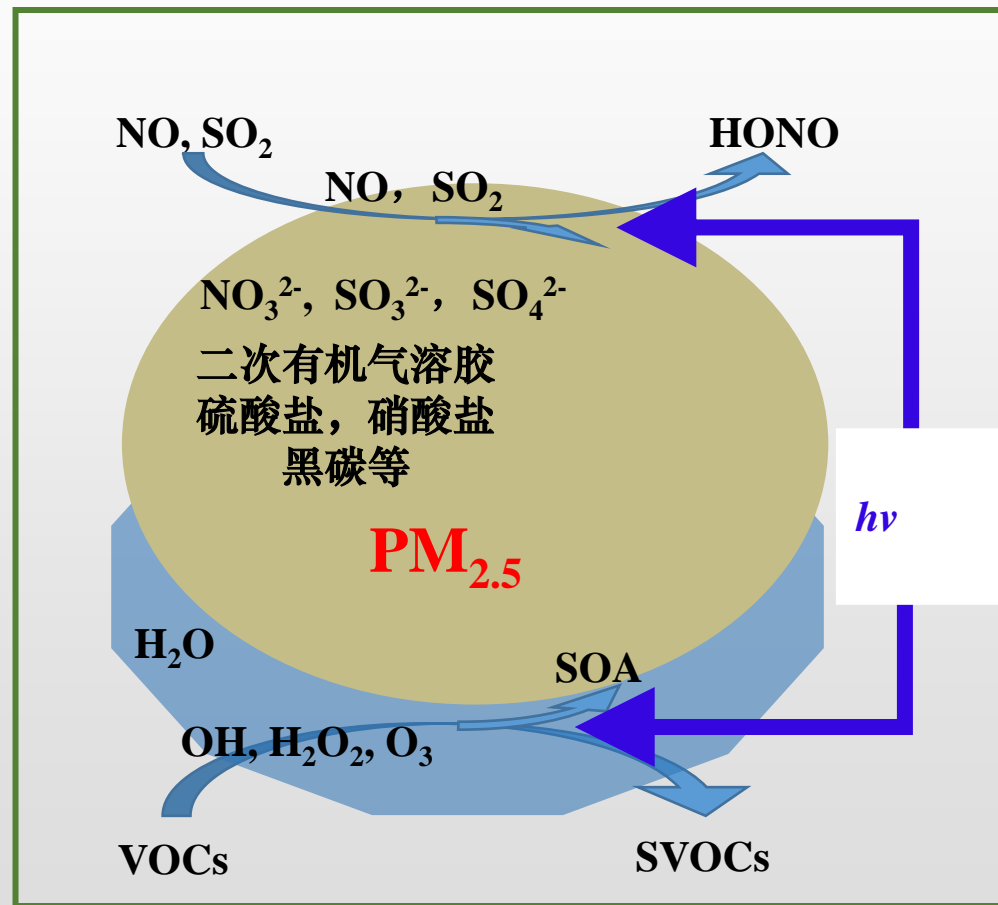
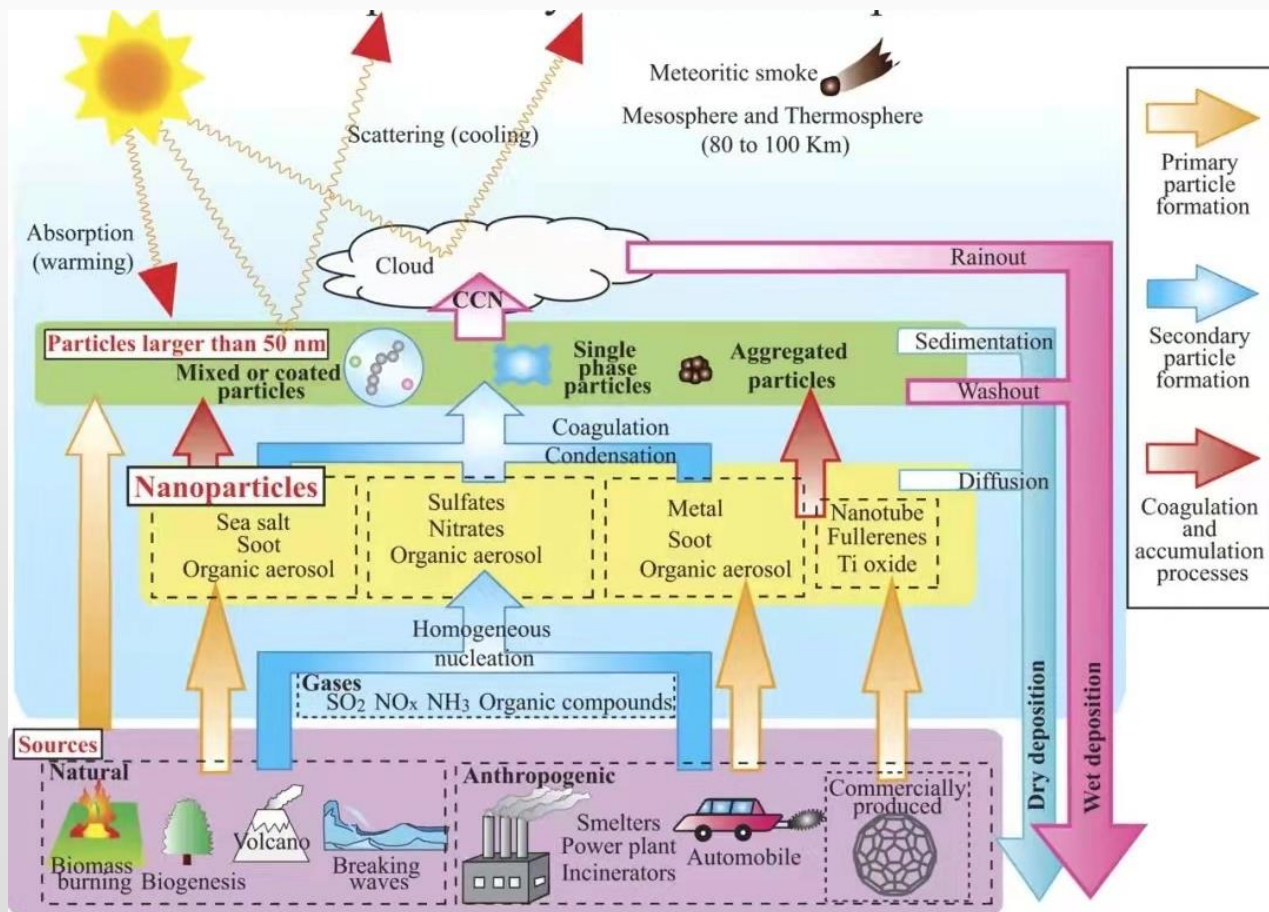
srad_dbl=solflux(i,j)
coszen_dbl=coszen

print*, 'lai_f to vd_gas_zhang=', lai_f

call vd_gas_zhang(deltaz,zl,z0,ustar,tempk(i,j,1), &
tsurf(i,j),srad_dbl,rh,fcloud(i,j,1), &
pwc(i,j,1),coszen_dbl,m,isesn,henry, &
henso2,ig,lai_f,vd)
```

# 模式物理化学过程和计算代码——气溶胶过程

涉及大气氧化过程、成核和气粒转化、表界面多相过程



# 模式物理化学过程和计算代码——气溶胶过程

模式的气溶胶主要包括：**海盐、沙尘、黑碳、有机碳、硫酸盐、硝酸盐、铵盐**

输入变量：**温度、气压、相对湿度、气态前体物**  
(**VOC、H2SO4、HNO3、NH3**) **和气溶胶浓度**

输出变量：**气态前体物和气溶胶质量浓度**

若采用分档气溶胶模块，  
模式可模拟**气溶胶数浓度**

```
call naqpms_drv_isorropia_v2 &  
& ( myid &  
& ,lapm &  
& ,ne,dt,nx,ny,nzz,nest,sy,ey,sx,ex &  
& ,mem2d &  
& ,mem3d &  
& ,dt_cbmz &  
& ,GC_MOLWT &  
& ,igas,iaer,ysize,nseacom,ndustcom &  
& ,ifsm,idmSet,ismMax,igMark )
```

```
call apm_boxphy_driver &  
& ( myid &  
& ,lapm &  
& ,dt_cbmz &  
& ,ne,nx,ny,nzz,nest,sy,ey,sx,ex &  
& ,ip2mem,mem2d &  
& ,ip3mem,mem3d &  
& ,ip4mem,mem4d &  
& ,igas,gas,GC_MOLWT &  
& ,longicrs,latitcrs,land_use &  
& ,PSFC,Plev,t,rh1)
```

# 模式可选择使用的气溶胶方案

●**选项1**：分四档的海盐沙尘+两个静态模态的人为气溶胶，计算海盐和沙尘的分档质量浓度及人为气溶胶的质量浓度

●**选项2**：精细分档气溶胶模型，海盐分20档、沙尘分15档、二次粒子分40档、BC和OC分28档，计算气溶胶的质量浓度和数浓度

两个选项的**有机气溶胶**方案可选择使用**简化模型**、**两产物模型**或**基于挥发性分级的有机气溶胶模型**



# 模式输入：排放清单、下垫面数据和气象场变量

- 网格化源排放：CO、NO、NO<sub>2</sub>、SO<sub>2</sub>、NH<sub>3</sub>、VOCs、PM等，可选择使用**不同时间分辨率**（具有月变化、日变化或小时变化）的排放数据；
- 下垫面数据：地形、土地利用等，静态数据，**不随时间变化**；
- 气象变量：风向、风速、温度、湿度、气压等，一般采用**小时分辨率**的数据或者由**AGCM实时提供**。

# 数据输出

- 气体、气溶胶浓度的时空分布
- 干沉降量、湿沉降量
- 诊断量：AOD、消光系数、O<sub>3</sub>净生成率、PH值、能见度等
- 过程分析、源识别与追踪输出

# 模式编译和运行

## 修改配置文件：

- (1) 模拟起始时间
- (2) 模拟时长
- (3) 模式物理化学过程配置
- (4) 模式网格参数
- (5) 模式的输入和输出频率等

## 编译运行：

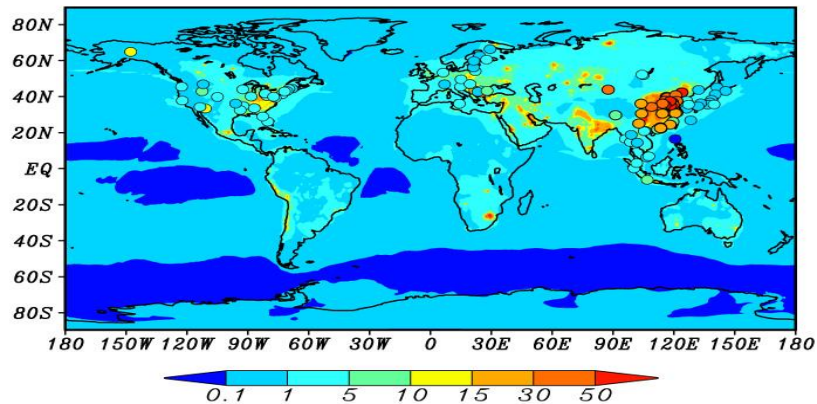
- (1) make clean
- (2) make
- (3) 提交任务 (AACM.exe)

```
2020 01 01 00
1      ! Nest Domain in (total domain)
.true. ! lglbrun
.false. ! lgaschemsmp
.false. ! lapm
'bulk'
.true. ! laqchem
.true. ! laqchem_naq
.false. ! naqpms emission sensitivity
.false. ! lrd_lai 6      ! /h met updt frequency
744    ! 360 run time
1 744  ! hrs 1 9000 ! hrs
'camx_ppm' ! 'camx_ppm' or 'walcek'
1      ! diffusion scheme 1: local 2:ysu 3?: nonlocal ACM2
1      ! gas chemistry (CBM-Z) 1--yes 0 --no
3      ! dry scheme 1--constant 2--calculated
2      ! iglobal, 1:global 2:fix
1      ! landuse category 1: modis 2: USGS
100    ! the hpa of defined top boundary
20000  ! the top height of NAQPMS m
20     ! nzz
360 180 20 1 1 ! nx,ny,nz,nxlo,nylo 432 339 20 24 48 ! nx,ny,nz,nxlo,nylo
600 1800 ! synchronous time step in sec
1 1 ! nhfq_updtmet
1 1 ! nhfq_output
'daily'
3 ! resolution ratio between mother and child domain (1 value)
4 ! isize
2 ! iaer
11.348127E-04,43.162551E-04,10.8355374E-03,37.5083238E-03 ! !Sea Salt Gravel
4.01E-05, 1.46E-04, 5.34E-04, 1.96E-03 !Dust Gravel ! Wang thesis
0.1 1.0 2.5 5.0 10.0 ! DUST SIZE
0.1 1.0 2.5 5.0 10.0 ! SEA SALT Mass size distribution
0 0 0 !ifsm(ne),ne=1,nest
5 16 83 5 !idmSet,iSrcDefiend, ismMax,iHgtLMax
18 0 0 ! S02
5 0 0 ! NO
6 0 0 ! NO2
7 0 0 ! NO3
8 0 0 ! N205
```

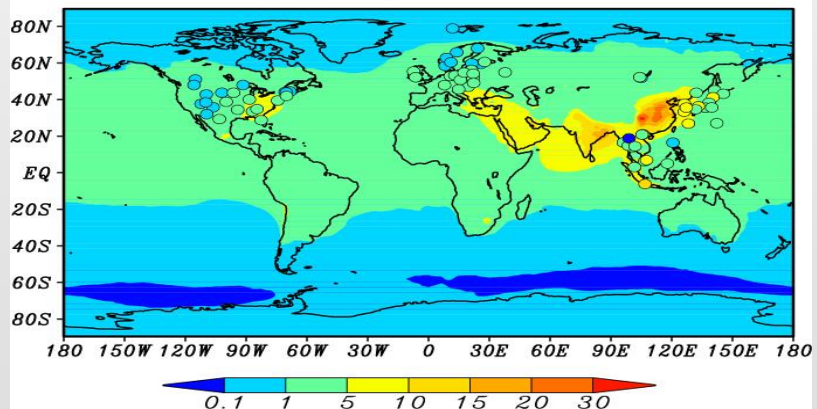
# 应用案例：SO<sub>2</sub>和硫酸盐与观测对比

## CBM-Z(WRF气象场)

SO<sub>2</sub> (μg/m<sup>3</sup>): Annual, 2014

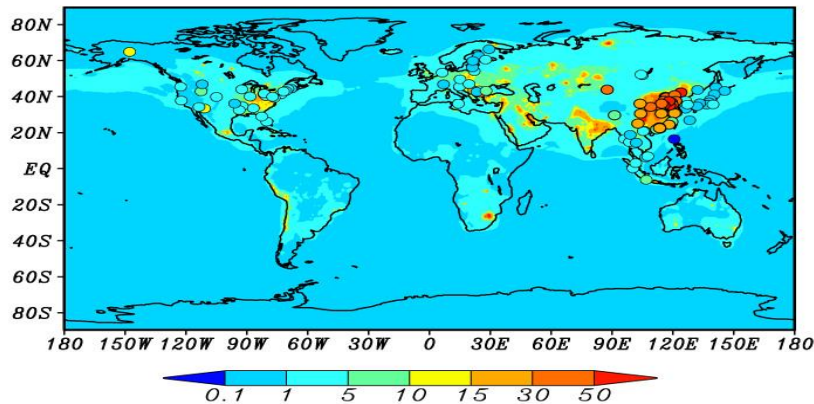


ASO<sub>4</sub> (μg/m<sup>3</sup>): Annual, 2014

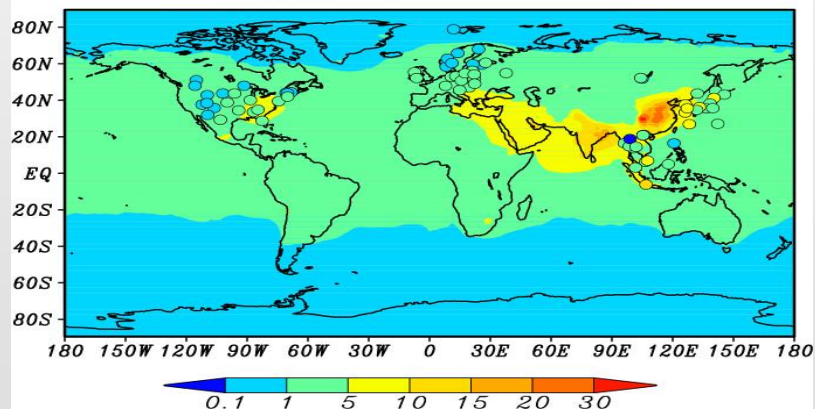


## 简化版 (WRF气象场)

SO<sub>2</sub> (μg/m<sup>3</sup>): Annual, 2014

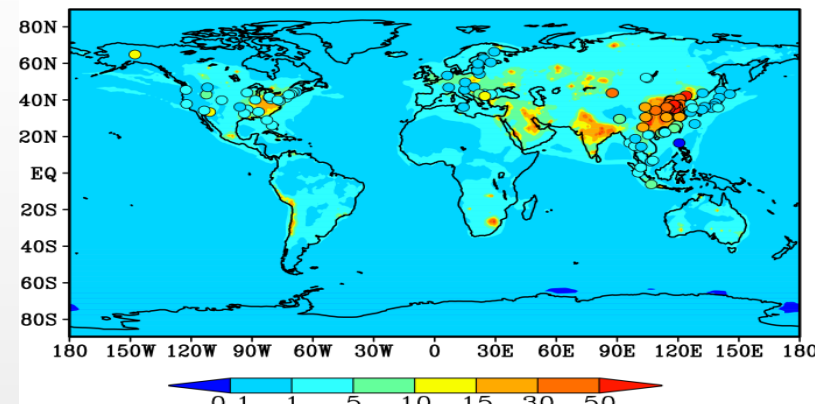


ASO<sub>4</sub> (μg/m<sup>3</sup>): Annual, 2014

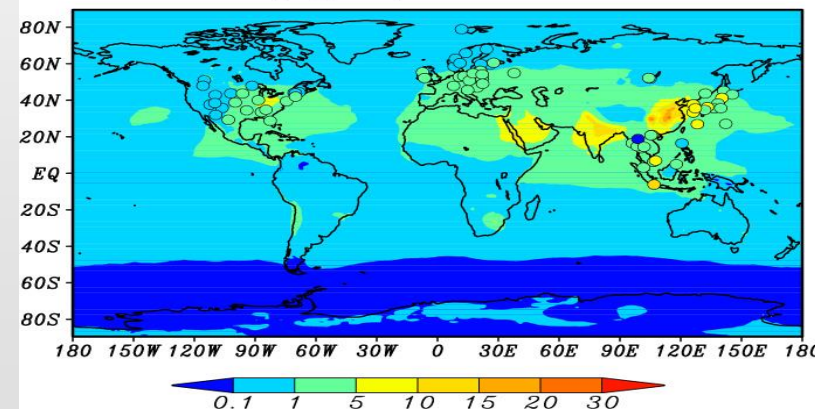


## 简化版(IAP-AGCM气象场)

SO<sub>2</sub> (μg/m<sup>3</sup>): Annual, 2014

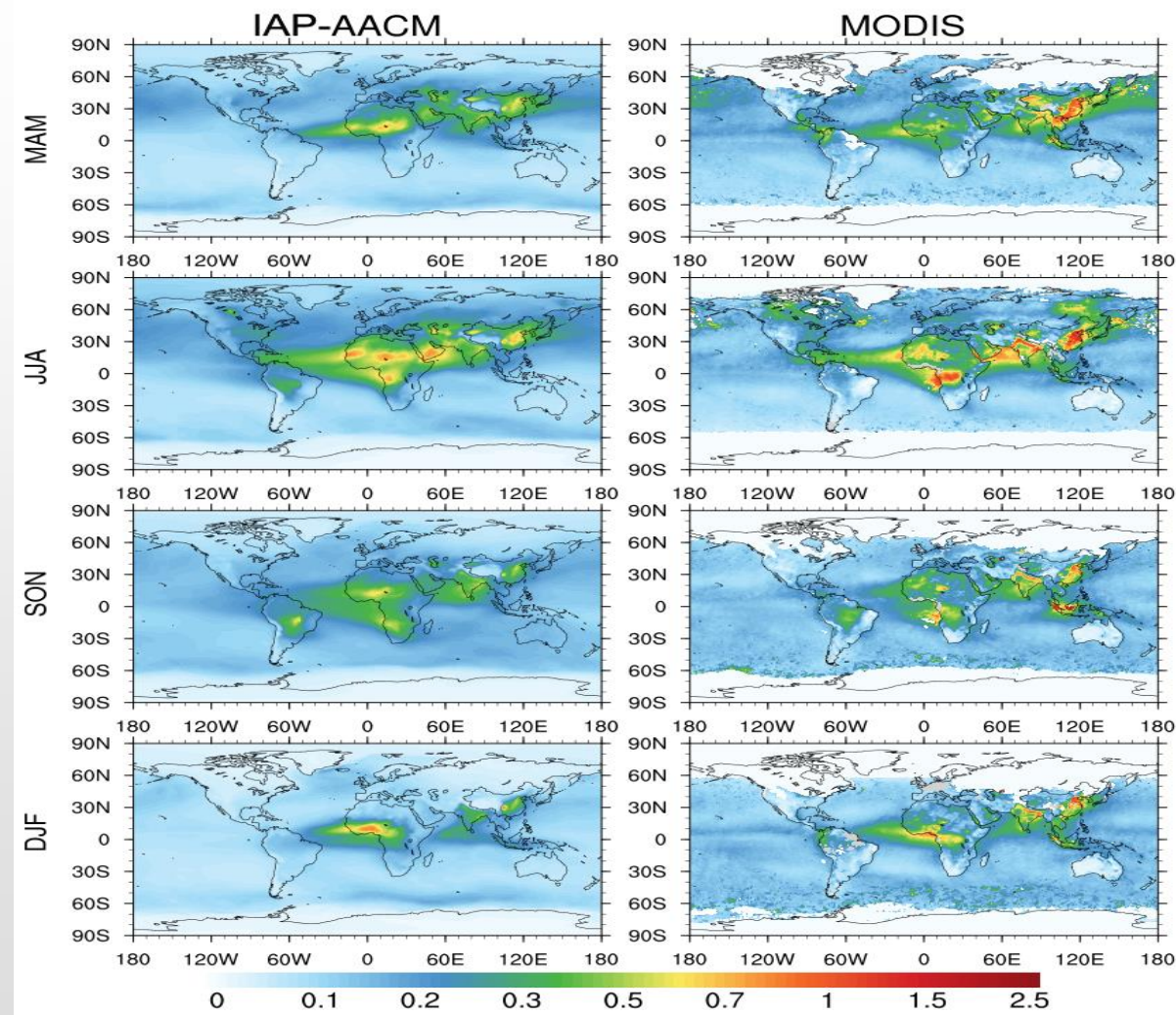
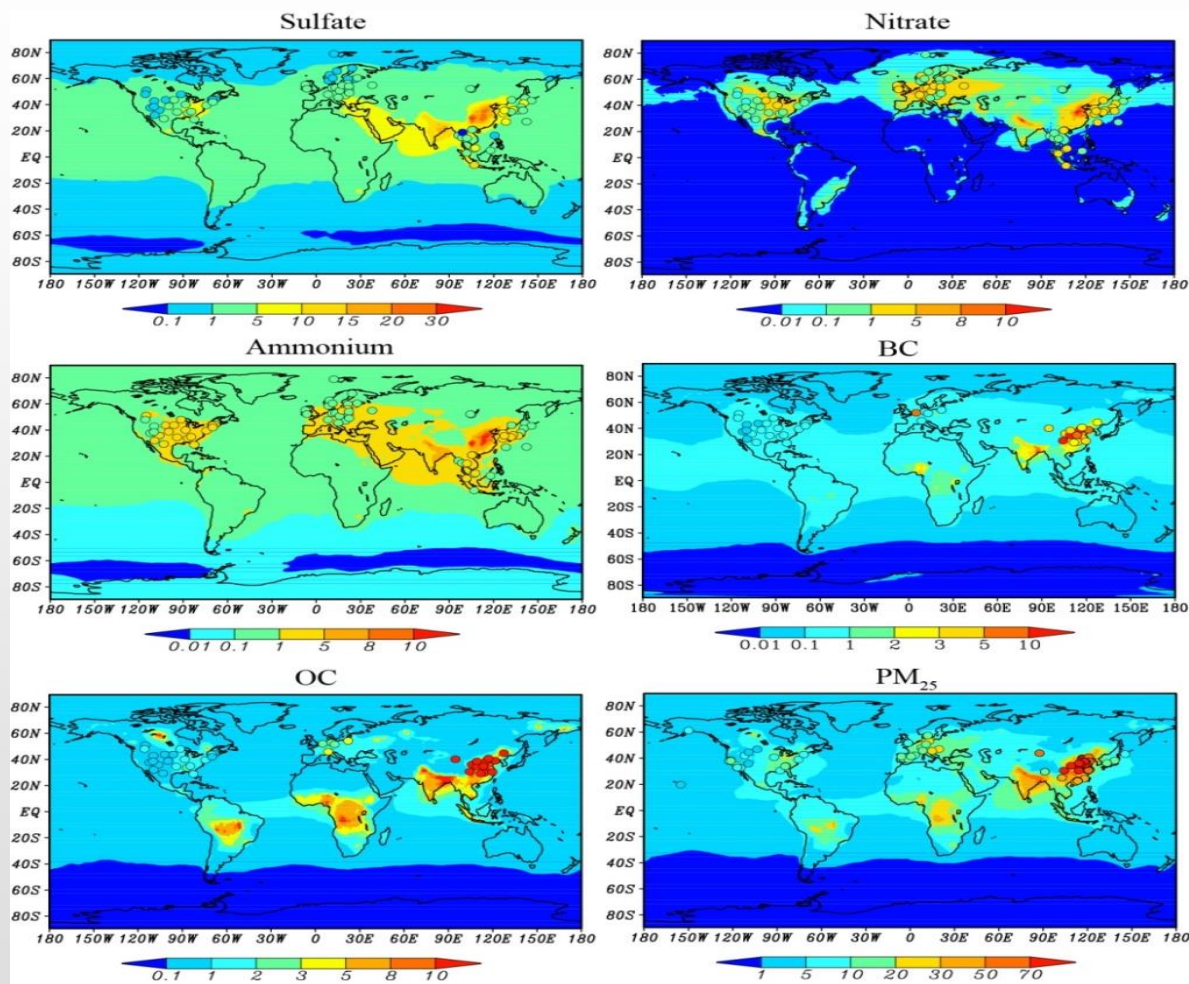


ASO<sub>4</sub> (μg/m<sup>3</sup>): Annual, 2014



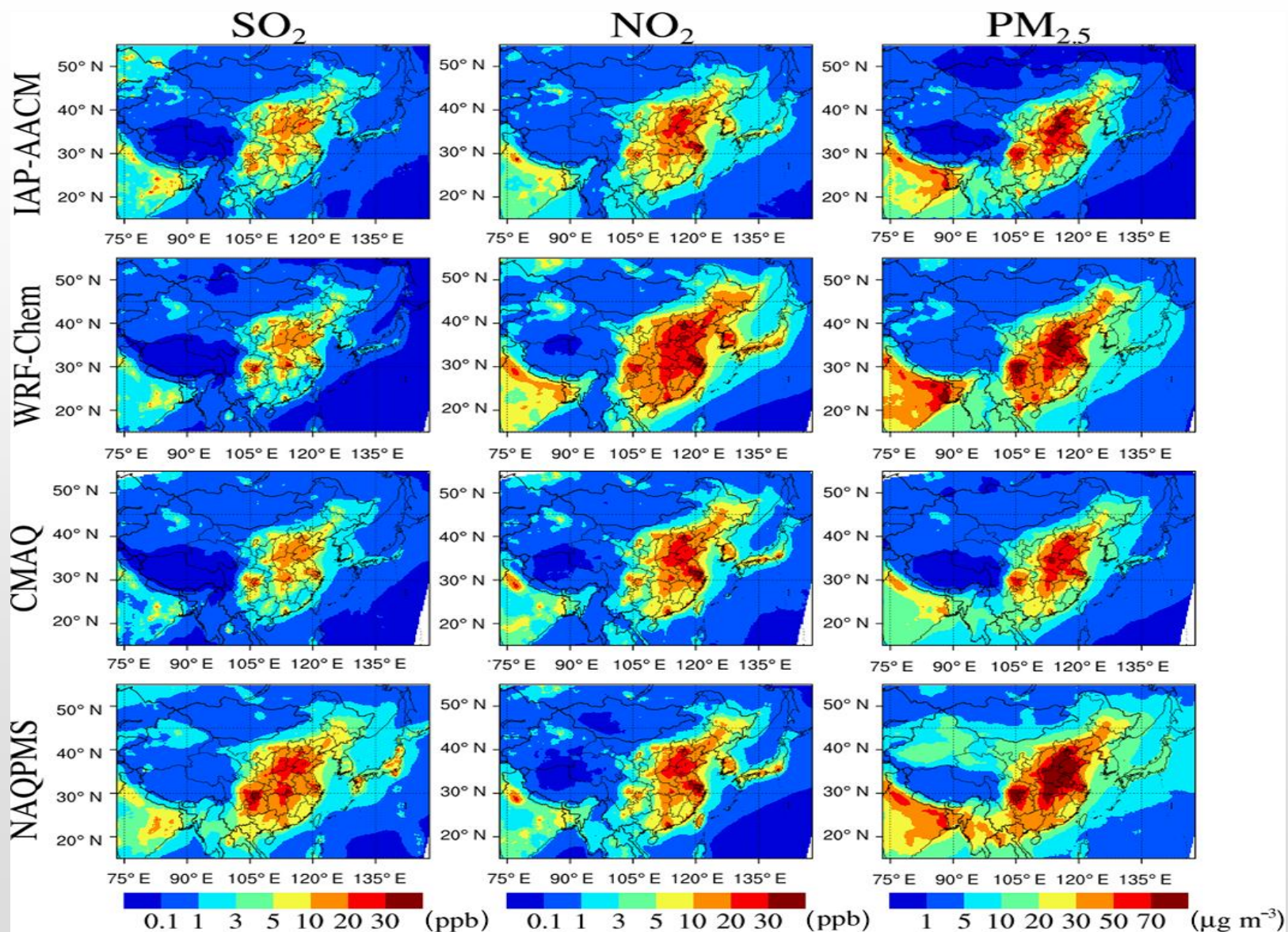
- 简化化学机制能基本再现复杂机制的主要特征
- 耦合模式模拟结果能基本再现观测的SO<sub>2</sub>和硫酸盐浓度

# 应用案例：气溶胶组分和AOD空间分布



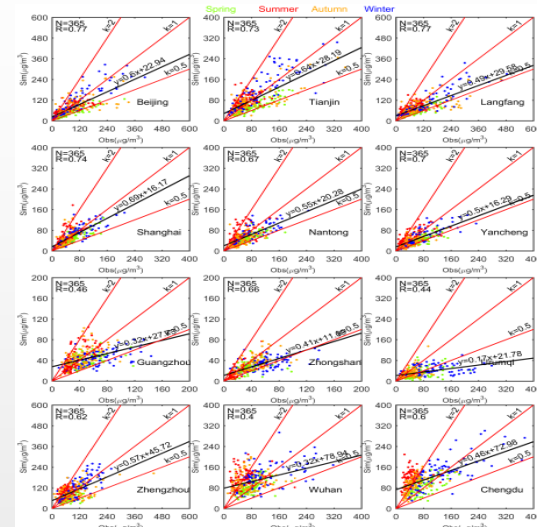
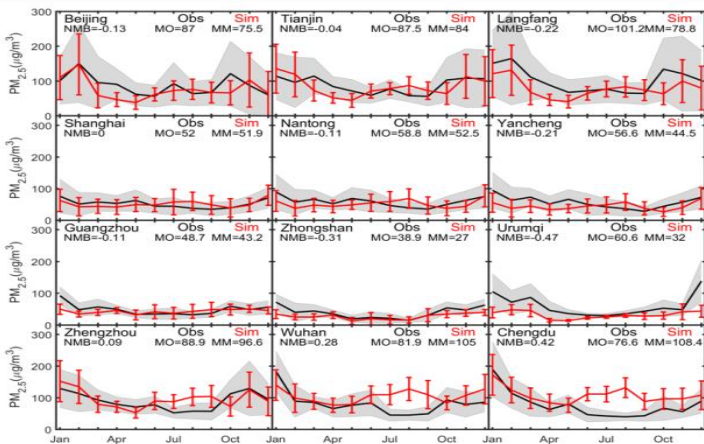
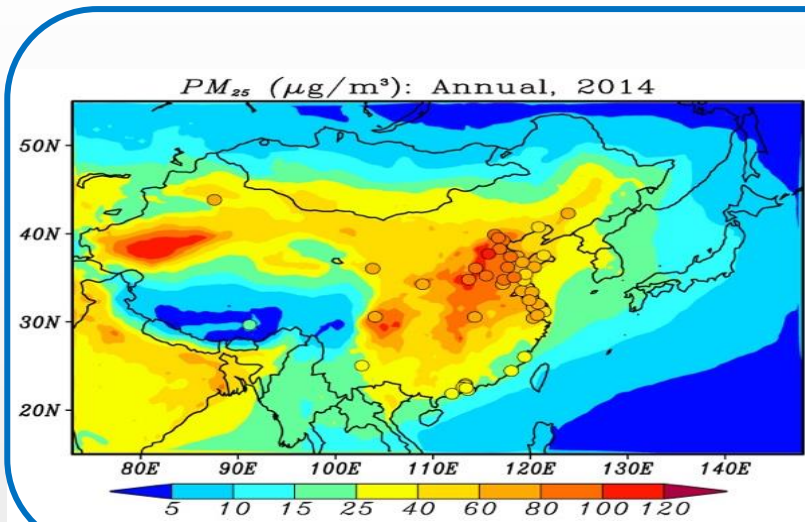
(Wei et al., ACP, 2019)

# 应用案例：和MICS-Asia模式比较

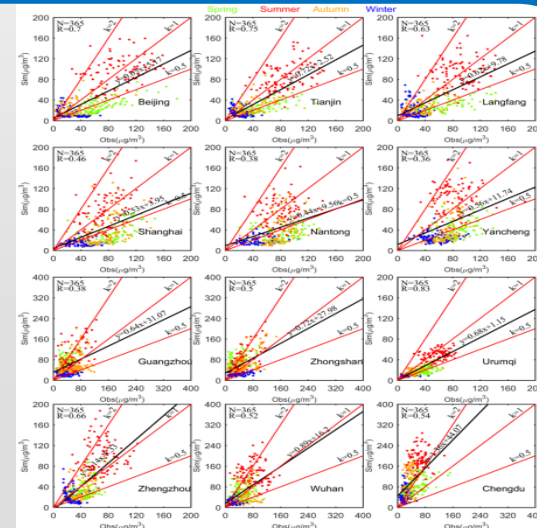
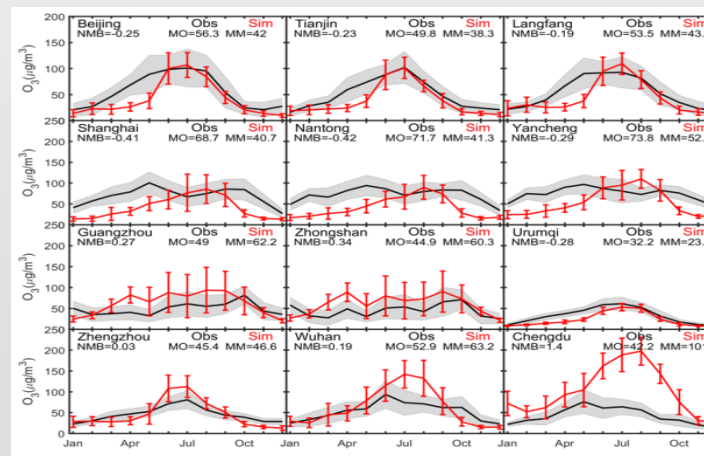
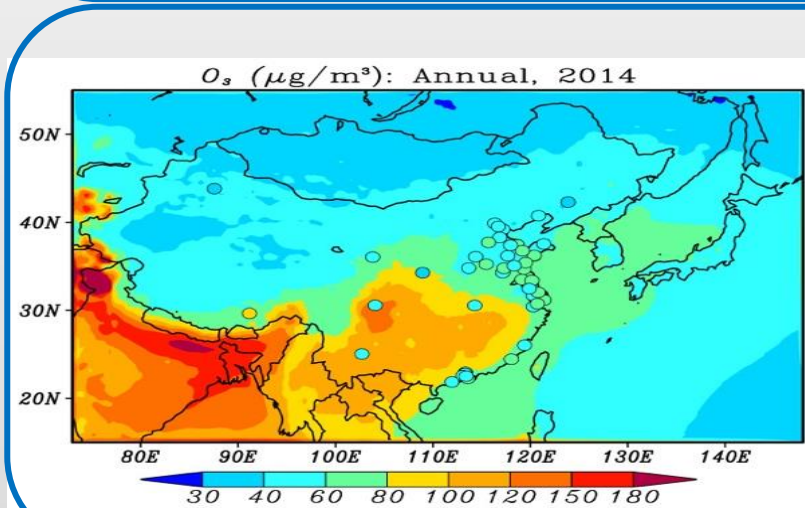


# 应用案例：中国地区PM<sub>2.5</sub>和O<sub>3</sub>时空变化

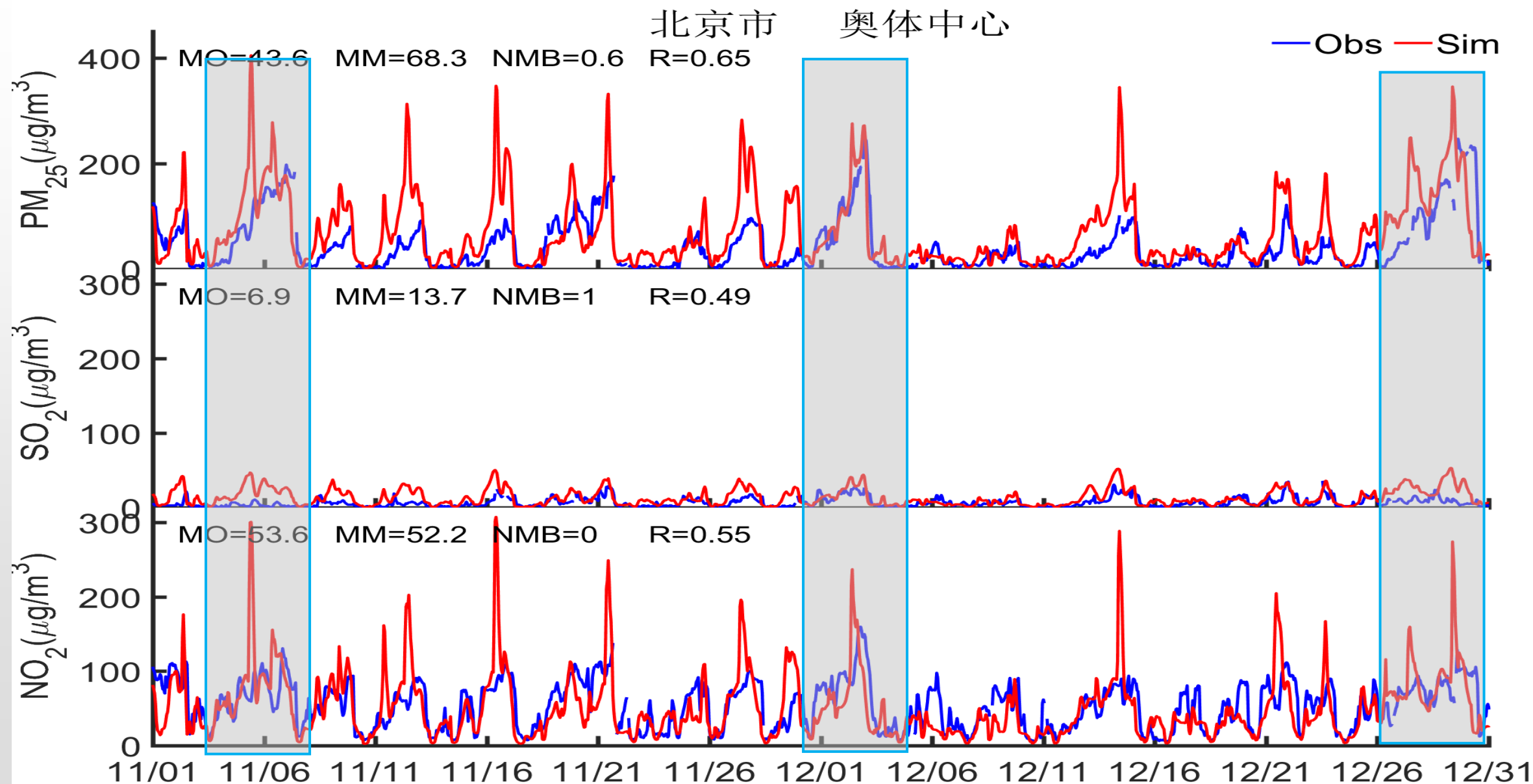
PM<sub>2.5</sub>



O<sub>3</sub>

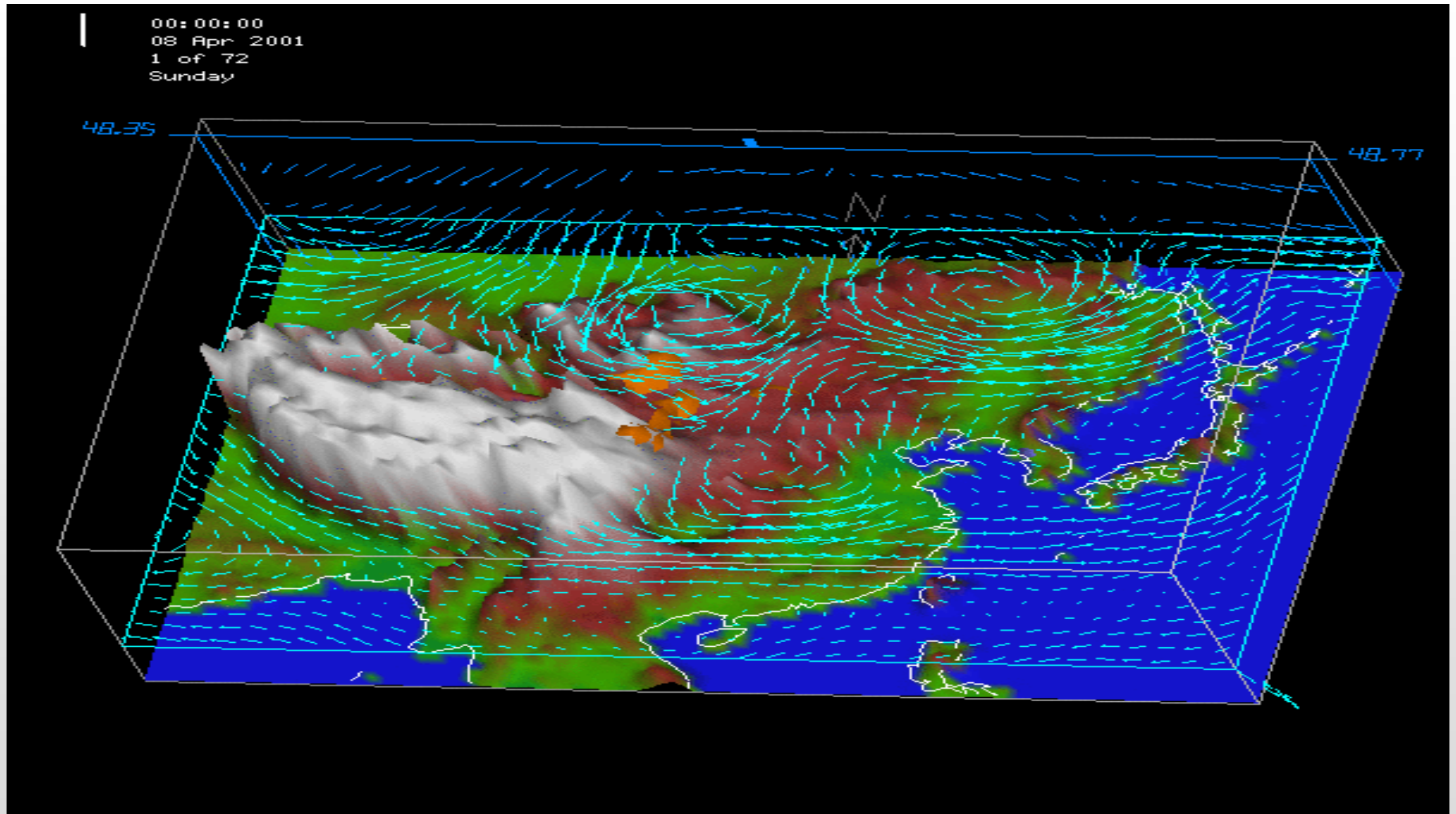


# 应用案例：模式重现冬季重污染过程

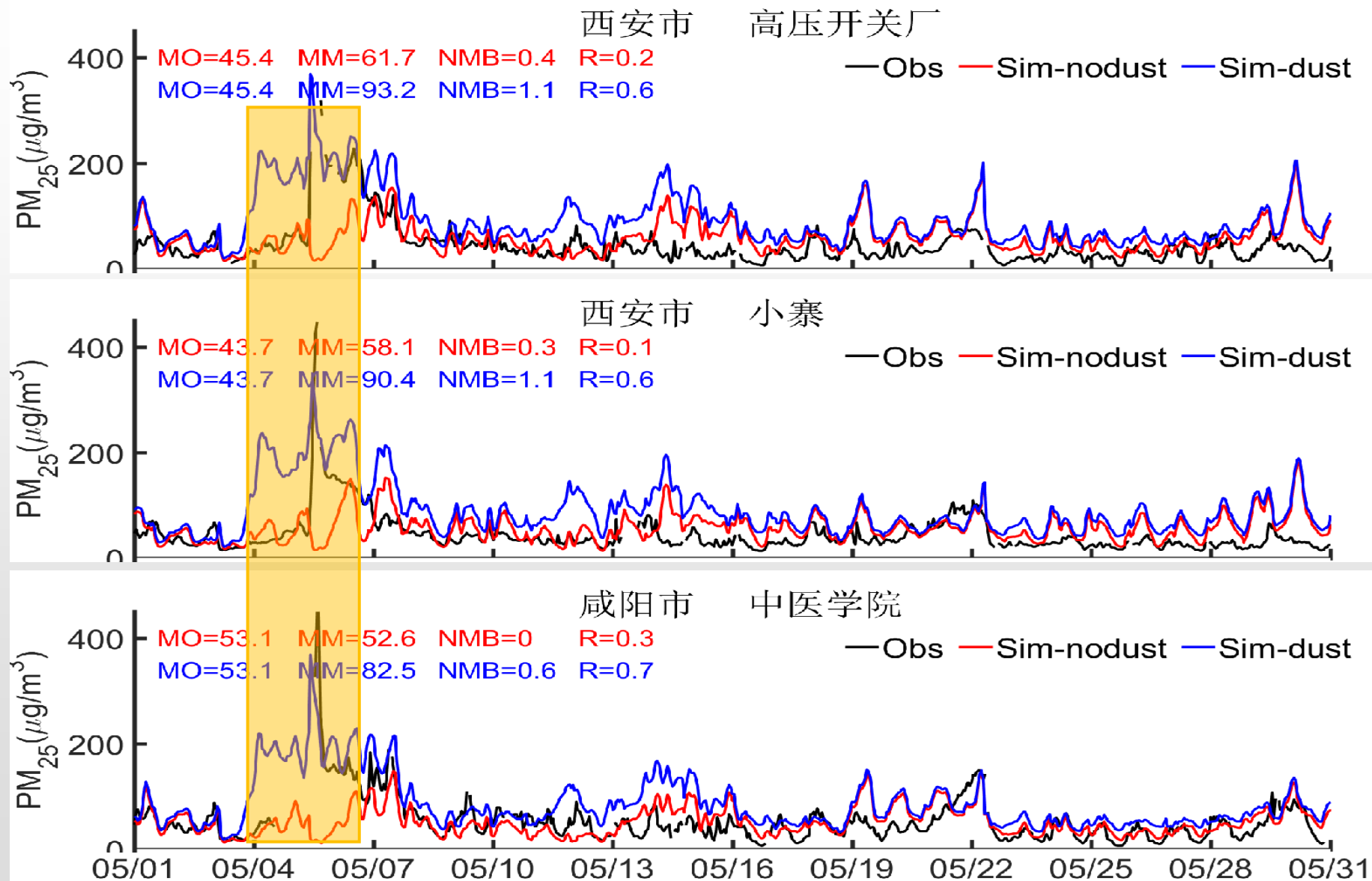




# 应用案例：沙尘模拟预报

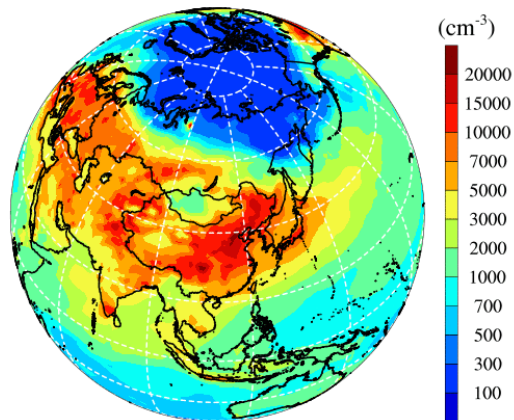


# 应用案例：沙尘模拟预报

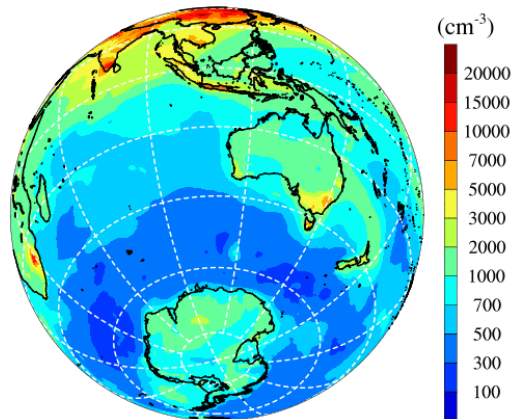


# 应用案例：全球气溶胶数浓度时空变化

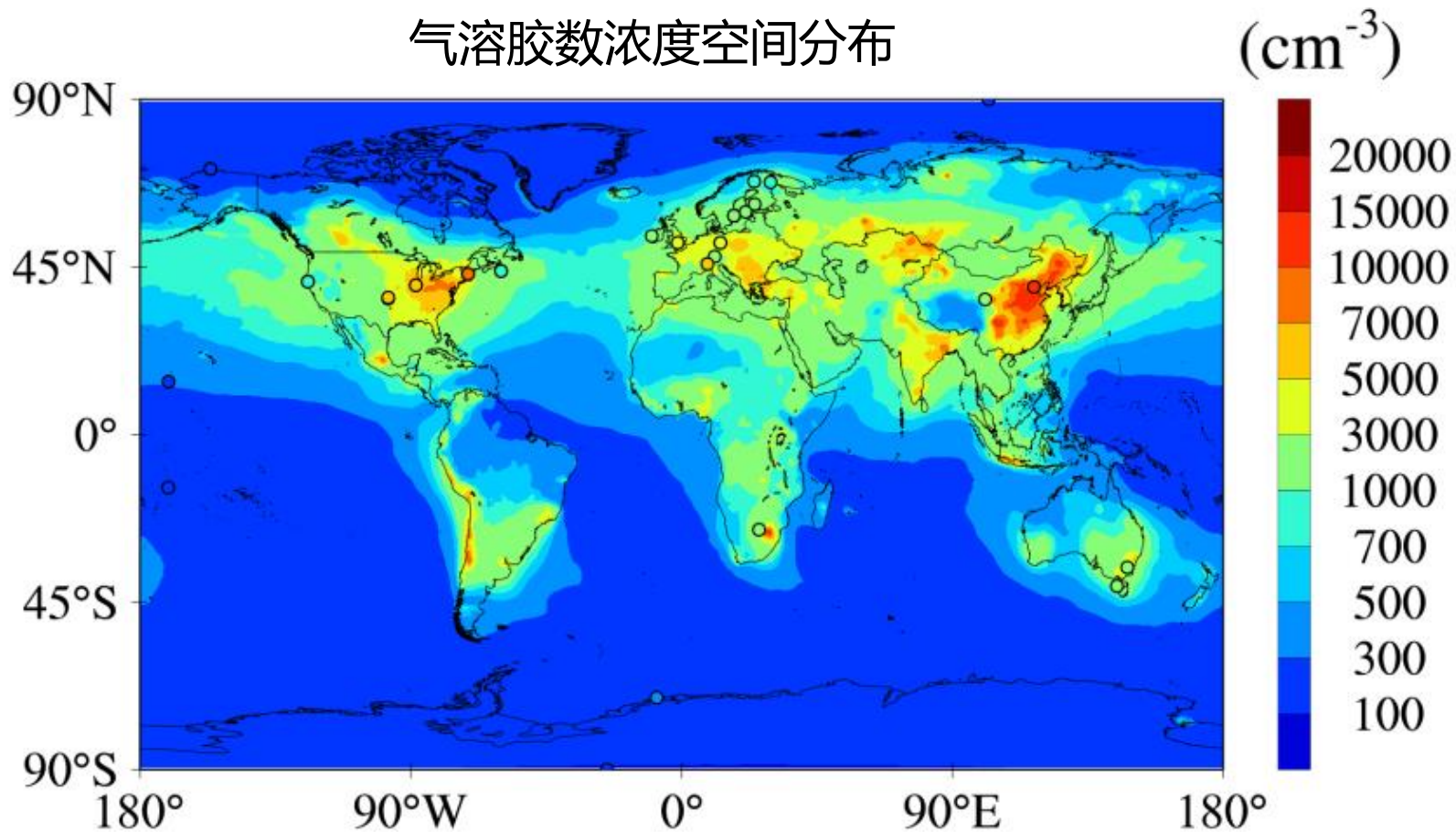
CN3 in 2014-01



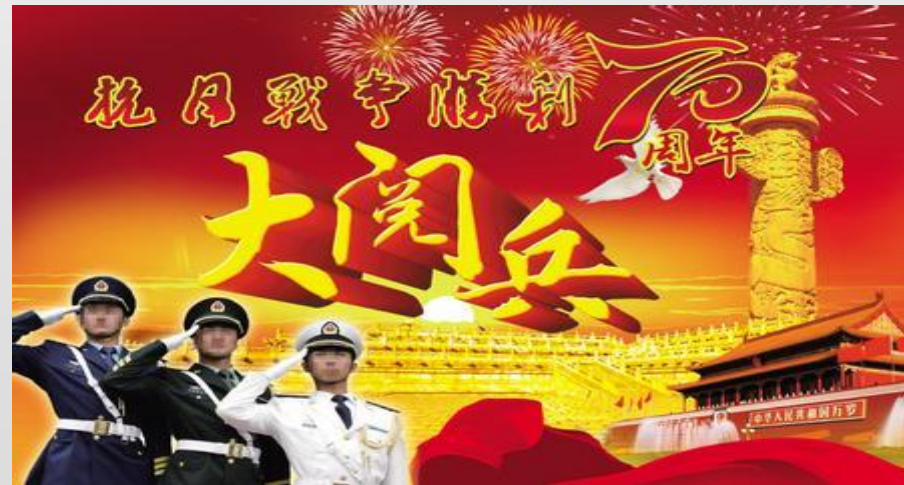
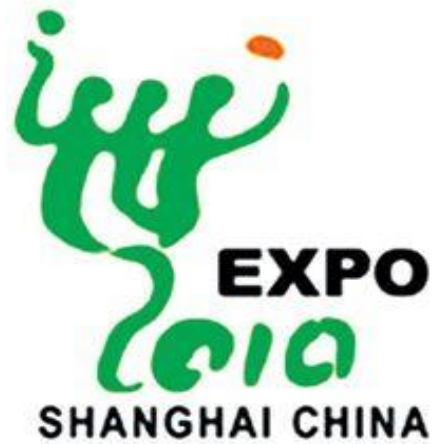
CN3 in 2014-01



气溶胶数浓度空间分布



# 应用案例：重大活动保障



# 主要参考文献

- Wang, Z., Ueda, H., and Huang, M.: A deflation module for use in modeling long-range transport of yellow sand over East Asia, *Journal of Geophysical Research*, 105, 26947-26960, 10.1029/2000JD900370, 2000.
- Wang, Z., Maeda, T., Hayashi, M., Hsiao, L. F., and Liu, K. Y.: A Nested Air Quality Prediction Modeling System for Urban and Regional Scales: Application for High-Ozone Episode in Taiwan, *Water Air and Soil Pollution*, 130, 391-396, 10.1023/A:1013833217916, 2001.
- 王自发, 谢付莹, 王喜全, 安俊岭, & 朱江. (2006). 嵌套网格空气质量预报模式系统的发展与应用. *大气科学*, 030(005), 778-790.
- Luo, G., and Wang, Z.: A Global Environmental Atmospheric Transport Model(GEATM): Model Description and Validation, *Chinese Journal of Atmospheric Sciences*, 30, [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(06\)60040-X](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(06)60040-X), 2006.
- Li, J., Wang, Z., Zhuang, G., Luo, G., Sun, Y., and Wang, Q.: Mixing of Asian mineral dust with anthropogenic pollutants over East Asia: a model case study of a super-duststorm in March 2010, *Atmos. Chem. Phys.*, 12, 7591-7607, 10.5194/acp-12-7591-2012, 2012.
- Chen, H., Wang, Z., Li, J., Tang, X., Ge, B., Wu, X., Wild, O., and Carmichael, G.: GNAQPMS-Hg v1.0, a global nested atmospheric mercury transport model: model description, evaluation and application to trans-boundary transport of Chinese anthropogenic emissions, *Geoscientific Model Development*, 8, 10.5194/gmd-8-2857-2015, 2015.
- Chen, X., Wang, Z., Li, J., and Yu, F.: Development of a Regional Chemical Transport Model with Size-Resolved Aerosol Microphysics and Its Application on Aerosol Number Concentration Simulation over China, *SOLA*, 10, 83-87, 10.2151/sola.2014-017, 2014.
- Yang, W., Li, J., Wang, W., Li, J., Ge, M.-F., Sun, Y., Chen, G., Ge, B., Tong, S., Wang, Q., and Wang, Z.: Investigating secondary organic aerosol formation pathways in China during 2014, *Atmospheric Environment*, 213, 10.1016/j.atmosenv.2019.05.057, 2019.
- Chen, X., Yang, W., Wang, Z., Li, J., Hu, M., An, J., Wu, Q., Wang, Z., Chen, H., Wei, Y., Du, H., and Wang, D.: Improving new particle formation simulation by coupling a volatility-basis set (VBS) organic aerosol module in NAQPMS+APM, *Atmospheric Environment*, 204, 1-11, 10.1016/j.atmosenv.2019.01.053, 2019.
- Wei, Y., Chen, X., Chen, H., Li, J., Wang, Z., Yang, W., Ge, B., Du, H., Hao, J., Wang, W., Li, J., Sun, Y., and Huang, H.: IAP-AACM v1.0: a global to regional evaluation of the atmospheric chemistry model in CAS-ESM, *Atmos. Chem. Phys.*, 19, 8269-8296, 10.5194/acp-19-8269-2019, 2019.
- 王自发, 魏颖, 陈学舜, 等. 2020. 一个适用于地球系统模式(CAS-ESM)的在线气溶胶与大气化学分量模式(IAP-AACM)的发展与评估[J]. *气候与环境研究*, 25(1): 1-18.
- Chen, X., Yu, F., Yang, W., Sun, Y., Chen, H., Du, W., Zhao, J., Wei, Y., Wei, L., Du, H., Wang, Z., Wu, Q., Li, J., An, J., and Wang, Z.: Global-regional nested simulation of particle number concentration by combining microphysical processes with an evolving organic aerosol module, *Atmos. Chem. Phys.*, 21, 9343-9366, <https://doi.org/10.5194/acp-21-9343-2021>, 2021.
- Ye, Q., Li, J., Chen, X., Chen, H., Yang, W., Du, H., Pan, X., Tang, X., Wang, W., Zhu, L., Li, J., Wang, Z., and Wang, Z.: High-resolution modeling of the distribution of surface air pollutants and their intercontinental transport by a global tropospheric atmospheric chemistry source-receptor model (GNAQPMS-SM), *Geosci. Model Dev.*, 14, 7573-7604, <https://doi.org/10.5194/gmd-14-7573-2021>, 2021.

**部分内容参考了安俊岭研究员《大气环境》课件，特此感谢！  
感谢大气化学模式研发团队及CAS-ESM团队的贡献和帮助！**

**谢 谢**

**欢迎大家使用和发展我们的模式！**

**欢迎交流, email: [chenxsh@mail.iap.ac.cn](mailto:chenxsh@mail.iap.ac.cn)**