



地球系统数值模拟装置项目  
( 地球系统模式数值模拟系统 )  
陆地生物地球化学分系统 ( 离线版 ) 培训

培训人：张伟

2022 年 5 月 26 日

01

背景介绍

---

02

模式原理

---

03

数据制备

---

04

结果诊断分析与应用案例

---



# 1、背景介绍

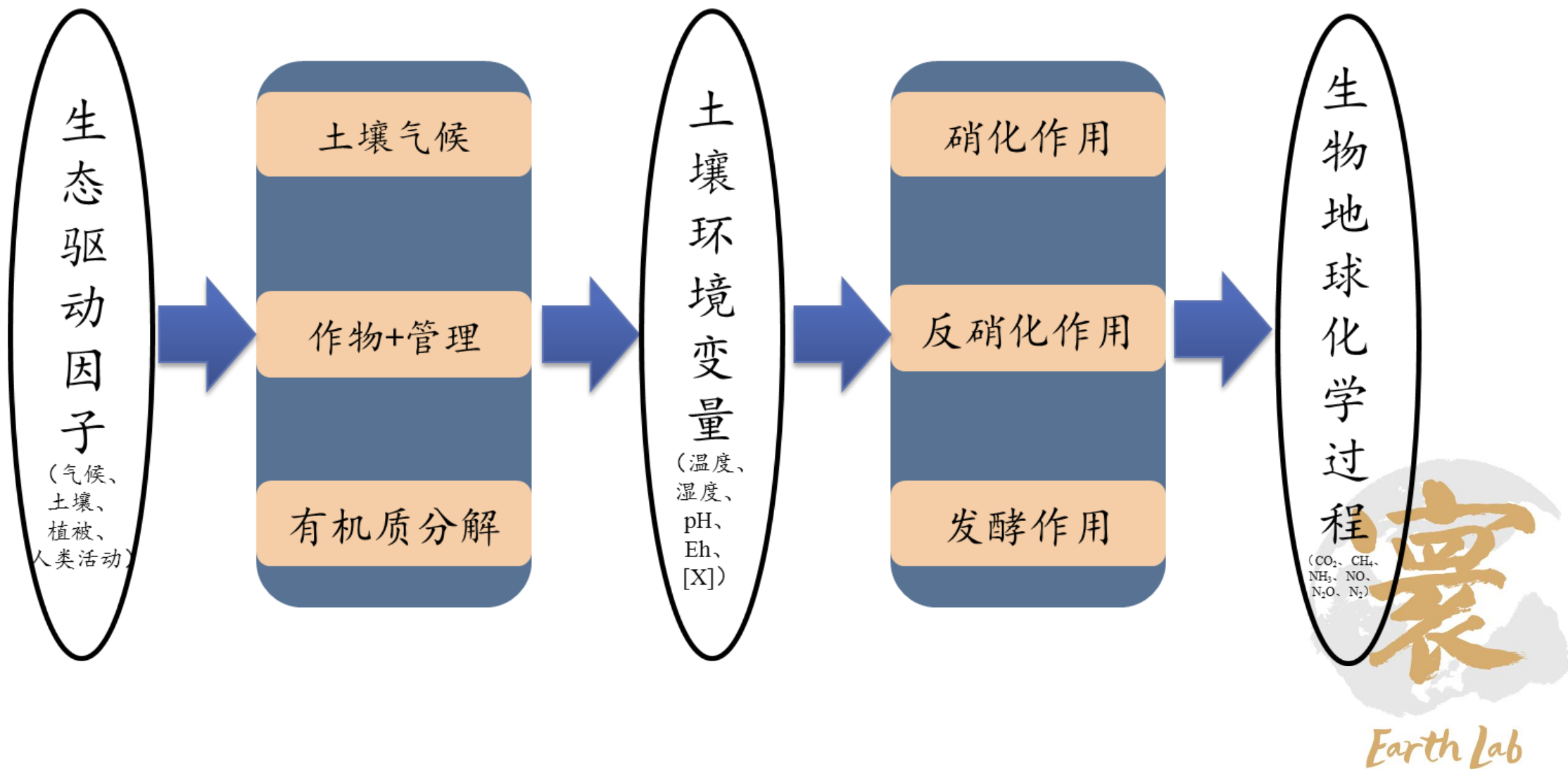
**陆地生物地球化学分系统（离线版）**是我国自主构建的水文-生物地球化学模式，基于碳氮循环过程，采用一阶动力学原理、米氏动力学原理等生物地球化学的基本原理和方法模拟土壤碳氮循环及其相互作用，包括有机质分解模块、土壤微生物模块、甲烷产生模块、甲烷氧化传输模块、硝化作用模块、反硝化作用模块、尿素水解模块、铵吸附解析模块、土壤pH动态模块、生物固氮模块、氮沉降模块、氨挥发模块、氨淋溶模块、溶质迁移模块和土壤气体传输模块等关键科学过程模块，实现对地气碳氮气体（ $\text{CO}_2$ 、 $\text{CH}_4$ 、 $\text{N}_2\text{O}$ 、 $\text{NO}$ 、 $\text{NH}_3$ ）通量的模拟。



## 2、模式原理（建模理念）

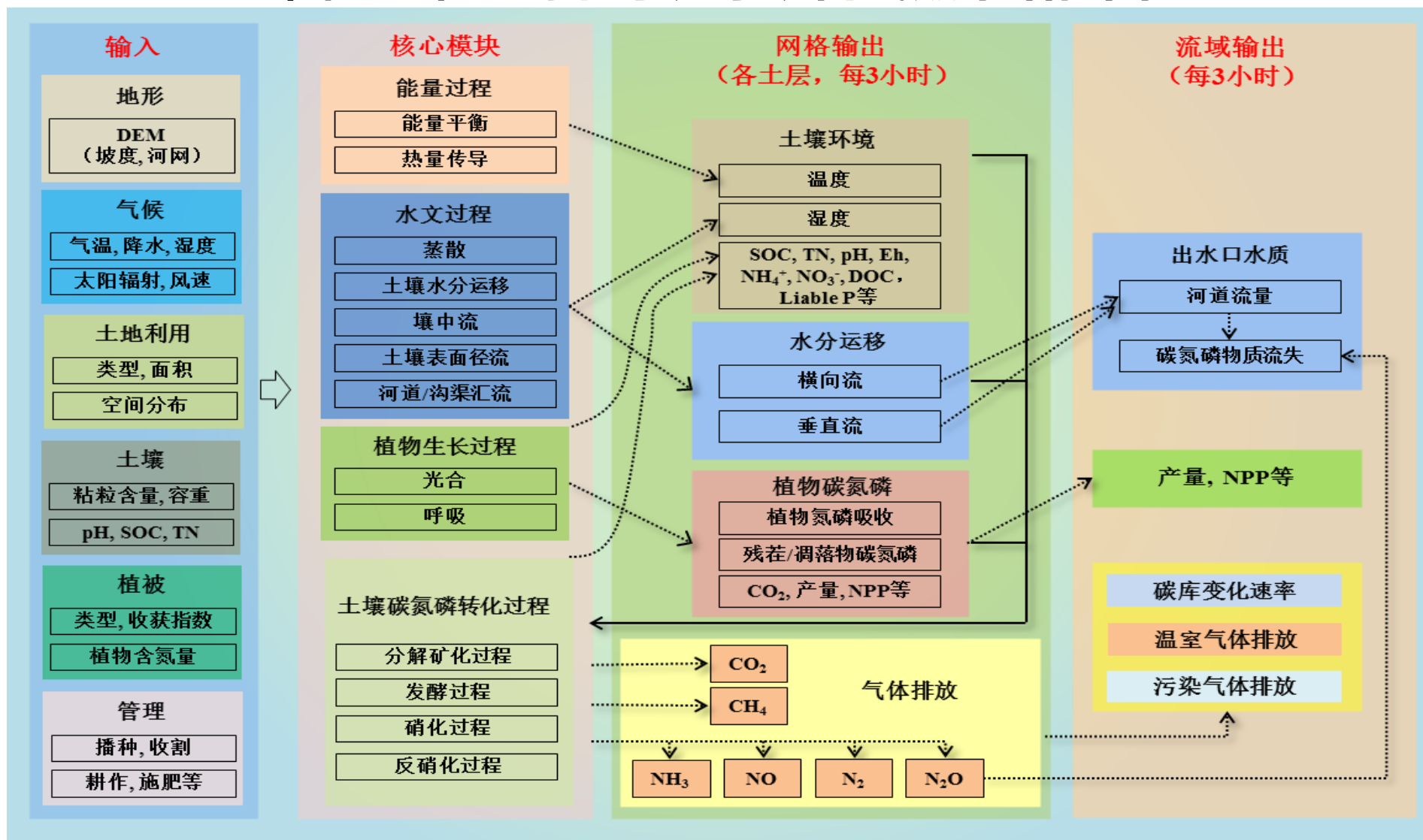


## 2、模式原理（建模理念）



## 2、模式原理（框架结构）

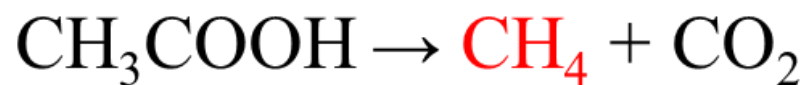
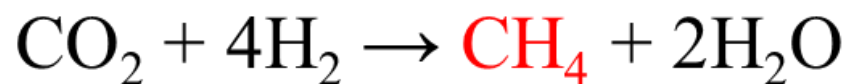
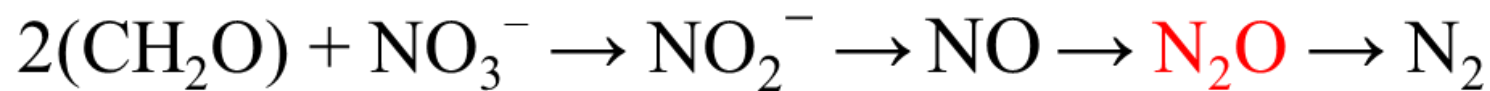
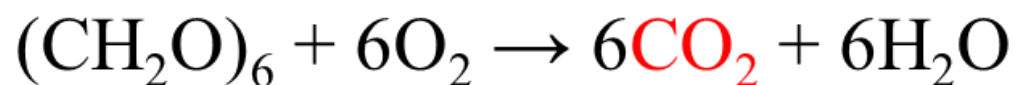
### 陆地生物地球化学分系统离线版本结构图



## 2、模式原理（科学过程）

计算碳氮形态转化的化学动力学反应速度→模拟碳氮气体源汇通量。

例如：



...



## 2、模式原理（科学过程-土壤气候）

	物理量	模型参数化
Soil physics	Soil temperature	$dT = \frac{Q}{C_s}$
	Soil moisture	Penman-Monteith Equation
Soil chemistry	pH	$\text{pH} = -\lg[\text{H}^+]$
	Eh	$E = E_\theta + \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\frac{O_x}{\text{Red}}\right)$





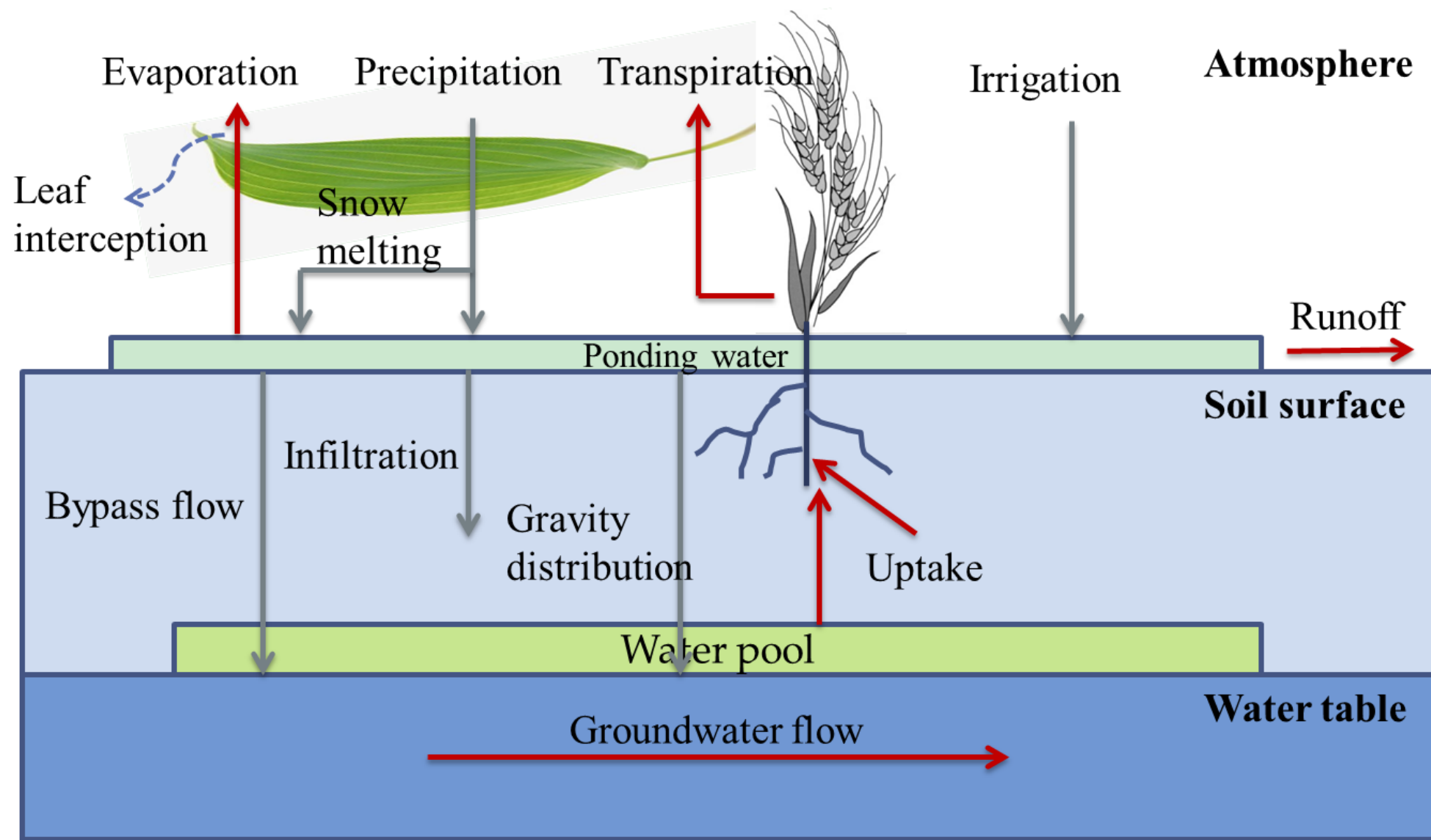
## 2、模式原理（科学过程-土壤气候-土壤温度）

$$dT = \frac{Q}{Cs}$$

科学过程	模型参数化	备注
热通量传导	$Q = -k \frac{\partial T}{\partial z}$	k为热导率
土壤水相态变化	$pQ1 = -temp[l] \cdot Cs_i$ $pQ2 = Vwater \cdot (41.0 - 21.0)$	结冰和融化时pQ1和pQ2的大小决定热量的大小



## 2、模式原理（科学过程-土壤气候-土壤湿度）

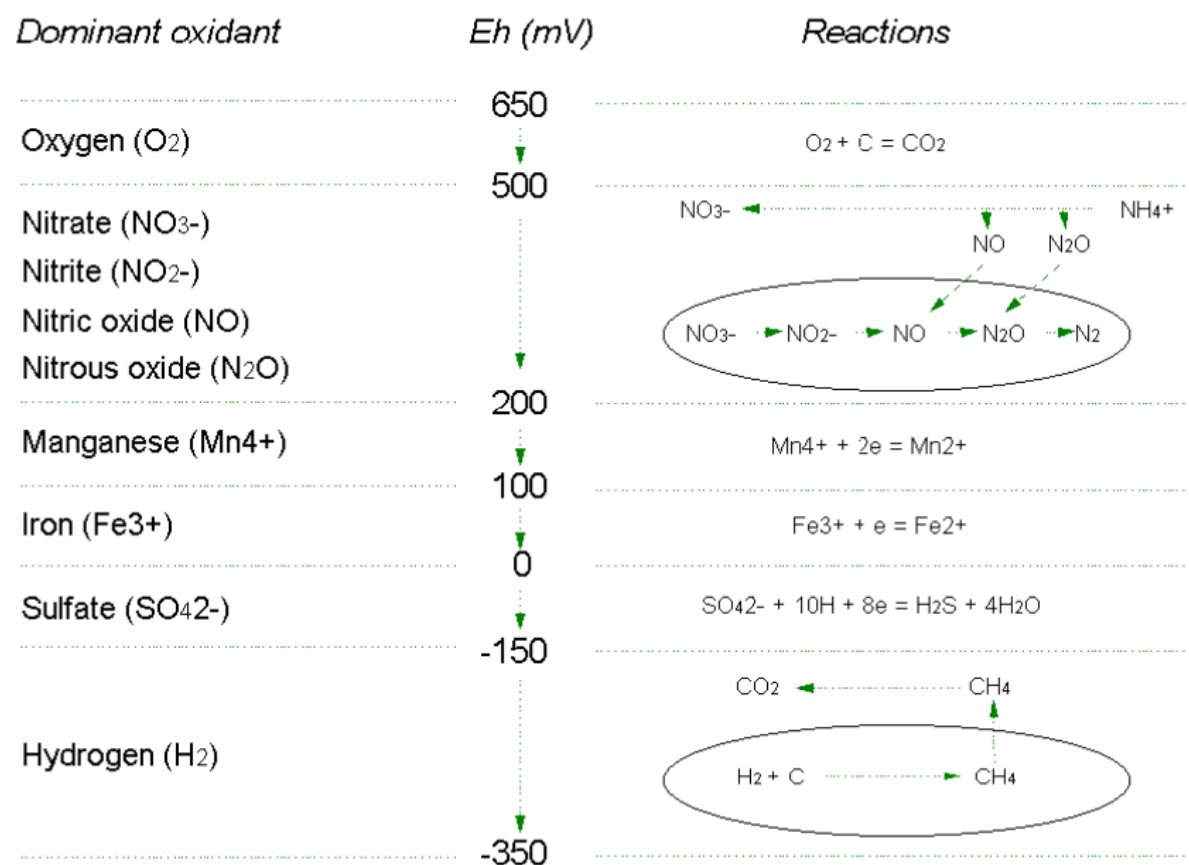


## 2、模式原理（科学过程-土壤气候-土壤pH）

科学过程	模型参数化
Urea hydrolysis	$\text{CO}(\text{NH}_2)_2 + 2\text{H}^+ + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{NH}_4^+ + \text{HCO}_3^- + \text{OH}^-$
Nitrification	$2\text{NH}_4^+ + 3\text{O}_2 \rightarrow 2\text{NO}_2^- + 4\text{H}^+ + 2\text{H}_2\text{O}$
Ammonia volatilization	$\text{NH}_4^+ \rightleftharpoons \text{NH}_3 + \text{H}^+$
Effect of rainfall	降水进入土壤会暂时影响土壤pH
flooding water pH	与灌溉水pH和灌溉时间相关

## 2、模式原理 ( 科学过程-土壤气候-土壤Eh )

Nernst方程: 
$$E = E_{\theta} + \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\frac{O_X}{Red}\right)$$



## 2、模式原理（科学过程-有机碳分解）

$$dC_x / dt = k_x F_t F_m F_{\text{clay}} F_{\text{till}} F_{\text{sr}} [X]$$

$k_x$ : x组分的分解速率(SDR),  $d^{-1}$ ; [X]: X组分含量;  
其余为土壤温度、湿度、黏粒含量、耕作和该组分在SOC中比例等影响因子

SOC亚库	SOC分亚库
Residue	very labile
	labile
	resistant
Micro biomass	labile
	resistant
Humads	labile
	resistant
Humus	



## 2、模式原理（科学过程-有机氮分解）

科学过程	模型参数化	备注
尿素水解	$\text{urea}_{\text{hydro}} = \text{urea}(l) F_t F_{\text{soc}}$	$F_t$ 土壤温度因子 $F_{\text{soc}}$ 表层SOC因子
$\text{NH}_4^+/\text{NH}_3$ 解离平衡	$[\text{NH}_3(l)] = [\text{NH}_4^+][\text{OH}^-] / K_a$	$K_a$ : $\text{NH}_4^+/\text{NH}_3$ 解离平衡常数
$\text{NH}_3$ 气液平衡	$\text{NH}_3(g) = [\text{NH}_3(l)] F_t$	$F_t$ 土壤温度因子
氨挥发	$\text{Flux}(\text{NH}_3) = \text{NH}_3(g) F_{\text{sd}} F_{\text{po}} F_{\text{wind}} F_{\text{flooding}}$	分别为土壤深度，孔隙度， 风速和淹水的影响



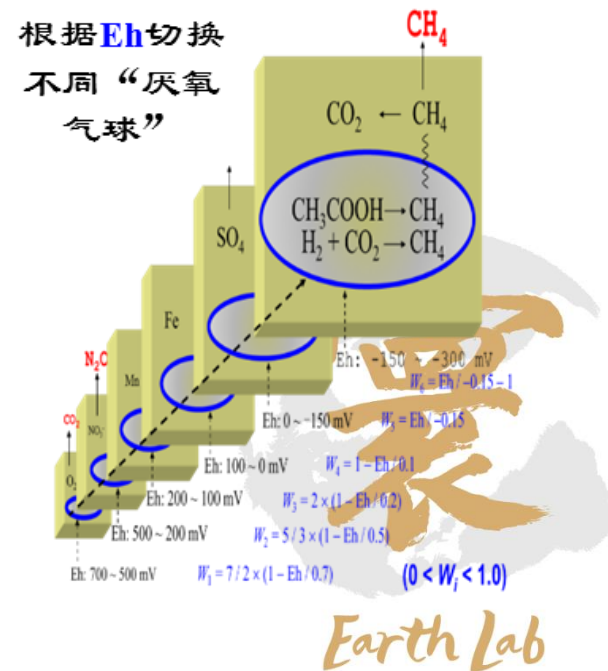
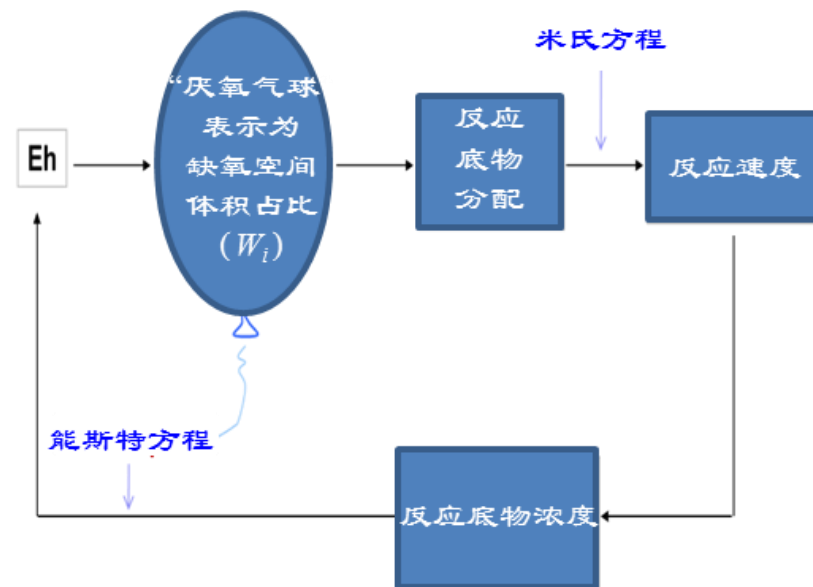
## 2、模式原理（科学过程-植物生长）

物理量	模型参数化	备注
生长期	$PGI = TDD / TDD_{max}$	根据积温计算
作物潜在需氮量	$N_d(n) = \max(mn) PGI F_{PGI} S_{water} F_{ST} F_{crop} F_{CO_2} F_{clay}$	
作物需水量 /潜在蒸腾量	$PT = CropwaterDemand \cdot PGI \cdot F_{ws}$	$F_{ws}$ 风速影响因子
潜在作物产量	$Grain\_wt = dayG\_N \cdot f\_grain \cdot plantcn$	$dayG\_N = day\_nup + day\_fix + day\_plant\_NH_3$

## 2、模式原理（科学过程-硝化反硝化）

基于“厌氧气球”假设解能斯特-米氏方程组 → 模拟非均匀介质中氧化、还原反应同时产生碳氮气体。

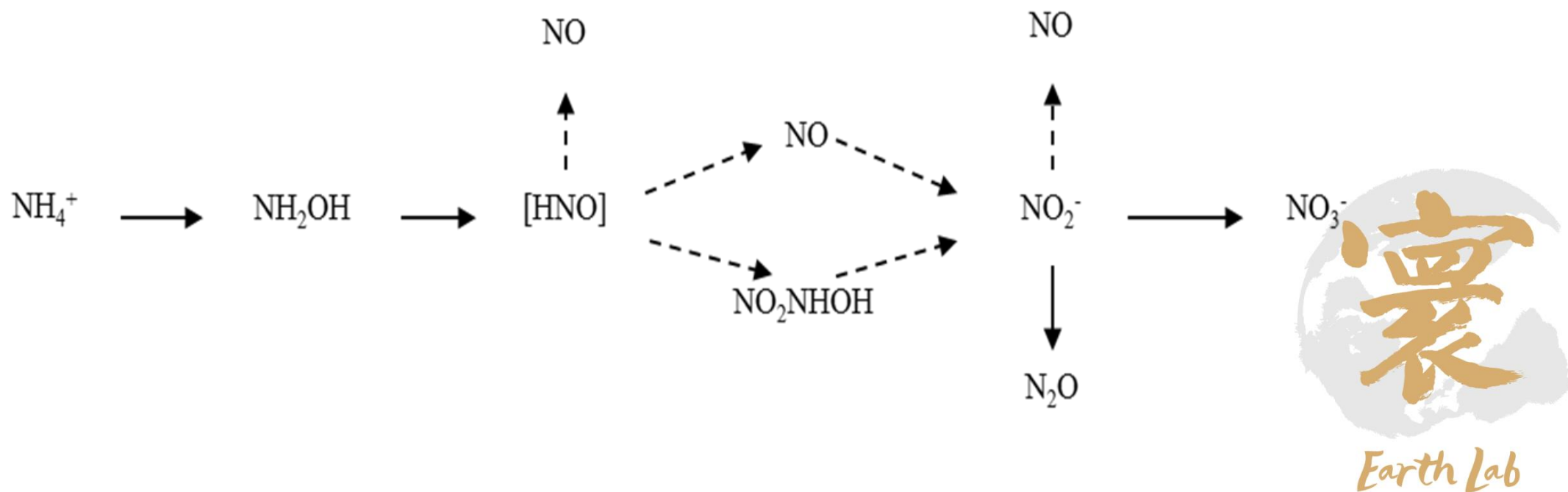
$$\left\{ \begin{array}{l} Eh = Eh^0 + RT/(nF) \cdot \ln([Ox]/[Red]) \leftarrow \text{能斯特方程} \\ V = V_{\max} [Red]/(K_a + [Red]) \cdot [Ox]/(K_b + [Ox]) \leftarrow \text{米氏方程} \end{array} \right.$$





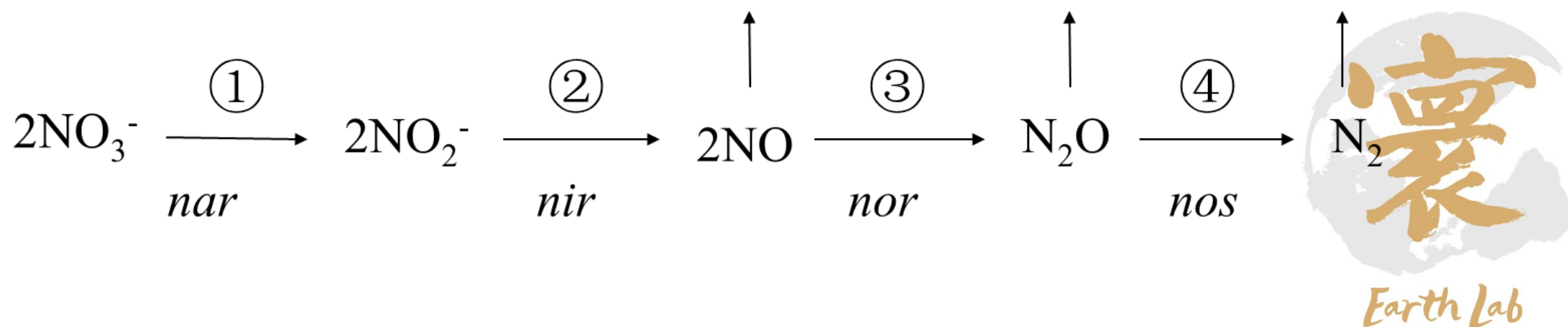
## 2、模式原理（科学过程-硝化）

硝化作用是指在通气条件下，土壤中的硝化微生物将铵盐转化为硝酸盐的过程。



## 2、模式原理（科学过程-反硝化）

反硝化过程主要是在厌氧条件下，异养微生物以土壤  $\text{NO}_3^-$  作为呼吸的最终电子受体，在硝酸根还原酶、亚硝酸根还原酶、一氧化氮还原酶和亚化亚氮还原酶的作用下将  $\text{NO}_3^-$  逐步还原成  $\text{NO}$ 、 $\text{N}_2\text{O}$ 、 $\text{N}_2$  等氮氧化物的过程，其中  $\text{N}_2\text{O}$  和  $\text{NO}$  是中间产物。



## 2、模式原理（科学过程-管理措施效应）

农田管理措施	模型参数化
耕作/犁地	耕作土壤剖面内碳氮水及其他元素平均分配
施肥	化肥：N，P分配 有机肥：肥料中的各组分被分配到土壤相应有的机碳库
灌溉	灌溉事件：投放深度影响蒸发，灌溉强度影响渗流速率 灌溉系数：植物根系对灌溉水的接近程度
放牧	消耗地上部分生物量 排泄物为土壤提供肥料 动物摄入的C、N分配到奶、肉、尿、粪和气体排放中



# 3、数据制备-地形输入

地形数据位于Topo文件夹下

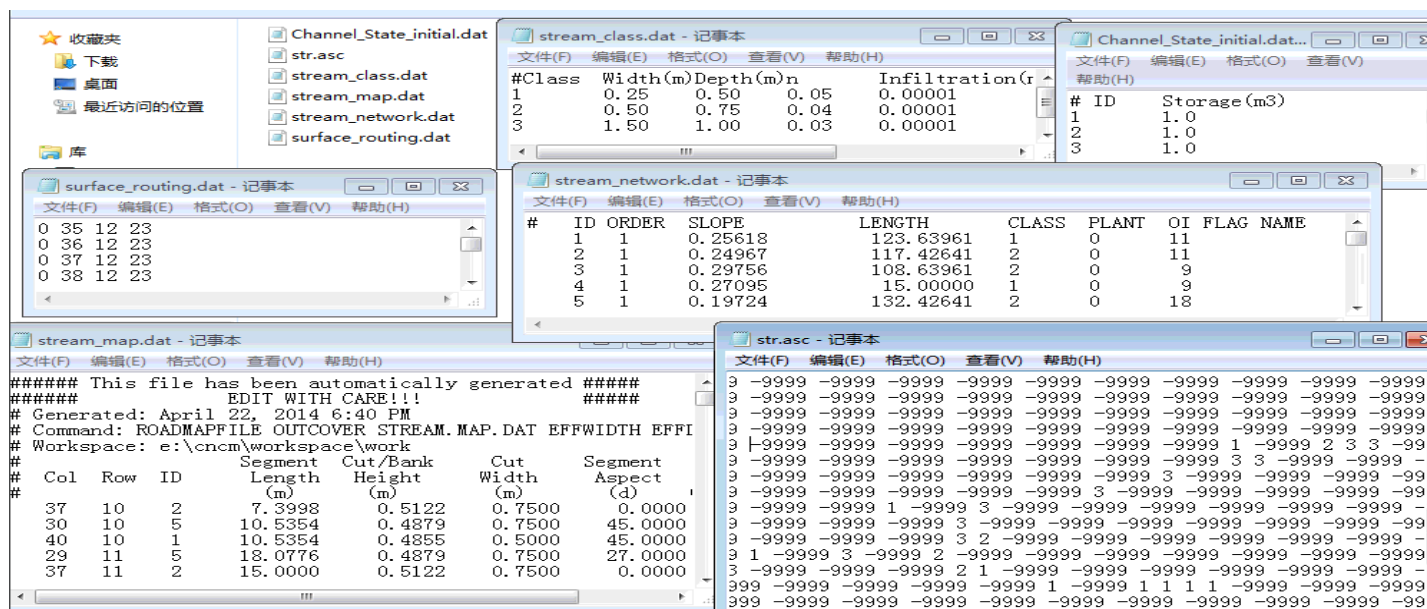
- 数字高程 ( dem.asc ) : 数字高程文件为流域各个栅格的高程值 ;
- 河流流向 ( flowdir.asc ) : 河流流向文件是基于数字高程图 , 利用ArcInfo软件的流域分析功能得到的各个栅格水流方向值 ;
- 流域边界 ( mask.asc ) : 流域边界文件也是基于数字高程图 , 利用ArcInfo的流域分析功能获取。



# 3、数据制备-地形输入

地形数据位中的河流数据位于stream文件夹下

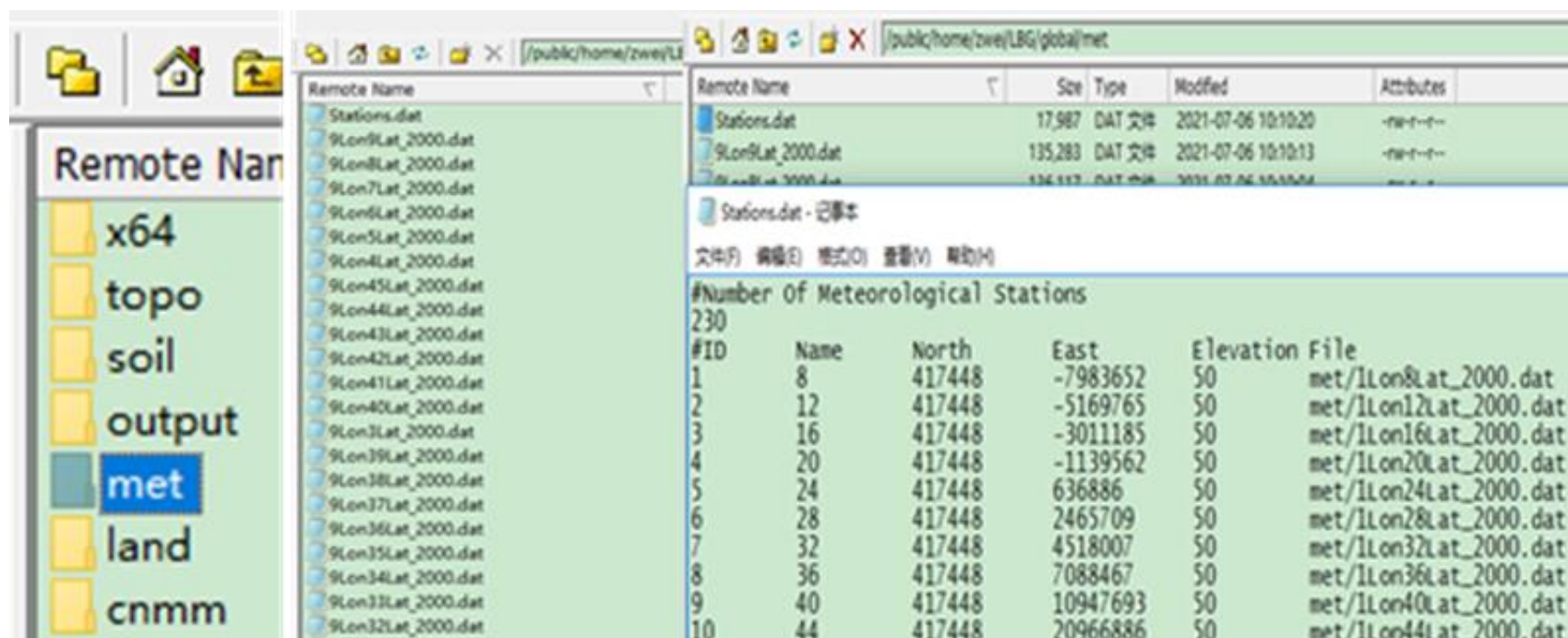
- 初始河道水量 ( Channel\_State\_initial.dat ) : 初始河道水流用户可根据实际情况自定义 ;
- 河流分布 ( str.asc ) : 流域河流分布的数字信息 ;
- 河流分级 ( stream\_class.dat ) : 各个级别河道的宽度、深度和水分下渗速率共3个参数 ;
- 河流信息 ( stream\_map.dat ) / 河流网络 ( stream\_network.dat ) : 河段位置 , 长度 , 切深、坡向、坡度等信息 ;
- 地表汇流 ( surface\_routing.dat ) : 模式自查运转中生成的驱动文件。



# 3、数据制备-气象输入

气象数据位于met文件夹下

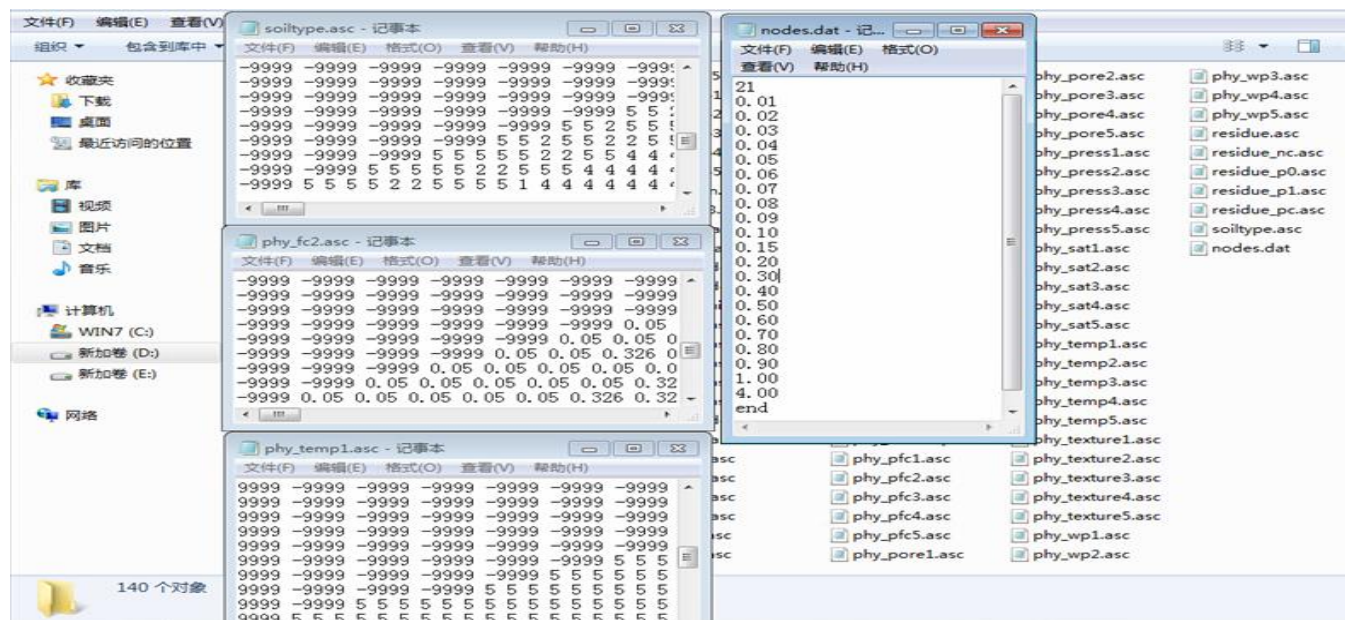
- 包括气象数据 ( xxx.dat ) : 模拟时间步长尺度 ( 3h ) 的气象数据 , 包括短波辐射、长波辐射、气温、降水、风速和相对湿度 ;
- 站点信息 ( Station.dat ) : 气象站名称、坐标、海拔、气象文件路径存储路径信息。



# 3、数据制备-土壤输入

土壤数据位于soil文件夹下

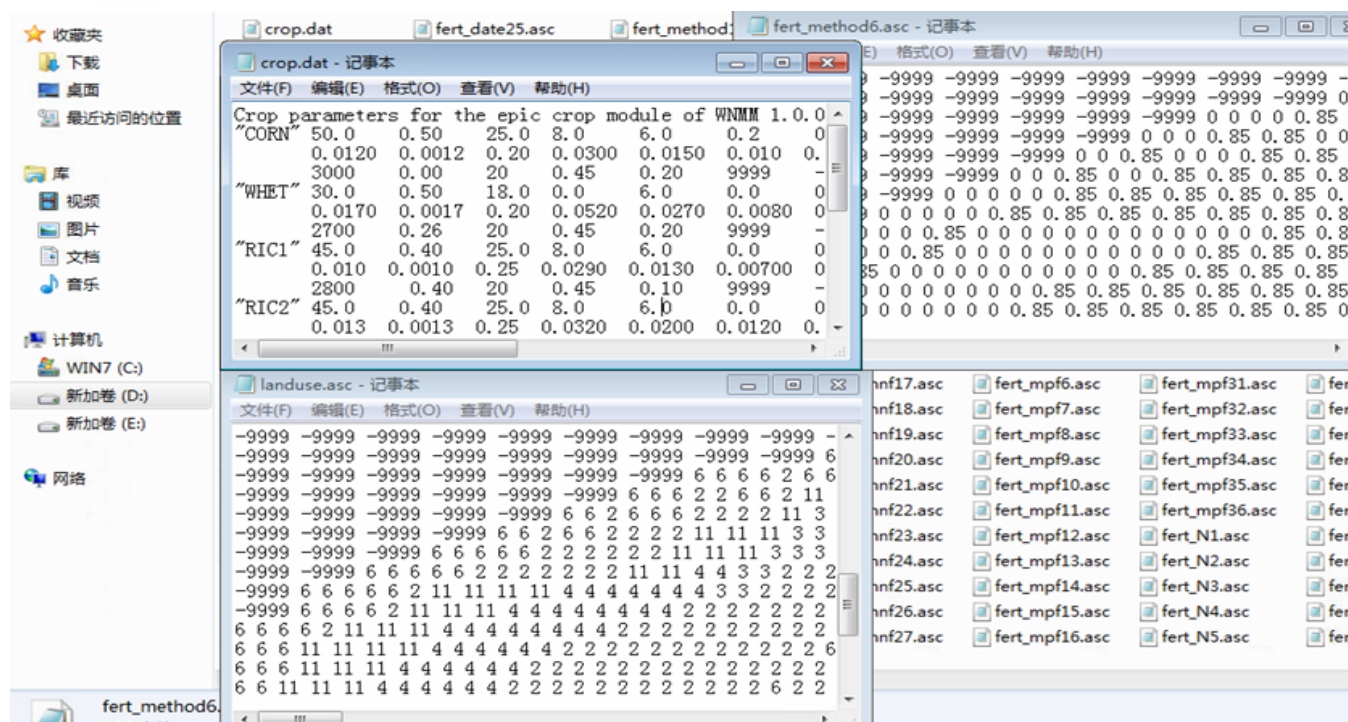
- 土壤类型分布 (soiltype.asc) : 基于流域边界文件将土壤类型矢量分布图栅格化获取 ;
- 土壤分层 (nodes.dat) : 模式运转过程中土壤分层状况描述 ;
- 土壤理化性质 : 不同层次土壤pH、黏粒含量、阳离子交换量、有机质含量、总氮、总磷、容重、饱和含水量、田间持水量、萎蔫系数、纵向饱和导水率, 表层横向饱和导水率等 ;
- 初始条件 : 主要包括初始土壤硝态氮和铵态氮含量、温湿度及秸秆残留量等。



# 3、数据制备-土地利用、植被和管理输入

数据位于land文件夹下

- 土地利用 ( landuse.asc ) : 基于流域边界文件将土地利用类型矢量分布图栅格化获取的 ;
- 作物参数 ( crop.dat ) : 不同作物生物学参数 ( 积温、收获指数、根深、株高、碳氮含量等 ) ;
- 管理措施 : 播种 ( 时间和作物 ) 、收获 ( 时间、作物和秸秆还田比例 ) 、施肥 ( 施肥量、种类、方法和氮磷含量等 ) 、灌溉 ( 灌溉量和时间 ) 、翻耕 ( 时间和作物 ) 等信息。

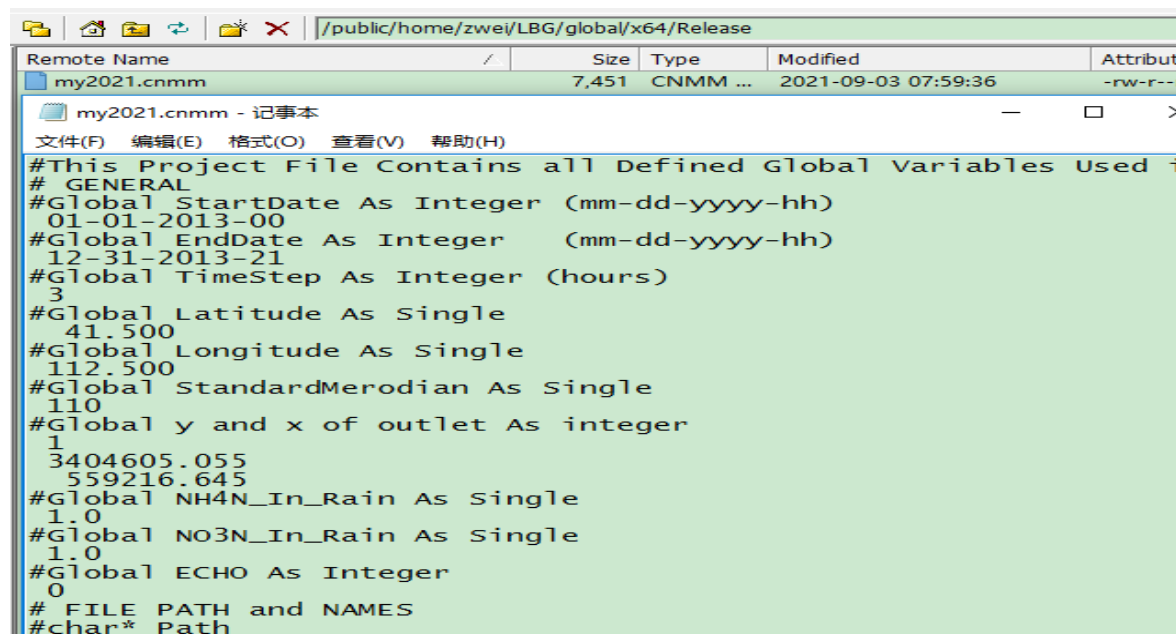




# 3、数据制备-Project文件

Project文件中

- 流域模拟：流域模拟的起止时间、模拟时间步长；
- 流域位置：流域中心点的经纬度、出水口坐标；
- 关键参数：降水中铵态氮和硝态氮浓度，不同物质淋溶系数等；
- 输入输出数据：输入文件（气象、土壤、地形、河流和农田管理）路径、文件名、文件数目和输出文件的路径、文件名及输出格点坐标，其中土壤数据信息还包括输入土壤属性分层信息。



```
#This Project File Contains all Defined Global Variables Used i
# GENERAL
#Global StartDate As Integer (mm-dd-yyyy-hh)
01-01-2013-00
#Global EndDate As Integer (mm-dd-yyyy-hh)
12-31-2013-21
#Global TimeStep As Integer (hours)
3
#Global Latitude As Single
41.500
#Global Longitude As Single
112.500
#Global StandardMerodian As Single
110
#Global y and x of outlet As integer
1
3404605.055
559216.645
#Global NH4N_In_Rain As Single
1.0
#Global NO3N_In_Rain As Single
1.0
#Global ECHO As Integer
0
# FILE PATH and NAMES
#char* Path
```



## 4、结果诊断分析与应用案例

程序编译：

在模式/home/.../global/cnmm目录下进行程序编译，输入命令make。

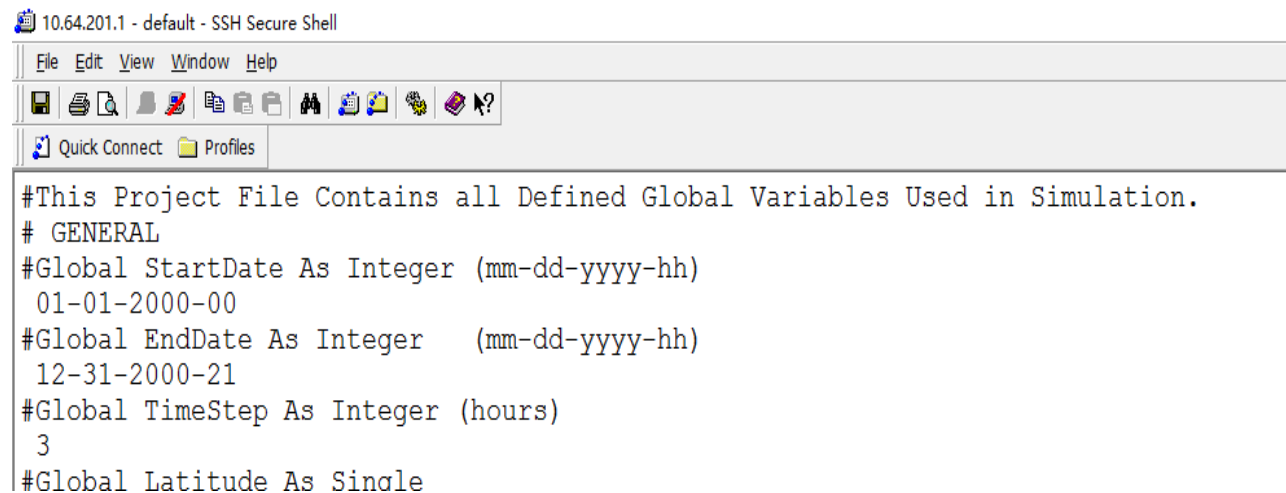
```
[zwei@login01 LBG]$ cd CNMM_dndc_final
[zwei@login01 CNMM_dndc_final]$ cd cnmm
[zwei@login01 cnmm]$ make
g++ -s -w -std=c++11 -fopenmp -fPIC -shared -o libcnmmdndc.so cnmm.cpp
g++ -o cnmmdndc main.cpp -fopenmp -w -std=c++11 -L. -lcnmmdndc
[zwei@login01 cnmm]$
```



## 4、结果诊断分析与应用案例

新建case：

进入到/home/.../global/x64/Release目录下，修改my2021.cnmm文件，设置运行时段。



```
10.64.201.1 - default - SSH Secure Shell
File Edit View Window Help
Quick Connect Profiles
#This Project File Contains all Defined Global Variables Used in Simulation.
# GENERAL
#Global StartDate As Integer (mm-dd-yyyy-hh)
01-01-2000-00
#Global EndDate As Integer (mm-dd-yyyy-hh)
12-31-2000-21
#Global TimeStep As Integer (hours)
3
#Global Latitude As Single
```



# 4、结果诊断分析与应用案例

提交运行：

使用run.slurm命令提交作业运行。run.slurm设置如下：

```
10.64.201.1 - default - SSH Secure Shell
File Edit View Window Help
Quick Connect Profiles

#!/bin/bash
#SBATCH -J LBG_test1
#SBATCH -p normal
#SBATCH -N 1
#SBATCH -n 1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=60
#SBATCH --mem=200G
#SBATCH -o lbg.o%j
#SBATCH -e lbg.e%j
#SBATCH --exclusive

module purge
module load compiler/intel/2017.5.239
#module load mpi/intelmpi/2017.4.239
module load mpi/hpcx/2.7.4/intel-2017.5.239
module load mathlib/hdf5/intel/1.8.20
module load mathlib/zip/intel/2.1.1
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1

#module load ...

export I_MPI_FABRICS=shm:dapl
export I_MPI_DAPL_UD=1
export I_MPI_DAPL_UD_RDMA_MIXED=1
export I_MPI_LARGE_SCALE_THRESHOLD=8192

export I_MPI_DAPL_UD_SEND_BUFFER_NUM=8208
export I_MPI_DAPL_UD_RECV_BUFFER_NUM=8208
export I_MPI_DAPL_UD_ACK_SEND_POOL_SIZE=8704
export I_MPI_DAPL_UD_ACK_RECV_POOL_SIZE=8704
export I_MPI_DAPL_UD_RNDV_EP_NUM=2

export DAPL_UCM_REP_TIME=8000 # REQUEST timer, waiting for REPLY in milliseconds
export DAPL_UCM_RTU_TIME=8000 # REPLY timer, waiting for RTU in milliseconds
export DAPL_UCM_RETRY=10 # REQUEST and REPLY retries
export DAPL_UCM_CQ_SIZE=2000
export DAPL_UCM_QP_SIZE=2000

export DAPL_UCM_DREQ_RETRY=4 #default == 1
export DAPL_UCM_DREP_TIME=200 #default == 200ms
export DAPL_UCM_WAIT_TIME=10000 #default == 60000ms

ulimit -s unlimited

export LD_LIBRARY_PATH=/public/home/zwei/per15/LBG/global/cnmm
./cnmndnc ../x64/Release/my2021.cnmm 0
```

修改运行路径



# 4、结果诊断分析与应用案例

作业运行：

作业运行过程的界面输出结果如下：

```
10.64.201.1 - default - SSH Secure Shell
File Edit View Window Help
Quick Connect Profiles
bashrc_zw casesm.e11049 casesm.e11053 casesm.o11049 casesm.o11053 cnmmdnc libcnmmdnc.so run.slurm test.sh
[zwei@login01 cnmm]$ vi casesm.o11049
Site0 @ y=3458517.300000, x=519419.800000
CNMM memory usage...
field: 110 gb
practice: 5 gb
growth: 3 gb
network: 1896 mb
snow: 674 mb
met: 842 mb
shadow: 84 mb
metweights: 105 mb
channel: 4 mb
field data is allocated.
practice data is allocated.
growth data is allocated.
met data is allocated.
imap data is allocated.
```



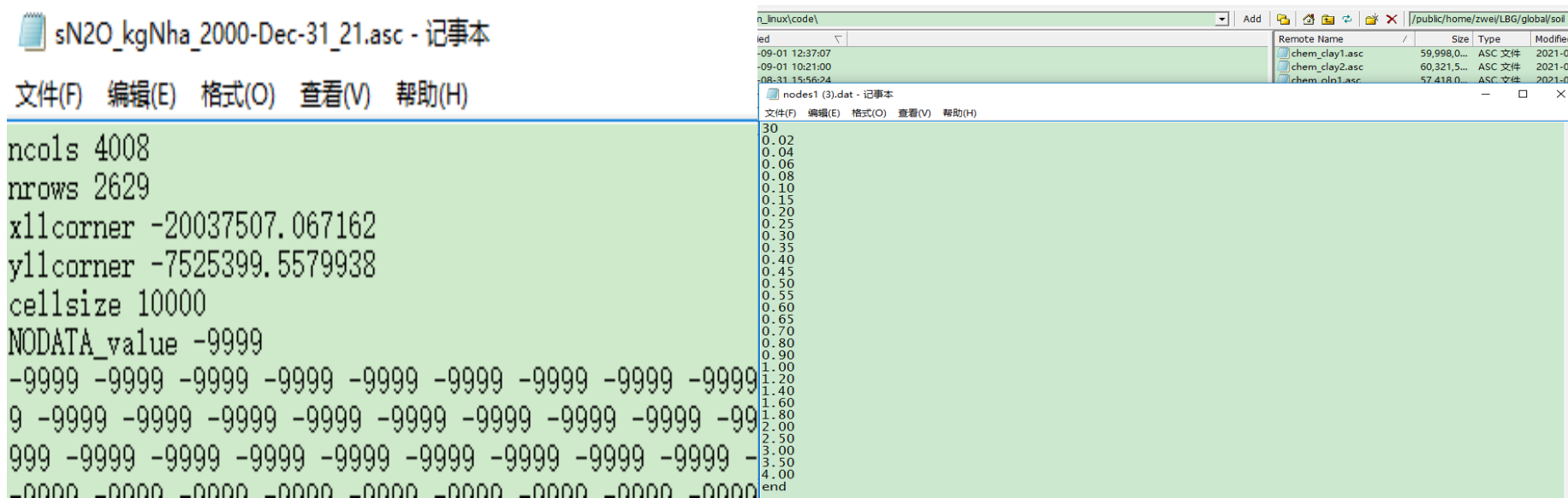
# 4、结果诊断分析与应用案例

可视化结果：分辨率和土壤分层

输出文件均在/home/.../global/output目录下，Log.txt文件输出栅格数目和土壤分层信息。

/home/.../global/output/Grids下的格点输出文件中，cellsize = 10000也给出分辨率为10 km的信息。

查看初始土壤分层文件/home/.../global/soil/nodes.dat，土壤分层信息以及层数（第一行：30）。



The image shows a Linux terminal window and a file explorer. The terminal window displays the contents of a file named 'nodes1 (3).dat', which contains soil layer information. The file explorer shows a directory listing of files in the path //public/home/zwejl/LBG/global/soil.

```
sN2O_kgNha_2000-Dec-31_21.asc - 记事本
文件(F) 编辑(E) 格式(O) 查看(V) 帮助(H)
ncols 4008
nrows 2629
xllcorner -20037507.067162
yllcorner -7525399.5579938
cellsize 10000
NODATA_value -9999
-9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999
9 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -99
999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -9999 -
-0000 -0000 -0000 -0000 -0000 -0000 -0000 -0000 -0000
end
```

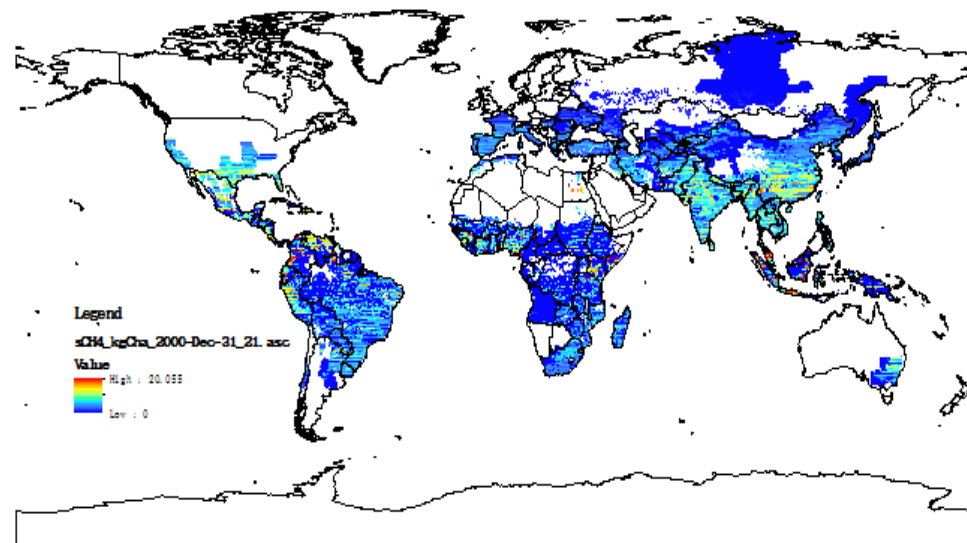
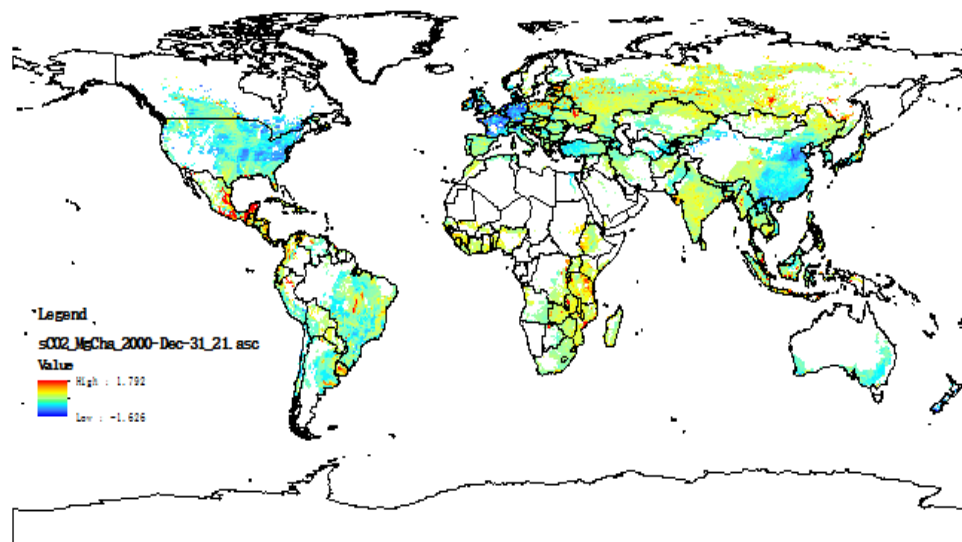
Remote Name	Size	Type	Modified
chem_clay1.asc	59,998,0...	ASC 文件	2021-07-0...
chem_clay2.asc	60,321,5...	ASC 文件	2021-07-0...
chem_clay3.asc	57,418,0...	ASC 文件	2021-07-0...



# 4、结果诊断分析与应用案例

可视化结果：全球尺度模拟结果

在/home/.../global/output/Grids目录下的输出结果为农田CO<sub>2</sub>净交换通量、稻田湿地CH<sub>4</sub>排放通量以及全球N<sub>2</sub>O排放通量。



# 4、结果诊断分析与应用案例

格点逐时结果：

/home/.../global/output/Sites下的输出指定格点的碳氮循环过程详细输出，Site0\_Output\_Carbon.txt为碳循环过程输出文件，Site0\_Output\_Nitrogen.txt为氮循环过程输出文件，包括3小时时间尺度的CO<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub>和N<sub>2</sub>O排放通量。

The screenshot displays a file explorer window showing a directory structure with files like 'Site0\_Output\_Carbon.txt' and 'Site0\_Output\_Nitrogen.txt'. Below the explorer, two text editors are open, showing detailed simulation output data. The left editor shows carbon fluxes (kg C/ha/day\_or\_kg C/ha/year) and the right editor shows nitrogen fluxes (kg N/ha/day\_or\_kg N/ha/year).

boilC_fluxes_(kg_C/ha/day_or_kg C/ha/year)_on and_in_the_soil_profile									
IYear	Iday	Ihour	CO2	CO2_Acc	CH4	CH4_Acc	sumKsd	sumSOC	sumWaC
36648.125	2000	123	0	0.10	0.1	0.00	0.00	1500	143967
36648.250	2000	123	3	0.18	0.3	0.00	0.00	1500	143967
36648.375	2000	123	6	0.21	0.5	0.00	0.00	1500	143967
36648.500	2000	123	9	0.23	0.7	0.00	0.00	1500	143967
36648.625	2000	123	12	0.24	1.0	0.00	0.00	1500	143967
36648.750	2000	123	15	0.24	1.2	0.00	0.00	1500	143966
36648.875	2000	123	18	0.24	1.4	0.00	0.00	1500	143966
36649.000	2000	123	21	0.24	1.7	0.00	0.00	1500	143966
36649.125	2000	124	0	0.24	1.9	0.00	0.00	1500	143966
36649.250	2000	124	3	0.24	2.2	0.00	0.00	1500	143965
36649.375	2000	124	6	0.24	2.4	0.00	0.00	1500	143965
36649.500	2000	124	9	0.23	2.6	0.00	0.00	1500	143965
36649.625	2000	124	12	0.22	2.8	0.00	0.00	1500	143965
36649.750	2000	124	15	0.21	3.0	0.00	0.00	1500	143964
36649.875	2000	124	18	0.21	3.3	0.00	0.00	1500	143964
36650.000	2000	124	21	0.21	3.5	0.00	0.00	1500	143964
36650.125	2000	125	0	0.21	3.7	0.00	0.00	1500	143964
36650.250	2000	125	3	0.21	3.9	0.00	0.00	1500	143964
36650.375	2000	125	6	0.21	4.1	0.00	0.00	1500	143963
36650.500	2000	125	9	0.21	4.3	0.00	0.00	1500	143963
36650.625	2000	125	12	0.20	4.5	0.00	0.00	1500	143963

soilN_fluxes_(kg_N/ha/day_or_kg N/ha/year)_on and_in_the_soil_profile														
IYear	Iday	Ihour	NO	sNO	N2O	N2O_Nit	N2O_Den	sN2O	sN2O_Nit	sN2O_Den	N2	sN2	NH3	sNH3
36648.125	2000	123	0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36648.250	2000	123	3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36648.375	2000	123	6	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36648.500	2000	123	9	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36648.625	2000	123	12	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36648.750	2000	123	15	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36648.875	2000	123	18	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36649.000	2000	123	21	0.0001	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36649.125	2000	124	0	0.0001	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36649.250	2000	124	3	0.0001	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36649.375	2000	124	6	0.0001	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36649.500	2000	124	9	0.0001	0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0003	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36649.625	2000	124	12	0.0005	0.0008	0.0000	0.0000	0.0000	0.0003	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36649.750	2000	124	15	0.0011	0.0019	0.0000	0.0000	0.0000	0.0003	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36649.875	2000	124	18	0.0009	0.0028	0.0000	0.0000	0.0000	0.0003	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36650.000	2000	124	21	0.0008	0.0036	0.0000	0.0000	0.0000	0.0004	0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36650.125	2000	125	0	0.0008	0.0044	0.0000	0.0000	0.0000	0.0004	0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
36650.250	2000	125	3	0.0008	0.0052	0.0000	0.0000	0.0000	0.0004	0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000





谢 谢