



## 区域高精度大气污染模式分系统 培训1 (基础篇：基础环境和操作等)

法人单位：中国科学院大气物理研究所  
承建单位：曙光信息产业（北京）有限公司  
培训时间：2022年05月26日



# 目录



一、区域高精度大气污染模式分系统介绍



二、地球模拟器系统环境和Linux基础



三、参数配置和分系统编译



四、分系统大气污染预报模拟基本操作流程





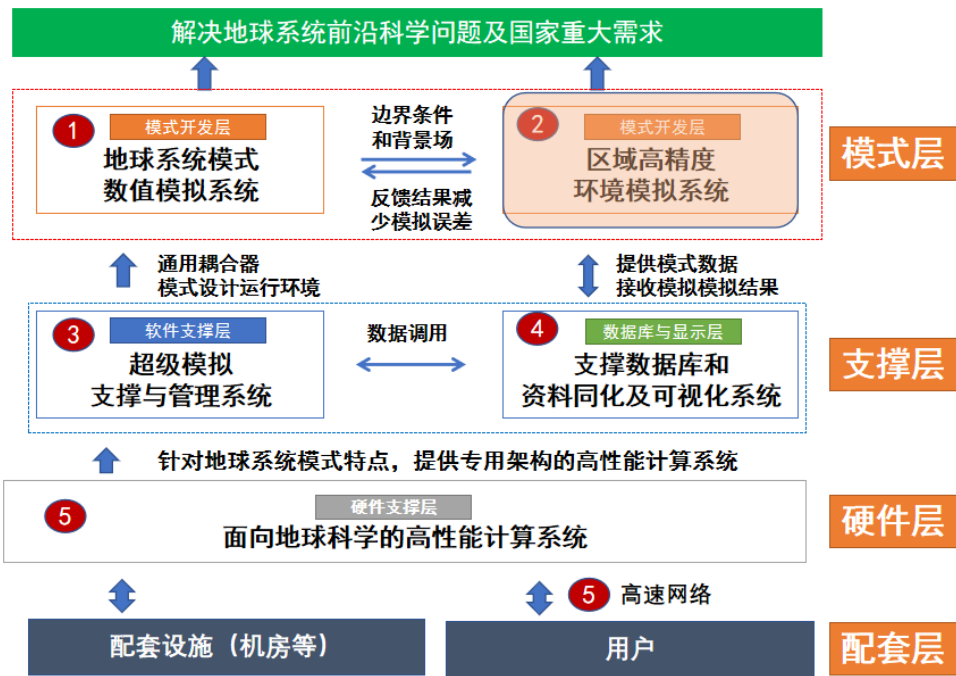
# 一、区域高精度大气污染模式分 系统介绍





# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 系统2:区域高精度环境模拟系统;



## 本项目内容包括:

- 1) 区域高精度大气污染模式分系统;
- 2) 区域云可分辨天气预报模式分系统;



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

◆ 建设单位：中国科学院大气物理研究所

◆ 承建单位：曙光信息产业（北京）有限公司

◆ 合同签订：2019年12月9日

序号	建设内容	子系统描述
1	区域高精度大气污染模式分系统	大气污染模拟总控与初始化子系统 大气污染物理化学过程模拟子系统 大气污染模拟分析子系统 大气污染异构计算子系统

系统名称	合同指标
(一) 区域高精度大气污染模式分系统	空间分辨率：全国3公里城市圈1公里水平分辨率； 垂直层数：垂直层数不少于30层； 气溶胶微物理过程模拟分档：不少于 30 档 非均相化学反应方程数：不少于 20 个； 气相化学反应数不少于100个； 污染来源追踪源区数：不少于20个； 对污染物来源的追踪和量化从空间维度提升到时空维度。





# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## ■ 系统概述

模拟大气污染复杂物理化学过程的相互作用，预报空气质量，量化解析污染源。

## ■ 分系统构成

由4个子系统，41个模块构成

## ■ 分系统建设指标

空间分辨率：全国**3KM**，重点区域**1KM**；

垂直层数：不少于**30层**；

气溶胶微物理过程模拟分档：不少于**30档**；

非均相化学反应方程数：不少于**20个**；

气相化学反应数：不少于**100个**；

污染源追踪源区数：不少于**20个**；





# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 模式存在问题调研和架构设计

完成原型系统相关模块梳理，  
分析原型系统模式**存在问题**



### 缺乏良好的系统软件架构设计

- 大量代码堆砌、模块化不足
- 代码结构不合理扩展性不足
- 无法快速集成新的科研成果
- 容易返工或重建，浪费严重

### 没有统一的编码技术规范

- 编程风格不统一，变量名不规范，开发效率低
- 文档、注释不规范
- 代码难读、难懂
- 代码运行效率低

### 问题历史由来：

- ◆ 科研创新产生的新模型新代码，风格各异；
- ◆ 存在多个版本，各版本支持的模型、功能差异较大
- ◆ 多为科研人员独自开发；
- ◆ 早有整合需要，但无时间、精力进行大规模规范工程化开发；

### 无工程化协同开发流程和管理

- 模式流程不规范，易出错
- 易出现程序运行溢出等错误，影响业务化运行
- 代码版本管理不规范，维护、历史追溯困难
- 无法团队协作

### 对高性能计算的新技术兼容性差

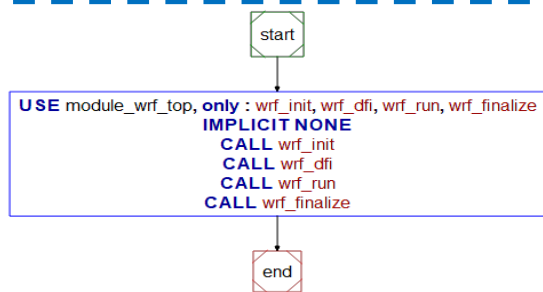
- 不支持向量化、DCU异构等并行计算
- 不支持并行I/O、PnetCDF
- 化学求解器等陈旧，计算效率低



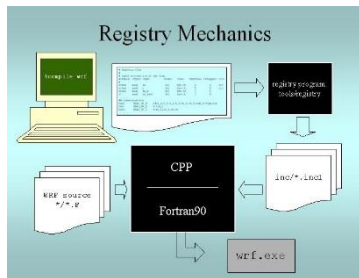
# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 国际先进模式调研

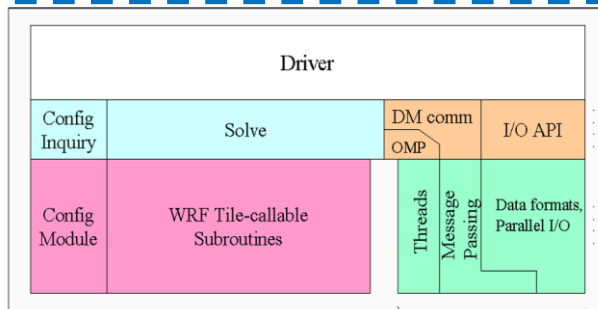
开展**WRF-Chem**、**CMAQ**、**CAMx**模式调研，吸收采纳先进技术。



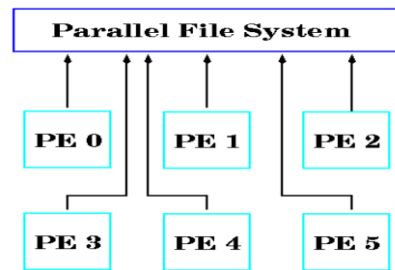
简洁的程序模块设计



Registry: 源代码自动修改, 输出变量管理



代码分驱动、求解、模型三层封装



完全数据并行、共享内存并行，数据格式处理库PnetCDF





# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 结构优化和规范化内容

序号	结构优化和规范化内容	解决问题
1	主程序采用分层结构	降低代码复杂度、提高可读性、可扩展性（参考WRF）
2	组件化、各功能模块化，可插拔	提高程序可扩展性和可修改性
3	代码及版本规范化	增加可读性、易用性、规范性，降低后期开发、维护难度和成本
4	配置参数分类、模块化	提高易用性和生产效率（WRF）
5	变量分类、封装	提高易用性和可修改性
6	按需编译、并行模式可选	提高易用性
7	功能集成等	满足详细设计中功能模块要求 KPP（WRF、CMAQ）



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 性能优化内容

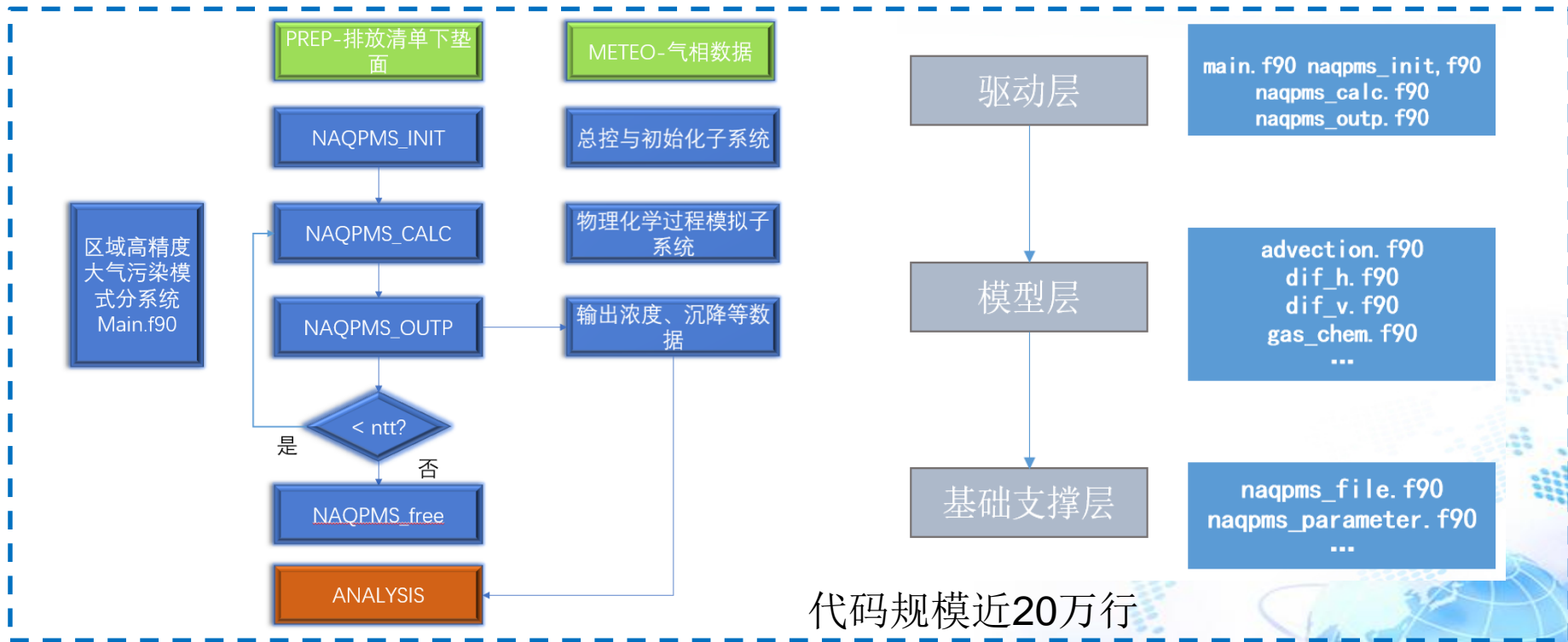
序号	性能优化内容	解决问题
1	采用并行数据格式处理库PnetCDF 读写优化	提高读写速度, 支持nc数据格式 (CMAQ等)
2	增加支持异构并行模块	利用平台的DCU等硬件提高并行效率
3	通信优化	提高通信速度
4	并行分区优化	提高并行加速比、效率
5	向量化	提高并行加速比、效率



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 大气污染模式系统分层架构开发

大气污染模式系统具备国际先进模式类似的**分层架构、扩展性、可读性改善**；





# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 模式代码开发

系统模式基础框架和各模块封装：完成系统基础框架代码优化，解决问题：大量代码堆砌、模块化不足

区域高精度  
大气污染模式分  
系统  
Main.f90

NAQPMS\_INIT

总控与初始化  
子系统

NAQPMS\_CALC

物理化学过程  
模拟子系统

NAQPMS\_OUTP

格式化输出模  
块

NAQPMS\_FREE

内存释放



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 模式代码开发

**系统模式基础框架和各模块封装：对各种变量进行合理的分类和模块化**

naqms\_parallel

naqms\_grids

naqms\_time

naqms\_boudaries

naqms\_parameters

naqms\_speciesinfo

naqms\_communication

naqms\_gridinfo

naqms\_metfields

naqms\_varlist

naqms\_file

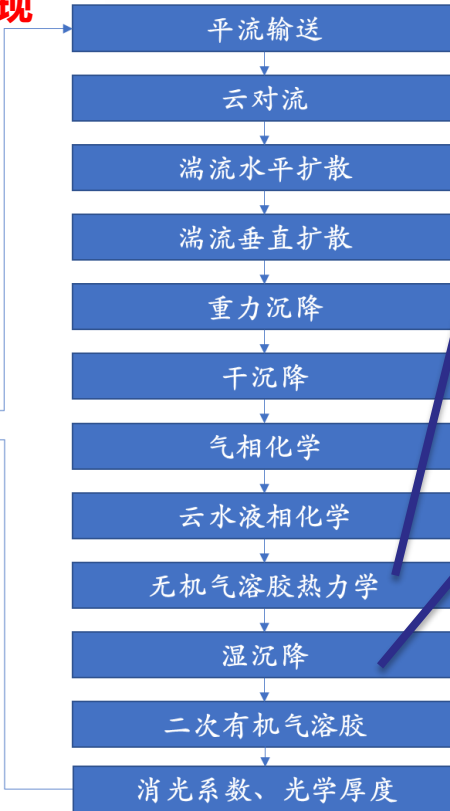
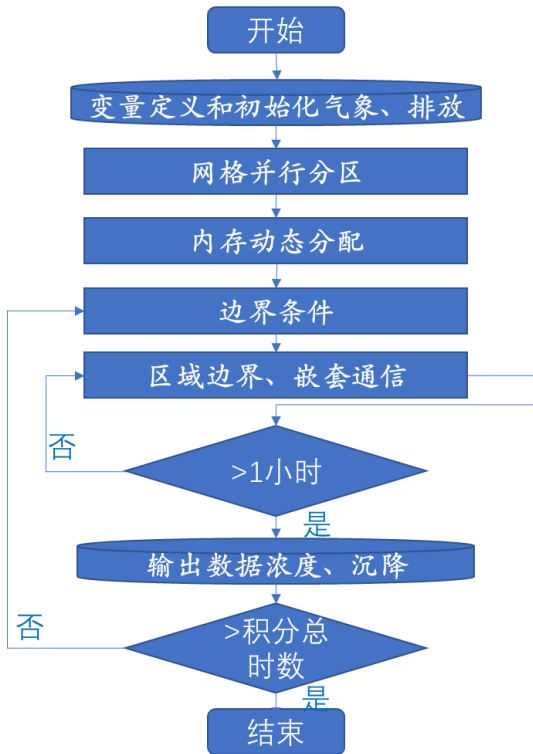
naqms\_control



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 模式代码开发

### 物理化学过程模块化设计和实现



## 各模块可插拔式设计

```

392 !>inorganic aerosol, isorropia
393 call inorganic_aer
394
395 !>process analysis for inorganic aerosol partitioning
396 if(lprocess) then
397   do k=1,nzz
398     do ig=1,iprinttermgas ! for isorropia
399       igg=iggpos(ig)
400       i04=ip4mem(k,igg,ne)
401       i05=ipgastermbal(k,22,ig,ne) ! 22 for inorganic aerosol partitioning
402       call termbal(myid,gasold(i04),gas(i04),gastermbal(i05), &
403         k,sx(ne), ex(ne), sy(ne), ey(ne),nx(ne),ny(ne),dt)
404     enddo
405   enddo
406 endif
407
408 !>wet deposition
409 call wet_dep
410
411 !>process analysis for wet deposition
412 if(lprocess) then
413   do k=1,nzz
414     do ig=1,iprinttermgas ! for wetdep process
415       igg=iggpos(ig)
416       i04=ip4mem(k,igg,ne)
417       i05=ipgastermbal(k,8,ig,ne) ! 8 for wetdep
418       call termbal(myid,gasold(i04),gas(i04),gastermbal(i05), &
419         k,sx(ne), ex(ne), sy(ne), ey(ne),nx(ne),ny(ne),dt)
420     enddo
421   enddo
  
```





# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 程序规范化

在空行、空格、成对书写、缩进、  
对齐、代码行、注释七方面的书写规范

文件和模块注释

子例程、函数注释

!> 功能描述

!> 输入参数

!> 输出参数

!> 拓扑关系 (调用、被调用关系)

!> 修改历史

子例程、函数中单个语句、变量注释

!> 上一行 或者 语句后

```
1 |> @file main.f90
2 |> @brief Nested Air Quality Prediction Modeling System(NAQPM5)
3 |> @development_organization Institute of Atmospheric Physics Chinese Academy of Sciences
4 |> @copyright
5 |> @references
6 |> Wang, Z., T Maeda, M Hayashi, LF Hsiao, KY Liu. (2001). A nested air quality prediction modeling system
7 |> for urban and regional scales: Application for high-ozone episode in Taiwan. Water Air and Soil Pollution. 130(1-4): 391-396.
8 |> @contents
9 |>   para_init -- MPI initialization
10 |>   init      -- prepare initial data and control parameters
11 |>   calc      -- calculate and write out data for postprocessing
12 |>   outp      -- write out data for analysis
13 |>   free      -- free allocated memory and cleanup
14 |> @history
15 |>   202007 Architecture group -- redesign the structure and rewrite the main program
16
17 program naqpm5
18
19   use naqpm5_init
20   use naqpm5_calc
21   use naqpm5_outp
22   use naqpm5_free
23   use naqpm5_time, only: ntt
24   use naqpm5_parallel
25
26   implicit none
27
28   #ifdef TIME_OPT
29     double precision :: calsta, calst, calend, calinv, call
30     !> double precision,dimension(15) :: caltime !cal time for every part1
31   #endif
32
33   integer :: it1
34
35   #ifdef TIME_OPT
36     calsta = 0.
37     calst = 0.
38     calend = 0.
39     calinv = 0.
40     call1 = 0.
41   #endif
42
43   call para_init
44
45   #ifdef TIME_OPT
46     !> begin of initialization
47     if (myid == 0) then
48       calsta = mpi_wtime()
49     end if
50   #endif
51
52   call init
```





# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 总控与初始化子系统-随机扰动模块

### 功能:

各参数误差概率分布, 随机抽取集合样本,

供敏感性分析、不确定性分析和集合预报使用

### 扰动的变量个数:

气象变量8个

初始值6个

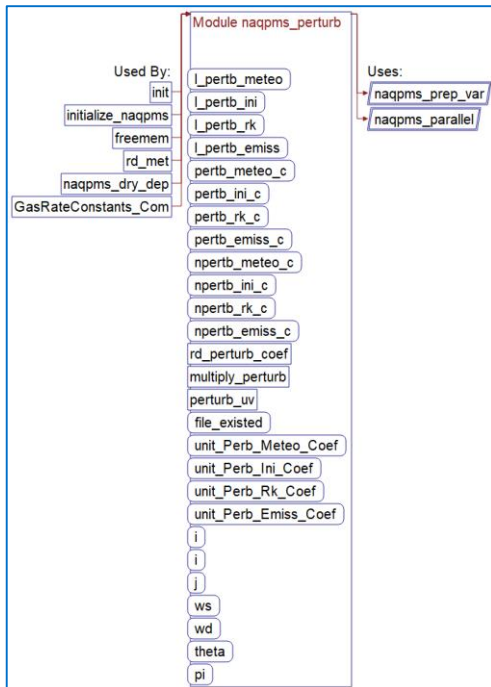
化学反应变量173个

### 优点:

程序模块化封装

输入文件配置灵活

## 代码模块调用



## 编码

```

155 subroutine multiply_perturb(a, sx, ex, sy, ey, pertb_c)
156 !> Function:
157 !> handle the original input data with perturbation coefficients.
158 !>
159 !> Routines called:
160 !>
161 !> Called by:
162 !> rd_met
163 !>
164 implicit none
165 integer sx, ex, sy, ey
166 real a(sx-1:ex+1,sy-1:ey+1)
167 real pertb_c
168 do i= sx,ex
169     do j= sy,ey
170         a(i,j)=a(i,j)*pertb_c
171         ! print*,a(i,j),i,j
172     enddo
173 enddo
174
175
176 return
177 end subroutine multiply_perturb

```



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 物理化学过程模拟子系统-气相化学模块

气相化学模块：CBM-Z前体物气相化学反应**173**个

- 污染物种类 74
- 气相化学支持 LSODE、MBE等求解器
- 支持CBM-Z、简单硫化学机制

分类	化学反应系数计算代码	分类	化学反应系数计算代码
背景大气	rk_com(1) = rk_photo(jphoto_no2)	生物源	rk_bio(1) = ARR(2.6e-11, 409.)
74个	rk_com(2) = rk_photo(jphoto_no3)	20个	rk_bio(2) = ARR(1.2e-14, -2013.)
	rk_com(3) = rk_photo(jphoto_hono)		rk_bio(3) = ARR(3.0e-12, -446.)
	.....		.....
	rk_com(72) = (4.0e-12)		
	rk_com(73) = ARR(4.5e-13, 1000.)		rk_bio(19) = ARR(7.44e-17, 821.)
	rk_com(74) = rk_param(jc2o3)		rk_bio(20) = ARR(6.642e-12, -175.)
分类	化学反应系数计算代码	分类	化学反应系数计算代码
城市	rk_urb(1) = 8.1e-13	海洋	rk_mar(1) = 9.60e-12 * exp(-234./te)
44个	rk_urb(2) = rk_photo(jphoto_aone)	35个	rk_mar(2) = 1.40e-13 * exp(500./te)
	rk_urb(3) = te**2*ARR(5.3e-18, -230.)		rk_mar(3) = 1.26e-11 * exp(409./te)
	.....		.....
	rk_urb(42) = rk_param(jnap)		rk_mar(33) = 0.0
	rk_urb(43) = rk_param(jxo2)		rk_mar(34) = 0.0
	rk_urb(44) = 1.0e-11		rk_mar(35) = 0.0

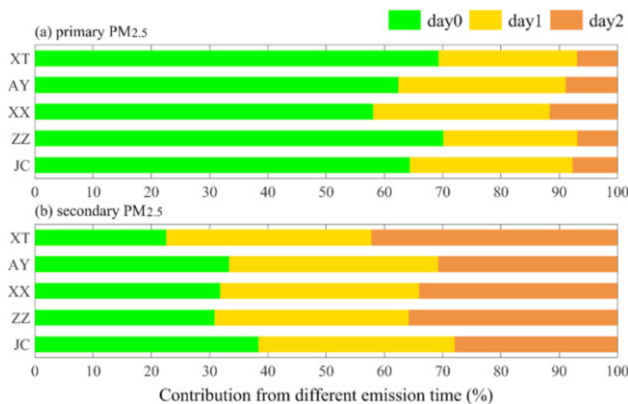
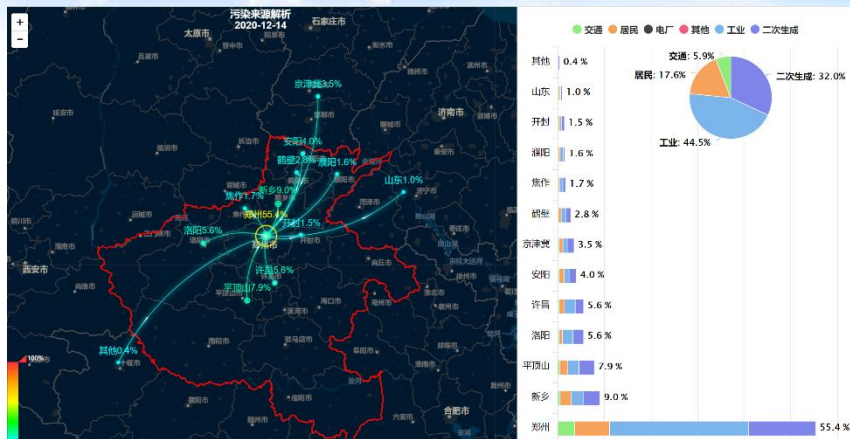


# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 集成分析子系统-污染源在线追踪解析模块

在线源追踪的源区数**40**个

ID	城市地区	备注(包含的地区)
1	北京	北京市
2	天津	天津市
3	石家庄	石家庄市
4	唐山	唐山市
5	秦皇岛	秦皇岛市
6	邯郸	邯郸市
7	邢台	邢台市
8	保定	保定市
9	张家口	张家口市
10	承德	承德市
11	沧州	沧州市
12	廊坊	廊坊市
13	衡水	衡水市
14	山西	山西省
15	内蒙古	内蒙古自治区
16	辽宁	辽宁省
17	山东	山东省
18	河南	河南省





# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

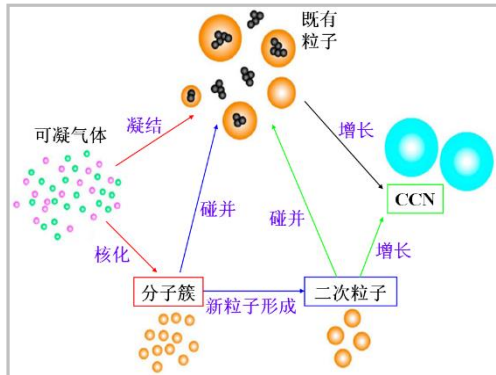
## 物理化学过程模拟子系统-气溶胶分档模块

### 气溶胶微物理过程模拟分40档

颗粒物形成与粒径大小演变

气溶胶微物理过程 APM

- 离子诱导成核机制
- 考虑动态凝结-蒸发过程
- 考虑化学成分吸湿增长
- Jacobson (1994) 方案  
考虑碰并过程
- 云凝结核数目模拟



气溶胶分40档编码

```

418  !> # of various APM tracers, can be organized in a better way later
419
420  NGCOND=1  !> Number of condensable gases
421  NSO4=40   !> Number of bins for sulfate or secondary particles
422
423  NCTSO4=0   !> Number of tracers associated with coating on SO4
424  NCTBCOC=2 !> Number of tracers associated with coating on BCOC
425  NCTDST=1  !> Number of tracers associated with coating on DUST
426  NCTSEA=1  !> Number of tracers associated with coating on Sea salt

721  NMAX = NSO4
722  DO I = 1, NMAX
723      IF(I.EQ.1) THEN
724          RDRY(I) =RMIN
725      ELSEIF(RDRY(I-1).LE.RDRY_TR) THEN
726          YVRAT(I-1)= VRAT
727          RDRY(I) = RDRY(I-1)*YVRAT(I-1)**THIRD
728      ELSE
729          YVRAT(I-1) = YVRAT(I-2) * RATIOVRAT
730          IF(YVRAT(I-1).GT.YVRATMAX) YVRAT(I-1) = YVRATMAX
731          RDRY(I) = RDRY(I-1)*YVRAT(I-1)**THIRD
732      ENDIF
733  VDRY(I)=4.d0/3.d0*3.1416d0*(RDRY(I)**3.d0)  ! m3
734  IF(I.EQ.NMAX) YVRAT(I) = YVRAT(I-1)
735  ENDDO

```



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

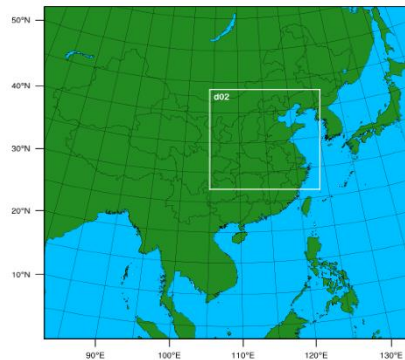
## 高分辨率结果

**嵌套区域** :D1区域包括了南海, D2区域可包括京津冀、长三角、珠三角等重点关注区域 (可按需要进行设置)。

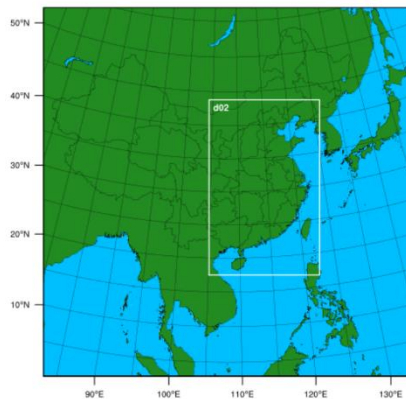
```
&geogrid
parent_id      = 1, 1,
parent_grid_ratio = 1, 3,
i_parent_start = 1, 900, 0,
j_parent_start = 1, 550, 0,
e_we          = 2000, 1801, 0,
e_sn          = 2000, 2851, 0,
geog_data_res = 'default', 'default',
dx = 3000,
dy = 3000,
map_proj = 'lambert',
ref_lat  = 30.0,
ref_lon  = 108.0,
truelat1 = 15.0,
truelat2 = 45.0,
stand_lon = 108.0,
```



WPS Domain Configuration



WPS Domain Configuration

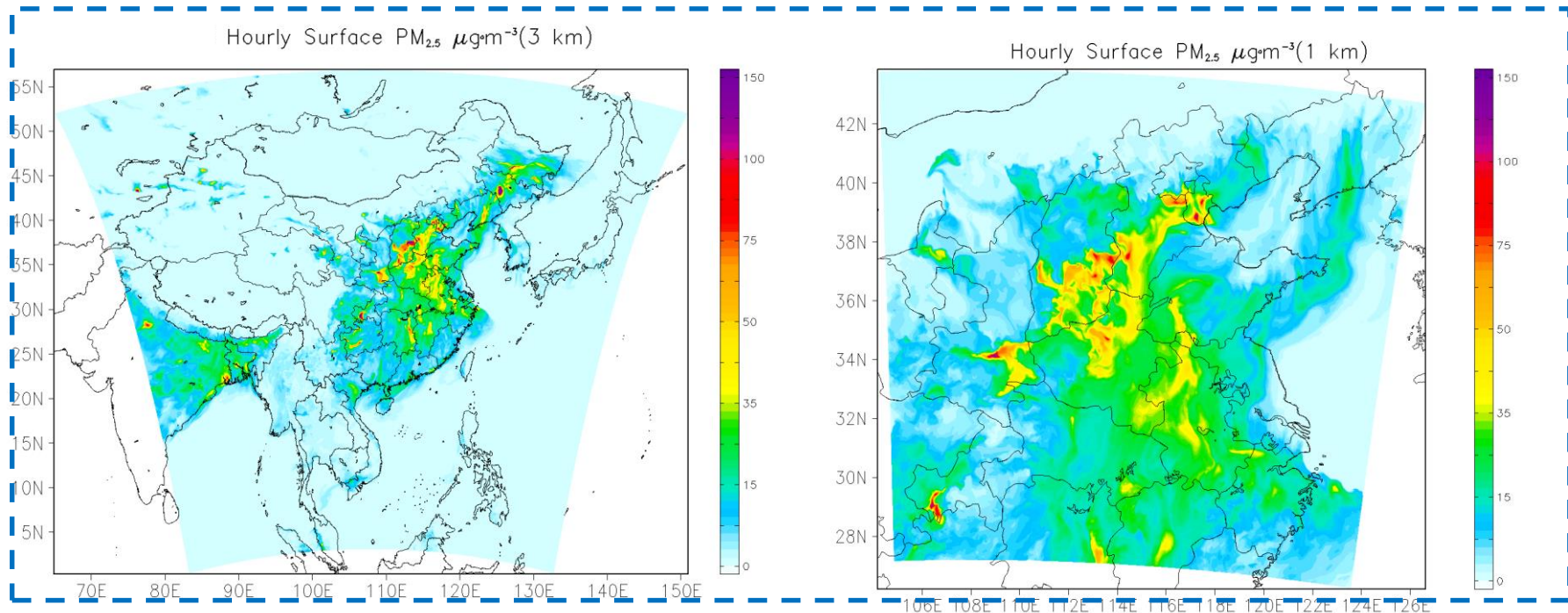




# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## 高分辨率结果

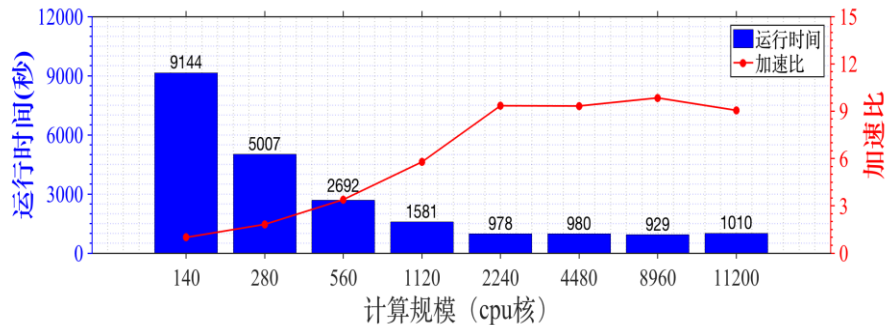
系统具备高精度模拟能力，系统可运行**全国3km**，**局部重点区域1km**的大气污染模拟



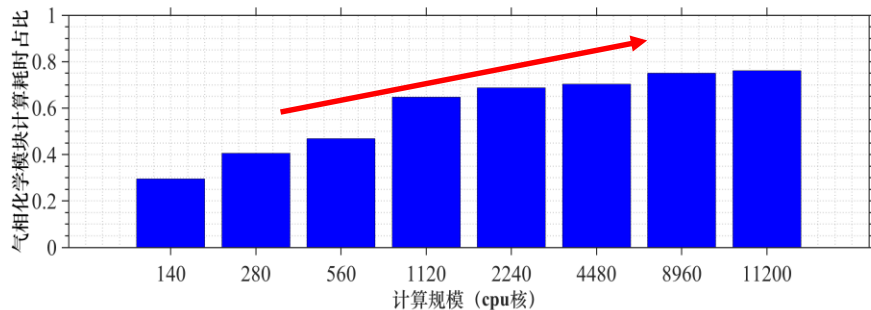


# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

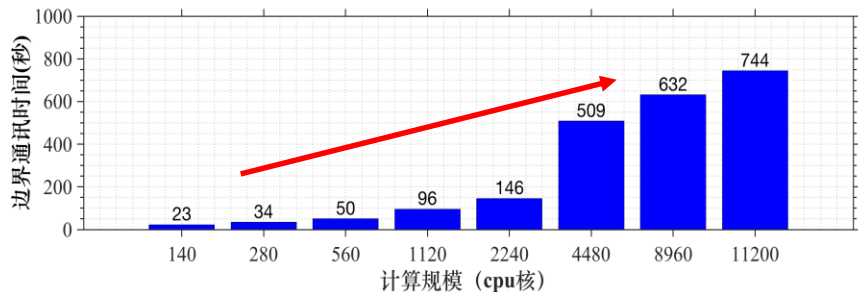
## • 模式运行总时间及加速比测试



## • 气相化学模块计算耗时测试



## • 边界通信开销测试



- ✓ 影响模式并行可拓展度的主要因素为**MPI边界通信开销大、气相化学模块计算负载不均衡。**



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## CPU并行加速模块

### 系统模式分区方式优化和扩展：

- ◆ 并行分区采用自动分区方式；
- ◆ 增加了分区方式优化算法推荐的分区方式；
- ◆ 也可以进行人为给定x,y两个方向的分区数；

核心数60，二维可能的分配方案：

不推荐方案

nproc_x=	1	nproc_y=	60
nproc_x=	2	nproc_y=	30
nproc_x=	3	nproc_y=	20

推荐的方案

nproc_x=	4	nproc_y=	15
nproc_x=	5	nproc_y=	12
nproc_x=	6	nproc_y=	10

...

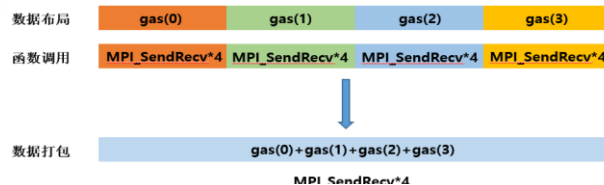




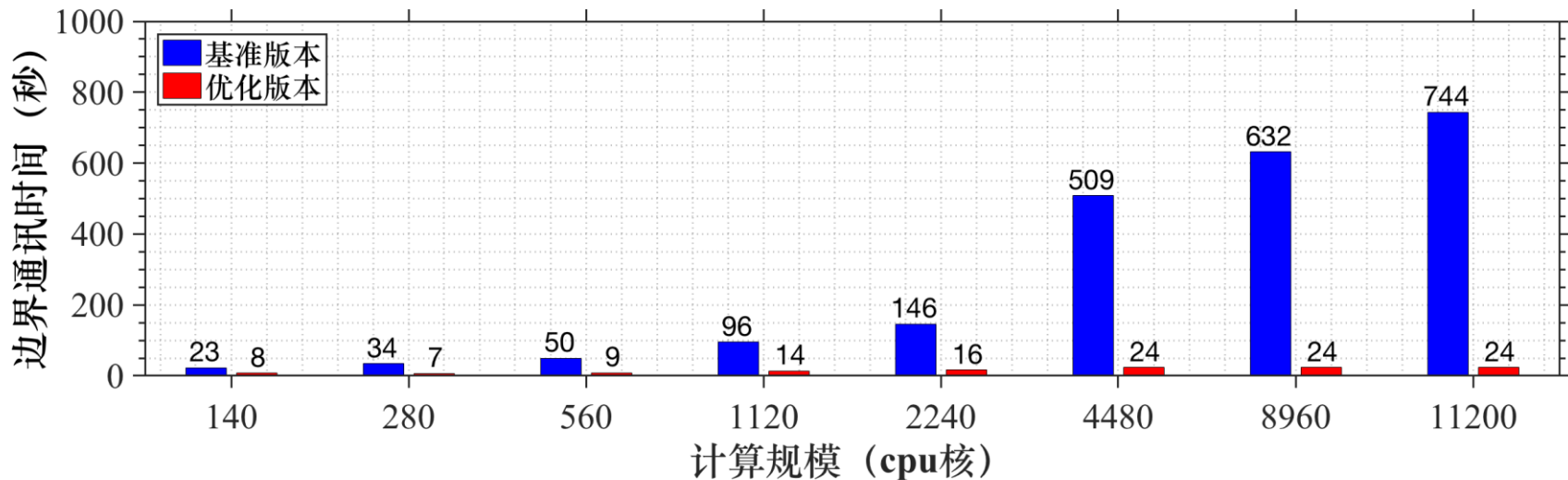
# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

## CPU并行加速模块

- 通过**数据打包**、**压缩**的方式减少MPI通信次数和通信量；



优化前后通信开销对比



- ✓ MPI通信优化后，当运行规模拓展至4000核以上，**通信开销基本不随核数变化**

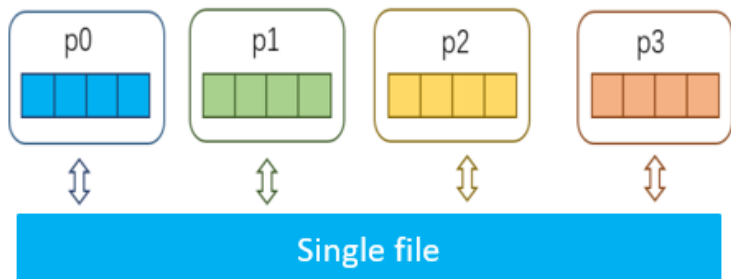


# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

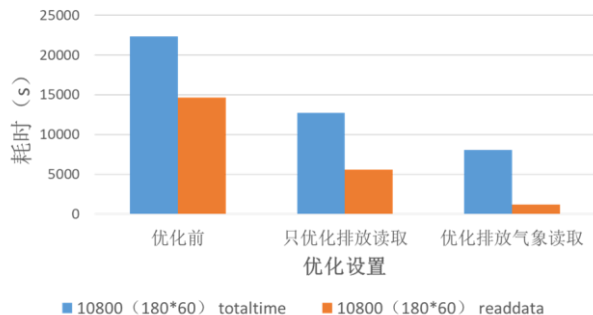
## CPU并行加速模块

### 数据读取优化

将每个mpi进程对应的网格区域映射到气象场数据集上的对应区域，减少进程不必要的冗余数据读取



时间统计



### 采用异构输出方式

优化系统中多变量、大数据量的数据输出  
合并为一次输出，并支持netcdf格式



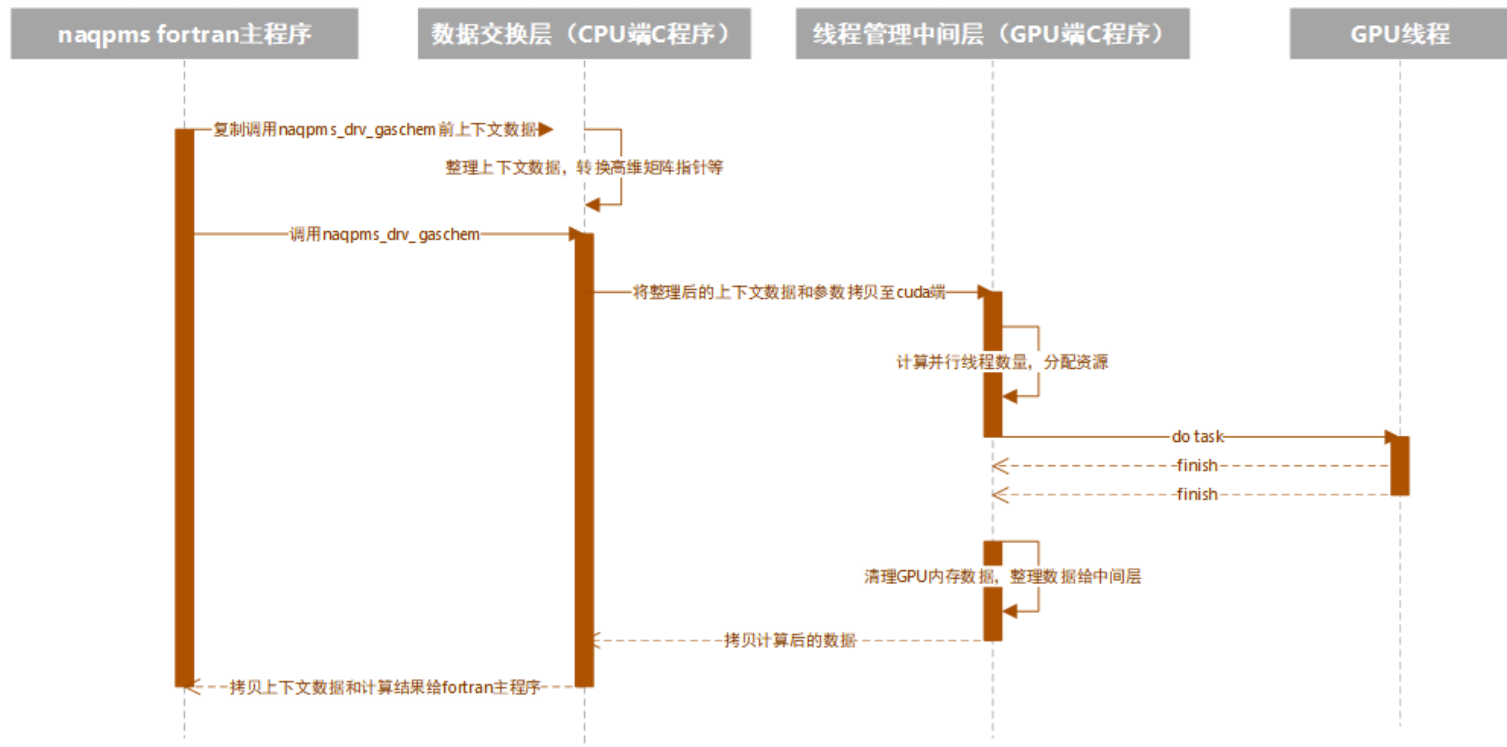
水平分辨率 全国3公里 (D1区域)  
重点区域1公里 (D2区域)  
优化后:

计算速度总体提升**2.7**倍  
数据读写加速**12.5**倍  
耗时约 **0.7**小时/模式天



# 一、区域高精度大气污染模式分系统介绍

LSODE求解器计算量大，气相化学模块成为了NAQPMS系统的效率瓶颈  
CPU-GPU异构计算方法





## 二、地球模拟器系统环境介绍 和Linux基础





# 地球模拟器系统环境介绍

## 地球模拟器硬件环境：

◆ 国产x86硬件；

		硬件环境配置信息				
硬件配置	序号	硬件类型	服务器用途	CPU	内存/存储	节点数量
	1	计算节点	应用服务器	2*Hygon C86 7185 32-core Processor	256GB	1960
	2	计算节点	应用服务器	2*Hygon C86 7185 32-core Processor	512GB	120
	3	计算节点	应用服务器	2*Hygon C86 7185 32-core Processor	1024GB	120
	4	计算节点	应用服务器	2*Hygon C86 7185 32-core Processor 2*DCU加速卡	128GB	120
	5	存储节点	存储服务器	2*Hygon C86 7185 32-core Processor	2PB	-



# 地球模拟器系统环境介绍

## 地球模拟器软件环境

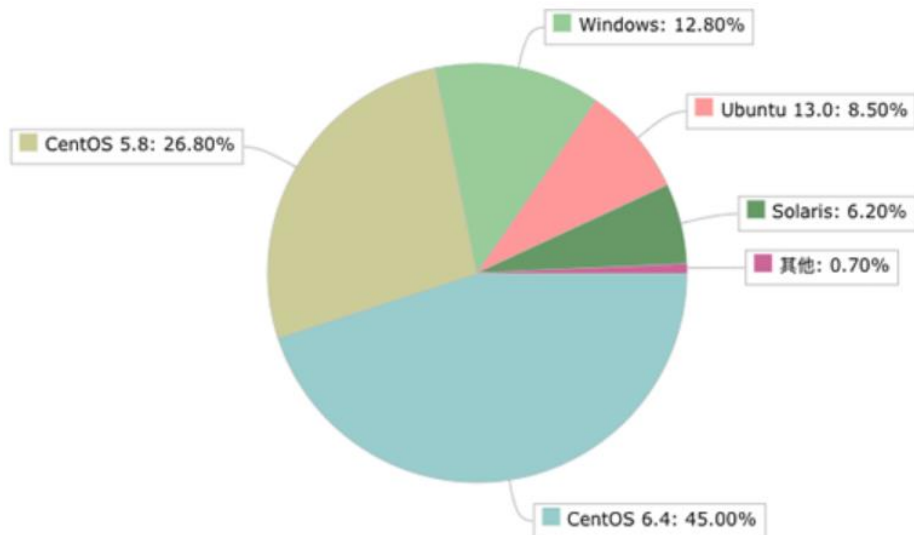
操作系统	CentOS 7.4
Kernel版本	3.10.0-693.el7.x86_64
编译器:	GCC 7.2.1 20170829 (Red Hat 7.2.1-1) Intel Fortran compile/ifort (IFORT) 17.0.5 20170817及以上
UCX	1.6.0
MPI	Intelmpi/2017.4.239及以上
监控与作业调度系统	Gridview (4.1.1.51379.20181026) / Torque PBS (version 6.1.1.1)
ROCm环境	ROCm 3.8/ROCm 3.9/ROCm 4.0
应用服务器	Python 3.8.3/NCL 6.6.2/Matlab/R version 3.6.1/IDL84envi52/MySQL5.7以上/redis5以上/nginx/ Distrib 5.5.56-MariaDB, for Linux (x86_64) using readline 5.1 Jdk 1.8.171
数据库服务器	Postgresql 12.1



# Linux基础

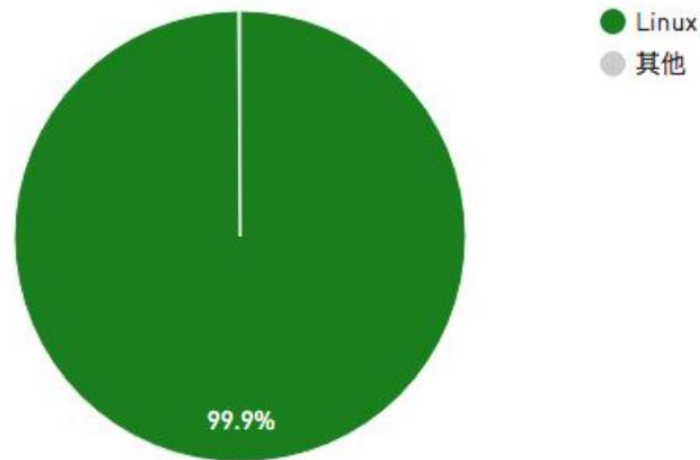
## Linux系统:

- ◆ Linux, 全称GNU/Linux, 免费使用、自由传播;
- ◆ 安全, 稳定;
- ◆ 服务器和HPC领域主流系统;



服务器操作系统市场份额  
(<http://c.biancheng.net>)

Operating system Family Performance Share



HPCTop500的统计数据



## Linux有多个发行版本

### CentOS系统:

- ◆ 源于Red Hat Enterprise Linux (RHEL) 依照开放源代码（大部分是GPL开源协议）规定释出的源码所编译而成、自由传播；
- ◆ 硬件驱动等支持较好；
- ◆ 历史因素；





## Linux系统:

- ◆ 一切都是文件;
- ◆ 系统中拥有小型, 单一用途的程序。(一个个单独的命令);
- ◆ 当遇到复杂任务,通过不同功能用途的程序组合起来完成;
- ◆ 避免令人困惑的用户界面 (Linux命令行更好用, 更稳定) ;
- ◆ 配置文件都存储在文本中, 方便增删改查;
- ◆ 不在乎后缀名, 有没有都无所谓 (不是通过后缀名来定义文件的类型) 。



## Linux常用命令:

- ◆ **pwd命令**——显示用户当前目录的完整路径
- ◆ **cd命令**——切换工作目录
- ◆ **相对路径和绝对路径**

**绝对路径**是以根（/）开头的路径，无论文件在哪都能准确找到

如：`cd /opt`

**相对路径**是以当前路径为起点往下找文件

如：`cd ../opt`

- ◆ **ls命令**——列出目录内容命令



## Linux常用命令：

- ◆ `mkdir` —— 建立新文件夹
- ◆ `touch`命令 —— 创建新文件命令（文件内容为空）
- ◆ `cp`命令 —— 复制文件或目录命令
- ◆ `rm`命令 —— 删除文件或目录命令
- ◆ `mv`命令 —— 移动文件或目录命令
- ◆ `ln` —— 创建链接文件



## Linux常用命令：

- ◆ `alias`——设置别名
- ◆ `export`——设置别名
- ◆ `du`——显示当前目录及其子目录所占空间大小
- ◆ `which`——查找命令文件存放目录
- ◆ `find`——查找文件或目录
- ◆ `grep` ——查找文本文件内容



### 三、参数配置和分系统编译





# 参数配置和分系统编译

## 运行和使用本系统软件所需要基础支持软件

- 操作系统：CentOS Linux release 7.6.1810 (Core)
- Fortran编译器：Intel Fortran compile/ifort (IFORT) 17.0.5 20170817及以上
- Intelmpi/2017.4.239及以上 或者 与之兼容的 hpcx 编译器2.7.4以上版本
- netcdf等库
- vi/vim等文件文档查看软件
- make等程序编译命令软件
- GrADS/NCL等数据处理绘图软件



## 支持软件的环境配置

- Fortran编译器和mpi环境配置

```
module purge
module load compiler/intel/2017.5.239
module load mpi/intelmpi/2017.4.239
```

- netcdf环境配置

```
module load mathlib/libpng/intel/1.2.12
module load mathlib/jasper/intel/1.900.1
module load mathlib/hdf5/intel/1.8.20
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1
```



## 支持软件的环境配置

- ncl环境配置

```
module load apps/ncl_ncarg/6.3.0
```

- GrADS环境配置

```
GRADS=/data/tangxiao/yuff/yufenfen/software  
export PATH=${GRADS}/grads-2.0.a8/bin:$PATH  
export GADDIR=${GRADS}/grads-2.0.a8/dat  
export GASCRP=${GRADS}/grads-2.0.a8/lib
```





## 获取区域高精度大气污染模式分系统

- 登录地球模拟器VPN

/data/tangxiao/高精度大气污染模式系统/system/Core

通过ssh 连接到 密云服务器 10.64.201.\*

目前有v1.0 到 v1.6 多个版本

```
[tangxiao@login02 ~]$ cd /data/tangxiao/高精度大气污染模式系统/system
[tangxiao@login02 system]$ ls
Core Doc Pre Sample Tool  第一步_请阅读本说明.txt.md
```

```
[tangxiao@login02 Core]$ ls
gnaqpms                                GNAQPMS_v1.6.1
GNAQPMS_v1.5.0                        GNAQPMS_v1.6.1.tar.gz
GNAQPMS_v1.5.0.tar.gz                 other
GNAQPMS_v1.5.2.4.2_for_simulationgroup_sm.tar.gz  region_highres_airpollution.v1.0
GNAQPMS_v1.6.0                        src_region_highres_airpollution_v1.1.tar.gz
```



## 获取区域高精度大气污染模式分系统

- 项目上提供的光盘

创建系统挂载点 `mkdir /mnt/cdrom` ；

挂载镜像 `mount -t iso9660 -o loop /dev/cdrom /mnt/cdrom`

将【区域高分辨率大气污染模式】目录复制出来：

在Linux命令行输入命令：`cp -ar 区域高分辨率大气污染模式 .`



## 编译区域高精度大气污染模式分系统

- 1) 在Linux命令行输入如下命令 `mkdir test` 建立测试算例文件夹
- 2) 把高精度大气污染模式源代码复制到test/中
- 3) 进入test/src, 执行make

```
[tangxiao@login01 Core]$ cd region_highres_airpollution.v1.0
[tangxiao@login01 region_highres_airpollution.v1.0]$ ls
basic  makefile  naqpms.input  naqpms.input_sm_31km  phys_chem_proc  README.md  README.naqpms.namelist
[tangxiao@login01 region_highres_airpollution.v1.0]$ make
mpiifort -O3 -cpp -DTIME_OPT -DVEC_OPT -DKNL_OPT -DOPT_CBMZ -DOUT_SIMP26 -DTIMING -I./phys_chem_proc/other/gaschem -I./phys_chem_proc/other/mbe -I/public/software/mpi/intelmpi/2017.4.239/intel64/bin/include64 -I./phys_chem_proc/other/include -I./phys_chem_proc/other/apm_phys_box/src -I./phys_chem_proc/other/apm_dyn -lp -traceback -w -ftz -fno-alias -fno-fnalias -g -safe_cray_ptr -convert big_endian -c basic/naqpms_glblrun.f90 -o basic/naqpms_glblrun.o
mpiifort -O3 -cpp -DTIME_OPT -DVEC_OPT -DKNL_OPT -DOPT_CBMZ -DOUT_SIMP26 -DTIMING -I./phys_chem_proc/other/gaschem -I./phys_chem_proc/other/mbe -I/public/software/mpi/intelmpi/2017.4.239/intel64/bin/include64 -I./phys_chem_proc/other/include -I./phys_chem_proc/other/apm_phys_box/src -I./phys_chem_proc/other/apm_dyn -lp -traceback -w -ftz -fno-alias -fno-fnalias -g -safe_cray_ptr -convert big_endian -c basic/naqpms_file.f90 -o basic/naqpms_file.o
mpiifort -O3 -cpp -DTIME_OPT -DVEC_OPT -DKNL_OPT -DOPT_CBMZ -DOUT_SIMP26 -DTIMING -I./phys_chem_proc/other/gaschem -I./phys_chem_proc/other/mbe -I/public/software/mpi/intelmpi/2017.4.239/intel64/bin/include64 -I./phys_chem_proc/other/include -I./phys_chem_proc/other/apm_phys_box/src -I./phys_chem_proc/other/apm_dyn -lp -traceback -w -ftz -fno-alias -fno-fnalias -g -safe_cray_ptr -convert big_endian -c basic/naqpms_time.f90 -o basic/naqpms_time.o
mpiifort -O3 -cpp -DTIME_OPT -DVEC_OPT -DKNL_OPT -DOPT_CBMZ -DOUT_SIMP26 -DTIMING -I./phys_chem_proc/other/gaschem -I./phys_chem_proc/other/mbe -I/public/software/mpi/intelmpi/2017.4.239/intel64/bin/include64 -I./phys_chem_proc/other/include -I./phys_chem_proc/other/apm_phys_box/src -I./phys_chem_proc/other/apm_dyn -lp -traceback -w -ftz -fno-alias -fno-fnalias -g -safe_cray_ptr -convert big_endian -c basic/naqpms_species.f90 -o basic/naqpms_species.o
mpiifort -O3 -cpp -DTIME_OPT -DVEC_OPT -DKNL_OPT -DOPT_CBMZ -DOUT_SIMP26 -DTIMING -I./phys_chem_proc/other/gaschem -I./phys_chem_proc/other/mbe -I/public/software/mpi/intelmpi/2017.4.239/intel64/bin/include64 -I./phys_chem_proc/other/include -I./phys_chem_proc/other/apm_phys_box/src -I./phys_chem_proc/other/
```



## 编译区域高精度大气污染模式分系统

### 4) 检查是否正确生成所需要的高精度大气污染模式的可执行文件

```
_proc/daqchem/daq_chem.o phys_chem_proc/inorganic_aer/inorganic_aer.o phys_chem_proc/wetdep/wet_dep.o phys_chem_proc/soa/soa.o phys_chem_proc/aod/aod.o basic/naqpms_prep.o basic/naqpms_post.o basic/naqpms_calc.o basic/naqpms_free.o basic/main.o phys_chem_proc/other/model/inout.o phys_chem_proc/other/model/model.o phys_chem_proc/other/model/sub_rd_gridinfo.o phys_chem_proc/other/model/sub_rd_monthly_oxidants.o phys_chem_proc/other/model/adv_hori.o phys_chem_proc/other/model/adv_hori_ds.o phys_chem_proc/other/model/adv_vert2.o phys_chem_proc/other/model/dif_hori.o phys_chem_proc/other/model/dif_vert.o phys_chem_proc/other/model/DryVel.o phys_chem_proc/other/model/setboundary.o phys_chem_proc/other/model/setboundtop1.o phys_chem_proc/other/model/termbal.o phys_chem_proc/other/model/termballi.o phys_chem_proc/other/model/getboundary.o phys_chem_proc/other/model/clddiagf.o phys_chem_proc/other/model/convmix.o phys_chem_proc/other/model/st_rtmix.o phys_chem_proc/other/model/dif_vert_conv.o phys_chem_proc/other/model/diffus.o phys_chem_proc/other/model/diffus_ds.o phys_chem_proc/other/model/vdiffimp.o phys_chem_proc/other/model/vdiffimp_ds.o phys_chem_proc/other/model/trdiag.o phys_chem_proc/other/model/trdiag_ds.o phys_chem_proc/other/model/tropause.o phys_chem_proc/other/model/diffu_vert.o phys_chem_proc/other/model/calfconv.o phys_chem_proc/other/model/calmol.o phys_chem_proc/other/model/eddyz.o phys_chem_proc/other/model/convect43c.o phys_chem_proc/other/model/drydep_gas.o phys_chem_proc/other/model/drydep_aer.o phys_chem_proc/other/model/drydep_aer_old.o phys_chem_proc/other/model/drydep_dust.o phys_chem_proc/other/model/GETDU.o phys_chem_proc/other/model/MODIS.o phys_chem_proc/other/model/ALLD.o phys_chem_proc/other/aqueous/GETCLOUDDEPTH.o phys_chem_proc/other/aqueous/AQUEOUS.o phys_chem_proc/other/aqueous/raqchem.o phys_chem_proc/other/aqueous/hlconst.o phys_chem_proc/other/aqueous/hlindex.o phys_chem_proc/other/aqueous/WETDEP_GAS.o phys_chem_proc/other/aqueous/scavrat.o phys_chem_proc/other/aqueous/WETDEP_AER.o phys_chem_proc/other/aqueous/WETDEP_AER_old.o phys_chem_proc/other/mark/diffus_mark.o phys_chem_proc/other/mark/vdiffimp_mark.o phys_chem_proc/other/mark/trdiag_mark.o phys_chem_proc/other/mark/clddiagf_mark.o phys_chem_proc/other/mark/convmix_mark.o phys_chem_proc/other/mark/strtmix_mark.o phys_chem_proc/other/mark/diffu_vert_mark.o phys_chem_proc/other/mark/inout2.o phys_chem_proc/other/mark/adv_hori_mark2.o phys_chem_proc/other/mark/adv_vert2_mark.o phys_chem_proc/other/mark/dif_hori_mark.o phys_chem_proc/other/mark/dif_vert_mark.o phys_chem_proc/other/mark/dif_vert_conv_mark.o phys_chem_proc/other/mark/chemprod.o phys_chem_proc/other/gaschem/Jday.o phys_chem_proc/other/gaschem/CALCLF.o phys_chem_proc/other/gaschem/CALCLDOPD.o phys_chem_proc/other/gaschem/cbmz.o phys_chem_proc/other/gaschem/chemope.o phys_chem_proc/other/gaschem/Hetero.o phys_chem_proc/other/gaschem/Feevolution.o phys_chem_proc/other/mbe/gas_data.o phys_chem_proc/other/mbe/Hetero.o phys_chem_proc/other/mbe/cbmz.o phys_chem_proc/other/mbe/naqpms_drv_gaschem.o phys_chem_proc/other/aerosol/ISOCOM.o phys_chem_proc/other/aerosol/ISOFWD.o phys_chem_proc/other/aerosol/ISOREV.o phys_chem_proc/other/aerosol/ISRPINTR.o phys_chem_proc/other/aerosol/SOAP.o phys_chem_proc/other/aerosol/EXT.o phys_chem_proc/other/aerosol/GETVIS.o -o region_highres_airpollution.v1.0.exe mv region_highres_airpollution.v1.0.exe ../ [tangxiao@login01 region_highres_airpollution.v1.0] █
```



## 四、分系统大气污染预报模拟 基本操作流程





# 大气污染预报模拟基本操作流程

## 1. 建立一个测试案例

1) 一个典型的大气污染预报测试案例

```
[tangxiao@login01 test]$ ls  
datagrid draw emit input naqpbs.input out post region_highres_airpollution.v1.0.exe run.slurm
```

### 1. 输入:

datagrid/ 地理静态数据

input/ 气象数据

emit/ 排放数据

namelist.input 参数输入

### 2. 可执行文件:

region\_highres\_airpolluti  
on.v1.0.exe

GNAQPMS\_v1.6.0.exe

3. 提交脚本: run.slurm

### 4. 输出:

out/ 大气污染预报输出

### 5. 后处理:

post/

6. 绘图 draw/



# 大气污染预报模拟基本操作流程

## 1. 建立一个测试案例

1) datagrid 文件内容: 网格间距、经纬度、土地利用类型等数据

```
[tangxiao@login02 datagrid]$ ls  
d01.ctl  d02.ctl  wrfd01.dat  wrfd02.dat
```

```
dset ^wrfd01.dat  
options byteswapped  
undef 1.e30  
title OUTPUT FROM GEOGRID V3.5.1  
pdef 1999 1999 lcc 30.000 108.000 1000.000 1000.000 45.00000 15.00000 108.00000 3000.000 3000.000  
xdef 6365 linear 64.99201 0.01351351  
ydef 4195 linear 0.26457 0.01351351  
zdef 20 linear 1 1  
tdef 1 linear 00z01jan2000 1hr  
VARS 8  
dx 20 99 Data for  
dy 20 99 Data for  
dz 20 99 Data for  
heiz 20 99 Data for  
ter 0 99 ter  
XLAT 0 99 ter  
XLONG 0 99 ter  
land 0 99 land  
ENDVARS
```



## 1. 建立一个测试案例

2) input 文件内容: WRF等模式输出的气象数据

```
[tangxiao@login02 input]$ cd /public/home/tangxiao/data_tangxiao/高精度大气污染模式系统/system/Sample/test2/i
nput/202103
[tangxiao@login02 202103]$ ls
wrfd01_2021-03-10_12.dat  wrfd01_2021-03-12_01.dat  wrfd02_2021-03-10_13.dat  wrfd02_2021-03-12_02.dat
wrfd01_2021-03-10_13.dat  wrfd01_2021-03-12_02.dat  wrfd02_2021-03-10_14.dat  wrfd02_2021-03-12_03.dat
wrfd01_2021-03-10_14.dat  wrfd01_2021-03-12_03.dat  wrfd02_2021-03-10_15.dat  wrfd02_2021-03-12_04.dat
wrfd01_2021-03-10_15.dat  wrfd01_2021-03-12_04.dat  wrfd02_2021-03-10_16.dat  wrfd02_2021-03-12_05.dat
wrfd01_2021-03-10_16.dat  wrfd01_2021-03-12_05.dat  wrfd02_2021-03-10_17.dat  wrfd02_2021-03-12_06.dat
wrfd01_2021-03-10_17.dat  wrfd01_2021-03-12_06.dat  wrfd02_2021-03-10_18.dat  wrfd02_2021-03-12_07.dat
wrfd01_2021-03-10_18.dat  wrfd01_2021-03-12_07.dat  wrfd02_2021-03-10_19.dat  wrfd02_2021-03-12_08.dat
wrfd01_2021-03-10_19.dat  wrfd01_2021-03-12_08.dat  wrfd02_2021-03-10_20.dat  wrfd02_2021-03-12_09.dat
wrfd01_2021-03-10_20.dat  wrfd01_2021-03-12_09.dat  wrfd02_2021-03-10_21.dat  wrfd02_2021-03-12_10.dat
wrfd01_2021-03-10_21.dat  wrfd01_2021-03-12_10.dat  wrfd02_2021-03-10_22.dat  wrfd02_2021-03-12_11.dat
wrfd01_2021-03-10_22.dat  wrfd01_2021-03-12_11.dat  wrfd02_2021-03-10_23.dat  wrfd02_2021-03-12_12.dat
wrfd01_2021-03-10_23.dat  wrfd01_2021-03-12_12.dat  wrfd02_2021-03-11_00.dat  wrfd02_2021-03-12_13.dat
```





# 大气污染预报模拟基本操作流程

## 1. 建立一个测试案例

### 2) input 文件内容: WRF等模式输出的气象数据ctl

多层变量: U、V、Plev、TK、RH、QVAPOR (水汽)、

QCLOUD (云水)、QRAIN (雨水)、

RAINCON、RAINNON;

下垫面相关: SOILT、SOILRH、SEAICE、FSOIL (土壤类型)、

FVEG (植被比例)、FSNOW (雪深);

单层变量: T2、RH2、PSFC、U10、V10、SWDOWN、

UST、RMOL、PBLH

```
U          20 0 x-wind component (m s-1)
V          20 0 y-wind component (m s-1)
T2         1 0 TEMP at 2 M (K)
PSFC       1 0 SFC PRESSURE (Pa)
U10        1 0 U at 10 M (m s-1)
V10        1 0 V at 10 M (m s-1)
QVAPOR     20 0 Water vapor mixing ratio (kg kg-1)
QCLOUD     20 0 Cloud water mixing ratio (kg kg-1)
QRAIN      20 0 Rain water mixing ratio (kg kg-1)
TSLB       4 0 SOIL TEMPERATURE (K)
SMCREL     4 0 RELATIVE SOIL MOISTURE (-)
SEAICE     1 0 SEA ICE FLAG (-)
ISLTYP     1 0 DOMINANT SOIL CATEGORY (-)
VEGFRA     1 0 VEGETATION FRACTION (-)
SNOWH      1 0 PHYSICAL SNOW DEPTH (m)
RAINCV     1 0 TIME-STEP CUMULUS PRECIPITATION (mm)
RAINNCV    1 0 TIME-STEP NONCONVECTIVE PRECIPITATION (mm)
SWDOWN     1 0 DOWNWARD SHORT WAVE FLUX at GROUND SURFACE (W m-2)
UST        1 0 U* IN SIMILARITY THEORY (m s-1)
RMOL       1 0 1./Monin Ob. Length (-)
PBLH       1 0 PBL HEIGHT (m)
TAUCLDI    20 0 CLOUD OPTICAL THICKNESS FOR ICE (-)
TAUCLDC    20 0 CLOUD OPTICAL THICKNESS FOR WATER (-)
pressure   20 0 Model pressure (hPa)
height     20 0 Model height (km)
tk         20 0 Temperature (K)
rh         20 0 Relative Humidity (%)
clflo      1 0 Low Cloud Fraction (%)
clfmi      1 0 Mid Cloud Fraction (%)
clfhi      1 0 High Cloud Fraction (%)
rh2        1 0 Relative Humidity at 2m (%)
tsk        1 0 Skin Temperature
lai        1 0 Leaf Area Index
sst        1 0 Sea Surface Temperature
crain      1 0 crain
srain      1 0 srain
nrain      1 0 nrain
ENDVARS
```



## 1. 建立一个测试案例

### 3) emit 文件内容

```
[tangxiao@login02 emit]$ ls  
data.emit  
[tangxiao@login02 emit]$ ls data.emit/emitgrid_03.d*  
data.emit/emitgrid_03.d1 _data.emit/emitgrid_03.d2
```

```
[tangxiao@login02 emis]$ ls  
emis.total.2021121612.d1  emis.total.2022012714.d1  emis.total.2022031016.d1  emis.total.2022042118.d1  
emis.total.2021121613.d1  emis.total.2022012715.d1  emis.total.2022031017.d1  emis.total.2022042119.d1  
emis.total.2021121614.d1  emis.total.2022012716.d1  emis.total.2022031018.d1  emis.total.2022042120.d1  
emis.total.2021121615.d1  emis.total.2022012717.d1  emis.total.2022031019.d1  emis.total.2022042121.d1  
emis.total.2021121616.d1  emis.total.2022012718.d1  emis.total.2022031020.d1  emis.total.2022042122.d1  
emis.total.2021121617.d1  emis.total.2022012719.d1  emis.total.2022031021.d1  emis.total.2022042123.d1  
emis.total.2021121618.d1  emis.total.2022012720.d1  emis.total.2022031022.d1  emis.total.2022042200.d1  
emis.total.2021121619.d1  emis.total.2022012721.d1  emis.total.2022031023.d1  emis.total.2022042201.d1
```





# 大气污染预报模拟基本操作流程

## 1. 建立一个测试案例

3) emit

排放文件ctl

```
TITLE datagrid for domain d01
UNDEF -9999.000000
OPTIONS byteswapped
pdef 1999 1999 lcc 30.00 108.00 1000.00 1000.00 15.00 45.00 108.00 3000.00 3000.00
xdef 6365 linear 64.99201 0.01351351
ydef 4195 linear 0.26457 0.01351351
ZDEF 20 LINEAR 1 1
TDEF 1 LINEAR 12Z15JUL2019 1hr
VARS 25
ALD2 20 99 ALD2 emis data from MEIC.
CH4 20 99 CH4 emis data from MEIC.
CO 20 99 CO emis data from MEIC.
C2H4 20 99 C2H4 emis data from MEIC.
C2H6 20 99 C2H6 emis data from MEIC.
ANOL 20 99 ANOL emis data from MEIC.
HCHO 20 99 HCHO emis data from MEIC.
OLEI 20 99 OLEI emis data from MEIC.
ISOP 20 99 ISOP emis data from MEIC.
MEOH 20 99 MEOH emis data from MEIC.
NH3 20 99 NH3 emis data from MEIC.
HONO 20 99 HONO emis data from MEIC.
NO 20 99 NO emis data from MEIC.
NO2 20 99 NO2 emis data from MEIC.
OLET 20 99 OLET emis data from MEIC.
PAR 20 99 PAR emis data from MEIC.
SO2 20 99 SO2 emis data from MEIC.
H2SO4 20 99 H2SO4 emis data from MEIC.
TERP 20 99 TERP emis data from MEIC.
TOL 20 99 TOL emis data from MEIC.
XYL 20 99 XYL emis data from MEIC.
BC 20 99 BC emis data from MEIC.
PM10 20 99 PM10 emis data from MEIC.
OC 20 99 OC emis data from MEIC.
PM25 20 99 PM25 emis data from MEIC.
```





# 大气污染预报模拟基本操作流程

## 1. 建立一个测试案例

### 4) naqps.input 参数输入

#### Grids and Nest

```
!single value number of nest domains
!single value for all nested layers
!single value for z direction partitions
!array values grid number in x direction
!array values grid number in y direction
!array values grid number in z direction
!array values nest location in x direction
!array values nest location in y direction
```

#### Time and Frequency

```
!four digit year of initial time
!two digit month of initial time
!two digit date of initial time
!two digit hour of initial time

!single number of run time totally unit: hour
!array number of run time at beginning
!array number of run time at end

!array values, synchronous time step unit:second
!array values, meteorological data update frequency
!array values, meteorological data update frequency
!array values, output data frequency
```

#### Boundary Parameters

```
& boundary_conditions
!global, 1:global 2:fix
!landuse category:1: modis 2: USGS
!the pressure of defined top boundary unit:hPa
!the top height of NAQPS domain unit:m
```

#### Control and Physical, Chemistry model

```
& control
lglbrun = .false.,
lgaschemsmp = .false.,
lapm = .false.,
ctdway = 'bulk',
laqchem = .true.,
lnaqps_pso4 = .true.,
lnaqps_ems = .false.,
lrd_lai = .false.,
idifvert = 1,
ichemgas = 1,
idry = 2,
caveoutclab = 'daily',
iopt_exchng = 1,
```





## 2. 运行一个测试案例

### 1) 编写提交脚本 run.slurm

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test_3_1
#SBATCH -p high
#SBATCH -N 180
#SBATCH -n 10800
#SBATCH --ntasks-per-node=60
#SBATCH -o log.%j
#SBATCH -e log.%j
#SBATCH --exclusive

module purge
module load compiler/intel/2017.5.239
module load mpi/intelmpi/2017.4.239
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1
#module load ...
```

```
scontrol show hostname > nd
NP=$SLURM_NPROCS
mpirun -np $NP -machinefile nd ./region_highres_airpollution.v1.0.exe
```

```
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 millisecs
export DAPL_UCM_RTU_TIME=8000 # REPLY timer, waiting for RTU in millisecs
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
#vuff
```



## 2.运行一个测试案例

### 2) 提交作业脚本

Linux cd 命令切换到算例文件根目录文件夹下，然后在命令行输入 **sbatch run.slurm**

```
[tangxiao@login01 test]$ sbatch run.slurm  
Submitted batch job 262435
```

提交计算成功后会显示作业ID, 例如: **job 262435**, 之后

大气污染模式开始运行, 输入**ls log.262435**, 可看到文件夹下已经生成了运行日志文件

```
[tangxiao@login01 test]$ ls log.262435  
log.262435
```



## 2.运行一个测试案例

### 3) 运行作业

```

naqpbs_check: after para_init
intzsm 2 in mpi_domain_split=          1
mkdir: cannot create directory 'out': File exists
kk1 wr_grid ne=          1
afcreate wr_grid ne=          1
kk2 wr_grid ne=          1
kk3 wr_grid ne=          1
kk4 wr_grid ne=          1
kk6 wr_grid ne=          1
kk1 wr_grid ne=          2
afcreate wr_grid ne=          2
kk2 wr_grid ne=          2
kk3 wr_grid ne=          2
kk4 wr_grid ne=          2
kk6 wr_grid ne=          2
bf grid.info
write grid.info
af grid.info
bf prepare my own send-rev
bf check the position(cpu)
af needsend.dat
end mpi
OUT_SIMP26nzz_out=          20
OUT_SIMP26nzz_out=          20
irec=          84
irec=          84
2 read gridinfo d01
2 read gridinfo d02
dim :          1          17          1          23
dim :          1          15          1          32
naqpbs_check: after init
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% outer time loop, hour = 001  time : 2021-03-10 12:00 %

```

```

naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=          9
naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=         10
naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=         10
naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=         11
naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=         11
naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=         12
naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=         12
naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=         12
naqpbs hadv
naqpbs vadv
  idt_syn=         12
OUT_SIMP26nzz_out=          20
OUT_SIMP26nzz_out=          20
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
elapsed time of this step:          62.87s
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
elapsed time of this run:          135.32s
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
The program finished successfully!
_loop total time:          62.90930

```





# 大气污染预报模拟基本操作流程

## 3.后处理数据

### 1) 运行设置和脚本

```
&userinput
```

```
lvbs = .false.
```

```
lamine = .false.
```

```
in_dir = '../out/tmp/'  
out_dir = '../data'
```

```
prefix = 'test'
```

```
ncpu = 10800  
nd = 2  
ifpr = 1, 0, 0  
nx = 1999, 1800, 228  
ny = 1999, 2850, 150  
nz = 20, 20, 20
```

```
st_year = 2021,2021,2016  
st_month = 03,03,12  
st_day = 10,10,20  
st_hour = 14,14,00  
st_minute = 00,00,00
```

```
ed_year = 2021,2021,3016  
ed_month = 03,03,07  
ed_day = 10,10,17  
ed_hour = 14,14,12  
ed_minute = 00,00,00
```

```
deltamn = 60, 60, 60
```

```
#!/bin/bash  
#SBATCH -J test_3_1  
#SBATCH -p normal  
#SBATCH -N 1  
#SBATCH -n 1  
#SBATCH --ntasks-per-node=1  
#SBATCH -o log.%j  
#SBATCH -e log.%j  
#SBATCH --exclusive
```

```
module purge  
module load compiler/intel/2017.5.239  
module load mpi/intelmpi/2017.4.239  
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1
```

```
scontrol show hostname > nd  
NP=$SLURM_NPROCS  
./revise_n26.exe 1
```



## 3.后处理数据

### 2) 运行日志和结果

```
140          130  kk aerom_1201
142          131  kk aerom_1301
144          132  kk aerom_1401
146          133  kk coefcld
147          134  kk gscav
148          135  kk ascav
149          136  kk entrn
150          137  kk dsdt

input directory : ../out/tmp/

Processing data at time : 2021-03-10_14:00:00 d_02
record number =          520

Time is over for domain 2

|=====|
| Sucessfully run program integrate ! |
|=====|
```

```
[tangxiao@login02 post]$ cd data/
```

```
[tangxiao@login02 data]$ ls
```

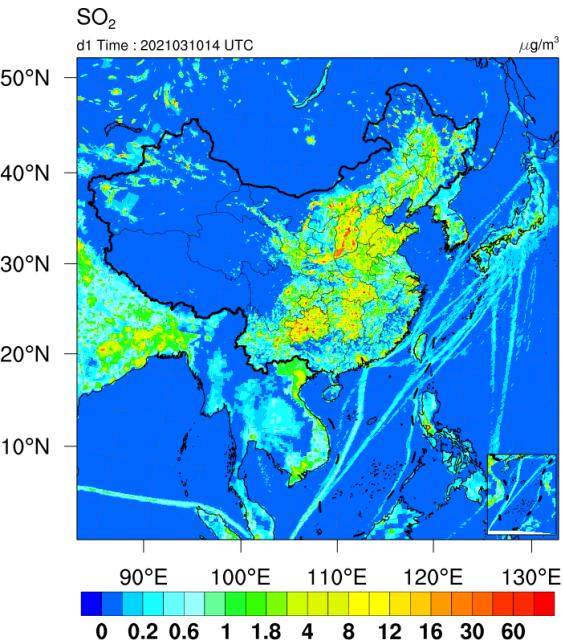
```
testd1.2021031014.ctl  testd1.2021031112.ctl  testd1.2021031312.ctl  testd2.2021031014.ctl
testd1.2021031014.grd  testd1.2021031112.grd  testd1.2021031312.grd  testd2.2021031014.grd
```



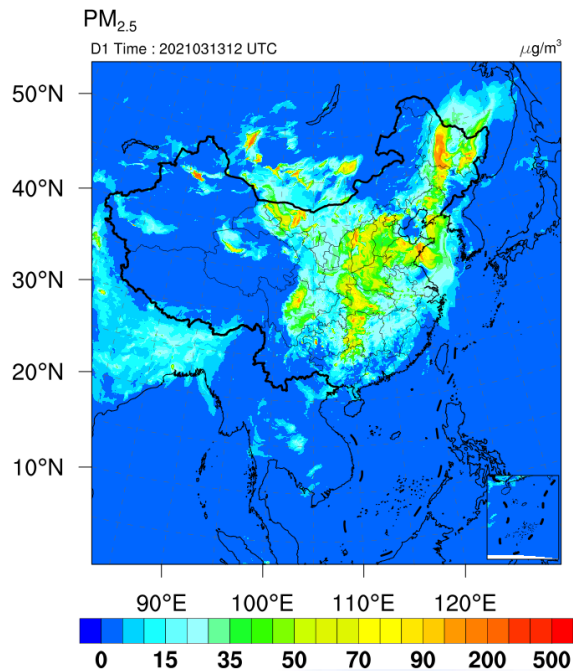
## 4. 绘图处理

程序运行完成不代表结果正确，需要进一步检查结果的正确性

ncl con\_hour\_d1\_test.ncl



SO<sub>2</sub>浓度图  
(d1区域)  
开始时间:  
2021031312  
计算 2小时



PM<sub>2.5</sub>浓度图  
(d1区域)  
开始时间:  
2021031312  
计算72小时



END

# 培训内容结束

## 谢谢大家!

法人单位：中国科学院大气物理研究所  
承建单位：曙光信息产业（北京）有限公司  
培训时间：2022年05月26日