



区域高精度大气污染模式分系统 培训2 (模式功能和应用篇)

培训人：余芬芬

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27日



目录



- 一、区域高精度大气污染模式分系统功能
- 二、各部分常用功能和使用介绍
- 三、区域高精度大气污染模式分系统应用





一、区域高精度大气污染模式 分系统功能





一、区域高精度大气污染模式分系统功能

基于地球科学理论和专用物理分区大规模计算设备，发展具有坚实物理数学基础的**高精度先进大气污染数值模拟软件**，实现大气污染复杂物理化学过程的多种复杂相互作用和反馈问题的**高精度模拟和预测**，显著提升我国解决关键大气污染科研和应用问题的能力





一、区域高精度大气污染模式分系统功能

■ 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**；

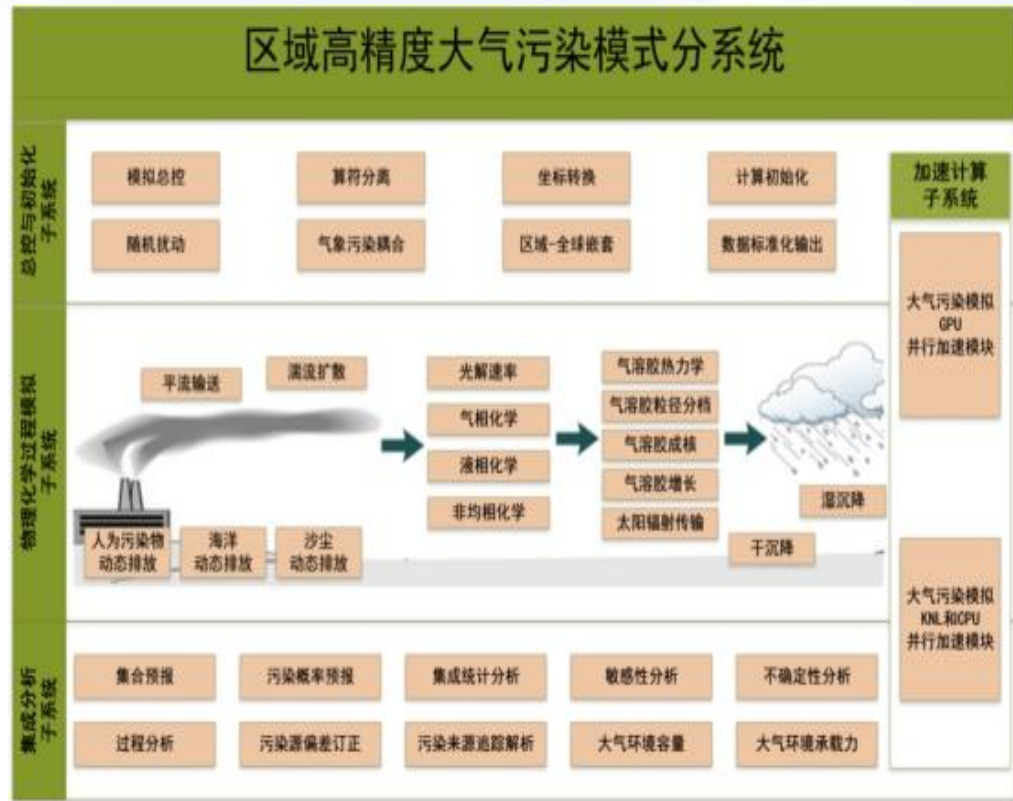
垂直层数：不少于**30层**；

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**；

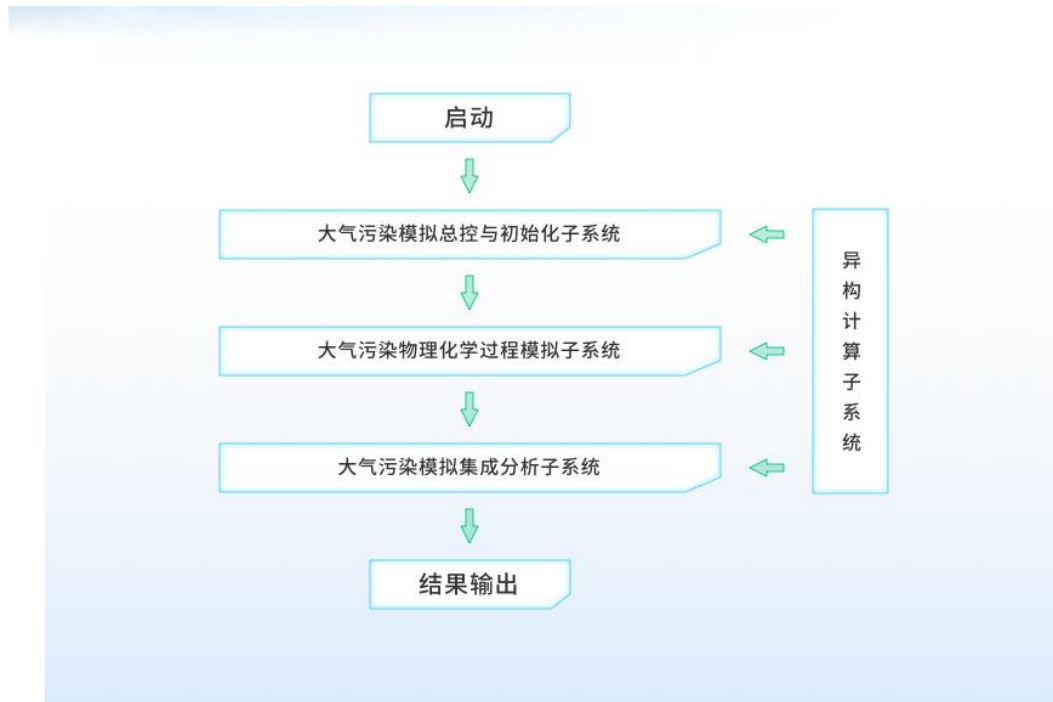


区域高精度大气污染模式分系统组成图



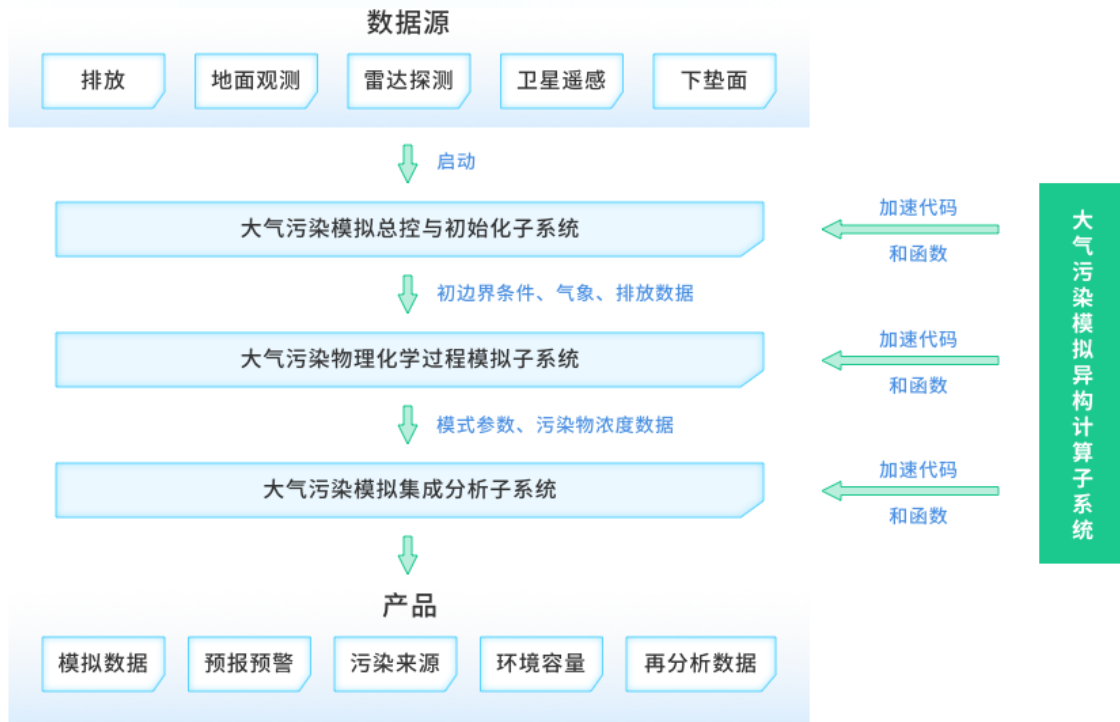
分系统各子系统流程

➤ 分系统通过4个子系统进行相互协调





➤ 分系统内部接口包括4个子系统之间的数据接口

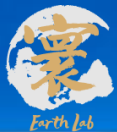




子系统1 大气污染模拟总控与初始化子系统

- 该子系统由坐标转换模块、算符分离模块、模拟总控、计算初始化、随机扰动、气象污染耦合、区域全球嵌套和数据标准化输出共8个模块组成。





子系统2 大气污染物理化学过程模拟子系统

- 该子系统由污染物动态排放、平流输送、湍流扩散、气相化学、液相化学、非均相化学、干沉降、湿沉降、无机气溶胶热力学、二次有机气溶胶、气溶胶粒径分档、气溶胶消光系数计算等共21模块。





子系统3 大气污染模拟集成分析子系统

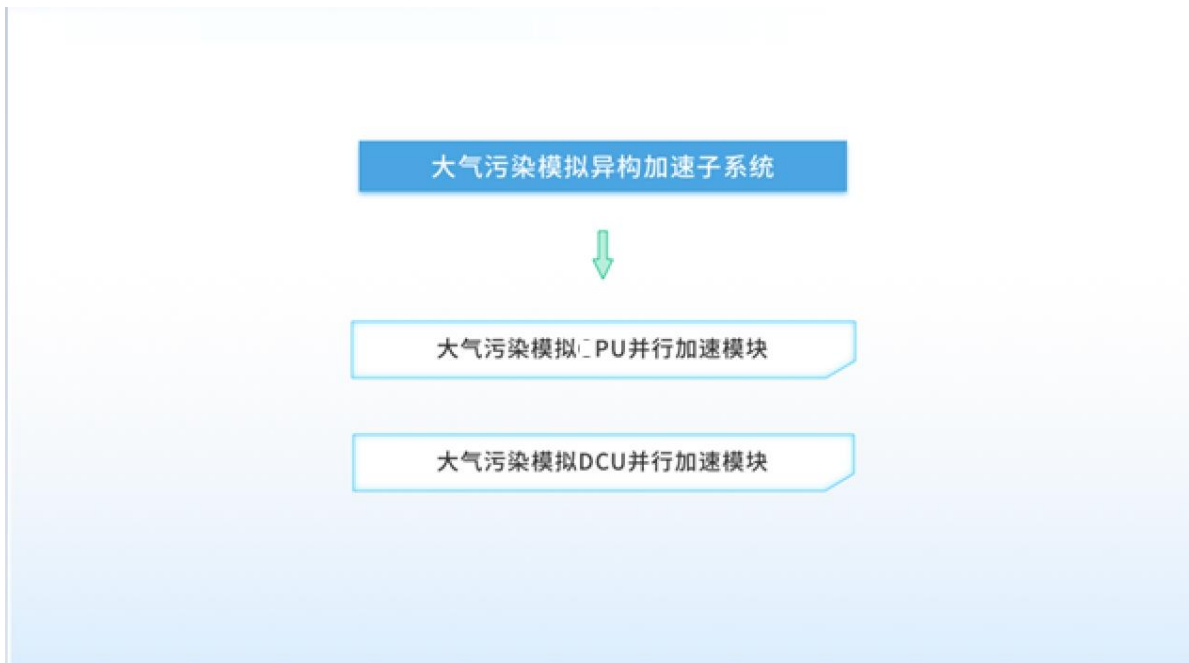
- 该子系统由集合预报、概率预报、敏感性分析、不确定性分析、污染源在线追踪解析、污染源偏差订正、大气环境容量计算等共10个模块。





子系统4 大气污染模拟异构加速计算子系统

- 该子系统由大气污染模拟CPU并行加速模块和大气污染模拟DCU并行加速模块共两个子模块组成。





二、各部分常用功能和应用介绍





子系统1 大气污染模拟总控与初始化子系统

- 1 支持区域模式、全球区域嵌套
- 2 支持气象、排放、化学反应系数扰动
- 3 数据标准化输出





1.支持区域模式、全球区域嵌套

通过系统设置文件中的lglbrun参数来控制

lglbrun = .true. 运行全球、区域嵌套案例

第一层设置为全球，其余层为区域层

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!
!                                     Control and Physical, Chemistry model
!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
& control
lglbrun = .true.,
lgaschemsmp = .false.,
lapm = .false.,
ctdway = 'bulk',
laqchem = .true.,
lnaqpms_pso4 = .true.,
lnaqpms_ems = .false.,
lrd_lai = .false.,
idifvert = 1,
ichemgas = 1,
idry = 3,
caveoutclab = 'daily',
iopt_exchng = 1,
igaschem_mbe = 0,
/
```

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!
!                                     Grids and Nest
!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

```
& nest grids
nest = 3,
ratio = 3,
nzz = 20.
nx = 360,225,228
ny = 180,120,150
nz = 20,20,20
nxlo = 1,74,81
nylo = 1,106,37
/
!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
```



1.支持区域模式、全球区域嵌套

➤ 和系统1联调过程:

- 1) 系统1 生成数据
- 2) 生成动态边界数据 (常用O3, CO, NO2, SO2等)
- 3) 运行区域大气污染模式,使用动态边界条件

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!
!                               Grids and Nest                               !
!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
& nest_grids
nest = 1,                !single value number of nest domains
ratio = 3,              !single value for all nested layers
nzz = 20,               !single value for z direction partitions
nx = 225,225           !array values grid number in x direction
ny = 120,120           !array values grid number in y direction
nz = 20, 20            !array values grid number in z direction
nxlo = 1,74            !array values nest location in x direction
nylo = 1,106           !array values nest location in y direction
/

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!
!                               Boundary Parameters                          !
!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
& boundary_conditions
iglobal = 2,            !iglobal, 1:global 2:fix
imodis = 1,             !landuse category:1: modis 2: USGS
press = 100,            !the pressure of defined top boundary unit:hPa
hh = 20000,             !the top height of NAQPMS domain unit:m
co_fix = 200.
ibdy = 1,                !dynamic boundary
ibdy_aer =0,            !dynamic boundary
```

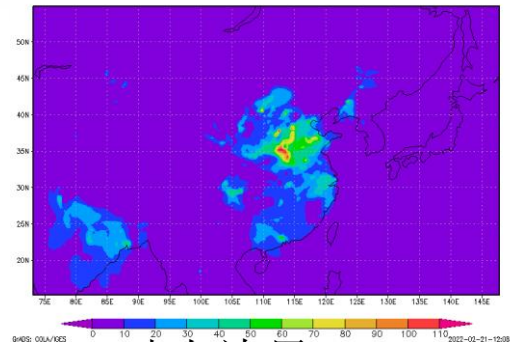




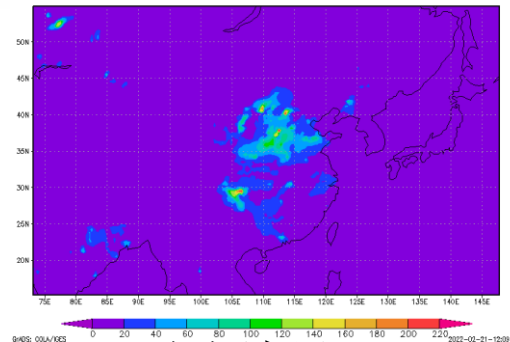
1.支持区域模式、全球区域嵌套

动态边界、全球区域嵌套 (360 x180, 225x120)

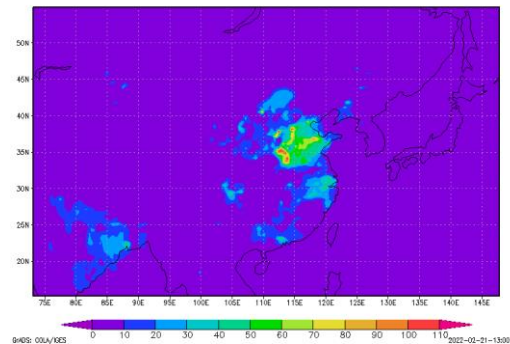
时间: 2020.01.01 00 - 2020.01.09 00



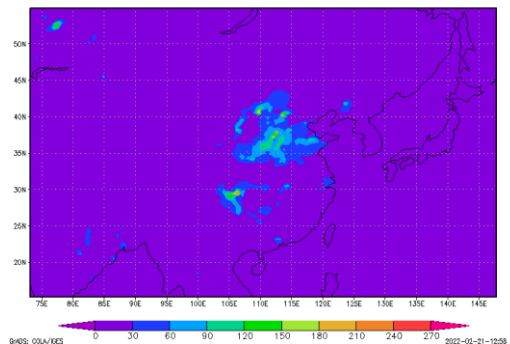
动态边界 PM2.5



动态边界 SO2



全球区域嵌套 PM2.5



全球区域嵌套SO2



2.支持气象、排放、化学反应系数扰动施加

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

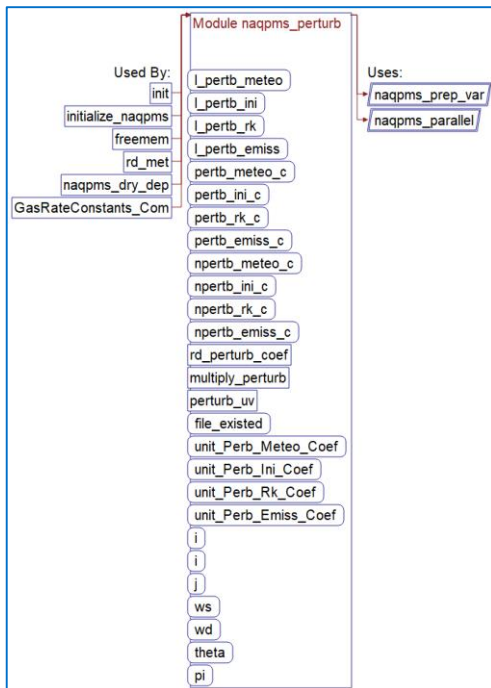
化学反应变量173个

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
171         a(i,j)=a(i,j)*pertb_c
172         ! print*,a(i,j),i,j
173     enddo
174 enddo
175
176 return
177 end subroutine multiply_perturb

```




3.支持标准化输出

通过系统设置文件中的*iopt_output*, *iopt_nc*等参数来控制

iopt_nc = 1, 输出nc格式数据

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!
!                               Control and Physical, Chemistry model
!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
& control
lglbrun = .false.,
lgaschemsmp = .false.,
lapm = .false.,
ctdway = 'bulk',
laqchem = .true.,
lnaqpms_pso4 = .true.,
lnaqpms_ems = .false.,
lrd_lai = .false.,
idifvert = 1,
ichemgas = 1,
idry = 2,
caveoutclab = 'daily',
iopt_output = 1,
iopt_nc = 1,
/
```

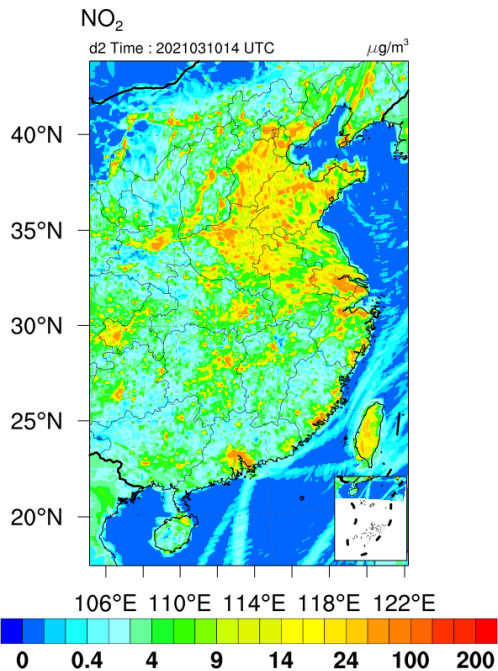




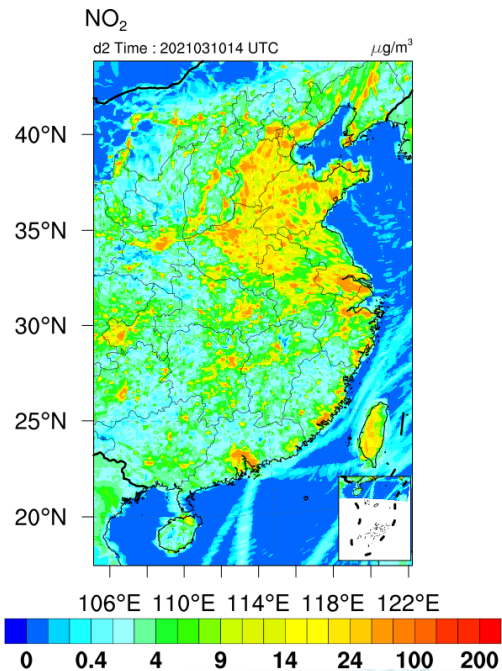
3.支持标准化输出

通过系统设置文件中的iopt_output, iopt_nc等参数来控制

iopt_nc = 1, 输出nc格式数据



grd格式输出作图 1km分辨率



nc格式输出作图 1km分辨率



子系统2 大气污染物理化学过程模拟子系统

- 1 支持二维、三维排放文件读取
- 2 完善平流输送，支持新版walcek等方案
- 3 气相化学-气态污染物化学过程模拟
- 4 非均相化学-颗粒物表面化学过程模拟
- 5 气溶胶动力过程设置
- 6 气体气溶胶干沉降过程模拟
- 7 气体气溶胶湿沉降过程模拟



1.支持二维、三维排放文件读取

通过系统设置文件中的lrd_emit3d参数来控制

lrd_emit3d = .true 排放读取方案采用三维排放文件

```
& emissions_setting  
nemit=25, !THE NUMBER OF SPECIES IN EMISSIONS FILES  
nlay_em=1, ! THE TYPE OF EMISSIONS  
d_freq="hourly",  
lrd_emit3d = .true.,  
/
```

```
& emissions  
!ipig = 28, 19, 17, 36, 20, 25, 23, 38, 52, 24, 4, 9, 5, 6, 37, 33, 18, 1, 68, 39, 40, 77, 76, 78, 75 ! TH  
E IG OF EMISSIONS SPECIES  
!cfmode = 'ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff','ff',  
, 'ff','ff','ff','ff', 'ff', 'ff'  
!emt2d_zfrc(:,1) = 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0  
!emt2d_zfrc(:,1) = 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05, 0.05,  
0.05, 0.05, 0.05, 0.05  
!emt2d_zfrc(:,2) = 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0  
!emt2d_zfrc(:,3) = 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0  
!emt2d_zfrc(:,4) = 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0  
!emt2d_zfrc(:,5) = 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0  
!emt2d_zfrc(:,6) = 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0  
!emt2d_zfrc(:,7) = 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0  
!emt2d_zfrc(:,8) = 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0  
!emt2d_zfrc(:,9) = 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,  
0.0, 0.0
```




2.完善平流输送，支持新版walcek等方案

通过系统设置文件中的flagadv参数来控制

flagadv = 'walcek_all' 气象选择新版walcek方案

- 垂直平流较为完善
- 考虑地图放大因子的影响

```
& advection
flagadv = 'walcek_all' ! 'camx_ppm' , 'walcek', 'walcek_all'
/
```

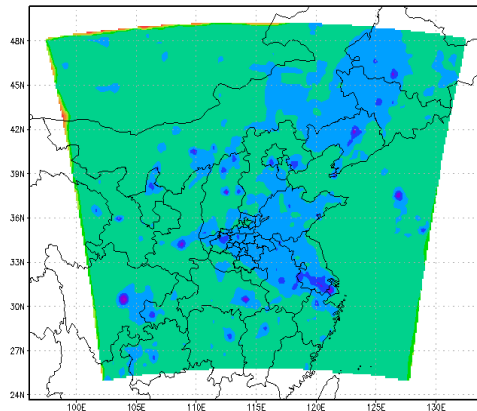




2.完善平流输送，支持新版walcek等方案

通过系统设置文件中的flagadv参数来控制

flagadv = 'walcek_all' 气象选择新版walcek方案

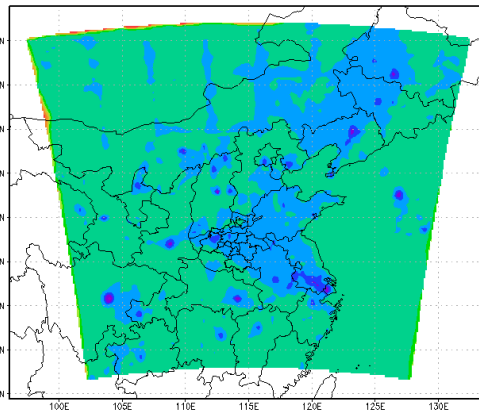


04DS: OLA/IGES

2021-12-24-12:17

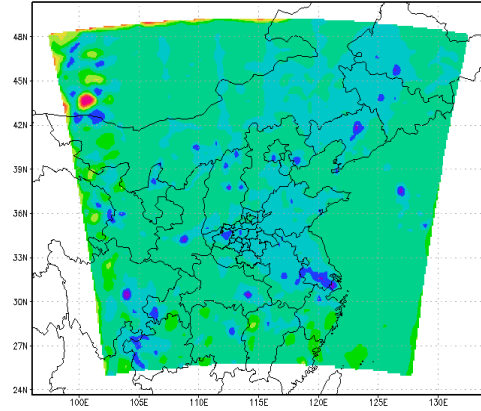
04DS: OLA/IGES

全国3公里
新版平流模块
臭氧 1小时



2021-12-23-18:54

全国3公里
原平流模块，仅
水平平流
臭氧



04DS: OLA/IGES

2021-12-24-11:45

全国3公里
原平流模块，水平、
垂直平流
臭氧



3.气相化学-气态污染物化学过程模拟

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
- 支持CBM-Z、简单硫化学机制
- CBM-Z气相化学支持LSODE、MBE、Rosenbrock等求解器

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)

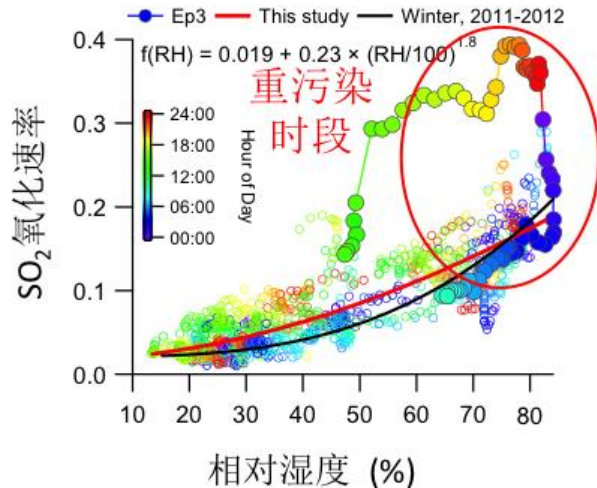
	rk_urb(42) = rk_param(jnap)		rk_mar(33) = 0.0
	rk_urb(43) = rk_param(jxo2)		rk_mar(34) = 0.0
	rk_urb(44) = 1.0e-11		rk_mar(35) = 0.0



4.非均相化学-颗粒物表面化学过程模拟

- 包括4类气溶胶表面：硫酸盐; 黑炭; 沙尘; 海盐
- 28个反应、14个物种
- 摄取系数：温度和湿度相关的动态系数，比之前单一系数值更符合实际

No.	Heterogeneous reactions	γ^a	Ref ^b
HR1	$N_2O_5 + \text{sulfate} \rightarrow 2HNO_3$	$\gamma = \alpha \times 10^{\beta}$ $\alpha = 2.79 \times 10^{-4} + 1.3 \times 10^{-4} \times RH - 3.43 \times 10^{-6} \times RH^2 + 7.52 \times 10^{-8} \times RH^3$ $\beta = 4 \times 10^{-2} \times (T - 294) (T \geq 282K)$ $\beta = -0.48 (T < 282K)$	1
HR2	$NO_2 + \text{sulfate} \rightarrow HNO_3$	3×10^{-3}	2
HR3	$HO_2 + \text{sulfate} \rightarrow 0.5H_2O_2$	2.5×10^{-1}	3
HR4	$OH + \text{sulfate} \rightarrow \text{products}$	2×10^{-1}	4
HR5	$HCHO + \text{sulfate} \rightarrow \text{products}$	2.2×10^{-2}	5
HR6	$O_3 + \text{soot} \rightarrow \text{products}$	$1.8 \times 10^{-4} \times e^{-\frac{1000}{T}}$	5
HR7	$NO_2 + \text{soot} \rightarrow HONO$	3.3×10^{-4}	6
HR8	$HNO_3 + \text{soot} \rightarrow NO_2$	2.1×10^{-2}	6
HR9	$NO_2 + \text{soot} \rightarrow 0.5HONO + 0.5HNO_2$	3×10^{-3}	7
HR10	$N_2O_5 + \text{soot} \rightarrow 2HNO_3$	5×10^{-3}	1
HR11	$O_3 + \text{dust} \rightarrow \text{products}$	2.7×10^{-5}	8
HR12	$HNO_3 + \text{dust} \rightarrow NO_2^+$	$\gamma = \frac{c \times RH}{(1-RH)^3 - (1-c) \times RH} \times 0.018 (c = 8)$	9,10 ^c
HR13	$NO_2 + \text{dust} \rightarrow 0.5HONO + 0.5HNO_2$	2.1×10^{-6}	8
HR14	$NO_2 + \text{dust} \rightarrow HNO_3$	1×10^{-3}	11
HR15	$N_2O_5 + \text{dust} \rightarrow 2HNO_3$	3×10^{-2}	8
HR16	$OH + \text{dust} \rightarrow \text{products}$	1×10^{-1}	8
HR17	$HO_2 + \text{dust} \rightarrow 0.5H_2O_2$	2×10^{-1}	8
HR18	$H_2O_2 + \text{dust} \rightarrow \text{products}$	$\gamma = 12 \times RH^2 - 5.95 \times RH + 4.08$	12
HR19	$SO_2 + \text{dust} \rightarrow SO_4^{2-}$	1×10^{-4}	13
HR20	$CH_3COOH + \text{dust} \rightarrow \text{products}$	1×10^{-3}	8
HR21	$CH_3OH + \text{dust} \rightarrow \text{products}$	1×10^{-3}	8
HR22	$HCHO + \text{dust} \rightarrow \text{products}$	1×10^{-3}	8
HR23	$N_2O_5 + \text{SSA} \rightarrow 2HNO_3$	$5 \times 10^{-3} (RH \geq 62\%)$ $3 \times 10^{-2} (RH \geq 62\%)$	1
HR24	$NO_2 + \text{SSA} \rightarrow HNO_3$	1×10^{-3}	7
HR25	$HO_2 + \text{SSA} \rightarrow 0.5H_2O_2$	2×10^{-1}	7
HR26	$SO_2 + \text{SSA} \rightarrow SO_4^{2-}$	$5 \times 10^{-3} (RH < 50\%)$ $5 \times 10^{-2} (RH \geq 50\%)$	14
HR27	$NO_2 + \text{SSA} \rightarrow NO_2^+$	1.7×10^{-2}	15
HR28	$HNO_3 + \text{SSA} \rightarrow NO_2^+$	5×10^{-1}	16



如：重污染时段高相对湿度促进了SO₂向硫酸盐转化



3&4 气相化学-非均相化学设置

气相化学模块：CBM-Z，改进高性能求解器；设定反应场景，根据不同场景调整参与反应的物种和反应方程

模块总体设置：

通过修改namelist参数chem_opt，来选择不同的化学机制和计算方式

chem_opt =

- 1 (采用cbmz机制，74个以上反应物种，最多201个反应，计算采用lsode求解器)
- 2 (采用更新版cbmz机制，71个反应物种，199个反应，计算采用rosenbrock求解器)
- 3 (反应机制同chem_opt =2，计算采用DCU异构计算)

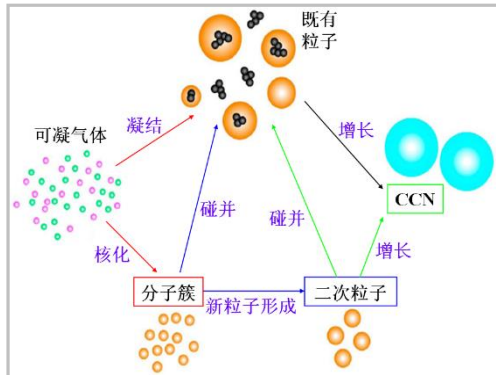
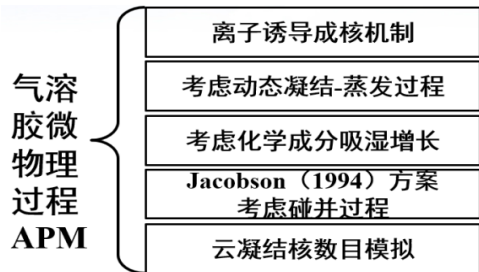


5.气溶胶动力过程模拟

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，实现质量浓度和数浓度模拟、颗粒物及其组分谱分布模拟，

颗粒物形成与粒径大小演变



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  NCTS04=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

```



5.气溶胶动力过程设置

通过系统设置文件中的lapm等参数来控制

Lapm = .true., 打开气溶胶微物理过程模拟

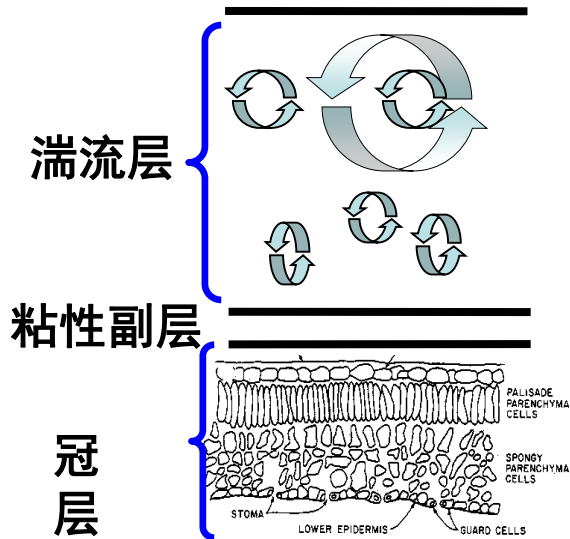
```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
!  
!           Control and Physical, Chemistry model           !  
!  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
& control  
lglbrun = .false.,  
lgaschemsmp = false.,  
lapm = .true.,  
ctdway = 'outk',  
laqchem = .true.,  
lnaqpms_pso4 = .true.,  
lnaqpms_ems = .false.,  
lrd_lai = .false.,  
idifvert = 1,  
ichemgas = 1,  
idry = 2,
```





6. 气体气溶胶干沉降过程模拟

- 考虑由于重力、湍流运动、热运动、惯性力和静电力的作用，污染物在大气中输送扩散时被地面阻留，形成连续不断的由大气向地面的质量迁移的干沉降过程。



污染物干沉降的计算

干沉降通量: $F_{O_3} = -K_c \cdot \frac{\partial C_{O_3}}{\partial Z}$

干沉降速度: $V_d = \frac{F_{O_3}}{C_{O_3}} \quad K_c = \frac{\kappa \cdot u_* \cdot (Z - d)}{\varphi_M \left(\frac{Z - d}{L} \right)}$

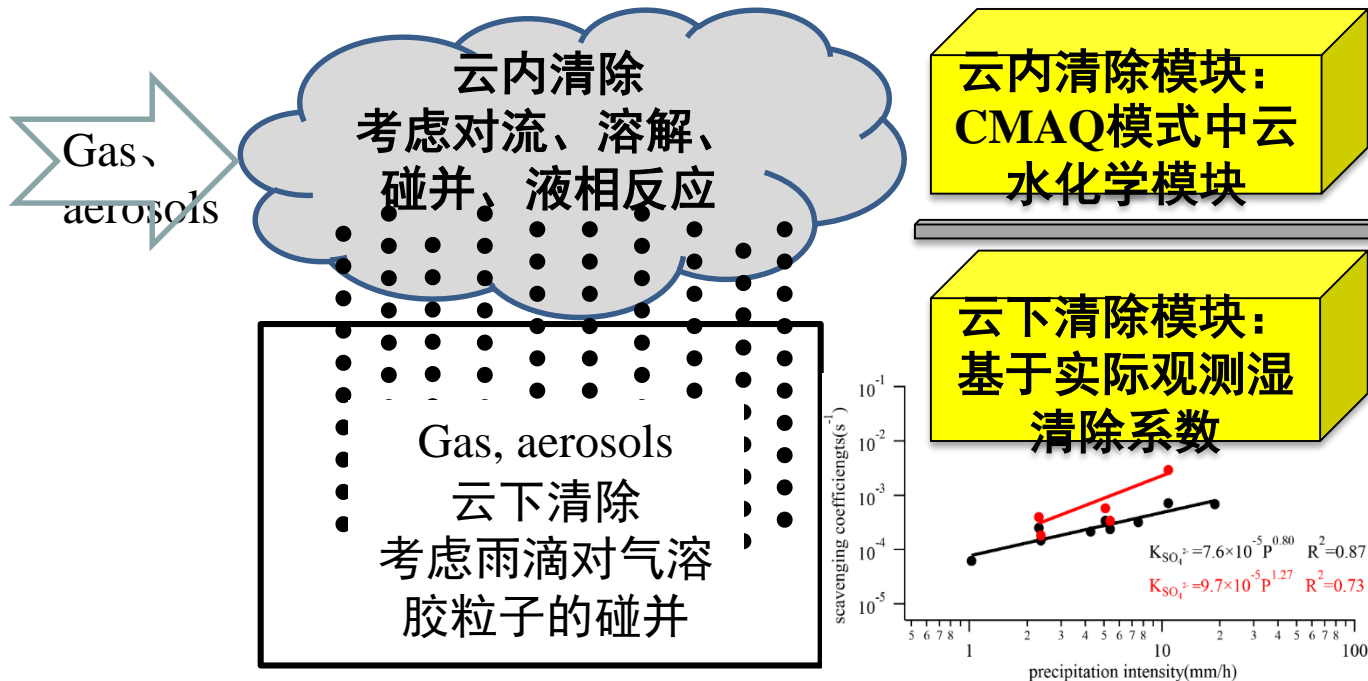
冠层阻力: $R_c = \frac{1}{V_d} - R_a - R_b$

空气动力学阻力: $R_a + R_b = \frac{u}{u_*^2} + \frac{2}{\kappa \cdot u_*} \cdot \left(\frac{Sc}{Pr} \right)^{2/3}$



7. 气体气溶胶湿沉降过程模拟

- 主要考虑大气气溶胶颗粒和溶解性较好的污染气体的清除过程，分对云内清除和云下冲刷清除两个过程。





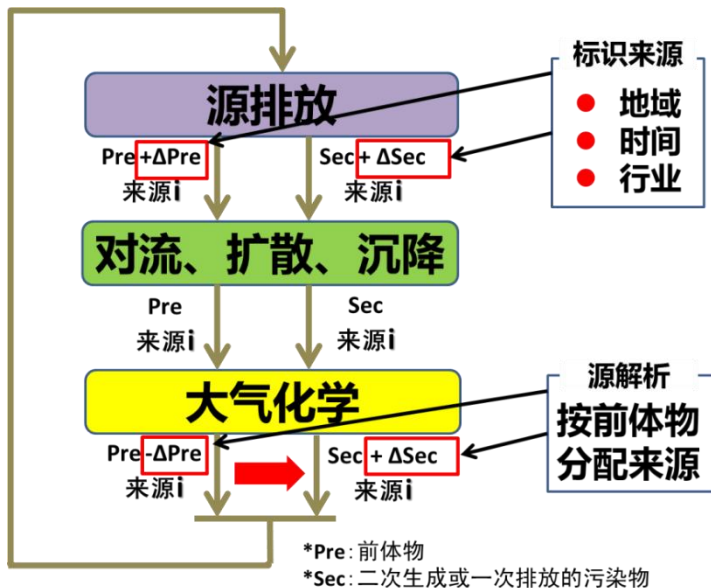
子系统3 大气污染模拟集成分析子系统

- 1 污染物来源定量计算分析
- 2 过程分析



1. 污染物来源定量计算分析

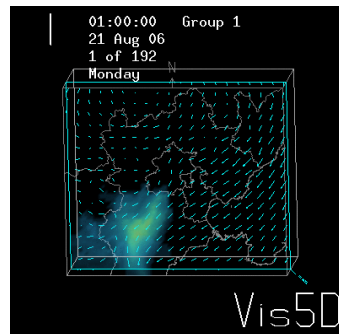
- 实现高时空分辨率，实时解析全国34个省级行政区的5类排放源（电厂、工业、机动车、居民源、无组织排放）对主要污染物（包括NO₂、SO₂、O₃、CO、PM_{2.5}、PM₁₀）浓度的贡献。



$$S = \sum_{T=1}^{T=n} S^T, F_{S^T} = S^T / S$$

$$\Delta F_{S^T} = F_t - F_{t-1} = \frac{S^T + \Delta S^T}{S} - \frac{S^T}{S} = \frac{\Delta S^T}{S}$$

$$\left(\frac{dF_{S^T}}{dt}\right)_i = ((A_{T,i})_{chem+emis^T} + (B_{T,i})_{dif+adv+conv}) / S_i$$



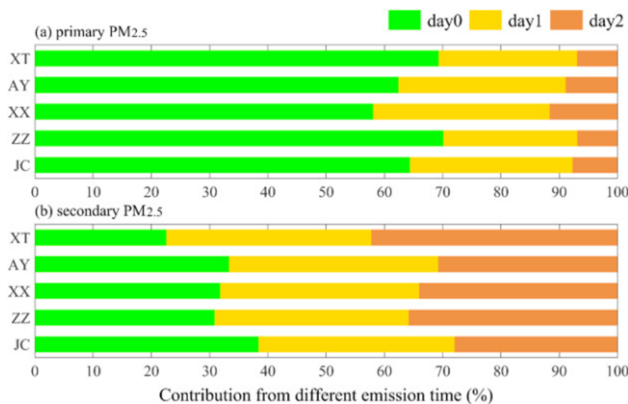
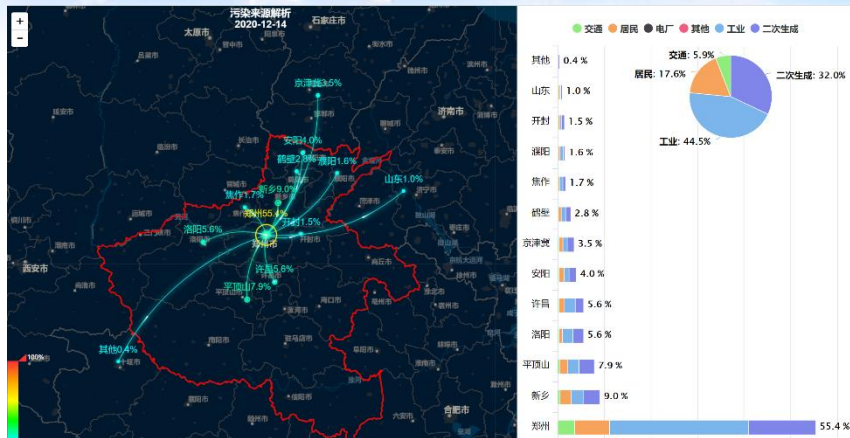


1. 污染物来源定量计算分析

集成分析子系统-污染来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

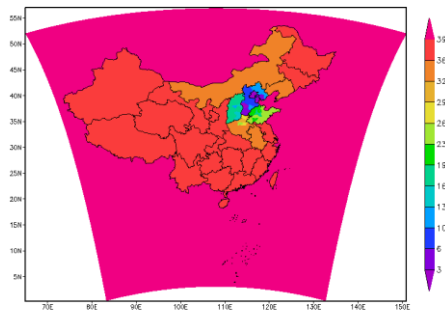




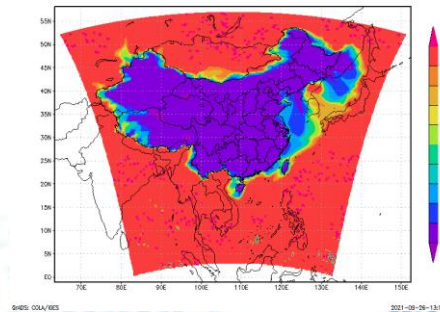
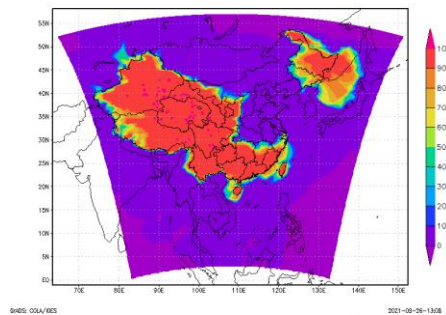
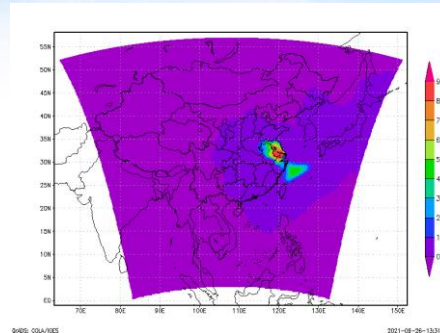
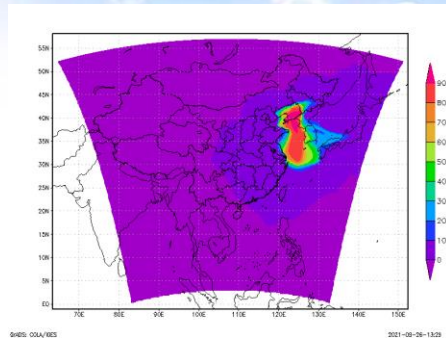
1. 污染物来源定量计算分析

新版源解析模块研发集成

- 支持一次、二次污染物;
- 按区域、行业和时间解析;
- 污染来源追踪源区数: 40个以上



案例1: 3-1公里 D1层源解析ID



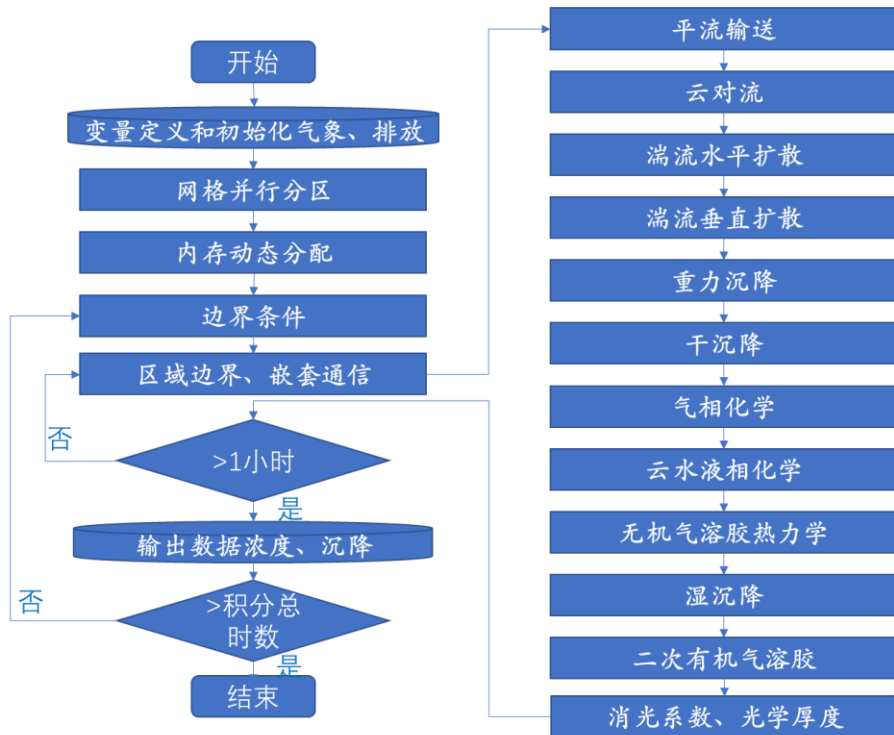
案例2: 2021冬奥同期期间的各源区污染物PM_{2.5}贡献占比



2.支持完善的物理化学过程分析

通过系统设置文件中的lprocess参数来控制

lprocess = .true. 打开过程分析, 过程分析模块默认关闭

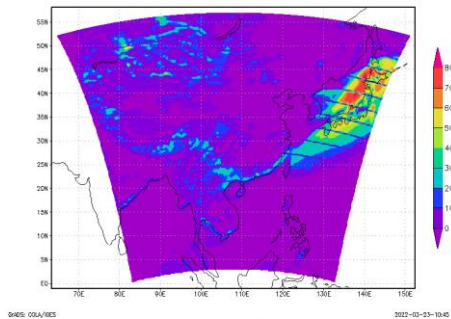




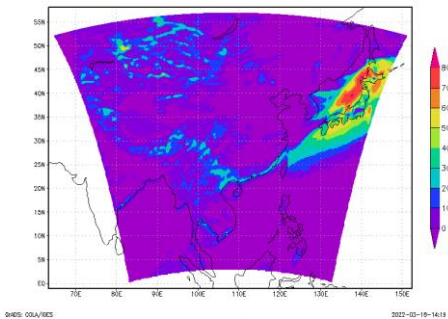
2.支持完善的物理化学过程分析

通过系统设置文件中的lprocess参数来控制

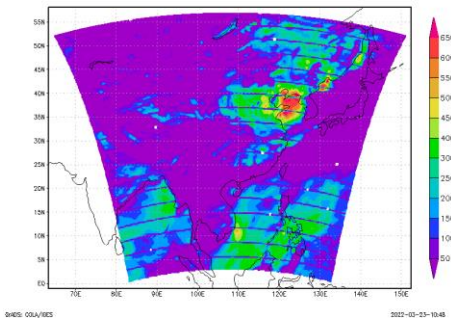
`lprocess = .true.` 打开过程分析, 过程分析模块默认关闭



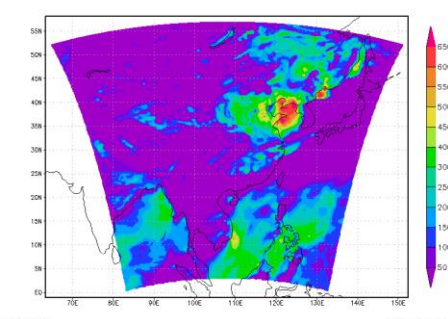
insou修改前



insou修改后



innor修改前



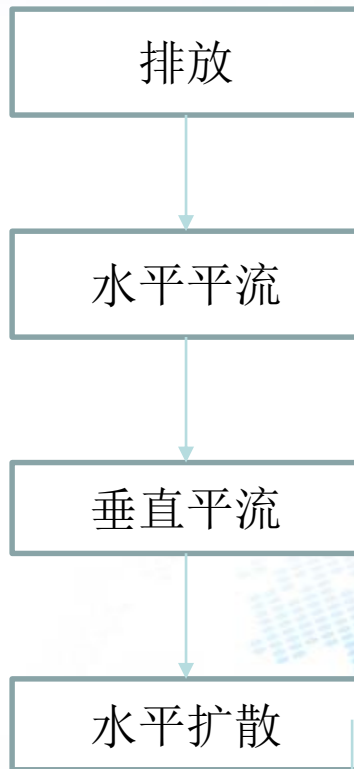
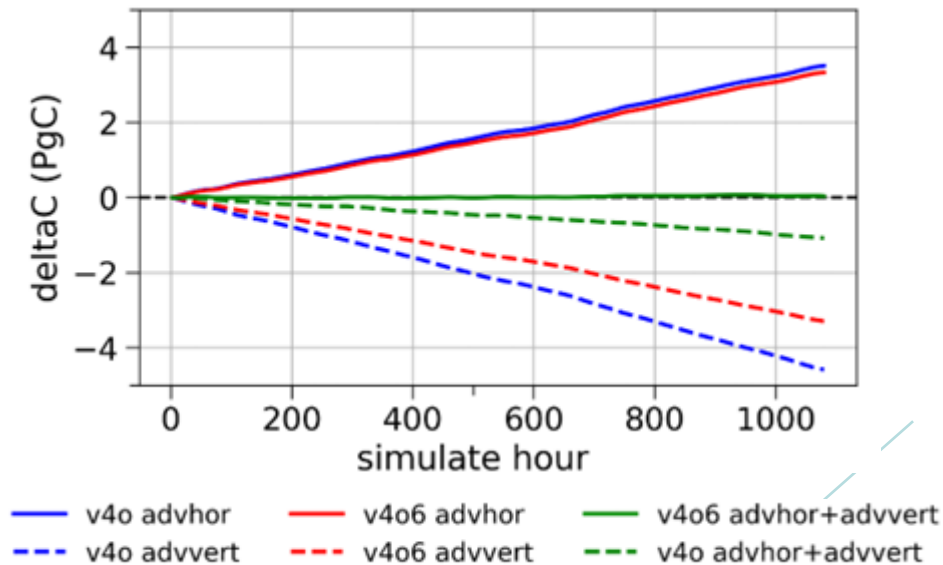
innor修改后



2.支持完善的物理化学过程分析

通过系统设置文件中的lprocess参数来控制

`lprocess = .true.` 打开过程分析, 过程分析模块默认关闭





子系统4 大气污染模拟异构加速计算子系统

- 1 CPU并行加速
- 2 CPU并行加速-支持3-1公里区域嵌套高精度快速模拟





1.CPU并行加速

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

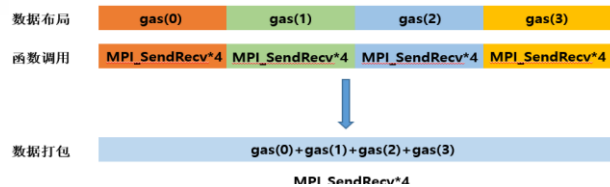
nproc_x=	4	nproc_y=	15
nproc_x=	5	nproc_y=	12
nproc_x=	6	nproc_y=	10

...

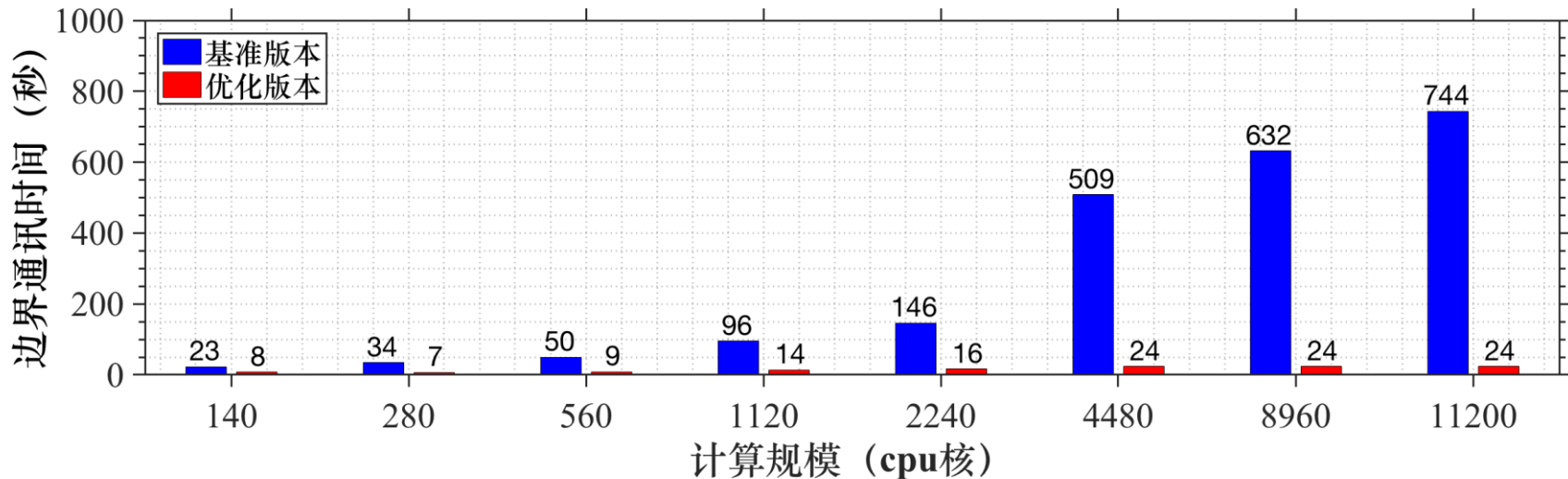


1.CPU并行加速

- 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



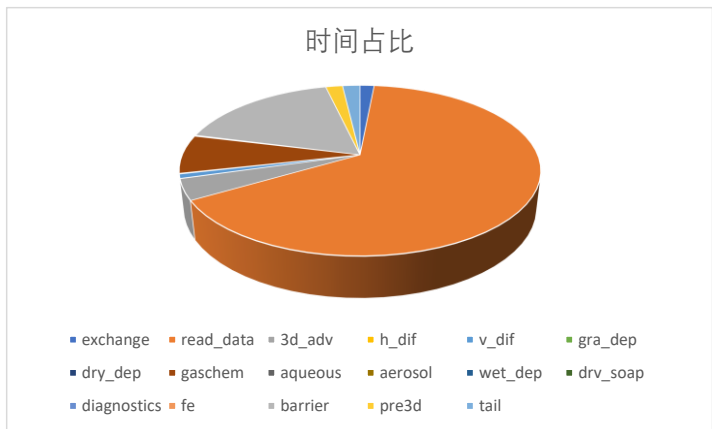
- ✓ MPI通信优化后，当运行规模拓展至4000核以上，**通信开销基本不随核数变化**



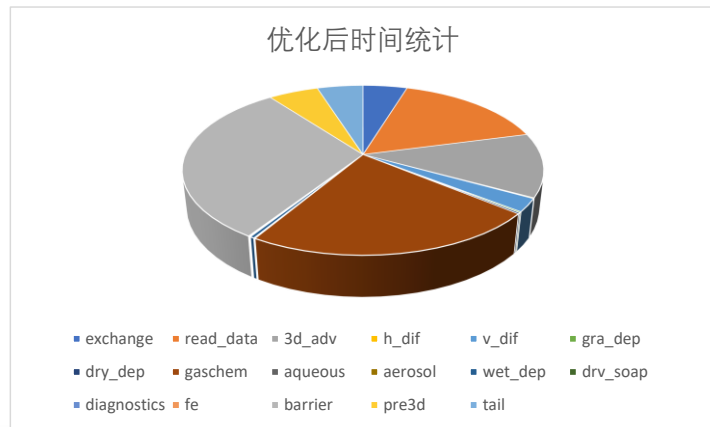
2.CPU并行加速- 支持3-1公里区域嵌套高精度快速模拟

分析：时间占比最大的是IO时间 方案：采用mpio

问题：数据读取效率高，但由于通信量加大，运行出现卡死
调整通信参数，解决卡死问题



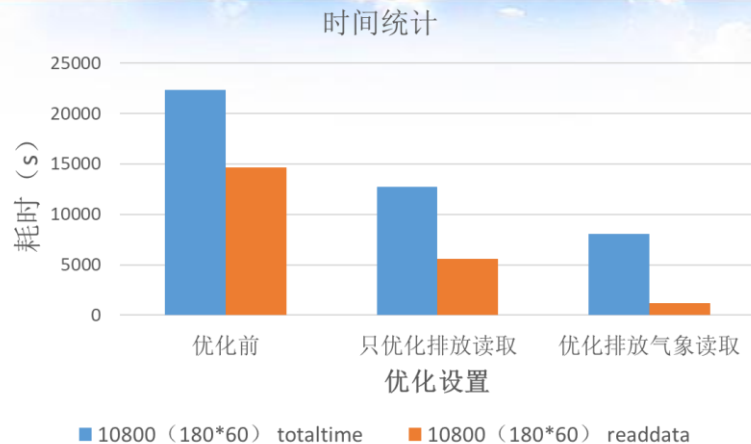
数据读取时间占比
由超70%下降为16%，
基本消除IO瓶颈





2.CPU并行加速- 支持3-1公里区域嵌套高精度快速模拟

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



	10800核心 total time	10800核心 readdata time	Ratio of total time	Ratio of readdata time
优化前	22340.55	14616.36	1	1
只优化排放读取	12745.87	5566.13	0.57	0.38
优化排放气象读取 +通信参数优化	8061.34	1225.34	0.36	0.08



2.CPU并行加速 -支持3-1公里区域嵌套高精度快速模拟

排放数据读取优化通过系统设置文件中的rd_freq参数相关

rd_freq = 'monthly' 按月读取排放数据, 自动开启排放数据读取优化

rd_freq = 'daily' 按天读取排放数据

Rd_freq = 'hourly' 按小时读取排放数据

```
& emissions_setting
nemit=25, !THE NUMBER OF SPECIES IN EMISSIONS FILES
nlay_em=5, ! THE TYPE OF EMISSIONS
lrd_emit3d=.false.,
rd_freq = "monthly",
emitfname = "emit/data.emit/emitgrid_"
/
```





三、区域高精度大气污染模式 分系统应用





全国3公里重点区域1公里高精度空气质量预报应用

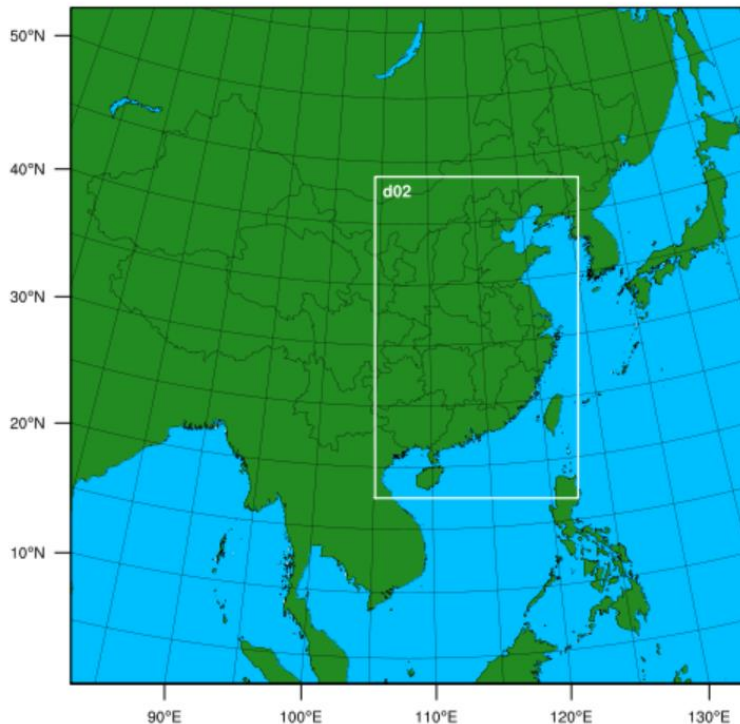
嵌套区域：

D1区域包括了南海，D2区域包括京津冀及周边、长三角、珠三角等重点关注区域。

```
&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,
```



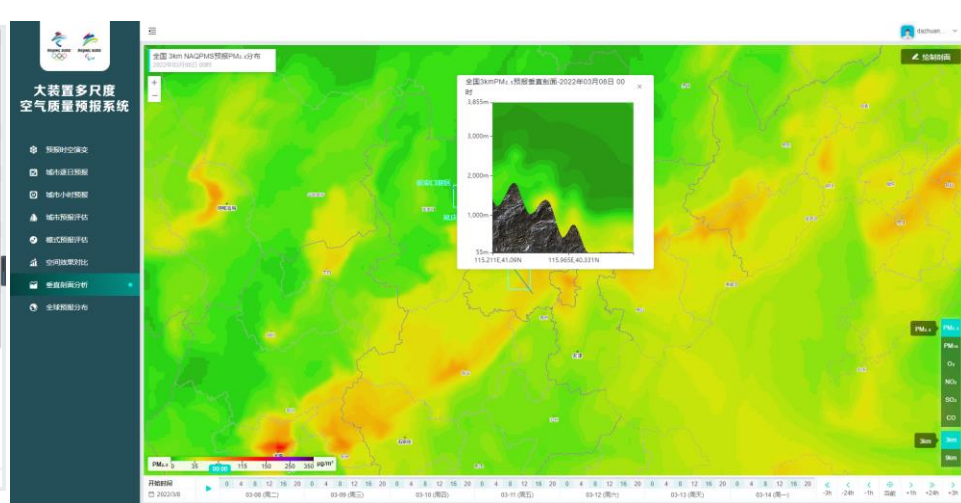
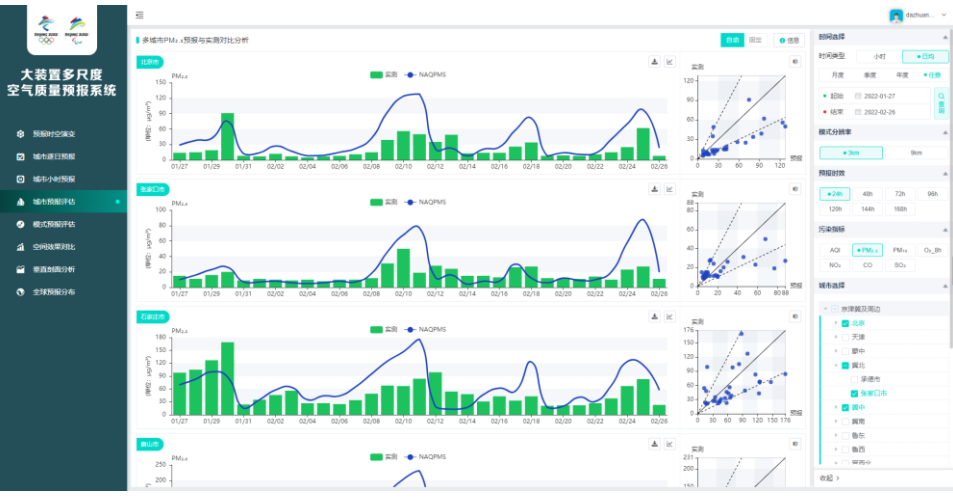
WPS Domain Configuration





全国3公里高精度空气质量预报应用

模式应用于地球模拟器业务预报系统, 服务于2022年冬奥保障





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27日