

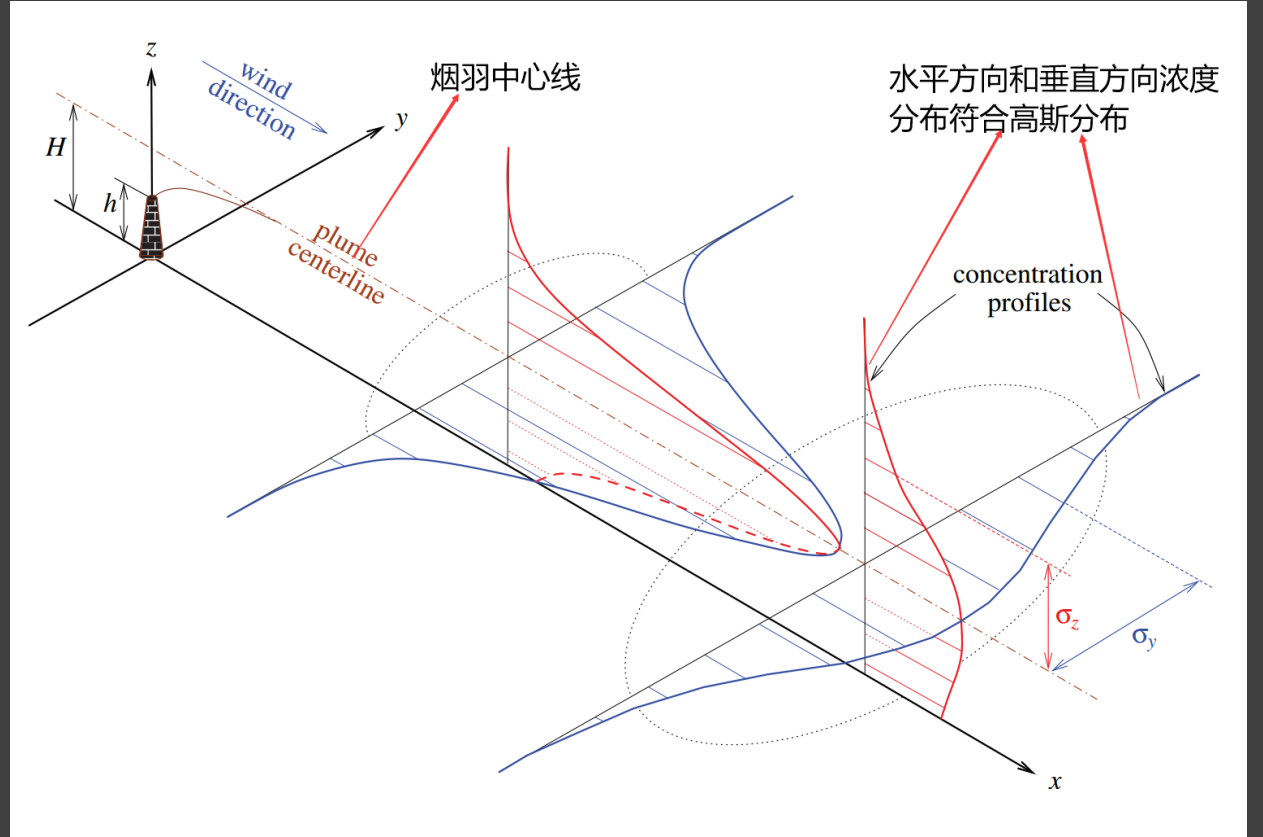
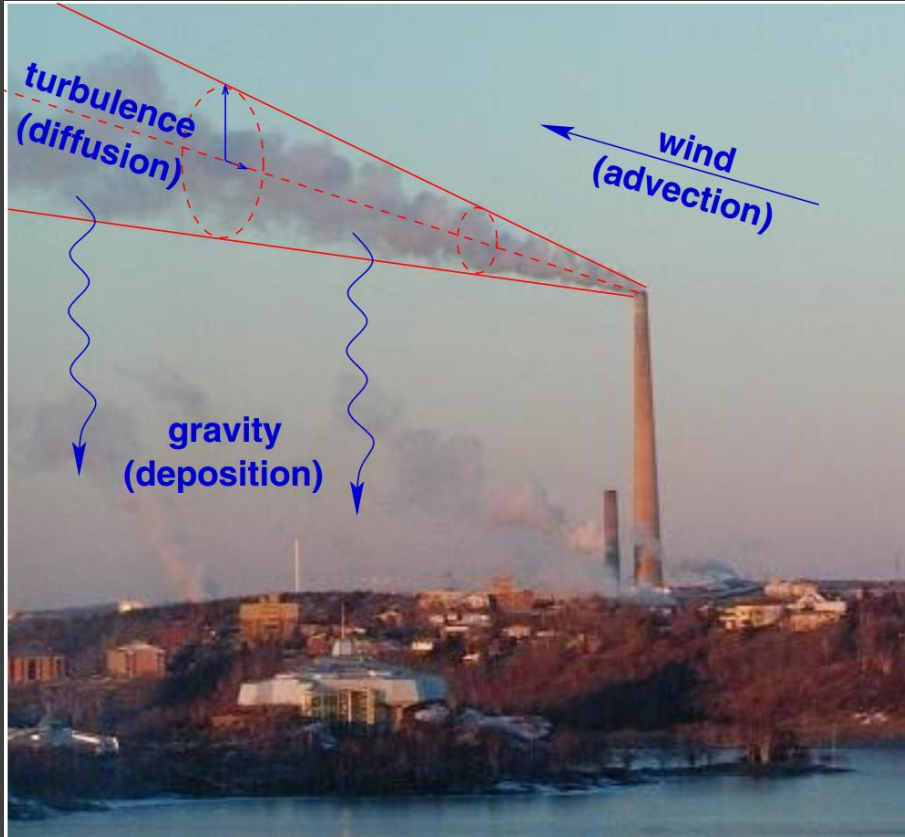
# 光化学空气质量 质量模型

第一部分：空气质量模型介绍和中尺度  
气象模型WRF

# 空气质量模型简介

# 空气质量模型分类

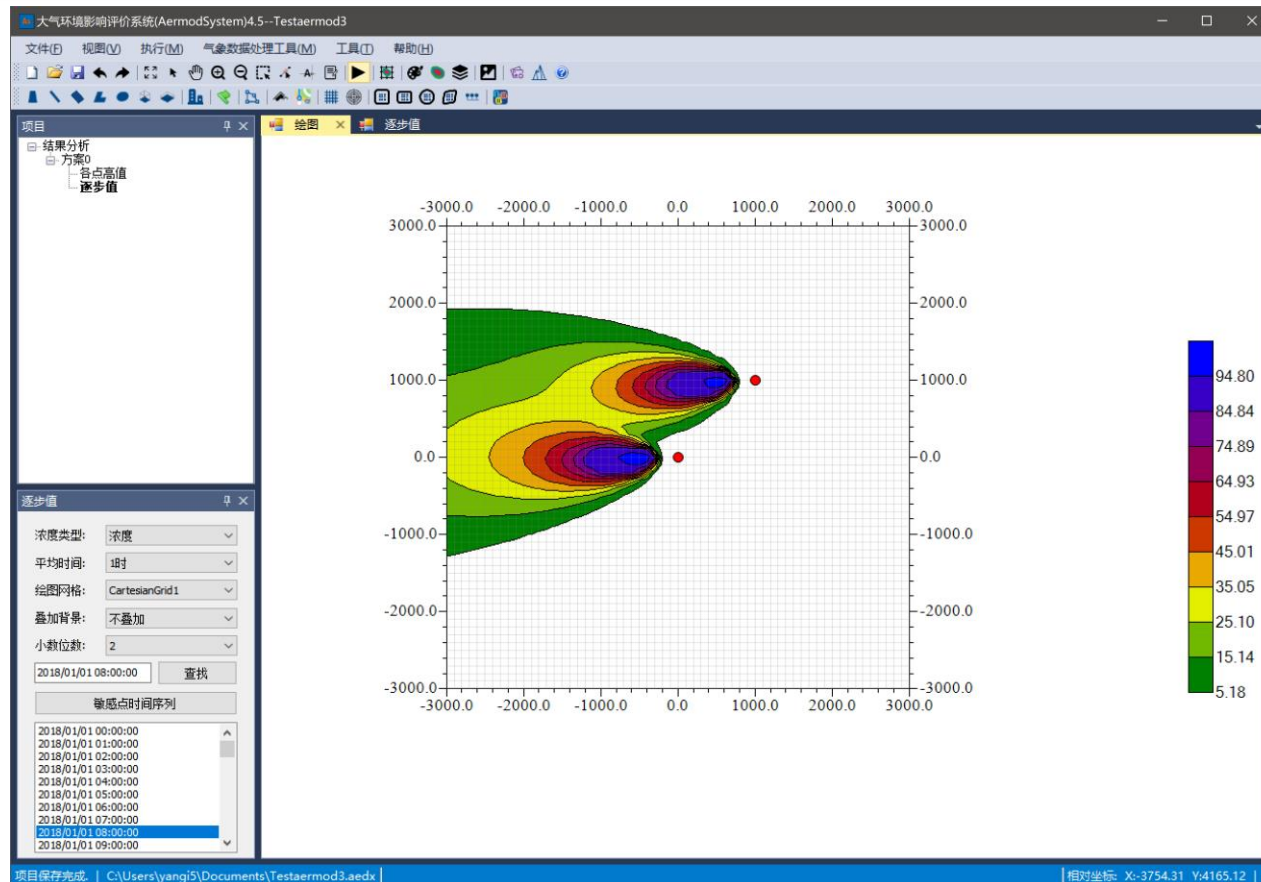
- 按照污染源和污染物
  - 单源单污染物
  - 多源单污染物
  - 多源多污染物（污染物之间简单关系）
  - 多源多污染物带化学机制（污染物之间复杂关系，比如NOX、O3、VOC复杂的非线性关系）
- 模拟尺度
  - 局地尺度（50km以下）
  - 城市尺度（几十到几百千米）
  - 区域尺度（几百千米以上）
- 描述污染的方式
  - 拉格朗日模型
    - 烟羽模型高斯
    - 烟团模型高斯
    - 粒子模型
  - 欧拉模型
- 采样时间
  - 瞬时模型
  - 时间平均模型



## 高斯烟羽模型

- 基本原理
  - 将污染气团假设为连续的烟羽，浓度分布符合高斯分布
- 代表模型
  - AERMOD (美国)
  - ADMS (英国)

# 高斯烟羽模型-AERMOD模型



## • 介绍

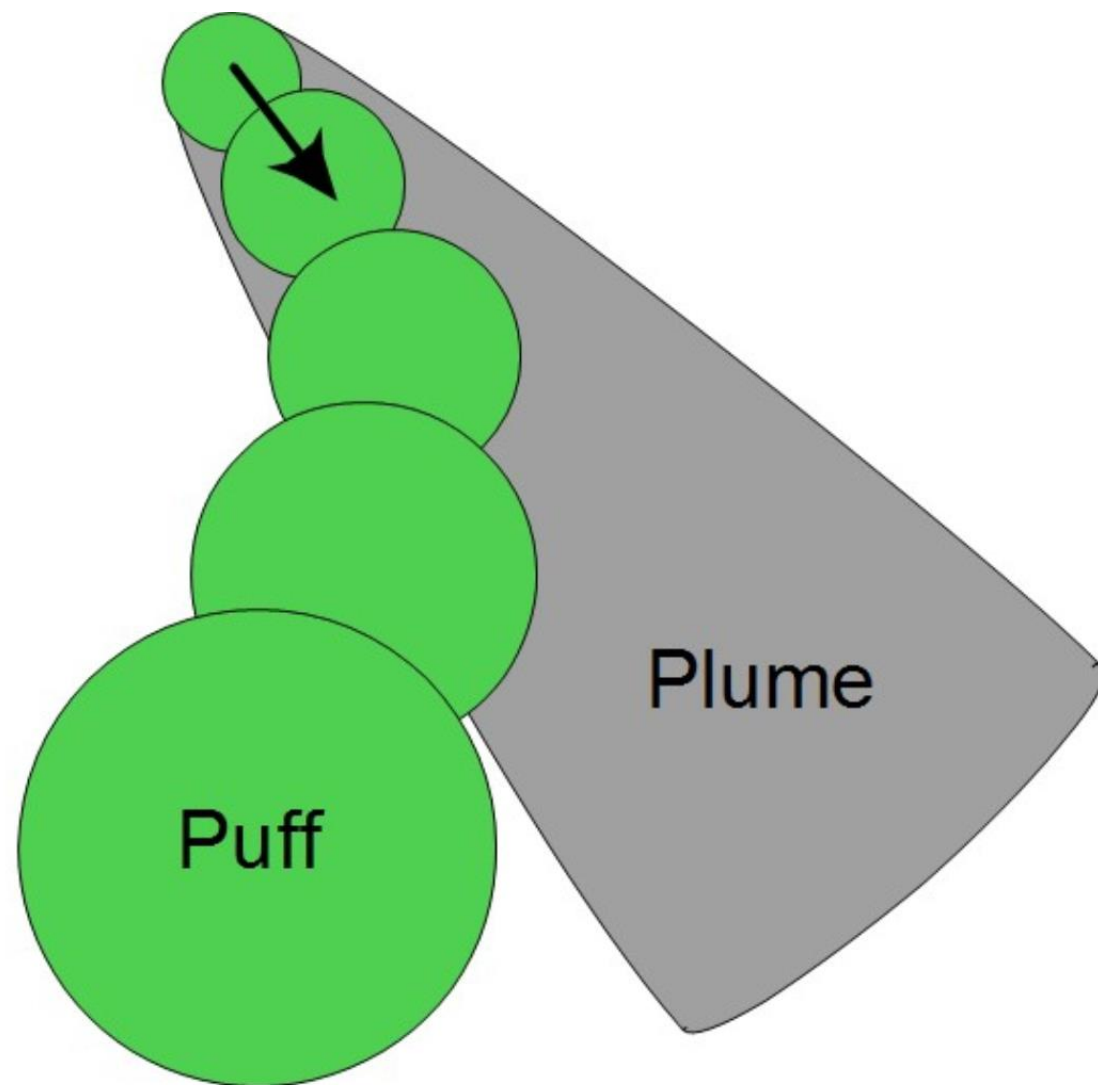
- 美国气象学会(AMS)和美国环保署(EPA)联合开发(1991年开始),目的是把当前的行星边界层概念引入规则的扩散模型,替代老旧的ISC3.
- 稳态烟羽模型
- 可以考虑建筑物下洗、复杂地形、城市边界层
- 优化浓度分布,在对流边界层(CBL),垂直分布被描述成双重概率密度函数

## • 特点

- 多源单污染物
- 适用局地尺度(50km以下)
- 高斯烟羽模型
- 时间平均模型

# 高斯烟团模型

- 基本原理
  - 将污染气团假设为离散的烟团, 浓度分布符合高斯分布
- 代表模型
  - CALPUFF (美国)
  - SCIPUFF (美国)
  - INPUFF (美国)



# 高斯烟团模型-CALPUFF模型

- 简述

- 采用拉格朗日的方法描述和追踪烟团，非定常三维拉格朗日烟团模式
- 具有一个三维诊断风场模型CALMET，可以调用多个气象站以及中尺度模型的数据来计算三维气象场
- 可以处理复杂地形、建筑物下洗、干湿沉降
- 内嵌了简单的化学机制，SO<sub>2</sub>、NO<sub>x</sub>-SO<sub>4</sub>、NO<sub>3</sub>和苯、二甲苯-SOA

- 分类

- 多源多污染物（简单）
- 适用局地尺度（50km以下）和城市尺度（几十到几百千米）
- 高斯烟团模型
- 时间平均模型

项目管理器

- Calmet结果分析
- Calpuff结果分析
  - 方案
    - 预测情景1
      - S02
        - 各点最大值
        - 逐步值

逐步值

名称: S02

浓度类型: 浓度

平均时间: 1h

绘图网格: 网格

叠加背景: 不叠加

小数位数: 2

风场网格层数: 1

叠加风场

2017/01/03 07:00:00 查找

显示所有敏感点浓度序列

- 2017/01/02 19:00:00
- 2017/01/02 20:00:00
- 2017/01/02 21:00:00
- 2017/01/02 22:00:00
- 2017/01/02 23:00:00
- 2017/01/03 00:00:00
- 2017/01/03 01:00:00
- 2017/01/03 02:00:00
- 2017/01/03 03:00:00
- 2017/01/03 04:00:00
- 2017/01/03 05:00:00
- 2017/01/03 06:00:00
- 2017/01/03 07:00:00
- 2017/01/03 08:00:00



# 拉格朗日粒子模型

- 基本原理
  - 拉格朗日粒子模型计算大量所谓粒子(不一定代表真实粒子, 但无穷小的空气包裹)的轨迹, 以描述示踪剂在大气中的运输和扩散
- 代表模型
  - Austl2000 (德国空气质量法规模型)
  - FLEXPART (欧洲)
  - Hysplit (美国)

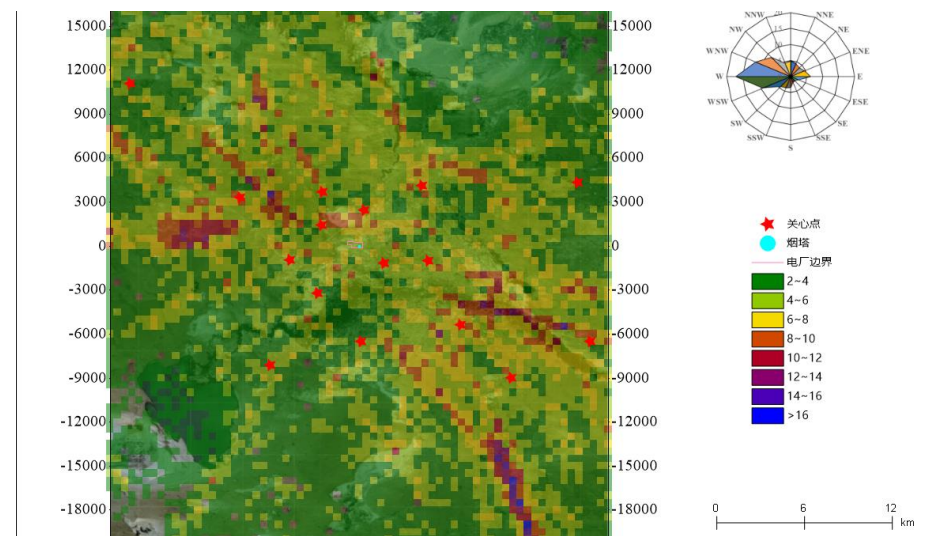
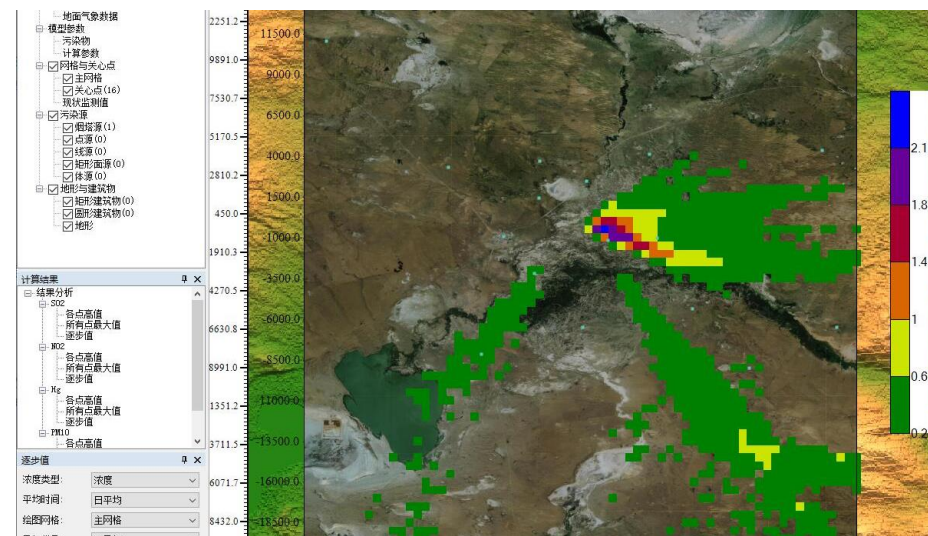
# 拉格朗日随机粒子模型 - austal2000

## 简介

- 德国空气质量法规模型
- 除了点源、面源外可以计算电厂冷却塔排烟的扩散模拟

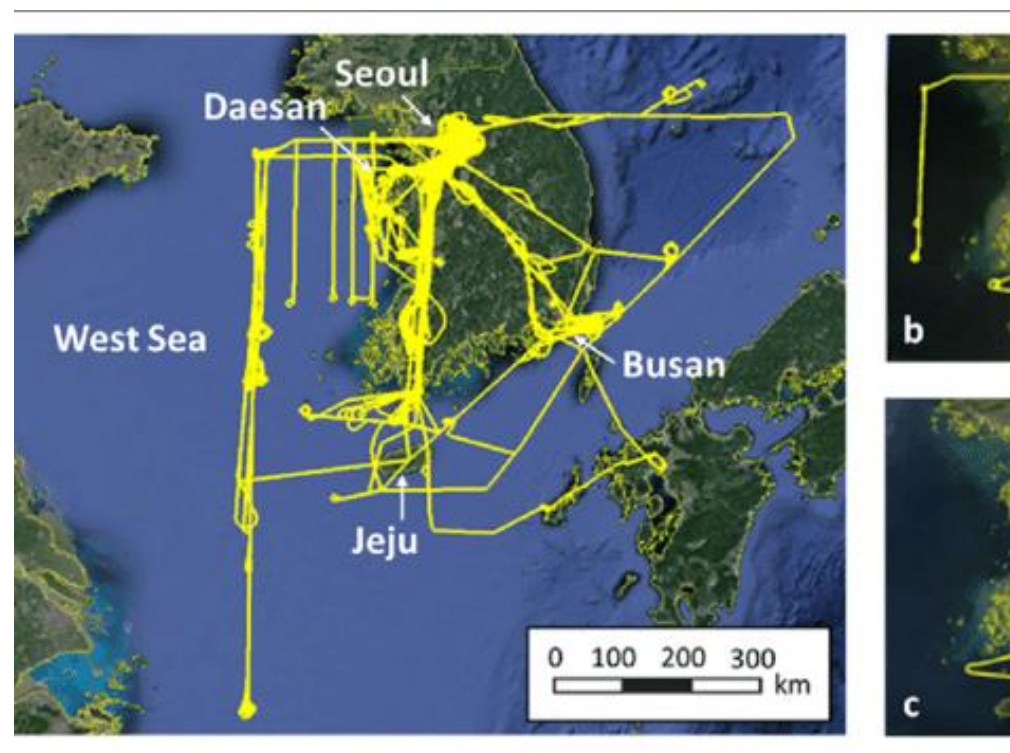
## 分类

- 多源单污染物，但可以一次运行多个污染物
- 适用局地尺度（50km以下）
- 拉格朗日粒子模型
- 时间平均模型



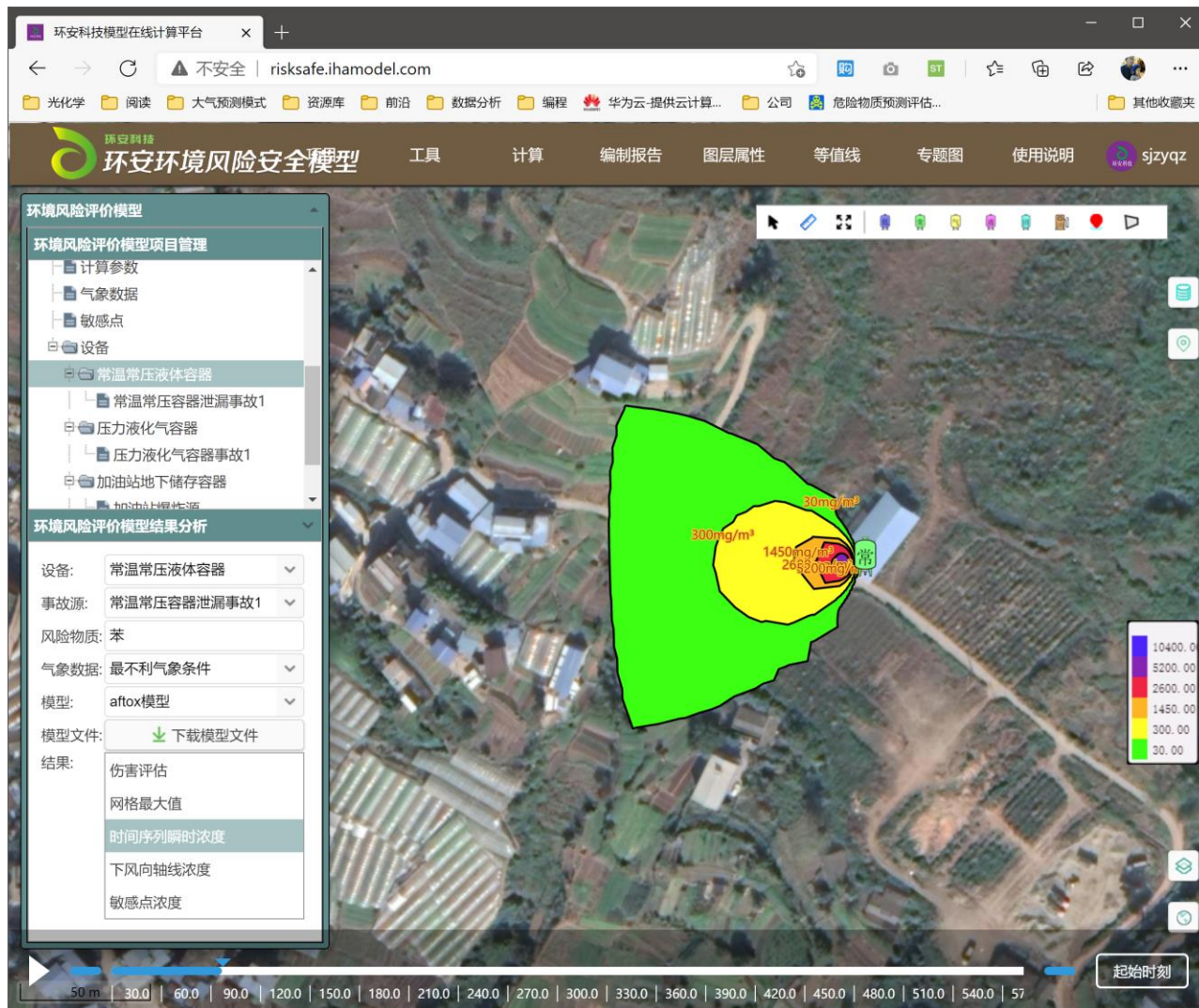
# 拉格朗日随机粒子模型-FLEXPART

- 介绍
  - FLEXPART的拉格朗日粒子弥散模型最初(1998年首次发布)是用来计算点源空气污染物的远距离和中尺度弥散,比如核电站事故后的弥散。
  - 考虑了中尺度传输、扩散、干湿沉降和放射性衰变。
  - 可计算粒子轨迹
  - 带有源-受体反算模式
- 分类
  - 多源单污染物,但可以一次运行多个污染物
  - 适用局地尺度(50km以下)和城市尺度(几十到几百千米)区域尺度(几百千米以上)
  - 拉格朗日粒子模型
  - 时间平均模型

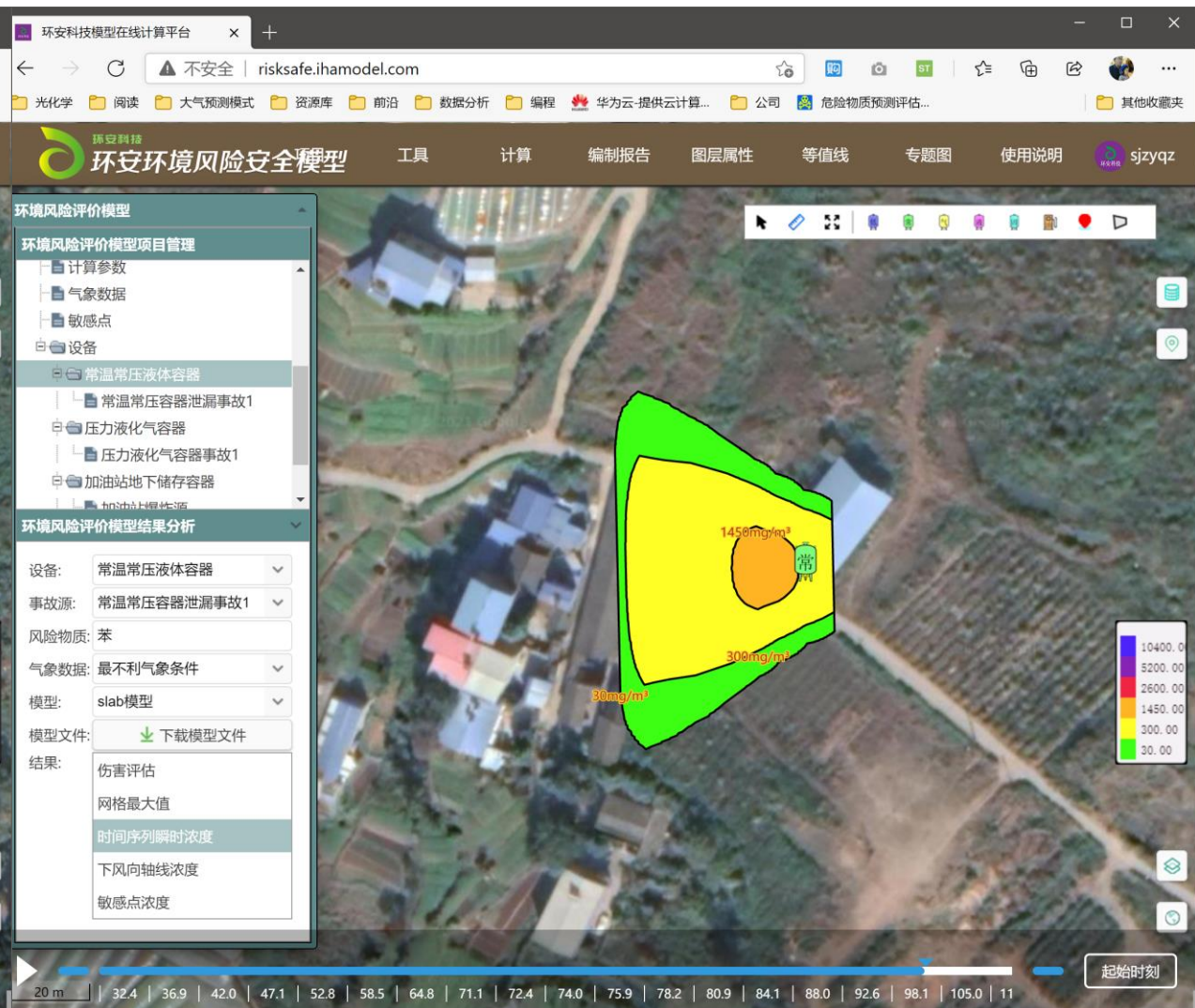


# 瞬时模型

- 中性气体模型AFTOX
  - 有毒有害物质扩散模型
  - 高斯模型
- 重气体模型SLAB
  - 浅层模型
  - 扩散与污染源释放状态和化学物质物化性质有关
- 分类
  - 单源单污染物
  - 适用局地尺度（50km以下）
  - 瞬时模型



• 中性气体模型AFTOX



• 重气体模型SLAB

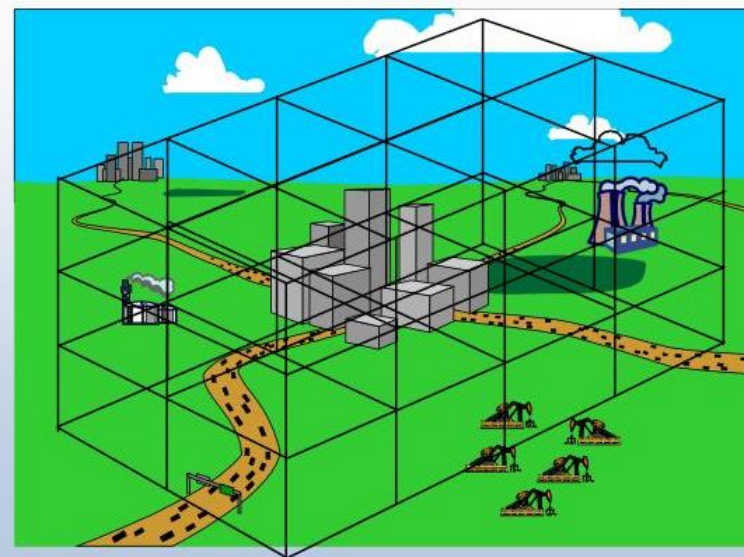
# 区域光化学网格模型

- 区域光化学网格模型：简称网格模型。采用包含复杂大气物理（平流、扩散、边界层、云、降水、干沉降等）和大气化学（气、液、气溶胶、非均相）算法以及网格化的输送化学转化模型，一般用于模拟城市和区域尺度的大气污染物输送与化学转化。
- 目前应用比较广的两个区域光化学网格模型为CMAQ和CAMx。



ENVIRON

## *Eulerian (Grid) Model Concept*



# 光化学网格模型模拟特点

1. 空气中复杂的光化学反应。排放到空气中的污染物在光化学活性分子的影响下发生多相化学反应、气相反应、液相反应和云内化学反应，生成二次污染物。比如京津冀地区的PM<sub>2.5</sub>污染以二次污染为主。
2. 多尺度气象场对空气质量的影响。在区域尺度范围内必须考虑气象场的影响，以京津冀地区为例，北京地区的颗粒物来源可划分为5条输送通道，京津冀平原地区受到太行山过山气流下沉影响降低了大气对污染物的容纳能力，弱气压场、地形辐合线、稳定层结都加重了本地区域的污染程度。
3. 污染源清单，区域空气质量模型基于“一个大气”思想考虑，需要研究区域内所有污染源，因此区域空气质量模拟首先要收集研究区域内所有的污染源。
4. 污染物种，区域空气质量模拟需要考虑复杂的光化学反应，需要将常规污染物PM<sub>2.5</sub>和VOC分配到具体的物种，区域空气质量模拟研究区域的污染源谱。
5. 计算量，区域尺度空气质量模拟由于计算量庞大，模型一般都支持并行计算，一般布设在小型机或者计算机集群上面才能发挥较好的性能。

# 社区空气质量模型CMAQ

1. 大气中各种污染物和污染问题是通过化学反应紧密相关的，Models-3/CMAQ基于“一个大气”的思想，可以同时进行多种污染物和污染问题（包括光化学反应、颗粒物、酸沉降和能见度等）的模拟计算，并且可以耦合MIMS模型进行跨媒介（土壤、地表水）的模拟。
2. Models-3/CMAQ能够进行多尺度、多层网格嵌套的模拟，在空间上具备很好的通用性和灵活性。在使用大网格进行背景场影响分析的同时，可以采用细网格对所关心区域进行模拟研究
3. Models-3/CMAQ具备良好的气象接口，能够方便地利用一些气象预报模型（如RAMS模型、WRF）的计算结果，为后继排放和化学转化模块提供较为详细和准确的气象场，也为应用于空气质量预报提供了很好的条件。
4. Models-3/CMAQ具有模块化的机构，易于对大气物理、化学过程的机理或算法进行修改和调整，为使用者提供化学反应机理研究的平台。
5. Models-3/CMAQ具有很强的开放性。它结合了近年来计算机技术的发展和大气科学的最新研究进展，比如烟羽在网格内初始扩散的算法、更详细的液相化学反应、云雨物理和光化学反应，更高效的数值计算方法以及数据的三维可视化分析。



# 复杂多尺度空气质量模型CAMx

- CAMx模式是美国ENVIRON公司开发的第三代三维空气质量模型，可应用于多尺度的、有关光化学烟雾和细颗粒物大气污染的综合模拟研究，并且可利用MM5、WRF等中尺度气象模式提供的气象场，在三维嵌套网格中模拟对流层污染物的排放、传输、化学反应及去除等过程。目前CAMx可提供多个扩展功能，如**臭氧源示踪技术**、**颗粒物源示踪技术**、敏感性分析、反应示踪分析、过程分析等。这些扩展模块的使用丰富了目前模式中的使用范围，包括源解析技术、敏感性实验、化学过程分析等均对模式的发展起到了重要作用。

当前项目-河南测试项目-camx

项目管理

选择导入的项目

设置解析点

背景值

计算设置

计算

结果分析

逐步值

设置颜色

henan

结果分析

方案名称：测试项目\_PM2.5

污染物：PM2.5

平均时间：24小时

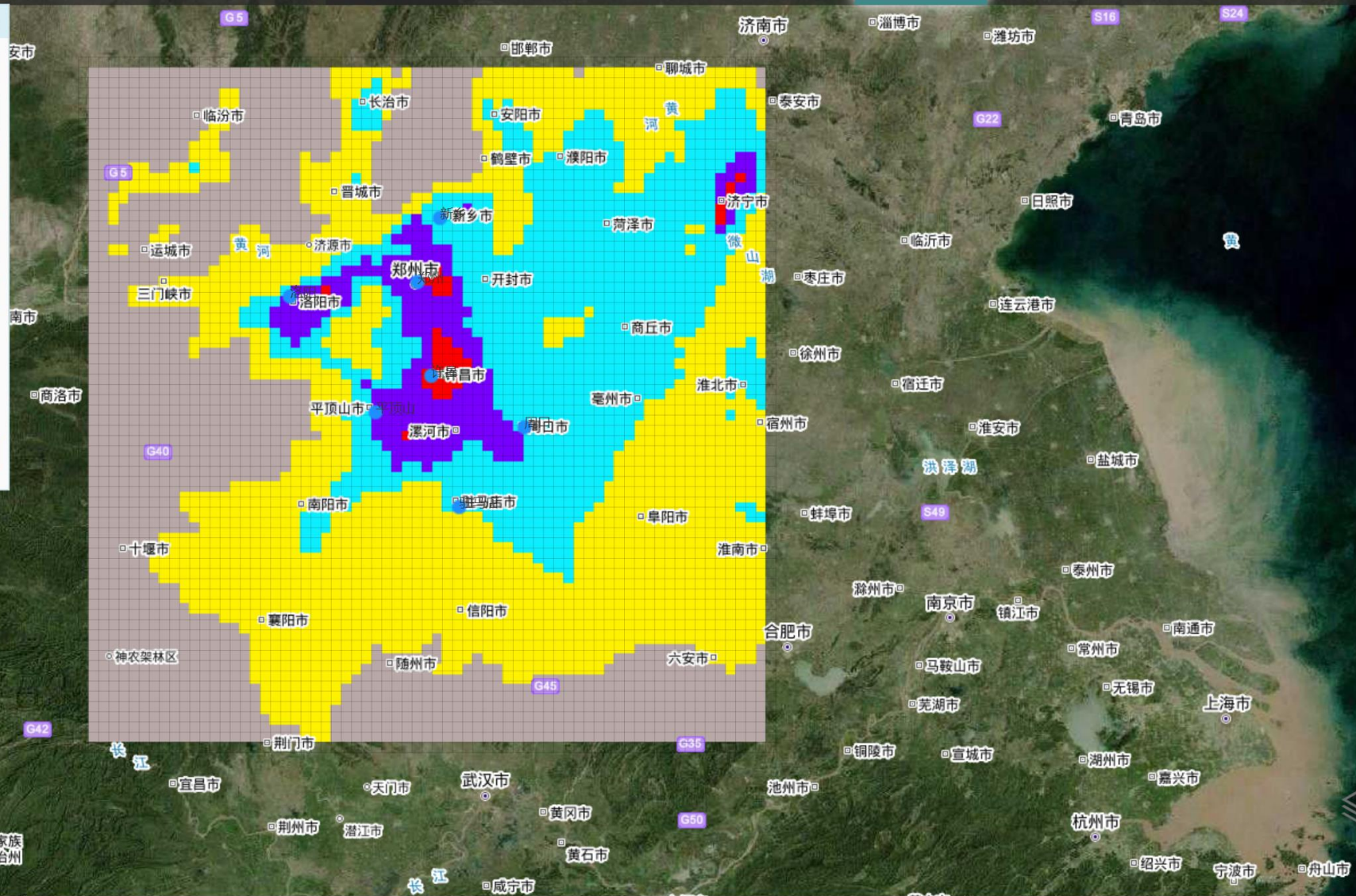
高值类型：各点最大值

绘图网格：网格

叠加背景：不叠加背景

查看Excel

关闭



# 光化学空气质量模型模拟体系



气象模型

常用的是WRF、RAMS



污染源模型

常用SMOKE



空气质量模型

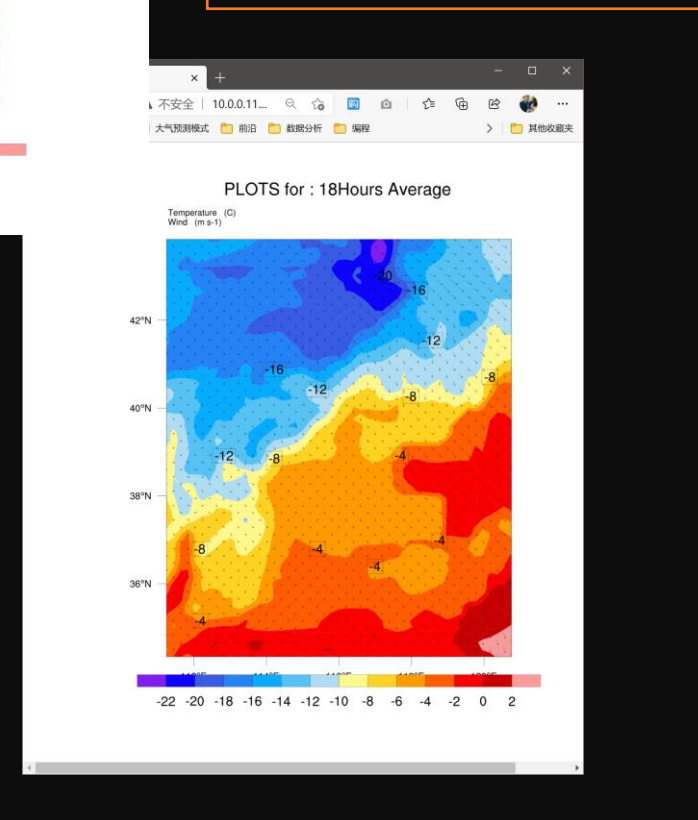
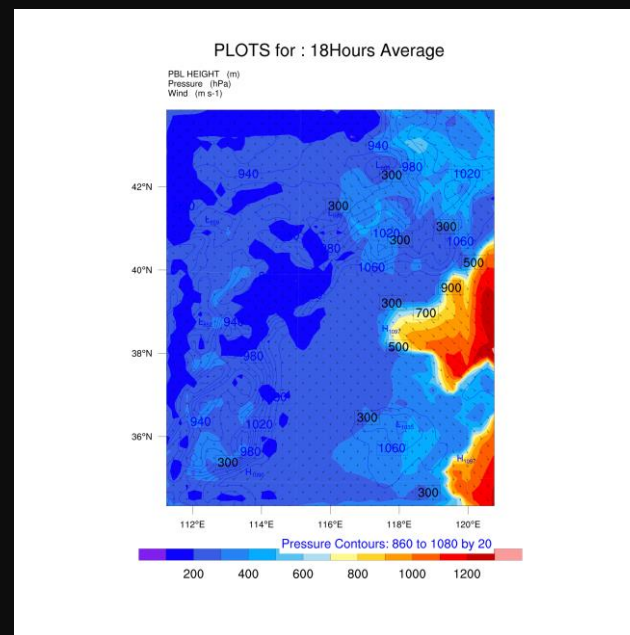
常用CMAQ、CAMx、WRF-Chem



数据后处理

Ncl

# 中尺度气象模型WRF



# 气象模型

## 天气模式

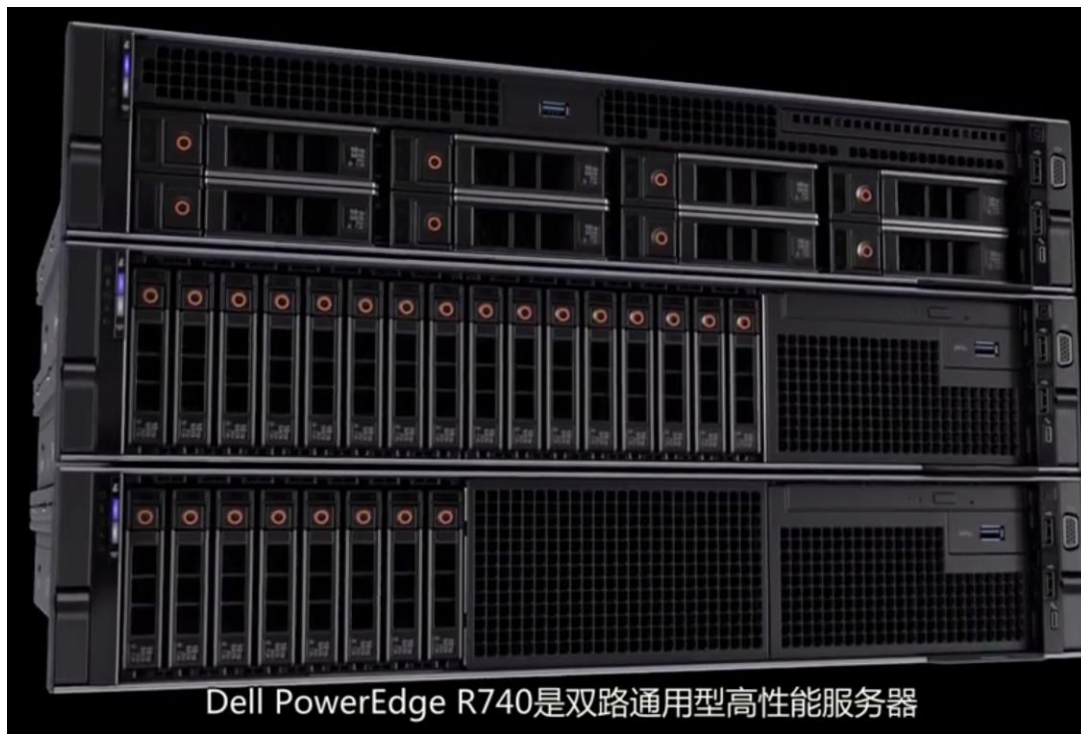
- 尺度上一般为中尺度模式 Mesoscale Model, MM
- [Weather Research and Forecasting Model \(WRF\)](#)
- [Regional Atmospheric Modeling System \(RAMS\)](#)

## 气候模型

- 尺度上一般为大气环流模式 General Circulation model, GCM
- [区域气候模型 Regional climate modeling system \(GegCM\)](#)

# WRF/SMOKE/CMAQ 运行环境

- 服务器端
  - 硬件：IBM、Cray等品牌x86服务器
  - 操作系统：Linux
  - 软件支持：GNU编译器或者Intel编译器
- 客户端：
  - 硬件：兼容计算机
  - 操作系统：windows linux macOS均可
  - 支持VPN连接的客户端



Dell PowerEdge R740是双路通用型高性能服务器



# 在哪运行WRF

- 超算中心 商业付费-课题申请
  - 超算济南中心<http://www.nscjcn.cn/>
  - 超算广州中心<http://www.nscg-z.cn/> 天河二号在广州中心管理
- 公有云 商业付费 -按小时付费
  - 阿里云 <https://cn.aliyun.com/>
  - 华为云 <https://www.huaweicloud.com/>
  - 腾讯云 <https://cloud.tencent.com/>
  - 电信云 <https://www.ctyun.cn/h5/home/>
- 自搭建平台 自主可控 一次投入
  - 采购cpu、内存、硬盘散件
  - 浪潮、DELL整机

# 准备运行WRF-WRF的安装和编译

- 编译和编译器-编译

- 编译(compilation , compile) 1、利用编译程序从源语言编写的源程序产生目标程序的过程。 2、用编译程序产生目标程序的动作。 编译就是把高级语言变成计算机可以识别的2进制语言, 计算机只认识1和0, 编译程序把人们熟悉的语言换成2进制的。编译程序把一个源程序翻译成目标程序的工作过程分为五个阶段: 词法分析; 语法分析; 语义检查和中间代码生成; 代码优化; 目标代码生成。
- 简单来说就是把程序员编写的源代码编译成可执行程序 (exe) 的过程。



# 准备运行WRF-WRF的安装和编译

- 编译和编译器-编译器

- 简单讲，编译器就是将“一种语言（通常为高级语言）”翻译为“另一种语言（通常为低级语言）”的程序。一个现代编译器的主要工作流程：源代码（source code）→ 预处理器（preprocessor）→ 编译器（compiler）→ 目标代码（object code）→ 链接器（Linker）→ 可执行程序（executables）。

- Gnu编译器

- C gcc
- C++ g++
- Fortran gfortan

- Intel 编译器

- C icc
- C++ icpc
- Fortran ifort

# 准备运行WRF-WRF的安装和编译

- WRF编译-主模型和库文件
- WRF模型
  - WPS
  - WRF
  - WRFDA
- 库文件
  - Netcdf
  - Zlib
  - Libpng
  - Jasper

# WRF运行流程

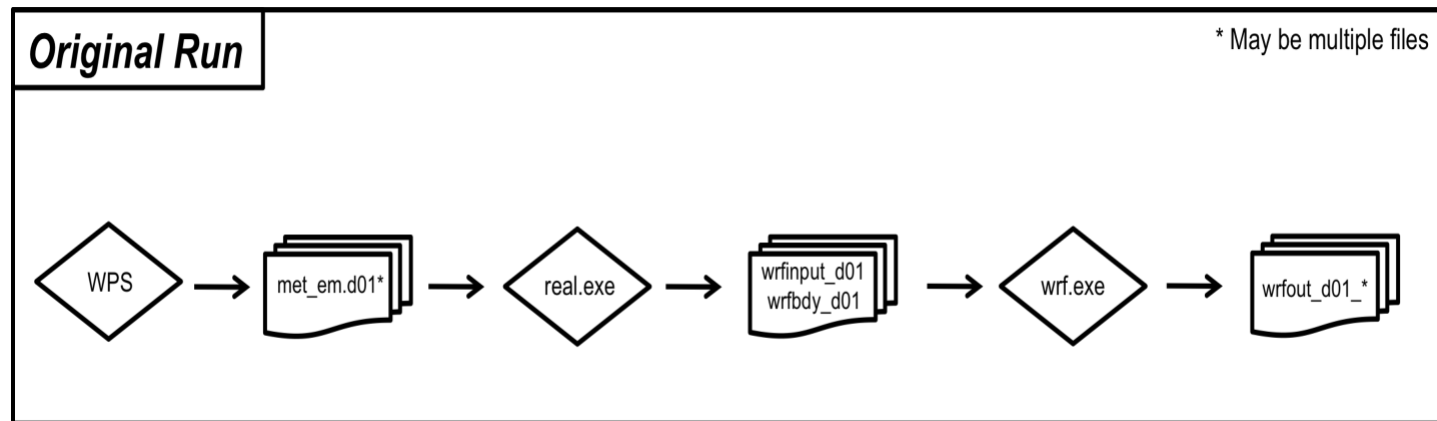
- 一种简单流程

- WPS

- 生成地形和土地利用数据geogrid.exe
- 连接基础气象数据集（GRIB格式）link.csh
- 读取GIRB格式文件并转写成中间格式ungirb.exe
- 将数据插值到模拟区域metgird.exe

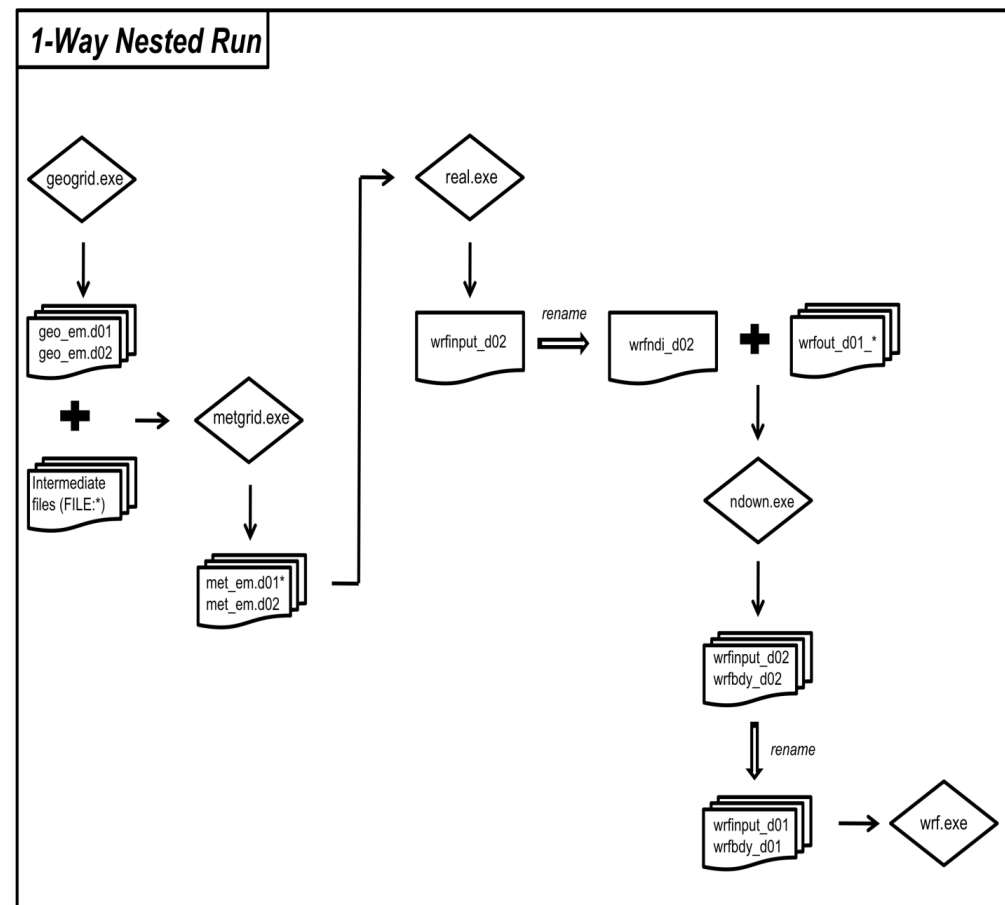
- WRF

- 初始化数据real.exe
- Wrf模拟wrf.exe



# WRF运行流程

- 1-way Nested Run
- WPS
  - 生成地形和土地利用数据geogrid.exe
  - 连接基础气象数据集（GRIB格式）link.csh
  - 读取GRIB格式文件并转写成中间格式ungrib.exe
  - 将数据插值到模拟区域metgird.exe
- WRF
  - 初始化数据real.exe
  - Ndown.exe
  - Wrf模拟wrf.exe



# 准备数据

- 地理数据
  - 必需数据
  - 特定选项下需要的数据
  - 可选输入数据
- NCEP数据
  - 基础数据
    - 1度分辨率数据DS083.2，来自全球资料同化系统
    - 0.25度分辨率数据DS083.3，来自全球资料同化系统
  - 观测数据
    - 地面和探空观测数据集DS337 bufr格式
    - 地面观测数据集DS451 little\_r格式

# WRF-替换地形和土地利用数据

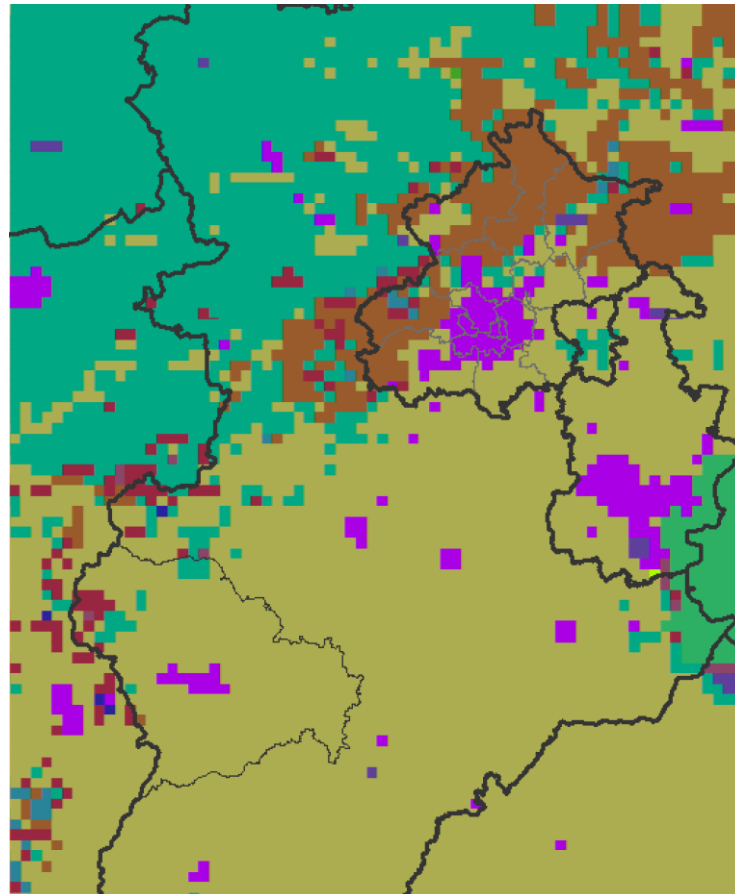
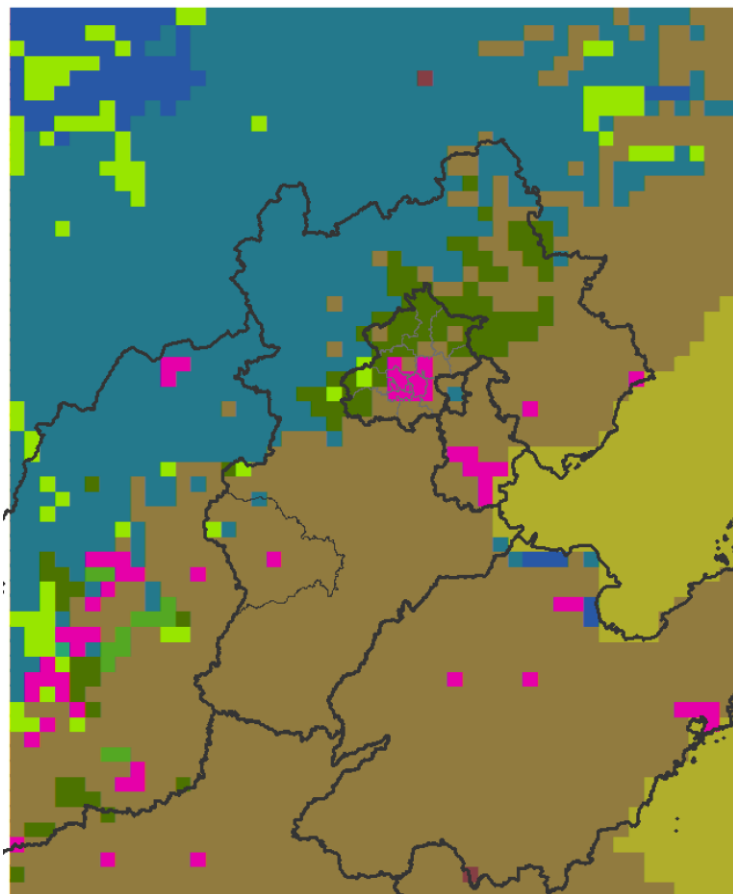
- 原理

- 方式1: 直接更新WPS读取的原始土地利用数据
- 方式2: 更新geo\_em.d01.nc中的
  - LANDMASK变量, 陆地和水面标识
  - LANDUSEF变量, 每一类土地利用类型所占该网格的比例, 小数表示
  - LU\_INDEX变量, 土地利用类型标识
  - HGT\_M变量, 地形, 直接修改海拔高度即可
  - LAI12M变量, modeis lai
- 土壤层参数, 应该也需要修改

- 工具

- [土地利用更新工具](#), 方式1
- [AMLUpdater](#), 方式1, 直接利用了清华大学的FROM-GLC 2015数据

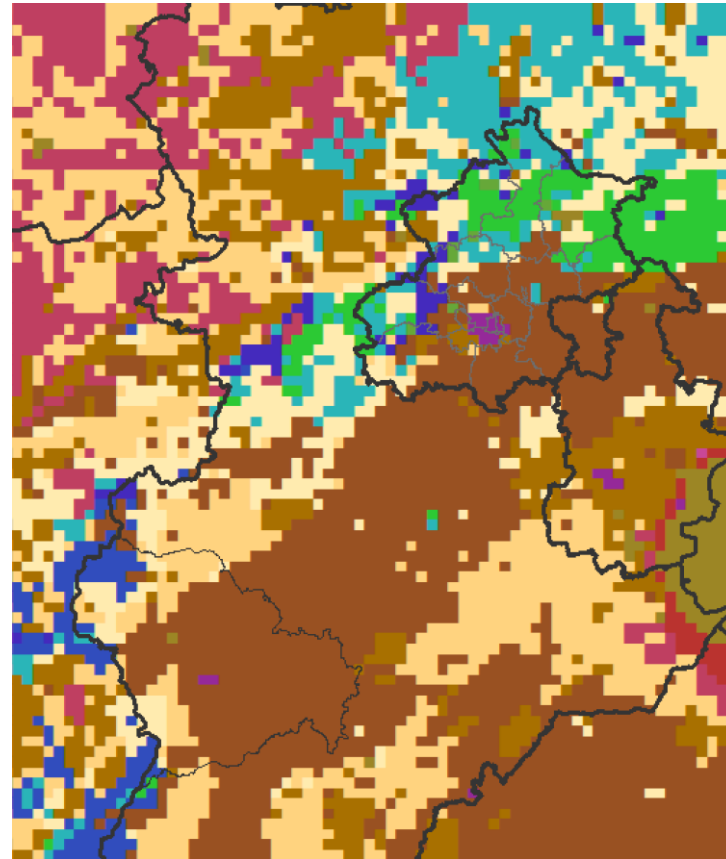
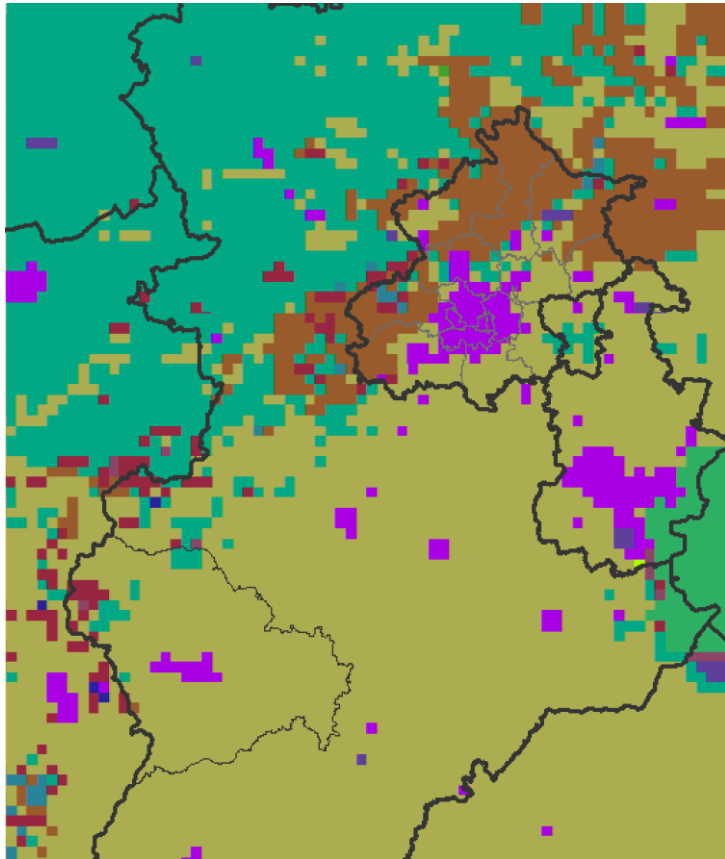
# 土地利用分类数据-IGBP-Modified MODIS 21-category



- 1 Evergreen Needleleaf Forest 常绿针叶林
- 2 Evergreen Broadleaf Forest 常绿阔叶林
- 3 Deciduous Needleleaf Forest 落叶针叶林
- 4 Deciduous Broadleaf Forest 落叶阔叶林
- 5 Mixed Forests 混交林
- 6 Closed Shrublands 封闭的灌木地
- 7 Open Shrublands 开放的灌木地
- 8 Woody Savannas 热带稀树草原
- 9 Savannas 草原
- 10 Grasslands 草原
- 11 Permanent Wetlands 永久性湿地
- 12 Croplands 农田
- 13 Urban and Built-Up 城市和建筑物
- 14 Cropland/Natural Vegetation Mosaic 农田/天然植被
- 15 Snow and Ice 冰雪
- 16 Barren or Sparsely Vegetated 贫瘠的或植被稀疏的
- 17 Water 水面
- 18 Wooded Tundra 森林苔原
- 19 Mixed Tundra 混合草原
- 20 Barren Tundra 贫瘠的苔原

# 土地利用分类数据-USGS

## 24个分类



- 1 城市和建设用
- 2 旱地农田和牧场
- 3 灌溉农田和牧场
- 4 旱地/灌溉耕地和牧场
- 5 农田/草原镶嵌
- 6 农田/林地镶嵌
- 7 草原
- 8 灌木地
- 9 混合灌丛带/草原
- 10 Savanna稀树大草原
- 11 落叶阔叶林
- 12 落叶针叶林
- 13 常绿阔叶林
- 常绿针叶林
- 15 混交林
- 16 水体
- 17 草本湿地
- 18 木本湿地
- 19 贫瘠的或稀疏植被的
- 20 草本苔原
- 21 森林苔原
- 22 苔原
- 23 裸露的苔原
- 24 雪或冰原



# 参数化方案

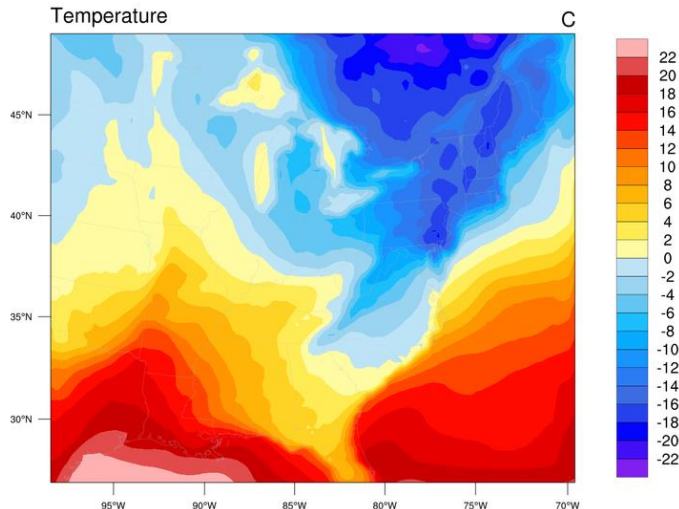
- 辐射过程参数化
- 微物理过程参数化
- 边界层参数化
- 积云对流参数化
- 陆面过程参数化

# 图形/数据处理工具 NCAR Command Language (NCL)

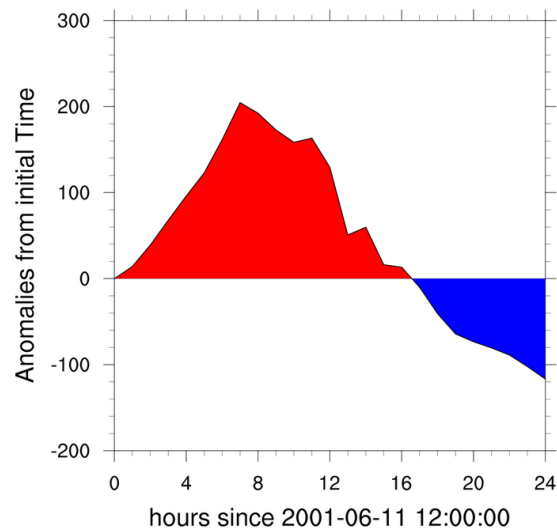
- NCL是可编程图形和数据处理软件
  - 支持读取/写入netcdf、HDF、GRIB、文本等格式文件
  - 支持交互式操作
  - 支持编程操作
  - 内置600多个功能函数
  - 可直接绘制图形

- [WRF-NCL](#)

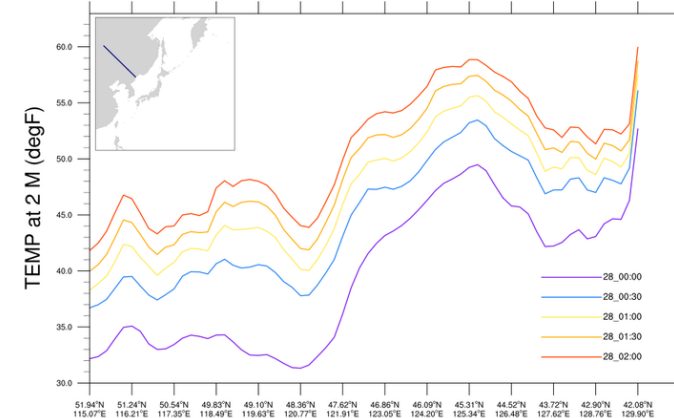
wrfout\_d01\_2005-12-14\_13:00:00



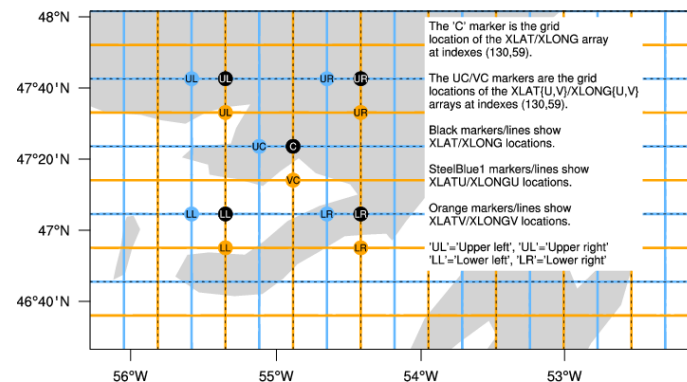
45.2015N 94.5472W



Surface temperature along lat/lon cross section

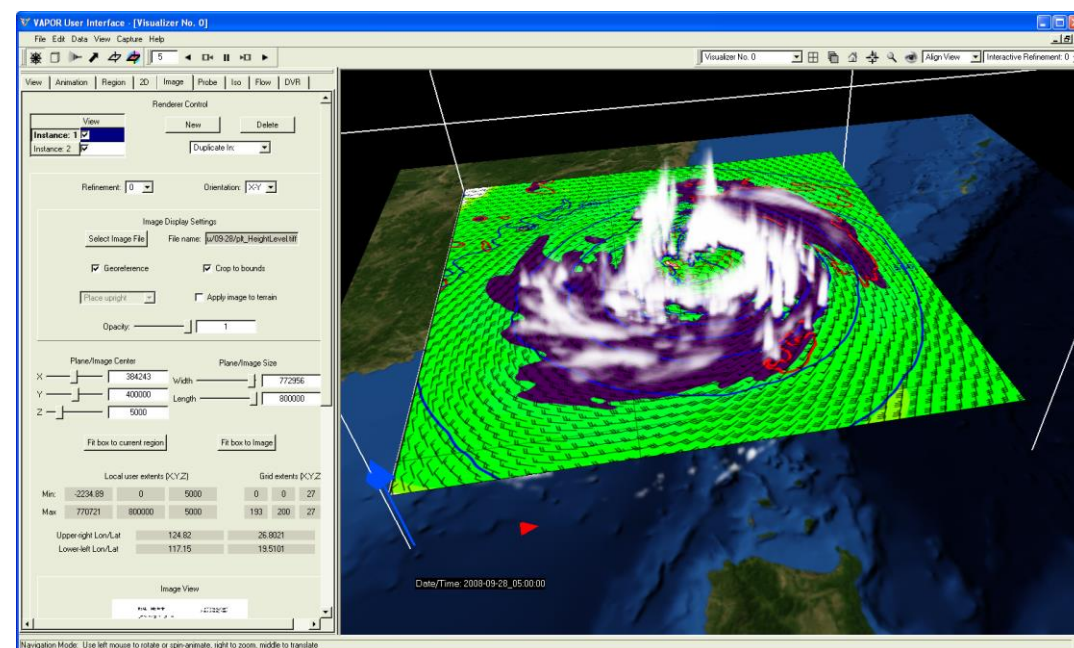
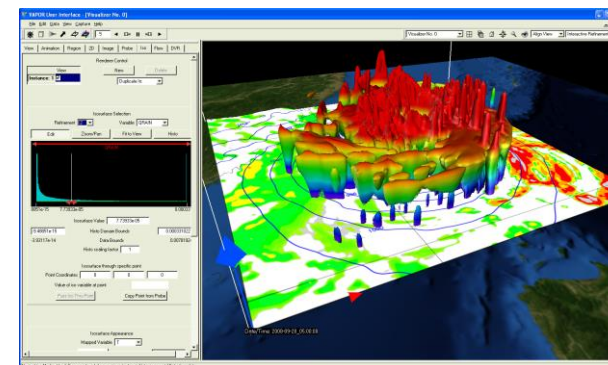
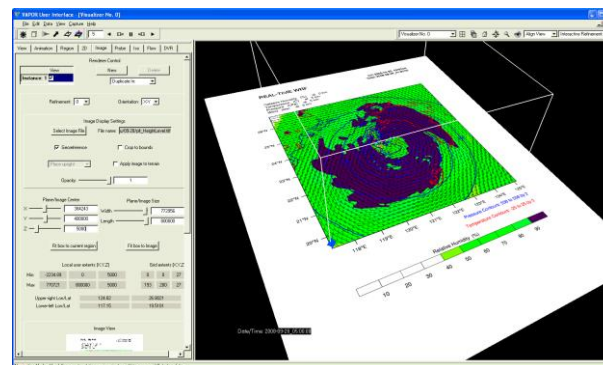


XLAT/XLONG, XLATU/XLONU, XLATV/XLONGV points



# 图形处理工具 NCAR VAPOR

- VAPOR 是海洋、大气和太阳能研究人员的可视化和分析平台。VAPOR 提供交互式 3D 可视化环境，还可以生成动画和静止帧图像。
- VAPOR 运行在大多数配备现代 3D 显卡的 UNIX 和 Windows 系统上。具有Ubuntu centos macos和 windows的安装包



感谢支持



**IUEMS** 城市生态智慧管理系统  
Modeling for a sustainable world



**环安科技**  
HUANAN TECHNOLOGY