

CMAQ (5.2版本) 操作中文说明书

中文说明书基于CMAQv5.2 Operational Guidance Document英文手册翻译，仅供模型使用者参考。

翻译参与人员包括：杨景朝、王刚、田军、黄满堂、伯鑫等。

转载及印刷，请邮件发送：boxinet@gmail.com。

源代码、中文说明书电子版本下载地址：

<http://www.lem.org.cn/>

<https://www.leimodel.org/>

问题与讨论，可关注微信公众号“大气污染模拟”



2021 年 3 月 10 日

1.1 免责声明	8
1.2 前言	8
1.3 简介	8
1.4 模型背景和目标	9
第二章 CMAQ 系统组件概述	12
2.1 安装介绍	12
2.1.1 从 GitHub 安装	12
2.1.2 从 git-based tarballs 安装 (CMAQ5.0.2 及以后的版本)	13
2.1.3 从 CVS-based tarballs 安装 (CMAQ5.0.1 及更早的版本)	13
2.2 配置选项	13
2.3 化学-传输模型概念机制	14
2.3.1 在线计算过程	15
2.4 CMAQ 基本模块简介	15
2.4.1 模型编译器 (Bldmake)	15
2.4.2 初始条件处理器 (ICON)	16
2.4.3 边界条件处理器 (BCON)	16
2.4.4 气象—化学接口处理器 (MCIP)	16
2.4.5 化学-输送模型 (CCTM)	17
2.4.6 化学机制编译器 (CHEMMECH)	17
2.4.7 EBI 化学求解器 (CREATE_EBI)	17
第三章 CMAQ 特征	19
3.1 CMAQ 针对应用用户的特性	19
3.2 对于模型开发者 CMAQ 所具备的特性	19
3.3 CMAQ 和 MCIP 的新特点	20
第四章 CMAQ 系统科学概述	21
4.1 实现 CMAQ 目标的特性	22
4.1.1 多污染物和多时空尺度	22
4.1.2 模块灵活性	23
4.1.3 质量控制特性	24
4.2 CMAQ 输入流程	24

4.2.1 MCIP 气象-化学接口处理器	25
4.2.2 ICON 初始条件和 BCON 边界条件处理器	27
4.2.3 CHEMMECH 化学机制编译器	28
4.2.4 CMAQ 闪电 NO 处理器	29
4.2.5 CALMAP: 提取日期和地图信息预处理器	29
4.3 CCTM: CMAQ 化学传输模型	30
4.3.1 气相化学	31
4.3.2 污染物传输	32
4.3.3 颗粒物(气溶胶)	34
4.3.4 云和液相化学	36
4.3.5 沉降	37
4.3.6 排放	38
4.3.7 过程分析	39
4.4 CMAQ 用户界面	40
4.5 参考文献	40
第五章 CMAQ 安装及系统配置要求	45
5.1 系统推荐	45
5.1.1 硬件	45
5.1.2 软件	46
5.2 安装和编译 CMAQ	47
5.2.1 分发目录	48
5.2.2 CMAQ 目录结构说明	48
5.2.3 配置系统和编译 CMAQ	49
5.2.4 安装 CMAQ	51
5.2.5 CMAQ 测试模拟运行	55
5.2.6 基准测试	56
第六章 必需库	59
6.1 输入/输出应用程序编程接口 (I/O API)	59
6.1.1 文件、逻辑名称和物理名称	60
6.1.2 I/O API 数据结构和数据文件类型	60

6.1.3 I/O API 数据文件打开与创建	62
6.1.4 读取 I/O API 数据文件	63
6.1.5 写入 I/O API 数据文件	64
6.1.6 与 CMAQ 相关的 I/O API 实用程序	65
6.2 网络通用数据表 (netCDF)	65
6.3 消息传递接口 (MPI)	66
6.4 参考文献	66
第七章 CMAQ 程序和所需库	67
7.1 概述	67
7.2 BCON	69
7.2.1 说明	69
7.2.2 文件, 配置和环境变量	69
7.2.3 编译和运行	74
7.3 Calmap	75
7.3.1 说明	75
7.3.2 文件, 配置和环境变量	75
7.3.3 编译和运行	77
7.4 CCTM	77
7.4.1 说明	77
7.4.2 文件, 配置和环境变量	78
7.4.3 编译和运行	100
7.5 CHEMMECH 和 CSV2NML	100
7.5.1 说明	100
7.5.2 文件、配置和环境变量	101
7.5.3 编译和运行	104
7.6 CREATE_EBI	105
7.6.1 说明	105
7.6.2 文件、配置和环境变量	105
7.6.3 编译和运行	110
7.7 ICON	110

7.7.1 说明	111
7.7.2 文件、配置和环境变量	111
7.7.3 编译和运行	116
7.8 INLINE_PHOT_PREPROC	117
7.8.1 说明	117
7.8.2 文件、配置和环境变量	117
7.8.3 编译和运行	120
7.9 JPROC	120
7.9.1 说明	120
7.9.2 文件、配置和环境变量	120
7.9.3 编译和运行	123
7.10 MCIP	124
7.10.1 说明	124
7.10.2 文件、配置和环境变量	125
7.10.3 编译和运行	130
7.11 参考文献	130
第八章 CMAQ 输入和输出文件	132
8.0.1 ET: 外星辐照度	147
8.0.2 MET_DOT_3D: 点三维气象场	170
8.1 CMAQ 诊断和后期输出文件	174
第九章 网格、模拟层和化学机制定义	177
9.1 网格和坐标系	177
9.1.1 可用于 CMAQ 的坐标系	177
9.1.2 水平网格	177
9.2 CMAQ 垂直层	181
9.2.1 垂直层分辨率	181
9.2.2 关于垂直层的更多信息	182
9.2.3 网格和垂直坐标系主题的相关参考	182
9.3 CMAQ 化学机制	182
9.3.1 使用预定义的化学机制	182

9.3.2 创建或修改化学机制	183
9.3.3 使用物种名称列表文件	183
9.3.4 关于化学机制的进一步说明	184
第十章 创建 CMAQ 新模拟任务	185
10.1 模型框架简介	185
10.2 配置新模拟任务	186
10.2.1 定义新的水平网格	186
10.2.2 定义新的垂直层结构	187
10.2.3 设置新的模拟时间段	187
10.2.4 初始和边界条件	188
10.2.5 输入/输出文件名和位置	189
10.2.6 科学选项配置	190
10.3 参考文献	190
第十一章 代码管理和开发	192
11.1 源代码管理	192
11.1.1 需要的配置管理工具	192
11.1.2 选择配置管理工具	193
11.1.3 git 解释	193
11.2 制定新的 CMAQ 源代码的准则	194
11.2.1 面向对象的概念	194
11.2.2 全球数据名称表	194
11.2.3 便捷接口	195
11.2.4 编码准则	195
11.2.5 文档指南	197
11.2.6 科学过程代码模板	197
11.3 使用新源代码编译 CMAQ	217
11.4 编写 CMAQshell 脚本的指南	218
11.5 新源代码的测试和分发	238
11.6 参考文献	239
第十二章 CMAQ 的分析工具	241

12.1 数据处理命令行	241
12.1.1 netCDF	241
12.1.2 CMAQ 实用工具	242
12.1.3 M3tools	243
12.1.4 nc 操作 (NCO)	244
12.2 可视化工具	246
12.2.1 用于数据解释的可视化环境 (VERDI)	246
12.2.2 大气模型评估工具 (AMET)	246
12.2.3 环境数据分析和可视化软件包 PAVE	247
12.2.4 集成数据查看器 IDV	247
12.3 NCAR 命令语言 NCL	248
第十三章 CMAQ 支持资源	250
13.1 CMAS 中心	250
13.1.1 CMAS 功能	250
13.2 获取 CMAQ 帮助	250
13.2.1 文档	251
13.2.2 互动资源	251
13.2.3 教程/培训	251
13.2.4 电子邮件支持	251
13.3 联系 CMAS	252
13.4 附录 A: CMAQ v5.2 机制表	252
第十四章 术语	254

1.1 免责声明

本操作指南文件中的信息全部或部分由美国环境保护署资助。该文件的草案未经该机构的同行和行政审查，也没有被批准作为环保署文件发表。该文件草案仅受到 CMAQ 社区建模与分析中心的审查，还未得到环保署的审查。对商品名称或商业产品的提及并不构成使用的背书和建议。

1.2 前言

CMAQ 模型系统是在美国环境保护署位于北卡罗莱纳国家暴露研究实验室的领导下开发和维护的。CMAQ 在大气模拟方面的研究已有二十多年的历史，自 20 世纪 90 年代初以来一直在积极发展。CMAQ 的第一个版本于 1998 年免费发布，供大气环境研究人员、政策制定者和利益相关团体使用，以解决多尺度、多污染物的空气质量问题。过去的、现在的和将来的版本，都将坚持相同的代码可访问性和范围。

1.3 简介

在“清洁空气法”的授权下，美国环境保护署制定了国家环境空气质量标准（NAAQS）。这些标准旨在保护人类健康和环境免受臭氧和颗粒物等高水平标准污染物的影响。为了达到国家环境空气质量标准，就需要对大气污染源进行有效控制。然而空气污染情景的复杂性要求控制策略对各种大气污染物、地理区域和尺度的有效性。作为降低环境标准污染物浓度的努力的一部分，环保署已经批准了在美国地区、州和地方尺度使用空气质量模拟模型，用于评估各种控制策略改善空气质量的能力，并确保取得符合成本效益的结果。

第一代空气质量模型，以高斯烟羽公式作为基础，利用简单的化学方法在局地尺度上模拟空气质量；第二代模型涵盖范围更广的尺度（如局地、城市、区域等）和污染物，用一个通常集中于单一污染物或问题（如臭氧、酸沉降等）的单独模型来处理每个尺度。然而，很明显，单污染物模型是不够的。根据污染物排放特征、所涉及的污染物以及污染物排放时周边的气象条件，模拟情景可以从局部的短期现象到长期的区域性事件。考虑到一些排放源排放的污染物不止一种，并且会在不同的时间尺度上影响整个区域，因此为了提出以经济有效的方式改善整体空气质量的策略，就需要一种能够处理多种空气污染物和时空尺度的综合建

模方法。1990 年清洁空气法修正案提出了新空气质量问题（如能见度、细颗粒物和粗颗粒物，以及间接接触有毒大气污染物），提出一种综合的建模方法，可以同时解决多种污染物的发展方向，正是在这样的背景下，第三代空气质量模型应运而生，它可以同时处理多种污染物，而且尺度可以扩大到大陆或更大的范围。未来第四代模型，将会更多地考虑到大气、水、土地和生物群之间的互相反馈，以提供一种更全面的方法来模拟化学物质和营养物质在整个生态系统中的输送和转化。

CMAQ 模型是第三代空气质量模型的典型代表，它可以在 CMAQ 模型网站在线下载，源代码可通过 GitHub 上的一个公众访问的、版本控制的 git 库获得（www.github.com/usepa/cmaq），感兴趣的各方可以在那里获得开源软件并对模型进行改进。CMAQ 设计应用范围从法规和政策分析到理解大气化学和物理的复杂相互作用。从模型结构上来看，它是一个三维欧拉（即网格化）大气化学和输送综合模型，可模拟整个对流层的臭氧、颗粒物（PM）、有毒空气污染物、能见度、酸性或营养性物质等污染物。CMAQ 设计理念为“一个大气”模型，可以同时解决多个空气质量问题之间的复杂耦合，考虑的空间尺度可从局地到半球。CMAQ 的源代码是透明和模块化的，通过空气质量建模社区所有成员的社区开发来促进模型的可扩展性。

1.4 模型背景和目标

空气质量模型整合了我们对影响大气中污染物浓度的复杂过程的理解。在大气污染物的背景下，建立气象、化学转化、化学物种的排放和去除过程之间的关系是空气质量模型的基本目标（Seinfeld and PANDIS, 1998）。与使用观测的大气条件的历史趋势来预测空气污染的统计空气质量模型不同，CMAQ 使用实际化学和物理过程的耦合数学模型来模拟空气质量。该模型基于通过一系列连续的覆盖在固定模型网格上的三维（3D）网格单元来保持质量守恒的基本概念。模型网格是一个固定在空间中的 x-y-z 数组，它覆盖一个特定的区域，即一个感兴趣的地理区域。因此，CMAQ 属于欧拉数学模型的一类，它通过求解在给定时间内跨越每个单元边界的传输和每个单元内的化学转化来计算每个网格单元内的质量平衡。CMAQ 作为模拟多种复杂大气过程相互作用的框架，需要两种主要类型的输入：气象信息和影响空气质量的排放源信息。

由于天气条件是大气中的主要物理驱动力（如温度的变化、风、云的形成和降水速率），代表性的网格气象构成了所有三维空气质量模型模拟的基础。宾夕法尼亚州立大学/国家大气研究中心（PSU / NCAR）第五代中尺度模型（MM5）（Grell 等，1994）和天气研究和预报（WRF）模型（Skamaroc 等，2005）是与 CMAQ 兼容的两个气象模型，气象输入要求以下 CMAQ 配置参数：

- 水平网格坐标系统（例如，经纬度）和地图投影（例如，兰伯特投影）
- 水平网格分辨率（即构成网格的单元格大小）
- 网格的最大空间覆盖（水平地理范围）
- 最大垂直网格范围（模型顶部高度）
- 时间范围（开始和结束日期、时间以及气象更新频率）

为了获得排放输入，CMAQ 依赖排放处理模型来估算污染源的大小、位置和时间变化。SMOKE 等开源排放处理模型可以计算排放清单输入到 CMAQ。这些排放输入必须在相同的水平和垂直空间尺度上，并与空气质量模型模拟中使用的时间段相同。输入到 CMAQ 的排放必须采用 CMAQ 支持的化学参数化表征挥发性有机化合物（VOC）的排放；目前支持的光化学机制是碳键（CB）机制、州范围空气污染研究中心（SAPRC）机制和区域大气化学机制（RACM）的最新版本。关于 CMAQ 气相化学的更多细节，请参阅 CMAQ 操作指南的化学和输送模块（CCTM）部分，以及 Byun 与 Ching（1999）、Byun 与 Schere（2006）。这两个文献也描述了 CMAQ 支持的主要气溶胶排放物种（“气溶胶”指悬浮在大气中的微粒物质，即微小的固体或液体颗粒）。

CMAQ 从一开始就被设计为一个社区模型，空气质量模型的开发依托于广大社区开发者的共同努力。通过采用标准化的建模架构，空气质量建模社区可以集中精力创建软件增强功能和新的科学模块。CMAQ 的模块化结构促进了社区的定制和开源开发。使用输入/输出应用程序编程接口（I/O API）库控制内部和外部的数据流模型，用网络通用数据形式（netCDF）库控制输入和输出文件格式，CMAQ 基于一个透明的和平台无关的代码基础结构，具有可扩展性。CMAQ 的模块化便于配置多种科学选项（即不同过程如何表示），模型用户可以在设置新的模拟时进行选择。这种灵活性的代价是模型配置的复杂性，模型用户在设计新的模拟时面临数百种不同的配置组合。为了避免新的 CMAQ 用户困惑，本文

档提供了开始使用模型时基本配置的指导。对于经验丰富的空气质量模型使用者来说，多种配置组合为不同的空气质量模型应用提供了高度的灵活性，以优化模型的性能。

CMAQ 旨在满足空气质量研究领域内多个群体的需求：研究和监管建模者，算法和科学模块开发者，空气质量预报员，规划和政策制定者等。虽然上述人员对 CMAQ 有不同的要求，但他们都需要一个高效、透明和科学可信的工具来模拟空气污染物的形成和传输。为了满足这些个人和共同的需求，CMAQ 的开发和维护有以下目标：

- 1、科学的完整性。通过定期对模型进行同行评审，确保模型科学性。
- 2、社区发展。利用鼓励空气质量建模社区所有成员创新和改进的设计。
- 3、多尺度建模。提供足够的技术支持，以解决从城市到半球的多种空间尺度上的空气质量问题。
- 4、一个大气的的设计理念。在一个单一的模拟中为多个耦合的空气质量问题建模提供可靠和集成的科学。
- 5、模块化。保持灵活性，可添加新的或从现有的科学模块中选择，以优化特定应用的模型性能。
- 6、透明度。利用编程实践，在源代码级别上促进对模型公式的理解。
- 7、计算效率。在不影响结果运行速度的情况下提供科学可靠的结果。
- 8、开源设计。通过建模社区实现免费分发和应用。

第二章 CMAQ 系统组件概述

CMAQ 是一套基于 Fortran 90 语言开发的模型,它能协同大气环境中的臭氧、颗粒物、有毒化合物和酸沉降等污染物及过程进行模拟分析, CMAQ 由四个主程序构成:

- 初始条件处理器 (ICON)
- 边界条件处理器 (BCON)
- 气象化学接口处理器 (MCIP)
- CMAQ 化学传输模块 (CCTM)

CMAQ 辅助模块主要包括:

- 代码创建器/管理器 (Bldmake)
- 化学机制编译器 (CHEMMECH)
- EBI 化学求解器 (create_ebi)
- 在线光解预处理器 (inlinephotpreproc)
- 名称列表转换器 (nml)
- 预处理程序 (JPROC)

2.1 安装介绍

在 CMAQ5.0.2 版本之前, CMAQ 开发人员使用 CVS 进行源代码管理, 分布式 tarball (MCIP 除外) 是 CVS 存档。从 5.0.2 版本开始, CMAQ 开发人员切换到 git。CMAQ 从 4.7.1 到现在的版本都可以在美国环保署 GitHub 存储库中获得。

CMAQ 源代码用于构建“可执行文件”: 由指令组成的二进制文件, 这些指令已从原始源代码 (如 Fortran) 翻译成机器代码 (也称为机器语言或目标代码), 以便它们可以执行。可执行文件是通过编译器程序创建的。

2.1.1 从 GitHub 安装

有两种方式可从 GitHub 获取 CMAQ 源代码。1. 从 GitHub 网页客户端下载代码存档。2. 使用命令行将存储库克隆到 Linux 服务器。例如, 下载 CMAQ5.2 版本, 采用以下命令 (假设系统上已经安装了 git):

```
git clone -b 5.2 https://github.com/USEPA/CMAQ.git CMAQ_REPO
```

2.1.2 从 git-based tarballs 安装 (CMAQ5.0.2 及以后的版本)

用户无需安装 git 就可安装 CMAQ。源代码和脚本的压缩文件可以从 GitHub 获取。在美国环保署 GitHub 软件库页面，点击“Clone or download”，选择“Download ZIP”，获取 CMAQ 存储库的所有文件，包括脚本和源代码。在 CMAQ 安装目录下解压这些文件。

2.1.3 从 CVS-based tarballs 安装 (CMAQ5.0.1 及更早的版本)

CMAQ5.0.2 之前的版本，在安装 CMAQ 前，必须在 Linux 系统中要先安装 CVS。解压 CMAQ 安装包后，用户的机器上就会安装一个 CVS 目录树，其中包含 CMAQ 源代码的存档副本。CMAQ 程序 Bldmake 根据 C-shell 构建脚本中用户指定的配置选项，控制从 CVS 中提取 CMAQ 源代码的副本。从 CVS 导出 CMAQ 源代码后，Bldmake 调用 Fortran90 编译器将 CMAQ 源代码编译为二进制对象文件，并将它们与必要的预编译库链接起来，以创建 CMAQ 二进制执行文件。为了创建 CMAQ 可执行文件，必须在用户的 Linux 系统上安装 C 和 Fortran90 编译器。

MCIP 没有在 CVS 存档中分发。相反，当下载 CMAQ 旧版本时，MCIP 会出现在它自己的目录中，并带有用于安装的源代码和 Makefile。

2.2 配置选项

由于 CMAQ 模型的基础结构是为了促进模块化而设计的，因此用户必须为除 MCIP 之外的所有程序的每一套科学配置选项创建新的 CMAQ 可执行程序。在 CMAQ 科学配置中，有太多的各种化学机制、水平和垂直传输方案、云例程和化学求解器的组合，无法有效地包含在单个可执行文件中，每个科学配置更改都需要重新编译 CMAQ，但可以灵活地向模型中添加新的科学或在不同的模型配置之间切换。关于模块化的这一点与 CCTM 最相关，尽管在编译其他 CMAQ 程序时也必须选择一些配置选项。

除了使用 CMAQ 编译时配置选项外，还有执行时配置选项。水平区域配置和垂直坐标系统是 CMAQ 中独立于可执行文件的动态特性。换句话说，用户可以为使用任何支持的地图投影或网格定义的模拟使用单个可执行文件，而不必重

新编译为新的可执行文件。在第 7 章：CMAQ 程序和库中，描述了哪些 CMAQ 选项必须在编译时选择，哪些选项在执行时选择。

2.3 化学-传输模型概念机制

CCTM 是 CMAQ 中的化学-传输模型的模块，是 CMAQ 建模序列中最终运行的程序。还有另外三个主要预处理模块（即 ICON, BCON 和 MCIP）为 CCTM 提供输入数据。在简要描述 CMAQ 项目之前，我们先给出 CMAQ 和欧拉空气质量模型的概念公式，为理解各种项目的目的、它们之间以及它们与整个系统的关系提供一个框架。

欧拉化学传输模型使用耦合常微分方程（ODE）来预测固定三维网格空间的污染物浓度变化。其主要可能受到影响因素包括：

- 污染源排放
- 水平平流和垂直平流
- 水平和垂直扩散
- 化学转化
- 损失（沉降）

从数学上讲，这些过程通过连续性方程与每个网格单元内浓度随时间变化来表示，简化形式如下：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = Adv + Diff + Rc + Ec - Sc$$

其中：

Adv=平流

Diff=扩散

Rc=物种 c 的化学转化,

Ec=物种 c 的排放

Sc=物种 c 的沉降

在 CMAQ 中，平流项和排放项分别根据气象模块（MCIP）和排放模块（SMOKE 等）生成的输入文件计算；扩散、化学转化和损失等过程项在 CCTM 中计算。

建模区域的欧拉表示是一系列连续的网格单元，它们在地球的一个子集上形

成一个有限区域的建模域。一个有限建模区域需要建立边界条件，以考虑污染物和其他化学物质从它以外的区域平流到模拟区域。CMAQ 目前只计算从水平（横向）边界进入区域的平流，假设没有通过区域顶部边界的交换（即垂直交换）。利用边界条件处理器 BCON 在 CMAQ 中对这些空间侧边界条件进行了估算。同样，利用出生条件处理器 ICON 建立时间边界条件，在 CMAQ 模型模拟的第一时间估算化学初始条件。这两个 CMAQ 程序的输出与排放、气象以及其他 CMAQ 预处理器的输出条件一起使用，形成运行 CCTM 所需的输入数据。

2.3.1 在线计算过程

CMAQ 的在线计算过程指那些与化学传输模型同时运行的过程。在 CCTM 中考虑在线过程的主要优点是：一个参数的模拟可以反馈到一个或多个参数的模拟。例如通过在 CCTM 中考虑光解速率在线计算，光解速率将受到模拟气溶胶导致的辐射影响。CCTM 的其他在线功能，如排放处理，为建模操作提供了效率优势，并促进了气象-化学耦合。CMAQ5.0 及以上版本的 CCTM 支持生物源、风沙尘、海盐、和点源烟羽抬升的排放计算。

需要注意的是在考虑 CCTM 在线选项时，用户需要避免重复计算排放。CCTM 没有能力识别哪些排放源是离线计算的，并被输入到模型中。例如，在输入排放文件中已经包括生物排放源，就没有必要配置 CCTM 在线计算生物排放，重复计算将会导致排放源计算的错误。若光解速率在 CCTM 中在线计算，预处理程序 JPROC 不再是 CMAQ 建模所必需的。

2.4 CMAQ 基本模块简介

CMAQ 的主要模块如下所述，下面将按照程序通常运行的顺序进行介绍：

2.4.1 模型编译器（Bldmake）

Bldmake 提供了一个与 CMAQ 源代码库和 Fortran90 编译器的接口，用于构建二进制可执行文件。因为 Bldmake 需要创建除 MCIP（它有自己的 Makefile 文件）之外的所有 CMAQ 可执行文件，所有它是在系统上安装 CMAQ 源代码后需要编译的第一个程序。除了创建可执行文件外，它还提供了生成 Linux Makefile 的选项。这对于将 CMAQ 代码移植到新的操作系统，在开发环境中测试新代码，或者通过 CMAQ 编译或执行排除问题都是非常有用的。

2.4.2 初始条件处理器 (ICON)

ICON 为模拟的第一个小时在建模区域生成化学条件的网格二进制 netCDF 文件。它可以从垂直剖面浓度配置文本文件（与 CMAQ 同时发行的）或现有的 CCTM 输出文件生成这些初始条件。如果配置文本文件没有与要使用的 CCTM 配置相同的垂直结构，ICON 将把数据插值到与 CCTM 一致的垂直结构中。使用现有的 CCTM 输出文件来生成初始条件适用于将初始条件从粗网格模拟外推到细网格模拟，就像在设置嵌套模拟时可能发生的情况一样（使用较细分辨率网格的模拟覆盖了部分较粗分辨率网格）。正如第 7 章所讨论的，ICON 的配置选项包括选择要建模的化学机制、定义水平和垂直网格，以及选择初始条件是从配置文本文件还是从现有的 CCTM 输出文件生成的。

2.4.3 边界条件处理器 (BCON)

BCON 沿着建模域的水平边界生成化学条件的网格化二进制 netCDF 文件。这些边界条件可以是静态的，也可以是时变的，并且（和 ICON 一样）可以从垂直剖面浓度配置文本文件或现有的 CCTM 输出文件中生成。同样，与 ICON 一样，BCON 将插入配置文本文件中的数据到与 CCTM 配置一致的垂直分辨率。然而，BCON 与 ICON 的不同之处在于，它可以生成时变（即动态）边界条件。动态边界条件通常从嵌套模拟的粗网格模拟的 CCTM 输出中提取，或从使用全球尺度模型的 CCTM 模拟的 CCTM 输出中提取。配置文本文件的文件结构也可以支持创建动态边界条件，但通常这些文件仅用于创建静态数据。BCON 的配置选项包括选择要建模的化学机制、定义水平和垂直网格，以及选择边界条件是从配置文本文件还是从现有 CCTM 输出文件生成的。（在第七章进一步讨论）

BCON 仅用于从配置文本文件或现有 CCTM 输出文件为 CCTM 创建边界条件输入。用户负责准备其他来源的 CCTM 输入边界条件，如全球化学传输模型。

2.4.4 气象—化学接口处理器 (MCIP)

MCIP 使用 MM5 或 WRF 气象模型的输出文件创建 netCDF 格式的输入气象数据，这些数据由 SMOKE 和 CMAQ 使用。MCIP 用于准备 SMOKE 和 CCTM 所需的所有气象字段。此外，MCIP 用于计算 CCTM 中使用的随时间变化的、与物种相关的干沉降速率。MCIP 可用于均匀地裁切由气象模型定义区域的水平边

界上的单元，或截取气象模型建模区域的子区域。MCIP 还可以通过“层折叠”来降低气象数据的垂直分辨率。不过应谨慎使用这个选项，因为如果使用不当，它可能会降低数据的质量。MCIP 的配置选项包括从气象模型输出文件中提取数据的时间段、水平和垂直网格定义，以及计算干沉降速率和将卫星云观测数据集集成到 MCIP 输出的选择（在第 7 章进一步讨论）。

2.4.5 化学-输送模型（CCTM）

CCTM 整合了上述预处理程序（BCON、ICON 和 MCIP）的输出结果以及为 CMAQ 准备的排放源输入（如 SMOKE 的输出），来模拟连续的大气化学条件。相关物种的模拟浓度可以在用户定义的时间频率（通常是小时）下输出。CCTM 的输出文件是网格化的二进制 netCDF 文件，除了常规的污染物浓度信息，还可以提供气相和气溶胶相物种混合比，小时湿沉降和干沉降值，能见度指标和积分平均浓度等。

CCTM 的时空覆盖由输入的气象信息决定。科学配置是特定于模型的每个应用，可以进行调整，以在计算上优化模型的性能，或是数值再现观测到的空气质量趋势。CCTM 的配置选项包括模拟的时间段、化学机制、污染物传输物理方案、多相和液相化学选项、在线处理选项和诊断选项（如过程分析，在下一段中讨论）。CCTM 用于所有 CMAQ 程序中最多的配置选项（在第 7 章进一步讨论）。

2.4.6 化学机制编译器（CHEMMECH）

这个程序从机制定义文件中为 CMAQ 创建化学机制名称列表文件。在 CMAQ 中，化学机制是通过一系列包含描述光化学机制的机械和动力学参数的名称列表文件来表示的。CHEMMECH 从一个 ASCII 机制定义文件创建名称列表文件，该文件将化学反应表示为反应物、生成物和反应速率信息的顺序方程。该程序需要修改现有机制中的反应化学计量学或动力学，添加新的物种和反应，并在 CMAQ 中实现全新的化学机制。

2.4.7 EBI 化学求解器（CREATE_EBI）

欧拉反向迭代（EBI）化学求解器是 CCTM 光化学机理的一种优化数值求解器。由于 EBI 解算器针对特定的化学机制配置进行了优化，新的 CCTM 光化学机制需要 EBI 解算器的新版本。程序 CREATEEBI 是一个用于新机制版本的

CCTM 源代码生成器。CREATEEBI 的机制输入文件是由 CMAQ 程序 CHEMMECH 生成的。由 CREATE_EBI 生成的源代码可以用来编译 CCTM 的新版本，以便与使用 CHEMMECH 创建的更新的化学名称列表文件一起使用。

在线光解预处理程序为 CCTM 在线光解模块创建光解反应参数表。

nml 程序将 chemmech 的化学机制 csv 输出文件转换为 CMAQ 程序所需的名称列表文件。

JPROC 通过查阅分子吸收截面和量子产量 (CSQY) 数据的表格，以及气候派生的臭氧柱和光深度数据来计算晴天的光解速率。

大气污染模拟

第三章 CMAQ 特征

3.1 CMAQ 针对应用用户的特性

针对开展研究科学问题或监管应用（如州实施计划）的用户，CMAQ 建模系统提供了多种重要特性。

- CMAQ 旨在解决多个空气质量问题之间复杂的相互作用。利用多尺度和多污染物模拟技术，CMAQ 可以在不同的空间尺度上对几种不同的污染物进行独立但动态一致的预测。

- CMAQ 的模块化设计为空气质量模型配置提供了灵活性，可以不同应用和空间分辨率优化模型性能。

- CMAQ、气象和排放模型开发社区间的密切互动，为空气质量模型系统的三个主要组成部分提供了紧密的整合。

- 串行和多处理器并行执行选项允许用户在不同的计算机平台上优化 CMAQ 性能。

- 社区开发通过追求多种研究小组的多个研究议程，促进了 CMAQ 功能的扩展。应用程序用户因此避免了必须依赖于单一、集中的开发团队的固有限制。

- 社区建模和分析系统（CMAS）中心网站提供全面的培训计划。CMAS 中心是 CMAQ 和其他建模系统用户的支持资源。

- 通过 CMAS 中心连接的大型国际用户社区成员通过分享数据和经验，以及提供技术支持互相帮助。

3.2 对于模型开发者 CMAQ 所具备的特性

CMAQ 是在社区建模范式下设计的，以模块化代码设计的开源软件的形式发布以促进分布式开发。CMAQ 在分层的 I/O API 和 netCDF 代码框架下构建，为测试新的科学算法、化学表示和优化技术提供了一个灵活的平台。CMAQ 为有兴趣开发新算法或将科学配置添加到模型的科学家提供了以下特性：

- 所有的 CMAQ 源代码都可以通过 GitHub 获得
- CMAQ 源代码的开发和分发遵循开源软件约定，易于访问且免费获取。
- CCTM 为模块化设计，使用标准化输入/输出（I/O）程序来促进可扩展性

•CMAQ 开发人员的多样性和持续增长的社区为讨论各种与开发相关的话题提供了一个很好的论坛。

3.3 CMAQ 和 MCIP 的新特点

CMAQ 的每个发布版本都包括了模型的新特性和改进。每个版本新特性的详细信息如下所示。关于这些特性的技术细节包含在 5.1 及更早版本的 CMAQ Wiki 中。从 5.2 版本开发，发布说明可以在美国环保署 GitHub 存储库中获得。以下链接提供了有关 CMAQ5.0 版本以来添加的新特性的详细信息。

CMAQ 版本新特性

[Version 5.2](#)

[Version 5.1](#)

[Version 5.0.2](#)

[Version 5.0.1](#)

[Version 5.0](#)

MCIP 版本新特性

[Version 4.3](#)

[Version 4.2](#)

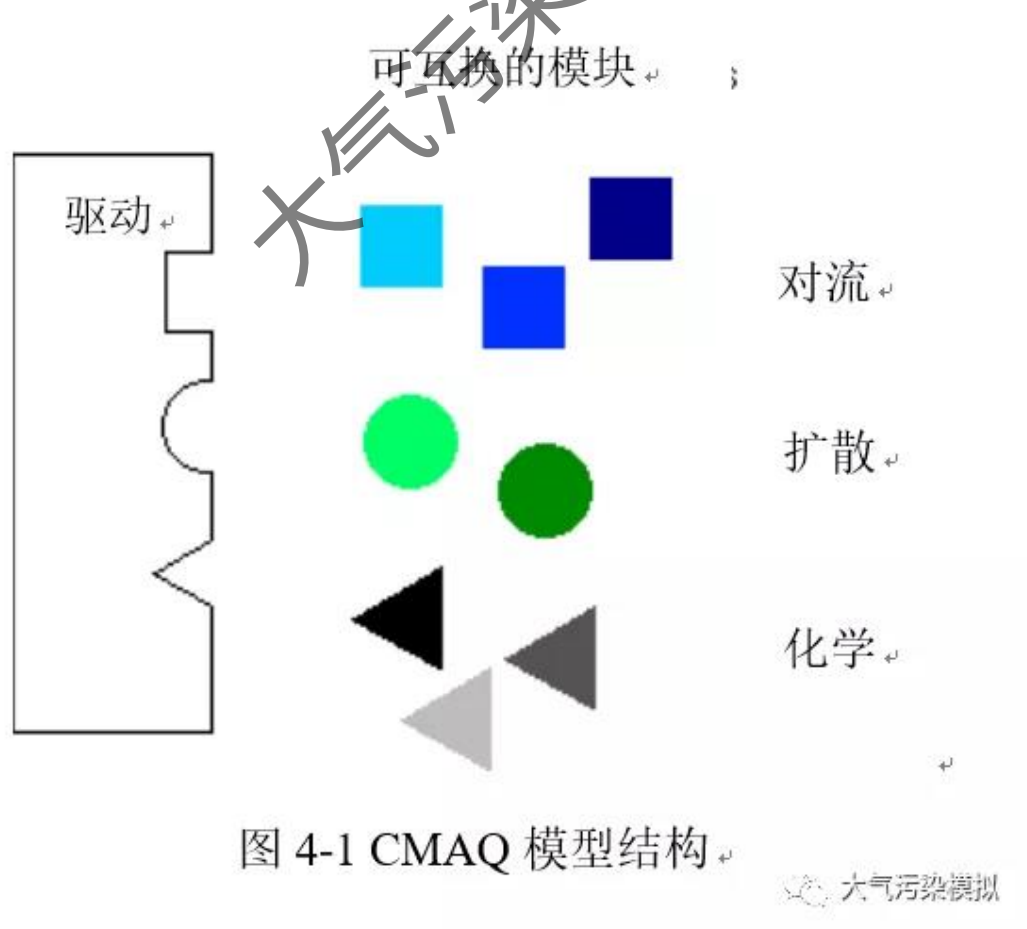
[Version 4.1](#)

大气污染模拟

第四章 CMAQ 系统科学概述

正如第一章所介绍，CMAQ 是一种多种时空尺度、多种污染物的空气质量模型系统。它不但可以模拟臭氧、颗粒物、有毒空气污染物、酸性污染物的化学转化和传输过程，还可以模拟能见度和沉降物总量。目前，CMAQ 使用最优化的计算方法，模拟从城市到全球范围的空气质量，它可以通过快速有效的运算系统框架，模拟复杂大气过程中的大气污染物转换、传输以及沉降过程。美国环境保护署第三代多尺度空气质量模型科学算法系统委员会持续为 CMAQ 的科学性设计提供重要建议，从而使 CMAQ 自发布以来，不断完善与发展。手册第三章提供了每个 CMAQ 版本更新内容的链接。

通过研究机构和应用部门所提出的实际需求，CMAQ 不断完善与发展。为了解决某个特定的空气质量问题，CMAQ 使用者可对模型的化学和云处理等模块进行修改与重新编译。CMAQ 模型结构可以促使它的新特性适用模块生效，这一特点使其始终保持技术领先。



CMAQ 可以通过使用最佳可用模拟技术的平台标准配置进行监管应用。与此同时，CMAQ 对于模型研发者也是一种非常有用的工具，部件设计灵活，人机交互界面模块清晰，这些都是它独一无二的优点。通过这些模型设计优点，模型研发者可以创新复杂模拟情景，或者使用标准化编码框架，开发出全新的模型。模型研发者将新开发模块与现有系统作对比，通过敏感性试验，验证新开发模块的适用性。

本章将从结构和科学特性介绍 CMAQ 模型的气象化学接口处理器 (MCIP)、初始条件处理器 (ICON)、边界条件处理器 (BCON)、化学机制编译器 (CHEMMECH)、CMAQ 化学传输模块 (CCTM)。有关于这些特性的更多内容请查阅 Byun 与 Ching (1999)、Byun 与 Schere (2006)。下一章将介绍 CMAQ 的安装和运行。

4.1 实现 CMAQ 目标的特性

正如前面章节的介绍，早期的空气质量模型着重解决臭氧或酸沉降之类的单一污染物或问题。但这些模型不适用于前沿科学发展或者新版法规制定。CMAQ 模型的出现，满足了不同的应用需求，并且改善了模型模拟方法。在模型科学领域，将从以下几方面分开讨论 CMAQ 的设计：（1）模拟多种空气污染物和多时空尺度；（2）通过模块化提高灵活性；（3）降低潜在模型模拟误差。

作为一套通用模型，CMAQ 充分发挥大气科学领域的模型开发者的专业性。这个优点让 CMAQ 成为发展速度最快的模型。

4.1.1 多污染物和多时空尺度

在“一个大气”的设计理念下，CMAQ 可以模拟解决多种污染物之间的相互影响问题，相比于早期可模拟单一污染物的模型，在很大程度上得到改善。CMAQ 在一次模拟情景中，可以模拟多种空气污染物，包括对流层臭氧、颗粒物、有毒空气污染物、能见度、酸性污染物。“一个大气”的方法很重要，这是因为多种化学物种间存在相互作用。例如，臭氧、羟基自由基与大气中人为、自然有机物之间反应，可以生成二次颗粒物。这些颗粒物通过太阳辐射的影响，可以改变光解速率、温度、通风量、风、热反应以及基于温度和风速的排放率。

CMAQ 的多空间尺度能力使得从局地到半球尺度的模拟应用成为可能。通过将这一多尺度特征与模型的时间灵活性相结合，既能评估年与年际的污染物气

候特征，又能预测本地源的短期传输路径。CMAQ 多尺度模拟功能的实现，可以解决诸如依赖于模式分辨率可扩展大气动力学和广义坐标系等问题。气象模式中，假定大尺度流体静力条件为垂直气压梯度力与重力相平衡，无垂直加速度的情景。然而，在城市尺度等较小尺度模拟，流体静力学假设还不能成立，一些应用于可压缩非流体静力学大气控制方程对于城市精细化模拟具有更好的适用性。CMAQ 广义坐标系统适用于不同水平和垂直坐标的气象场，可以在相同的 CTM 坐标中模拟多尺度情景。广义坐标系所使用的雅可比矩阵控制了必要的网格和坐标转换。

4.1.2 模块灵活性

CMAQ 目前的编码结构是基于模块化设计，将 CCTM 主驱动程序、科学模块、数据估算模块、控制/实用子程序相互分开。科学模型（包括气象、排放、化学传输模型的子模型）的分析和可视化子系统也进行了模块化区分。

在 CCTM 中，影响污染物浓度场的流程模块以如下列表分类。每个流程都包含过程的描述，这些模块将在本节后面进一步讨论。

科学模块：

- 水平平流 (hadv)
- 垂直平流 (vadv)
- 平流过程质量守恒调整 (adjc)
- 水平扩散 (hdiff)
- 垂直扩散 (vdiff)
- 气相化学反应求解器 (gas)
- 液相反应和云混合 (cloud)
- 气溶胶动力学和尺寸分布 (aero)
- 平流层与对流层之间的位势涡度交换 (pv_o3)
- 气象-化学耦合 (twoway)

控制/实用程序模块：

- 数据流和时间步长同步器 (driver)
- 水平网格系统 (grid)
- 单位转换 (couple)

- 初始条件 (init)
- 并行计算 (par)
- CGRID 配置 (cgrds)
- 过程分析 (procan)
- 物种列表实用程序 (spcs)
- 函数库 (util)

数据估算模块:

- 沉积速率估算 (depv)
- 光解速率计算 (phot)

在线排放模块:

- 在线排放计算 (生物质、风沙尘、闪电、海盐、烟羽抬升) (emis)
- BEIS3 生物质排放量在线计算 (biog)
- 烟羽抬升在线计算 (plrise)

模块化特性可以使其在 CCTM 中方便修改与引入特定的科学流程。例如，气体模块包含了不同气相化学求解程序的选项，这些程序都可以优化模型性能。如果没有模块化结构，仅仅一个科学流程的改变就需要修改整个 CCTM 中的源代码，从而大大增加了人为误差的风险。

4.1.3 质量控制特性

通过一些重要的方法，CMAQ 降低了模型模拟误差发生的概率：

- 美国环保署制定的正式的 CMAQ 评审流程，确保了模型的科学可信度。此外，除了北美地区，CMAQ 模型系统非正式的“评审”每天也在进行，它的出现，使多数国际用户团队可以应用 CMAQ 解决当地各种各样的科学问题。
- CMAQ 科学流程的模块化使用户改进模型将变得更加简便，并将潜在错误的可能降至最低，因为用户不再需要，在程序模块中，修改与自己模拟方案无关的代码或声明变量。

4.2 CMAQ 输入流程

CCTM 的输入数据来自于其他模型，CMAQ 模型模拟输入流程见图 4-2。

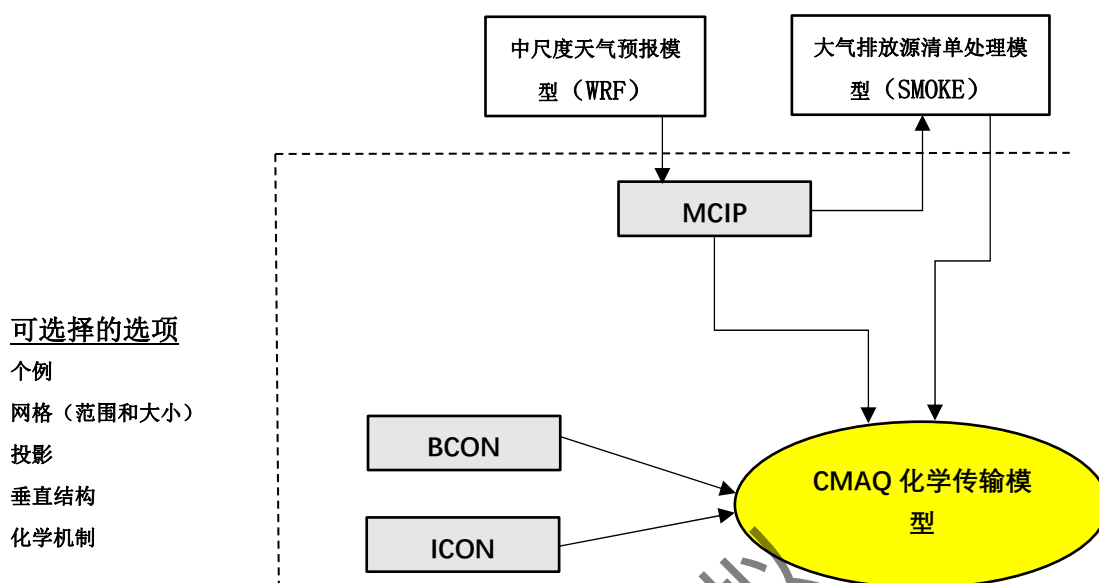


图 4-2 CMAQ 化学传输模型 (CCTM) 及前处理系统

如图 4-2，3 个灰色框内容组成了 CCTM 输入数据的前处理系统。图 4-2 展示了 CMAQ 所有程序（虚线以内的内容），这些程序需要 5 个基本配置选项：

- 案例名称：标识模拟的唯一字符串
- 网格（区域和大小）：水平建模网格的定义，包括相对于固定地图投影的位置和区域的大小
- 投影：定义地球球面的水平面，用于指定模型网格在地球上的位置
- 垂直结构：垂直网格层边界的定义
- 化学机制：用于 CMAQ 模拟的光化学机制、气溶胶化学机制和液相化学机制的名称

对于这些选项的选择以及如何为每个 CMAQ 程序选择这些选项将在第 7 章中详细介绍。

CMAQ 使用 MCIP 软件为 CCTM 提供气象场。ICON 和 BCON 为 CCTM 模拟提供初始条件和边界条件。SMOKE 输出的排放数据，可以直接输入到 CCTM 中，为 CMAQ 提供排放值。这一节介绍了 CMAQ 各个前处理器，同时也介绍了 CHEMMECH 处理器，但此处理器未在图 4-2 中进行展示。

4.2.1 MCIP 气象-化学接口处理器

MCIP 输入来自于 WRF 或 MM5 输出的气象场，生成 CMAQ 模拟所需的气象文件。MCIP 的目标是尽可能多地直接使用气象模型数据，以确保 CMAQ 模型系统所使用的大气状态的物理一致性。MCIP 的输出是 CMAQ 模型系统中使用的标准 I/O API 格式。排放处理器可以使用 MCIP 输出文件（例如移动排放源的气象变化温度），CCTM 可以使用 MCIP 输出文件来定义大气条件。MCIP 概述请详见 Otte and Pleim (2010)。

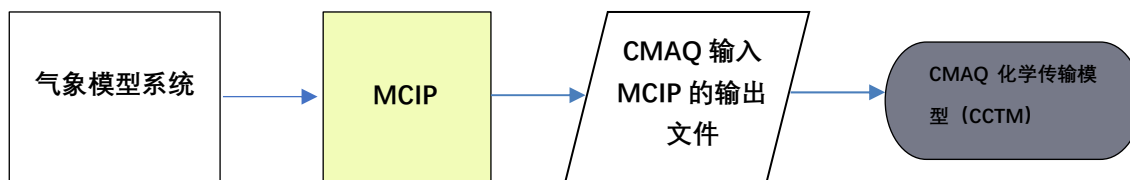


图 4-3 CMAQ 气象前处理过程 MCIP

MCIP 使用气象模型的输出文件，执行以下功能：

- 处理 CCTM 和排放模型所需的所有气象场。如大气温度、压力、湿度和风，都直接来自气象模型。CCTM 需要但不是气象模型直接输出的其他字段，在 MCIP 中从可用的气象字段进行计算。
- 在 CCTM 规定的计算区域上提取气象模型输出。与气象模型相比，CCTM 通常使用更小的计算区域，并且 CCTM 通过不使用气象模型的横向边界。
- MCIP 可选择使用“层折叠”减少气象模型到 CCTM 的垂直层数。为了做到这一点，MCIP 在更高垂直分辨率的气象模型输出上使用质量加权平均。
- 使用简单的对流方案计算云顶高度、云底高度、液态含水量和积云覆盖面积。使用云参数考虑 CCTM 液相化学和云混合(Walcek and Taylor, 1986; Chang et al., 1987)。
- 以 I/O API 格式输出多个文件，其中包含排放处理和 CCTM 使用的气象和地理空间信息。

MCIP 是用 FORTRAN 语言编写的，它在 Unix/Linux 环境中单处理器上运行。MCIP 由一个 C-shell 脚本驱动，该脚本具有几个通过 FORTRAN 名称列表定义的运行选项。典型的做法是使用 MCIP 将气象模型输出处理成每日的小时输出场。

MCIP 通常与 CCTM 同时更新。对 MCIP 的更改与软件的每次更新一起记录，并且存于一个特定于 MCIP 的 FAQ 文件中。

4.2.2 ICON 初始条件和 BCON 边界条件处理器

初始条件与边界条件是空气质量模拟的必需条件。初始条件（在 ICON 处理器中计算）是在建模第一步时，提供单个化学物质的浓度。边界条件（在 BCON 处理器中计算）用于提供模拟区域横向边界上单个化学物质的浓度。在一次运行中，ICON 和 BCON 可以生成 CMAQ 所需的所有化学物质的浓度。ICON 和 BCON 所需的文件详细说明了对流层中各种化学物质的浓度值、光化学和气溶胶机制规范。这些处理器需要两个输入文件（如图 4-4），分别是化学物质浓度文件和化学机制文件。

浓度文件：ICON 和 BCON 使用的浓度文件可以通过以下两种途径获得：

一组与时间无关的垂直浓度分布，其物种种类依赖于所使用的化学机制。这种方法通常在没有初始浓度和边界浓度的其他信息时使用。CMAQ 目前与 CB05、RACM2、SAPRC-07T 光化学机制以及 CMAQ AERO6 气溶胶模块的 IC、BC 垂直剖面文件一起发布。这些文件设定在计算网格的四个边界（北、东、南、西），因此固定在空间中。

现有的 CCTM 三维浓度场。通常用执行模型嵌套模拟选择此选项，并且可以从较粗网格 CCTM 模拟结果中获取建模结果。当 CCTM 单独运行时，现有的 CCTM 浓度场可以被使用。不同于前面项目讨论的垂直剖面文件，这个 CCTM 浓度是随时空变化的。

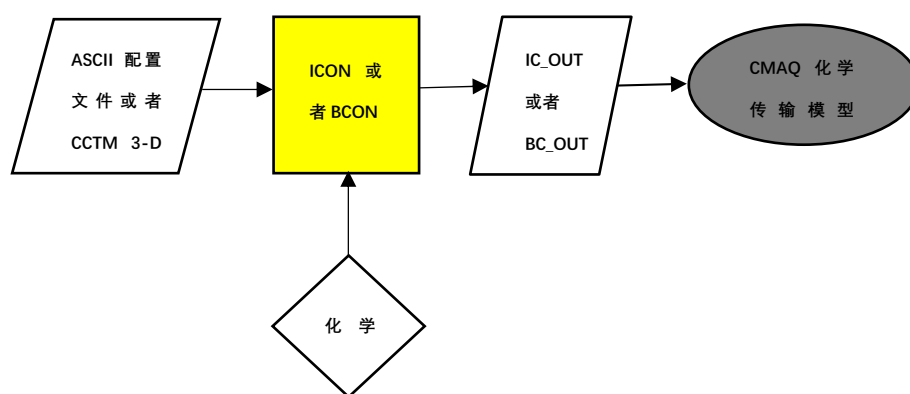


图 4-4 CMAQ 前处理初始条件和边界条件

化学机制：CCTM 浓度场与垂直浓度剖面文件都有与之相关的特定的化学机制。一个通用的文本输入配置文件或现有的 CCTM 三维浓度文件可以被用来为 CCTM 生成初始条件和边界条件。用户在配置 ICON 和 BCON 时，要充分考虑

用于 CCTM 模拟的气相化学机制和气溶胶模块。CMAQ 包括用于 RACM2、CB05、SAPRC-07T 光化学机制和 CMAQ AERO6 气溶胶模块的文本输入配置文件。现有的 CCTM 三维浓度场可以通过几种不同的化学机制产生。

CCTM 和 CMAQ 输入处理器中使用的化学机制必须与用于生成输入到 ICON 和 BCON 的浓度字段的机制一致。换句话说，用户必须使用 CCTM 模拟中使用的相同化学机制来生成初始条件和边界条件。

如果输入数据是标准的 I/O API 格式，ICON 和 BCON 可从配置文件中使用的水平和垂直坐标系统线性插值输入浓度文件到模型模拟所需的配置文件。如果插值是在两种不同的垂直坐标系中，每个垂直层的中间高度也必须是可用的。

目前的 ICON 和 BCON 处理器还不能从半球和全球模型的结果生成 CMAQ 模型的初始条件和边界条件。一个单独的处理器（GEOS2CMAQ）可以使用 GEOSCHEM 模型结果为 CMAQ 生成边界条件。另一个处理器可以使用半球模型结果为 CMAQ 生成边界条件。这些处理器正在开发中，未来将会发布。如果你现在需要这些处理器，请联系我们。

4.2.3 CHEMMECH 化学机制编译器

CMAQ 的发布版本包括了预配置的大气化学反应集和机制的所有必需的化学机制信息。用户选择用于编译和运行 CCTM 可执行文件的机制。CCTM 通过其名称列表文件和 FORTRAN 模块实现了化学机制。这些名称列表文件是 ASCII 格式的，包括所需的机制参数，如物种、反应化学计量和动力学信息。模块文件用于编译 CCTM 可执行文件，而名称列表则由 CCTM 在运行时读取。

希望生成新的化学机制的高级用户必须使用 CHEMMECH 程序将机制转换为 CCTM 程序所需的文件。CHEMMECH 使用通常名为“mech.def”的机制定义文件，以及可选的机制名称列表文件来生成 FORTRAN 模块。“mech.def”是一个文本文件，它使用严格的语法来定义化学反应及其速率常数。

这种定义 CMAQ 化学机制的方法允许化学反应和它们的种类成为可执行代码的固定部分。修改名单可以改变保存到输出文件中的预测、物种沉降过程、排放输入和其他物种选项，而无需重新编译可执行文件。参数文件和 ICON、BCON 前处理程序均定义了 CCTM 化学机制。CCTM 以及 ICON 和 BCON 预处理器使用定义化学机制的名称列表。FORTRAN 模块需要运行实用程序，例如 create_ebi、

inline_phot_preproc 和 JPROC。

4.2.4 CMAQ 闪电 NO 处理器

CMAQ 可以评估闪电 NO 排放对空气质量的影响。CCTM 闪电 NO 处理器的细节在第 7 章和 CMAQv52 发布说明中描述。闪电 NO 排放集科研在线生成，也可以作为包含三维 NO 数据的外部输入文件读取。CCTM 中有两种评估闪电 NO 排放的方法：使用国家雷电监测网发布的逐小时雷击数监测数据；2002 至 2016 年水平网格分辨率 12km 的国家雷电监测网雷击数数据，可以从 CMAS 中心获取。闪电参数文件包含海洋掩模和 ICCG 数据（云间和云与地面间雷击数比率的气候数据）；海洋掩模和 ICCG 数据应用于两种在线生成方案。参数文件可调用国家雷电监测网逐小时雷击数数据。闪电 NO 默认生成速率对于 CG 和 IC 雷击都是每雷击一次 350 摩尔，然而这些值可以通过 CCTM 环境变量修改（MOLSNCG 和 MOLSNIC）。在美国通常是下载国家雷电监测网逐小时数据和参数文件进行模拟。线性（对数线性）参数来源于历史悠久的国家雷电监测网数据，模型 Kain-Fritsch 对流参数方案可预测对流降水。当监测的逐小时雷击数数据不可用时，上述选项可以使用，例如空气质量预报和未来气候应用。

4.2.5 CALMAP：提取日期和地图信息预处理器

CMAQ 可以在 CCTM 中在线预测粉尘排放量。CMAQ 粉尘排放模块使用了土地覆盖/地表利用数据以确认粉尘排放源区域。粉尘模块包括预测农业区风（与人为粉尘排放不同）对扬尘的影响，种植期和收割期可利用侵蚀土地对粉尘排放的影响。Calmap 是 CCTM 的一个预处理器，它可以提取日历信息，向 CMAQ 粉尘模块提供格点作物种植和收割日期。

图 4-5 展示了 Calmap 工作流程。CALMAP 从 GRIDCRO2D 气象文件（MCIP 输出文件）读入格点信息，从 BELD3 获取土地覆盖/地表利用数据，从日历信息获取播种起始期、播种结束期和收割结束期，向模型网格中插入不同的作物种植类型。当预测粉尘排放时，CCTM 输入这些文件，模拟农业活动对粉尘排放的影响。

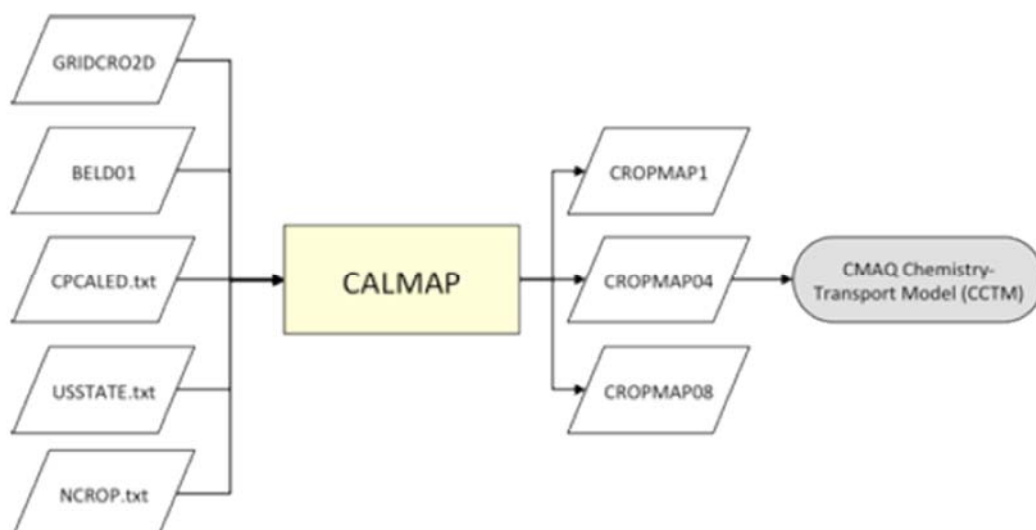


图 4-5 CCTM 提取日期和地图信息预处理器

4.3 CCTM: CMAQ 化学传输模型

图 4-6 说明了 CMAQ 模型系统模拟污染物化学传输特征的步骤。这张图同时也展示了 CMAQ 是如何与空气质量模型系统其他模块相联系的：气象模型、排放源模型和分析软件。CMAQ 需要输入数据来执行模型模拟，包括气象和排放源数据。CCTM 使用这些输入信息，可以模拟每一个大气传输、大气转换过程，臭氧和颗粒物清除过程以及其他污染物。CMAQ 使用科学技术模拟这些进程，如下所述。

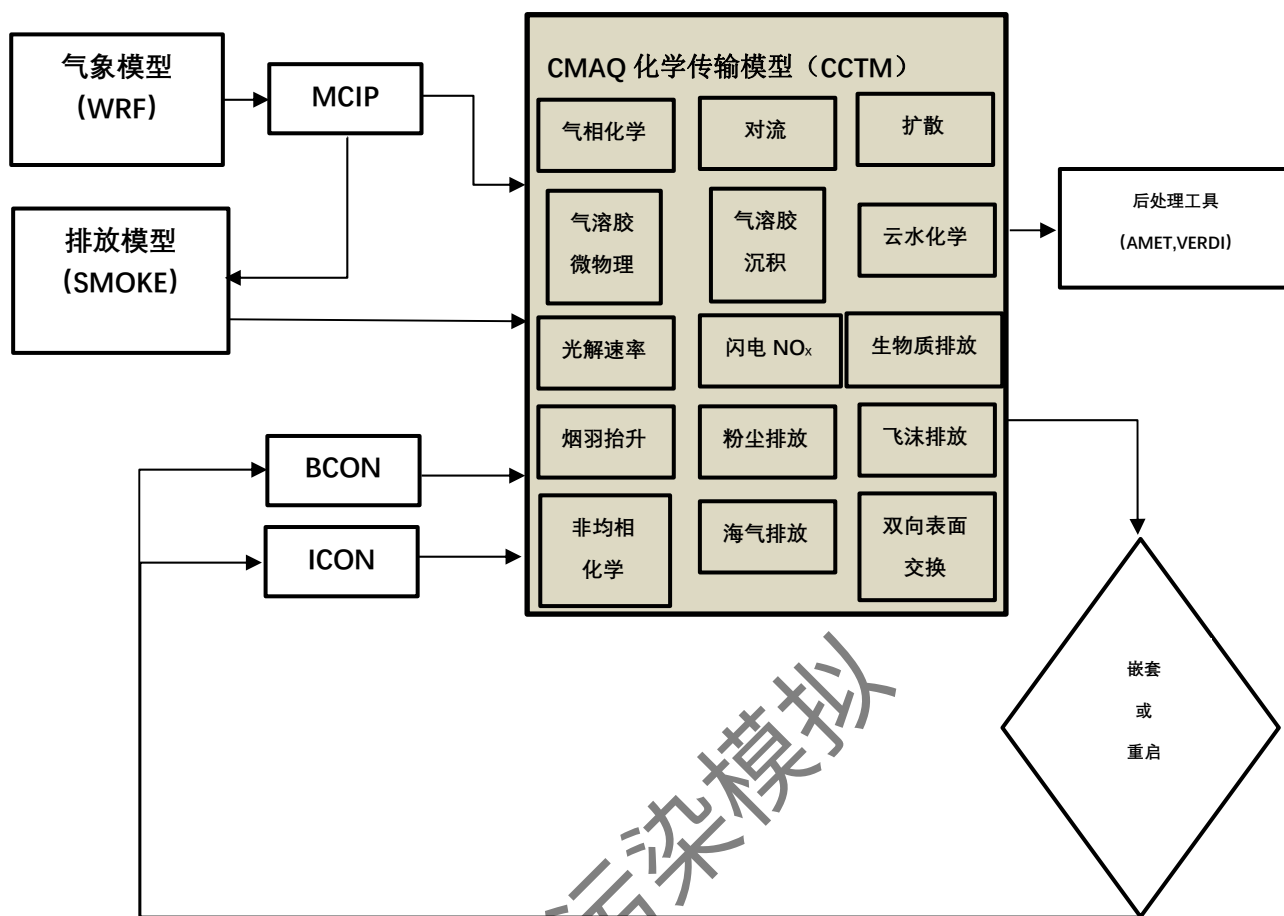


图 4-6 CMAQ 化学传输模型和相关联的预处理器

4.3.1 气相化学

有关于 CMAQ 化学算法的更新内容，请查阅 CMAQv5.2 发布说明。

4.3.1.1 气相化学求解器

为了确定由化学机制描述的时间依赖性物种浓度, CCTM 使用数值方法来求解代表化学转化的常微分方程。有三种适用的求解方法，它们在精度、泛化和计算效率等方面有所不同。它们包括 Rosenbrock (ROS3) 求解器(Sandu et al., 1997)、欧拉反向迭代 (EBI) 求解器(Hertel et al., 1993)和稀疏矩阵矢量化齿轮 (SMVGEAR) 求解器(Jacobson and Turco, 1994)。按照出现的顺序, SMVGEAR 和 ROS3 被认为更为准确。这两种求解法被标记为“广义的”，因为使用任何一个都只需机制的名称列表和 FORTRAN 模块。EBI 求解器计算效率更高，但精度较低，而且不是“广义”求解器，因此每种化学机制都需要它自己的 EBI 求解器。CMAQ 为每个机制定义文件版本都包含了一个模型版本的 EBI 求解器。请

参阅 CMAQ 说明文档了解特定版本中的机制。如果用户创造或者修改化学机制，他必须要通过 `create_ebi` 程序创造一个新的 EBI 求解器。

4.3.1.2 光解

光解或光解作用在大气中几个关键的化学进程中激发和分解化合物。它在臭氧和影响人体健康的特殊物质的形成过程中起到作用。因此，计算光解反应的速率强烈地影响空气质量模型模拟准确度模拟现实情况的好坏。

光解速率的计算必须考虑多种因素，云、地表特征、大气气体和气溶胶都会影响光解速率，因为它们都会散射和吸收光。一个给定的光解反应取决于所涉及化合物的分子性质。以下两个属性描述了依赖性。吸收截面表示化合物吸收太阳辐射的有效分子面积。量子产率使分子有机会在吸收辐射后游离。每个特性都依赖于入射辐射的波长，以及空气的温度和密度。

在线法 (Binkowski et al., 2007) 是 CCTM 程序计算光解速率的首选方法。该方法使用模拟中预测的气溶胶和臭氧来计算太阳辐射。该计算需同时输入 `PHOT_OPTICS` 和 `OMI` 输入文件。`PHOT_OPTICS` 光学文件描述了云层、气溶胶和地球表面的光学特性。`OMI` 文件用于确定模型区域之上的大气吸收了多少光。这两个文件都包括在 CMAQ 发行版本中。计算光解速率还需使用一个额外的称为 `CSQY_DATA` 的输入文件。它包含了给定化学机制中光解速率的横截面和量子产率。在 CMAQ 发行版本中，`CSQY_DATA` 文件可用于所有化学机制计算。如果用户使用新的或附加的光解速率创造了机制，他们必须也要创造新的 `CSQY_DATA` 文件。`Inline_phot_preproc` 程序基于描述机制的 Fortran 模块 (详见 `CHEMMECH` 程序部分) 和描述每个光解反应的吸收截面和量子产率的单个文件生成这个文件。

CMAQ 建模系统包括一个额外的方法来计算基于查找表的光解速率。该表给出了在无云条件下，基于大气成分、温度、密度、气溶胶的固定径向截面的机制光解速率。每个表都以特定儒略日高度、纬度和太阳时角的函数表示速率。说在模型模拟中，该方法在数据表中插入速率，并根据气象文件描述的云进行校正。`JPROC` 程序基于描述化学机制的 FORTRAN 模块创建表，该程序还需要文件描述每个光解速率。

4.3.2 污染物传输

关于 CMAQ 中传输算法的更新，请参阅 CMAQv5.2 版本发布说明。

污染物的输送包括平流和次网格尺度的扩散。平流与平均风场引起的污染物输送有关，而扩散与次网格尺度的污染物湍流混合有关。如果污染物烟羽主要是由平流输送的，那么它可以在污染物浓度变化不大的情况下长距离输送。另一方面，如果污染物烟羽主要是由扩散的方式进行输送，那么污染物将更快地混合，并更接近污染源，从而导致污染物浓度的重大变化。

4.3.2.1 平流

在 CCTM 中，平流过程分为水平分量和垂直分量。这种区别是可能的，因为平均大气运动主要是水平的。垂直运动通常与动力学和热力学的相互作用有关。平流过程依赖于连续性方程的质量守恒特性。利用 MCIP 的动态和热力一致的气象资料进行空气质量模拟，保持资料的一致性。当气象资料与数值平流算法质量不太一致时，需要求解修正的平流方程(Byun, 1999)。

CMAQ 水平平流方案是分段抛物线法(PPM)(Colella and Woodward, 1984)。该算法基于平流标量的有限体积子网格定义。在 PPM 中，子网格分布在每个网格区间用一条抛物线来描述。PPM 是一种单调正定方案。正定方案保持着输入值的符号，在这种情况下，意味着正浓度将会保持正值，而不会变为负值。这些规范采用了 v4.6 版本引入的全球质量守恒方案，该方案与 CMAQ 的空气质量预报版本所使用的方案类似。受与剑桥环境学院 Robert Yamartino 讨论的启发，该方法使用水平平流 PPM 方案，利用驱动气象模型的空气密度推导出每个网格单元的垂直速度分量，以满足连续性方程。

垂直平流模块求解模型底部至顶部没有质量交换边界条件的垂直平流。CMAQ 也使用 PPM 作为其垂直平流模块。从 CMAQv5.0 开始，实现了一种新的计算垂直速度的方法，该方法遵循 WRF 中的 ω 计算，但使用 PPM 计算水平质量散度。这一过程分为两步，首先通过垂直列积分连续性方程以得到列质量的变化，然后利用水平质量散度求出每层的 ω 值（详见 the WRF ARWv3 技术手册方程 2.27）。在 CCTM 中，由于光化学空气质量条件下观察到的示踪物种的强梯度，带有陡度过程的 PPM 算法被作为默认值用于垂直平流。

4.3.2.2 扩散

在 CCTM 中，垂直扩散用 Pleim and Chang, 1992 的非对称对流方法(ACM)

来表示，ACM2 (Pleim, 2007)是 ACM 的更新版本，在 CMAQv5.0 开始应用。这种方法认为在对流条件下（当地面变暖时），热空气通过浮力垂直运输，并在地面以上的每一层与周围空气混合，直到上升的空气温度与周围温度相等。这一过程是由狭窄上升气流中的快速流动空气和较大下降气流中的缓慢流动空气造成的。因此，在对流条件下，垂直扩散是非对称的。对于处理生物源和点源排放的在线方法，是在 CMAQ 计算过程中使用 ACM 来计算这些排放的垂直分布。

在非对流条件下（当地面是变冷时），垂直扩散用涡流扩散率方法表示。涡流扩散率是一种局部混合方案，与区域酸沉降模型使用的基于行星边界层(PBL)相似理论算法(Chang et al., 1987, 1990)相同。在 CCTM 中，沉降过程被模拟为一个通量边界条件，影响最低垂直模型层的浓度。将沉降过程看作是由于模型底部扩散通量引起的质量损失，可以将广义坐标系下的底部边界条件与笛卡尔坐标系的底部边界条件联系起来。CMAQv5 是对最小允许垂直涡流扩散系数方案的改进。改进版在城市和非城市土地覆盖之间插值，允许以城市为主的网格单元具有较大的最小垂直扩散系数。

水平扩散是通过一个单一的涡动扩散算法来实现的，该算法基于局地风的变形，并按网格单元缩放。水平涡扩散系数假定是均匀的，但依赖于与模型的网格分辨率。在高分辨率运行时，由于平流过程的数值扩散较小，这种扩散系数较大。

4.3.3 颗粒物（气溶胶）

关于 CMAQ 中气溶胶化学算法的更新，请参阅 CMAQv5.2 发布说明。

在空气质量领域，大气气溶胶粒子被称为颗粒物（PM）。PM 可以是一次污染物（直接排放），也可以是二次污染物（在大气中形成）。PM 来自于自然源或人为源。二次来源包括 SO₂ 气相氧化成硫酸盐，氨和硝酸盐的缩合，以及气相 VOCs 的氧化，如异戊二烯、单萜、芳烃和烷烃。云过程也有助于 PM 的形成；例如，云滴中 SO₂ 的液相氧化作用是生成硫酸盐颗粒物的重要途径。CCTM 使用三个相互作用的对数正态分布或模态表示 PM。其中，有两种模态（爱根核模态和积聚模态）通常直径小于 2.5 微米，而另一种粗模态直径通常大于 2.5 微米。通过模型的质量浓度和粒径分布信息，可获得国家环境空气质量标准中 PM_{2.5} 和 PM₁₀ 的物种聚集指标。

在 CMAQ 中颗粒物通过湿清除、湿沉降、干沉降从大气中去除。干沉降是

通过湍流空气运动和较大颗粒的直接重力沉降来实现的。颗粒物的沉降速率必须从气溶胶粒径分布、气象和土地利用信息计算出来。CMAQ 的干沉降模块根据三种模态的质量和数量浓度计算粒径分布，从而计算干沉降速率。粗模态中的粒子较大，CMAQ 明确地解释了它们的重力沉降。在湿沉降中，颗粒物是通过降水沉降的。湿沉降在 CMAQ 云模块中计算的。从 CMAQv4.7 开始，对湿沉降算法进行了改进，在粗堆积模式中加入来撞击项。

CMAQ 第六代气溶胶模块 (AERO6) 扩展了 PM 的化学形态。AERO6 中增加了 8 个新的 PM 物种：Al、Ca、Fe、Si、Ti、Mg、K 和 Mn。在以前的 CMAQ 版本中明确处理过但没有建立模型的四种物种现在可以被视为主要的人为物种：H₂O、Na、Cl、CH₄。物种形成后遗留中新组件中的 PM 排放质量现在作为 PMOTHER 物种输入到模型中。AERO6 需要 18 个 PM 排放种类：OC、EC、硫酸盐、硝酸盐、H₂O、Na、Cl、NH₄、NCOM、Al、Ca、Fe、Si、Ti、Mg、K、Mn 和其他 (Reff et al., 2009)。

CMAQ 包括两个 POA 选项：非挥发性和半挥发性。非挥发性 POA 配置中，质量是根据其碳 (OC) 和非碳 (NCOM) 含量单独跟踪的。通过这种方法，可以将质量添加到非碳物种中，以模拟 POA 对大气氧化剂的反应。Simon 和 Bhavsar (2011) 记录了主要有机碳和 OH 自由基之间二级反应的实现。半挥发性 POA 配置中基于挥发性与氧化态的组合将 POA 分为几个模型物种 (Murphy et al., 2017)。低氧化态 POA 有 5 种 (LVPO1、SVPO1、SVPO2、SVPO3、IVPO1)，分别代表着低挥发性、半挥发性和中挥发性化合物。当气相物种 (如 VLVPO1) 与 OH 氧化时，它们会形成更高氧化态的物种 (如 LVPO1、LVPO2、SVPO1、SVPO2、SVPO3)。半挥发性 POA 配置的多代老化化学来源于 Donahue (2012) 等人的方法，该方法考虑了氧化后有机蒸汽的功能化和碎片化。半挥发性 POA 配置还包括了潜在二次燃烧源有机气溶胶 (psSOA) 选项 (默认开启)。这种物质以 VOC (pcVOC) 的形式排放，与 OH 自由基后反应后生成 SOA。psVOC 排放值可由用户归零。

AERO6 在“反向模态”中使用 ISORROPIA 计算挥发性无机气体与已知粗颗粒表面气相浓度之间的冷凝和蒸发。在“正向模态”中，使用 ISORROPIA 计算气体与细颗粒物模态之间的瞬时热力学平衡。所有半挥发性有机物质的传质是

在假设平衡吸收分配的情况下计算的，尽管一些非挥发性物质确实存在（例如云处理有机气溶胶、低聚物、非挥发性 POA（如果选择））。

CMAQ 可以输出由 PM 的存在引起的能见度降低，被认为是雾霾。CCTM 集成了整个粒径范围内的米氏散射（一种广义的粒子光散射机制，遵循电磁定律应用于粒子），从而在每个时间步长上为每个模型网格单元获得单一的能见度值。Binkowski 和 Shankar(1995)、Binkowski 和 Roselle (2003)以及 Byun 和 Schere (2006)对 CCTM 中使用的 PM 的计算技术有更详细的描述。

为了便于 CMAQ 输出的 PM 值和观测值对比，模型可以输出与时间相关的截止分数(例如 Jiang 等, 2006)。这些包括数量来描述每种模态的分数被归类为 PM_{2.5}（例如 PM25AT, PM25AC 和 PM25CO）和 PM_{1.0}（例如 PM1AT, PM1AC 和 PM1CO），以及粒子的分数从每种模态将被检测到的 AMS（即 AMSAT, AMSAC 和 AMSCO）。在 CMAQ 的多污染物版本中，有一个表面相互作用模块，可以计算来自和去向地表的汞通量（而不仅仅是沉降汞）。

关于 CMAQ 颗粒物处理科学改进的进一步讨论，可以在模型的每个发布版本的发布说明中找到。

4.3.4 云和液相化学

请详见 CMAQv5.2 版本了解 CMAQ 中多相化学算法的更新。

云是空气质量建模的重要组成部分，在水化学反应、污染物垂直混合和湿沉降去除污染物等方面发挥着关键作用。云还通过改变太阳辐射间接影响污染物浓度，而太阳辐射反过来又影响光化学污染物（例如臭氧）和生物排放通量。CMAQ 中的云模块执行与云物理和云化学有关的功能。CMAQ 可模拟三种类型的云：次网格对流降水云、次网格无降水云和网格解析云。气象模型提供了网格解析云信息，CMAQ 不考虑额外的云动力学。对于两种类型的次网格云，CCTM 中的云模块对污染物进行垂直再分配，计算云内清除和降水清除，进行水化学计算和累积湿沉降量。CMAQv5 对流云混合算法的一个重要改进是修正了从预测云上层向云下层过度输送的趋势。

CMAQ 的标准云化学处理可以估算五种硫氧化反应产生的硫酸盐，以及乙二醛和甲基乙二醛与羟基自由基反应产生的二次有机气溶胶。气相和液相之间的分布是由瞬时亨利平衡决定的，并使用二分法估计假设电中性状态下 pH 值和离

子物种的分布。从 CMAQv5.1 开始, AQCHEM-KMT 和 AQCHEM-KMTI 两个额外的云化学模块选项, 与标准的 AQCHEM (Fahey 等, 2017) 一起提供。这些模块采用了 Rosenbrock 求解器, 该求解器是使用动力学预处理器 (KPP) 生成的, 版本为 2.2.3 (Damian 等, 2002), 用于解决云化学、离子离解、湿沉降、以及气相和液相之间的动力学传质 (Schwartz, 1986 年)。除了标准的硫和羰基氧化反应外, AQCHEM-KMTI 还包括一种扩展的液相化学机制, 可以从云中衍生环氧化物 (Pye, 2013) 中处理 SOA 的形成。在所有的云化学模块中, 大颗粒粒子阳离子含量的参数已更新, 与 CMAQ 的其余部分一致。

4.3.5 沉降

请参阅 CMAQv5.2 发行说明了解 CMAQ 中空气-地面交换算法的更新。

CMAQ 可选择性地计算化学物质的干、湿沉降。有关算法的信息可以在 Pleim and Ran (2011)、Bash 等 (2013)、Pleim 等(2013)中找到。要在模型运行中考虑沉降过程, 名称列表文件中的条目必须指出沉降替代物种和沉降因子。默认的名称列表文件包含已知物种沉降的标准配置。对于湿沉降, 清除因子 (SCAV_FAC) 应设置为 1, 替代物种 (SCAV_SUR) 必须是 HLCONST.F 子例程中列出的化学物质之一。如果该化学物质没有在 HLCONST.F 中子例程列出的替代物种列表中, 需要将其添加到模型源代码中。对于干沉降, 沉降因子 (DEPV_FAC) 应设置为 1, 沉降速率替代物 (DEPV_SUR) 应是 DEPVDEFN.F 子例程所列物质之一。此文件中列出的物种将进一步交叉引用到 ASX_DATA_MOD.F 子例程中的一个表。ASX_DATA_MOD.F 中指定了在空气中的扩散系数、化学反应、叶肉阻力、LeBas 摩尔体积、湿表面清除替代物。湿表面清除替代物必须是 HLCONST.F 程序中的某种化学物质, 同时还必须是某种典型湿沉降物质。如果沉降速率替代物不在表格中, 则可以将这种物质添加到模型源代码中。

CMAQ 的运行标志是氨和汞双向模块是否调用。双向模块用于模拟这些物种在大气与地表间的双向交换 (而不仅仅是沉降)。汞双向模块 (Bash 2010) 是 CMAQv5 多污染物配置的一部分。要使用氨的双向选项, 需要额外的输入文件。这些文件是根据环境政策综合气候模型 EPIC 创建的 (Cooter 等, 2012)。有两个时间独立的文件提供关于土壤和土地覆盖的信息。一个时间相关文件包含施肥方法和用量的信息。

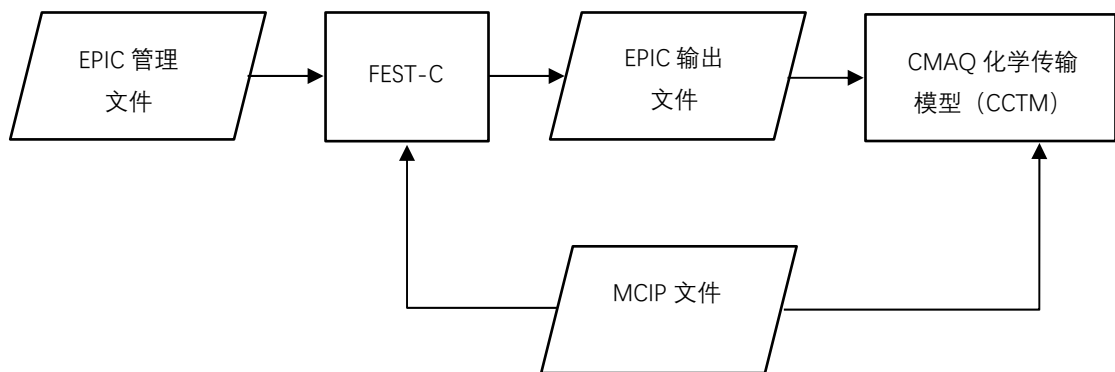


图 4-7 Cooter 等（2012）制作的 EPIC、气象模型和 CMAQ 之间的数据流

另一个与沉降相关的选项是 CMAQ_MOSAIC 运行时选项。该选项输出土地利用的特定沉积速率与通量。

CMAQ 旧版本已经包括了 HONO 多相化学对于沉降速率的影响。CMAQv5.0 不再包含这些影响。

4.3.6 排放

请参阅 CMAQv5.2 发布说明了解 CMAQ 中排放算法的更新。

CMAQ 包括计算和处理 CCTM 排放的几个在线选项。CMAQv5 的在线排放选项包括：

- **BEIS3** 生物排放模型可用于计算植被和土壤的排放。这个生物模型是基于 SMOKE 中包含的相同模型。BEIS 的用户文档可以在 SMOKE 手册的 6.17 章找到。生物排放的时间分配包含在 CMAQ 中。然而，冬季和夏季网格标准化排放计算与时间无关，必须在 CMAQ 在线生物源选项运行之前使用 **normbeis3** 进行计算。用户必须为模拟提供一个不只是夏季或冬季的 **BIOSEASON** 文件（例如，多个季节，春、秋），要么将 **SUMMER_YN** 标志为夏季的 Y 或冬季的 N。如果没有 **BIOSEASON** 文件，所有的生物排放都将使用夏季因子或冬季因子计算。另外，当使用生物在线选项时，用户必须将前一天模拟的 **SOILOUT** 文件指向第二天的 **SOILINP** 文件。用户还必须决定是重写前几天的 **SOILOUT** 文件，还是为每天都创建一个唯一命名的 **SOILOUT** 文件。如果用户希望在模拟序列中保持重启模型的能力，建议采用后一种方法。

- 对于较大的点源，可以计算烟羽抬升。排放文件经过 SMOKE 处理后，可在 CMAQ 内在线计算烟羽抬升。NPTGRPS 设置为部门的数量，用户需要提供 stack_groups 文件和在线排放文件。可选地，用户可以要求 2 个可选输出诊断文件，包括一个三维排放文件和一个层分数文件，包括每个模型层的排放分数。

- 利用气象和土地利用数据可以用来评估风沙尘排放。

- 更新海盐排放。在 AERO6 中，积聚模态下的海盐排放形成 Na、Cl、SO₄、Ca、K 和 Mg。粗态海盐中的所有阳离子（即 Na、Ca、K 和 Mg）都被归为一种称为 ASEACAT 的物种。

4.3.7 过程分析

关于 CMAQ 中过程算法的更新，请参阅 CMAQv5.2 的发布说明。

过程分析（PA）是一种可以分离和量化单个物理和化学过程对污染物预测浓度变化的贡献的技术。PA 不一定要在 CMAQ 中激活，但是包含 PA 可以提供对解释 CMAQ 结果有用的额外信息。PA 由两部分组成：综合进程率分析（IPR）和综合反应率分析（IRR）。IPR 分析量化了平流、扩散、排放、干沉降、气溶胶过程和云过程的单个物理过程和化学过程的总体影响。IPR 分析允许输出个别化学反应率或者用户指定的化学反应组合和物种循环。

PA 变量的计算是通过保存与每个过程或反应有关的微分算子，集成在模型同步的时间步长上，在求解模型中的连续性方程时使用相同的变量。对于在同一操作中同时解决的过程，PA 使用质量平衡来计算每个过程的贡献。

作为一个识别单个化学和物理过程相对重要的工具，PA 可以人工应用，包括：当试图识别化学物质浓度的主要贡献者时，PA 有助于揭示大量控制物质浓度的复杂过程。这对于在同一时间步骤中同时发生产生和衰变过程的物种也很有用，因为最终浓度可能变化不大，但单个的衰变和产生速率可能很大。

为了表征一个特定网格单元的化学状态，IRR 可以用来计算定量，如奇氧的产生，新自由基的产生和自由基的终止（例如，详见 Tonnesen and Dennis, 2000）。作为模型开发工具，PA 可以帮助评估模型或者过程模块修改的效果。为了 QA 的目的，PA 可以用来帮助确定补偿、或未解决的模型错误、或者输入数据中的错误，这些可能不会在总浓度变化中反映。例如，如果排放输入数据中的错误导

致模型在中间步骤计算出现负浓度值，如果由化学计算产生的更大的正值补偿，这可能在最终预测浓度中被掩盖。

如果用户在 CMAQ 运行期间激活 PA (CTM_PROCAN=Y)，PA 输入文件 (PACM_INFILE) 指定是否执行 IPR、IRR 或两者分析，并定义每个分析需要哪些变量。IRR 参数是高度可定制的，可以很容易修改新的化学机制，但必须在运行前仔细检查，以确保它们与所使用的机制相对应。PA_REPORT 输出文件应始终被检查，以验证计算是否被正确执行。需要注意的是，IPR 选项可以在任何化学求解器下运行，而在 CMAQ 中使用 IRR 则需要使用 Rosenbrock 处理器，或 SMVGEAR 处理器。

4.4 CMAQ 用户界面

与模型源代码一起发布的 CMAQ 用户界面由一系列用于在 Linux 操作系统上构建和运行各种 CMAQ 程序的 C-shell 脚本组成。这些脚本主要用于设置 Bldmake 程序或者 CMAQ 程序可执行文件所需的环境变量。这些脚本可以适应于任何 Linux shell 脚本（如 Bash、Bourne）。

CMAQ 源代码可以从美国环境保护署 CMAQ GitHub 库中查看和下载。或者，代码也可以在模型交流和分析系统 (CMAS) 中心网页下载。CMAQ 每一个程序脚本都可以单独构建和运行。构建脚本用于将源代码编译为二进制可执行文件。运行脚本用于设置所需的环境变量和执行 CMAQ 程序。用户可以通过 emacs、gedit、nano、vi 等 Linux 文本编辑器操作 CMAQ 脚本。有些选项需要在编译时设置，有些选项可以在运行模拟之前设置。关于使用脚本构建和运行 CMAQ 的细节在第 5 章描述，更多的细节在第 7 章描述。

CMAS 中心目前在使用 Gnu、Portland Group 和 Intel Fortran 编译器的 Linux 系统上支持 CMAQ。鼓励社区成员分享他们将 CMAQ 移植到其他操作系统和编译器的经验。

强烈建议 CMAQ 用户对 CMAQ 系统的所有组件使用相同的 Fortran 编译器，包括 CMAQ 所依赖的 netCDF 和 I/O API 库。

4.5 参考文献

Bash, J. O., E. J. Cooter, R. L. Dennis, J. T. Walker, and J. E. Pleim, 2013: Evaluation of a regional airquality model with bidirectional NH₃ exchange coupled to an agroecosystem model. *Biogeosciences*, 10, 1635-1645.

Bash, J.O., 2010, Description and initial simulation of a dynamic bi-directional air-surface exchange model for mercury in CMAQ, *J. Geophys. Res.*, 115, D06305

Binkowski, F.S., and U. Shankar, 1995: The Regional Particulate Model: Part I. Model description and preliminary results. *J. Geophys. Res.*, 100, 26 191 – 26 209.

Binkowski, F. S., and S. J. Roselle, 2003: Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model aerosol component. 1. Model description. ”*J. Geophys. Res.*, 108, 4183, doi:10.1029/2001JD001409.

Binkowski, F.S, , S. Arunachalam, Z. Adelman, and J. Pinto, Examining photolysis rates with a prototype on-line photolysis module in CMAQ, 2007, *J. Appl. Meteor. and Clim.*. 46, 1252-1256, doi:10.1175/JAM2531.1

Byun, D. W., 1999: Dynamically consistent formulations in meteorological and air quality models for Multiscale atmospheric studies. Part I: Governing equations in a generalized coordinate system. *J.Atmos. Sci.*, 56, 3789 – 3807.

Byun, D. W., and J. K. S. Ching, 1999: Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. U. S. Environmental Protection Agency Rep. EPA600/R99/030, 727 pp. [Available from Office of Research and Development, EPA, Washington, DC 20460.]

Byun, D., and K. L. Schere, 2006: Review of the governing equations, computational algorithms, and other components of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system. *Appl. Mech. Rev.*, 59, 51 – 77. doi:10.1115/1.2128636

Carlton, A.G., B. J. Turpin, K. Altieri, S. Seitzinger, R. Mathur, S. Roselle, R. J. Weber, 2008. CMAQ model performance enhanced when in-cloud SOA is included: comparisons of OC predictions with measurements, *Environ. Sci. Technol.* , 42, (23), 8799-8802,

Carlton, A.G., P.V. Bhawe, S.L. Napelenok, E.O. Edney, G. Sarwar, R.W. Pinder, G.A. Pouliot, M. Houyoux, 2010: Model Representation of Secondary Organic Aerosol in CMAQv4.7. *Env. Sci. & Technol.* 44 (22), 8553-8560.

Chang, J. S., P. B. Middleton, W. R. Stockwell, C. J. Walcek, J. E. Pleim, H. H. Lansford, F. S. Binkowski, S. Madronich, N. L. Seaman, D. R. Stauffer, D. Byun, J. N. McHenry, P. J. Samson, and H. Hass, 1990: The regional acid deposition model and engineering model, *Acidic Deposition: State of Science and Technology*, Report 4, National Acid Precipitation Assessment Program.

Colella, P., and P. L. Woodward, 1984: The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *J. Comput. Phys.*, 54, 174 – 201.

Cooter, E.J., Bash, J.O., Benson V., Ran, L.-M., 2012, Linking agricultural management and air-quality models for regional to national-scale nitrogen deposition assessments, *Biogeosciences*, 9, 4023-4035

Damian, V., A. Sandu, M. Damian, F. Potra, and G.R. Carmichael, 2002: The Kinetic PreProcessor KPP – A Software Environment for Solving Chemical Kinetics, *Computers and Chemical Engineering*, 26, 1567-1579.

Donahue, N. M., et al. 2012: A two-dimensional volatility basis set – Part 2: Diagnostics of organic aerosol evolution. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12(2), 615-634.

Edney, E. O., T. E. Kleindienst, M. Lewandowski, and J. H. Offenberg, 2007. Updated SOA chemical mechanism for the Community Multi-Scale Air Quality model, EPA 600/X-07/025, U.S. EPA, Research Triangle Park, NC.

Elterman, L., R. Wexler, and D. T. Chang, 1969: Features of tropospheric and stratospheric dust. *Appl. Optics*, 8, 893 – 903.

Fahey, K.M., A.G. Carlton, H.O.T. Pye, J. Baek, W.T. Hutzell, C.O. Stanier, K.R. Baker, K.W. Appel, M. Jaoui, J.H. Offenberg, 2017: A framework for expanding aqueous chemistry in the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model version 5.1, *Geosci. Model Dev.*, 10, 1587-1605.

Fountoukis, C and A. Nenes, 2007: ISORROPIA II: A computational efficient thermodynamic equilibrium model for $K^+-Ca^{2+}-Mg^{2+}-NH_4^+-Na^+-SO_4^{2-}-NO_3^- -Cl^- -H_2O$ aerosols, " Atmos. Chem. And Phys., 7, 4639-4659.

Hertel O., R. Berkowicz, J. Christensen, and O. Hov, 1993: Test of two numerical schemes for use in atmospheric transport-chemistry models. Atmos. Environ., 27A, 2591 – 2611

Jacobson, M., and R. P. Turco, 1994: SMVGEAR: A sparse-matrix, vectorized Gear code for atmospheric models. Atmos. Environ., 28, 2991 – 3003.

Jiang, W., S. Smyth, É. Giroux, H. Roth, and D. Yin, 2006: Differences between CMAQ fine mode particle and PM_{2.5} concentrations and their impact on model performance evaluation in the lower Fraser valley. Atmos. Environ., 40, 4973 – 4985.

Murphy, B. N., et al., 2017: Semivolatile POA and parameterized total combustion SOA in CMAQv5.2: impacts on source strength and partitioning. Atmospheric Chemistry and Physics Discussions, 2017:1-44.

Otte, T. L., and J. E. Pleim, 2010: The Meteorology-Chemistry Interface Processor (MCIP) for the CMAQ modeling system: updates through MCIPv3.4.1. Geoscientific Model Development, 3, 243-256.

Pleim, J.E., J. O. Bash, J. T. Walker, and E. J. Cooter, 2013. J. Geophys. Res., 118, 3794-3806.

Pleim, J. E., and J. S. Chang, 1992: A nonlocal closure model in the convective boundary layer. Atmos. Environ., 26A, 965 – 981.

Pleim, J.E., and L. Ran, 2011: Surface Flux Modeling for Air Quality Applications. Atmosphere, 2, 271-302.

Pleim, J. E., A. Xiu, P. L. Finkelstein, and T. L. Otte, 2001: A coupled land-surface and dry deposition model and comparison to field measurements of surface heat, moisture, and ozone fluxes. Water Air Soil Pollut. Focus, 1, 243 – 252.

Pleim, J, 2007: A combined local and nonlocal closure model for the atmospheric boundary layer. Part I: model description and testing, J. of Appl Met. and Climatology, 46, 1383-1395

Pye, H.O.T., R.W. Pinder, I.R. Piletic, Y. Xie, S.L. Capps, Y.H. Lin, J.D. Surratt, Z.F. Zhang, A. Gold, D.J. Luecken, W.T. Hutzell, M. Jaoui, J.H. Offenberg, T.E. Kleindienst, M. Lewandowski, E.O. Edney, 2013: Epoxide pathways improve model predictions of isoprene markers and reveal key role of acidity in aerosol formation, *Environ. Sci. Technol.*, 47(19), 11056-11064.

Reff, A., P.V. Bhave, H. Simon, T.G. Pace, G.A. Pouliot, J.D. Mobley, M. Houyoux, 2009: Emissions inventory of PM_{2.5} trace elements across the United States, *Env. Sci. & Technol.* 43, 5790-5796.

Sandu, A., J. G. Verwer, J. G., Blom, E. J. Spee, G. R. Carmichael, and F. A. Potra, 1997: Benchmarking stiff ODE solvers for atmospheric chemistry problems. II: Rosenbrock solvers. *Atmos. Environ.*, 31, 3459 – 3472.

Schwartz, S.E., 1986: Mass transport considerations pertinent to aqueous-phase reactions of gases in liquid water clouds. In *Chemistry of multiphase atmospheric systems*, NATO ASI Series, G6, 415-471.

Tonnesen, G.S., Dennis, R.L., 2000: Analysis of radical propagation efficiency to assess ozone sensitivity to hydrocarbons and NO_x : 1. Local indicators of instantaneous odd oxygen production sensitivity, *J. Geophys. Res.*, 105(D7), 9213-9225.

National Oceanic and Atmospheric Administration, 1976: U.S. Standard Atmosphere, U.S. Government Printing Office, Washington, DC, NOAA/T761562.

第五章 CMAQ 安装及系统配置要求

这一章介绍在 Linux 系统下如何设置和安装 CMAQ。本章的安装说明指导用户获取 CMAQ 源代码，并在计算机上进行 CMAQ 安装。本章还介绍了运行 CMAQ 基准案例和对模型进行基准测试的简要说明。此处，术语“基准测试”指的是验证模型已正确安装在一台新计算机上的过程。CMAQ 发布时带有一套参考数据集，可以用来对 CMAQ 安装进行基准测试。它们包括输入数据（例如排放数据、土地利用数据、气象数据等）和相关的输出数据，以便对进行比较。

基准测试成功完成后，CMAQ 系统才可以配置为其他模拟。为基准案例构建模型所需的步骤同样适用于为新的模拟构建模型。第十章将会介绍为新的应用配置 CMAQ。

5.1 系统推荐

所有 CMAQ 程序均由 Fortran 语言编写，并且为运行 Linux 操作系统的计算机进行了优化。大多数运行 Linux 操作系统的个人计算机都有足够的能力处理基本的 CMAQ 应用程序。然而，在实际项目中使用 CMAQ，需要考不同的空间区域和排放控制情景，模型的多次迭代均会被执行，建议在多处理器计算机集群，或可扩展的机架式 Linux 服务器上运行。

CMAQ 是分布式的，可以在 Linux 操作系统上使用 Intel Fortran、Portland Group Fortran (PGF)、Gnu Fortran 编译器执行。CMAQ 可移植到大多数运行 Linux 系统的计算机上，这些系统有 SGI Altix、Red Hat Enterprise、Fedora、Ubuntu、Mandrake、MacOSX 和 Suse。除了 Intel 和 PGF 编译器，CMAQ 还可以使用 Sun 和 Absoft 编译器进行编译。可以通过 CMAS 中心网页，查看这些端口和最新硬件信息。

5.1.1 硬件

运行 CMAQ 基准测试案例的最低硬件需求：

- 单一处理器 Linux 计算机
- 1GB 运行内存
- 100GB 硬盘存储空间

CMAS 中心硬件博客中，有实际项目基板硬件配置的推荐。

5.1.2 软件

表格 5-1 列出了 CMAQ 需要的所有程序。这个表包括与 CMAQ 一起发布的程序。注意，CMAQv5.0 及更高版本需要 I/O API 3.1 版本。更新版本的 CMAQ 将不能使用早期 I/O API 库进行编译。表格 5-2 列出了一些额外的实用软件，这些软件不用于运行 CMAQ，但他们对于模型诊断和评估很有用。

表 5-1 CMAQ 运行的软件需求

软件名称	功能描述	软件源
CMAQ 程序		
Bldmake	编译源代码的生成器	CMAQv5.2
ICON	初始条件预处理器	
BCON	边界条件预处理器	
MCIP	气象化学交互处理器	
CCTM	CMAQ 化学传输模型	
CHEMMECH	修改或增加模型化学反 应编译器	
CREATE_EBI	EBI 化学解算器源代码 生成器	
编译器		
IFORT	Intel Fortran 90 compiler	http://www.intel.com
PGF90	Portland Group Fortran 90 compiler	http://www.pgroup.com/
GFORT	Gnu Fortran compiler	http://gcc.gnu.org/fortran/
GCC	Gnu C compiler	http://gcc.gnu.org/
代码库		
OpenMPI	信息传递接口；CMAQ 多 核模拟	https://www.open-mpi.org
MPICH	信息传递接口；CMAQ 多 线程模拟	http://www.mcs.anl.gov/research/pr ojects/mpich2/
netCDF	控制 CMAQ 文件格式	http://www.unidata.ucar.edu/softwa re/netcdf/
I/O API	输入输出交互程序	http://www.cmascenter.org/ioapi/
LAPACK	双向线性代数模块	http://www.netlib.org/lapack
BLAS	线性代数基础子程序	http://netlib.org/blas/

软件名称	功能描述	软件源
CVS	CMAQ 源代码管理系统	http://ximbiot.com/cvs/cvshome/

注释: CMAQ 输出文件格式使用改进的 NetCDF 文件格式。虽然 CMAQ 通常以 NetCDF 格式输出,但是它事实上是 I/O API 和 NetCDF 的混合格式。

表 5-2 CMAQ 附加实用软件

软件名称	功能描述	软件源
评估和可视化工具		
VERDI	NetCDF 格点数据可视化展示	http://www.verdi-tool.org
PAVE	NetCDF 格点数据分析和可视化工具	http://www.cmascenter.org
IDV	NetCDF 格点数据查看器	http://www.unidata.ucar.edu/software/idv/
I/O API 工具	I/O API/netCDF 格式后处理工具	http://www.cmascenter.org/ioapi/
netCDF 工具	netCDF 格式后处理工具	http://my.unidata.ucar.edu/content/software/netcdf/index.html
源代码诊断		
GDB	Gnu Fortran 调试程序	http://sourceware.org/gdb/
PGDBG	Portland Group Fortran 调试程序	http://www.pgroup.com/
PGPROF	Portland Group Fortran 代码分析工具	http:// www.pgroup.com/
IDB	Intel Fortran 调试程序	http://software.intel.com/en-us/articles/idb-linux

5.2 安装和编译 CMAQ

在 Linux 系统下,编译和运行 CMAQ 需要几个步骤。此处列出了安装 CMAQ 的一般步骤,以及所需的支持软件和库:

1. 检查 Linux 系统下 Fortran 和 C 编译器。如果没有安装,请安装。
2. 安装 Git (CMAQ 的旧版本安装 CVS)。

3. 下载和安装 I/O API 和 NetCDF 库。按照安装说明文档，在 Linux 系统中对每个库进行安装。注意：强烈建议在建立 CMAQ 系统时，对每个库，都使用相同编译器进行编译。
4. 安装消息传递接口（MPI）。
5. 在美国环境保护署开源软件存储库（EPA GitHub Repository）或者模型分析委员会中心（CMAS Center）（<http://www.cmascenter.org>）下载 CMAQ 安装包。在模型分析委员会中心软件库注册并下载 CMAQ，按照说明文档描述的安裝和运行步骤，安装 CMAQ。注意 GitHub 仅提供了源代码和脚本。基准输入和输出数据仅可在 EPA 或 CMAS Center 下载。

5.2.1 分发目录

从 CMAQv5.2 开始，CMAQ 安装包包括：化学传输模型（CCTM）源代码、脚本和版本说明；前处理软件（例如 ICON、BCON、MCIP）源代码和脚本；实用工具（例如 BLDMAKE、CHEMMECH、NML）源代码和脚本；后处理和分祈软件（例如 COMBINE、HR2DAY、BLDOVERLAY）源代码和脚本；用户手册、教程和开发指南（DOCS）。

5.2.2 CMAQ 目录结构说明

当解压 CMAQ 压缩包时，CMAQ 会在一级目录默认安装并且以 CMAQ_HOME 路径进行安装（CMAQv5.2 之前的名称为 M3HOME）。这个目录是 CMAQ 安装的基础目录。这个步骤会让用户决定在哪里安装 CMAQ。如果用户在存储库文件夹下安装和运行 CMAQ，那么 CMAQ_HOME 没有必要进行明确设置。如果用户希望在存储库以外，安装、编译、运行模型，那么 CMAQ_HOME 就需要在 bldit_project.csh 中进行特别设置。执行 bldit_project.csh 将会自动以设置的 CMAQ_HOME 路径创建 CMAQ 文件夹。

在 CMAQ_HOME 下，数据目录提供了模型的输入输出数据，lib 目录包含了 CMAQ 执行程序所需要的编译库。CMAQ 脚本使用了环境变量，指定这些目录的位置：

```
CMAQ_LIB = $CMAQ_HOME/lib (M3LIB before CMAQv5.2) CMAQ_DATA  
= $CMAQ_HOME/data (M3DATA before CMAQv5.2)
```


CMAQ 脚本需要用户设置 CMAQ_HOME 路径；其他 CMAQ 目录是为 CMAQ_HOME 的相对路径。虽然这种目录结构对于基准测试案例和大多数 CMAQ 应用很方便，也可以按其他配置方式。CMAQ 安装和编译的详细说明将在下一节进行介绍。

5.2.3 配置系统和编译 CMAQ

使用 Fortran 和 C 编译器安装 NetCDF 和 I/O API。表格 5-3 列出了 NetCDF 和 I/O API 库的编译选项设置。有关这些库的其他安装和编译信息请详见说明文档。

表 5-3 CMAQ NetCDF 和 I/O API 编译选项设置

Library Type	Intel Fortran	PGI Fortran	Gnu Fortran
netCDF	CC = icc CPPFLAGS = -DNDEBUG -DpgiFortran CFLAGS = -g -O FC = ifort F77 = ifortFFLAGS = -O2 -mp -recursive CXX = icpc	CC = gcc CPPFLAGS = -DNDEBUG -DpgiFortran CFLAGS = -OFC = pgf90FFLAGS = -O -w CXX = g++	CC = gcc CPPFLAGS = -DNDEBUG -DgFortran CFLAGS = -OFC = gfortranFFLAGS = -O -wCXX = g++
I/O API 32-bit	BIN = Linux2_x86ifort	BIN = Linux2_x86pg_pgcc_nomp	N/A
I/O API 64-bit	BIN = Linux2_x86_64ifort	BIN = Linux2_x86_64pg_pgcc_nomp	BIN = Linux2_x86_64gfort

5.2.3.1 CMAQ 配置脚本

配置变量的一致性对于构建 CMAQ 是至关重要的，而不仅仅是它的库。相应地，CMAQ 包括配置脚本 config_cmaq.csh，这个脚本有助于保证与 CMAQ 相关环境变量设置的一致性。表格 5-4 列出了 config_cmaq 及其关联库的环境变量设置，为构建运行脚本，建议设置这些变量的值。

对于多处理器应用程序，建议为 Fortran 编译器（myFC）配置 Fortran MPI 并行脚本 mpif90。使用这个脚本，代替了 Fortran 直接编译器，将会确保并行程序编译过程中可包括完整的 MPI 组件（库和相关文件）。

表 5-4 config_cmaq.csh 配置变量

变量名	变量说明
CMAQ_HOME	CMAQ 安装的核心目录。在 /home/user/CMAQ 路径下安装 CMAQ，环境

变量名	变量说明
	变量设置为 export CMAQ_HOME=/home/user/CMAQ。CMAQv5.2 版本前这个变量的名称是 M3HOME。
CMAQ_DATA	通过 csh 脚本自动设置。CMAQv5.2 版本前这个变量的名称是 M3DATA。
CMAQ_LIB	通过 csh 脚本自动设置。CMAQv5.2 版本前这个变量的名称是 M3LIB。
M3MODEL	通过 csh 脚本自动设置。CMAQv5.2 版本已删除该变量。
compiler	可以选用 Intel、pgi、gcc 编译 CMAQ。
compilerVrsn	编译 CMAQ 的 Fortran 编译器版本号，采用该变量则安装目录及可执行程序名称会加上此版本号。（可选）
IOAPI_MOD_DIR	指定 I/O API 模块的安装位置。
IOAPI_INCL_DIR	指定 I/O API include 文件的位置。
IOAPI_LIB_DIR	指定 I/O API 库文件的位置。
NETCDF_LIB_DIR	指定 NetCDF 库文件的位置。
MPI_LIB_DIR	指定 MPI 库文件的位置。
netcdf_lib	NetCDF 库名称。4.2.0 版本设置“-lnetcdf”，4.2.0 以后版本设置“-lnetcdf -lnetcdf”。
ioapi_lib	I/O API 库的名称。设置“-lioapi”。
pnetcdf_lib	并行 netCDF 库名称。设置“-lpnetcdf”。
mpi_lib	MPI 库的名称。对于 MVAPICH 设置“-lmpich”，对于 OpenMPI 设置“-lmpi”。
myFC	设置编译 NetCDF 的 Fortran 编译器。
myCC	设置编译 NetCDF 的 C 编译器。
myFFLAGS	Fortran 固定格式编译器的优化标志。
myCFLAGS	C 编译器的优化标志。
myFRFLAGS	Fortran 自由格式编译器的优化标志。
MPI_INC	控制 MPI 库 INCLUDE 文件路径。例如 \$M3LIB/mpich/include
extra_lib	设置编译其他库。用户可以很便捷的修改这个设置。
EXEC_ID	建立命令，决定 config_cmaq.csh 是否自

变量名	变量说明
	动进行设置。

5.2.4 安装 CMAQ

根据以下步骤在 Linux 系统进行 CMAQ 安装（例如使用 C-shell 环境，小红帽系统和 Portland Group Fortran 编译器）。Windows 和 MacOSX 系统不可以安装 CMAQ。

5.2.4.1 获取 CMAQ 安装包

CMAQ 安装包可以使用 git 或者从 GitHub 存储库中下载。以下是两种方式的介绍。

5.2.4.1.1 Git 安装

你可以使用以下命令复制 EPA 官方 GitHub 存储库 CMAQv5.2 的安装包，进行 CMAQ 的安装：

```
git clone -b 5.2 https://github.com/USEPA/CMAQ_CMAQ_REPO
```

5.2.4.1.2 Zip 文件安装

CMAQ 安装包 Zip 文件可以在公共 GitHub 存储库获取。在 <https://github.com/USEPA/CMAQ/tree/5.2> 点击“Clone or download”，选择“Download ZIP”，下载 CMAQv5.2。用户也可以在 EPA CMAQ 网站上下载 zip 文件。

在 CMAS 中心可以获取测试软件是否安装成功的参考输入/输出数据。数据无法通过 GitHub 获取，需注册/登录才能访问 CMAS 中心的源代码和数据。

在你想安装 CMAQ 的目录下，解压 CMAQ 安装包压缩文件：

```
unzip CMAQ-5.2.zip
```

接着将会产生以下文件：

CMAQ-5.2/CCTM

CMAQ-5.2/PREP

CMAQ-5.2/POST

CMAQ-5.2/UTIL

CMAQ-5.2/DOCS

Git 和 zip 文件安装选项在不同的子目录中生成。基础安装目录是 CMAQ_REPO；zip 文件的安装目录是 CMAQ-5.2。本手册后续说明将基于 git 克隆安装。对于 Zip 文件安装，将会使用 CMAQ-v5.2 替换 CMAQ_REPO。不同目录名强调了不同函数。克隆存储库可以让用户访问完整的存储库，然而下载 zip 文件只可以获取 5.2 版本。

使用 git 克隆选项，CMAQ 将会在以下目录进行安装：

CMAQ_REPO/CCTM

CMAQ_REPO/PREP

CMAQ_REPO/POST

CMAQ_REPO/UTIL

CMAQ_REPO/DOCS

5.2.4.2 在存储库外的用户指定目录安装和运行

在 CMAQ_REPO 顶层目录，bldit_project.csh 脚本将会自动复制 CMAQ 文件夹结构，并将每个构建和运行脚本从存储库中复制出来，从而用户可以随意修改他们，而不需要版本控制。

在 bldit_project.csh 脚本中，修改环境变量 \$CMAQ_HOME，指定 CMAQ 安装路径。例如：

```
set CMAQ_HOME = /home/username/CMAQ_v5.2
```

然后执行脚本。

```
./bldit_project.csh
```

5.2.4.3 安装 CMAQ 库

CMAQ 安装脚本需要以下库文件和 include 文件链接到 CMAQ_LIB 目录中。（CMAQ_LIB 可以通过 config_cmaq.csh 脚本自动设置，环境变量设置为 CMAQ_LIB = \$CMAQ_HOME/lib）：

- netCDF 库文件放在 \$CMAQ_LIB/netcdf/lib 目录下。
- I/O API 库文件放在 \$CMAQ_LIB/ioapi 目录下。
- MPI 库和 INCLUDE 文件放在 \$CMAQ_LIB/mpi 目录下。

config_cmaq.csh 脚本会在 CMAQ_LIB 目录中自动链接需要的库。通过以下 config_cmaq.csh 环境变量，设置 netCDF、I/O API 和 MPI 安装位置：

setenv IOAPI_MOD_DIR: I/O API 模块文件位置。

setenv IOAPI_INCL_DIR: I/O API include 文件位置。

setenv IOAPI_LIB_DIR: 编译 I/O API 库的位置。

setenv NETCDF_LIB_DIR: netCDF 安装位置。

setenv MPI_LIB_DIR: MPI (OpenMPI 或者 MVAPICH) 的位置。

例如, 如果 netCDF 库安装在 /usr/local/netcdf/lib 路径下, 需要设置 NETCDF 环境变量 /usr/local/netcdf/lib。同理, 如果你的 I/O API 库安装在 /home/cmaq/ioapi/Linux2_x86_64ifort, 需要设置 IOAPI_LIB 环境变量为 /home/cmaq/ioapi/Linux2_x86_64ifort。

1. 使用 ioapi_lib 和 netcdf_lib 检查 I/O API 和 netCDF 库。

2. 使用 mpi 检查 MPI 库。MVAPICH 使用 -lmpich, openMPI 使用 -lmpi。

用户运行任何构建或运行脚本时, 将自动创建到这些库的链接。如果手动创建这些库, 需要执行 config_cmaq.csh 脚本, 确认编译器 [intel | gcc | pgi]:

```
source config_cmaq.csh [compiler]
```

如果用户希望在构建目录和可执行文件名中标识编译器的版本, 可以选择标识编译器版本。例如, 执行 source config_cmaq.csh intel 17.0

当你 source config_cmaq.csh 时, CMAQ 目录下所有需要的库将被安装到工作目录下。如果遇到关于找不到库的错误, 需要检查 config_cmaq.csh 中脚本变量 (如 IOAPI、NETCDF、MPI) 的设置, 以确保它们正确指向 Linux 系统上这些库所在的位置。

5.2.4.4 安装 CMAQ 参考/基准输入数据

从 CMAS 软件中心下载 CMAQ 单日参考数据, 并复制到 \$CMAQ_DATA。然后前往 \$CMAQ_DATA 目录, 解压单日基准输入和输出文件:

```
cd $CMAQ_DATA
```

```
tar xvzf CMAQv5.2_Benchmark_SingleDay_Input.tar.gz
```

```
tar xvzf CMAQv5.2_Benchmark_SingleDay_Output.tar.gz
```

使用以上命令行, 会产生以下子目录:

```
CMAQ_REPO/data/SE52BENCH/single_day/cctm_input
```

```
emis/
```

icbc/
land/
lightning/
met/

5.2.4.5 编译 CMAQ

对于所有的 CMAQ 程序（除了 MCIP），使用 Bldmake 将源代码编译为可执行程序。编译 CMAQ 的第一步是编译 Bldmake，然后使用 Bldmake 来编译 CMAQ 程序。注意，编译器路径和标志全部在 config_cmaq.csh 脚本中进行设置，然后传递到构建脚本。CMAQ 的构建脚本不包含编译器设置，每个构建脚本都引用 config_cmaq.csh，采用“source”命令构建脚本。关于 config_cmaq.csh 脚本中编译标志的说明，参见表 5-4。

每个构建和运行脚本都引用 config_cmaq.csh 配置脚本，以确保与计算环境条件一致。当执行每个脚本时，用户需要指定在 config_cmaq.csh 配置文件中记录的编译器名称和版本。

除 CCTM 之外，CMAQ 的所有程序都是在单处理器模式下运行的。CCTM 可以在单处理器模式下串行运行，也可以在多个处理器上并行运行。以下提供了程序特定编译指令。这些编译指令可以构建的模拟 CMAQ 发布的测试数据集的可执行文件。有关各种 CMAQ 程序的配置选项的附加信息，在第四章和第七章进行介绍。

5.2.4.5.1 Bldmake 编译

在 CMAQv5.2 中，当你第一次运行任何 CMAQ 构建脚本时，都会自动编译 bldmake。如果用户希望单独运行脚本，bldmake 的构建脚本位于 \$CMAQ_REPO/UTIL/bldmake/scripts。

5.2.4.5.2 CMAQ 程序编译

创建 ICON、BCON、MCIP、CCTM 的可执行程序。

ICON 和 BCON 可为不同的化学机制和输入数据进行配置。ICON 和 BCON 的配置选项将在第七章进行详细介绍。

使用以下命令编译 ICON 和 BCON：

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/icon  
bldit_icon.csh [compiler] [version] |& tee build_icon.log  
cd $CMAQ_HOME/PREP/bcon  
bldit_bcon.csh [compiler] [version] |& tee build.bcon.log  
where,
```

[compiler] can be either intel, pgi, or gcc

[version] is the version number of the compiler, e.g. 4.8.1

如 Bldmake 程序，MCIP 可以使用 Fortran 进行编译。

使用以下命令编译 MCIP：

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/mcip/src  
source ../.././config_cmaq.csh  
make |& tee make.mcip.log
```

CCTM 有多个配置选项，可以根据不同的应用程序更改这些选项以优化模型性能。除了选择化学机制来模拟气相化学之外，用户还可以选择不同的科学模块。CCTM 的科学配置选项将在第四章和第七章进行详细介绍。通过配置并行 CCTM 脚本，可以创建多处理器执行程序，用于测试安装是否成功。对于多处理器应用程序，CMAQ 使用 MPI 解决在多处理器集群计算环境中的处理器间通信问题。MPI 的路径和库文件都在 config_cmaq.csh 文件中进行指定。

对于单处理器系统，通过激活 CCTM 脚本 “ParOpt” 变量，配置 CCTM 脚本可以创建单处理器可执行程序。

使用以下命令编译 CCTM：

```
cd $CMAQ_HOME/CCTM/scripts  
bldit_cctm.csh [compiler] [version] |& tee build_cctm.log
```

测试模拟也不需要 CHEMMECH 和 CALMAP 程序，但是可以使用 Makefile 文件编译。

5.2.5 CMAQ 测试模拟运行

成功编译各种 CMAQ 程序后，使用分布式运行脚本可以生成 CCTM 输入文件，然后运行 CCTM 模拟 CMAQ 基准案例。CCTM 必须在最后一步运行；MCIP 必须在第一步运行。然而，CMAQ 可用的气象数据是与 CMAQ 测试案例一起发

布的,这意味着实际上不需要运行 MCIP 测试模式安装。除了 MCIP,其他 CMAQ 程序间无依赖关系,所以它们可以以任何顺序运行为 CCTM 创建输入数据。

要为各种 CMAQ 程序运行测试模拟,需将目录更改为每个程序的所在位置,并执行运行脚本。

运行 ICON 可以生成初始条件:

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/icon  
./run_icon.csh |& tee run_icon.log
```

运行 BCON 可以生成边界条件:

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/bcon  
./run_bcon.csh |& tee run_bcon.log
```

检查 ICON 和 BCON 的日志文件,以确保程序运行成功。默认情况下,CCTM 被配置在多处理器模式下运行。这种模式需要设置运行时间、处理器个数、MPI 初始化命令的位置。通过 MPI 域分解所设置的行 (NPROW) 列 (NPCOL) 数,确定模拟所需的处理器个数。行列数是确定 CCTM 运行所需处理器个数的依据。例如,如果用户有一个可以运行 CMAQ 的 6 个处理器的系统,设置 3 行 2 列;处理器总个数 (NPROCS) 是可以通过脚本自行设定的。

对于 6 个处理器的 MPI 配置:

```
@ NPCOL = 3; @ NPROW = 2
```

大多数集群多处理器系统需要启动 MPI 运行环境。默认的 CCTM 运行脚本使用了 mpirun 命令。了解在运行多处理器应用程序时如何调用 MPI,可咨询系统管理员。对于单处理器计算,需设置 NPROCS 为 1,行列数均为 1。

对于单处理器计算,设置 NPCOL_NPROW 为 “1 1”:

```
setenv NPCOL_NPROW "1 1"
```

MPI 配置完成以后,使用以下命令运行 CCTM。根据上面的说明,不同的 Linux 系统拥有不同的提交 MPI 作业的要求。下面的命令是如何提交 CCTM 运行脚本的一个例子,可能不同的 Linux 系统,MPI 设置也不同。

```
./run_cctm.csh |& tee cctm.log
```

5.2.6 基准测试

基准测试用于确认一台全新计算机系统模型源代码编译和执行是否成功。CMAQ 在用于科学研究和法规应用之前，应首先进行基准测试。基准测试的目的是确保本地系统参数（如编译器、处理器或操作系统）不会引入不一致的解决方案。虽然不同的操作系统、硬件和编译器产生的 CMAQ 结果可能存在差异，但这些差异应该很小，并且在模型的数值误差范围内。输入和输出参考数据与 CMAQ 打包在一起，可用于在新系统对模型的基准测试。在运行与源代码打包的测试用例后，将结果与 CMAQ 发行版提供的基准数据进行对比。

5.2.6.1 CMAQ 基准参数

CMAQ 基准测试用例是 2011 年 7 月 1 日在美国东南部水平分辨率为 12 公里 100 列×80 行×35 层上进行的一天模拟。基准测试案例的 CCTM 配置参数如下：

- 多处理器并行计算
- 水平平流：Yamo
- 垂直平流：WRF
- 水平扩散：多尺度
- 垂直扩散：ACM2
- 沉降：M3Dry
- 化学求解器：EBI
- 气溶胶模块：AERO6
- 云模块：ACM_AE6
- 化学机制：cb6r3_ae6_aq
- 每小时雷击数据计算出的闪电氮氧化物排放量
- 动态垂直扩散系数
- 在线沉降速率
- 地面亚硝酸相互作用
- 在线生物排放
- 在线烟羽抬升
- 在线风尘排放
- 双向氨通量

- 无平流-对流层臭氧交换

用于生成基准参考数据的系统配置参数包括： - Red Hat Enterprise Linux Server release 5.11 (Tikanga) - Linux Kernel 2.6.18-238.12.1.el5 x86_64 - Intel v15.0 compiler, 8 processors with OpenMPI。

5.2.6.2 CMAQ 基准模拟结果

完成 CMAQ 基准案例后，可将 CCTM 的输出文件与 CMAQ 发行版中的基准数据集进行比较。基准数据可从 CMAS 软件中心获取。通过差异块图、网格单元统计（最小/最大差异）和域范围的统计数据与模拟的结果进行比较。第 12 章将介绍比较两种数据的分析工具。

对于每种模型物种，模拟数据与基准数据之前的区域范围差异以及每个模拟时间步长（每小时）小于 1%，表明在该 Linux 系统上的软件基准测试是成功的。虽然较大的差异可能表明安装存在问题，但它们也可能标准基准模拟中的配置差异。查看编译的配置选项和 CCTM 配置选项，可用于分析和解决与基准数据间的差异。

CMAQ 技术支持可从 CMAS 中心获取（详见第 13 章）。

第六章 必需库

CMAQ 需要一些第三方库，必须在用户系统上安装这些库，然后才能编译和运行 CMAQ。这些库通过 CMAQ 控制数据流，通过 CMAQ 输入和输出文件使用的二进制文件格式，控制了在多处理器计算环境下运行 CMAQ。CMAQ 所有应用均需要输入/输出应用程序编程接口(I/O API)和网络通用数据表(netCDF)。消息传递接口(MPI)只有在 CCTM 并行时才会应用。这三个库将会在本章进行介绍。对于每个库如何编译和配置等其他介绍，请参考每个库的相关文档。

6.1 输入/输出应用程序编程接口 (I/O API)

第三代空气质量模型输入/输出应用程序编程接口 (I/O API) 是一个环境软件开发库,它可以提供 CMAQ 相关应用数据接口(Coats, 2005)。I/O API 是 CMAQ 程序输入/输出的核心框架,提供了源代码模块和读写数据文件之间传递信息的子程序。用户应下载最新 I/O API 的代码。I/O API 除了可以提供输入/输出框架外,还构成了 CMAQ 程序所使用的二进制文件格式的一部分。从 CMAQ5.0 版本开始,需要 I/O API3.1 或更新的版本进行编译和运行 CMAQ。

CMAQ 输入和输出文件采用了 netCDF- I/O API 混合文件格式。NetCDF 介绍如下。CMAQ 数据文件都采用了自描述的 netCDF 约定,选择性直接访问,这意味着模型系统可以更有效的只读取数据文件的必要部分。此外,netCDF 文件可跨计算平台移植。这意味着可以在 Sun 工作站、Red Hat Linux 工作站和 Mac OSX 上读取相同的文件。I/O API 文件格式组件是在 CMAQ 数据文件中定义空间信息的方式。定义水平网格的 I/O API 约定是结合使用地图投影和从投影中心到建模区域西南角的偏移量。在定义了区域西南角或与投影中心的偏移量之后,I/O API 网格定义指定了水平网格单元格的大小以及在 X 和 Y 方向上的单元格数量。I/O API 的另一个优点是可使用一组可扩展的数据操作实用程序来评估和后处理 CMAQ 二进制输入/输出数据文件。

对于使用预配置的模型应用程序的 CMAQ 用户,I/O API 系统基本上可以是透明的。对于计划为了研究目的而修改代码和实现更新模块的用户,应该了解 I/O API 的几个关键元素,它们将会在接下来的章节进行介绍。本节仅涵盖 CMAQ

用户必须清楚的几个基本点。对于 I/O API 代码库开发的新模块的一些信息，请参考 I/O API 用户手册。

6.1.1 文件、逻辑名称和物理名称

I/O API 使用文件和虚拟文件存储和检索数据，这些文件包含（可选的）多个变量、多个层次、多个时间步长。文件是内部格式化的，因此可使它们独立于计算机和网络的。这不同于 Fortran 文件，Fortran 文件的内部格式是特定于平台的，换句话说，文件不能很好地使用文件传输协议 FTP 或者网络文件系统 NFS 进行传输。每个 I/O API 文件都有一个内部描述，由文件类型、格点数、坐标描述和一组文件变量（名称、单元规格和文本描述）组成。根据 I/O API 的格式，文件和变量通过名称使用，层数通过数字使用（从 1 到顶层），日期和时间分别以整型编码格式 YYYYDDD（通常称为“JDATE”）和 HHMMSS（通常称为“JTIME”）存储。

$$\text{YYYYDAY} = (1000 * \text{Year}) + \text{Julian Day}$$

$$\text{HHMMSS} = (10000 * \text{Hour}) + (100 * \text{Minute}) + \text{Seconds}$$

I/O API 利用了逻辑文件名的概念，而不是强迫程序员和程序用户处理硬编码文件名和硬编码单元号。模型开发者可以将逻辑名定义为程序的属性，然后在运行时，可以通过环境变量将逻辑名称链接到实际文件名。处于编程的目的，唯一的限制是文件名不可以包含空格，并且最多 16 个字符。当模型开发者使用 I/O API 运行程序时，在环境变量中必须设置程序逻辑文件名的值。第 7 章将会介绍 CMAQ 如何使用 I/O API 环境变量。本节剩余部分将介绍应用 I/O API 数据文件环境下，程序设计的一些基本细节。

6.1.2 I/O API 数据结构和数据文件类型

每个 CMAQ 数据文件都有内部文件描述，包含文件类型、文件起始日期和时间、文件时间步长、格点数、坐标描述以及其他变量说明。文件说明中的某些要素均可以通过 I/O API 进行自动维护，例如文件创建和更新的日期时间、创建文件的程序名称。其他描述信息必须在创建文件时提供。

所有由 I/O API 控制的文件都可能有多变量和层次。每个文件都有时间步长结构，这种结构可以让其所有变量共享。有三种时间步长结构可供支持（表 6-1）。文件中所有变量都是拥有相同维度、层数、数据结构类型的数据数组，即

使数据间可能是不同的数据类型。数据结构类型如表 6-2 所示。GRDDED3 和 BNDARY3 是 CMAQ 模拟常用文件类型。幻数是与文件类型相关联的标志。

表 6-1. I/O API 文件时间步长结构示例

文件类型	文件说明
Time-independent	文件时间步长为 0。通常使用 time-independent 文件，会忽略日期和时间参数。
Time-stepped	该文件拥有起始日期、起始时间和正时间步长。读写请求必须是在起始时间的正整数倍时间进行。
Circular-buffer	该文件类型只有两部分“记录”，“偶数”部分和“奇数”部分（例如，对于“重启”文件，只有最后一部分数据是可用的）。文件说明有起始日期、起始时间和负时间步长（设置为实际时间步长的负数）。读写请求必须是在起始时间的正整数倍时间进行，必须反映文件中的特定时间点。

表 6-2. I/O API 数据文件类型

文件类型	幻数	数据类型	说明
CUSTOM3	-1	Custom	系统可自行读写的 REAL4 数组。
DCTNRY3	0	Dictionary	数据类型存储和检索，FDESC.EXT 文件说明的一部分。
GRDDED3	1	Gridded	REAL4 数组维数（NCOLS, NROWS, NLAYS, NVARs）。
BNDARY3	2	Boundary	REAL4 数组维数（SIZE, NLAYS, NVARs）
IDDATA3	3	ID-reference	存储数据列表，例如污染监测数据。
PROFIL3	4	Vertical profile	存储垂直层数据，例如探空数据。
GRNEST3	5	Nested grid	尝试存储多格点数据，这些格点与其他相同坐标系统无任何关系。
SMATRX3	6	Sparse matrix	分散矩阵数据，这种数据使用“天际线转置”进行表示，例如在 SMOKE 中的数据。
KFEVNT3	-3	Cloud event	KF-Cloud 文件与 FDESC3.EXT 文件使用了相同的数据文件结构说明，与 PARMS3.EXT 文件使用了相同的定义参数方法；通常 I/O API DESC3 文件可以从头文件中检索文件说明。另一方面，KF-Cloud 文件拥有自己特殊的打开/创建、查找/索引、输入和输出方式。
TSRIES3	7	Hydrology Time Series	水文时间序列文件是一种格点文件，除了行列数通常都设为 1，其他文件信息都可在 INCLUDE 文件 ATDSC3.EXT 中查看。

文件类型	幻数	数据类型	说明
PTRFLY3	8	Pointer-flyer	pointer-flyer 观测文件是一种格点文件，NCOLS3D 和 NROWS3D 都设为 1，常规变量和变量名通过分析与可视化软件进行使用。

6.1.3 I/O API 数据文件打开与创建

I/O API OPEN3 函数用于打开新创建和已存在文件。OPEN3 是 Fortran 逻辑函数，运行成功返回 TRUE 值，运行失败返回 FALSE 值。

LOGICAL FUNCTION OPEN3(FNAME, FSTATUS, PGNAME)

where:

FNAME (CHARACTER) = file name for query

FSTATUS (INTEGER) = 详见表格 6-3 查看选项

PGNAME (CHARACTER) = 调用程序名称

OPEN3 在头文件中保留了大量标识信息，该文件也可自动进行日志记录操作。OPEN3 的输入参数是文件名，可用于日志记录和文件标识，该文件的整型标识 FSTATUS 可显示打开文件的操作类型。OPEN3 对于相同文件可多次被调用。FSTATUS 值在 PARMS3.EXT 进行定义，请详见表格 6-3。

表 6-3. OPEN(3) FSTATUS 值

FSTATUS	值	说明
FSREAD3	1	用于已存在文件的只读操作。
FSRDWR3	2	用于已存在文件的读、写和更新操作。
FSNEW3	3	用于新创建文件的读、写操作。文件必须是新创建文件。
FSUNKN3	4	用于未知文件的读、写和更新操作。
FSCREA3	5	用于文件的创建、截取、读、写操作。

在“new”、“unknown”和“create/truncate”个例中，程序开发人员在 INCLUDE 文件 FDESC3.EXT 进行了文件说明，并且定义了文件结构，命名为 OPEN3。如果文件不存在这些个例中，OPEN3 将会使用用户设定的信息创建新文件，并且将新文件定义为可读写文件。在“unknown”个例中，如果文件已经存在，OPEN3 将会在提供的文件说明和头文件中找到的文件说明间执行一致性检查，如果二者一致，返回 TRUE 值。

以下是一个如何使用 OPEN3 函数的例子(来自于 CMAQ INITSCEN 子程序)。该程序段检验了 CCTM 浓度 (CTM_CONC_1) 文件是否创建, 如果创建, 将会以读-写-更新方式打开。如果 CCTM CONC 文件没有创建, 将会有有一个警告信息提示。

```
IF ( .NOT. OPEN3( CTM_CONC_1, FSRDWR3, PNAME ) ) THEN
MSG = 'Could not open ' // CTM_CONC_1 // ' file for update - '
& // 'try to open new'
CALL M3MESG( MSG )
END IF
```

通过 DESC3 可获取文件说明文档 (例如 I/O API 文件类型、维数、起始日期和时间等等)。DESC3 是一种 I/O API Fortran 逻辑函数。当 DESC3 被调用, 完整的文件说明文档将会在标准文件数据结构说明目录 FDESC3.EXT 中放置。请注意, 在调用 DESC3 之前, 文件必须已打开。一个 DESC3 典型 Fortran 程序如下:

```
IF ( .NOT. DESC3( ' myfile' ) ) THEN
!... error message
ELSE
!... DESC3 commons now contain the file description
END IF
```

6.1.4 读取 I/O API 数据文件

有四个模块可从文件中读取或检索数据: READ3, XTRACT3, INTERP3 和 DDTVAR3。四个模块都是逻辑函数, 当运行成功, 都会返回 TRUE 值, 运行失败, 都会返回 FALSE 值。表 6-4 对四个模块进行了解释。

表 6-4. I/O API 数据检索模块

模块	说明
READ3	从文件读取选定日期和时间的一个或全部层和变量。
XTRACT3	读取选定日期和时间子网格的一个或全部变量。
INTERP3	将分析变量从文件插值到分析日期/时间。
DDTVAR3	计算选定日期/时间的分析变量时间导数。

因为 INTERP3 为用户优化了插值程序, 所以 INTERP3 可能是这些模块最有效的工具。以下是一个使用 INTERP3 读取/插值 HNO3 变量的例子:

```
CHARACTER*16 FNAME, VNAME
REAL*4 ARRAY( NCOLS, NROWS, NLAYS )
...
IF (                               .NOT.
INTERP3('myfile','HNO3',1995035,123000,NCOLS*NROWS*NLAYS,ARRAY))
THEN
... (some kind of error happened--deal with it here)
END IF
```

在 READ3 和 XTRACT3 中, 用户可以使用“幻数” ALLVAR3 (=‘ALL’, 在 PARMS3.EXT 文件中进行定义) 或 ALLAYS3 (=1, 也在 PARMS3.EXT 文件中进行定义) 作为变量名或层数读取文件中所有变量及层数。对于独立时间文件, 日期和时间参数将被忽略。

6.1.5 写入 I/O API 数据文件

CMAQ 模块开发人员使用逻辑函数 WRITE3 将数据写入文件。对于格点、边界和定制文件, 代码不是一个时间点一个变量的写入, 就是一个时间点完整数据写入(“幻数” ALLVAR3 可作为变量名)。对于 ID、配置文件和网格嵌套文件, 代码必须一个时间点完整写入。

```
LOGICAL FUNCTION WRITE3( FNAME, VNAME, JDATE, JTIME,
BUFFER)
```

where:

FNAME (CHARACTER) = 查询文件名

VNAME (CHARACTER) = 变量名(or ALLVAR3 (=‘ALL’))

JDATE (INTEGER) = 日期, 格式 YYYYDDD

JTIME (INTEGER) = 时间, 格式 HHMMSS

BUFFER(*) = 保存输出数据的数组

WRITE3 通常以 VNAME 变量名、JDATE 日期和 JTIME 时间向逻辑名为 FNAME 的 I/O API 数据格式文件写入数据。对于时间独立文件, JDATE 和 JTIME

可忽略。如果 VNAME 是“幻数” ALLVAR3，WRITE3 可写入全部变量。如果 FNAME 是字典文件，WRITE3 会将 VNAME 当作字典变量（忽略 JDATE 和 JTIME）。WRITE3 可以在选定日期和时间写入数据，例子如下：

```
REAL*4 ARRAY( NCOLS, NROWS, NLAYS, NVAR )  
  
!...  
  
IF ( .NOT. WRITE3( 'myfile', 'HNO3', JDATE, JTIME, ARRAY ) ) THEN  
  
!...(some kind of error happened--deal with it here)  
  
END IF  
  
IF ( .NOT. WRITE3( 'afile', 'ALL', JDATE, JTIME, ARRAYB ) ) THEN  
  
!...(some kind of error happened--deal with it here)  
  
END IF
```

6.1.6 与 CMAQ 相关的 I/O API 实用程序

CMAQ 系统数据文件通过 I/O API 实用程序可易于操作。I/O API 实用程序（也称为 m3tools）是 netCDF-I/O API 格式文件的一套操作与分析脚本程序。表 6-5 介绍了常用模块。I/O API 说明文档将会详细介绍如何使用这些实用程序。

表 6-5. I/O API 数据检索模块

实用程序	说明
M3XTRACT	在指定时间间隔内从文件中提取变量子集。
M3DIFF	统计分析变量。
M3STAT	统计分析文件变量。
BCWNDW	建立格点文件的子网格边界条件文件。
M3EDHDR	编辑头文件描述参数。
M3TPROC	计算时间段内总量并将其写入输出文件。
M3TSHIFT	从文件中复制或者更替数据。
M3WNDW	数据从格点文件到子网格文件。
M3FAKE	根据用户规范构建一个用虚拟数据填充的文件。
VERTOT	计算文件中变量的垂直层数。
UTMTOOL	lat/lon、Lambert 和 UTM 坐标的坐标转换和网格计算。

6.2 网络通用数据表（netCDF）

网络通用数据表（netCDF）是一组软件库和独立于机器的数据格式，它可以支持面向数组的科学数据的创建、访问和共享。NetCDF 库实现了不同程序语

言之间的通用接口。NetCDF 在 CMAQ 中用于定义二进制输入和输出文件的数据格式结构。CMAQ 输入输出文件是自描述的 netCDF 格式文件，其中文件头包含定义数据所需的所有维度和描述性信息。用户可从 NetCDF 网站下载 NetCDF 最新安装包。通过 NetCDF 的编译和配置信息可以通过 Unidata 网站获得。

6.3 消息传递接口（MPI）

消息传递接口（MPI）是用于在大规模并行计算硬件和工作组集群上进行消息传递或软件内通信的标准库规范。有不同的开源 MPI 库都可用于 CMAQ。

- MVAPICH2 是俄亥俄州立大学提供的一种 MPI 可移植程序。

- OpenMPI 是一个由学术、研究和行业合作伙伴组成的联盟开发和维护的开源 MPI 程序。

6.4 参考文献

Coats, C., 2005: The EDSS/Models-3 I/O API. Available online at the I/O API website Unidata, 2009: NetCDF. Available online at NetCDF website

第七章 CMAQ 程序和所需库

7.1 概述

执行基本空气质量模拟的 CMAQ 核心程序是 MCIP、ICON、BCON 和 CCTM。这些程序的相互联系在图 7-1 绿色框内进行介绍。蓝色框内容不属于 CMAQ 分包的一部分，但提供空气质量模拟所需的气象和排放数据。黄色框内容是 CMAQ 标准前处理系统：MCIP、ICON 和 BCON。红色框则是 CMAQ 化学传输模块（CCTM），CMAQ 欧拉空气质量模型组件。箭头方向代表数据流。红色箭头说明从 CMAQ 前处理系统和排放模型到 CCTM 的数据流。绿色箭头展示了 CCTM 创建的初始和边界条件，用于嵌套模拟。黑色箭头代表气象模型和 MCIP 之间的联系。蓝色箭头说明了驱动排放模型的 MCIP 输出文件。

气象模型，例如 WRFARW，输出数据可作为 CMAQ 和排放模型的初始格点气象场。这些气象数据可使用 MCIP 输入到 CMAQ 中。

排放模型可将排放清单转换为逐时的网格化排放文件。SMOKE 排放模型输出的排放数据适用于 CMAQ。

CMAQ 的一些“在线”选项，将气象和化学过程进行耦合，有助于空气质量模型建模（详见第四章）。用户可在 CCTM 模拟期间合并光解速率计算和排放处理。在 CCTM 模拟中直接合并这些过程有几个优点：

1. 光解速率计算使用来自 CCTM 模拟的气溶胶浓度场和气象场，模拟输入排放和产生的空气质量在光化学上的反馈。

2. 排放与气象场在化学时间步长同步，而不是在每个模拟小时内进行线性时间插值。

3. 可以节省磁盘空间，对于高架点源不再需要三维排放文件。

4. CMAQ 可以更容易地与气象模型耦合，通过新计算的气象变量直接调整排放。



ICON 可以创建 CCTM 的二进制 **netCDF** 初始条件。用户可以选择从垂直浓度场文件或现有的 CCEM 输出文件，创建初始条件数据。ICON 可为指定建模网格和化学机制创建初始条件。

BCON 可以创建 CCTM 的二进制 **netCDF** 边界条件。用户可以选择从垂直浓度文件、现有的 CCTM 或更大尺度的（如全球规模）的输出文件，创建边界条件。BCON 可为指定建模网格和化学机制创建边界条件。如果使用 CCTM 和大尺度输出文件，BCON 会产生时空变化的动态边界条件。如果使用垂直浓度场文件，BCON 会产生静态边界条件。

CCTM 是 CMAQ 最后一个需要运行的核心程序。CMAQ 的其他所有程序的运行，都为 CCTM 运行做准备。通过同步模拟时间段、模型网格、垂直层配置和化学参数，CCTM 可以输出污染浓度预测值、干湿沉降率及能见度值。

除了图 7-1 展示的核心程序外，CMAQ 模块程序还包括实用和后处理程序，用于利用 CMAQ 中的其他技术和诊断特性。CMAQ 实用程序有 CHEMMECH

CSV2NML、CREATE_EBI、INLINE_PHOT_PREPROC 和 JPROC，这些程序可以改进或处理 CMAQ 中的新化学机制。CMAQ 前处理程序 CALMAP 可以创建作物日历地图，用于估计风尘排放。CMAQ 后处理程序将在 CMAQv5.2 手册中进行介绍，用于 CMAQ 输出数据分析。

本章详细描述了 CMAQ 程序和实用程序。关于 CMAQ 所使用的第三方库程序，例如 I/O API、netCDF 和 MPI 在第六章介绍。第六章还介绍了各程序的输入输出文件和不同的 I/O API 文件格式。

7.2 BCON

7.2.1 说明

BCON 向 CCTM 提供横向化学边界条件 (BCs)，BCON 输入文件可以是 ASCII 垂直剖面文件，或是 CCTM 输出浓度文件 (CONC)。BCs 在时空上可以是静态的（即在所有边界网格单元中具有均匀的浓度时不变的），也可以是动态的，亦或者是静态和动态的结合。ASCII 垂直剖面文件主要用于创建静态边界条件，CONC 文件可以创建动态边界条件。动态边界条件可以从相同的水平网格间距（用于窗口区域模拟），或高分辨率模型网格（用于嵌套模拟），或从大尺度传输模拟插值（类似于定义 WRF ARW 的侧边界条件）提取。

BCON 有两种不同的运行模式，使用的模式取决于输入数据的性质。创建 BCON 执行程序时，用户必须说明是以 ASCII 垂直剖面文件还是以 CONC 文件作为输入数据，分别以 “profile” 和 “m3conc” 作为 ModType 变量设置。这个变量决定在创建 BCON 可执行文件时使用的输入模块。

CCTM 可以通过全球化学模型 (GCMs) 的化学边界条件驱动，例如 GEOS-Chem 和 MOZART。BCON 不支持处理来自 GCMs 的数据。来自 GCMs 的边界条件必须使用 CMAQ 发行包中的没有的自定义代码或脚本进行计算。CAMx 处理器提供了从 GEOS-Chem 和 MOZART 中提取区域模型边界条件的代码。请访问 www.CAMx.com 的支持软件部分下载这些实用程序。

7.2.2 文件，配置和环境变量

表格 7-2 介绍了 BCON 的输入输出文件和配置选项。在编译时调用的选项与在程序执行时调用的选项之间有区别。在编译 BCON 时，用户需要指定一个

化学机制用来创建化学边界条件的气相化学和气溶胶机制。在 BCON 编译脚本中设置的 ModMech 和 Mechanism 变量，使用特定的 INCLUDE 机制文件配置程序，以创建可执行程序。在 BCON 编译脚本中设置的 ModType 变量，可将程序配置为读取静态浓度文本文件或一个依赖时间的二进制 netCDF 浓度文件，用于计算 CCTM 的边界条件。必须为不同的机制和输入文件配置不同的 BCON 可执行文件。

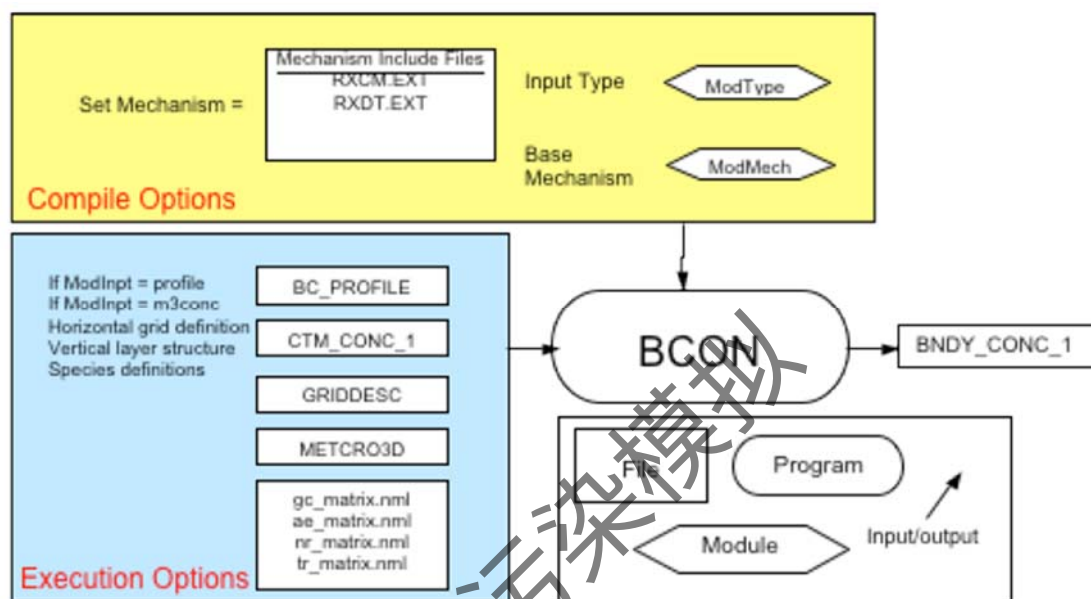


图 7-2 BCON 输入输出文件

BCON 运行时，会将化学环境浓度数据文件转换为预定义模型网格的边界条件。通过在 BCON 运行脚本中指定的 ModType 变量，BCON 可以输入 ASCII 垂直剖面文件 (BC_PROFILE) 或 CCTM 浓度文件 (CTM_CONC_1)；这些选项的选择，取决于用户如何编译模型。用户提供的 BCON 输入文件必须具有与 BCON 可执行文件的一致的化学机制。例如，如果使用 CB05 化学机制编译 BCON 创建边界条件，BCON 输入剖面数据必须采用 CB05 化学机制。CMAQ 程序采用 ASCII 垂直剖面文件时，代表北美大陆以下化学机制的有：cb05e51_ae6_aq，saprc07tb_ae6_aq 和 racm2_aq6_aq。对于其他化学机制的 BCON 输入文件，需要用户自定义。

BCON 的水平网格和垂直层结构在执行时分别通过输入格点描述文件 (GRIDDESC) 和气象交叉点 3D 文件 (MET_CRO_3D) 定义。如果输入垂直层结构和输出垂直层结构不同，BCON 会进行插值。

7.2.2.1 BCON 输入文件

表 7-1. BCON 输入文件

文件名	格式	说明
BC_PROFILE	ASCII	垂直化学剖面文件，由此计算边界条件；该文件由用户创建；当 BCON 环境变量设置为“profile”时使用。
CTM_CONC_1	GRDDED3	CMAQ 浓度文件，由此计算边界条件；该文件由 CCTM 输出；当 BCON 环境变量设置为“m3conc”时使用。
MET_CRO_3D_CRS	GRDDED3	如果垂直网格结构在嵌套模拟时发生变化，则需要创建垂直网格结构的粗网格 MET_CRO_3D 文件的名称和路径；该文件由 MCIP 输出。
MET_CRO_3D_FIN	GRDDED3	如果垂直网格结构在嵌套模拟时变化，则需要创建垂直网格结构的细网格 ME_CRO_3D 文件的名称和路径；该文件由 MCIP 输出。
GRIDDESC	ASCII	用于定义模型网格的水平网格描述文件；该文件由 MCIP 输出或由用户创建。
LAYER_FILE	GRDDED3	用于定义模型网格垂直层结构的三维交叉点气象 METCRO3D 文件；该文件由 MCIP 输出。
gc_matrix.nml	ASCII	用于定义通过边界条件输入到模型中的气相物种的参数文件。
ae_matrix.nml	ASCII	用于定义通过边界条件输入到模型中的气溶胶种类的参数文件。
nr_matrix.nml	ASCII	用于定义通过边界条件输入到模型中的非反应性物种的参数文件。
tr_matrix.nml	ASCII	用于定义通过边界条件输入到模型中的示踪物种的参数文件。

7.2.2.2 BCON 输出文件

表 7-2. BCON 输出文件

文件名	格式	说明
BNDY_CONC_1	BNDARY3	GRID_NAME 定义的模型格点条件输出数据的名称和目录

BCON 输出文件默认存储目录是 \$CMAQ_DATA/bcon，通过运行脚本 OUTDIR 变量指定。默认文件名通常使用 APPL 和 GRID_NAME。对于从 CCTM CONC 文件创建的边界条件，可通过 DATE 环境变量指定文件名日期。BCON 输出文件的所有文件名变量均在运行脚本中进行设置。

7.2.2.3 编译配置变量

以下列出了 BCON 程序编译时的配置选项。当调用这些选项时，它们会创建与指定配置相关联的二进制程序。如果要改变这些选项，用户必须重新编译 BCON。

- CopySrc

取消注释源代码复制到工作目录。如果注释，在工作目录中只会放置编译对象和执行文件。

- MakeFileOnly

取消注释创建编译脚本编译执行程序。注释已创建编译脚本和编译文件。

- ModType: [默认：模块配置文件]

定义 BCON 边界条件输入文件的格式。

- m3conc:输入 CCTM CONC 文件；用于嵌套模拟。
- profile:输入 ASCII 垂直廓线文件。
- tracer:使用示踪参数文件创建示踪物质的边界条件。

- Mechanism:[默认：cb05e51_ae6_aq]

明确创建边界条件的气相物质、气溶胶和液相化学机理。机理变量选项位于 \$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS 目录。例如包括：

- cb6r3_ae6_aq:CB6 修订 3 气相机理，第六代 CMAQ 气溶胶海盐和颗粒物、水云化学机理。

- cb05tucl_ae6_aq:CB05 气相活性氯化学机理，更新甲苯机理，第六代 CMAQ 气溶胶海盐和颗粒物、水云化学机理。

- cb05tump_ae6_aq: CB05 气相活性氯化学机理，更新甲苯、汞和空气毒物机理。第六代 CMAQ 气溶胶海盐和颗粒物、水云化学机理。它是 CMAQv5 混合污染物机理。

- saprc07tb_ae6_aq: SAPRC-07 更新的甲苯气相机理，第六代 CMAQ 气溶胶机理。

- racm2_ae6_aq:RACM2 更新的甲苯气相机理，第六代 CMAQ 气溶胶机理。

- Tracer[默认 trac0]

明确示踪物质。通过明确参数文件，编译 CMAQ 程序文件，激发惰性示踪物质。这个模块的示踪配置在\$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS 目录下进行设置。默认设置不使用任何示踪物质。

- trac[n]

7.2.2.4 执行配置变量

以下环境变量主要用于程序执行，在 BCON 运行脚本中设置。

- APPL[默认: none]BCON 可执行文件标识符。必须与 BCON 创建脚本中的 APPL 变量相匹配。

- CFG[默认: none]BCON 模拟的配置标识符。

- MECH[默认: none]CMAQ 化学机制。必须与 BCON 创建脚本中的机制变量相匹配。

- EXEC: [默认: BCON_\${APPL}_\${EXECID}]用于模拟的可执行文件。变量 CFG 在 BCON 运行脚本中进行设置。变量 EXECID 在 config_cmaq.csh 配置文件中设置。

- GRIDDESC: [默认: \$CMAQ_HOME/scripts/GRIDDESC1]设置水平网格的说明文件。

- GRID_NAME: [默认: CMAQ-BENCHMARK]GRIDDESC 文件中网格定义的名称，主要用于明确当前模型应用的水平网格设置。

- IOAPI_ISPH:[默认: 20] I/O API 球形设置。详见 I/O API 关于集合球的说明文档。

- IOAPI_OFFSET_64: [默认: NO] I/O API 长时间步长记录设置。如果模型输出数据大于 2GB，这个选项需要设置为 YES。

- LAYER_FILE: [默认: none] 明确当前模型应用的垂直层结构 MET_CRO_3D 文件的名称和路径。

- gc_matrix.nml: [默认: none]气相物质参数文件。这个文件主要用于配置 BCON 输出的气相物质。

- ae_matrix.nml: [默认: none]气溶胶物质参数文件。这个文件主要用于配置 BCON 输出的气溶胶物质。

•nr_matrix.nml: [默认: none]非活跃物质参数文件。这个文件主要用于配置 BCON 输出的非活跃物质。

•tr_matrix.nml: [默认: none]示踪物质参数文件。这个文件主要用于配置 BCON 输出的示踪物质。

•OUTDIR:[默认: \$CMAQ_HOME/data/bcon]输出数据目录。

•BC:设置输入文件类型。这个变量设置决定了脚本如何设置输入和输出环境变量。

- profile:设置输出文件名包括标识符“profile”; 使用变量 BC_PROFILE 指定 ASCII 垂直廓线文件作为 BCON 的输入。

- m3conc: 用于嵌套模拟。设置输出文件的起始时间; 使用变量 CTM_CONC_1 指定 CCTM CONC 文件作为 BCON 的输入。

•DATE:设置 BCON 嵌套模拟日期。

•SDATE:[默认: \${DATE}]从 CCTM CONC 嵌套模拟文件中提取边界条件的日期。如果没有设置 SDATE, 这个变量将会从 CTM_CONC_1 文件中自动设置。

•STIME:[默认: 000000] 从 CCTM CONC 嵌套模拟文件中提取边界条件的起始时间。如果没有设置 STIME, 这个变量将会从 CTM_CONC_1 文件中自动设置。

•RUNLEN:[默认: 240000] 从 CCTM CONC 嵌套模拟文件中提取边界条件的其小时数。如果没有设置 RUNLEN, 这个变量将会从 CTM_CONC_1 文件中自动设置。

7.2.3 编译和运行

7.2.3.1 BCON 编译

第 5 章介绍了如何安装和编译 CMAQ 前处理程序。接下来将介绍编译 BCON 新版本的步骤 (总结如下)。

1.当第一次编译 CMAQ 程序 (ICON, BCON, CCTM) 时, Bldmake 将被自动编译。

- 配置 config_cmaq.csh 脚本, 它指向可用的 I/O API 和 netCDF 库。
- 通过设置上述编译配置变量, 配置 BCON 应用程序构建脚本。
- 调用构建脚本, 创建可执行程序。

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/bcon/scripts/  
./bldit_bcon.csh [compiler] [version] |& tee build_bcon.log
```

7.2.3.2 运行 BCON

按照上述执行配置变量说明，设置运行脚本。运行 BCON 生成 CCTM 的边界条件。

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/BCON  
./run_bcon.csh |& tee run_bcon.log
```

7.3 Calmap

7.3.1 说明

前处理程序 Calmap 为不同类型的作物生成网格化的种植开始日期、种植结束日期和收获结束日期，用于估计农业活动对风尘排放的影响。CMAQ 风尘排放模块可以使用 Calmap 的输出文件模拟作物周期对于风尘排放的影响。

7.3.2 文件，配置和环境变量

图 7-3 展示了 Calmap 读入 5 种输入文件和生成 8 种输出文件，其中三个用于 CCTM。Calmap 使用 MCIP 生成的 GRIDCRO2D 文件设置模型网格。BELD01 文件指向 BELD3 “a” 文件，该文件包含网格化的土地覆盖和土地利用数据，其中包括几种不同作物类别的覆盖。BELD3“a”文件是 BEIS 排放模型的输入，可以通过空间分配器生成。Calmap 其他输入是打包在 CMAQv5 中美国农作物日历数据。Calmap 将作物日历数据转换为 I/O API GRDDED3 文件，供模型使用。CROPMAP01 文件包含特殊作物的种植起始时间。CROPMAP04 文件包含特殊作物的种植结束时间。CROPMAP08 文件包含特殊作物的收获时间。当可蚀耕地模块（CTM_ERODE_AGLAND）开启，这些文件都会输入于 CCTM 中。

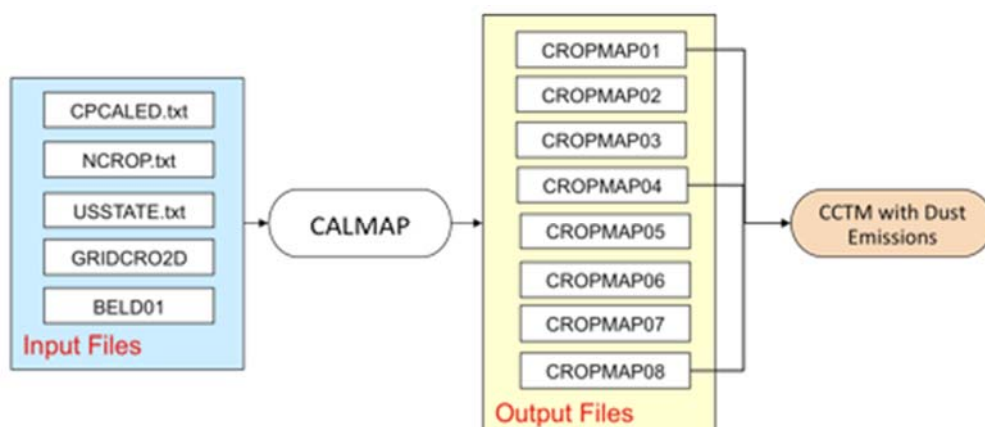


图 7-3 Calmap 输入和输出文件

7.3.2.1 Calmap 输入文件

表 7-3 Calmap 输入文件

文件名	格式	说明
GRID_CRO_2D	GRDDED3	与时间无关的二维交叉点气象文件；由 MCIP 输出。
BELD01	GRDDED3	BELD 土地利用数据，用于模拟风尘排放；
CPCALED	ASCII	国家农业活动日历。
NCROP	ASCII	作物名称、数量及日历。
USSTATE	ASCII	美国农作物代码。

7.3.2.2 Calmap 输出文件

表 7-4 Calmap 输出文件

文件	格式	说明
CROPMAP01	GRDDED3	网格种植开始时间文件的名称和位置。
CROPMAP02	GRDDED3	网格的名称和位置?? 开始日期文件；不被 CCTM 使用。
CROPMAP03	GRDDED3	网格的名称和位置?? 日历文件；不被 CCTM 使用。
CROPMAP04	GRDDED3	网格种植结束时间文件的名称和位置。
CROPMAP05	GRDDED3	网格的名称和位置?? 开始日期文件；不被 CCTM 使用。
CROPMAP06	GRDDED3	网格的名称和位置?? 开始日期文件；不被 CCTM 使用。
CROPMAP07	GRDDED3	网格收获结束时间文件的名称和位置。

7.3.2.3 执行配置变量

环境变量列表调用可执行程序，在 Calmap 运行脚本中进行设置。

7.3.3 编译和运行

7.3.3.1 Calmap 编译

Calmap 通过编译文件进行编译。编译文件中配置选项包括对于创建可执行程序 of 的编译器标记。编译文件位于 \$CMAQ_HOME/REP/agdust/src 目录。编译 Calmap, 会使用以下命令行更新 config_cmaq.csh 和调用编译文件。

```
cd $CMAQ_HOME/REP/agdust/src  
source $CMAQ_HOME/config_cmaq.csh  
./make |& tee make.calmap.log
```

使用不同的编译器编译 Calmap, 只需修改 config.cmaq 脚本中的编译器名称、路径和标记。

7.3.3.2 Calmap 运行

按照可执行配置变量说明设置运行脚本。运行 Calmap 会产生 CCTM 风尘模型所需的作物日历输入文件:

```
cd $CMAQ_HOME/REP/agdust/scripts  
./run_calmap.csh |& tee run_calmap.log
```

7.4 CCTM

7.4.1 说明

CCTM 是 CMAQ 欧拉化学传输模型的一部分。它的输入数据来自于 CMAQ 的气象和排放模块。CCTM 对于每次模拟都会输出多种文件。CCTM 基本输出文件包括瞬时和小时平均浓度文件、干湿沉降文件和能见度模拟值。其他 CCTM 输出文件包括气溶胶诊断文件、云文件和过程分析文件。

CCTM 包含了几种用于模拟传输、化学和沉降的科学配置。CCTM 中所有的科学配置选项, 例如要使用的化学机制, 都是在编译可执行程序时设置的。在执行时设置 CCTM 的模型网格及垂直层结构。选择科学配置和模型网格、层配置间的重要区别是, 当更改模型网格、层时, CCTM 无需重新编译, 但当调用新的科学选项时, 需要重新编译。

可选的输出文件是在 CCTM 中调用相关进程时创建的。例如，在打开过程分析的情况下编译 CCTM 时，会创建额外的输出文件。

CCTM 包括排放和光解速率的在线处理选项。在线（in-line）指的是以前是在 CCTM 外部完成的处理过程，如采用 CCTM 内部处理代替以前 SMOKE 源排放模型的处理过程。在线排放处理的好处包括在计算生物源排放和点源烟羽抬升的过程中集成了高时间分辨率的气象数据，并避免了排放数据所需的大量数据存储负担。在线光解速率计算的好处是在速率计算中包含了预测的气体和气溶胶浓度。

排放和光分解速率的在线都是通过 CCTM 编译时配置选项调用的。当使用 CCTM 进行在线排放计算时，在执行时需要一系列额外的输入文件和环境变量。这些额外输入文件将在下面进行介绍。在线光解速率不需要任何额外的输入，因为 CCTM 包括了在线模拟所需的所有光解速率数据。

7.4.2 文件，配置和环境变量

图 7-4 介绍了 CCTM 的输入输出文件和配置选项。在编译时调用的选项与在程序执行时调用的选项之间存在区别。在编译 CCTM 时，用户指定一个化学机制来配置用于空气质量模型计算的气相化学和气溶胶机制。在 CCTM 编译脚本中设置机制变量，可以将程序配置为使用一组特定的机制 INCLUDE 文件来构建可执行程序。所有由 CCTM 模拟的科学过程必须在 CCTM 编译过程中进行选择，必须为不同的机制和科学配置编译不同的 CCTM 可执行程序。在程序执行时，或运行 CCTM 时，用户可设置水平和垂直网格、以及输入文件。只要输入文件与内置在可执行程序中的科学配置一致，不同的空间域、垂直网格结构和输入文件可以与单个 CCTM 可执行程序一起使用。例如，通过气相光化学机制配置选项创建的 CCTM 可执行程序，只要排放和 IC/BC 文件与构建到可执行程序中的光化学机制配置一致，就可以使用可执行程序模拟不同的区域。

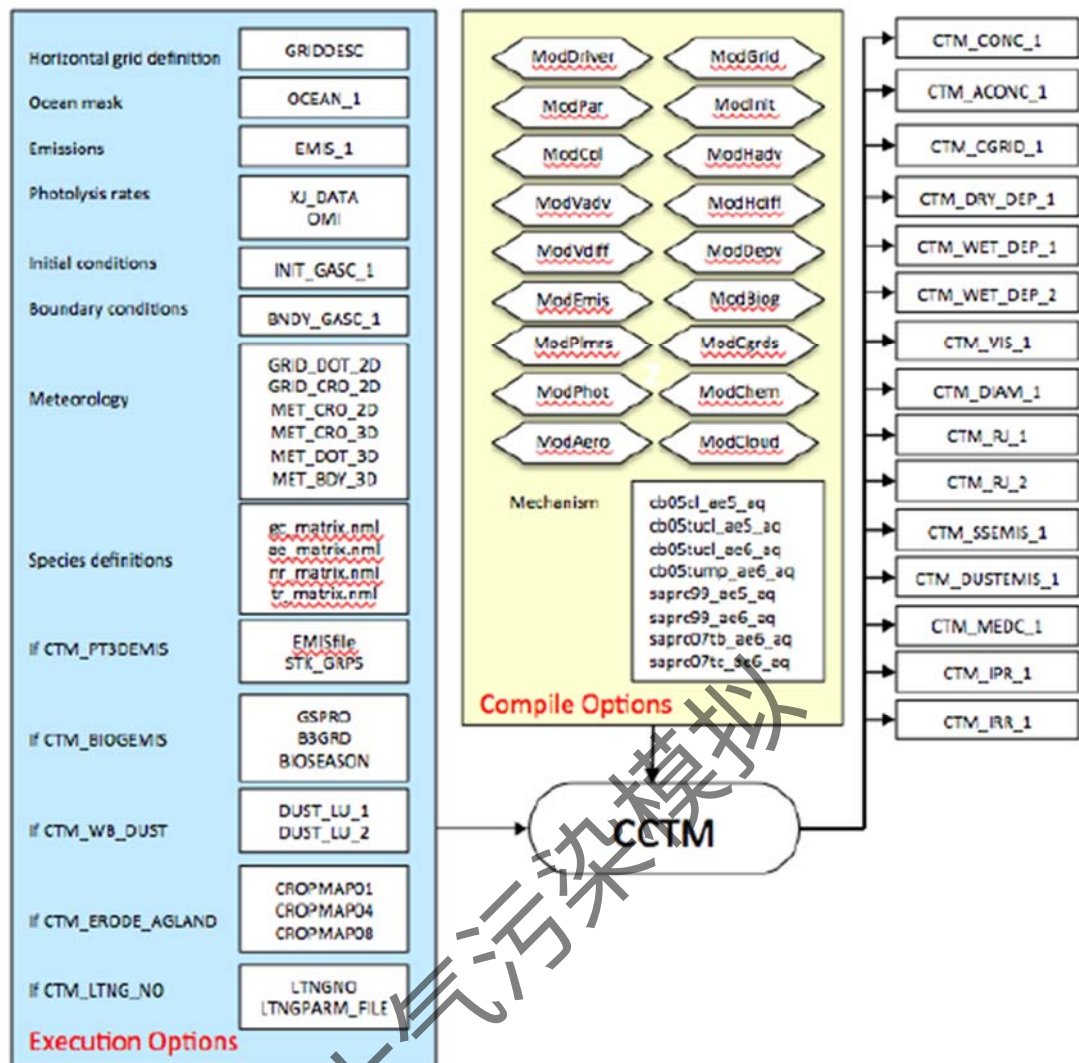


图 7-4. CCTM 输入输出文件

7.4.2.1 CCTM 输入文件

表 7-5.CCTM 所需的输入文件

文件名	格式	描述
GRIDDESC	ASCII	地图投影和网格定义。
OCEAN_1	GRDDED3	用于定义海洋覆盖的网格单元与时间无关的二维文件。
EMIS_1	GRDDED3	为特定气相化学机制和颗粒物模型指定的随时间变化的二维或三维排放文件的名称和位置；例如，SMOKE 或 CONCEPT 排放模型的输出文件。
INIT_[GASC/AERO/NONR/TRAC]	GRDDED3	为特定气相化学机制和颗粒物模

文件名	格式	描述
		型指定的时间依赖、单时间步长或三维初始条件文件的名称和位置。
		由 ICON 输出。
BNDY_[GASC/AERO/NONR/TRAC]	BN1DARY3	为特定气相化学机制和颗粒物模型指定的随时间变化的、单时间步长或多时间步长的三维边界条件文件的名称和位置。由 BCON 输出。
GRID_CRO_2D	GRDDED3	随时间变化的二维交叉点气象文件的名称和位置。由 MCIP 输出。
GRID_DOT_2D	GRDDED3	随时间变化的二维点气象文件的名称和位置。由 MCIP 输出。
MET_CRO_2D	GRDDED3	随时间变化的二维交叉点气象文件的名称和位置。由 MCIP 输出。
MET_DOT_3D	GRDDED3	随时间变化的三维气象文件的名称和位置。由 MCIP 输出。
MET_CRO_3D	GRDDED3	随时间变化的三维交叉点气象文件的名称和位置。由 MCIP 输出。
MET_BDY_3D	BNDARY3	随时间变化的三维边界气象文件的名称和位置。由 MCIP 输出。
CSQY_DATA	ASCII	用于在线计算光解速率的吸收截面和量子产额数据。
OMI	ASCII	不同年份按纬度分的垂直臭氧柱数据。
OPTICS_DATA	ASCII	用于 CMAQ 在线光解速率计算的波长、光学和表面反照率参数。
gc_matrix.nml	ASCII	定义输入模型的气相物质的参数文件。
ae_matrix.nml	ASCII	定义输入模型的气溶胶物质的参数文件。
nr_matrix.nml	ASCII	定义输入模型的无反应物质的参数文件。
tr_matrix.nml	ASCII	定义输入模型的示踪物质的参数文件。

7.4.2.2 CCTM 选择性输入文件

表 7-6. CCTM 选择性输入文件

文件名	格式	描述
XJ_DATA	ASCII	为特点气相化学机制而指定的每日晴空光解速率文件的名称和位置；由 JPROC 输出-仅用于离线光解配置。
STK_GRPS_nn	GRDDED3	用于计算点源排放在线烟羽上升的烟囱参数文件，nn 指源组 ID 号。由 SMOKE 生成。
STK_EMIS_nn	GRDDED3	高架点源排放，nn 指源组 ID 号。由 SMOKE 生成。
GSPRO	ASCII	物种配置文件。包含用于将总污染物排放量分配为 CCTM 所需的模型物种排放的因子。
B3GRD	GRDDED3	输入于 BEIS3 中的标准化生物排放。由 SMOKE 程序 Normbeis3 生成。
BIOSEASON	GRDDED3	表示某一年中每天使用的生物排放因子，可采用 SMOKE 程序 Metscan 创建。BIOSEASON 文件与时间相关是，通常包括全年（365 或 366 天）的数据。它使用一个季节变量，SEASON 变量要么设为 0（冬季条件）要么设为 1（夏季条件）。
SOILINP	GRDDED3	生物源 NO 土壤输入文件；由 CCTM 输出。
DUST_LU_1	GRDDED3	用于计算风尘排放的土地利用“A”数据文件。由 BELD 土地利用和空间分配器生成。
DUST_LU_2	GRDDED3	用于计算风尘排放的土地利用“TOT”数据文件。由 BELD 土地利用和空间分配器生成。
MODIS_FPAR	GRDDED3	MODIS 反演植被变率覆盖数据。可以使用空间分配器工具生成。
CROPMAP01	GRDDED3	用于可蚀耕地尘排放评估的格点种植起始时间。由 CMAQ 前处理程序 Calmap 生成。
CROPMAP04	GRDDED3	用于可蚀耕地尘排放评估的格点种植结束时间。由 CMAQ 前处理程序 Calmap 生成。
CROPMAP08	GRDDED3	用于可蚀耕地尘排放评估的格点作物收割时间。由 CMAQ 前处理程序 Calmap 生成。
LTNGNO	GRDDED3	模型逐层每个时间步长的闪电 NO 排放文件。
NLDN_STRIKES	GRDDED3	CCTM 模拟范围每小时观测雷击数。
LTNGPARMS_FILE	GRDDED3	与时间无关的网格化闪电参数文件，包括从历史 NLDN 观测得到的回归数据和 WRF 预测对降水使用的 KF 对流参数化方案、海洋掩

文件名	格式	描述
		模和云对地闪光的比率。
BELD4_LU	GRDDED3	BELD4 土地利用文件, 部分作物网格化文件。
E2C_SOIL	GRDDED3	每种作物类型的 EPIC 土壤特性参数网格化文件。该文件包含了 1cm 表层和 10cm 翻耕层的每种农作物的土壤 pH 值。
E2C_FERT	GRDDED3	EPIC 作物类型文件网格化文件。该文件包含 EPIC 模拟输出的首日土壤初始铵浓度、施肥深度和施肥量。

7.4.2.3 CCTM 输出文件

表 7-7 列出了 CCTM 基本配置下输出的文件名、文件格式和文件说明。激活不同的科学模块, 在线沉降和在线排放处理, CCTM 都会产生额外的输出文件。表 7-8 列出了 CCTM 可选配置输出的文件名、文件格式和文件说明。

表 7-7. CCTM 基本输出文件

文件名	格式	说明
CTM_CONC_1	GRDDED3	三维气体和气溶胶小时污染模拟瞬时值
S_CGRID	GRDDED3	模拟结束时三维气体和气溶胶污染浓度值, 作为重启文件使用
A_CONC_1	GRDDED3	二维或三维气体和气溶胶小时污染模拟平均值
CTM_DRY_DEP_1	GRDDED3	三维气体和气溶胶干沉降小时模拟值
CTM_WET_DEP_1	GRDDED3	三维气体和气溶胶湿沉降小时模拟值
CTM_VIS_1	GRDDED3	三维小时能见度瞬时值

表 7-8. CCTM 可选输出文件

文件名	格式	说明
CTM_SSEMIS_1	GRDDED3	二维小时海盐排放量; 在 CCTM 运行脚本中将 CTM_SSEMDIAG 设置为 Y 来输出这个文件。
CTM_WET_DEP_2	GRDDED3	二维小时云诊断文件的名称和位置; 在 CCTM 运行脚本中将 CLD_DIAG 设置为 Y 来输出该文件。
CTM_DEPV_DIAG	GRDDED3	二维小时在线沉降诊断文件; 在 CCTM 运行脚本中将 CTM_DEPV_FILE 设置为 T 或 Y,

文件名	格式	说明
CTM_IPR_[1-3]	GRDDED3	并将 CTM_ILDEPV 设置为 Y 来输出该文件。 二维或三维小时 IPR 文件；CCTM 以 IPR 配置驱动时输出该文件。
CTM_IRR_[1-3]	GRDDED3	二维或三维小时 IRR 文件；CCTM 以 IRR 配置驱动时输出该文件。
CTM_RJ_[1-2]	GRDDED3	小时光解诊断输出文件；在化学机制中有大量光解反应时所写的多个文件；在 CCTM 运行脚本中将 CTM_PHOTDIAG 设置为 Y 来输出这个文件。
B3GTS_S	GRDDED3	小时生物质排放文件；CCTM 运行脚本中将 CTM_BIOGEMIS 和 B3GTS_DIAG 都设置为 Y 时，激活在线生物质排放进程。
SOILOUT	GRDDED3	土壤小时 NO 排放文件；CCTM 运行脚本中将 CTM_BIOGEMIS 设置为 Y 时，激活在线生物质排放进程。
CTM_DUST_EMIT_1	GRDDED3	二维小时尘排放文件；CCTM 运行脚本中将 CTM_WB_DUST 和 CTM_DUSTEM_DIAG 都设置为 Y 时，激活尘排放模块。
CTM_LTNG_DIAG1	GRDDED3	三维闪电 NO 小时平均排放文件；CCTM 运行脚本中将 CTM_LTNG_NO 和 LTNGDIAG 都设置为 Y 时，激活闪电模块。
CTM_LTNG_DIAG2	GRDDED3	闪电 NO 柱小时排放文件；CCTM 运行脚本中将 CTM_LTNG_NO 和 LTNGDIAG 都设置为 Y 时，激活闪电模块。
CTM_PT3D_DIAG	GRDDED3	三维点源小时排放文件；CCTM 运行脚本中将 CTM_PT3DEMIS 和 PT3DDIAG 都设置为 Y 时，激活在线排放进程。
PLAY_SRCID_NAME	GRDDED3	三维层分指数小时文件；CCTM 运行脚本中将 CTM_PT3DEMIS 和 PT3DFRAC 都设置为 Y 时，激活在线排放进程。
CTM_DRY_DEP_MOS	GRDDED3	
CTM_DRY_DEP_FST	GRDDED3	
MEDIA_CONC	GRDDED3	汞沉降小时输出文件；CCTM 运行脚本中将 CTM_HGBIDI 设置为 Y 时，激活双向汞通量。
CTM_VDIFF_DIAG	GRDDED3	小时垂直扩散诊断文件；CCTM 运行脚本中将 VDIFF_DIAG_FILE 设置为 Y 时，激活该

文件名	格式	说明
CTM_VSED_DIAG	GRDDED3	变量。 小时重力沉降诊断文件；CCTM 运行脚本中将 VDEFF_DIAG_FILE 设置为 Y 时，激活该变量。
CTM_AOD_1	GRDDED3	小时气溶胶光学厚度模拟；CCTM 运行脚本中将 CTM_AOD 设置为 Y 时，激活该变量。
CTM_AVIS_1	GRDDED3	三维小时平均能见度；CCTM 运行脚本中将 CTM_AVISDIAG 设置为 Y 时，激活该变量。
CTM_PMDIAG_1	GRDDED3	三维小时气溶胶诊断瞬时文件；气溶胶物质聚集模块；CCTM 运行脚本中将 CTM_PMDIAG 设置为 Y。
CTM_APMDIAG_1	GRDDED3	三维小时平均气溶胶诊断文件；气溶胶物质聚集模块；CCTM 运行脚本中将 CTM_APMDIAG 设置为 Y。

CCTM 输出文件默认存放在 \$CMAQ_HOME/data/cctm 目录下，在运行脚本中由 OUTDIR 变量控制。所有 CCTM 默认的输出文件名包括 EXEC 和 APPL 环境变量。命名 CCTM 输出的所有变量均在运行脚本中设置。

7.4.2.4 编译配置变量

以下列出的配置选项是在编译 CCTM 可执行程序时设置的。当调用这些选项时，将创建指定配置的可执行程序。要更改这些选项，需要用户重新编译 CCTM 并创建一个新的可执行程序。

CCTM 的科学模块可有多种选择。这里提供了这些选项的简要描述。有关不同选项的科学细节，请参阅 CMAQ 发布说明。

通过在 CCTM 构建脚本中取消注释该行，可以调用以下五个选项。使用“#”注释脚本中的行以关闭该选项。

- CopySrc

取消注释以将源代码复制到工作构建（BLD）目录下。如果被注释，编译的可执行程序将被放到 BLD 目录中。

- set ParOpt

构建可在多处理器上运行的可执行程序。调用此命令，需要 MPI 库文件和 INCLUDE 目录。

- MakeFileOnly

取消注释以构建一个 Makefile 来编译可执行程序。注释掉以创建 Makefile 和编译。

- set build_parallel_io

取消注释，用真正的并行 I/O 特性构建 CMAQ（需要 ioapi3.2 和 pnetcdf）。

- set build_twoway

取消注释以构建 WRF-CMAQ 双向耦合系统，不能为单独的 CMAQ 设置该选项。

- set potvortO3

取消注释以构建具有势涡对流层 O₃ 标度的 CMAQ。

以下配置设置可能有多个选项。在 CCTM 构建脚本中选择其中一个选项。

- ModDriver: [default: driver/wrf]

CCTM 一般设置-坐标驱动模块。

- driver/wrf

采用基于 WRF 的方案解决质量守恒平流问题；应用 WRF 气象场时选择该选项。

- driver/yamo

采用 Yamartino 方案解决质量守恒平流问题。

- ModGrid: [default: Cartesian]

CCTM 模型网格配置模块。CMAQ 目前仅支持笛卡尔直角坐标系。请勿更改此模块的设置。

- grid/cartesian

- ModInit: [default: init/yamo]

CCTM 时间步长初始化模块模块，采用 Yamartino 方案解决质量守恒平流问题。请勿更改此模块的设置。

- init/yamo

- ModCpl: [default: couple/gencoor_wrf]

质量耦合浓度转换模块选项。单元转换和浓度耦合模块。

- couple/gencoor_wrf

与基于 WRF 的平流方案兼容的耦合方案；当 ModDriver 设置为 driver/wrf 时，可选用此方案。

- couple/gencoor

与 Yamartino 平流方案相匹配的耦合方案；当 ModDriver 设置为 driver/yamo 时，可选用此方案。

- ModHadv: [default: hadv/yamo]

水平对流模块。目前仅支持 Yamartino 全球质量守恒水平对流方案。

- hadv/yamo

- ModVadv: [default: vadv/wrf]

垂直对流模块。

- vadv/wrf

采用分段抛物法（PPM）的 WRF omega 方法计算垂直对流；这个模块应该只与 WRF 气象场一起使用。

- vadv/yamo

采用全球质量守恒方案计算垂直对流。

- ModHdiff: [default: hdiff/multiscale]

对于水平扩散模块，CMAQv5 中唯一的选项是 hdiff/multiscale，该模块应用了基于局地风场变化的扩散率。请勿更改此模块的设置。

- hdiff/multiscale

- ModVdiff: [default: vdiff/acm2]

垂直扩散和表面交换模块。请勿更改此模块的设置。

- vdiff/acm2

采用非对称对流模型 ACM2 计算垂直扩散。

- ModDepv: [default: depv/m3dry]

沉降速率计算模块。请勿更改此模块的设置。

- depv/m3dry

CMAQ 干沉降速率程序。

- ModEmis: [default: emis/emis]

CMAQ 在线人为源和自然源排放模块。在 CCTM 运行脚本中启动。请勿更改此模块的设置。

- emis/emis
- ModBiog: [default: biog/beis3]

应用 BEIS3 模块计算在线生物源排放。在 CCTM 运行脚本中启动。请勿更改此模块的设置。

- biog/beis3
- ModPlmrs: [default: plrise/smoke]

采用 Briggs 算法计算点源的在线烟羽抬升。在 CCTM 运行脚本中启动。请勿更改此模块的设置。

- plrise/smoke
- ModCgrds: [default: spcs/cgrid_spcs_nml]

CMAQ 物种配置模块。

- spcs/cgrid_spcs_nml

用于配置 CMAQ 模型物种的参数文件。

- spcs/cgrid_spcs_icl

应用 Fortran INCLUDE 文件配置 CMAQ 模型物种。

- ModPhot: [default: phot/inline]

光分解计算模块。

- phot/inline

采用模拟的气溶胶和臭氧浓度在线计算光分解率。

- phot/table

采用 CMAQ JPROC 程序离线计算晴空光分解率; 为 CCTM 提供每日光分解率表格。

- Mechanism: [default: cb05e51_ae6_aq]

气相、气溶胶和液相化学机制。详见 CMAQ 机制定义表格 (https://github.com/USEPA/CMAQ/blob/5.2/DOCS/User_Manual/CMAQ_OGD_appendix_A.md)。

- Tracer [default trac0]

指定示踪剂种类。在 CMAQ 中调用惰性示踪剂，需要使用参数文件定义示踪剂和编译 CMAQ。需要在\$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS 目录下设置这个模块，包括示踪剂配置的参数文件。默认设置是不使用任何示踪剂。

- trac[n]

- ModGas: [default: gas/ebi_{\$Mechanism}]

气相化学处理模块。

- smvgear

应用 SMVGEAR 化学处理器。

- ros3

应用 gas/the Rosenbrock 化学处理器。

- ebi

应用欧拉反迭代处理器。

- ModAero: [default: aero6]

CMAQ 气溶胶模块。

- aero6

第六代 CMAQ 气溶胶模型（海盐排放和热力学扩展）包括二次有机气溶胶的产量。

- ModCloud: [default: cloud/acm_ae6]

CMAQ 云模块，用于模拟云对沉降、混合、光分解和液相化学的影响。

- cloud/acm_ae6

ACM 云处理器，应用 ACM 方法计算 AERO6 非均相化学对流混合。

- cloud/acm_ae6_mp

ACM 云处理器，应用 ACM 方法计算 AERO6 非均相化学对流混合和毒性污染物。这就是 CMAQv5 中的多污染物机制。

- cloud/acm_ae6_kmt

ACM 云处理器，应用 ACM 方法计算 AERO6 非均相化学对流混合和动态液相化学。

- cloud/acm_ae6i_kmti

ACM 云处理器，应用 ACM 方法计算 AERO6 非均相化学对流混合、动态液相化学和云滴中 SOA 的液相形成。

- ModUtil: [default: util]

CMAQ 实用程序模块。请勿更改此模块的设置。

- util/util

• Tracer: [default: trac0]在 CCTM 中加入惰性化学示踪剂，默认无示踪剂物种。

• ModPa: [default: procan/pa]在 CCTM 运行脚本中控制过程分析。请勿更改此模块的设置。

- procan/pa

• ModPvO3: [default: pv_o3]对流层臭氧交换位涡参数化方案。这个选项使用 CCTM 构建脚本中的 potvorO3 变量配置。请勿更改此模块的设置。

- pv_o3

7.4.2.5 执行配置变量

以下环境变量是在执行 CCTM 时调用的，在 CCTM 运行脚本中设置。

- compiler [默认值: intel]

- compilerVrsn [默认值: 13.1]

- VRSN [默认值: v52]

- PROC [默认值: mpi]

CCTM 在多核或单核运行情景下，设置如下。

- mpi

使用 MPI 多处理器并行计算配置。在选择 mpi 时需额外的配置设置，CCTM 在构建时必须支持 MPI 模块。运行脚本需要 Linux 系统所需的处理器数量和其他 MPI 配置变量。

- serial

CCTM 单处理器计算配置。

• MECH [默认值: None]CMAQ 化学机制，必须与 CCTM 构建脚本中的机制变量相匹配。

- EMIS [默认值: 2013ef]

- APPL [默认值: SE52BENCH]

CCTM 可执行文件标识符, 必须与 CCTM 构建脚本中的 APPL 变量相匹配。

- RUNID [默认值: \$VRSN_compiler_APPL] 运行 ID, 用于跟踪版本号、编译器以及应用程序名称。

- EXEC [默认值: CCTM_\$APPL_\$EXECID]

CCTM 可执行程序名称。

7.4.2.5.1 MPI 配置

- NPCOL_NPROW [默认值: 1 1]

在 MPI 配置中分解建模区域的列和行数。在这两个数字的乘积必须等于分配给 CCTM 模拟的处理器总数。对于单处理器运行, MPI 项必须设置为 1 1。对于多处理器并行运行, 列数 (即第一个数字) 应该大于或等于行数。例如, 对于 8 处理器 MPI 并行运行, 设置为 4 2。

- NPROCS [默认值: 1]

为 CCTM 模拟运行分配的处理器数量, 等于行列数的乘积。对于单处理器模拟, 设置为 1, 否则将设置为 NPCOL_NPROW 两个数的乘积。

7.4.2.5.2 垂直层数

- NZ [默认值: 35] 设置垂直层数。

7.4.2.5.3 时间步长设置

- NEW_START_TRUE [默认值: TRUE] 对于模型重启, 设置为 FALSE。
- START_DATE 公历格式模拟起始日期 (YYYY-MM-DD)
- END_DATE 公历格式模拟结束日期 (YYYY-MM-DD)
- STTIME 模拟起始时间 (HHMMSS)
- NSTEPS [默认值: 240000] 模拟时间步长 (HHMMSS)
- TSTEP [默认值: 010000] 模拟输出时间步长间隔 (HHMMSS)

7.4.2.5.4 CCTM 配置选项

- LOGFILE [默认值: \$BASE/\$APPL.log]

取消注释可将 CCTM 标准输出到日志文件; LOGFILE 变量设置了日志文件名称和位置。

- GRID_NAME [默认值: CMAQ-BENCHMARK]

GRIDDESC 文件包含的网格定义名称，该文件为模型的当前应用程序指定了水平网格。

- GRIDDESC [默认值: \$CMAQ_HOME/scripts/GRIDDESC1]用于设置水平网格定义的网格描述文件。

- CTM_APPL [默认值: \${RUNID}_\${YYYYMMDD}]CCTM 日志文件命名扩展名。

- CONC_SPCS [如果注释掉，即是所有物种] 写入到 CCTM CONC 文件的模型物种。

- CONC_BLEV_ELEV [如果注释掉，即是所有层]垂直模型层范围的 CONC 浓度。该变量设置的输出 CONC 文件的最高和最低层。

- AVG_CONC_SPCS [如果注释掉，输出所有物种]

用于计算每个输出时间步长的积分平均浓度的模型物种。选项可以是写入 CCTM CONC 文件的任何标准输出种类。这个列表中的物种将被写入 ACONC 输出文件。

- ACONC_BLEV_ELEV [默认值: 如果注释掉，输出所有层]

积分平均浓度的垂直模型层范围。这个变量设置了计算积分平均浓度的最高和最低层。例如，该项设置为“1 5”，将会产生第一至五层的平均积分浓度。

- ACONC_END_TIME [默认值: N]

将 ACONC 文件输出时间步长的时间戳从默认的小时开始改成小时结束。

- Y:设置时间戳到每小时结束。
- N:设置时间戳到一个小时的开始。

- EXECUTION_ID

CCTM 可执行文件的名称；由脚本自动设置。

7.4.2.5.5 同步时间步长和容量选项

- CTM_MAXSYNC [默认值: 300]

以秒为单位的最大同步时间步长。

- CTM_MINSYNC [默认值: 60]

以秒为单位的最小同步时间步长。

- SIGMA_SYNC_TOP [默认值: .70]

由同步步骤决定的最高 Sigma 层。

- ADV_HDIV_LIM [默认值: .95] 平流时间步长调整的最大水平分限。
- CTM_ADV_CFL [默认值: .95] 最大 cfl 条件。
- RB_ATOL [默认值: 1.0E-09] 全球 ROS3 化学绝对耐受性解释器。

7.4.2.5.6 科学选项

- CTM_WB_DUST [默认值: Y]

设置 CCTM 计算在线风尘排放的选项。将这个变量设置为 Y 需要网格化的土地利用输入文件，土地利用类型包括以下 BELD USGS 分类：shrubland，shrubgrass 和 sprsbarren。详见第 8 章对于 DUST_LU_1 和 DUST_LU_2 输入文件的解释。注释掉或设置为 Y 为开启，N 则为关闭。

- CTM_ERODE_AGLAND [默认值: Y]

设置使用可选的可侵蚀性农业土地类型，用于计算来自农业土地的风尘排放。将该变量设置为 Y 需要有描述 18 种作物类型的种植起始时间，结束时间和收获时间的网格作物时间数据。详见第 8 章对于 CROPMAP01，CROPMAP04 和 CROPMAP08 输入文件的描述。如果 CTM_WB_DUST 注释掉或设置为 N，该设置项将关闭，设置为 Y 则开启。

- CTM_WBDUST_BELD [默认值: BELD3] 用于识别沙尘源区域的土地利用数据库；如果 CTM_WB_DUST 设置为 N 即关闭。

- BELD3

应用 BELD3 土地利用数据。

- BELD4

应用 BELD4 土地利用数据。

- CTM_LTNG_NO [默认值: Y]

该设置项是控制闪电 NO 排放。将该变量设置为 Y 需要额外的变量来定义闪电 NO 排放计算的配置。详见以下关于 LTNGNO、LTNGPARAMS、NLDN_STRIKES 和 LTNGDIAG 的设置。设置为 Y 即开启，注释掉或设置为 N 则关闭。

- CTM_WVEL [默认值: Y]

设置为将 CCTM 计算的垂直速度输出到 CONC。设置为 Y 即为开启，注释掉变量或 N 则为关闭。

- KZMIN [默认值: Y]

如果将 KZMIN 设置为 Y, CCTM 将会从 GRID_CRO_2D 气象文件中读取城市土地利用分数变量 PURB, 并使用该信息确定每个网格单元中的最小涡流扩散率。在 CMAQv5 中, 主要位于城市的网格一般采用 $1.0\text{m}^2/\text{s}$, 非城市网格采用 $0.01\text{m}^2/\text{s}$ 。如果该变量设置为 N, PURB 变量将会关闭, 模拟区域网格统一使用 $1.0\text{m}^2/\text{s}$ 值。

- CTM_ILDEPV [默认值: Y]

计算在线沉积速率。注释掉或设置为 Y 即为开启, N 则为关闭。

- CTM_MOSAIC [默认值: N]

计算土地利用的特定沉积速率和通量。

- CTM_FST [默认值: N]

使用 MOSAIC 方法获取土地利用的特定气孔通量。

- CTM_ABFLUX [默认值: Y]

激活肥料氮双向通量的在线排放量和沉积速率。如果 CTM_ILDEPV 设置为 N 则关闭。设置为 Y 需要其他四个输入文件, 包括网格作物分块分布(B4LU_file), 土壤性质 (E2C_Soilfile), 肥料条件 (E2C_Fertfile), 农业土壤初始条件文件 (INIT_MEDC_1)。该选项将会控制干沉降文件中其他变量的生成。详见第 8 章对于所需要输入文件的说明。设置为 Y 即为开启, 注释掉或 N 则为关闭。

- CTM_HGBIDI [默认值: N]

控制汞双向通量在线排放量和沉积速率。如果 CTM_ILDEPV 设置为 N 则关闭。该选项会使干沉积文件中产生额外的变量。设置为 Y 即为开启, 注释掉或 N 则为关闭。

- CTM_SFC_HONO [默认值: Y]

计算地面 HONO 作用。注释掉或设置为 Y 即为开启, N 则为关闭。

- CTM_GRAV_SETL [默认值: Y]

计算气溶胶的重力沉降作用。注释掉或设置为 Y 即为开启, N 则为关闭。

- CTM_BIOGEMIS [默认值: Y]

计算生物质排放。注释掉或设置为 Y 即为开启，N 则为关闭。如果该选项开启，必须设置几个额外的变量（详见在线生物质排放设置）。

- CTM_PT3DEMIS [默认值: Y]

计算高架点源的烟羽抬升。设置为 Y 即为开启，注释掉或 N 则为关闭。如果该选项开启，必须设置几个额外的变量（详见在线排放设置）。

- CTM_ZERO_PCSEA [默认值: N]关闭 VOCs 前体排放对于 psSOA 的影响。CMAQ 开发团队推荐保留 psSOA 质量对运行的影响。

7.4.2.5.7 过程分析选项

- CTM_PROCAN [默认值: N]

激活 CCTM 的过程分析选项。将 CTM_PROCAN 设置为 Y，并且使用 \$CMAQ_DATA/pacp/pacp.inp 文件配置进程率和反应率选项。该选项激活后还会输出过程分析文件。

- PA_BCOL_ECOL [默认值: None]

对于过程分析计算的模拟格点列数设置。设置为过程分析范围起始和结束列号的两位数字。

- PA_BROW_EROW [默认值: None]

对于过程分析计算的模拟格点行数设置。设置为过程分析范围起始和结束行数字的两位数字。

- PA_BLEV_ELEV [默认值: None]

对于过程分析计算的模拟格点层数设置。设置为过程分析范围设置一个最底层和最顶层编号的两位数字。

7.4.2.5.8 输入输出控制

- IOAPI_LOG_WRITE [默认值: Y]

开启该选项将会输出日志文件。

- FL_ERR_STOP [默认值: N]

该选项设置为 T，如果在输入文件中发现不一致的头文件，则退出。

- PROMPTFLAG [默认值: N]

开启 I/O API 提示文件交互模式。该选项设为 T，需要对不同的 I/O API 操作进行交互式提示。

- IOAPI_OFFSET_64 [默认值: N]

大时间步长的 I/O API 设置。如果输出时间步长要生成的每个时间步长>2GB 的数据，则该选项应设为 YES。

7.4.2.5.9 气溶胶诊断控制

- CTM_AVISDIAG [默认值: N]

能见度诊断输出文件。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- CTM_PMDIAG [默认值: N]

气溶胶诊断特性输出文件。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- CTM_APMDIAG [默认值: N]

气溶胶诊断特性小时平均输出文件。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- APMDIAG_BLEV_ELEV [默认值: None]

模拟域内，格点垂直层气溶胶诊断特性小时平均输出文件。设置最低层和最高层以控制输出范围。

7.4.2.5.10 诊断输出标记

- CTM_CKSUM [默认值: Y]

标准科学过程输出文件。影响运行速度和输出日志文件大小。该选项注释掉或设为 Y 则开启，设为 N 则关闭。

- CLD_DIAG [默认值: N]

1 小时湿沉降诊断文件 (CTM_WET_DEP_2)，包括对流湿沉降评估。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- CTM_PHOTDIAG [默认值: N]

输出在线光解率和相关数据诊断 netCDF 输出文件。CTM_RJ_1 文件包含 O₃ (JO3O1D) 和 NO₂ (JNO2) 格点光解率、晴空和云影响、地表向下总辐照度 (ETOT_SFC_W)、气溶胶厚度 (TAU_AERO_W)、总光学厚度 (TAU_TOT_W)、模拟范围内臭氧光学厚度 (TAUO3_TOP_W)、模拟范围内瑞利光学厚度 (TAU_RAY_W)、地表反照率 (ALBEDO_W)。CTM_RJ_2 文件包含其它已选化学机制的格点光解率。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- CTM_SSEMDIAG [默认值: N]

将计算出的海盐排放输出到诊断 netCDF 输出文件 (CTM_SSEMIS_1)。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- CTM_DUSTEM_DIAG [默认值: N]

输出在线尘排放量诊断 netCDF 输出文件 (CTM_DUST_EMIS_1)。诊断文件不仅包括总尘排放量，还包括土地利用类型和尘模型参数（如网格化的可蚀土地利用类型）分类的粉尘排放。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- CTM_DEPV_FILE [默认值: N]

输出每小时诊断文件 (CTM_DEPV_DIAG)，计算在线沉积速度。如果 CTM_ILDEPV 设置为 N，则忽略该变量。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- VDIFF_DIAG_FILE [默认: N]

输出一个扩散和空气重力沉降诊断文件。设置为 Y 表示打开，注释掉或设置为 N 表示关闭。

- CTM_AOD [默认值: N]

输出气溶胶光学厚度诊断文件。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- DISP [默认值: keep]

控制现有日志文件的维护。

- 如果该文件已存在，删除输出文件。
- 如果日志文件已存在，停止模拟。

7.4.2.5.11 在线排放配置

- NPTGRPS [默认值: 1]

排放点源数组文件。至多可输入 9 组点源。

- STK_GRPS_##

与烟羽排放源相关的排气筒文件名以及文件路径。

- STK_EMIS_##

与烟羽排放源相关的点源排放文件名以及文件路径。

- LAYP_STDATE [HHMMSS]

计算高点源排放的起始日期。

- LAYP_STTIME [HHMMSS]

计算高点源排放的起始时间。

- LAYP_NSTEPS [HHHHHH]

计算高点源排放的时间步长数。

- CTM_EMLAYS [默认值: max no of model layers]

计算高点源排放的排放层数。如果未设置（注释掉），将按照最大值进行模拟。

- PT3DDIAG [默认值: N]

输出在线三维点源排放诊断 netCDF 输出文件（CTM_PT3D_DIAG）。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- PT3DFRAC [默认值: N]

输出在线三维点源层数分指数诊断 netCDF 输出文件（PLAY_SRCID_NAME）。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- REP_LAYER_MIN [默认值: -1]

烟羽值最小层数诊断文件。如果设置为-1或注释掉，即所有层数均被报告。

7.4.2.5.12 闪电 NO_x 配置

CMAQ 闪电 NO_x 模块文档。

- LTNGNO [默认值: InLine]

确认闪电排放计算是在线还是离线。可以将该变量设置为闪电 NO 排放格点文件，以使用 CCTM 之外的前处理程序进行排放计算。将该变量设置为“inline”，将会激活在线排放计算，并要求 LTNGPARMS 变量(见下文)定义在线排放的配置。

- USE_NLDN [默认值: Y]

使用逐小时 NLDN 雷击文件计算在线闪电 NO 排放量。需要 NLDN_STRIKES 输入文件激活该设置。该选项注释掉或设为 Y 则开启，设为 N 则关闭。

- LTNGPARAMS [默认值: Y]

使用闪电参数配置文件计算在线闪电 NO 排放量。当变量 LTNGNO 设置为在线，该项将会用于在线排放计算。该项设置为 Y，将会使用逐小时闪电计数观测数据计算闪电 NO。该项设置为 N，将会直接使用输入气象数据中的对流降水

率计算闪电 NO。该项设置为 Y 时，需要其他闪电输入参数文件（LTNGPARMS_FILE），包括云地闪电比值，用于计算对流降水率的因子以及每闪击一次的 NO 量。

- NLDN_STRIKES [默认值: None]

逐小时 NLDN 闪击 netCDF 文件。需要同时满足 LTNGNO 设置为 Inline，USE_NLDN 设置为 Y，才可启用该项。

- LOG_START [默认值: 0.9]

对流降水（RC）值将闪电 NO 排放计算由线性转变为对数线性。

- LTNGDIAG [默认值: N]

闪电 NO 排放量诊断文件。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- LTNGPARMS_FILE [默认值: None]

闪电参数文件。LTNGDIAG = N 即忽略该项。

- LTNGOUT [默认值: None]

闪电诊断文件。LTNGDIAG = N 即忽略该项。

7.4.2.5.13 在线生物物质排放配置

- GSPRO [默认值: None]

输入 ASCII 形式配置文件的目录路径和文件名。

- B3GRD [默认值: None]

网格标准化生物物质排放输入文件。

- BIOG_SPRO [默认值: None]

生物源 VOCs 配置文件 ID。该 ID 必须写入 GSPRO 文件。

- BIOSW_YN [默认值: Y]

使用霜冻日期转换文件来决定是否使用冬季还是夏季的生物源排放。该选项注释掉或设为 Y 则开启，设为 N 则关闭。

- BIOSEASON [默认值: None]

文件名称为霜冻日期开关输入 NetCDF 文件。

- SUMMER_YN [默认值: Y]

切换到夏季正常的生物源排放。如果 BIOSW_YN 设置为 Y，则忽略该变量。注释掉或设置为 Y，以选择夏季生物源排放因子，设置为 N 表示关闭。

- PX_VERSION [默认值: Y]

该选项说明输入气象学是否采用 Pleim-Xiu 陆地-地表模型。该项设置为 Y，则输入气象场必须包括用于计算土壤湿度 NO 排放的土壤湿度 (SOILM)、土壤温度 (SOILT) 和土壤类型 (ISLTYP) 变量。

- INITIAL_RUN [默认值: N]

如果是首次计算生物土壤 NO 排放，该项应设置为 Y。如果已有一个先前创建的文件，该项应设为 N。

- SOILINP [默认值: None]

生物土壤 NO 排放文件的路径和文件名。如果 INITIAL_RUN 设为 N 或 F，前一日模拟的土壤 NO 排放文件将会作为模拟所需的输入文件。

- B3GTS_DIAG [默认值: N]

将在线生物排放（质量单位）写入诊断 NetCDF 输出文件。该选项设为 Y 则开启，注释掉或设为 N 则关闭。

- B3GTS_S

生物排放诊断输出 NetCDF 文件。如果 B3GTS_DIAG 设置为 N，则忽略该项。

7.4.2.5.14 风尘排放配置

CMAQ 风尘模块文档 DUST_LU_1

将 BELD “A” 土地利用数据插值到模拟网格中。如果 CTM_WBDUST_BELD 设置为 BELD3 使用。

- DUST_LU_2

将 BELD “TOT” 土地利用数据插值到模拟网格中。如果 CTM_WBDUST_BELD 设置为 BELD3 使用。

- MODIS_FPAR

将 MODIS FPAR 时间变化植被文件插值到模拟网格中。

- BELD4_LU

将 BELD4 土地利用数据插值到模拟网格中。如果 CTM_WBDUST_BELD 设置为 BELD4 使用。

- CROPMAP01

将植被种植起始日期数据插值到模拟网格中。

- CROPMAP04

将植被种植结束日期数据插值到模拟网格中。

- CROPMAP08

将植被收割结束日期数据插值到模拟网格中。

7.4.3 编译和运行

7.4.3.1 CCTM 编译

第 5 章介绍了如何安装和编译 CMAQ 预处理器程序，进行测试模拟。请按照以下步骤（总结如下）编译 CCTM 的新版本。

1.编译 Bldmake、CMAQ 源代码和编译管理程序。只需在首次安装 CMAQ 时执行一次。

- 使用 config_cmaq.csh 脚本配置 CCTM 创建脚本，该脚本指向可用的 I/O API 和 netCDF 库。

- 通过设置上述编译配置变量，为应用程序配置 CCTM 创建脚本。

- 调用创建脚本以生成可执行文件：

```
cd $CMAQ_HOME/CCTM/ scripts
```

```
./bldit_cctm.csh [compiler] [version] |& tee build_cctm.log
```

7.4.3.2 CCTM 运行

根据上面描述的执行配置变量设置运行脚本。使用以下命令运行 CCTM：

```
cd $CMAQ_HOME/CCTM/ scripts
```

```
./run_cctm.csh |& tee run_cctm.log
```

7.5 CHEMMECH 和 CSV2NML

7.5.1 说明

CHEMMECH 程序为所有依赖化学机制的 CMAQ 程序生成机制源代码文件。使用 ASCII 机制定义文件作为输入文件，Fortran 程序 CHEMMECH 为 CMAQ 程序创建所有定义气相化学机制的 Fortran 文件。C-Shell 脚本 CSV2NML 将一个以逗号分隔的文本文件转换为一个 NAMELIST 文件，该文件将影响每个模型物种浓度的过程（例如，输入人为源排放、边界条件、传输、沉积）定义输入到

CMAQ 程序的 NAMELIST 文件中。结合 Fortran 源文件和 NAMELIST 文件定义了 CMAQ 程序中的化学机制。

在 CMAQ 程序中,通过 CHEMMECH 和 CSV2NML 创建新机制需要两个步骤。CHEMMECH 生成机制 RXNS 源文件,必须在将 CMAQ 源代码编译为可执行文件时使用这些源文件。CSV2NML 生成在执行期间输入到 CMAQ 程序中的 NAMELIST 物种文件。必须注意确保 RXNS 和 NAMELIST 文件相一致,以便正确更新或生成 CMAQ 中的新机制。

CHEMMECH 读取一个机制定义 (mech.def) 文本文件,该文件列出了光化学反应机制的化学计量和动力学要素。该程序将 mech.def 文件转换为两个 RXNS 文件, RXNS_DATA_MODULE.F90 文件和 RXNS_FUNC_MODULE.F90 文件,与 CMAQ 源代码一起编译成一个新的可执行文件。CHEMMECH 创建的源文件必须手动移动到 CMAQ 源代码目录中的正确目录位置,以便在编译 CMAQ 程序期间可用。CMAQ 的机制文件位于 *CMAQHOME/CCTM/src/MECHS/ Mechanism* 中,其中 \$Mechanism 是化学机制的唯一 ID (例如 cb05e51_aq6_aq)。

CSV2NML 读取一系列 CSV 文件,这些文件定义了影响所有 CMAQ 物种浓度的过程。CSV 文件将被转换为执行各种 CMAQ 程序时所调用的 NAMELIST 文件。必须将 ICON、BCON 和 CCTM 运行脚本中的环境变量设置为指向特定机制的 NAMELIST 文件。

有关如何在 CMAQ 中更新现有机制或创建新机制的详细信息,请参阅第 9 章。

7.5.2 文件、配置和环境变量

图 7-5 显示了 CHEMMECH 和 CSV2NML 的输入和输出文件以及配置选项。CMAQ 程序所需的全套机制文件分两步生成。第一步, CHEMMECH 程序运行机制定义文件 mech.def 以作为输入项。然后,生成的 RXNS 文件将输入到 CMAQ 创建脚本中,使用新的化学机制配置编译 CMAQ。CSV2NML 用于将物种定义文件从 CSV 格式转换为 NAMELIST 文件。NAMELIST 文件用作 CMAQ 程序 ICON、BCON 或 CCTM 的输入项,用于定义将影响每个模型物种的过程。三个 NAMELIST 文件定义了气相物种 (GC.nml)、气溶胶物种 (AE.nml) 和非反应物种 (NR.nml) 的过程。

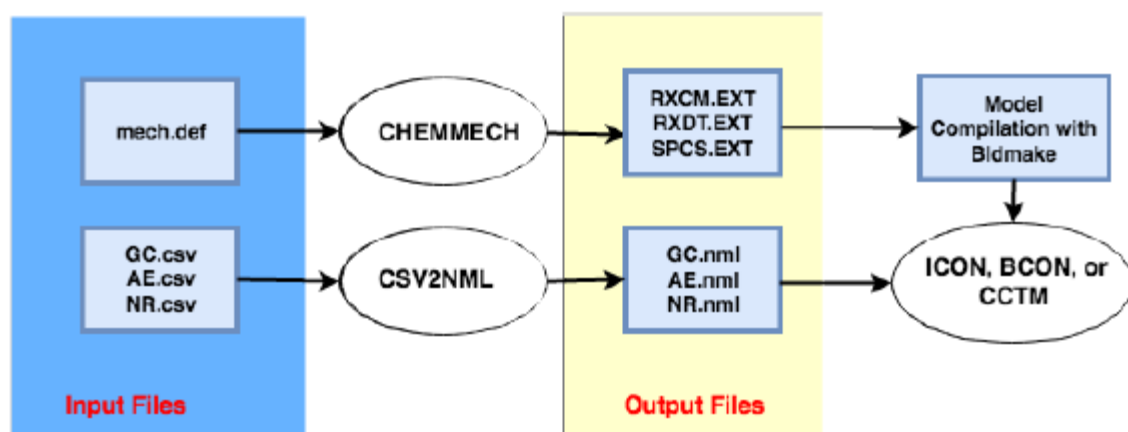


图 7-5.CHEMMECH 和 CSV2NML 输入和输出文件

要在 CMAQ 中实现一个新机制，需要从模型现有机制定义（mech.def）文件和 CSV 物种文件开始。编辑 mech.def 文件，以包括新的反应、种类和反应速率，并提供新的 mech.def 文件作为 CHEMMECH 的输入项。编辑 CSV 物种文件，以包括新物种，并将这些文件作为 CSV2NML 的输入项。第 9 章提供了更新现有机制和向 CMAQ 添加新机制的详细示例。CHEMMECH 和 CSV2NML 均不需要水平网格、垂直层或时间设置。

7.5.2.1 CHEMMECH 输入文件

表 7-9.CHEMMECH 输入文件

文件名	格式	说明
MCFL (mech.def)	ASCII	CMAQ 机制定义文件；光化学机理列出了组成化学机理的所有反应的机械和动力学信息。

7.5.2.2 CHEMMECH 输出文件

表 7-10.CHEMMECH 输出文件

文件名	格式	说明
RXCM.EXT	ASCII	INCLUDE 机制通用文件；列出所有化学机理变量和参数。
RXDT. EXT	ASCII	INCLUDE 机制数据文件；以化学机制定义格式作为数据模块，以便为 CMAQ 源代码读取。
SPCS. EXT	ASCII	INCLUDE 物种文件；未使用。

CHEMMECH 输出文件的位置在运行脚本中由变量 `Opath` 进行设置。要编译使用 CHEMMECH 创建的 INCLUDE 文件的 CMAQ 程序，需要将这些 INCLUDE 输出文件需要移动到 `CMAQ_HOME/models/mechs/release` 新目录下。通过“Mechanism”变量将 CMAQ 生成脚本指向此新目录。

7.5.2.3 CSV2NML 输入文件

第 8 章对表 7-11 中所示文件的格式进行了详细说明。

表 7-11.CSV2NML 输入文件

文件名	格式	说明
GC.csv	ASCII	气相物种过程参数。此文件定义了影响化学机制中每个气相物种浓度的源和汇过程。
AE.csv	ASCII	气溶胶物种过程参数。此文件定义了影响化学机制中每个气溶胶物种浓度的源和汇过程。
NR.csv	ASCII	非反应物种过程参数。此文件定义影响化学机制中每个非反应物种浓度的源和汇过程。

7.5.2.4 CSV2NML 输出文件

表 7-12.CSV2NML 输出文件

文件名	格式	说明
GC.nml	ASCII	气相物种过程参数。此文件定义了影响化学机制中每个气相物种浓度的源和汇过程。
AE.nml	ASCII	气溶胶物种过程参数。此文件定义了影响化学机制中每个气溶胶物种浓度的源和汇过程。
NR.nml	ASCII	非反应物种过程参数。此文件定义了影响化学机制中每个非反应物种浓度的源和汇过程。

7.5.2.5 执行配置变量

此处列出的环境变量在运行时将被调用，并在 CHEMMECH 运行脚本中进行设置。MP.saprc99.csh 是默认运行脚本。

- Xpath [默认值: \$BASE]

可执行目录路径

- EXEC [默认值: CHEMMECH]

可执行文件名称

- Mechanism [默认值: None]

输出机制的名称。

- Opath [默认值: ../exts]

输出文件的目录路径

- Mpath [默认值: ../exts]

定义机制文件的目录路径。

- MECHDEF [默认值: None]

定义机制文件名。

- MAPPING_ROUTINE [默认值: None]

- SPCSDATX [默认值: \$Opath/SPECIES.ext]

输出物种 INCLUDE 名称文件

- RXNS_DATA_MODULE [默认值: \$Opath/RXNS_DATA_MODULE.F90]

输出机制 Fortran 数据文件名称

- RXNS_FUNC_MODULE [默认值: \$Opath/RXNS_FUNC_MODULE.F90]

常用输出机制 Fortran 文件名称

- EQNS_KPP_FILE [默认值: None]

- SPCS_KPP_FILE [默认值: None]

7.5.3 编译和运行

7.5.3.1 Chemmech 编译

编译 CHEMMECH，运行构建脚本：

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/chemmech/scripts
```

```
./bldit_chemmech.csh [compiler] [version] |& tee bldit_chemmech.log
```


如果要使用不同的编译器编译 CHEMMECH，需要在 config_cmaq.csh 脚本中更改编译器名称、位置 and 标记。

7.5.3.2 运行 CHEMMECH

根据上面描述的执行配置变量，设置运行脚本。使用以下命令运行 CHEMMECH：

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/chemmech/scripts  
  
./run_chemmech.csh |& tee run_chemmech.log
```

7.5.3.3 CSV2NML 使用

CSV2NML 脚本配置为从命令行读取 CSV 文件，并输出一个可以与 CMAQ 一起使用的 NAMELIST 文件。以下是如何使用 CSV2NML 创建气相物种 NAMELIST 文件的示例：

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/nml/scripts  
  
./csv2nml.csh GC.CSV  
  
还有一个脚本可以将现有 namelist 文件转换为 CSV 文件。  
  
cd $CMAQ_HOME/UTIL/nml/scripts  
  
./nml2csv.csh GC.nml
```

7.6 CREATE_EBI

7.6.1 说明

CREATE_EBI 程序为依赖机制的欧拉反向迭代（EBI）解算器生成 Fortran 源代码。此实用程序允许用户在机制被修改或添加到 CMAQ 时创建新的 EBI 解算器代码。CREATE_EBI 生成的源代码应用于使用新的或修改的化学机制 CCTM 版本中。

有关如何在 CMAQ 中更新现有机制或创建新机制的详细信息，请参阅第 9 章。

7.6.2 文件、配置和环境变量

要在 CMAQ 中创建新机制，需要从定义机制（`mech.def`）文件和现有机制物种 CSV 文件开始。编辑 `mech.def` 文件，包括新的反应、物种和反应速率，并提供新的 `mech.def` 文件作为 CHEMMECH 程序的输入文件。CHEMMECH 将输出一个 `RXNS_DATA_MODULE.F90` 文件，用作 `CREATE_EBI` 的输入文件。

要在 CMAQ 中实现一个新机制，首先从模型中现有机制的一个机制定义 (mechanism definition, `mech.def`) 文件和 CSV 物种文件开始。编辑 `mech.def` 文件，以包含新的反应、物种和反应速率，并提供这个新的 `mech.def` 文件作为程序 CHEMMECH 的输入。CHEMMECH 将输出一个 `RXNS_DATA_MODULE.F90` 文件，它被用作 `CREATE_EBI` 的输入。

7.6.2.1 `CREATE_EBI` 输入文件

表 7-13. `CREATE_EBI` 输入文件

文件名	格式	描述
<code>RXNS_DATA_SRC.F90</code>	ASCII	以 Fortran 90 格式编写的 CMAQ 机制反应清单；由 CHEMMECH 程序输出。

7.6.2.2 `CREATE_EBI` 输出文件

表 7-14. `CREATE_EBI` 输出文件

文件名	格式	描述
*.F	ASCII	用于 CCTM EBI 化学解算器的 Fortran 90 源代码
	F90	
<code>RXNS_DATA_MODULE.F90</code>	ASCII	机制数据 Fortran 源文件；化学机制定义格式化为数据块，以便作为 CMAQ 源代码被读取。
	F90	

`CREATE_EBI` 输出文件的位置由运行脚本中变量 `OUTDIR` 设置。要编译使用 `CREATE_EBI` 创建的 F90 文件的 CMAQ 程序版本，需要将这些输出 F90 文件移动到 `$CMAQ_HOME/CCTM/src/gas` 目录下的新目录。通过 “Mechanism” 变量将 CMAQ 生成脚本指向此新目录。

7.6.2.3 编译配置变量

- `GC_NAME` [默认值: None]

气相机制的名称标识符

- CB6R3

CB6 化学机制修订版 3

- CB05E51

CMAQ5.1 版本修改的 CB05 化学机制

- CB05MP51

CMAQ5.1 版本的多污染物 CB05 化学机制

- CB05TUCL

修改甲苯和氯的 CB05 化学机制

- CB05TUMP

修改苯和多污染物的 CB05 化学机制

- SAPRC07TB

修改甲苯化学的 SAPRC07 化学机制

- SAPRC07TC

修改甲苯化学的 SAPRC07 化学机制

- SAPRC07TIC

修改甲苯化学的 SAPRC07 化学机制

- RACM2

RACM2 化学机制

- AE_NAME [默认值: None]

粒子相机制的名称标识符

- AE6

CMAQ 气溶胶版本 6

- AE6I

CMAQ 气溶胶 6i 版本

- AQ_NAME [默认值: AQ]

CMAQ 液相机制的名称标识符

7.6.2.4 执行配置变量

此处列出的环境变量在运行时调用，并在 CREATE_EBI 运行脚本中设置。

- EXEC [默认值: CHEMMECH]

可执行文件的名称

- GC_NAME [默认值: None]

气相机制的名称标识符

- CB6R3

CB6 化学机制版本 3

- CB05E51

CMAQ5.1 版本修改的 CB05 化学机制

- CB05MP51

CMAQ5.1 版本的多污染物 CB05 化学机制

- CB05TUCL

修改甲苯和氯化学的 CB05 化学机制

- CB05TUMP

修改甲苯和多污染物化学的 CB05 化学机制

- SAPRC07TB

修改甲苯化学的 SAPRC07 化学机制

- SAPRC07TC

修改甲苯化学的 SAPRC07 化学机制

- SAPRC07TIC

修改甲苯化学的 SAPRC07 化学机制

- RACM2

RACM2 化学机制

- AE_NAME [默认值: None]

粒子相机制的名称标识符

- AE6

CMAQ 气溶胶 6 版本

- AE6I

CMAQ 气溶胶 6i 版本

- AQ_NAME [默认值: AQ]

CMAQ 液相机制的名称标识符

- OUTDIR [默认值: ../output]

输出文件目录路径

- COPYRT_FLAG

- CVS_HDR_FLAG

- PAR_NEG_FLAG [默认值: F] 包括 PAR 负化学计量。

- T 表示碳键机制

- F 表示 SAPRC 和 RACM 机制

- DEGRADE_SUBS

- NO2EX_CYCLE

- MECH_NO

一氧化氮的机制名称

- MECH_NO2

二氧化氮的机制名称

- MECH_NO2EX

活性二氧化氮 SAPRC, RACM 机制名称; 不是碳键。

- MECH_O3

臭氧机制名称

- MECH_O3P

地表氧原子机制名称

- O 表示碳键机制

- O3P 表示 SAPRC 和 RACM 机制

- MECHO_O1D

活性氧原子的机制名称

- MECH_OH

羟基机制名称

- MECH_HO2

氢氧基机制名称

- MECH_HONO

亚硝酸机制名称

- MECH_HNO4

过氧酸机制名称

- PNA 表示碳键机制
- HNO4 表示 SAPRC 和 RACM 机制
- MECH_PAN

过氧乙酰硝酸盐机制名称

- MECH_C2O3

过氧乙酰基的机制名称

- C2O3 表示碳键机制
- MECO3 表示 SAPRC 和 RACM 机制
- MECHO_NO3

硝酸盐基的机制名称

- MECH_N2O5

二氧化氮机制名称

7.6.3 编译和运行

7.6.3.1 CREATE_EBI 编译

要编译 CREATE_EBI, 在命令行中调用构建文件:

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/create_ebi/scripts
```

```
./bldit.create_ebi.csh |& tee build.create_ebi.log
```

使用不同的编译器编译 CREATE_EBI, 需在 bldit 脚本中更改 COMPILER 变量。

7.6.3.2 CREATE_EBI 运行

根据上面描述的执行配置变量设置运行脚本。使用以下命令运行 CREATE_EBI。

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/create_ebi/scripts
```

```
./run.create_ebi.csh |& tee run.create_ebi.log
```

7.7 ICON

7.7.1 说明

程序 ICON 可使用垂直剖面文本文件或现有的 CCTM 浓度输出 (CONC) 文件为 CCTM 创建化学初始条件 (ICs)。ICON 创建了一个输出文件, 该文件具有单个时间步长, 表征 CCTM 模拟起始时每个网格单元中的化学条件。根据 ICs 输入数据的来源, ICs 可以空间均一的, 也可以随网格变化的。若使用垂直剖面文本文件创建 ICs, ICON 只能在每个模拟层内创建空间均一的 ICs; 它可以为各垂直层创建不同的 ICs。如果使用 CONC 文件创建 ICs, 无论是以相同的网格单元分辨率, 还是提取其中部分区域, 亦或是用于更精细的网格分辨率 (如嵌套模拟), ICON 都可以创建空间变化的 ICs。

ICON 有两种不同的选项设置, 具体取决于输入数据的类型。创建 ICON 可执行文件时, 用户将 ModType 选项设置成 "profile" 或 "m3conc", 对应指定输入数据是垂直剖面文本文件还是 CONC 文件。该选项决定了创建 ICON 可执行文件时要使用的输入数据类型。

CCTM 还可以使用全球化学模型 (GCMs) 缩小的初始条件, 例如 GEOS-Chem 和 MOZART。ICON 不支持处理 GCMs 数据。来自 GCMs 的 ICs 数据, 必须用户自己编写代码和脚本进行处理, CMAQ 发行包中无此模块。CAMx 开发者 (Ramboll Environ) 有代码可从 GEOS-Chem 和 MOZART 中提取模拟区域的 ICs。请访问 www.CAMx.com 的 Support Software section 版块下载这些实用程序。

7.7.2 文件、配置和环境变量

ICON 的输入、输出文件和配置选项如图 7-6 所示。ICON 在编译时调用的选项与在执行程序时调用的选项不同。编译 ICON 时, 用户指定一种化学机制配置用于创建化学 ICs 的气相化学和气溶胶机制。在 ICON 编译脚本中设置 ModMech 和机制变量, 可以配置程序使用指定的机制 namelist 文件创建可执行文件。在 ICON 编译脚本中设置 ModType 变量, 创建 CCTM 所需的 ICs 时, 可以配置程序输入静态浓度的文本文件或依赖时间的二进制 netCDF 文件。不同的机制和输入文件配置选项需要不同的 ICON 可执行文件。

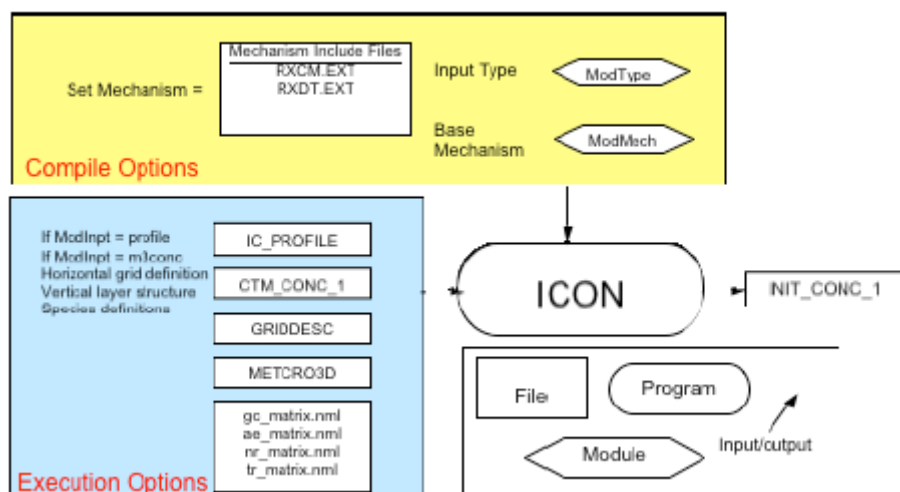


图 7-6. ICON 输入和输出文件

ICON 运行时，它将化学环境浓度数据文件转换为预定义模拟网格中的 ICs。通过 ICON 运行脚本中的 ModType 变量，ICON 将会输入一个垂直剖面文本文件（IC_PROFILE）或现有的 CCTM 浓度文件（CTM_CONC_1）；选择输入哪种文件取决于用户如何编译模型。用户提供的 IC 输入文件必须具有与 ICON 可执行文件的机制配置一致的化学形态。例如，如果使用 CB05 机制编译 ICON 以创建 ICs，则输入的 IC 配置数据文件必须与 CB05 机制一致。CMAQ 发行包中的垂直剖面文本文件，代表了北美清洁大陆的 ICs，适用于以下化学机制：cb05_ae6_aq、saprc07tb_ae6_aq、racm2_ae6_aq 和 saprc99_ae6_aq。用户如果有需求，可为其他机制配置创建输入的 IC。

ICON 的水平网格和垂直层结构，在执行时分别通过输入输入网格描述文件（GRIDDESC）和三维气象交叉点文件（MET_CRO_3D）进行设置。如果输入垂直层结构和输出层结构不同，ICON 可以插值。

7.7.2.1 ICON 输入文件

表 7-15. ICON 输入文件

文件名	格式	描述
IC_PROFILE	AscII	用于创建初始条件的垂直化学剖面文件；此文件由用户创建；仅当 IC 环境变量设置为“profile”时使用。
CTM_CONC_1	GRED3	用于创建初始条件的 CMAQ 浓度文件；此文件由 CCTM 输出；仅当 IC 环境变量设置为“m3conc”时使用。

文件名	格式	描述
MET_CRO_3D_CRS	GRED3	粗网格 MET_CRO_3D 文件；如果嵌套网格垂直结构发生改变，则用于创建新的垂直结构；此文件由 MCIP 输出。
MET_CRO_3D_FIN	GRED3	细网格 MET_CRO_3D 文件；如果垂直网格结构在嵌套模拟之间发生改变则需要；此文件由 MCIP 输出。
GRIDDESC	ASCII	水平网格描述文件，用于定义模拟网格；此文件由 MCIP 输出，也可由用户创建。
LAYER_FILE	GRED3	三维交叉点气象文件，用于定义模拟网格垂直层结构；此文件由 MCIP 输出。
gc_matrix.nml	ASCII	用于定义通过边界输入到模型的气相物种的列表文件。
ae_matrix.nml	ASCII	用于定义通过边界输入到模型的气溶胶物种的列表文件。
nr_matrix.nml	ASCII	用于定义通过边界输入模型的非反应物种的列表文件。
tr_matrix.nml	ASCII	用于定义通过边界输入到模型的示踪物种的列表文件。

7.7.2.2 ICON 输出文件

表 7-16. ICON 输出文件

文件名	格式	描述
INIT_CONC_1	GRED3	通过 GRID_NAME 定义的模型网格上输出的初始条件数据。

ICON 输出文件的默认位置是\$CMAQ_DATA/目录，由运行脚本中的OUTDIR 变量控制。所有 ICON 输出文件的默认命名规则均由 APPL 和 GRID_NAME 环境变量控制。对于现有的 CCTM CONC 文件创建的初始条件，儒略日通过 DATE 环境变量设置。ICON 输出的所有文件命名规则均在运行脚本中设置。

7.7.2.3 编译配置变量

此处列出的配置选项均是在编译 ICON 可执行文件时设置的。当调用这些选项时，它们会创建一个指定配置选项的二进制可执行文件。要更改这些选项，必须重新编译 ICON 并创建新的可执行文件。

CopySrc

取消注释以将源代码复制到工作目录（BLD）中。如果注释，只有编译对象和可执行文件被放在 BLD 目录中。

- MakeFileOnly

- 取消注释以创建编译可执行文件的 Makefile。注释掉同时创建 Makefile 和编译。

- ModType: [默认: module profile]

定义 ICON 将使用的初始条件输入文件的格式。

- m3conc: CCTM CONC 输入文件；用于嵌套模拟。

- profile: 垂直剖面文本输入文件。

- tracer: 使用示踪命名列表文件创建标记示踪物质的 ICs。.

- Mechanism: [默认: cb05e51_ae6_aq]

指定用于创建初始条件的气相、气溶胶和液相化学机制。机制变量选项位于 \$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS 目录下。参阅机制定义表。

示例包括：

- cb6r3_ae6_aq: CB6 修正 3 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制，包括海盐、其他颗粒物种类和水/云化学。

- cb05e51_ae6_aq: CMAQv5.1 更新的 CB05 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制，包括海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。

- cb05tucl_ae6_aq: 具有活性氯化学的 CB05 气相机制，更新甲苯机制、第六代 CMAQ 气溶胶机制、海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。

- cb05tump_ae6_aq: 具有活性氯化学的 CB05 气相机制，更新甲苯机制、汞和有毒气体种类、第六代 CMAQ 气溶胶机制、海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。即 CMAQv5 多污染物机制。

- saprc07tb_ae6_aq: 更新甲苯的 SAPRC-07 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制。

- racm2_ae6_aq: 更新甲苯的 RACM2 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制。

- Tracer [默认 trac0]

指定示踪物种。在 CMAQ 中调用惰性示踪物质需要使用定义示踪程序的命名列表，并使用这些文件编译 CMAQ 程序。配置示踪物质的命名列表文件位于 \$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS 目录。默认设置是不使用任何示踪程序。

-示踪[n]

7.7.2.4 执行配置变量

此处列出的环境变量在程序执行期间被调用，并在 ICON 运行脚本中设置。

- APPL[默认: None]

ICON 可执行文件标识符。必须在 ICON 创建脚本中匹配 APPL 变量。

- CFG[默认: None]

ICON 模拟的配置标识符。

- MECH [默认值: None]

CMAQ 化学机制。必须在 ICON 创建脚本中匹配机制变量。

- EXEC: [默认值: ICON_\$ _APPL_ \$\$[EXECID].exe]

用于模拟的可执行文件。在 ICON 运行脚本中设置 CFG 变量，在 config_cmaq.csh 配置文件中设置 EXECID 变量。

- GRIDDESC: [默认: \$CMAQ_HOME/ scripts /GRIDDESC1]

用于设置水平网格定义的网格描述文件。

- GRID_NAME: [默认: CMAQ-BENCHMARK]

GRIDDESC 文件中包含的网格定义的名称，该文件为模型当前应用程序指定水平网格信息。

- IOAPI_ISPH: [默认值: 20]

球形 I/O API 设置。有关详细信息，请参阅 I/O API 文档了解。

- IOAPI_OFFSET_64: [默认: NO]

用于大时间步长记录的 I/O API 设置。如果每次步长输出的数据大于 2GB，则需要设置为"YES"。

- [LAYER_FILE: [默认值: none]

为模型当前应用程序指定垂直层结构 MET_CRO_3D 文件的名称和位置。

- [gc_matrix.nml: [默认: none]

气相物种列表文件。此文件用于配置 ICON 输出的气相物种。

[ae_matrix.nml: [默认: none]

气溶胶物种列表文件。此文件用于配置 ICON 输出的气溶胶物种。

[nr_matrix.nml: [默认: none]

非反应物种列表文件。此文件用于配置 ICON 输出的非反应物种。

[tr_matrix.nml: [默认: none]

示踪物质列表文件。此文件用于配置 ICON 输出的示踪物质。

- 输出数据目录: [默认: \$CMAQ_HOME/ data /bcon] 输出数据目录。

- IC:

设置输入文件类型。此变量的设置确定运行脚本如何设置输入和输出环境变量。

- profile: 设置输出文件名, 在文件名中标记"profile"; 使用变量 IC_PROFILE 指向输入于 ICON 的垂直剖面文本文件。

- m3conc: 用于嵌套模拟;输出文件名应包含起始日期。使用变量 CTM_CONC_1 指向输入于 ICON 的 CCTM CONC 文件。。

- 日期:

使用朱利安日期命名用于嵌套运行的 ICON 输出文件。

SDATE: [默认值: \${DATE}]

嵌套模拟, 使用朱利安起始日期从 CCTM CONC 文件中提取边界条件。如果未设置 SDATE, 则将从 CTM_CONC_1 文件自动设置。

STIME: [默认值: 000000]

嵌套模拟, 使用起始日期从 CCTM CONC 文件中提取初始条件。如果未设置 STIME, 则将从 CTM_CONC_1 文件自动设置。

7.7.3 编译和运行

7.7.3.1 编译 ICON

第 5 章概述了如何安装和编译用于测试模拟的 CMAQ 预处理器程序。按照以下步骤编译 ICON 的新版本(概述如下)。

1. 编译 Bldmake、CMAQ 源代码和编译管理程序。只需要在安装 CMAQ 时完成一次。

•使用 config_cmaq.csh 脚本配置 ICON，该脚本指向可用的 I/O API 和 netCDF 库。

•通过设置上述编译配置变量，为应用程序配置 ICON 创建脚本。

•调用生成脚本以创建可执行文件：

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/icon/scripts
./bldit_icon.csh [compiler] [version] |& tee build_icon.log
```

7.7.3.2 ICON 运行

根据上述执行配置变量设置运行脚本。运行 ICON 生成 CCTM 的初始条件：

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/icon/scripts
./run_icon.csh |& tee run_icon.log
```

7.8 INLINE_PHOT_PREPROC

7.8.1 说明

INLINE_PHOT_PREPROC 程序为 CCTM 在线光解模块更新吸收横截面/量子产量（CSQY）数据文件。此实用程序允许用户通过创建新的 CSQY 表时，修改或添加反应速率数据到 CMAQ 中。通过 INLINE_PHOT_PREPROC 更新的数据表，可应用于 CCTM 在线光解速率配置。

有关如何更新现有机制或创建 CMAQ 新机制的详细信息，请参阅第 9 章。

7.8.2 文件、配置和环境变量

在 CMAQ 中运行新的 CSQY 数据，需从适用的光化学机制中的每个光解反应 CSQY 数据开始。通过添加或修改这些数据创建 CCTM 在线 CSQY 数据表。

7.8.2.1 INLINE_PHOT_PREPROC 输入文件

表 7-17.INLINE_PHOT_PREPROC 输入文件

文件名	格式	描述
RXNS_DATA_MODULEF90	ASCII	Fortran 90 格式的 CMAQ 机制反应列表；从 CHEMMECH 程序输出。.
CSQY_DATA_RAW	ASCII	光解反应特异性吸收横截面/量子产额数据作为波长的函数。
WVBIN_FILE	ASCII	包含 CSQY 数据的波长柱。
FLUX_FILE	ASCII	0.05nm 波长的太阳通量。

文件名	格式	描述
WATER	ASCII	按波长计算的水折射率。
INSOLUBLE	ASCII	土壤气溶胶材料的光学特性。
DUST	ASCII	土壤气溶胶材料的光学特性。
SOLUTE	ASCII	水溶性气溶胶材料的光学特性。
SOOT	ASCII	烟尘气溶胶材料的光学特性。
SEASALT	ASCII	海盐气溶胶材料的光学特性。

7.8.2.2 INLINE_PHOT_PREPROC 输出文件

表 7-18. INLINE_PHOT_PREPROC 输出文件

文件名	格式	描述
CSQY_DATA	ASCII	作为温度和波长函数的 CSQY 数据。
PHOT_OPTICS	ASCII	用于 CMAQ 在线光解计算的波长、光学和表面反照率参数。

INLINE_PHOT_PREPROC 输出文件的路径由运行脚本中的 OUTDIR 变量控制。通过 INLINE_PHOT_PREPROC 的创建文件编译 CMAQ 程序，将输出文件复制到 \$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS/\$Mechanism 目录下。使用 "Mechanism" 变量将 CMAQ 生成脚本指向此目录。

7.8.2.3 编译配置变量

- Mechanism: [默认: cb6r3_ae6_aq]

指定创造初始条件的气相、气溶胶和液相化学机制。可选择的机制变量位于 \$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS 目录。参阅机制定义表。

示例包括:

- cb6r3_ae6_aq: CB6 修正 3 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制，包括海盐、其他颗粒物种类和水/云化学。
- cb05e51_ae6_aq: CMAQv5.1 更新的 CB05 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制，包括海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。
- cb05tucl_ae6_aq: 具有活性氯化学的 CB05 气相机制，更新甲苯机制、第六代 CMAQ 气溶胶机制、海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。
- cb05tump_ae6_aq: 具有活性氯化学的 CB05 气相机制，更新甲苯机制、汞和有毒气体种类、第六代 CMAQ 气溶胶机制、海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。即 CMAQv5 多污染物机制。

- `saprc07tb_ae6_aq`: 更新甲苯的 SAPRC-07 气相机制, 第六代 CMAQ 气溶胶机制。

- `racm2_ae6_aq`: 更新甲苯的 RACM2 气相机制, 第六代 CMAQ 气溶胶机制。

- 编译

用于构建程序的编译器

- PGF90
- INTEL
- GFORTRAN

7.8.2.4 执行配置变量

此处列出的环境变量在运行时调用, 并在运行脚本 `CREATE_EBI` 中设置。-
Mechanism: [默认: `cb05e51_ae6_aq`]

指定创造初始条件的气相、气溶胶和液相化学机制。可选择的机制变量位于 `$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS` 目录。参阅机制定义表。

示例包括:

`cb6r3_ae6_aq`: CB6 修正 3 气相机制, 第六代 CMAQ 气溶胶机制, 包括海盐、其他颗粒物种类和水/云化学。

- `cb05e51_ae6_aq`: CMAQv5.1 更新的 CB05 气相机制, 第六代 CMAQ 气溶胶机制, 包括海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。

- `cb05tucl_ae6_aq`: 具有活性氯化学的 CB05 气相机制, 更新甲苯机制、第六代 CMAQ 气溶胶机制、海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。

- `cb05tump_ae6_aq`: 具有活性氯化学的 CB05 气相机制, 更新甲苯机制、汞和有毒气体种类、第六代 CMAQ 气溶胶机制、海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。即 CMAQv5 多污染物机制。

- `saprc07tb_ae6_aq`: 更新甲苯的 SAPRC-07 气相机制, 第六代 CMAQ 气溶胶机制。

- `racm2_ae6_aq`: 更新甲苯的 RACM2 气相机制, 第六代 CMAQ 气溶胶机制。

- USE_RXNS_MODULES[默认值: T] CMAQ 的兼容性标志。CMAQ5.1 或更高版本设置为"T"; 旧版本的 CMAQ 设置为"F"。

- WVL_AE_REFRAC [默认值: T] 包括光谱气溶胶的折射率。CMAQ5.1 或更高版本设置为"T"; 旧版本的 CMAQ 设置为"F"。

- SPLIT_OUTPUT [默认值: T] 将光学和 CSQY 输出数据拆分到不同的文件中。仅适用于 CMAQ5.1 或更高版本; 旧版本的 CMAQ 设置为"F"。

7.8.3 编译和运行

7.8.3.1 编译 CREATE_EBI

编译 CREATE_EBI, 用以下命令行调用文件:

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/create_ebi/scripts
```

```
./bldit.create_ebi |& tee build.create_ebi.log
```

如果将 CREATE_EBI 移植到不同的编译器, 需更改 bldit 脚本中的 "COMPILER" 变量。

7.8.3.2 运行 CREATE_EBI

根据上述执行配置变量设置运行脚本。使用以下命令运行 CREATE_EBI:

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/create_ebi/scripts
```

```
./run.create_ebi |& tee run.create_ebi.log
```

7.9 JPROC

7.9.1 说明

JPROC 程序利用分子吸收横截面和量子产量 (CSQY) 数据的查阅表, 以及气候臭氧柱和光学厚度数据计算每日晴天光解速率。JPROC 输出的查询表是文本格式, 该查询表为每日午间不同高度、纬度和时刻的光化学反应晴天光解率。在 JPROC 编译期间, 从这些光解率中提取光化学机制。在 JPROC 源代码中, 各高度、纬度和时角光解率的是固定不变的。

CCTM 目前使用一种在线光解选项, 利用预测的臭氧和气溶胶计算光解率。当 ModPhot 默认配置 (phot/inline) 时, JPROC 不再使用。如果将 ModPhot 设置为 phot/table 进行 CCTM 编译, 则需要 JPROC 创建每日光解速率查找表。

7.9.2 文件、配置和环境变量

JPROC 的输入和输出文件如图 7-7 所示。一些选项在编译时调用，而其他选项在程序执行时调用。编译 JPROC 时，用户指定一种化学机制来表示用于计算光解率的气相化学过程。在 JPROC 编译脚本中设置 Mechanism 变量时，需配置程序在 INCLUDE 文件中创建可执行文件。JPROC 可执行文件对于特定机制配置是固定不变的。

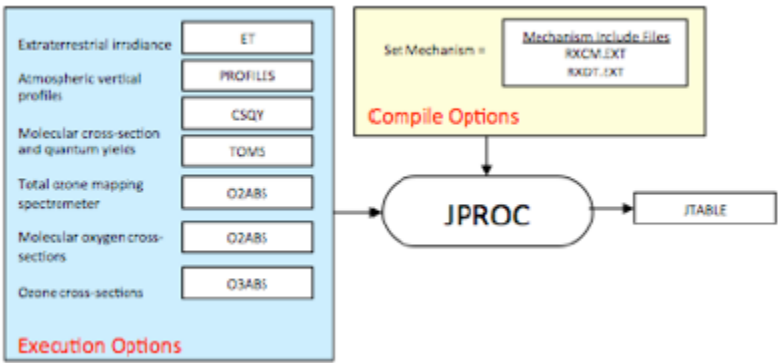


图 7-7.JPROC 输入和输出文件

虽然 JPROC 在执行时不需要任何技术配置（如区域定义），但用户必须向模型提供几个必需和可选的输入文件。对于选定的光化学机制，用户必须提供一组与机制中光解反应一致的分子吸收 CSQY 数据文件。CMAQ 发布时附带了一套完整的 CSQY 文件，这些文件适用于模型支持的 CB、SAPRC 和 RACM 光化学机制版本。如果向 CMAQ 添加了新的机制，则用户必须为添加的机制生成相应的 CSQY 数据文件。用户还可以选择使用 PROFILES 输入文件中的默认大气配置文件或使用总臭氧测绘光谱仪（TOMS）数据来替换 PROFILES 文件中的气候臭氧柱数据。

7.9.2.1 JPROC 输入文件

表 7-19. JPROC 输入文件

文件名	格式	描述
ET	ASCII	作为波长函数的地外辐射。
PROFILES	ASCII	臭氧浓度、气溶胶衰减、温度、空气密度和多布森值的季节性垂直剖面。
TOMS	ASCII	由太阳同步极地轨道 Nimbus 卫星上的总臭氧测绘光谱仪测量的总臭氧柱。
O2ABS	ASCII	吸收 CSQY 数据的分子氧作为波长的函数。
O3ABS	ASCII	吸收 CSQY 数据的臭氧作为波长的函数。

文件名	格式	描述
CSQY	ASCII (directory path)	包含气相光解反应吸收 CSQY 数据作为波长函数的目录路径。

7.9.2.2 JPROC 输出文件

表 7-20. JPROC 输出文件

文件名	格式	描述
JTABLE_ \$Date	ASCII	每日晴天光解速率文件

JPROC 输出文件的默认位置是\$CMAQ_HOME/data/jproc，由运行脚本中的OUTDIR 变量控制。所有 JPROC 输出文件的默认命名规则均由 Date 环境变量控制，该变量与运行脚本中的 STDATE 环境变量一致。

7.9.2.3 编译配置变量

此处列出的配置选项是在编译 JPROC 可执行文件时设置的。当调用这些选项时，它们会创建一个指定配置选项的二进制可执行文件。要更改这些选项，必须重新编译 JPROC 并创建新的可执行文件。

CopySrc

取消注释以将源代码复制到工作目录（BLD）中。如果注释，则在工作目录（BLD）中放置已编译完成的可执行文件。

- MakeFileOnly

取消注释以创建编译可执行文件的 Makefile。注释掉同时创建 Makefile 和编译。。

- Mechanism: [默认: cb6r3_ae6_aq]

指定用于创建初始条件的气相、气溶胶和液相化学机制。机制变量选项位于\$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS 目录下。参阅机制定义表。

示例包括:

- cb6r3_ae6_aq: CB6 修正 3 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制，包括海盐、其他颗粒物种类和水/云化学。

- cb05e51_ae6_aq: CMAQv5.1 更新的 CB05 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制，包括海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。

- cb05tucl_ae6_aq: 具有活性氯化学的 CB05 气相机制，更新甲苯机制、第六代 CMAQ 气溶胶机制、海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。

- `cb05tump_ae6_aq`: 具有活性氯化学的 CB05 气相机制，更新甲苯机制、汞和有毒气体种类、第六代 CMAQ 气溶胶机制、海盐、其他颗粒物物种和水/云化学。即 CMAQv5 多污染物机制。

- `saprc07tb_ae6_aq`: 更新甲苯的 SAPRC-07 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制。

- `racm2_ae6_aq`: 更新甲苯的 RACM2 气相机制，第六代 CMAQ 气溶胶机制。

- `Tracer` [默认 `trac0`]

指定示踪物种。在 CMAQ 中调用惰性示踪物质需要使用定义示踪程序的命名列表，并使用这些文件编译 CMAQ 程序。配置示踪物质的命名列表文件位于 `$CMAQ_HOME/CCTM/src/MECHS` 目录。默认设置是不使用任何示踪程序。

-示踪[n]

7.9.2.4 执行配置变量

此处列出的环境变量在程序执行期间调用，并在 JPROC 运行脚本中设置。

- `APPL`[默认: `None`]

JPROC 可执行文件标识符。必须在 JPROC 创建脚本中匹配 `APPL` 变量。

- `CFG`[默认: `None`]

JPROC 模拟的配置标识符。

- `MECH` [默认值: `None`]

CMAQ 化学机制。必须在 JPROC 创建脚本中匹配机制变量。

- `EXEC`: [默认值: `JPROC_${APPL}_${EXEC_ID}`]

用于模拟的可执行文件。在 JPROC 运行脚本中设置 `CFG` 变量。在 `config_cmaq.csh` 配置文件中设置 `EXEC_ID` 变量。

- `STDATE`

朱利安起始日期 (YYYYYDDD)，用于计算晴天光解率。

- `ENDATE`

朱利安结束日期 (YYYYYDDD)，用于计算晴天光解率。

7.9.3 编译和运行

7.9.3.1 JPROC 汇编

第 5 章概述了如何安装和编译用于测试模拟的 CMAQ 预处理器程序。按照以下步骤编译 JPROC 的新版本（概述如下）。

1. 编译 Bldmake、CMAQ 源代码和编译管理程序。只需要在安装 CMAQ 时完成一次。

- 使用 config_cmaq.csh 脚本配置 JPROC，该脚本指向可用的 I/O API 和 netCDF 库。

- 通过设置上述编译配置变量，为应用程序配置 JPROC 创建脚本。

- 调用生成脚本以创建可执行文件：

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/jproc/scripts
```

```
./bldit_jproc.csh [compiler] [version] |& tee build_jproc.log
```

7.9.3.2 JPROC 运行

根据上述执行配置变量设置运行脚本。运行 JPROC 生成 CCTM 的晴天光解速率：

```
cd $CMAQ_HOME/UTIL/jproc/scripts
```

```
./run_jproc.csh |& tee run_jproc.log
```

7.10 MCIP

7.10.1 说明

气象-化学接口处理器 (MCIP) 将 MM5 或 WRFARW 气象模型输出数据处理为 CMAQ 和 SMOKE 可读的 I/O API 格式文件。MCIP 通过尝试将文件作为 netCDF 文件格式打开，自动判定输入文件是由 MM5 还是 WRFARW 生成的。如果文件可以读取为 netCDF，MCIP 认为输入的是 WRFARW 数据，否则认为输入的 MM5 数据。

MCIP 在处理成排放模型和 CCTM 所需气象场时，气象模型模拟的许多字段没有被修改，而是直接写入 I/O API 文件。转换到 CMAQ 广义坐标系的所需的字段在 MCIP 中计算。目前 MCIP 版本不再计算干沉降速率。CMAQv5 现在可计算所有沉积速率，MCIPv3.4 将 MCIP 内部计算沉积速率的最后一个版本。

MCIP 可以提取输出气象文件的时间和空间子集。运行脚本允许用户指定 MCIP 模拟的开始和结束日期/时间；这些日期/时间可以为输入气象时段中范围

的任何地方，但必须与气象文件的时间精度一致。MCIP 不能以时间插值的方式人为地提高气象场的时间分辨率。MCIP 包含两种水平域调整选项。边界修剪选项(“BTRIM”)均匀地从输入气象网络的四个横向边界中修剪网格单元。非均匀修剪选项指定从输入气象域的左下角开始的偏移量，以及从修改后的原点到输入域的 X 和 Y 方向的单元格数。关于如何调用这些选项的更多信息将在下一节 MCIP 中说明。MCIP 还提供了在输出气象场中重新配置垂直层结构的能力，通过运行脚本中的 sigma 坐标定义的输入结构到输出结构的插值，通常称为“layer collapsing”，这个选项应谨慎使用，因为它可通过其对预测风场的影响显著地影响气象学固有的能量守恒假设。

7.10.2 文件、配置和环境变量

MCIP 的输入输出文件和配置选项如图 7-8 所示。所有 MCIP 配置都是在运行时(而不是在编译时)以 Fortran 列表变量完成的,这与其它 CMAQ 程序不同。用户不需要直接编辑 MCIP 列表文件。所有配置设置都包含在 MCIP 运行脚本中，该脚本在每次执行时都会自动创建新的列表文件。

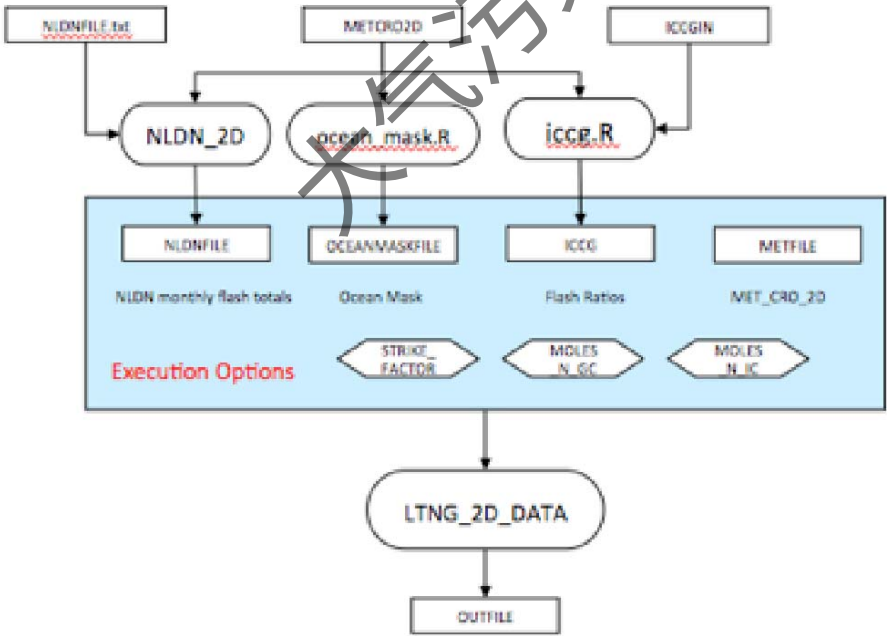


图 7-8. MCIP 输入和输出文件

7.10.2.1 MCIP 输入文件

表 7-21. MCIP 输入文件

文件名	格式	描述
-----	----	----

InMetFiles	binary (MM5) or netCDF (WRF-ARW)	输入到 MCIP 的 MM5 或 WRFARW 数据文件。
InTerFile	binary	包含土地利用数据的 MM5 地理文件；用于计算与土地利用相关的垂直扩散系数。WRFARW 不需要；该信息包含在 WRF-ARW 数据文件中。
InSatFiles		GOES 卫星云数据。

7.10.2.2 MCIP 输出文件

表 7-22. MCIP 输出文件

文件名	格式	描述
GRIDDESC	ASCII	带有坐标和网格定义的信息的网格描述文件。
GRID_BDY_2D	BNDARY3	与时间无关的二维边界气象文件。
GRID_CRO_2D	GRDDED3	与时间无关的二维交叉点气象文件。
GRID_CRO_3D	GRDDED3	与时间无关的三维交叉点气象文件。
GRID_DOT_2D	GRDDED3	与时间无关的二维点气象文件。
MET_BDY_3D	BNDARY3	随时间变化的三维边界气象文件。
MET_CRO_2D	GRDDED3	与时间相关的二维交叉点气象文件。
MET_CRO_3D	GRDDED3	与时间相关的三维交叉点气象文件。
MET_DOT_3D	GRDDED3	与时间相关的三维点气象文件。
mmheader	ASCII	MM5 头文件，包括配置信息；WRFARW 不需要。

MCIP 输出文件的默认位置是\$CMAQ_HOME/data/mcip/\$GridName。由于默认文件名没有关于它们要模拟的模型网格的任何信息，因此网格名称应设置在输出目录路径中。所有 MCIP 输出文件的默认命名规则由 APPL 环境变量控制。MCIP 输出的所有文件命名变量都在运行脚本中设置。

7.10.2.3 编译配置

MCIP 的所有模型配置选项都在执行过程中设置。必须在提供的 Linux Makefile 中设置系统编译器选项，以便为不同的操作系统/编译器组合创建程序。默认 Makefile 中提供了编译器路径、标志和库位置示例。

7.10.2.4 执行配置变量

此处列出的环境变量在程序执行期间调用，并在 MCIP 运行脚本中设置。

- APPL [默认：None]

应用程序名称;文件命名方案。

- CoordName [默认值：None]

写入 GRIDDESC 文件的 MCIP 输出网格的坐标系名称。

- GridName [默认值：无]

写入 GRIDDESC 文件的 MCIP 输出网格的模型网格名称。

- DataPath [默认值：\$CMAQ_DATA]

输入/输出数据路径。

- InMetDir [默认值：None]

MM5 或 WRFARW 模拟数据路径。

InTerDir [默认值：None]

包含 MM5 地理或 WRF ggrid 文件的路径。

- InSatDir [默认值：None]

GOES 卫星云数据文件路径。

- OutDir [默认值：\$CMAQ_HOME/data/mcip]

MCIP 输出数据路径。

- ProgDir [默认值：\$CMAQ_HOME/PREP/mcip/src]

包含 MCIP 可执行文件的工作目录。

- WorkDir [默认值：\$OutDir]

Fortran 链接和名称列表文件临时工作目录。

- InMetFiles [默认值：None]

气象数据列表，包括每个文件的路径；在不修改 MCIP 的情况下，单个 MCIP 运行最多允许 300 个气象模拟文件。

- InSatFiles [默认值：None]

GOES 卫星云数据文件列表。

- ifTer [默认值：F]

指示输入 MM5 地理或 WRF ggrid 文件的二进制标志;选项包括 T (true) 或 F (false)。

- InTerFile [默认值: None]

MM5 地理或 WRF gegrid 文件的名称和位置。

- LPV: [默认值: 0]

计算和输出位势涡度。必须激活此选项才可计算 CCTM O3 位势涡度。

- 0: 不计算和输出位势涡度
- 1: 计算和输出位势涡度

- LWOUT [默认值: 0]

输出垂直速度。

- 0: 不输出垂直速度。
- 1: 输出垂直速度。

- LUVCOU [默认值: 0]

在 c 网格上输出 u 和 v 分量的风。

- 0: 不输出 u 和 v 分量的风到 c 网格上。
- 1: 输出 u 和 v 分量的风到 c 网格上。

- LSAT [默认值: 0]

使用 GOES 卫星云观测数据代替模拟云数据。

- 0: 不用卫星数据。
- 1: 使用 GOES 卫星云观测数据代替模拟云数据。

- MCIP_START [格式: YYYY-MM-DD-HH:MM:SS.SSSS]

MCIP 输出数据的开始日期和时间(UTC)。开始日期和时间必须包含在 MM5 或 WRFARW 输入数据范围内。

- MCIP_END [格式: YYYY-MM-DD-HH:MM:SS.SSSS]

MCIP 输出数据的结束日期和时间(UTC)。结束日期和时间必须包含在 MM5 或 WRFARW 输入数据范围内。

- INTVL [默认值: 60]

输出间隔 (分钟)。这个设置确定了模拟时间步长。MCIP 的输出间隔可以不如输入气象模型数据的输出频繁 (例如, 从 15 分钟分辨率的 WRF 数据中提取 30 分钟分辨率的 CCTM 数据)。

- CTMLAYS [默认值: "-1.0"]

三维 MCIP 输出垂直层的 Sigma 值。每个 Sigma 值的逗号分隔值必须按降序排列，从 1 开始，以 0 结束。最多允许 100 层。若使用输入气象模拟数据的所有层，设置 CTMLAYS = 1.0。

- MKGRID [默认值: T]

确定是否输出静态 (GRID) 气象文件。

- BTRIM [默认值: 5]

在 MCIP 区域的四个水平边的每个边上要删除的边界点的数目。设置 BTRIM = 0 将指定输入气象区域的最大范围。若要删除 MM5 或 WRFARW 横向边界，设置 BTRIM = 5 (推荐)。该设置通过减少输入气象区域 $2\text{BTRIM} + 2\text{NTHIK} + 1$ (NTHIK 为侧边界厚度，来自 BDY 文件) 来减少 MCIP 输出的气象区域水平范围。额外的点反映了从网格点 (单点) 到网格单元格 (交叉点) 的转换。对输入气象的子集区域截取，设置 BTRIM = -1; 这个设置导致 BTRIM 被 X0、Y0、NCOLS 和 NROWS 提供的信息所代替 (见下文)。

- X0 [仅在 BTRIM = -1 时使用]

基于输入的 MM5 或 WRFARW 区域的完整 MCIP 交叉点区域 (包括 MCIP 外侧边界) 左下角的 x 坐标。X0 为东西方向。

- Y0 [仅在 BTRIM = -1 时使用]

基于输入的 MM5 或 WRFARW 区域的完整 MCIP 交叉点区域 (包含 MCIP 外侧边界) 左下角的 y 坐标。Y0 为南北方向。

- NCOLS [仅在 BTRIM = -1 时使用]

输出 MCIP 区域的列数 (不包括 MCIP 横向边界)。

- NROWS [仅在 BTRIM = -1 时使用]

输出 MCIP 区域的行数 (不包括 MCIP 横向边界)。

- LPRT_COL [默认值: 0]

MCIP 建模域上诊断输出的列单元格坐标。

- LPRT_ROW [默认: 0]

MCIP 建模域上诊断输出的行单元格坐标。

- WRF_LC_REF_LAT [默认值: -999.0]

WRF 兰伯特保角参考纬度。使用此设置可强制输出 MCIP 数据中的参考纬度。如果未设置，MCIP 将使用两个真纬度的平均值。此设置可将 WRF 网格与现有 MM5 网格进行匹配。

7.10.3 编译和运行

7.10.3.1 编译 MCIP

第 5 章概述了如何安装和编译 CMAQ 程序。按照第 5 章中概述的步骤编译 MCIP 的新版本。

MCIP 使用 Makefile 编译。Makefile 中的配置选项仅包括用于构建可执行文件的编译器和编译器标志。Makefile 位于带有 MCIP 源代码的目录中（\$CMAQ_HOME/PREP/mcip/src）。要编译 MCIP，请 source config_cmaq.csh 文件进行源，并用以下命令行调用 Makefile：

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/mcip/src/  
source $CMAQ_HOME/config_cmaq.csh  
./make |& tee make.mcip.log
```

若用不同的编译器编译 MCIP，需更改 config_cmaq.csh 脚本中的编译器名称、位置和标志。

7.10.3.2 MCIP 运行

根据上述配置变量设置运行脚本。运行 MCIP 为 CCTM 生成气象输入数据：

```
cd $CMAQ_HOME/PREP/mcip/scripts  
./run_mcip.csh |& tee run_mcip.log
```

7.11 参考文献

Arya, P., 1984: Parametric relations for the atmospheric boundary layer. Bound.-Layer Meteor., 30,57 - 73.

Byun, D. W., and J. K. S. Ching, 1999: Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. U. S. Environmental Protection Agency Rep. EPA600/R99/030, 727 pp. [Available from Office of Research and Development, EPA, Washington, DC 20460.]

Hanna, S. R., G. A. Briggs, and R. P. Hosker, 1982: Handbook on atmospheric diffusion, U.S. DOE, DOE/TIC-11223, DE82002045, National Technical Info. Center, Springfield, VA.

Hicks, B.B., 1985: Behavior of turbulence statistics in the convective boundary layer. *J. Clim. Appl. Meteor.*, 24, 607 – 614.

Irwin, J. S., 1979: Scheme for estimating dispersion parameters as a function of release height, EPA-600/4-79-062, Research Triangle Park, NC.

Niewstadt, F. T. M., 1984: Some aspects of the turbulent stable boundary layer. *Bound.-Layer Meteor.*, 30, 31 – 55.

Pleim, J. E., A. Xiu, P. L. Finkelstein, and T. L. Otte, 2001: A coupled land-surface and dry deposition model and comparison to field measurements of surface heat, moisture, and ozone fluxes. *Water Air Soil Pollut. Focus*, 1, 243 – 252.

Venkatram, A., 1988: Dispersion in the stable boundary layer. Chapter 5, in *Lectures on Air Pollution Modeling*, A. Venkatram and J. Wyngaard, Eds., American Meteorology Society, Boston, MA.

Weil, J. C., 1988: Dispersion in the convective boundary layer. Chapter 4, in *Lectures on Air Pollution Modeling*, A. Venkatram and J. Wyngaard, Eds., American Meteorology Society, Boston, MA.

Wesely, M. L., 1989: Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models. *Atmos. Environ.*, 23, 1293 – 1304.

第八章 CMAQ 输入和输出文件

本章将讲解 CCTM 的输入和输出文件。

CMAQ 的输入文件是由一个适用于所有程序的区域定义文件；ICON 和 BCON 均有两套文件选项、MCIP 有两种输入文件（WRF/MM5 和地形文件）、JPROC 有 5 个必需输入文件和 1 个可选输入文件；对于 CCTM，排放、初始条件和边界条件文件、6 个气象数据文件和 1 个光解速率文件。对于大多数 CCTM 输入，建模的每个水平域都需要单独的数据集。当 CMAQ 配置为在线排放和沉降时，还需要额外的排放输入文件。

CMAQ 输出文件包括一组基本文件，其中包括气溶胶和气相物质浓度、干湿沉降预测值和能见度指标，以及一组用于诊断模型性能和在线计算排放的辅助输出文件集。

CMAQ 输入文件

本节介绍 CMAQ 程序所需的每个输入文件。本节首先讲解网格定义文件，CMAQ 多个程序均会使用该文件，然后逐个程序列出 CMAQ 输入文件要求。表 8-1 列出了每个 CMAQ 输入文件的数据源、文件类型以及时空维度等信息。从表 8-1 可以轻松地获取所需输入数据集的磁盘空间要求；每条数据记录为四个字节。I/O API 文件大小可以使用 CMAQ 文件中的变量数和时空分辨率进行计算。用户可查阅 CMAQ 发行说明获取额外的文件信息。

表 8-1. CMAQ 输入文件

文件名	文件类型	时间相关性	空间维度	数据源
通用的				
GRIDDESC	ASCII	n/a	n/a	user/MCIP
gc_matrix.nml	ASCII	n/a	n/a	CSV2NML
ae_matrix.nml	ASCII	n/a	n/a	CSV2NML
nr_matrix.nml	ASCII	n/a	n/a	CSV2NML
tr_matrix.nml	ASCII	n/a	n/a	CSV2NML
ICON				
IC_PROFILE	ASCII	年	n/a	user
CTM_CONC_1	GRDDED3	小时	X Y Z	CCTM
MET_CRO_3D	GRDDED3	小时	X Y Z	MCIP

文件名	文件类型	时间相关性	空间维度	数据源
BCON				
BC_PROFILE	ASCII	年	n/a	user
CTM_CONC_1	GRDDED3	小时	X Y Z	CCTM
MET_CRO_3D	GRDDED3	小时	X Y Z	MCIP
JPROC				
ET	ASCII	年	n/a	user
PROFILES	ASCII	年	n/a	user
O2ABS	ASCII	年	n/a	user
O3ABS	ASCII	年	n/a	user
TOMS	ASCII	变化的	n/a	user
CSQY	ASCII	年	n/a	user
MCIP				
InMetFiles	Binary or netCDF	通常小时的， 但有时比小时 频次更高	X Y Z	MM5 or WRF-ARW
InTerFile	Binary	n/a	X*Y	MM5 or WRF
InSatFiles				Spatial Allocator
CCTM				
INIT_CONC_1	GRDDED3	不变时的	X Y Z	ICON/CCTM
BNDY_CONC_1	BNDARY3	小时	[2 (X+1)+2 (Y+1)]	BCON
JTABLE	ASCII	日	n/a	JPROC
OMI	ASCII	日	n/a	
EMIS_1	GRDDED3	小时	X*Y*Z	SMOKE
OCEAN_1	GRDDED3	不变时的	X*Y	Spatial Allocator
GSPRO	ASCII	不变时的	N/a	User
B3GRD	GRDDED3	不变时的	X*Y	SMOKE
BIOSEASON	GRDDED3	不变时的	X*Y	Metscan
STK_GRPS_nn	GRDDED3	不变时的	X*Y	SMOKE
STK_EMIS_nn	GRDDED3	小时	X*Y	SMOKE
DUST_LU_1	GRDDED3	不变时的	X*Y	Spatial Allocator
DUST_LU_2	GRDDED3	不变时的	X*Y	Spatial Allocator
MODIS_FPAR	GRDDED3	日	X*Y	Spatial

文件名	文件类型	时间相关性	空间维度	数据源
				Allocator
CROPMAP01	GRDDED3	不变时的	X*Y	Cropcal
CROPMAP04	GRDDED3	不变时的	X*Y	Cropcal
CROPMAP08	GRDDED3	不变时的	X*Y	Cropcal
LTNGNO	GRDDED3	小时	X*Y*Z	User
NLDN_STRIKES	GRDDED3	小时	X*Y	
LTNGPARMS_FILE	GRDDED3	不变时的	X*Y	
BELD4_LU	GRDDED3	不变时的	X*Y	
E2C_SOIL	GRDDED3	不变时的	X*Y	
E2C_FERT	GRDDED3	日	X*Y	
MEDIA_CONC	GRDDED3	小时	X*Y	
INIT_GASC_1	GRDDED3		X*Y	
INIT_AERO_1	GRDDED3		X*Y	
INIT_NONR_1	GRDDED3		X*Y	
INIT_TRAC_1	GRDDED3		X*Y	
GRID_CRO_2D	GRDDED3	不变时的	X*Y	MCIP
GRID_CRO_3D	GRDDED3	不变时的	X*Y*Z	MCIP
GRID_BDY_2D	GRDDED3	不变时的	PERIM*Z	MCIP
GRID_DOT_2D	GRDDED3	不变时的	(X+1)*(Y+1)	MCIP
MET_BDY_3D	BNDARY3	小时	PERIM*Z	MCIP
MET_CRO_2D	GRDDED3	小时	X*Y	MCIP
MET_CRO_3D	GRDDED3	小时	X*Y*Z	MCIP
MET_DOT_3D	GRDDED3	小时	(X+1)*(Y+1)*Z	MCIP

• GRIDDESC: 水平区域定义

ICON、BCON、CCTM 均需使用。

除 JPROC 和 MCIP 之外，其他所有程序都使用 CMAQ 网格描述文件（GRIDDESC）定义建模区域的水平空间网格。GRIDDESC 遵循 I/O API 网格规定：有关详细信息，请参阅网格和坐标系部分。

GRIDDESC 是一种文本文件，包含两部分内容：水平坐标和网格描述。GRIDDESC 是存储水平坐标和网格描述并由 DSCGRID（）和 DSCCOORD（）实用程序读取的文本文件的逻辑名称。每段都有一行数据头（按照约定，它为数据记录中的列提供数据头）、一系列数据记录和一个名称字段为空的记录结束标志

(即, ")。使用 MCIP 自动生成 GRIDDESC 文件; 另外, 可以使用文本编辑器创建 GRIDDESC。

水平坐标部分(表 8-2)由坐标系名称、地图投影和描述性参数 P_ALP、P_BET、P_GAM、XCENT 和 YCENT 等组成的文本记录。

网格描述部分(表 8-3)由网格名称、相关的坐标系名称和描述性参数 XORIG、YORIG、XCELL、YCELL、NCOLS、NROWS 和 NTHIK 等组成的文本记录。对于一个典型的 CMAQ 应用程序, "点"和"交叉点"网格都在 GRIDDESC 文件中定义; 这些网格符合拓扑对偶原理, 即一个网格的顶点(角)对应于另一个网格的中心。

表 8-2. GRIDDESC 的水平坐标描述

行	列	名称	类型	描述
1	A	Header	String	以单引号分隔的数据头描述文件; 可以是空白的, 即 ' '。
2	A	COORDNAME	String	坐标描述名称(必需), 单引号分隔。
3	A	COORDTYPE	Int	定义地图投影类型的 I/O API 索引(必需)。
3	B	P_ALP	Double	第一个地图投影描述参数(取决于投影类型)。
3	C	P_BET	Double	第二个地图投影描述参数(取决于投影类型)。
3	D	P_GAM	Double	第三个地图投影描述参数(取决于投影类型)。
3	E	XCENT	Double	坐标中心经度。
3	F	YCENT	Double	坐标中心纬度。

表 8-3. GRIDDESC 网格描述

行	列	名字	类型	描述
1	A	Header	String	以单引号分隔的数据头描述文件; 可以是空白的, 即 ' '。
2	A	GRIDNAME	String	水平网格名称(必需), 单引号分隔。
3	A	COORDNAME	String	上一节中坐标描述名称(必需), 单引号分隔。

行	列	名字	类型	描述
3	B	XORIG	Double	相对于 (XCENT, YCENT) (取决于投影类型) 网格的左下角 (西南) 角的 X 坐标。
3	C	YORIG	Double	相对于 (XCENT, YCENT) (取决于投影类型) 网格的左下角 (西南) 角的 Y 坐标。
3	D	XCELL	Double	X 坐标网格分辨率 (取决于投影类型)。
3	E	YCELL	Double	Y 坐标网格分辨率 (取决于投影类型)。
3	F	NCOLS	Int	水平网格列数 (取决于投影类型)。
3	G	NROWS	Int	水平网格行数 (取决于投影类型)。
3	H	NTHIK	Int	边界周长厚度 (单元格数) (可选)

这些文件中的每个数据记录均由两个或三个列表格式的行组成 (即, 项目用空格或逗号分隔)。名称字段为带引号的字符串, 出现在第 1 行中。数字字段以双精度型给出, 出现在第 2 行或第 2 和 3 行。由以下形式记录, 具体取决于它们显示在 GRIDDESC 的第一段或第二段:

COORD-NAME COORDTYPE, P_ALP, P_BET, P_GAM XCENT, YCENT

或

COORD-NAME COORDTYPE, P_ALP, P_BET, P_GAM, XCENT, YCENT

和

GRID-NAME COORD-NAME, XORIG, YORIG, XCELL, YCELL NCOLS, NROWS, NTHIK

或

GRID-NAME COORD-NAME, XORIG, YORIG, XCELL, YCELL, NCOLS, NROWS, NTHIK

每个文件最多可包含 32 个坐标系和 256 个网格。这些文件足够小, 易存档, 具有较为简单的格式, 很容易"手工编写".

如下图所示的 GRIDDESC 文件示例：

```
' ' 'LAM_40N100W' 2 30.0 60.0 -100.0 -100.0 40.0 ' ' 'M_32_99TUT02'  
'LAM_40N100W' 544000.0 -992000.0 32000.0 32000.0 38 38 1'
```

此示例 GRIDDESC 文件中的水平坐标部分（第一部分）定义了一个名为 "LAM_40N100W" 的水平坐标。坐标体系为兰伯特投影，由坐标描述行的第一列控制，对应于 I/O API 多种网格类型的数字代码（2 = Lambert）。接下来的三个参数（P_ALP、P_BET 和 P_GAM）对不同的地图投影有不同的定义。对于 Lambert 投影，P_ALP 和 P_BET 是投影的真纬度（示例中为 30°N 和 60°N），P_GAM 是投影的中心子午线（示例中为 100°W）。最后两个参数 XCENT 和 YCENT 是笛卡尔坐标系网格中心的经纬度坐标，在示例中为 100°W 和 40°N。如果使用 WRF-ARW 气象模拟数据，用户应该意识到与该方法的区别。

上述网格定义示例部分描述了一个名为 "M_32_99TUT02" 的网格。网格定义以对该文件的坐标定义部分中的坐标名称的引用开始，此示例中，网格定义中引用了名为 "LAM_40N100W" 的坐标。网格定义中的后续两个参数（XORIG 和 YORIG）是以米为单位的 XCENT 和 YCENT 的东西偏移和南北偏移量（WRF-ARW 用法可能有所不同）。接下来的两个参数（XCELL 和 YCELL）是 X 和 Y 方向的水平网格间距（以米为单位，即 delta-x 和 delta-y）。接下来的两个参数（NCOLS 和 NROWS）是 X 和 Y 方向上的网格单元数。网格描述部分以边界单元格 NTHIK 结束，通常设置为 1。

{gc|ae|nr|tr}_matrix.nml: 物种名称列表文件

BCON、CCTM、ICON、CHEMMECH 均需使用。

在 CMAQ 程序执行过程中，使用不同类型模拟污染物的名单查找表来定义不同模型物种的参数。气相（gc）、气溶胶（ae）、非反应性（nr）和示踪（tr）物质名称列表包含了这些模型物种的参数，这些模型物种包括在这些不同的分类中。物种名称列表文件用于控制不同的 CMAQ 程序和进程如何处理这些模型物种。列表文件为每种模型物种定义以下参数：

- 排放代码 – 污染物所对应的排放物种（如果有的话）；对于 GC、NR 和 TR 物种，由排放文件中的变量名称确定允许的替代值；对于 AE 物种，模型源代码确定允许的值。

•排放系数 – 如果污染物被映射到一种排放物种上，则对排放统一应用一个比例因子。

•沉积速率 – 沉积速率是所映射的污染物的沉积速率；允许的速率在模型源代码中指定。

•沉积速率因子 – 如果污染物映射到沉积速率，则对该速率统一应用一个比例因子。

•初始/边界条件 – 污染物所映射的初始和边界条件物种；如果未指定，则将默认为物种名称。

•IC/BC 因子 – 如果污染物被映射到一个初始/边界条件物种，则对该浓度统一应用一个比例因子。

•清除 – 污染物所对应的物种（如果有的话）；允许在模型源代码中指定清除代理项。

•清除因子 – 如果污染物被映射到一个要清除的物种，则对该清除率统一应用一个比例因子。

•气体到气溶胶转换 – 气相污染物浓度从气相转化成气溶胶相的气溶胶化学物质（如果有的话）。

•气体到液体转换 – 为了模拟云水中的化学成分，气体污染物浓度进入哪个云化学种类。

•气溶胶到液体转换 – 为了模拟云水中的化学成分，气溶胶污染物浓度会涉及到哪些云化学成分。

• 传输 – 是模型中通过对流和扩散传输的污染物。

•干沉降 – 将污染物写入干沉降输出文件。

•湿沉降 – 将污染物写入湿沉降输出文件。

•浓度 – 将污染物写入瞬时浓度输出文件。

名称列表文件包含描述所在文件中包含的物种类别的头信息、文件中包含的参数数量、描述参数字段的头信息、以及包含每个模型物种配置参数的一系列行。表 8-4 包含气相（GC）物种名称列表文件格式。其他物种（AE、NR、TR）的名称列表文件类似于表 8-4 所示的格式。

表 8-4. GC 物种名称列表文件格式

行	列	名字	类型	描述
1		!Revision Control System(RCS file)		
2		Header: filename, version, date/time, author		
4		File type	String	&GC_nml
6		Number of group 1 surrogate params	String	n_surr1 = x, x 代表一系列代替物质和代替因子的数量, 例如: 排放、沉降、初始/边界条件, 清除。
7		Number of group2 surrogate params	String	n_surr2 = x, x 仅代表一种物质, 例如: 气体-气溶胶转换、气体-液体转换和气溶胶-液体转换。
8		Number of control params	String	n_ctrl = x, Y/N 参数控制污染物是否可以传输, 是否写入干沉降、湿沉降和浓度输出文件。
10		Header ID	String	TYPE_HEADER =
11		HEADER	String	数据头文件, 用单引号括起来。
12		Matrix ID	String	TYPE_MATRIX =
13	1	SPC	String	CMAQ 污染物名称, 例如: NO, HNO3, PAR; 依赖于化学机制。
	2	MOLWT	Integer	污染物分子量。
	3	EMIS_SUR	String	CMAQ 排放污染物名称。
	4	EMIS_FAC	Real	输入排放物的比例因子。
	5	DEPV_SUR	String	CMAQ 污染物沉降速率参数。
	6	DEPV_FAC	Real	沉降速率比例因子。
	7	ICBC_SUR	String	CMAQ IC/BC 污染物名称。
	8	ICBC_FAC	Real	IC/BC 浓度比例因子。
	9	SCAV_SUR	String	湿沉降清楚系数。
	10	SCAV_FAC	Real	清除比例因子。
	11	G2AE_SUR	String	气体-气溶胶转换物质。

行	列	名字	类型	描述
	12	G2AQ_SUR	String	气体-液体转换物质。
	13	TRNS	Yes/No	传输交换参数。注：启用或关闭“TRNS”选项可控制污染物的对流和扩散，“ADV”和“DIFF”参数分别控制污染物的对流和扩散。
	14	DDEP	Yes/No	干沉降输出文件。
	15	WDEP	Yes/No	湿沉降输出文件。
	16	CONC	Yes/No	浓度输出文件。
...	...	...	...	气相污染物的数量。

其他污染物类别的名称列表文件的配置与表 8-4 所示的气相物种配置相似。有关示例，请参阅 GC 名称列表物种文件的 `cb05e51_ae6_aq` 机制。

IC_PROFILE: 初始条件垂直剖面文件
在 ICON 中使用。

ICON 可以从两种不同类型的输入文件生成初始条件。第一种文件是垂直剖面文本文件，它列出了在空间和时间上固定的不同模型层的物种浓度。采用垂直剖面文本文件配置 ICON 生成初始条件时，在编译程序时选择“prof”输入模块（见第 8 章）。IC_PROFILE 文件是文本格式的垂直剖面文件，本节将对此文件进行说明。IC_PROFILE 文件必须由用户编制，可以根据气候平均的观测数据编制，也可以根据区域模拟数据编制。第二种文件，ICON 可使用前期 CMAQ 运行的浓度文件生成初始条件。该文件是 CTM_CONC_1，将在下一节进行介绍。

IC_PROFILE 以头文件开始，头文件包含描述数据的注释部分，以及一个定义文件中垂直层数、污染物种类数量以及垂直层分布的文件描述部分。第二部分是起始日期，它不被 ICON 使用。

IC_PROFILE 文件中的每行对应不同的污染物，并以污染物的名称开头，名称后为每层的化学浓度。气相物质单位为 ppmV，气溶胶物质单位为 $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ 。IC_PROFILE 文件的垂直层结构不需要与建模的垂直层结构完全对应；ICON 程序会将数据插值为正确的垂直格式进行模拟。

初始场仅为模拟的第一小时提供条件。基于垂直剖面文本文件的初始场包括输入于 CCTM 的网格文件，该文件在每个模拟层都有水平均匀的物质浓度。对

于水平方向的空间解析初始场，ICON 有必要使用另一种输入文件类型，即现有的 CCTM 浓度文件（CTM_CONC_1）。

表 8-5 中详细介绍了初始场垂直配置文件的格式。配置文件的头文件是列表格式，而文件的数据部分是固定格式。

表 8-5. IC_PROFILE 格式说明

列	名字	类	描述
		型	
1-3	Text Header	String	描述目录和初始场源（可选）。
4	A NUM_SIGMA_LVL	Int	文件中包含的 sigma 层数（必需）
	B NUM_POLL	Int	文件中包含的污染物数量（必需）
	C SIGMA_LVL	Real	sigma-p 层的垂直坐标;设置时，比 NUM_SIGMA_LVL 参数多 1（必需）。
5	A STDATE	String	起始日期，YYYYDD（可选）。
	B STTIME	String	起始日期，HH（可选）。
6	1-10 SPECIES1	String	污染物名称，以双引号括起来（必需）。
	12-20 LAYER1_IC	Exp	Sigma 最低层的 IC 物质 1 浓度（必需）。
	23-31 LAYER2_IC	Exp	Sigma 第二层的 IC 物质 1 浓度（必需）。
	34-42 LAYER3_IC	Exp	Sigma 第三层的 IC 物质 1 浓度（必需）。
	45-53 LAYER4_IC	Exp	Sigma 第四层的 IC 物质 1 浓度（必需）。
	LAYERX_IC	Exp	Sigma 第 X 层的 IC 物质 1 浓度（必需）。
7	1-10 SPECIES2	String	污染物名称，以双号括起来（必需）。
	12-20 LAYER1_IC	Exp	Sigma 最低层的 IC 物质 2 浓度（必需）。
	23-31 LAYER2_IC	Exp	Sigma 第二层的 IC 物质 2 浓度（必需）。
	34-42 LAYER3_IC	Exp	Sigma 第三层的 IC 物质 2 浓度（必需）。
	45-53 LAYER4_IC	Exp	Sigma 第四层的 IC 物质 2 浓度（必需）。
	LAYERX_IC	Exp	Sigma 第 X 层的 IC 物质 2 浓度（必需）。
Z	1-10 SPECIESZ	String	污染物名称，以双号括起来（必需）。
	12-20 LAYER1_IC	String	Sigma 最低层的 IC 物质 Z 浓度（必需）。
	23-31 LAYER2_IC	Exp	Sigma 第二层的 IC 物质 Z 浓度（必需）。
	34-42 LAYER3_IC	Exp	Sigma 第三层的 IC 物质 Z 浓度（必需）。
	45-53 LAYER4_IC	Exp	Sigma 第四层的 IC 物质 Z 浓度（必需）。
	LAYERX_IC	Exp	Sigma 第 X 层的 IC 物质 Z 浓度（必需）。

IC_PROFILE 文件的四个部分的示例如下所示。

初始条件示例：生成这些初始条件的垂直坐标是地形跟随 sigma 坐标系。下面列出了 sigma 层的数量和设置的 sigma 层。

```
6 55 1.00 0.98 0.93 0.84 0.60 0.30 0.00
1988180 00
"SO2 " 0.300E-03 0.200E-03 0.100E-03 0.100E-03 0.200E-04 0.100E-04
####BC_PROFILE: 边界条件垂直剖面文件
```

在 BCON 中使用。

与 ICON 程序一样，BCON 也可由两种不同类型的输入文件生成边界条件。第一种文件是垂直剖面文本文件，该文件列出了在时间和空间上固定的不同模型层的物种浓度。从垂直剖面文本文件配置 BCON 生成边界条件，在编译程序时选择“prof”输入模块（见第 5.2 章节）。BC_PROFILE 文件是文本格式的垂直剖面文件，本节将对此文件进行说明。BC_PROFILE 文件必须由用户提供，该文件可由气候平均观测数据或模拟数据生成。第二种文件，BCON 可使用前期 CMAQ 运行的浓度文件生成初始条件。该文件是 CTM_CONC_1，将在下一节进行介绍。

BC_PROFILE 以头文件开始，头文件包含描述数据的注释部分，垂直层数，污染物种类以及垂直层分布量。第二部分是起始日期。BCON 输入由四部分数据组成，这些数据对应于模型网格的横向边界（即北、南、东和西）。BCON 输入文件包含一个字段，该字段位于每个数据节之前，用于指示数据节描述的水平边界。

BC_PROFILE 文件的数据部分格式与 IC_PROFILE 文件相同。每行对应不同的污染物，以污染物的名称开头，名称后为每层的化学浓度。气相物质单位为 ppmV，气溶胶物质单位为 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 。BC_PROFILE 文件的垂直层结构不需要与建模的垂直层结构完全对应；BCON 程序会将数据插值为正确的垂直格式进行模拟。

边界条件可以是时间无关（静态）或时间相关（动态）。使用 BC_PROFILE 垂直剖面文本文件生成边界条件，该边界在每个模拟层的四个水平边界上都是静态均匀的。对于空间解析（水平方向）和时间解析的边界条件，有必要将其他类型输入文件用于 BCON，CTM_CONC_1 是现有的 CCTM 浓度文件。

表 8-6 详细介绍了边界条件的垂直配置文件的格式。配置文件的头文件是列表格式，而文件的数据部分是固定格式。

表 8-6. BC_PROFILE 格式说明

行	列	名字	类型	描述
1-3		Text Header	String	描述目录和初始场源（可

行	列	名字	类型	描述
				选)。
4	A	NUM_SIGMA_LVL	Int	文件中包含的 sigma 层数 (必需)
	B	NUM_POLL	Int	文件中包含的污染物数量 (必需)
	C	SIGMA_LVL	Real	sigma-p 层的垂直坐标; 设置时, 比 NUM_SIGMA_LVL 参数多 1 (必需)。
4	n			
5	A	STDATE	String	起始日期, YYYYDDD(可选)。
	B	STTIME	String	起始日期, HH (可选)。
6	A	Direction	String	北、南、东、西; 边界描述 (必需)。
7	1-10	SPECIES1	String	污染物名称, 以双引号括起来 (必需)。
	12-20	LAYER1_BC	Exp	Sigma 最低层的 BC 物质 1 浓度 (必需)。
	23-31	LAYER2_BC	Exp	Sigma 第二层的 BC 物质 1 浓度 (必需)。
	34-42	LAYER3_BC	Exp	Sigma 第三层的 BC 物质 1 浓度 (必需)。
	45-53	LAYER4_BC	Exp	Sigma 第四层的 BC 物质 1 浓度 (必需)。
		LAYERX_BC	Exp	Sigma 第 X 层的 BC 物质 1 浓度 (必需)。
8	1-10	SPECIES2	String	污染物名称, 以双号括起来 (必需)。
	12-20	LAYER1_BC	Exp	Sigma 最低层的 BC 物质 2 浓度 (必需)。
	23-31	LAYER2_BC	Exp	Sigma 第二层的 BC 物质 2 浓度 (必需)。
	34-42	LAYER3_BC	Exp	Sigma 第三层的 BC 物质 2 浓度 (必需)。
	45-53	LAYER4_BC	Exp	Sigma 第四层的 BC 物质 2 浓度 (必需)。
		LAYERX_BC	Exp	Sigma 第 X 层的 BC 物质 2 浓度 (必需)。

行	列	名字	类型	描述
				浓度（必需）。
Y	A	Direction	String	北、南、东、西；水平边界描述（必需）。
Z+1	1-10	SPECIESZ	String	污染物名称，以双号括起来（必需）。
	12-20	LAYER1_BC	Exp	Sigma 最低层的 BC 物质 Z 浓度（必需）。
	23-31	LAYER2_BC	Exp	Sigma 第二层的 BC 物质 Z 浓度（必需）。
	34-42	LAYER3_BC	Exp	Sigma 第三层的 BC 物质 Z 浓度（必需）。
	45-53	LAYER4_BC	Exp	Sigma 第四层的 BC 物质 Z 浓度（必需）。
		LAYERX_BC	Exp	Sigma 第 X 层的 BC 物质 Z 浓度（必需）。

下面给出了 BC_PROFILE 示例文件的重要部分。

```
6 55 1.00 0.98 0.93 0.84 0.60 0.30 0.00
1988180 00
North
"SO2 " 0.300E-03 0.200E-03 0.100E-03 0.100E-03 0.200E-04 0.100E-04
West
"SO2 " 0.300E-03 0.200E-03 0.100E-03 0.100E-03 0.200E-04 0.100E-04
### CTM_CONC_1: CCTM 浓度文件
```

在 ICON 和 BCON 中使用。

I/O API GRDDED3 格式的 CCTM 浓度输出文件（CTM_CONC_1）可用于创建时空变化的初始和边界条件。编译 ICON 和 BCON 程序时选择“m3conc”输入模块，使用 CCTM 浓度文件创建初始和边界条件（详见 5.2 节 BCON 和 5.5 节 ICON）。输入浓度文件必须覆盖模拟时空范围。ICON 和 BCON 都需要用朱利安起始日期，从浓度文件中提取起始模拟时间。BCON 还需要运行长度确定输入文件中边界条件的时间步长数。对于嵌套模拟，嵌套的初始和边界条件必须位于同一投影浓度输入文件的模拟范围内。

CSQY: 吸收横截面和量子量

在 JPROC 中使用。

CSQY 是文本数据文件的逻辑名称，其中包含用于特殊光解反应的吸收横截面和量子产率数据。这些文件中的数据以波长函数给出，对应于 CMAQ 中每个化学机制的标准光解反应。灵活的格式允许用户自己编写新数据并测试应用。

文本格式的 CSQY 文件以可应用光解反应的数字和列表开头。CSQY 文件的数据部分包括（1）反应名称/ID（2）温度波段（3）波长箱数（4）波长箱的起始、效应和结束以及每个内联波段的光子通量。对于每个波长箱、温度波段和反应，以吸收横截面平均超过 UCI 太阳通量（cm），并且量子量平均超过 UCI 太阳通量的数据作为列。CSQY 文件的数据部分采用空间分隔的自由格式。表 8-7 详细介绍了 CSQY 文件格式。

表 8-7. CSQY 格式描述

行	列	名称	类型	描述
1	A	CSQY Mechanism Table Name	String	说明化学机制名称。此名称在化学机制描述文件中交叉引用（必需）
1	A	NPHOTAB	String	光解反应数
2	A	Comments	String	以“!”注释说明
3	A	Name	String	反应名称
repeat for all (NPHOTAB) reaction names 3+NPHOTA B	A	Name	String	反应名称
3+NPHOTA B+1	A	NTEMP	Int or Real	温度带数
3+NPHOTA B+2	A	Number	Integer	温度指数
	B	TEMP	Real	开尔文温度
repeat for all	A	Comments	String	在数据标题处以“!”注释说明， I,

行	列	名称	类型	描述
NTEMP values 3+NPHOTA B+NTEMP				START_WL_BIN (nm), EFFECT _WL_BIN_ (nm), END_WL_BIN _(nm), photon_flux (cm-2* s-1),
3+NPHOTA B+NTEMP+ 1	A	Number of Inline Photolysis Bands	Integer	
	B	Start Wavelength	Real	起始波长箱
	C	Effect Wavelength	Real	效果波长箱
	D	End Wavelength	Real	结束波长箱
	E	Photon Flux	Real	光子通量
3+NPHOTA B+NTEMP+ 2	A	Comments	String	以 “!” 注释, CS = 吸收横 截面平均超过 UCI 太阳通 量
3+NPHOTA B+NTEMP+ 3	A	Comments	String	以 “!” 注释, QY = 量子量 平均超过 UCI 太阳通量
3+NPHOTA B+NTEMP+ 4	A	Comments	String	以 “!” 注释, EQY = eCS*eQY/CS 平均超过太阳 通量和 UCI 模型中的 77 箱 数
3+NPHOTA B+NTEMP+ 5	A	Comments	String	以 “!” 注释, 光解反应、 CS 或 EQY 和波长箱的标 题
3+NPHOTA B+NTEMP+ 6	A	Reaction Name	String	反应名称
	B	Quantity	String	Cs
	C	TEMP	Real	温度
	D	WBIN (1)	Real or EXP	BIN 1 的吸收横截面 (CS) 值
	E	WBIN (2)	Real or EXP	BIN 2 的吸收横截面 (CS) 值
	F	WBIN (3)	Real or EXP	BIN 3 的吸收横截面 (CS) 值
	G	WBIN (4)	Real or	BIN 4 的吸收横截面 (CS)

行	列	名称	类型	描述
3+NPHOTA B+NTEMP+ 7	H	WBIN (5)	EXP Real or EXP	值 BIN 5 的吸收横截面 (CS) 值
	I	WBIN (6)	Real or EXP	BIN 6 的吸收横截面 (CS) 值
	J	WBIN (7)	Real or EXP	BIN 7 的吸收横截面 (CS) 值
	A	Reaction Name	String	反应名称
	B	Quantity	String	EQY
	C	TEMP	Real	温度
	D	WBIN (1)	Real or EXP	BIN 1 的吸收横截面 (EQY) 值
	E	WBIN (2)	Real or EXP	BIN 2 的吸收横截面 (EQY) 值
	F	WBIN (3)	Real or EXP	BIN 3 的吸收横截面 (EQY) 值
	G	WBIN (4)	Real or EXP	BIN 4 的吸收横截面 (EQY) 值
	H	WBIN (5)	Real or EXP	BIN 5 的吸收横截面 (EQY) 值
	I	WBIN (6)	Real or EXP	BIN 6 的吸收横截面 (EQY) 值
	J	WBIN (7)	Real or EXP	BIN 7 的吸收横截面 (EQY) 值

8.0.1 ET：外星辐照度

在 JPROC 中使用。

ET 是文本数据文件的逻辑名称，包含作为波长函数的地外辐射。外星辐照度文件的格式类似于 CSQY 文件。文件以数据说明行开始;注释行前面有一个"! "。与 CSQY 文件一样，数据说明行包含数据间隔字段数。数据部分采用空间分隔的自由格式，并列出每个波长的入射太阳辐射 (nm) 和辐照度 (光子 cm-2 s-1) 的波长，每行对应于特定的波长间隔。表 8-8 细介绍了文件格式。

表 8-8.. ET 文件格式描述

行	列	名称	类型	描述
1	A	Comments	String	注释行以"!"开始, 描述文件内容并记录数据源(可选)
n				
n+1	A	Data Location	String	测量波长数据位置的字段; 可能包括: 开始、结束、居中、点(必需)
n+2	A	Multiplier	String	适用于光解方程的乘法因子; 行以 FAC=开头; 以真实或指数格式列出的因子(必需)
n+3	A	Wavelength	Int or Real	与 ET 数据对应的波长; 单位为 nm (必需)
	B	Extra - terrestrial Irradiance	Real or Exp	估计到达地球大气层外部的光子通量; 单位为光子 $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ (必需)
n+4	A	Wavelength	Int	与 ET 数据对应的波长; 单位为 nm (必需)
	B	Extra - terrestrial Irradiance	Real or Exp	对到达地球大气层外部的光子通量的估计; 单位为光子 $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ (必需)
n+X				

有关 ET 文件的示例, 请参阅此链接。ET 文件重要部分的示例如下所示。

! Extraterrestrial Irradiance

! Taken from the RADM data---derived from the WMO 1985 report Table 7-4

! Format: wl, et_irradBeginning

! With FAC, units are (photons $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)

FAC=1.0

185.185 3.620E+11

186.916 4.730E+11

PROFILES: 大气垂直廓线

在 JPROC 中使用。

PROFILES 是文本数据文件的逻辑名称,其中包含臭氧、气溶胶衰减、温度、气压和多布森值的季节性和垂直廓线数据。PROFILES 文件中提供的文本格式数据为 19 个纬度带 (90°N 至 90°S) 和 51 个高度 (0 至 50 公里) 三个不同的数据部分。第一个数据部分包含 O3 浓度 (molecules cm-3)、空气温度 (K) 和空气密度 (molecules cm-3) 的季节性和纬度相关的垂直廓线。第二个数据部分包含 19 个纬度带的每月多布森值。最后一个数据部分包含 1976 年美国标准大气的空气温度 (K)、空气密度 (molecules cm-3)、臭氧浓度 (molecules cm-3) 和气溶胶衰减系数 (km-1) 的垂直廓线。

PROFILES 文件的第一个数据部分分为 228 (19x3x4) 数据块,每个数据块表示 19 个纬度带的三个变量 (O3、空气温度和空气密度),代表一年中的 4 个季节。每个数据块包含每个变量的 51 个值,表示 0 到 50 公里高度的标准条件。数据按季节 (春季、夏季、秋季、冬季)、变量 (O3、空气温度、空气密度)、纬度和高度排序,从一般到具体。例如,PROFILES 文件中的第一个数据块包含 90°N 至 80°N 范围内,从海平面 0 至 50 km 的高度的春季 O3 浓度垂直廓线;第一个值代表 0km 处的值,最后一个值代表 50km 处的值。下一个数据块也是代表春季 O3 浓度廓线,但纬度范围是从 80°N 至 70°N。接下来的 17 个数据块表示 19 个纬度带的其他范围的春季 O3 浓度廓线,最后一个数据块表示 80°S 至 90°S 范围内的数据。第 20 个数据块开始表述 90°N 至 80°N°的春季空气温度廓线,后面是其余 18 个春季空气温度廓线数据块。以下 19 个数据块遵循相同的空气密度格式。其后,对夏季配置文件、秋季配置文件以及冬季配置文件重复 19x3 数据块。

PROFILES 文件中的第二个数据部分包含每月平均多布森值。数据分为 12 行 (1 月至 12 月) 和 19 列 (90°N-80°N 至 80°S-90°S)。

PROFILES 文件的最后一个数据部分包含 1976 年美国空气温度、空气密度、臭氧浓度和气溶胶衰减系数标准的垂直廓线。数据包括 51 行,对应于海拔 0 到 50 公里,每行有 4 列,代表 4 个要素值。有关 PROFILES 文件示例,请参阅此链接。表 8-9 中详细介绍了文件格式。

表 8-9.配置文件文件格式说明

行	列	名称	类型	描述
1	A	Ozone concentration at	Exp	季节、纬度和垂直层臭氧

行	列	名称	类型	描述
		Season 1, Latitude 1, Level 1	(E10.3)	值;单位为 molecules cm ⁻³ (必需)
	B	Ozone concentration at Season 1, Latitude 1, Level 2	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层臭氧 值;单位为 molecules cm ⁻³ (必需)
127	A	Ozone concentration at Season 1, Latitude 19, Level 1	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层臭氧 值;单位为 molecules cm ⁻³ (必需)
	B	Ozone concentration at Season 1, Latitude 19, Level 2	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层臭氧 值;单位为 molecules cm ⁻³ (必需)
134	A	Temperature profiles at Season 1, Latitude 1, Level 1	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层温度 值;单位为 K (必需)
	B	Temperature profiles at Season 1, Latitude 1, Level 2	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层温度 值;单位为 K (必需)
260	A	Temperature profiles at Season 1, Latitude 19, Level 1	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层温度 值;单位为 K (必需)
	B	Temperature profiles at Season 1, Latitude 19, Level 2	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层温度 值;单位为 K (必需)
267	A	Air density profiles at Season 1, Latitude 1, Level 1	Exp (E10.3)	月、纬度和垂直层空气密度 值;单位为 molecules cm ⁻³ (必需)
	B	Air density profiles at Season 1, Latitude 1, Level 2	Exp (E10.3)	月、纬度和垂直层空气密度 值;单位为 molecules cm ⁻³ (必需)
393	A	Air density profiles at Season 1, Latitude 19, Level 1	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层空气密 度值;单位为 molecules cm ⁻³ (必需)
	B	Air density profiles at Season 1, Latitude 19, Level 2	Exp (E10.3)	季节、纬度和垂直层空气密 度值;单位为 molecules cm ⁻³ (必需)
1596	A	Air density profiles at	Exp	季节、纬度和垂直层空气密

行	列	名称	类型	描述
		Season 4, Latitude 19, Level 51	(E10.3)	度值;单位为 molecules cm-3 (必需)
1597	A	Average Dobson Values at Latitude 1, Month 1	Real	月、纬度平均多布森值 (必需)
1597	B	Average Dobson Values at Latitude 2, Month 1	Real	月、纬度平均多布森值 (必需)
1608	A	Average Dobson Values at Latitude 19, Month 12	Real	月、纬度平均多布森值 (必需)
1609	A	Air Temperature at Level 1	Real	标准大气的空气温度廓线; 单位为 K (必需)
	B	Air Density at Level 1	Real or Exp	标准大气的空气密度廓线; 单位为 molecules cm-3 (必需)
	C	Ozone Concentration at Level 1	Real or Exp	标准大气的臭氧浓度廓线; 单位为 molecules cm-3 (必需)
	D	Aerosol Attenuation at Level 1	Real or Exp	标准大气的气溶胶衰减系数; 单位为 km-1 (必需)
1659	A	Air Temperature at Level 51	Real	标准大气的空气温度廓线, 单位为 K (必需)
	B	Air Pressure at Level 51	Real or Exp	标准大气的气压廓线, 单位为 molecules (必需)
	C	Ozone Concentration at Level 51	Real or Exp	标准大气的臭氧浓度廓线, 单位为 molecules cm-3 (必需)
	D	Aerosol Attenuation at Level 51	Real or Exp	标准大气的气溶胶衰减系数; 单位为 km-1 (必需)

###TOMS: 臭氧光谱仪观测数据

在 JPROC 中使用。

TOMS 是文本数据文件的逻辑名称, 其中包含由太阳同步极轨 Nimbus 卫星上的臭氧光谱仪在多布森单元中采集的臭氧柱总测量值。数据以地球上的位置 (纬度和经度) 为函数, 针对特定的朱利安日期提供。

表 8-10 中提供了文件格式的详细说明。这些文件是固定格式。

表 8-10. TOMS 数据配置文件

行	列	名称	类型	描述
1	A	Julian Day	Int	文件起始朱利安日期,DDD; 前面有 6 个空格(必填)
	B	Year	Int	文件起始年份,YYYY;前面 有 9 个空格(必填)
2		Header	String	描述文件内容的 80 个字符 行(如果省略,则需要行占 位符)
3		Header	String	描述文件内容的 80 个字符 行(如果省略,则需要行占 位符)
4	A	TOMS Data	Int	以经度和纬度划分的 TOMS 臭氧观测值,###;行以空格 开头,然后每行空间分隔 25 个值(必需)

O2ABS: 氧分子吸收横截面数据
在 JPROC 中使用。

O2ABS 是文本数据文件的逻辑名称,其中包含 O2 光解的吸收横截面和量子产额数据。文件中数据以波长函数表示。此文件格式与 CSQY 文件相同。

O3ABS: 臭氧吸收横截面数据
在 JPROC 中使用。

O3ABS 是文本数据文件的逻辑名称,其中包含 O3 光解的吸收横截面和量子产额数据。文件中数据以波长函数表示。有关示例,请参阅此链接。此文件格式与 CSQY 文件相同。

InMetFiles: MM5 或 WRF-ARW 输出文件列表
在 MCIP 中使用。

MCIP 可以读取 MM5(version 3)二进制输出文件(MMOUT)和 WRF-ARW 的 netCDF 文件,生成 I/O API 格式的 netCDF 文件,用于输入到 CMAQ 和排放模型。有关 MMOUT 文件格式的详细信息,请访问 MM5 主页。有关 WRF 输出文件的格式的信息,请访问 WRF-ARW 主页。

InTerFile: 地形文件

在 MCIP 中使用。

MM5 或 WRF 输出文件包含土地利用数据。此文件由 MM5 程序 TERRAIN 模块和 WRF 程序 GEOGRID 模块生成。

InSatFiles: GOES 云数据文件

在 MCIP 中使用。

[EPA: 需要此文件的说明]

BNDY_CONC_1: 边界条件

在 CCTM 中使用。

CMAQ 边界条件数据为 BNDARY3 文件类型。边界条件由处理器 BCON 生成, CCTM 可以读取边界条件数据, 并通过指针系统将其与内部数据相关联。此指针系统指定起始网格新边界一侧的数据 (即模拟范围的南部、东部、北部或西部)。图 8-1 说明了此输入数据的结构以及边界数据与 CMAQ 模块内部数据的关系。

每个建模的物种都应包含在 BNDY_CONC_1 文件中。如果此文件中不包含某些建模物种, 则这些物种的边界条件将默认设置为 1×10^{-30} 。CMAQ 模拟范围的周长为 1 个网格单元, 其中边界单元格数 = $(2NROW) + (2NCOL) + 4$ 。图 8-2 是 CMAQ 边界条件文件的图形示例, 西部和北部边界的臭氧值为 0.035ppmV, 而东边界和南边界的值为 0.030ppmV。

图 8-1. CMAQ 边界条件文件的插图

图 8-2. CMAQ 网格化边界条件文件的图形示例

INIT_CONC_1: 初始条件

在 CCTM 中使用。

每个建模物种的初始浓度必须输入于 CMAQ 中。初始条件输入文件类型为 GRDDED3, 不随时间变化。文件数据以这种方式循环: 按列、行、层、变量。初始条件文件的结构与浓度文件相同, 因此第 1 天最后一小时的预测浓度可用于初始化第 2 天的模拟。这使 CMAQ 用户以任何方式灵活地分割模拟。图 8-3 是

CMAQ 初始条件文件的示例。该文件显示空间变化的数据，这些数据可作为起始模拟的初始条件（即 1996 年 6 月 25 日 0: 00: 00）。

图 8-3. CMAQ 网格化初始条件文件的图形示例

JTABLE: 光解率查询表

在 CCTM 中使用。

CMAQ 中每个气相机制都包含光解反应，需要根据不同海拔高度和纬度带的动力学数据预先计算出晴空反应速率。JPROC 程序生成用于输入 CMAQ 的光解率查询表。JTABLE 光解文件包含一个描述文件内容的头部分，以及一个数据部分，其中包含一天中不同时间段的晴天光解速率。

头文件的第一行包含文件中数据的朱利安日期。此日期对应于使用 JTABLE 数据模拟的起始日期。接下来是四组数据，用于描述文件中包含的数据高度(m)、纬度(度)、小时角度(从中午开始)和光解反应名称。每个数据对应一行，描述每个变量名和变量数值。高度(variable = LEVELS)、纬度(variable = LATITUDES)和小时角(variable = HOUR ANGLES)变量具有固定的值，这些值被硬编码在程序 JPROC (jproc.F) 中。反应名称(variable = PHOTOLYTIC REACTIONS)取决于机制，随气相机制的选择而变化。

文件的数据部分包括使用 3 位代码映射到头的数据块。每个数据块对应于高度、纬度和光解反应，并包含标题中列出的 9 个小时角的晴天光解速率值。3 位数的代码将高度/纬度/反应编号映射到数据块。例如，使用代码"3 1 2"的数据块对应于文件数据说明部分列出的高度 3、纬度 1 和反应 2。表 8-11 中详细介绍了 JTABLE 文件格式

表 8-11. JTABLE 文件格式说明

行	列	名称	类型	描述
1	A	JVDATE	String	朱利安文件的日期;YYYYDD (必需)
	B	Comment	String	朱利安日期字段的描述(可选)
2	A	JVHT	Int	数据垂直层数 (必需)
	B	Level Field Indicator	String	单词"LEVELS" (必需)
	C	Comment	String	每层说明;以"(m)"为单位 (可选)

行	列	名称	类型	描述
3	A	XZJV_1	Real	第 1 层高度; 以“(m)”为单位 (必需)
	B	XZJV_2	Real	第 2 层高度; 以“(m)”为单位 (必需)
	x	XZJV_x	Real	第 x 层高度; 以“(m)”为单位 (必需)
4	A	JVHT	Int	数据覆盖的纬度范围 (必需)
	B	Latitude Field Indicator	String	单词“LATITUDES”(“必需)
	C	Comment	String	纬度说明; 以“(deg)”为单位 (可选)
5	A	XLATJV_1	Real	纬度 1; 以度为单位 (必需)
	B	XLATJV_2	Real	纬度 2; 以度为单位 (必需)
	x	XLATJV_x	Real	纬度 x; 以度为单位 (必需)
6	A	JVTMAX	Int	数据覆盖的小时角度数 (必需)
	B	Hour Angle Field Indicator	String	单词“ HOUR ANGLES ” (必需)
	C	Comment	String	小时角度字段的说明; 通常“(从中午开始)” (可选)
7	A	XHAJV_1	Real	小时角 1; 中午开始的几小时内 (必需)
	B	XHAJV_2	Real	小时角 2; 中午开始的几小时内 (必需)
	x	XHAJV_x	Real	小时角 x; 中午开始的几小时内 (必需)
8	A	JPHOT	Int	数据包含的光解反应种数 (必需)
	B	Reaction Field Indicator	String	单词“ PHOTOLYTIC REACTIONS ” (必需)
	C	Comment	String	反应类型的说明 (可选)
9	A	PHOT_NM_1	String	以单引号引用的光解反应 1 (必需)
	B	Delimiter	Char	将反应名称与乘数分离的逗号分隔符 (必需)

行	列	名称	类型	描述
10	C	ACLD_1	Real	反应 1 乘数（必需）
	A	PHOT_NM_2	String	以单引号引用的光解反应 2（必需）
	B	Delimiter	Char	将反应名称与乘数分离的逗号分隔符（必需）
x	C	ACLD_2	Real	反应 2 乘数（必需）
	A	PHOT_NM_x	String	以单引号引用的光解反应 x（必需）
	B	Delimiter	Char	将反应名称与乘数分离的逗号分隔符（必需）
x+1	C	ACLD_x	Real	反应 x 乘数（必需）
	A	NHTO	Int	垂直层说明段（必需）
	B	NLATO	Int	纬度说明段（必需）
x+2	C	NPHOTO	Int	光解反应说明段（必需）
	A	XJVAL_1	Real or Exp	NHTO、NLATO、NPHOTO 和小时角 1 的晴天光解率（必需）
	B	XJVAL_2	Real or Exp	NHTO、NLATO、NPHOTO 和小时角 2 的晴天光解率（必需）
JVTMAX	C	XJVAL_3	Real or Exp	NHTO、NLATO、NPHOTO 和小时角 3 的晴天光解率（必需）
		XJVAL_(JVTMAX)	Real or Exp	与 JVTMAX 相对应的 NHTO、NLATO、NPHOTO 和小时角晴天光解率（必需）
x+3	A	NHTO	Int	垂直层说明段（必需）
	B	NLATO	Int	纬度说明段（必需）
	C	NPHOTO	Int	光解反应说明段（必需）
x+4	A	XJVAL_1	Real or Exp	NHTO、NLATO、NPHOTO 和小时角 1 的晴天光解率（必需）
	B	XJVAL_2	Real or Exp	NHTO、NLATO、NPHOTO 和小时角 2 的晴天光解率（必需）
	C	XJVAL_3	Real or Exp	NHTO、NLATO、NPHOTO 和小

行	列	名称	类型	描述
			Exp	时角 3 的晴天光解率（必需）
	JVTMAX	XJVAL_(JVTMAX)	Real or Exp	与 JVTMAX 相对应的 NHTO、NLATO、NPHOTO 和小时角晴天光解率（必需）

JTABLE 文件重要部分的示例如下所示。

```

1999181 (yyyyddd) Julian Date for the file 7 LEVELS (m) 0.0 1000.0 2000.0
3000.0
4000.0 5000.0 10000.0 6 LATITUDES (deg) 10.0 20.0 30.0 40.0 50.0 60.0 9
HOUR ANGLES
(from noon) 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0 8.0 6 PHOTOLYTIC REACTIONS
'NO2_CBIV88
', 1.0 'O3O1D_CBIV88 ', 1.0 'HCHOmole_CBIV88 ', 1.0 'HCHOrad_CBIV88 ',
1.0 'ALD_CBIV88
', 1.0 'ACROLEIN ', 1.0 1 1 1 5.0964761E-01 4.9923715E-01 4.6422747E-01
4.0129572E-01

```

3.0394882E-01 1.6590215E-01 3.2829735E-02 0.0000000E+00 0.0000000E+00

OMI：臭氧柱监测数据

在 CCTM 中使用。

OMI 臭氧柱数据（按纬度和经度）用于在线光解计算。CMAQ 包含 1978 年至 2015 年的臭氧柱数据。数据为多布森单元中的 $22.5^{\circ} \times 10^{\circ}$ 网格臭氧柱。表 8-12 列出了 OMI 数据文件的格式。

表 8-12.OMI 数据格式

	名称	类型	描述
1	Header		每列名称的标题
2	A Yeardate	Real	YYYY.??? or YYYY.????格式数据
	B Latitude 1	Int	北纬 80 度
	C Longitude 1	Int	180.0Z 经度臭氧柱 (DU)
	D Longitude 2	Int	157.5W 经度臭氧柱 (DU)
	E Longitude 3	Int	135.0W 经度臭氧柱 (DU)

	名称	类型	描述
	F Longitude 4	Int	112.5W 经度臭氧柱 (DU)
	G Longitude 5	Int	090.0W 经度臭氧柱 (DU)
	H Longitude 6	Int	067.5W 经度臭氧柱 (DU)
	I Longitude 7	Int	045.0W 经度臭氧柱 (DU)
	J Longitude 8	Int	022.5W 经度臭氧柱 (DU)
	K Longitude 9	Int	000.0Z 经度臭氧柱 (DU)
	L Longitude 10	Int	022.5E 经度臭氧柱 (DU)
	M Longitude 11	Int	045.0E 经度臭氧柱 (DU)
	N Longitude 12	Int	067.5E 经度臭氧柱 (DU)
	O Longitude 13	Int	090.0E 经度臭氧柱 (DU)
	P Longitude 14	Int	112.5E 经度臭氧柱 (DU)
	Q Longitude 15	Int	135.0E 经度臭氧柱 (DU)
	R Longitude 16	Int	157.5E 经度臭氧柱 (DU)
	S Longitude 17	Int	180.0Z 经度臭氧柱 (DU)
3	A Yeardate	Real	YYYY.??? or YYYY.????格式数据
	B Latitude 2	Int	北纬 70 度
	C Longitude 1	Int	180.0Z 经度臭氧柱 (DU)
	S Longitude 17	Int	180.0Z 经度臭氧柱 (DU)
4	A Yeardate	Real	YYYY.??? or YYYY.????格式数据
	B Latitude 3	Int	北纬 60 度
	C Longitude 1	Int	180.0Z 经度臭氧柱 (DU)
	S Longitude 17	Int	180.0Z 经度臭氧柱 (DU)
5	A Yeardate	Real	YYYY.??? or YYYY.????格式数据
	B Latitude 4	Int	北纬 50 度
	C Longitude 1	Int	180.0Z 经度臭氧柱 (DU)
	S Longitude 17	Int	180.0Z 经度臭氧柱 (DU)
总共对 17 个纬度的数据重复上述步骤			
1978-2008 年每年 48 天（每月 4 天）的数据			
2009-2015 年每年 365 天的数据			

EMIS_1: 排放

在 CCTM 中使用。

CMAQ 可以接受来自各种排放模型和预处理器的排放数据输入。最常用的是 SMOKE 排放模式的数据，这是一个程序集，分别处理和合并每个排放部门的排放数据，以输入空气质量模型。

排放文件按网格单元和时间对排放的气相和气溶胶物种进行排序。文件类型为 GRDDED3，并且气相物种的单位以摩尔/秒为单位 (moles/s)，气溶胶物种以克/秒为单位 (g/s)。文件数据按列、行、层、变量和输入时间步长进行循环。CMAQ 不会人为地区分地面源和高架源，而是通过排放源垂直分布来进行评估。对于不使用在线排放计算的 CCTM 配置，所有排放估算值都包含在每天单个输入排放文件中。在 v4.7 版本中，CMAQ 可处理在线点源、海盐和生物源排放。用于计算在线排放的补充输入文件在 CMAQv4.7 说明中也进行了相应的描述。

OCEAN_1: 海盐面

在 CCTM 中使用。

CMAQ 气溶胶模型 AERO5 和 AERO6 可以计算来自开放海洋网格单元和碎浪带网格单元的海盐排放。增加碎浪带选项可以模拟发生波浪作用的沿海地区海盐排放量。OCEAN_1 文件包含开放海洋 (OPEN) 或碎浪带 (SURF) 每个网格单元的数据。当使用 AERO5 或 AERO6 编译 CCTM 时，会将 OCEAN_1 作为输入文件。

GSPRO: 物种特征

仅在 CCTM 在线排放版本中需使用。

GSPRO 物种特征文件将 CMAQ 所需的污染物排放总量分解为模型物种的排放量。如果仅在 CMAQ 中计算在线生物源排放，CCTM 使用的 GSPRO 文件只需要包含 B3GRD 文件中输入的生物 VOC 排放的物种分配因子。如果 CCTM 正在计算其他排放源，则这些排放源的 VOC 物种分配系数必须包含在 GSPRO 文件中。在 SMOKE 用户手册中列出了 GSPRO 文件格式，请参阅 GSPRO 文档。

B3GRD: 网格化、标准化生物源排放

仅在 CCTM 在线排放版本中需使用。

一个 I/O API GRDDED3 格式文件，包含网格化、标准化的生物源排放（以每小时克的碳或氮表示，取决于物种）和叶面积指数。B3GRD 文件包含以夏季和冬季排放系数计算的标准化排放。B3GRD 文件通过 SMOKE 程序

NORMBEIS3 使用网格化土地利用数据生成的。有关 B3GRD 文件的其他信息，请参阅 SMOKE 用户手册中的 NORMBEIS3 文档。

BIOSEASON: 霜冻日期

仅在 CCTM 在线排放版本中需使用。

BIOSEASON 文件格式为 I/O API GRDDED3，用于确定模拟范围内每个网格单元在给定年份的每一天使用哪个生物排放因子。此文件可以通过与 SMOKE 一起发布的 Metscan 实用程序创建。BIOSEASON 文件与时间相关，通常包含一整年（365 天或 366 天）的数据。使用 SEASON 变量进行设置，可以设置为 0（网格使用冬季因子）或 1（网格使用夏季因子）。有关创建 BIOSEASON 文件的其他信息，请参阅 SMOK 用户手册中的 Metscan 文档。

STK_GRP5_nn: 排气筒组

仅在 CCTM 在线排放版本中需使用。

* 标记是唯一的，表示分区标识。

排气筒组文件是 I/O API netCDF 文件，包含排气筒参数。此文件由 SMOKE 程序 ELEVPOINT 创建。有关创建排气筒组文件的其他信息，请参阅 SMOK 用户手册中的 ELEVPOINT 文档

STK_EMIS_nn: 点源排放

仅在 CCTM 在线排放版本中需使用。

* 标记是唯一的，表示分区标识。

该文件格式为 I/O API GRDDED3。此文件中的排放数据使用 CCTM 中包含的烟羽抬升算法通过垂直层进行计算。可以使用 SMOKE 创建点源排放文件。有关使用 CMAQ 烟羽抬升方法计算点源排放的详细信息，请参阅 SMOKE 用户手册中的 ELEVPOINT 文档。

DUST_LU_1: 网格化土地覆盖/土地利用

仅在 CCTM 在线粉尘排放版本中需使用。

网格化的土地覆盖/土地利用（LCLU）文件格式为 I/O API GRDDED3，将 BELD3 数据投影到建模域。此文件必须包含以下 LCLU 变量，才能与 CMAQ 粉尘模块兼容：

- USGS_urban

- USGS_drycrop
- USGS_irrcrop
- USGS_cropgrass
- USGS_cropwdlnd
- USGS_grassland
- USGS_shrubland
- USGS_shrubgrass
- USGS_savanna
- USGS_decidforest
- USGS_evbrdleaf
- USGS_coniferfor
- USGS_mxforest
- USGS_water
- USGS_wetwoods
- USGS_sprsbaren
- USGS_woodtundr
- USGS_mxtundra
- USGS_snowice

这些类别用于确定粉尘排放位置和冠层清除因子。可以使用空间分配器和 BELD4 变量为北美创建此文件。DUST_LU_1 文件对应于空间分配器的“a”输出文件。有关详细信息，请参阅有关创建生物源排放手册。

DUST_LU_2: 网格化土地覆盖/土地利用

仅在 CCTM 在线粉尘排放版本中需使用。

网格化土地覆盖/土地利用（LCLU）文件是一个 I/O API GRDDED3 格式文件，该文件将 BELD3 数据投影到模拟区域。此文件必须包含以下变量才能与 CMAQ 灰粉尘模块兼容：

- FOREST

此变量与 DUST_LU_1 文件中的变量结合使用，以确定粉尘排放位置和冠层清除因子。可以使用空间分配器和 BELD3 变量为北美创建此文件。DUST_LU_2

文件对应于空间分配器的“tot”输出文件。有关详细信息，请参阅有关创建生物源排放手册。

MODIS_FPAR: MODIS 植被覆盖率

仅在 CCTM 在线粉尘排放版本中需使用。

MODIS_FPAR 文件是一个 I/O API 格式文件，该文件可将 MODIS 每日光合有效辐射分量插值到模拟区域。需要获取在线扬尘排放模块使用的动态植被分数。

CROPMAP01: 网格化种植起始日期

仅在 CCTM 作物在线粉尘排放版本中需使用。

网格化种植起始日期文件是 I/O API GRDDED3 格式文件，可将各种作物的种植起始日期插值到模拟区域。此文件中的变量是不同作物的种植起始日期，其中每个变量都是整数，表示 1 月 1 日之后每个作物停止种植的天数。CMAQ 预处理程序 CALMAP 读取作物活动日历和 GRID_CRO_2D 文件以生成 CROPMAP08 文件。

CROPMAP04: 网格化种植结束日期

仅在 CCTM 在线粉尘排放版本中需使用。

网格化种植结束日期文件是 I/O API GRDDED3 格式文件，可将各种作物的种植结束日期插值到模拟区域。此文件中的变量是不同作物的种植结束日期，其中每个变量都是整数，表示 1 月 1 日之后每个作物停止种植的天数。CMAQ 预处理程序 CALMAP 读取作物活动日历和 GRID_CRO_2D 文件以生成 CROPMAP08 文件。

CROPMAP08: 网格化收获日期

仅在 CCTM 在线粉尘排放版本中需使用。

网格化收获日期文件是 I/O API GRDDED3 格式文件，可将各种作物的收获日期插值到模拟区域。此文件中的变量是不同作物的收获结束日期，其中每个变量都是整数，表示 1 月 1 日之后每个作物停止收割的天数。CMAQ 预处理程序 CALMAP 读取作物活动日历和 GRID_CRO_2D 文件以生成 CROPMAP08 文件。

LTNGNO: 闪电氮氧化物排放

仅在 CCTM 闪电氮氧化物版本中需使用。

闪电氮氧化物排放文件是一个 I/O API GRDDED3 格式文件，将三维逐小时氮氧化物排放量（moles/s）插值到模拟区域。它是输入于 CMAQ 中的离线闪电氮氧化物排放文件。

LTNGPARMS_FILE: 闪电参数文件

仅在 CCTM 闪电氮氧化物版本中需使用。

闪电参数文件用于计算来自于逐小时观测的雷击数所产生的在线氮氧化物排放量。此文件包含插值于模拟范围的以下变量：

- SLOPE（无单元）：小时雷击数产生的氮氧化物排放量线性方程参数。
- INTERCEPT：小时雷击数产生的氮氧化物排放量线性方程参数。
- SLOPE_lg：小时雷击数产生的氮氧化物排放量对数方程参数。
- INTERCEPT_lg：小时雷击数产生的氮氧化物排放量对数方程参数。
- ICCG_SUM（无单元）：夏季云间与云地雷击比率。
- ICCG_WIN（无单元）：冬季云间与云地雷击比率。
- OCNMASK（无单元）：陆地/水面去除海洋虚假雷击数。

NLDN_STRIKES: 每小时观测雷击数

仅在 CCTM 闪电氮氧化物版本中需使用。

NLDN 雷击文件用于计算来自于逐小时观测的雷击数所产生的在线氮氧化物排放量。此文件包含插值于模拟范围的以下变量：

- NDNstrk（km⁻²）：每平方公里小时雷击数。

BELD4_LU - 作物分指数

仅在 CCTM 双向 NH₃ 通量版本中需使用。

BELD4 土地利用文件，在模拟范围内以网格化作物分指数表示。

E2C_SOIL - EPIC 土壤特性

仅在 CCTM 双向 NH₃ 通量版本中需使用。

此三维文件由 EPIC 模型通过 FEST-C 接口创建，包含每个网格单元中每个作物和土壤组合的第 1 层（0 至 1 厘米深度）和第 2 层（1 厘米至 100 厘米深度）的土壤属性。有关 EPIC 模型和 FEST-C 接口的其他信息，请访问 <https://www.cmascenter.org/fest-c/>。此文件中包含以下变量：

- L1_SoilNum：土壤编号（none）

- L1_Bulk_D: 第 1 层土壤密度 (t/m**3)
- L1_Wilt_P: 第 1 层土壤湿度 (m/m)
- L1_Field_C: 第 1 层土壤含水量 (m/m)
- L1_Porosity: 第 1 层土壤疏松度 (%)
- L1_PH: 第 1 层 PH 值 (none)
- L1_Cation: 第 1 层阳离子交换 (cmol/kg)
- L2_Bulk_D: 第 2 层土壤密度 (t/m**3)
- L2_Wilt_P: 第 2 层土壤湿度 (m/m)
- L2_Field_C: 第 2 层土壤含水量 (m/m)
- L2_Porosity: 第 2 层土壤疏松度 (%)
- L2_PH: 第 2 层 PH 值 (none)
- L2_Cation: 第 2 层阳离子交换 (cmol/kg)

E2C_FERT - EPIC 作物类型和肥料应用
仅在 CCTM 双向 NH3 通量版本中需使用。

这是 EPIC 模型通过 FEST-C 接口创建的每日三维文件，包含每个网格单元的肥料应用率、每种作物和土壤的深度信息。有关 EPIC 模型和 FEST-C 接口的其他信息，请访问 <https://www.cmascenter.org/fest-c/>。该文件包含的变量多于 CMAQ 使用的变量。此文件中包含以下变量：

- QNO3: 表面径流的 N 流失量 (kg/ha)
- SSFN : 地下潜流 N 量 (kg/ha)
- PRKN: 渗透物 N 流失量 (kg/ha)
- DN: N-NO3 脱硝 (kg/ha)
- DN2: NO3 脱硝的 N-N2O (kg/ha)
- AVOL: N-NH3 排放量 (kg/ha)
- HMN: 土壤呼吸的 OC 变化 (kg/ha)
- NFIX: N 固定量 (kg/ha)
- YP: 沉积物 P 流失量 (kg/ha)
- QAP: 径流中不稳定 P 流失量 (kg/ha)
- YON: 沉积物 N 流失量 (kg/ha)

- YW: 风蚀量 (ton/ha)
- Q: 径流 (mm)
- HUSC: 热单元时间表 (none)
- HU_BASE0: 基本热单元 (none)
- HU_FRAC: 热单位分指数 (none)
- L1_DEP: 第 1 层深度 (m)
- L1_BD: 第 1 层土壤密度 (t/m^3)
- L1_NO3: 第 1 层硝酸 N 量 (kg/ha)
- L1_NH3: 第 1 层氨 N 量 (kg/ha)
- L1_ON: 第 1 层有机 N 量 (kg/ha)
- L1_P: 第 1 层矿物 P 量 (kg/ha)
- L1_OP: 第 1 层有机 P 量 (kg/ha)
- L1_C: 第 1 层 C 量 (kg/ha)
- L1_NITR: 第 1 层硝化 NH3 的 N 量 (kg/ha)
- L2_DEP: 第 2 层深度 (m)
- L2_BD: 第 2 层土壤密度 (t/m^3)
- L2_NO3: 第 2 层硝酸 N 量 (kg/ha)
- L2_NH3: 第 2 层氨 N 量 (kg/ha)
- L2_ON: 第 2 层有机 N 量 (kg/ha)
- L2_P: 第 2 层矿物 P 量 (kg/ha)
- L2_OP: 第 2 层有机 P 量 (kg/ha)
- L2_C: 第 2 层 C 量 (kg/ha)
- L2_NITR: 第 2 层硝化 NH3 的 N 量 (kg/ha)
- T1_DEP: 土壤层深度 (土壤剖面层数) (m)
- T1_BD: 第 N 层土壤密度 (t/m^3)
- T1_NO3: 第 N 层硝酸 N 量 (kg/ha)
- T1_NH3: 第 N 层氨 N 量 (kg/ha)
- T1_ON: 第 N 层有机 N 量 (kg/ha)
- T1_P: 第 N 层矿物 P 量 (kg/ha)

- T1_OP: 第 N 层有机 P 量 (kg/ha)
- T1_C: 第 N 层 C 量 (kg/ha)
- T1_NITR: 第 N 层硝化 NH₃ 的 N 量 (kg/ha)
- L1_ANO3: 第 1 层 N-NO₃ 应用率 (kg/ha)
- L1_ANH3: 第 1 层 N-NH₃ 应用率 (kg/ha)
- L1_AON: 第 1 层 ON 应用率 (kg/ha)
- L1_AMP: 第 1 层 MP 应用率 (kg/ha)
- L1_AOP: 第 1 层 OP 应用率 (kg/ha)
- L2_ANO3: 第 2 层 N-NO₃ 应用率 (kg/ha)
- L2_ANH3: 第 2 层 N-NH₃ 应用率 (kg/ha)
- L2_AON: 第 2 层 ON 应用率 (kg/ha)
- L2_AMP: 第 2 层 MP 应用率 (kg/ha)
- L2_AOP: 第 2 层 OP 应用率 (kg/ha)
- UN1: 按作物进行 N 应用 (kg/ha)
- HUI: 热单位指数 (none)
- LAI: 叶面积指数 (none)
- CPHT: 作物高度 (m)

INIT_MEDC_1 - 土壤初始条件文件

仅在 CCTM 双向 NH₃ 通量版本中需使用。

来自双向 NH₃ 或 Hg 模型输出的前一天 ASXfile 文件, 用于初始化模拟当日的土壤条件。本文件包含土壤 NH₄ 浓度、土壤 PH 值以及土壤、植被和水汞含量。

GRID_CRO_2D: 二维网格交叉点场

在 CCTM 中使用。

GRID_CRO_2D 文件包含交叉点处的 (即单元格中心) 地表区域。它由 MCIP 创建, 并由 CCTM 使用。此文件包含以下变量:

- LAT: 纬度 (度, 北半球为正纬度)
- LON: 经度 (度, 西半球为负经度)
- MSFX2: 方形地图比例因子 (m² m⁻²)

- HT: 地形高程 (m)
- DLUSE: 主要土地利用类型 (category)
- LWMASK: 陆地水面 (1=陆地, 0=水面)
- PURB: 陆地城市百分比 (%)
- LUFRAC_01: NLCD40 的土地利用部分: 常青针叶森林
- LUFRAC_XX:

GRID_DOT_2D: 二维网格点场

在 CCTM 中使用。

GRID_DOT_2D 文件包含网格点处的 (即单元格角) 地表区域。它由 MCIP 创建, 并由 CCTM 使用。GRID_DOT_2D 文件中存在以下变量:

- LAT: 纬度 (度, 北半球为正纬度)
- LON: 经度 (度, 西半球为负经度)
- MSFD2: 方形地图比例因子 ($m^2 m^{-2}$)

MET_BDY_3D: 输入三维气象边界值

在 CCTM 中使用。

MET_BDY_3D 文件包含横向边界处的 (在交叉点上) 三维气象场。它由 MCIP 创建, 由 CCTM 和 PDM 使用。MET_BDY_3D 文件中可能包含以下变量:

- JACOB_F: 层表面的总雅各比 (m)
- JACOB_M: 层中间的总雅各比 (m)
- DENSA_J: 雅各比加权总空气密度 ($kg m^{-2}$)
- WHAT_JD: 雅各比和密度加权反垂直速度 ($kg m^{-1} s^{-1}$)
- TA: 空气温度 (K)
- QV: 水蒸气混合比 ($kg kg^{-1}$)
- PRES: 气压 (Pa)
- DENS: 空气密度 ($kg m^{-3}$)
- WWIND: 垂直速度 ($m s^{-1}$)
- ZH: 地面以上的中层高度 (m)
- ZF: 地面以上所有层高度 (m)
- QC: 云水混合比 ($kg kg^{-1}$)

- QR: 雨水混合比 (kg kg^{-1})
- QI: 冰混合比 (kg kg^{-1})
- QS: 雪混合比 (kg kg^{-1})
- QG: 霰混合比 (kg kg^{-1})

MET_CRO_2D: 二维交叉点气象场
在 CCTM 中使用。

MET_CRO_2D 文件包含交叉点处(即网格中心)的表面和其他二维气象场。它由 MCIP 创建, 由 CCTM 和 PDM 使用。MET_CRO_2D 文件中可能包含以下变量:

- PRSFC: 地面气压 (Pa)
- JACOBS: 地面总雅各比 (m)
- USTAR: 网格平均水平摩擦速度 (m s^{-1})
- WSTAR: 对流速度 (m s^{-1})
- PBL: 行星边界层高度 (m)
- ZRUF: 表面粗糙度 (m)
- MOLI: 反向莫宁-奥布霍夫长度 (m^{-1})
- QFX: 潜热通量 (W m^{-2})
- HFX: 合理的热通量 (W m^{-2})
- RADYNI: 反空气动力学阻力 (m s^{-1})
- RBNDYI: 反边界层阻力 (m s^{-1})
- RSTOMI: 反空气阻力 (m s^{-1})
- TEMPG: 地表温度 (K)
- TEMP10: 10 米温度 (K)
- TEMP1P5: 1.5 米温度 (K)
- WSPD10: 10 米风速 (m s^{-1})
- WDIR10: 10 米风向 (m s^{-1})
- GLW: 地面长波辐射 (W m^{-2})
- GSW: 地面吸收的太阳辐射 (W m^{-2})
- RGRND: 到达地面的太阳辐射 (W m^{-2})

- RN: 非对流性降水 (cm)
- RC: 对流性降水 (cm)
- CFRAC: 总云分指数 (分数)
- WBAR: 云的平均液态水含量 (g m^{-3})
- CLDT: 云顶高度 (m)
- CLDB: 云底高度 (m)
- SNOCOV: 雪覆盖量 (1 = yes, 0 = no)
- TEMP2: 2 米温度 (K)
- SOIM1: 土壤水分 ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$)
- SOIM2: 土壤水分 ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$)
- SOIT1: 土壤温度 (K)
- SOIT2: 土壤温度 (K)
- SLTYP: 土壤类型 (category)
- LAI: 叶面积指数 (area area^{-1})

默认情况下, MCIP3 计算以下沉积速度并写入 MET_CRO_2D 文件:

- VD_SO2: SO₂ 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_SULF: SO₄ 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_NO2: NO₂ 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_NO: NO 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_O3: O₃ 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_HNO3: HNO₃ 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_H2O2: H₂O₂ 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_ALD: ALD 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_HCHO: HCHO 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_OP: OP 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_PAA: PAA 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_ORA: ORA 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_NH3: NH₃ 的沉积速度 (m s^{-1})
- VD_PAN: PAN 的沉积速度 (m s^{-1})

- VD_HONO: HONO 的沉积速度 (m s-1)
- VD_CO: CO 的沉积速度 (m s-1)
- VD_METHANOL: 甲醇的沉积速度 (m s-1)
- VD_N2O5: N2O5 的沉积速度 (m s-1)
- VD_NO3: NO3 的沉积速度 (m s-1)
- VD_GEN_ALD: 醛的沉积速度 (m s-1)
- VD_CL2: CL2 的沉积速度 (m s-1)
- VD_HOCL: HOCL 的沉积速度 (m s-1)
- VD_HCL: HCL 的沉积速度 (m s-1)
- VD_FMCL: FMCL 的沉积速度 (m s-1)
- VD_ICL1: ICL1 的沉积速度 (m s-1)
- VD_ICL2: ICL2 的沉积速度 (m s-1)
- VD_HG: HG 的沉积速度 (m s-1)
- VD_HGIIGAS: HGIIGAS 的沉积速度 (m s-1)

MET_CRO_3D: 三维交叉点气象场
在 CCTM、ICON、BCON 中使用。

MET_CRO_3D 文件包含交叉点（即网格中心）三维气象场。它由 MCIP 创建，由 CCTM、ICON、BCON 和 PDM 使用。MET_CRO_3D 文件中可能存在的变量也可能存在于 MET_BDY_3D 文件中。

8.0.2 MET_DOT_3D: 点三维气象场

在 CCTM 中使用。

MET_DOT_3D 文件包含网格点（即网格角）和网格面三维气象场。它由 MCIP 创建，由 CCTM 和 PDM 使用。MET_DOT_3D 文件中可能包含以下变量：

- UWIND: 水平风的 u 分量 (m/s)
- VWIND: 水平风的 v 分量 (m/s)
- UHAT_JD: U 雅各比逆变分量密度 (kg/m/s)
- VHAT_JD: V 雅各比逆变分量密度 (kg/m/s)

CCTM 输出文件

上一节介绍了输入到 CCTM 的来自 JPROC、ICON、BCON 和 MCIP 的输出文件。在本节中,将提供有关 CCTM 输出文件的详细信息。除 JPROC(创建 ASCII 文件)外,所有 CMAQ 程序都会生成 netCDF 格式的输出文件(第 4 章)。I/O API 格式 CMAQ 输出文件是三维、网格化、时间步长的二进制文件,包含带有描述文件内容的元数据的头文件。这独立于机器和网络的透明二进制文件可在不同的计算机体系结构之间传输。除了模型数据输出外,CMAQ 可以选择生成包含来自 CMAQ 各处理器标准输出的日志文件。如果用户未选择日志文件选项,CMAQ 将所有日志信息与报错信息一起写入屏幕,可以使用基本的 UNIX 语法将其捕获到文本文件中。

表 8-13. CMAQ 输出文件

文件名	文件类型	时间相关	空间维度
General			
Output Log	ASCII	n/a	n/a
CTM_CONC_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_CGRID_1	GRDDED3	1-hour	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_ACONC_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_DRY_DEP_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_WETDEP_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_VIS_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_AVIS_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
Diagnostic and Advanced			
CTM_PMDIAG_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_APMDIAG_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
B3GTS_S	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_DEPV_DIAG	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_PT3D_DIAG	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_DUST_EMIS_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_AOD_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_IPR_1-3	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
CTM_IRR_1-3	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
FLOOR	ASCII	Hourly	n/a
MEDIA_CONC	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_DEPV_MOS	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$

文件名	文件类型	时间相关	空间维度
CTM_DRY_DEPV_MOS	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_DEPV_FST	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_DRY_DEPV_FST	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_VDIFF_DIAG	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_VSED_DIAG	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
LTNG_HOURLY	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]*Z$
LTNG_COL	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
PLAY_SRCID	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_RJ_1-2	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
SOILOUT	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_SSEMIS_1	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$
CTM_WETDEP_2	GRDDED3	Hourly	$[2(X+1)+2(Y+1)]$

CMAQ 日志文件

所有 CMAQ 处理器在执行过程中都会输出文件和可能的报错信息。对于 CCTM 以外的其他处理器,可以使用 UNIX 命令将此诊断输出信息捕获到执行时的日志文件。例如,要捕获 CCTM 的输出文件和报错信息,请使用以下命令:

```
run.cctm >& tee cctm.log
```

对于 CCTM, LOGFILE 环境变量允许用户指定日志文件的名称,以便从运行中捕获。如果未设置此变量,则标准输出将写入终端,并使用 UNIX 命令“(>)”进行捕获,如上例所示。

CTM_CONC_1: CCTM 每小时瞬时浓度文件

CCTM 三维小时浓度文件 (CONC) 是最常使用的 CCTM 输出文件。CONC 文件包含气相物种混合比 (ppmV) 和气溶胶物种浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$), 包括每个模型小时结束时的瞬时模拟物种浓度。CONC 文件中包含的物种数量和类型取决于编译 CCTM 时选择的化学机制和气溶胶模型配置。机制目录中的 FORTRAN 名称列表列出了建模的物种, 并包含一个列, 用于指定哪些物种写入 CONC 文件。GC_mechname.nml 文件、AE_. mechname.nml 文件和 NR_mechname.nml 文件分别列出了气相物种、气溶胶物质非反应 (惰性) 物种。可以通过编辑 NameList 文件中的 CONC 列来删除物种, 以减少写入的物种数量, 从而减少 CONC 文件的大小。

CTM_CGRID_1: CCTM 重启文件

CCTM 三维浓度结束文件 (CGRID) 是 CCTM 的重启文件。CGRID 文件包含气相物种混合比 (ppmV) 和气溶胶物种浓度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$), 包括每次模拟结束时的模拟物种浓度。输出 CGRID 文件中的物种数量和类型取决于编译 CCTM 时选择的化学机制和气溶胶模型配置。此文件可用于模拟完成时的 CCTM 初始化。例如, 如果将 CCTM 配置为生成每日输出文件, 则每个模拟日结束时都会写出一个 CGRID 文件。

CTM_ACONC_1: CCTM 每小时平均浓度文件

CCTM 三维平均浓度文件 (ACONC) 包含每个模型的小时平均模拟物种浓度, 而不是每个输出时间步长结束时的瞬时浓度。写入 ACONC 文件的物种由用户使用变量 AVG_CONC_SPCS 在 CCTM 运行脚本中设置。用于计算积分平均浓度的模型层也使用变量 ACONC_BLEV_ELEV 在 CCTM 运行脚本中设置, 其中 BLEV 对应于底层编号, ELEV 对应于顶层编号。例如, ACONC_BLEV_ELEV 设置为 “1 6”, 它定义垂直层有 1 至 6 层, 用于计算每小时平均浓度。

CTM_DRY_DEP_1: CCTM 每小时累积干沉积文件

CCTM 二维干沉积文件 (DRYDEP) 包括选定模型物种的每小时累积干沉积通量 ($\text{kg}/\text{hectare}$)。CCTM 计算机制目录中 FORTRAN 名称列表沉积列中列出了所有干沉积物种。GC_mechname.nml 文件列出了气相物种, AE_mechname.nml 文件列出了气溶胶物种, NR_mechname.nml 列出了非反应 (惰性) 物种。通过编辑 NameList 文件中的 DDEP 列, 可以从干沉积文件中删除物种。

CTM_WETDEP_1: CCTM 每小时累积湿沉积文件

CCTM 二维湿沉积文件 (WETDEP) 包括选定模型物种的每小时累积湿沉积通量 ($\text{kg}/\text{hectare}$)。CCTM 计算机制目录中 FORTRAN 名称列表湿沉积列中列出了所有湿沉积物种。GC_mechname.nml 文件列出了气相物种, AE_mechname.nml 文件列出了气溶胶物种, NR_mechname.nml 列出了非反应 (惰性) 物种。通过编辑 NameList 文件中的 WDEP 列, 可以从湿沉积文件中删除物种。

CTM_VIS_1: CCTM 每小时瞬时能见度指标

CCTM 二维能见度文件包含每小时的 Mie、重建视觉范围系数 (km^{-1}) 和标准消光系数 (deiviews)。

CTM_AVIS_1: CCTM 每小时平均能见度指标

CCTM 二维能见度文件包含每小时的 Mie、重建视觉范围系数 (km⁻¹) 和标准消光系数 (deiviews)。

8.1 CMAQ 诊断和后期输出文件

除了上一节详述的基本输出外，CMAQ 可以输出多个辅助文件以诊断模型性能。

CTM_PMDIAG_1: 小时瞬时气溶胶诊断文件

此诊断文件包含关于对数正态模态的几何平均直径和几何标准偏差信息。

CTM_APMDIAG_1: 小时平均气溶胶诊断文件

此诊断文件包含关于对数正态模态的几何平均直径和几何标准偏差信息。

B3GTS_S: 生物源排放诊断文件

CCTM 每小时二维输出文件包含以质量为单位计算的生物源排放量。仅当 CCTM 计算在线生物源排放并打开 B3GTS_DIAG 变量时，才会生成 B3GTS_S 文件。

CTM_DEPV_DIAG: CCTM 在线沉积诊断文件

CCTM 二维文件包含最后时间步长计算的每个化学物质的沉积速度 (m/s)。

CTM_PT3D_DIAG: CCTM PT3D 诊断文件记录三维点源排放量，作为输出时间步长的线性平均值。

CTM_DUST_EMIS_1: CCTM 每小时二维输出文件包含以质量为单位计算的粉尘排放量。仅当 CCTM 计算在线粉尘排放以及打开 CTM_DUSTEM_DIAG 变量时，才会生成 DUST_EMIS_1 文件。

CTM_AOD_1 计算的气溶胶光学厚度。仅当 CCTM 运行脚本中的 CTM_AOD 设置为 Y 时，才会生成此文件。

CTM_IPR_[1-3] CCTM 三维集成工艺速率文件 (IPR) 包含模拟过程中所选物种的小时浓度，该文件有助于预测模拟物种小时浓度。对于过程分析域中的每个网格单元（很可能是模拟范围的子集），IPR 文件显示由于特定源/接收器模拟过程而导致的物种每小时浓度变化。procan.inp 输入文件用于捕获模拟物种的分析信息，以及流程分析期间的示踪信息。

CTM_IRR_[1-3] CCTM 三维综合反应速率文件（IRR）包含所选模拟物种气相化学路径小时浓度，该文件有助于预测模拟物质小时浓度。对于过程分析域中的每个网格单元（很可能是模拟范围的子集），IRR 文件显示由于特定源/接收器模拟过程而导致的物种每小时浓度变化。procan.inp 输入文件用于捕获模拟物种的分析信息，以及流程分析期间的示踪信息。

FLOOR: 浓度重置诊断文件

FLOOR 文件是可选的输出诊断文件，其中列出了特定的网格/时间步，具有负浓度的物质统一重置为零。

MEDIA_CONC: 土壤 NH₄⁺重启文件

如果使用双向 NH₃ 选项和/或土壤、植被和水汞浓度，此 CCTM 二维文件应包含土壤 NH₄ 浓度和 PH 值。此文件用于初始化模拟第二天的数据。

CTM_DEPV_MOS

CCTM 三维文件包含网格单元中每个土地利用类型最后一个时间步长的沉积速度（m/s）。

CTM_DRY_DEP_MOS

CCTM 三维文件包含每个网格单元中每个土地利用类型每小时的总沉积量（kg/ hectare）。

CTM_DRY_DEP_FST

CCTM 三维文件包含每个网格单元中每个土地利用类型气孔路径的总沉积量（kg/hectare）。

CTM_DEPV_FST

CCTM 三维文件包含通过气孔路径的沉积速度（m/s），用于网格单元内每种土地利用类型每小时的最后时间步长。

CTM_VDIFF_DIAG The VDIFF_DIAG 文件可输出垂直分散诊断参数。它由 VDIFF_DIAG_FILE 环境变量控制。

CTM_VSED_DIAG The VSED_DIAG 文件可输出粒子引力沉降诊断速度的诊断输出。它由 VDIFF_DIAG_FILE 环境变量控制，并在开启重力沉降时激活。

LTNG_HOURLY 每小时三维闪电 NO 排放，由 CCTM 在线计算。

LTNG_COL 每小时闪电柱 NO 排放，由 CCTM 在线计算。

CTM_RJ_[1-2]:在线光分析输出文件 - 网格光解率

光解诊断输出文件 (RJ) 包含使用 CCTM 在线光解选项计算的光解率。

SOILOUT

每小时土壤 NO 排放文件的名称和位置;当在线生物源排放被激活，并且 CTM_BIOGEMIS 设置为 “T”或 “Y”时，输出。

- CTM_SSEMIS_1: 海盐排放诊断文件

CCTM 二维每小时输出文件包含计算的海盐排放量。仅当使用 AERO5 气溶胶机制，并且启用 CTM_SSEMDIAG 变量时，CCTM 才会生成 SSEMIS 文件。

CTM_WET_DEP_2: CCTM 云诊断文件

在 CMAQ 中，湿沉积可用于分别计算解析云（网格比例）和对流云（子网格）。WETDEP1 文件包含总湿沉积，即解析比例和子网格比例沉积的总和。WETDEP2 文件仅包含子网格比例沉积，以及一些云诊断变量。CCTM 二维湿沉积文件（WETDEP2）包括选定模型物种的小时湿沉积累积通量（kg/hectare）。CCTM 计算机制目录中 FORTRAN 名称列表湿沉积列中列出了所有物种的湿沉积。GC_mechname.nml 文件列出了气相物种，AE_mechname.nml 文件列出了气溶胶物种，NR_mechname.nml 列出了非反应（惰性）物种。通过编辑 NameList 文件中的 WDEP 列，可以从湿沉积文件中删除物种。

第九章 网格、模拟层和化学机制定义

本章介绍如何在 CMAQ 中定义新的水平网格、垂直层和化学机制。这些规范适用于 CMAQ 建模系统中的多个程序,包括 ICON、BCON、JPROC 和 CCTM。配置新的模拟任务时,用户必须定义水平和垂直网格的位置、范围和结构,以及用于表示污染物化学转化的化学机制。CMAQ 包含了这些参数的默认选项,这些默认选项可作为模板用于设置新的模拟任务。在设置新的网格和化学机制之前,请检查现有设置是否足以进行模式模拟。如果默认设置不适用于新模拟任务,则按照本节中描述的步骤重新设置上述参数。

在水平网格、垂直层和化学机制方面重新设置了适用于用户新模拟任务的参数后,请转到第 10 章,学习如何创建适用于 CMAQ 模拟任务的新可执行文件。

9.1 网格和坐标系

CMAQ 是一种三维欧拉空气质量模型。模型模拟范围为三维网格,其边界必须严格定义模型的所有参数(例如化学、排放、气象)。描述大气传输和地气交换过程的数学算法控制着物质进入每个网格的单元的流动,描述化学反应和气溶胶动力学的数学算法控制着每个网格单元中物质的产生的损失。

模型运行的水平网格和垂直层的处理方式不同。水平网格设置必须是规则的:每个网格单元的水平投影具有相同的分辨率,并且每个网格单元不随时间变化。相比之下,垂直层设置不必是规则的,它可以在空间和时间上变化。

水平网格和垂直层设置完成后,气象模型模拟范围必须大于 CMAQ 模拟范围。更为广阔的气象模型模拟范围用于区分气象边界条件和 CMAQ 边界条件。

9.1.1 可用于 CMAQ 的坐标系

CMAQ 和 MCIP 网格设置受 I/O API 网格规范约束。CMAQ 的水平坐标系或地图投影取决于输入的排放清单和气象场,它们必须一致。WRF/ARW 支持兰伯特、极地和墨卡托投影,可以直接传递给 CMAQ。

9.1.2 水平网格

通过 GRIDDESC 和 GRID_NAME 环境变量设置 CMAQ 水平网格。水平网格由网格定义文件 (GRIDDESC) 控制,用户可以编辑该文件。

CMAQ 中水平网格范围受输入气象场范围限制。MCIP 和 I/O API 工具可用于气象数据子集的提取。为 CCTM 运行选择适当的水平网格大小和范围取决于建模需要解决什么问题。同时，也应考虑网格大小、输出文件大小和执行时间之间的关系，即输出数据量和运行时间会随着水平网格单元数量的增加而增加。

9.1.2.1 CMAQ 水平网格约定

网格约定由 I/O API 指定。用户应该注意 CMAQ 同时使用“交叉点”和“单点”网格。

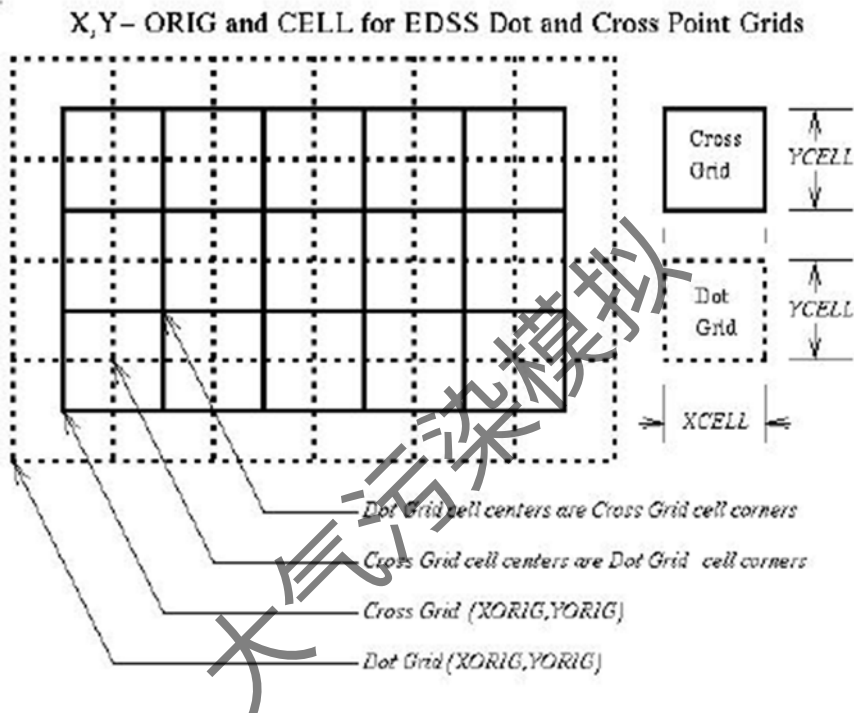


图 9-1 I/O API 网格定义条款

表 9-1. I/O API 网格类型条款

变量名	定义
origin	列 =行 =1 的左下角单元格。
X_ORIG	网格原点的 X 坐标（以投影单位为单位）。
Y_ORIG	网格原点的 Y 坐标（以投影单位为单位）。
X_CELL	与 X 坐标轴平行的水平分辨率（以投影单位为单位）。
Y_CELL	与 Y 坐标轴平行的水平分辨率（以投影单位为单位）。
NCOLS	网格列数，X 方向。
NROWS	网格行数，Y 方向。

CMAQ 发行包中的 GRIDDESC 案例文件包含一个覆盖加利福尼亚州的 12km 网格，该网格使用兰伯特投影。此网格的定义如下。

- Coordinate: Lambert Conformal
- Latitude 0: 40.0

- Longitude 0: -97.0
- Standard Parallel 1: 33.0
- Standard Parallel 2: 45.0
- X origin = -2,376,000
- Y origin = -792,000
- Rows: 100
- Columns: 72
- dX = 12,000
- dY = 12,000
- Layers = 35

9.1.2.2 创建或修改水平网格

在 CMAQ 中创建水平网格只需向 GRIDDESC 文件添加几行文本即可。结合使用 I/O API 的 GRIDDESC 文件格式文档和现有网格定义作为示例，通过向 GRIDDESC 文件添加坐标和网格描述可以为 CMAQ 定义新的网格。在 CMAQ 运行脚本中设置 GRID_NAME 环境变量以指向新网格名称。

创建新的 CMAQ 网格定义最常见的情况是还未获取 CMAQ 建模使用的气象和排放数据时。WRFOUT 输出数据可以通过 MCIP 运行生成一个 GRIDDESC 文件，该文件可以直接输入到 CMAQ 和 SMOKE。MCIP 包括一组变量，用于从 WRF 输出中裁剪边界单元、模拟范围以及设置投影的参考纬度。第 7 章提供了 MCIP 变量的说明。下面提供了用于定义水平网格的 MCIP 变量。

- **BTRIM:** 设置 MCIP 域四个水平边上移除的边界点的数量。BTRIM = 0 将指定输入气象场的最大范围。要删除 WRFARW 横向边界，请设置 BTRIM = 5（推荐）。对于气象场的子集域，设置 BTRIM = -1；此设置会用 X0、Y0、NCOLS 和 NROWS 提供的信息替代 BTRIM 参数。

- **X0:** 基于 WRFOUT 数据域的 MCIP 交叉点区域的左下角 x 坐标。X0 是指从 WRF 数据域的原点到 MCIP 交叉点域的原点东西方向的网格单元数。仅当 BTRIM = -1 时，才使用此设置。

- Y0: 基于 WRFOUT 数据域的 MCIP 交叉点区域的左下角 y 坐标。Y0 是指从 WRF 域的原点到 MCIP 交叉点域的原点的南北方向的网格单元数。仅当 BTRIM = -1 时, 才使用此设置。

- NCOLS: 输出 MCIP 域的列数。仅当 BTRIM = -1 时, 才使用此设置。

- NROWS: 输出 MCIP 域的行数。仅当 BTRIM = -1 时, 才使用此设置。

- WRF_LC_REF_LAT: WRF 兰伯特投影参考纬度。使用此设置可强制输出 MCIP 数据中的参考纬度。如果未设置, MCIP 将使用两个真实纬度的平均值。

9.1.2.3 BTRIM 计算样例

图 9-2 显示了如何用 WRFOUT 数据进行 BTRIM 计算的样例。12 公里网格分辨率左下角坐标, 在投影中心西侧 600 千米处和南侧 1680 千米处。CMAQ/MCIP 输出范围具有偏移, 左下角位于投影中心东侧 108 千米和南侧 1620 千米处。

MCIP 变量 X0 和 Y0 设置从 WRF 数据域中修剪单元格数, 以得到 MCIP 区域的左下角坐标,。在每一项计算中加上“1”就增加了 MCIP 横向边界。

$$X0 = |(WRF \text{ X origin} - MCIP \text{ X origin})| / (Grid \text{ Resolution}) + 1$$

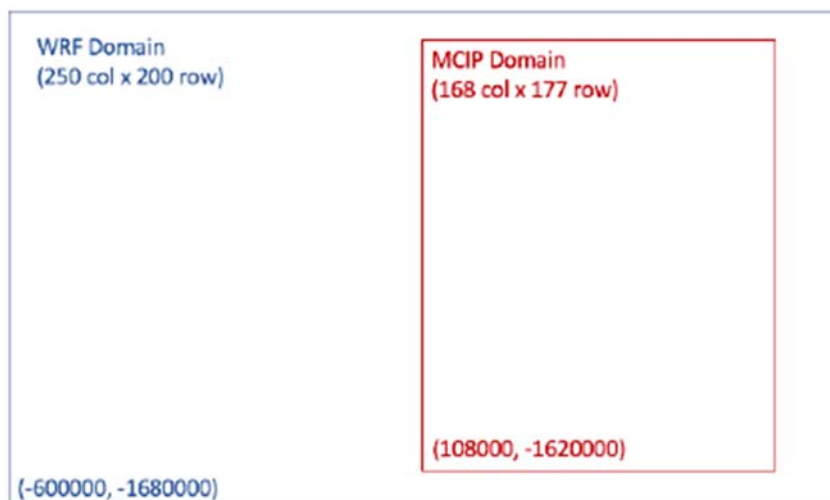
$$X0 = |(-600,000 - 108,000)| / 12,000 + 1$$

$$X0 = 60$$

$$Y0 = |(WRF \text{ Y origin} - MCIP \text{ Y origin})| / (Grid \text{ Resolution}) + 1$$

$$Y0 = |(-1,680,000 - -1,620,000)| / 12,000 + 1$$

$$Y0 = 6$$



9.1.2.4 关于水平网格的更多信息

•如果已采用 MCIP 处理过气象数据，但 GRIDDESC 文件丢失，则可以使用 nc 实用程序 ncdump 查看其中一个 I/O API 文件（气象或排放文件）的头文件，然后使用这些信息手动创建一个 GRIDDESC 文件。

- 水平网格不应小于 30 行和 30 列。
- 外部边界厚度应设置为“1”。
- CMAQ 网格应比气象网格小至少 4 个网格单元，最好小 6 个。
- 内外水平网格间距通常具有 1: 3 的比率，尽管其他比率也可以使用。

9.2 CMAQ 垂直层

CMAQ 的垂直结构继承了气象模拟数据。WRF-ARW 使用基于地面气压（而不是海平面气压）至顶层气压的 sigma 坐标。sigma 坐标使用地形跟随坐标。由于 WRF-ARW 是非静力模型，因此垂直坐标是随时间变化的。

9.2.1 垂直层分辨率

对于气象模拟来说，地表边界层的分辨率要求很高（即浅层垂直层）。为了确定边界层与自由对流层之间的质量交换，在边界层顶部附近设置高分辨率也比较好。此外，不同的积云参数化方案设置可能根据分层结构执行不同的操作。层的定义应适用于模拟区域的地形特征。影响干沉降速度的空气阻力是边界层厚度和边界层稳定性的函数。对于排放处理，层厚度会影响主要烟囱的烟羽抬升。地

面排放效应的垂直范围由 CCTM 最低模型层的厚度决定。从一致性上考虑，CCTM 垂直分辨率应与气象模拟数据一致。

9.2.2 关于垂直层的更多信息

- CMAQ 重新定义了垂直坐标，随着地形高度而单调增加，这是处理广义坐标系所必需的功能。

- 虽然 MCIP 可用于通过折叠层来减少垂直层数量，但不建议这样做，因为动态不一致可能会导致误差。特别是云计算过程非常重要时。

- 增加垂直层数量会增加计算机运行时间。

- 计算极限产生于垂直对流和扩散过程的库朗数。当使用 K 理论时，很浅的层定义在对流条件下极大地增加了 CPU 运行时间。

9.2.3 网格和垂直坐标系主题的相关参考

- 关于第 3 代模型的水平和垂直网格定义
- 1999 年第 3 代模型/CMAQ 科学说明第 12 章 (MCIP)
- Otte 和 Pleim 2009 年 MCIP

9.3 CMAQ 化学机制

CMAQ 模型系统在三个阶段描述化学：气相、气溶胶（固体或液体）和液相。请参阅说明文档，查找 CMAQ 每个发行版本中可用的气相化学机制。在几种基本气相机制上演化，如是否有氯、汞，以及有毒物种化学，这些化学机制与 CMAQ 一起发行。CMAQ 的模块化使得创建或修改气相化学机制成为可能。

气相化学机制通过 Fortran 源文件在 CMAQ 中定义。这些文件位于 \$CMAQ_MODEL/CCTM/src/MECHS 目录的子目录中（每个目录对应于一个机制名称），定义了各种机制的来源、反应参数和大气过程（例如扩散、沉积、对流）。每个机制的物种定义都包含在在 CMAQ 程序执行期间读取的名称列表文件中。与水平网格和垂直层配置相比，CMAQ 机制配置更类似于科学模块配置，因为该机制是在编译时定义的，导致可执行文件硬链接到特定的气相机制。要在不同模拟之间更改的化学机制，必须编译包含所需机制配置的新可执行文件。

9.3.1 使用预定义的化学机制

要在 CMAQ 中选择预定义的机制配置，请将构建脚本中的机制变量设置为 `$CMAQ_MODEL/CCTM/src/MECHS` 下的一个机制目录的名称。有关 CMAQv5.2 中可用的机制列表，请参阅 CMAQv5.2 光化学机制说明。

9.3.2 创建或修改化学机制

在 CMAQ 中创建或修改机制需要使用 CHEMMECH 模块生成所需的 Fortran 源文件 (F90) 和名称列表文件。CHEMMECH 将 ASCII 机制列表转换为 CMAQ 所需的 F90 和名称列表文件。与所有 CMAQ 预处理器一样，CHEMMECH 是一个 Fortran 程序，必须在使用前编译。CHEMMECH 带有编译用的 Makefile 和执行用的运行脚本，读取机制定义文件 (`mech.def`)，输出 F90 和名称列表文件。有关 CHEMMECH 的说明，请参阅第 7 章。

要修改现有机制，请将现有机制目录中的 `mech.def` 文件复制到新目录，并相应地修改 `mech.def` 文件。将此修改后的机制定义文件提供给 CHEMMECH 作为输入，以生成编译 CMAQ 所需的 F90 和名称列表文件。

要在 CMAQ 中调用此新机制，请将 CMAQ 生成脚本中的机制变量设置为新机制目录的名称，并编译新的可执行文件。

要为 CMAQ 创建新机制，请遵循类似于上述过程来修改机制。使用现有的 `mech.def` 文件的格式设置新机制。以 `mech.def` 文件格式设置机制后，将此文件输入于 CHEMMECH，为 CMAQ 创建所需的机制输入文件。将生成的机制文件移到 `$CMAQ_MODEL/CCTM/src/MECHS` 下的新目录。要调用此新机制，请将 CMAQ 生成脚本中的机制变量设置为新机制目录的名称，并编译新的可执行文件。

9.3.3 使用物种名称列表文件

物种名称列表文件定义了模型模拟的气体、气溶胶、非反应性物种和示踪剂物种的参数。CMAQ 程序在执行期间读取名称列表文件，以定义影响模型输出各物种模拟浓度的源和过程。

名称列表文件为主要模拟过程提供模型物种比例因子。例如，通过将 0.5 因子应用于气相物种名称列表文件的排放标量列，NO 的排放量可全面减少 50%。同样，通过将因子 1.5 应用于气相物种名称列表文件的边界条件列，O3 的边界条件可增加 50%。

有关名称列表文件格式的说明，请参阅第 8 章。

在 CMAQ 中修改或创建机制时，必须创建新的名称列表文件，其中包括机制中的新物种。如上所述，程序 CHEMMECH 将从 mech.def 机制定义文件生成名称列表文件。或者，现有的名称列表文件可以作为模板来指导手动创建新文件。

9.3.4 关于化学机制的进一步说明

- CCTM 和 CMAQ 其他所有处理器必须使用相同的化学机制。
- EBI 化学处理器依赖于机制。如果修改了化学机制，则必须根据机制定义生成新的 EBI 化学处理器。CREATE_EBI 读取 CHEMMECH 的输出文件，以生成新的 EBI 化学处理器。
- Rosenbrock 和 SMVGEAR 处理器是 CCTM 化学处理器的独立机制选择。
- 向 CMAQ 添加新物种时，请务必检查这些新物种的来源是否正确写入了机制定义文件中。如果物种通过排放文件添加到模拟域中，则定义机制物种的名称列表文件必须包含这些新物种。

第十章 创建 CMAQ 新模拟任务

对于 CMAQ 用户, CMAQ 模型生成器 Bldmake 仅在模拟开始时用于编译特定科学配置的可执行文件。由于水平网格和垂直层结构是在模型执行时动态定义的, 因此在更改这些参数时通常不需要重新编译程序。仅当首次执行 CMAQ 模拟或更改模型中的化学/科学配置时, 才需要编译。

模型开发人员可以使用 Bldmake 选择 CMAQ 源代码的工作版本, 并创建一个 Makefile 来促进模型中科学模块信息交换、修改现有化学机制中的反应细节, 或者对源代码修改进行试验。

本章将介绍如何为 CMAQ 程序构建可执行文件, 而不仅仅是运行安装测试案例。在学习本章之前, 请查看第 5 章, 了解 CMAQ 模型概述。通常, 编译 CMAQ 可执行文件主要有以下三个步骤:

1. 安装第三方库 (netCDF、I/O API、MPI)
2. 编译 Bldmake
3. 为各种 CMAQ 程序配置和构建可执行文件。

所有库和 CMAQ 的编译都必须使用相同的编译器和设置来完成。本章将详细介绍创建 CMAQ 新模拟任务的三个主要步骤。

10.1 模型框架简介

在创建 CMAQ 新模拟任务前, 建议使用与模型一起分发的测试数据集对模型进行基准测试。第 5 章介绍了如何在 Linux 系统上安装 CMAQ 并进行 CMAQ 基准测试。对 CMAQ 进行基准测试后, 可以将此配置用于其他模拟。新模拟任务与测试案例运行步骤相同。然而, 对于一个新的模型配置, 并不是所有步骤都需要重复执行, 除非有新的代码可用或者 Bug 修复。特别是, 一旦在用户系统上构建了工作版本, 就没有必要重新构建 CMAQ 使用的任何库。工作库 (netCDF、I/O API、MPI) 可以链接到模型的多个配置和应用程序。同样, CMAQ 模型生成器 Bldmake 也只需编译一次, 并用于模型的所有应用程序。

除 MCIP 外, 当模型的化学机制或科学配置发生变化时, 所有 CMAQ 程序都需要重新编译。如果科学配置在不同应用程序之间没有改变, 那么可以在同一个 Linux 系统上的不同应用程序上重用 CMAQ 可执行文件。MCIP 只需要在用户

的 Linux 系统上编译一次，可执行文件可以应用于模型的所有应用程序，除非有新的源代码（包括库）可用。

10.2 配置新模拟任务

对特定时间段进行建模的原因源于要研究的问题，例如确定为什么会发生严重的空气污染事件，或研究特定地理区域能见度下降的主要来源。确定建模事件后，在 CMAQ 运行之前必须采取几个步骤：

1. 为感兴趣的事件运行和评估 WRF 模型
2. 使用 MCIP 将输入的 WRF 数据转换为 SMOKE 和 CMAQ 可输入数据
3. 运行和评估 SMOKE 数据，以处理 CMAQ 的输入排放数据
4. 准备生物源输入排放数据，用于在线或离线处理
5. 为 CMAQ 准备初始和边界条件
6. 运行和评估 CCTM。

水平网格、垂直层结构和模拟时间段必须在气象数据、排放数据和 CMAQ 之间保持一致。

CMAQ 新模拟任务设置包括定义模拟网格、垂直层、模拟时间段、初始和边界条件、输入/输出文件位置以及模型的科学选项。以下各节将详细介绍 CMAQ 新模拟任务的具体设置。

10.2.1 定义新的水平网格

依赖网格的 CMAQ 程序（CCTM、ICON、BCON）均使用 GRIDDESC 网络描述文件来定义用于模拟的地图投影和水平网格。GRIDDESC 文件由 MCIP 输出，也可以使用文本编辑器手动创建。依赖网格的 CMAQ 程序运行脚本必须引用包含模型网格定义的 GRIDDESC 文件。必须在 CMAQ 运行脚本中指定当前应用程序的网格名称，因为单个 GRIDDESC 文件可以包含多个网格定义。有关 CMAQ 水平网格设置的其他信息请参阅第 9 章内容。

如果运行脚本中 GRIDDESC 文件的名称或位置，或水平网格的名称不正确，则任何 CMAQ 程序都可能会有以下报错信息：

Failure defining horizontal domain

对于 CCTM, 它同时使用 GRIDDESC 文件和网格化输入数据 (排放、气象、ICs/BCs), GRIDDESC 文件中定义的网格必须在所有网格化输入文件中保持一致, 否则模拟将失败。

要配置新的 CMAQ 模拟任务, 必须执行以下步骤来设置水平网格:

- 排放和气象数据与 CCTM 水平网格需一致
- 创建定义水平网格的 GRIDDESC 文件。
- 在水平网格上生成 ICs 和 BCs; 对于嵌套模拟, 从父网格生成 BCs。
- 使用模拟水平网格上的 GRIDDESC 文件和输入数据配置 CCTM 脚本。

10.2.2 定义新的垂直层结构

产生三维输出的 CMAQ 程序 (CCTM、ICON、BCON) 使用 MET_CRO_3D 文件来定义垂直层结构。MET_CRO_3D 文件从 MCIP 输出, 并从输入气象学中获取垂直层结构。所有 CMAQ 执行程序中涉及垂直层结构设置的内容必须保持一致。在处理原始气象模拟数据时, 使用 MCIP 处理 CMAQ 模拟的新垂直层结构。

10.2.3 设置新的模拟时间段

CMAQ 模拟时间范围受输入的气象和排放数据的可用性限制。与水平网格和垂直层结构类似, 在设计用于产生 CMAQ 输入数据的气象模型模拟时, 也必须考虑 CMAQ 模型的模拟时段。

每个 CMAQ 模拟输出时间步长和运行时长都可以在适用的 CMAQ 程序的运行脚本中进行灵活设置。对于 CCTM, 可以具有与相应的气象或排放输入数据不同时间步长的输出文件。例如, 通常以 4 天或 5 天间隔输入气象数据, 以 1 天或 2 天间隔输入排放文件, 并输出 1 天时间范围内的 CCTM 文件。CMAQ 脚本允许用户设置任意时间步长的数据。CCTM 时间步长不需要与气象、排放数据相对应。为了保持 CMAQ 输出文件大小易于管理, CMAQ 通常以 1 天 (24 小时) 为一个输出文件。

CMAQ 新模拟任务设置, 必须使用以下步骤来设置模拟时间段:

- 使用排放和气象数据时间段进行 CMAQ 模拟时间段设置。模型起始运行阶段需考虑“spin-up”问题。“spin-up”起始运行模拟数据请勿应用于后续结果分析。这个阶段的模拟数据是为了尽量减少初始条件对 CCTM 模拟结果的影响。

“spin-up”时间长短不一，主要取决于模拟范围、模拟范围内排放源大小以及所研究的污染物。作为区域建模的一般经验法则，应该考虑至少 10 天的“spin-up”时间。

- 生成 CCTM 模拟首个时间步长的 ICs；如果按日期顺序连续多日运行，需使用 ICON 中的 ICs 设置 CCTM 运行脚本中的起始模拟时间，并使用前一天的 CCTM 输出文件初始化后续日期。

- 为模拟网格生成与时间无关的 BCs，或为嵌套模拟从父网格的 CCTM 输出文件生成与时间变化的 BCs。

- 配置 CCTM 运行脚本，可设置循环模拟天数，使用每个模拟的正确输入文件，并使用所需的时间步长编写输出文件。

10.2.4 初始和边界条件

在准备好气象和排放输入数据文件、确定模型网格和模拟时间段后，下一步需为 CCTM 创建初始和边界条件（ICs 和 BCs）。ICON 处理器为新模拟任务模拟区域提供各物种浓度的初始化学场。BCON 为新模拟任务周围区域提供各化学物种的浓度。ICON 和 BCON 都需要两个输入：模拟中所需的化学物种的浓度值，以及预定义的化学机制。

如第 5 章所述，ICON 和 BCON 的输入浓度有两种类型：（1）对流层垂直廓线和（2）来自 CMAQ 或更大规模 CTM 模拟的三维数据，如 GEOS-Chem（2009）或 MOZART（2009）。用于 ICON 和 BCON 的输入文件类型取决于是否是前一次运行的重新启动或是嵌套模拟。必须为 ICON、BCON 和 CCTM 选择相同的化学机制。ICON 和 BCON 都假定输入物种浓度是所选机制的浓度。有关如何为两种输入文件配置 ICON 和 BCON 的信息，请参阅第 5 章。

CMAQ 的标准操作是从全球模型中提取边界条件，例如 GEOS-Chem 或 MOZART。嵌套模拟使用从 CCTM 父网格模拟结果中提取的边界条件。ICON 生成的初始条件在第一个“spin-up”日是与时间无关的。如果初始条件是从垂直廓线数据生成的，那么它们在空间上也将是均一的，这意味着对于给定的垂直层，它们在每个网格单元中包含相同的浓度值。模拟的剩余天数应使用前一天 CCTM 模拟的空间异构输出来初始化每一天。有关 CCTM 模拟的初始和边界条件示意

图，请参阅图 10 - 1，该原理图采用两天的“spin-up”。在此示例中，每个日期都单独运行。

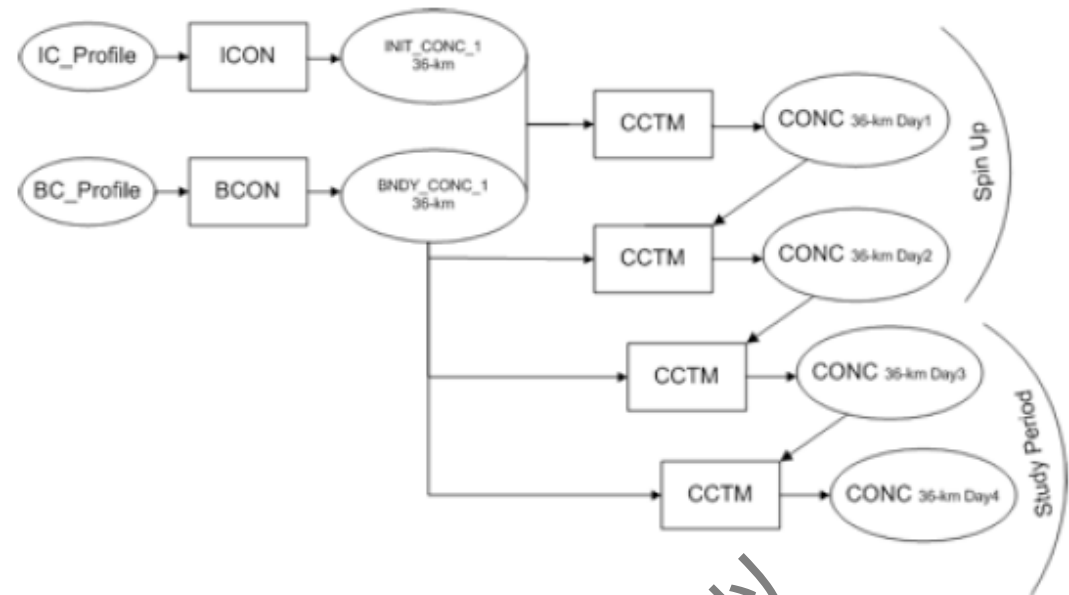


图 10-1. 36 公里 4 天建模周期的 IC/BC 原理图

使用嵌套网格时，细分分辨率网格可以使用 BCON 生成的时变边界条件，输入来自 CCTM 输出的时变浓度文件。细网格启动的初始条件也使用粗网格的浓度场。后续模拟需使用前一天运行生成的最后一小时数据。有关单向嵌套模拟的示例，请参阅图 10 - 2。本示例使用 36km 粗网格模拟的初始和边界条件，用于相同两天更精细模拟。

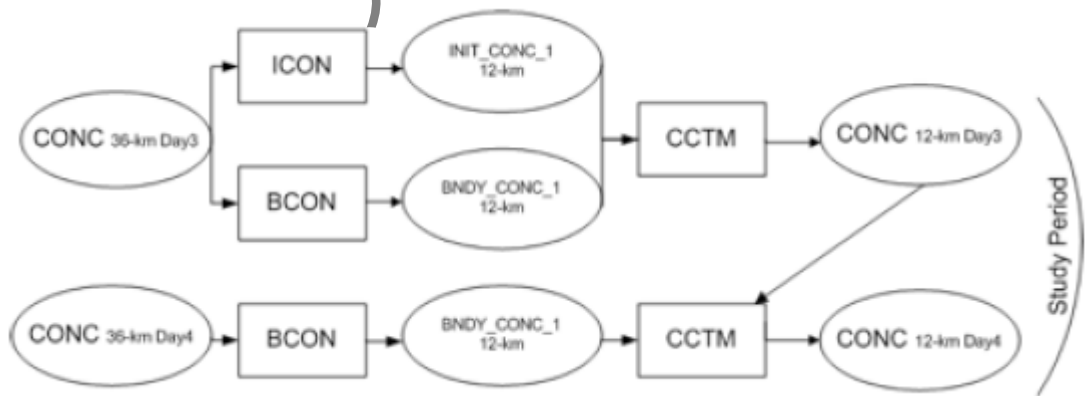


图 10-2. 12 公里 2 天嵌套模拟 IC/BC 原理图

10.2.5 输入/输出文件名和位置

为新的模拟配置 CMAQ 运行脚本包含创建一个以 CMAQ 输出文件名使用的应用程序标识符，并指定 CMAQ 输入和输出文件名和位置。选择应用程序标识

符是为了唯一标识与模拟有关的输出文件。例如，如果您运行的是 2007 年的模拟任务，则模拟标识符或 CMAQ 中的 APPL 设置可以是 Base07。对于时间相关的输出文件，日期标识符以模拟时间段添加到文件名中。按照前面的示例，如果将模拟设置为 2007 年 1 月 5 日开始运行，CMAQ5.2 版本中的 CCTM 浓度文件的示例文件名将是 CCTMv52.CONC.Base07.2007005.ncf。其他标识信息（如化学机制名称、输入气象和排放版本标识符）和操作系统版本（如 Linux2_x86_64）通常也添加到 CMAQ 输出文件名中。

在开始新的 CMAQ 模拟任务之前，用户需要确认所有 CMAQ 程序的输入文件是否存在，并检查输出文件和目录位置名称。所有 CMAQ 程序的常见错误是缺少或错误命名输入文件导致运行失败。

10.2.6 科学选项配置

CMAQ 脚本在发行时使用默认的科学选项设置。虽然此默认设置对于模型的所有应用程序都是可以使用的，但它并不是 CMAQ 可以使用的唯一设置。ICON 和 BCON 科学选项取决于输入数据性质、化学机制选择以及是否使用单向嵌套。CCTM 科学设置提供了不同的传输算法、化学选项和特殊功能的组合，如过程分析。要查看可用于 CCTM 的所有选项，请参阅第 7 章。并非所有 CCTM 配置选项的组合都已进行过测试。不同科学模块的某些组合可能无法构建模拟可执行文件。以下是几个 CCTM 配置规则：

- 对于使用 Yamartino 模型驱动程序的配置，必须将 Yamartino 选项用于初始化模块、对流程和浓度调整方案。
- 确保化学机制和气溶胶模块的选择具有一致性；例如，aero6 气溶胶模块不能与标有"ae5"的化学机制一起使用。
- EBI 化学解算器与机制相关，必须与化学机制一致；例如，CB05 的 EBI 解算器不能与 SAPRC07 化学机制一起使用。

CMAQ 中不同科学选项的可用性有助于灵活地选择针对不同模拟任务的选项配置。通过测试与模型精度和速度有关的各种科学配置，CMAQ 用户可以找到科学选项的组合，为特定的建模研究提供最佳性能。

10.3 参考文献

GEOS-CHEM(2009)http://wiki.seas.harvard.edu/geos-chem/index.php/Main_Page
ge
MOZART(2009),<http://www.mpimet.mpg.de/en/wissenschaft/modelle/mozart.html>
ml

大气污染模拟

第十一章 代码管理和开发

作为社区开源模型，CMAQ 是许多开发人员贡献的产物，预计贡献人员量会随着全球用户数量的增加而增加。这些代码提交给 CMAS 中心进行存档和基准测试的工作，需要标准化管理和归档。本章提供有关源代码管理、新代码开发编码指南、使用生成脚本编译新源代码以及编写 CMAQ 可用的 shell 脚本的指南。这些信息的大部分来源于 Byun 和 Ching (1999) 的第 18 章 (Young, 1999)，并进行了相关更新，特别是对于模型代码的新版本和 Fortran 90 标准。本章还包括 CMAQ 分发代码的开发过程介绍。

11.1 源代码管理

11.1.1 需要的配置管理工具

面对不断开发的程序、模块和代码，必须系统地管理用户对该软件的访问。以下为软件的科学管理内容：

- 存储库 – 所有公共代码所在的位置。
- 存档代码的概念 – 已存入存储库的代码，以便任何用户都可以在以后提取精确的代码。这涉及某种类型的转换程序，用于维护具有嵌入式更改表的代码主副本。
- 版本控制的概念 – 存档代码的结果是修改主副本更改表中的标签或唯一的版本标识符，以便在以后恢复准确的代码。
- 已发布代码的概念 – 已经达到某种成熟状态并已被指定为某种“已发布”状态的代码。它们的使用具有合理的可靠性预期。所使用的范式采用了以下场景：
 1. 用户修改或开发代码。代码可以是一个子程序，也可以是多个子程序，也可以构成整个科学模块。代码可以“从头开始”，也可以从存储库中提取并修改。
 2. 对代码完成测试后，可将其保存在存储库中，以便其他人可以访问它。
 3. 一些存档代码可能仍处于试验或开发状态，而其他代码可能相当稳定，并且经过了更完整的测试。后者可以被指定为“released”。在一个实验性或已释

放状态下，没有强制执行的手段来控制访问。社区将会并且应该能够不加区别地访问，并且清楚地意识到使用开发状态代码是有风险的。

4. 当用户继续使用代码时，他可能会进行改进或发现并修复错误。然后将升级安装到存储库中，存储库将自动分配唯一的修订标识符。

5. 存储库位于所有用户都可以方便访问的位置，并由设置和实施一般访问规则的管理员维护。

11.1.2 选择配置管理工具

在 CMAQ5.0.2 版本之前，CMAQ 开发人员使用 CVS 进行版本控制，分布式 tarball 包含 CVS 工件（例如，名称以“，v”结尾的文件）。从版本 5.0.2 开始，CMAQ 开发人员切换到 git。

11.1.3 git 解释

git 是一个支持分布式工作的版本控制系统。每个 Git 目录都是一个完整的存储库，具有完整的历史记录和版本跟踪。

- 它可以在几乎所有的 UNIX 和 Linux 平台以及许多 PC 上工作。 - 它是公开和免费的，并且根据 GNU 通用公共许可证的条款分发。 - 如果要对 EPA CMAQ 存储库进行更改，请使用以下步骤：1.在 <https://github.com/>创建一个 github 帐户；2.转到 EPA github 站点，并将用户自己的 EPA CMAQ 副本存入 github 帐户；3.在计算机上创建一个名为 CMAQv5.2 的目录，用户获取代码副本；4.git 克隆 -b 5.2 [https://github.com/<your github name>/CMAQ.git](https://github.com/your_github_name/CMAQ.git) CMAQv5.2 - 从 github 站点获取 CMAQ5.2 的克隆包或副本；5.将 5.2 版本副本放入 CMAQv5.2 目录；6.进入 CMAQv5.2 目录；7.确认存储库中的文件和当前已使用文件；8.将 5.2_update 复制到新的 5.2_update 目录中；9. 用以下步骤编辑 config_cmaq.csh 文件：vi config_cmaq.csh - 或使用 Atom、TextWrangler 或其他编辑器；10.使用以下命令 git diff config_cmaq.csh 查看已做的更改；11.使用以下命令行 git add config_cmaq.csh 进行更改；12.使用命令 git commit -m "changed config_cmaq.csh to fix issue X" 更改库位置；13. 使用命令 git push 更改用户的 Github 至 5.2_update 目录；14.如果用户收到一条消息，指出推送被拒绝，如下所示：！ [rejected] 5.2_update -> 5.2_update (fetch first) error: failed to push some refs to 'https://github.com/CEMPD/CMAQ.git' hint: Updates were rejected, 因为没有进行

本地化工作，这通常是由另一个存储库推送提示引起的：到相同的 ref。您可能需要首先集成远程更改提示，然后再次推送。提示：有关详细信息，请参阅“git push --help”；15. 自上次克隆以来，Github 存储库上的文件已更改。使用以下命令获取对远程 git 存储库所做的更改：git pull ；16.如果没有与文件更改冲突的更改，系统将要求您合并这些文件。如果成功，您将看到类似于以下内容的消息，显示更改了哪些文件。Merge made by the 'recursive' strategy. config_cmaq.csh | 4 ++-- 1 file changed, 2 insertions(+), 2 deletions(-) ；17.重新推送命令，将提交到本地存储库的更改放在 Github 存储库上：git push；18.在 github 页面上的 EPA CMAQ，将您所做的更改合并到 EPA github 站点中。

11.2 制定新的 CMAQ 源代码的准则

11.2.1 面向对象的概念

为了使 CMAQ 系统稳定而灵活，在系统设计中引入了面向对象的概念。这些想法的结合有助于开发人员在需要修改代码时避免引入错误。此外，系统可以方便高效地修改，允许用户快速地为不同的应用程序创建模型。CMAQ 的实现语言是 Fortran 90，它限制了在面向对象设计方面的发展。特别是，由于 Fortran 是一种静态语言，对象不能动态实例化；它们必须在编译时创建的源代码中显式声明。然而，为了鼓励用户社区为未来的增强功能贡献代码，已经做了各种努力来坚持遵循 Fortran 90 标准。

11.2.2 全球数据名称表

为了实现模块化和数据独立性，我们采用了大量来自“继承”和代码重用的面向对象概念的设计理念。代码中处理化学机制、I/O API、逻辑文件名、一般常量和指针的数据结构是由 CMAQ 系统中的数据和参数语句中的 Fortran 声明决定的。这些数据结构属于一个特定应用程序，并且是全局应用的，不仅仅是通过其所有子例程序应用于一个特定的 CCTM，而且也适用于为 CCTM 提供该应用程序数据的所有模型。这些数据结构包含在 Fortran INCLUDE 文件中，这些文件本质上是头文件，包含在 Fortran 代码源文件顶部的声明部分。这些源文件通过 INCLUDE 文件的通用字符串自动进行编写，该字符串在编译的预处理阶段被解析并扩展到实际的 INCLUDE 文件。Fortran 全局 INCLUDE 文件包含：

1. 化学机制;
2. I/O API 接口, 包括逻辑文件名;
3. 全局建模常数;
4. 应用于整个模型的其他常量或参数。

为了将 INCLUDE 文件的实现到代码中, 通过特殊的编译系统 Bldmake 读取基于应用程序的配置文件, 该编译系统决定可执行文件的创建。ASCII 配置文件可以由 CMAQ 系统生成, 也可以由用户按照一些简单的语法规则生成。除了全局 INCLUDE 文件之外, 配置文件还包含模块命令, 这些命令指示 Bldmake 从模型代码存储库中提取该模块的代码以供编译。

11.2.3 便捷接口

如第 4 章所述, CMAQ 被设计成在模块交换和消除跨模块数据依赖方面是稳定和灵活的。因此, 在设计中使用了“便捷接口”的概念, 它主要应用于类驱动 (即科学模块的顶层调用)。便捷接口的实现要包含以下几方面要求:

- 消除全局内存引用 (跨模块)。这意味着没有跨模块的公共块, 没有隐藏的数据路径, 也没有“后门”。
- 每个模块独立地读取和插入所需的数据。I/O API 有助于确保此类数据独立性。
- 用于调用类驱动的标准参数列表 (CGRID, Date, Time, TimeStep)。请参阅第 9.2.6 节中的示例。这些需求试图在 CMAQ 设计中加入封装的面向对象思想。Rumbaugh 等人 (1991 年) 认为“封装” (即信息隐藏) 包括将对象的外部方面 (其他对象可以访问) 与对象的内部实现细节 (对其他对象隐藏) 分离开来。封装防止程序变得过于依赖, 以避免一个小的变化会产生巨大的连锁反应。可以更改对象的实现而不影响使用它的应用程序。

封装设计使 CMAQ 系统更安全, 并具有事务处理、即插即用的功能。这种设计还使用户能够更容易跟踪模块内的数据和使用情况, 特别是在类驱动程序级别。

11.2.4 编码准则

为了维护在 CMAQ 系统设计中实现面向对象的概念, 我们已经建立了一套适用于开发 CMAQ 科学模块并影响模型的底层设计的代码指导原则。我们已经

开发了在类驱动程序级别控制数据依赖关系的标准，但我们还没有将这些编码标准扩展到子模块级别。

1. 这些模型通常是用 Fortran 编写的，可以链接用 C 语言编写的子例程，尽管在当前的 CMAQ 中还没有这样做。虽然 Fortran 90 编译器可编译 Fortran 77 代码，但反过来就不正确了。因此，Makefiles 设置为调用 Fortran 90 编译器。

2. 为了实现 Fortran 77 编译器和 Fortran 90 代码之间的代码兼容性，提供了以下指南：Fortran 90 中允许超过 72 个字符的行长度，但在 Fortran 77 不允许；因此，在第一行第 73 列和第 6 列 Fortran 90 代码下一行之间插入 ‘&’ 将确保两个编译器的兼容性。

3. 模块必须由顶级类驱动程序控制，其调用参数必须是计算集中网格数组 (CGRID)、当前场景日期 (Date)、场景时间 (Time) 和控制时间步长 (TimeStep)。(见上文第 9.2.3 节)

4. 类驱动程序还负责模块内所需的任何时间积分。

5. 模块的任何读取和写入应在类驱动程序例程的级别上完成。尽管不是绝对对要的，但强烈建议这样做，因为已知当前场景日期和时间的模块的最高级别控制数据访问的时间通常要容易的多。

6. 使用 Fortran IMPLICIT NONE 来维护对排版错误和未定义变量的一些控制。使用 IMPLICIT NONE 强制开发人员声明所有内部变量。这是 Fortran 90 的标准。

7. 使用全局 INCLUDE 文件获取化学机制数据和其他数据。

8. 在适当情况下，为外部数据引用使用 I/O API。有关这些规则的说明，请参阅第 9.2.6 节中提供的代码模板。

在子模块级别，没有严格的 I/O 或编码标准。这里的设想是，开发人员可自己使用他们自己的风格编写算法进行实现。然而，以下建议有助于将模块并入 CMAQ 系统中：

- 通常，MKS 单元用于输入和输出变量，因为这些单元已在整个 CMAQ 系统中进行标准化处理。在子模块子例程中，可以使用任何最方便的单元。但是，开发人员必须将使用的单元转换到 MKS 输入和输出，从而避免潜在的错误。

- 考虑到效率和性能，操作可能需要在的一组网格单元（一个单元块）上完成。如果块中有 N 个单元，整个域包含 M 个单元，则可以将整个域分解为 M/N 块。 N 的默认值设置为 500。对于水平 (x, y) 中的操作，单元格约束变为 $X \times Y \leq N$ ，其中 X 为 x 方向中的单元格数， Y 为 y 方向的单元格数。对于水平和垂直操作，约束变为 $X \times Y \times Z \leq N$ ，其中 Z 为 z 方向中的单元格数。在某些操作中，例如对一些水平对流方案，分解成块会变得更加困难或不可能。

11.2.5 文档指南

适用的文档对 CMAQ 开发代码的易用性和可维护性至关重要。CMAQ 的官方发布版本包含大量在线文档，并尽可能包含相关的技术信息。鉴于越来越多的开发人员和代码模块的加入，CMAQ 开发的新代码需符合以下准则：

- 应针对新代码和修改代码，保留修订历史记录，记录修订的作者、日期和性质。修订历史记录显示在子例程的顶部。
- 应尽可能提供对相关技术文档的完整引用，并在修订历史记录说明后立即列在注释行中。它们应在相关代码段之前或嵌入到相关代码段之前引用。
- 强烈建议在子例程和 INCLUDE 文件中提供指示单元可变定义的在线文档，以便将来实现代码修改。此信息通常包含在每个变量声明的注释中。

11.2.6 科学过程代码模板

CMAQv4.7 中示例演示了一个科学过程类驱动程 Fortran 90 子例程。代码开发人员应该在适当的时候遵循这个模板，以最大限度地从 CMAQ 实现的设计概念中获益。这个模板是通用的，演示了许多可用的特性。模块中的一些类驱动程序和大多数其他子程序可能不具备，也不需要这些特性中的大部分或任何一种。

```
C:.....
SUBROUTINE VDIFF ( CGRID, JDATE, JTIME, TSTEP )
C-----
C Asymmetric Convective Model v2 (ACM2) -- Pleim(2006)
C Function:
C calculates and writes dry deposition.
C calculates vertical diffusion
C Subroutines and Functions Called:
```

```
C INIT3, SEC2TIME, TIME2SEC, WRITE3, NEXTIME,  
C      M3EXIT,      EDDYX,      TRI,      MATRIX,      PA_UPDATE_EMIS,  
PA_UPDATE_DDEP
```

C Revision History:

C Analogous to VDIFFIM (Eddy diffusion PBL scheme)

C 03 Mar 16 G.Sarwar: updated for halogen emissions

C 16 Sep 16 J.Young: update for inline procan (IPR)

C-----

...

C-----

USE CGRID_SPCS ! CGRID mechanism species

USE GRID_CONF

USE EMIS_DEFN

USE DEPV_DEFN

USE ASX_DATA_MOD

USE VDIFF_MAP

USE UTILIO_DEFN

USE BIDI_MOD

USE HGSIM

USE LSM_MOD, Only: n_lufrac

USE SEDIMENTATION

USE VDIFF_DIAG

USE PA_DEFN, Only: LIPR ! Process Analysis control and data variables

IMPLICIT NONE

INCLUDE SUBST_FILES_ID ! file name parameters

CHARACTER(120) :: XMSG = ''

C Arguments:

REAL, POINTER :: CGRID(:, :, :, :) ! concentrations

INTEGER JDATE ! current model date, coded YYYYDDD

```

INTEGER JTIME ! current model time, coded HHMMSS
INTEGER TSTEP( 3 ) ! time step vector (HHMMSS)
! TSTEP(1) = local output step
! TSTEP(2) = sciproc sync. step (chem)
! TSTEP(3) = twoway model time step w.r.t. wrf time
! step and wrf/cmaq call frequency

C Parameters:

C External Functions: None

C Local Variables:

CHARACTER( 16 ), SAVE :: PNAME = 'VDIFFPROC'
CHARACTER( 16 ), SAVE :: AERO_GRAV_SETL = 'CTM_GRAV_SETL'
CHARACTER( 80 ) :: VARDESC ! env variable description
LOGICAL, SAVE :: GRAV_SETL
LOGICAL, SAVE :: FIRSTIME = .TRUE.
LOGICAL, SAVE :: WRITE_FIRSTIME = .TRUE.
INTEGER, SAVE :: WSTEP = 0 ! local write counter
INTEGER STATUS ! ENV... status

REAL :: FCJACMF( NCOLS,NROWS,NLAYS ) ! 1/ mid-full layer vert Jac
factor

REAL LRDX3M ! loop local RDX3M( L )
REAL FCMSF ! loop local RMSFX4( C,R )
REAL, ALLOCATABLE, SAVE :: CNGRD( :,::, ) ! cgrid aero in mixing ratio
REAL, ALLOCATABLE, SAVE :: DDEP ( :,::, ) ! ddep accumulator
REAL, ALLOCATABLE, SAVE :: ICMP ( :,::, ) ! component flux accumulator
REAL, ALLOCATABLE, SAVE :: DDEPJ ( :,::, ) ! ddep for mosaic
REAL, ALLOCATABLE, SAVE :: DDEPJ_FST( :,::, ) ! ddep for
stomtal/cuticular pathway

REAL :: WRDD( NCOLS,NROWS ) ! ddep write buffer

```

REAL :: WRDDJ(NCOLS,NROWS,N_LUFRAC+1) ! mosaic ddep write
buffer

REAL :: WRDDJ_FST(NCOLS,NROWS,N_LUFRAC+1) ! mosaic stomatal
flux write buffer

REAL, ALLOCATABLE, SAVE :: DDEP_PA (:, :,) ! ddep for process analysis

REAL, ALLOCATABLE, SAVE :: EMIS_PA(:, :,) ! emis for process analysis

INTEGER, SAVE :: N_SPC_CGRID ! no. of CGRID species

REAL :: EDDYV (NCOLS,NROWS,NLAYS) ! from EDYINTB

REAL :: SEDDY (NLAYS,NCOLS,NROWS) ! flipped EDDYV

REAL DTSEC ! model time step in seconds

REAL, ALLOCATABLE, SAVE :: VSED_AE(:, :,)

C Local Variables

INTEGER, SAVE :: LOGDEV

INTEGER ASTAT

INTEGER C, R, L, S, V, I, J, OFF ! loop induction variables

INTEGER MDATE, MTIME, MSTEP ! internal simulation date&time

INTERFACE

SUBROUTINE PA_UPDATE_EMIS (PNAME, VDEMIS, JDATE, JTIME,
TSTEP)

CHARACTER(*), INTENT(IN) :: PNAME

REAL, INTENT(IN) :: VDEMIS(:, :,)

INTEGER, INTENT(IN) :: JDATE, JTIME

INTEGER, INTENT(IN) :: TSTEP(3)

END SUBROUTINE PA_UPDATE_EMIS

SUBROUTINE PA_UPDATE_DDEP (PNAME, DDEP, JDATE, JTIME,
TSTEP)

CHARACTER(*), INTENT(IN) :: PNAME

REAL, INTENT(IN) :: DDEP(:, :,)

INTEGER, INTENT(IN) :: JDATE, JTIME


```

INTEGER, INTENT( IN ) :: TSTEP( 3 )
END SUBROUTINE PA_UPDATE_DDEP
SUBROUTINE CONV_CGRID ( CGRID, JDATE, JTIME, CNGRD )
REAL, POINTER :: CGRID( :,:,: )
INTEGER, INTENT( IN ) :: JDATE, JTIME
REAL, INTENT( INOUT ) :: CNGRD( :,:,: )
END SUBROUTINE CONV_CGRID
SUBROUTINE REV_CGRID ( CNGRD, JDATE, JTIME, CGRID )
REAL, INTENT( INOUT ) :: CNGRD( :,:,: )
INTEGER, INTENT( IN ) :: JDATE, JTIME
REAL, POINTER :: CGRID( :,:,: )
END SUBROUTINE REV_CGRID
SUBROUTINE EDDYX ( EDDYV )
REAL, INTENT( OUT ) :: EDDYV( :,:,: )
END SUBROUTINE EDDYX
SUBROUTINE VDIFFACMX( dtsec, seddy, ddep, icmp, ddepj, ddepj_fst,
cngrd )
REAL, INTENT( IN ) :: dtsec
REAL, INTENT( INOUT ) :: seddy( :,:,: )
REAL, INTENT( INOUT ) :: ddep ( :,:,: )
REAL, INTENT( INOUT ) :: icmp ( :,:,: )
REAL, INTENT( INOUT ), OPTIONAL :: ddepj ( :,:,: )
REAL, INTENT( INOUT ), OPTIONAL :: ddepj_fst( :,:,: )
REAL, INTENT( INOUT ) :: cngrd( :,:,: )
END SUBROUTINE VDIFFACMX
END INTERFACE
C-----
IF ( FIRSTIME ) THEN
FIRSTIME = .FALSE.

```

```

LOGDEV = INIT3()
IF ( .NOT. DEPV_INIT ( JDATE, JTIME, TSTEP, CGRID ) ) THEN
XMSG = 'Failure initializing deposition velocities module'
CALL M3EXIT ( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF

C create global maps
IF ( .NOT. VDIFF_MAP_INIT( N_SPC_DEPV ) ) THEN
XMSG = 'Failure initializing index mapping module'
CALL M3EXIT ( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF

C Initialize the met data
CALL INIT_MET( JDATE, JTIME, MOSAIC, ABFLUX, HGBIDI )
IF ( HGBIDI ) THEN ! Initialize HGSIM module
CALL INIT_HGSIM(JDATE, JTIME)
END IF

C Get gravitational settling (sed) flag.
GRAV_SETL = .TRUE. ! default
VARDESC = 'Using J,K-mode aerosols gravitational settling'
GRAV_SETL = ENVYN( AERO_GRAV_SETL, VARDESC, GRAV_SETL,
STATUS )

IF ( STATUS .EQ. 0 ) WRITE( LOGDEV, '(5X, A)' ) VARDESC

C Get diagnostic files flag.
VDIFFDIAG = .FALSE. ! default
VARDESC = 'Writing the VDIFF diagnostic files'
VDIFFDIAG = ENVYN( VDIFF_DIAG_FILE, VARDESC, VDIFFDIAG,
STATUS )

IF ( STATUS .EQ. 0 ) WRITE( LOGDEV, '(5X, A)' ) VARDESC

C Set output file characteristics based on COORD.EXT and open the dry dep file
IF ( IO_PE_INCLUSIVE ) THEN

```

```

CALL OPDDEP ( JDATE, JTIME, TSTEP( 1 ), N_SPC_DDEP, ABFLUX )
IF ( ABFLUX .OR. HGBIDI ) CALL OPASX_MEDIA( JDATE, JTIME,
TSTEP( 1 ), ABFLUX )
END IF
C Open vdiff diagnostics file (ioapi header from cgrd)
IF ( VDIFFDIAG ) THEN
IF ( .NOT. VDIFF_DIAG_INIT ( JDATE, JTIME, TSTEP( 1 ), GRAV_SETL ) )
THEN
XMSG = 'Failure initializing vdiff diagnostics module'
CALL M3EXIT ( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1
END IF
END IF
C Allocate and initialize dry deposition array
ALLOCATE ( DDEP( N_SPC_DEPV, NCOLS, NROWS ), STAT = ASTAT )
IF ( ASTAT .NE. 0 ) THEN
XMSG = 'Failure allocating DDEP'
CALL M3EXIT( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
DDEP = 0.0 ! array assignment
ALLOCATE ( ICMP( LCMP, NCOLS, NROWS ), STAT = ASTAT )
IF ( ASTAT .NE. 0 ) THEN
XMSG = 'Failure allocating ICMP'
CALL M3EXIT( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
ICMP = 0.0 ! array assignment
IF ( .NOT. EMIS_INIT ( JDATE, JTIME, TSTEP( 1 ) ) ) THEN
XMSG = 'Failure initializing emissions module'
CALL M3EXIT ( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF

```

```

C Set up for process analysis
IF ( LIPR ) THEN
  ALLOCATE ( EMIS_PA( NCOLS,NROWS,EMLAYS,N_SPC_EMIS+1 ),
STAT = ASTAT )
  IF ( ASTAT .NE. 0 ) THEN
    XMSG = 'EMIS_PA memory allocation failed'
    CALL M3EXIT ( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
  END IF
  ALLOCATE ( DDEP_PA( NCOLS,NROWS,N_SPC_DEPV ), STAT = ASTAT )
  IF ( ASTAT .NE. 0 ) THEN
    XMSG = 'DDEP_PA memory allocation failed'
    CALL M3EXIT ( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
  END IF
END IF

C Set up for grav. settling
IF ( GRAV_SETL ) THEN
  ALLOCATE ( VSED_AE( N_AE_SPC,NLAYS,NCOLS,NROWS ), STAT =
ASTAT )
  IF ( ASTAT .NE. 0 ) THEN
    XMSG = 'Failure allocating VSED_AE'
    CALL M3EXIT( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
  END IF
END IF
N_SPC_CGRID = SIZE ( CGRID,4 )
ALLOCATE ( CNGRD( N_SPC_CGRID,NLAYS,NCOLS,NROWS ), STAT =
ASTAT )
IF ( ASTAT .NE. 0 ) THEN
  XMSG = 'Failure allocating CNGRD'
  CALL M3EXIT( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )

```

```

END IF

CNGRD = 0.0 ! array assignment

IF ( MOSAIC ) THEN

  ALLOCATE ( DDEPJ( N_LUFRAC,N_SPC_DEPV,NCOLS,NROWS ), STAT =
ASTAT )

  IF ( ASTAT .NE. 0 ) THEN
    XMSG = 'Failure allocating DDEPJ'
    CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
  END IF

  DDEPJ = 0.0 ! array assignment

  IF ( IO_PE_INCLUSIVE )
    & CALL OPDDEP_MOS ( JDATE, JTIME, TSTEP( 1 ), N_SPC_DDEP )
  IF ( FST ) THEN
    ALLOCATE ( DDEPJ_FST( N_LUFRAC,N_SPC_DEPV,NCOLS,NROWS ),
STAT = ASTAT )
    IF ( ASTAT .NE. 0 ) THEN
      XMSG = 'Failure allocating DDEPJ_FST'
      CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
    END IF
    DDEPJ_FST = 0.0 ! array assignment
    IF ( IO_PE_INCLUSIVE )
      & CALL OPDDEP_FST ( JDATE, JTIME, TSTEP( 1 ), N_SPC_DDEP )
    END IF ! if Fst
  END IF ! if Mosaic
END IF ! if Firsttime

MDATE = JDATE
MTIME = JTIME
MSTEP = TIME2SEC( TSTEP( 2 ) )
DTSEC = FLOAT( MSTEP )

```

```

CALL NEXTIME ( MDATE, MTIME, SEC2TIME( MSTEP / 2 ) )
C Convert non-molar mixing ratio species and re-order CGRID
CALL CONV_CGRID ( CGRID, MDATE, MTIME, CNGRD )
C read & interpolate met data
CALL GET_MET ( MDATE, MTIME, MSTEP, MOSAIC, ABFLUX, HGBIDI )
C read & interpolate deposition velocities
CALL GET_DEPV ( MDATE, MTIME, TSTEP, CGRID )
IF ( GRAV_SETL ) THEN
C Get gravitational settling velocity for the vsed aero species:
C AERO_SEDV assumes that every aero species is dry deposited and is diffused
(trns)
C Calculate the changes in the layer J-,K-mode aerosol concentrations
CALL SEDI( MDATE, MTIME, DTSEC, VSED_AE, CGRID, CNGRD )
END IF
C read & interpolate emissions data => VDEMIS from EMIS_DEFN module
CALL GET_EMIS ( MDATE, MTIME, TSTEP, CONVPA, CGRID )
IF ( LIPR ) THEN
DO S = 1, N_SPC_EMIS+1
DO L = 1, EMLAYS
DO R = 1, MY_NROWS
DO C = 1, MY_NCOLS
EMIS_PA( C,R,L,S ) = VDEMIS( S,L,C,R )
END DO
END DO
END DO
END DO
CALL PA_UPDATE_EMIS ( 'VDIF', EMIS_PA, JDATE, JTIME, TSTEP )
END IF
CALL EDDYX ( EDDYV )

```

```

C EDDYV returned = Kz, where Kz is in m**2/sec
DO L = 1, NLAYS
  LRDX3M = Grid_Data%RDX3M( L )
  DO R = 1, MY_NROWS
    DO C = 1, MY_NCOLS
      FCJACMF( C,R,L ) = LRDX3M * Met_Data%RJACM( C,R,L ) *
Met_Data%RJACF( C,R,L )
    END DO
  END DO
END DO

DO R = 1, MY_NROWS
  DO C = 1, MY_NCOLS
    FCMSF = Grid_Data%RMSFX4( C,R )
    DO L = 1, NLAYS
      SEDDY( L,C,R ) = FCMSF * FCJACMF( C,R,L ) * EDDYV( C,R,L )
    END DO
  END DO
END DO

IF ( WSTEP .EQ. 0 ) THEN
  DDEP = 0.0 ! array assignment
  ICMP = 0.0 ! array assignment
  IF ( MOSAIC ) THEN
    DDEPJ = 0.0 ! array assignment
    IF ( FST ) DDEPJ_FST = 0.0 ! array assignment
  END IF
END IF

C Calculate the change in concentration and dry dep from vertical diffusion and
vsed

```

C Note: cngrd is the argument keyword (from the INTERFACE); CNGRD is the actual argument

```
IF ( .NOT. MOSAIC ) THEN
CALL VDIFFACMX( DTSEC, SEDDY, DDEP, ICMP,
& cngrd = CNGRD )
ELSE
IF ( .NOT. FST ) THEN
CALL VDIFFACMX( DTSEC, SEDDY, DDEP, ICMP,
& ddepj = DDEPJ, cngrd = CNGRD )
ELSE
CALL VDIFFACMX( DTSEC, SEDDY, DDEP, ICMP,
& ddepj = DDEPJ, ddepj_fst = DDEPJ_FST, cngrd = CNGRD )
END IF
END IF
IF ( VDIFFDIAG ) THEN
NTICS = NTICS + 1
NLPCR_SUM = NLPCR_SUM + NLPCR_MEAN ! array assignment
DO R = 1, MY_NROWS
DO C = 1, MY_NCOLS
NLPCR_MAX( C,R ) = MAX( NLPCR_MEAN( C,R ), NLPCR_MAX( C,R ) )
NLPCR_MIN( C,R ) = MIN( NLPCR_MEAN( C,R ), NLPCR_MIN( C,R ) )
END DO
END DO
IF ( GRAV_SETL ) THEN
DTCCR_SUM = DTCCR_SUM + DTCCR_MEAN ! array assignment
DO R = 1, MY_NROWS
DO C = 1, MY_NCOLS
DTCCR_MAX( C,R ) = MAX( DTCCR_MEAN( C,R ), DTCCR_MAX( C,R ) )
DTCCR_MIN( C,R ) = MIN( DTCCR_MEAN( C,R ), DTCCR_MIN( C,R ) )
```



```

END DO
END DO
END IF
END IF

C Revert non-molar mixing ratio species and re-order CGRID
CALL REV_CGRID ( CNGRD, MDATE, MTIME, CGRID )

C If last call this hour: write accumulated depositions:
WSTEP = WSTEP + TIME2SEC( TSTEP( 2 ) )
IF ( WSTEP .GE. TIME2SEC( TSTEP( 1 ) ) ) THEN
MDATE = JDATE
MTIME = JTIME
CALL NEXTIME( MDATE, MTIME, TSTEP( 2 ) )
WSTEP = 0
#ifdef parallel_io
IF ( WRITE_FIRSTIME ) THEN
WRITE_FIRSTIME = .FALSE.
IF ( .NOT. IO_PE_INCLUSIVE ) THEN
IF ( .NOT. OPEN3( CTM_DRY_DEP_1, FSREAD3, PNAME ) ) THEN
XMSG = 'Could not open ' // TRIM(CTM_DRY_DEP_1)
CALL M3EXIT( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
IF ( MOSAIC ) THEN
IF ( .NOT. OPEN3( CTM_DRY_DEP_MOS, FSREAD3, PNAME ) ) THEN
XMSG = 'Could not open ' // TRIM(CTM_DRY_DEP_MOS)
CALL M3EXIT( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
IF ( FST ) THEN
IF ( .NOT. OPEN3( CTM_DRY_DEP_FST, FSREAD3, PNAME ) ) THEN
XMSG = 'Could not open ' // TRIM(CTM_DRY_DEP_FST)

```

```

CALL M3EXIT( PNAME, JDATE, JTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
END IF
END IF
END IF ! .NOT. IO_PE_INCLUSIVE
END IF
#endif
DO V = 1, N_SPC_DDEP
S = DD2DV( V )
DO R = 1, MY_NROWS
DO C = 1, MY_NCOLS
WRDD( C,R ) = DDEP( S,C,R )
END DO
END DO
IF ( .NOT. WRITE3( CTM_DRY_DEP_1, DDEP_SPC( V ),
& MDATE, MTIME, WRDD ) ) THEN
XMSG = 'Could not write' // CTM_DRY_DEP_1 // ' file'
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
IF ( ABFLUX .AND. TRIM( DDEP_SPC( V ) ) .EQ. 'NH3' ) THEN
DO I = 1, LCMP
DO R = 1, MY_NROWS
DO C = 1, MY_NCOLS
WRDD( C,R ) = ICMP( I,C,R )
END DO
END DO
IF ( .NOT. WRITE3( CTM_DRY_DEP_1, CMPSPC( I ),
& MDATE, MTIME, WRDD ) ) THEN
XMSG = 'Could not write ' // CTM_DRY_DEP_1 // ' file'

```

```

CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
END DO
ENDIF
END DO

WRITE( LOGDEV, '( /5X, 3( A, :, 1X ), I8, ":", I6.6 )' )
& 'Timestep written to', CTM_DRY_DEP_1,
& 'for date and time', MDATE, MTIME

C Write vdiff diagnostics
IF ( VDIFFDIAG ) THEN
IF ( GRAV_SETL ) THEN ! Write vsed diagnostics
DO V = 1, N_VSED
S = VSED_MAP( V )
DO L = 1, NLAYS
DO R = 1, MY_NROWS
DO C = 1, MY_NCOLS
VSED_BUF( C,R,L,V ) = VSED_AE( S,L,C,R )
END DO
END DO
END DO

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VSED_DIAG, VSED_NAME( V ),
& MDATE, MTIME, VSED_BUF( 1,1,1,V ) ) ) THEN
XMSG = 'Could not write ' // TRIM( VSED_NAME( V ) )
& //' to ' // CTM_VSED_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
END DO

WRITE( LOGDEV, '( /5X, 3( A, :, 1X ), I8, ":", I6.6 )' )
& 'Timestep written to', CTM_VSED_DIAG,

```

```

& 'for date and time', MDATE, MTIME
END IF ! GRAV_SETL

C Write other diagnostics

NLPCR_MEAN = NLPCR_SUM / FLOAT( NTICS )

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VDIFF_DIAG, 'NLP_MEAN',
& MDATE, MTIME, NLPCR_MEAN ) ) THEN

XMSG = 'Could not write ' // 'NLP_MEAN to ' // CTM_VDIFF_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )

END IF

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VDIFF_DIAG, 'NLP_MAX',
& MDATE, MTIME, NLPCR_MAX ) ) THEN

XMSG = 'Could not write ' // 'NLP_MAX to ' // CTM_VDIFF_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )

END IF

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VDIFF_DIAG, 'NLP_MIN',
& MDATE, MTIME, NLPCR_MIN ) ) THEN

XMSG = 'Could not write ' // 'NLP_MIN to ' // CTM_VDIFF_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )

END IF

NLPCR_MAX = 0.0 ! array assignment
NLPCR_MIN = 9.9E30 ! array assignment
NLPCR_SUM = 0.0 ! array assignment

IF ( GRAV_SETL ) THEN ! Write vsed diagnostics

DTCCR_MEAN = DTCCR_SUM / FLOAT( NTICS )

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VDIFF_DIAG, 'SEDI_DTC_MEAN',
& MDATE, MTIME, DTCCR_MEAN ) ) THEN

XMSG = 'Could not write ' // 'SEDI_DTC_MEAN to ' // CTM_VDIFF_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )

END IF

```

```

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VDIFF_DIAG, 'SEDI_DTC_MAX',
& MDATE, MTIME, DTCCR_MAX ) ) THEN
XMSG = 'Could not write ' // 'SEDI_DTC_MAX to ' // CTM_VDIFF_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VDIFF_DIAG, 'SEDI_DTC_MIN',
& MDATE, MTIME, DTCCR_MIN ) ) THEN
XMSG = 'Could not write ' // 'SEDI_DTC_MIN to ' // CTM_VDIFF_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF

DTCCR_MAX = 0.0 ! array assignment
DTCCR_MIN = 9.9E30 ! array assignment
DTCCR_SUM = 0.0 ! array assignment
END IF

CNVCT = 0.0 ! array assignment
DO R = 1, MY_NROWS
DO C = 1, MY_NCOLS
IF ( Met_Data%CNVCT( C,R ) ) CNVCT( C,R ) = 1.0
END DO
END DO

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VDIFF_DIAG, 'CNVCT',
& MDATE, MTIME, CNVCT ) ) THEN
XMSG = 'Could not write ' // 'cnvct to ' // CTM_VDIFF_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_VDIFF_DIAG, 'LPBL',
& MDATE, MTIME, REAL( Met_Data%LPBL ) ) ) THEN
XMSG = 'Could not write ' // 'lpbl to ' // CTM_VDIFF_DIAG
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )

```

```

END IF

WRITE( LOGDEV, '( /5X, 3( A, :, 1X ), I8, ":", I6.6, I6 )' )

& 'Timestep written to', CTM_VDIFF_DIAG,

& 'for date and time (and ntics)', MDATE, MTIME, NTICS

NTICS = 0

END IF

IF ( MOSAIC ) THEN

DO V = 1, N_SPC_DDEP

S = DD2DV( V )

WRDD = 0.0 ! reuse array since it has already been written for hour

DO R = 1, MY_NROWS

DO C = 1, MY_NCOLS

DO J = 1, N_LUFRAC

WRDD( C,R ) = WRDD( C,R ) + DDEPJ( J,S,C,R ) *

Grid_Data%LUFRAC( C,R,J ) / N_LUFRAC

END DO

WRDDJ( C,R,N_LUFRAC+1 ) = WRDD( C,R ) ! last array element is total

across END DO

END DO

IF ( .NOT. WRITE3( CTM_DRY_DEP_MOS, DDEP_SPC( V ),

& MDATE, MTIME, WRDDJ ) ) THEN

XMSG = 'Could not write ' // CTM_DRY_DEP_MOS // ' file'

CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )

END IF

END DO

WRITE( LOGDEV, '( /5X, 3( A, :, 1X ), I8, ":", I6.6 )' )

& 'Timestep written to', CTM_DRY_DEP_MOS,

& 'for date and time', MDATE, MTIME

IF ( FST ) THEN

```

```

DO V = 1, N_SPC_DDEP
S = DD2DV( V )
WRDD = 0.0 ! reuse array since it has already been written for hour
DO R = 1, MY_NROWS
DO C = 1, MY_NCOLS
DO J = 1, N_LUFRAC
WRDD( C,R ) = WRDD( C,R ) + DDEPJ_FST( J,S,C,R ) *
Grid_Data%LUFRAC( WRDDJ_FST( C,R,J ) = DDEPJ_FST( J,S,C,R )
IF ( DDEPJ_FST( J,S,C,R ) .GT. DDEPJ( J,S,C,R ) ) THEN
WRITE( LOGDEV,* ) 'FST too big !!!'
WRITE( LOGDEV,* ) 'J,S,C,R = ', J, S, C, R
WRITE( LOGDEV,* ) 'DDEPJ,DDEPJ_FST: ', DDEPJ( J,S,C,R ),
DDEPJ_FST( WRITE( LOGDEV,* ) 'DDEP Species: ', DDEP_SPC( V )
WRITE( LOGDEV,* ) 'Time and date: ', MTIME, MDATE
END IF
END DO
WRDDJ_FST( C,R,N_LUFRAC+1 ) = WRDD( C,R ) ! last array element is
total END DO
END DO
IF ( .NOT. WRITE3( CTM_DRY_DEP_FST, DDEP_SPC( V ),
& MDATE, MTIME, WRDDJ_FST ) ) THEN
XMSG = 'Could not write ' // CTM_DRY_DEP_FST // ' file'
CALL M3EXIT( PNAME, MDATE, MTIME, XMSG, XSTAT1 )
END IF
END DO
WRITE( LOGDEV, '( /5X, 3( A, :, 1X ), I8, ":", I6.6 )' )
& 'Timestep written to', CTM_DRY_DEP_FST,
& 'for date and time', MDATE, MTIME
END IF ! FST

```

```

END IF ! MOSAIC

IF ( ABFLUX .OR. HGBIDI ) THEN

CALL WRASX_MEDIA( MDATE, MTIME, ABFLUX )

END IF

IF ( LIPR ) THEN

DO V = 1, N_SPC_DEPV

DO R = 1, MY_NROWS

DO C = 1, MY_NCOLS

DDEP_PA( C,R,V ) = DDEP( V,C,R )

END DO

END DO

END DO

CALL PA_UPDATE_DDEP ( 'VDIF', DDEP_PA, JDATE, JTIME, TSTEP )

END IF

C re-set dry deposition array to zero

DDEP = 0.0

ICMP = 0.0

IF ( MOSAIC ) THEN

DDEPJ = 0.0 ! array assignment

IF ( FST ) DDEPJ_FST = 0.0 ! array assignment

END IF

END IF

RETURN

END

```

笔记:

1. 标题注释 - 强烈建议用于内部文档。
2. USE 包括指定的 Fortran 源文件。
3. Fortran90 中必须使用 IMPLICIT NONE, 即不支持隐式声明。这大大减少了由于拼写错误和未定义的变量而导致的错误。

4. 化学机制数组标注和循环全局变量。
5. C 预处理器标志，确定编译了哪些排放标注和全局变量。
6. 其他全局数组维度和循环全局变量，包括 I/O API 的变量。逻辑变量 LIPR 在 SUBST_PACTL_ID INCLUDE 文件中定义，用于标记为 (18) 的行。
7. 局部变量声明。请注意与 Fortran-77 的语法差异。
8. 参数列表的声明（标准化）。
9. 局部 Fortran 参数的声明和参数语句，说明变量和单位的在线文档。请注意与 Fortran-77 的语法差异。
10. 先前未声明的外部函数声明。
11. 用于保存外部数据文件的数组声明。
12. 局部变量和保存变量的声明和定义，以及动态内存分配。
13. 接口通过 INTENT 变量规范（如 IN、OUT 或 IN OUT）调用程序中的输入、输出或两项。程序不需要调用参数的其他声明。如果仅调用 IN，则可以在子例程调用中显式传递参数的值。如果 OUT，则参数必须作为变量传递。
14. 用于子例程初始化的代码段，以及不需要在子例程的每个入口设置的任何本地数据。这样的数据需要在声明中使用 SAVE 语句。例如 FIRSTIME 在局部变量部分初始化为.TRUE.。
15. 声明为可配置变量的内存分配实例。在此示例中，从 COORD.EXT 文件访问 NLAYS。
16. 使用 I/O API 函数设置文件插值时间。
17. 气象和其他数据通过一系列子例程调用读取和插入。这些子例程使用 I/O API 实用程序执行所需的气象变量、沉积和排放物质的时间插值。
18. 调用过程分析程序，以获取可选的集成处理速率函数。
19. 说明对模块内另一个科学过程的调用。
20. 在水平网格上的主要循环计算。
21. 在子同步时间间隔上的时间步长循环。
22. 说明如何在模块中写入 I/O API 文件。
23. 子例程结束。

11.3 使用新源代码编译 CMAQ

建议在开发新模块时使用以下步骤编译 CMAQ。创建一个 Makefile，然后可以修改该 Makefile，以在适当的类中添加新模块，但是可以使用相同的步骤获取配置文件，该配置文件可以通过类似的方式修改以添加新模块。

- 在选择的计算平台上，使用 Git 安装 CMAQ。
- 在 \$CMAQ_HOME/CCTM/scripts/ 目录中，通过取消注释行 “set MakeOpt” 来修改名为 bldit.ctm 的文件。

- 执行 bldit.ctm 脚本。在子目录 \$CMAQ_HOME/CCTM/scripts/BLD_CCTM_v52b_{compiler} 中创建 Makefile，其中复制了模型代码。

- 可以通过指定 .o 来编译 Makefile 和链接新模块。具有相应名称的源文件必须在同一目录下。

- 使用 “make” 命令将源代码编译为可执行文件。

11.4 编写 CMAQshell 脚本的指南

要运行模型可执行文件，必须在调用执行命令的 shell 中设置各种 UNIX 环境变量。通常，这些变量涉及模拟任务的开始时间、运行持续时间、输出时间步长、不同模型的各种内部代码标志以及所有输入和输出的文件名。在源代码中引用外部文件名的方法有很多种，UNIX 平台可以使用环境变量链接它们。有一些 I/O API 实用程序函数允许用户以通用和可移植的方式轻松访问代码中的这些变量。I/O API 的另一个功能是在 shell 的环境变量中附加 -v 标志来声明文件具有 “易失性”。通过这样做，I/O API 将导致 netCDF 文件在每次写操作之后更新（同步）它的磁盘拷贝，从而更新 netCDF 头文件。否则，netCDF 头文件直到文件关闭才会更新。这个特性非常有用，例如，它允许用户在模型运行时使用可视化工具分析打开的 netCDF 文件。它在系统崩溃的情况下也很有用。CCTM 模型可以在最后一次成功写入后的场景时间内重新启动，使用中止的输出文件作为初始输入数据。

下面是一个可以从 CMAS 网站下载的示例运行脚本。创建和运行脚本是此站点下载的 tar 文件的一部分。（示例运行脚本请查看英文手册）

```
#!/bin/csh -f
```

```

# ===== CCTMv5.1 Run Script
=====

# Usage: run.cctm >&! cctm_D51a.log &
#
# To report problems or request help with this script/program:
# http://www.cmascenter.org
#
=====

#
=====

#> Runtime Environment Options
#
=====

#> Choose compiler and set up CMAQ environment with correct
#> libraries using config.cmaq. Options: intel | gcc | pgc
setenv compiler intel
setenv compilerVrsn 13.1
#> Source the config.cmaq file to set the build environment
cd ../../
source ./config_cmaq.csh
cd CCTM/scripts
#> Set General Parameters for Configuring the Simulation
set VRSN = v52 #> Code Version
set PROC = mpi #> serial or mpi
set MECH = cb6r3_ae6_aq #> Mechanism ID
set EMIS = 2013ef #> Emission Inventory Details

```

```

set APPL = SE52BENCH #> Application Name (e.g. Gridname)

#> Define RUNID as any combination of parameters above or others. By default,
#> this information will be collected into this one string, $RUNID, for easy
#> referencing in output binaries and log files as well as in other scripts.

setenv RUNID ${VRSN}_${compiler}_${APPL}

#> Set the build directory (this is where the CMAQ executable
#> is located by default).

set                                BLD                                =
${CMAQ_HOME}/CCTM/scripts/BLD_CCTM_${VRSN}_${compiler}

set EXEC = CCTM_${VRSN}.exe

cat $BLD/CCTM_${VRSN}.cfg; echo " "; set echo

#> Set Working, Input, and Output Directories

setenv WORKDIR ${CMAQ_HOME}/CCTM/scripts #> Working Directory.

Where the runscript is.

setenv OUTDIR ${CMAQ_DATA}/output_CCTM_${RUNID} #> Output
Directory

setenv INPDIR ${CMAQ_DATA}/SE52BENCH/single_day/cctm_input #>
Input Directory

setenv LOGDIR ${OUTDIR} #> Log Directory Location

setenv NMLpath ${BLD} #> Location of Namelists. Common places are:

#> ${WORKDIR} | ${CCTM_SRC}/MECHS/${MECH} | ${BLD}

#

=====

=====

#> CCTM Configuration Options

#

=====

=====

#> Set Start and End Days for looping

```

```

setenv NEW_START TRUE #> Set to FALSE for model restart
set START_DATE = "2011-07-01" #> beginning date (July 1, 2011)
set END_DATE = "2011-07-01" #> ending date (July 14, 2011)
#> Set Timestepping Parameters
set STTIME = 000000 #> beginning GMT time (HHMMSS)
set NSTEPS = 240000 #> time duration (HHMMSS) for this run
set TSTEP = 010000 #> output time step interval (HHMMSS)
#> Horizontal domain decomposition
if ( $PROC == serial ) then
setenv NPCOL_NPROW "1 1"; set NPROCS = 1 # single processor setting
@ NPCOL = 4; @ NPROW = 2
@ NPROCS = $NPCOL * $NPROW
setenv NPCOL_NPROW "$NPCOL $NPROW";
endif
#> Vertical extent
set NZ = 35
#setenv LOGFILE $CMAQ_HOME/$RUNID.log #> log file name; uncomment
to write standard output to setenv GRID_NAME SE52BENCH #> check GRIDDESC
file for GRID_NAME options
setenv GRIDDESC $INPDIR/GRIDDESC #> grid description file
#> Output Species and Layer Options
#> CONC file species; comment or set to "ALL" to write all species to CONC
#setenv CONC_SPCS "O3 NO ANO3I ANO3J NO2 FORM ISOP ANH4J
ASO4I ASO4J"
#setenv CONC_BLEV_ELEV " 1 4" #> CONC file layer range; comment to
write all layers to CONC
#> ACONC file species; comment or set to "ALL" to write all species to
ACONC
#setenv AVG_CONC_SPCS "O3 NO CO NO2 ASO4I ASO4J NH3"

```

```

setenv AVG_CONC_SPCS "ALL"

setenv ACONC_BLEV_ELEV " 1 1" #> ACONC file layer range; comment to
write all layers to ACONC

#setenv ACONC_END_TIME Y #> override default beginning ACON
timestamp [ default: N ]

setenv EXECUTION_ID $EXEC #> define the model execution id

#> Synchronization Time Step and Tolerance Options

setenv CTM_MAXSYNC 300 #> max sync time step (sec) [ default: 720 ]

setenv CTM_MINSYNC 60 #> min sync time step (sec) [ default: 60 ]

setenv SIGMA_SYNC_TOP 0.7 #> top sigma level thru which sync step
determined [ default: 0.7 #setenv ADV_HDIV_LIM 0.95 #> maximum horiz. div.
limit for adv step adjust [ default: 0.9 ]

setenv CTM_ADV_CFL 0.95 #> max CFL [ default: 0.75]

#setenv RB_ATOL 1.0E-09 #> global ROS3 solver abs tol [ default: 1.0E-07 ]

#> Science Options

setenv CTM_WB_DUST Y #> use inline windblown dust emissions [ default:
Y ]

setenv CTM_ERODE_AGLAND Y #> use agricultural activity for windblown
dust

#> [ default: N ]; ignore if CTM_WB_DUST = N

setenv CTM_WBDUST_BELED BELD3 #> landuse database for identifying dust
source regions

#> [ default: BELD3 ]; ignore if CTM_WB_DUST = N

setenv CTM_LTNG_NO Y #> turn on lightning NOx [ default: N ]

setenv CTM_WVEL Y #> save derived vertical velocity component to conc
#> file [ default: N ]

setenv KZMIN Y #> use Min Kz option in edyintb [ default: Y ],
#> otherwise revert to Kz0UT

setenv CTM_ILDEPV Y #> calculate in-line deposition velocities [ default: Y ]

```

setenv CTM_MOSAIC N #> landuse specific deposition velocities [default: N]
 setenv CTM_FST N #> mosaic method to get land-use specific stomatal flux
 #> [default: N]
 setenv CTM_ABFLUX Y #> ammonia bi-directional flux for in-line deposition
 #> velocities [default: N]; ignore if CTM_ILDEPV = N
 setenv CTM_HGBIDI N #> mercury bi-directional flux for in-line deposition
 #> velocities [default: N]; ignore if CTM_ILDEPV = N
 setenv CTM_SFC_HONO Y #> surface HONO interaction [default: Y]; ignore
 if CTM_ILDEPV = setenv CTM_GRAV_SETL Y #> vdiff aerosol gravitational
 sedimentation [default: Y]
 setenv CTM_BIOGEMIS Y #> calculate in-line biogenic emissions [default: N]
 setenv CTM_PT3DEMIS Y #> calculate in-line plume rise for elevated point
 emissions
 #> [default: N]
 setenv CTM_ZERO_PCSOA N #> turn off the emissions of the VOC precursor
 to pcSOA.
 #> The CMAQ dev team recommends leaving pcSOA mass in the
 #> model for production runs. [default: N]
 #> Process Analysis Options
 setenv CTM_PROCAN N #> use process analysis [default: N]
 #> process analysis global column, row and layer ranges
 #> user must check GRIDDESC for validity!
 setenv PA_BCOL_ECOL "10 320"
 setenv PA_BROW_EROW "10 195"
 setenv PA_BLEV_ELEV "1 4"
 #> I/O Controls
 setenv IOAPI_LOG_WRITE F #> turn on excess WRITE3 logging [options: T |
 F]
 setenv FL_ERR_STOP N #> stop on inconsistent input files

setenv PROMPTFLAG F #> turn on I/O-API PROMPT*FILE interactive mode
[options: T | F]

setenv IOAPI_OFFSET_64 NO #> support large timestep records
(>2GB/timestep record) [options: setenv CTM_EMISCHK N #> Abort CMAQ if
missing surrogates from emissions Input files

#> Aerosol Diagnostic Controls

setenv CTM_AVISDIAG Y #> Aerovis diagnostic file [default: N]

setenv CTM_PMDIAG Y #> What is this [default: Y]

setenv CTM_APMDIAG Y #> What is this [default: Y]

setenv APMDIAG_BLEV_ELEV "1 3" #> layer range for average pmdiag

setenv APMDIAG_BLEV_ELEV "" #> layer range for average pmdiag =
NLAYS

setenv AVG_FILE_ENDTIME N #> What is this [default: N]

#> Diagnostic Output Flags

setenv CTM_CKSUM Y #> cksum report [default: Y]

setenv CLD_DIAG Y #> cloud diagnostic file [default: N]

setenv CTM_AERDIAG Y #> aerosol diagnostic file [default: N]

setenv CTM_PHOTDIAG Y #> photolysis diagnostic file [default: N]

setenv CTM_SSEMDIAG Y #> sea-salt emissions diagnostic file [default: N]

setenv CTM_DUSTEM_DIAG Y #> windblown dust emissions diagnostic file
[default: N]; ignore setenv CTM_DEPV_FILE Y #> deposition velocities diagnostic
file [default: N]

setenv VDIFF_DIAG_FILE Y #> vdiff & possibly aero grav. sedimentation
diagnostic file [default: setenv LTNGDIAG Y #> lightning diagnostic file [default:
N]

setenv CTM_AOD Y #> AOD diagnostic file [default: N]

setenv B3GTS_DIAG Y #> beis mass emissions diagnostic file [default: N]

setenv PT3DDIAG N #> optional 3d point source emissions diagnostic file
[default: N]; setenv PT3DFRAC N #> optional layer fractions diagnostic (play) file(s)


```
[ default: N]; setenv REP_LAYER_MIN -1 #> Minimum layer for reporting plume  
rise info [ default: -1 ]
```

```
set DISP = delete #> [ delete | keep ] existing output files
```

```
#
```

```
=====
```

```
=====
```

```
#> Input Directories and Filenames
```

```
#
```

```
=====
```

```
=====
```

```
set ICpath = $INPDIR/icbc #> initial conditions input directory
```

```
set BCpath = $INPDIR/icbc #> boundary conditions input directory
```

```
set EMISpath = $INPDIR/emis/gridded_area #> surface emissions input  
directory
```

```
set IN_PTpath = $INPDIR/emis/inln_point #> elevated emissions input directory
```

```
(in-line point set IN_LTpath = $INPDIR/lightning #> lightning NOx input directory
```

```
set METpath = $INPDIR/met/mcip #> meteorology input directory
```

```
#set JVALpath = $INPDIR/jproc #> offline photolysis rate table directory
```

```
set OMIPath = $BLD #> ozone column data for the photolysis model
```

```
set LUpath = $INPDIR/land #> BELD landuse data for windblown dust model
```

```
set SZpath = $INPDIR/land #> surf zone file for in-line seasalt emissions
```

```
set ICBC_CASE = 2013ef_v6_13g_s07 #> Version label for the ICBCs
```

```
set EMIS_CASE = 2013ef_v6_13g_s07_hg #> Version Label for the Emissions
```

```
#
```

```
=====
```

```
=====
```

```
#> Begin Loop Through Simulation Days
```

```

#
=====

=====

set TODAYG = ${START_DATE}

set TODAYJ = `date -ud "${START_DATE}" +%Y%j` #> Convert
YYYY-MM-DD to YYYYJJ

set STOP_DAY = `date -ud "${END_DATE}" +%Y%j` #> Convert
YYYY-MM-DD to YYYYJJ

while ($TODAYJ <= $STOP_DAY ) #>Compare dates in terms of YYYYJJ
#> Retrieve Calendar day Information

set YYYYMMDD = `date -ud "${TODAYG}" +%Y%m%d` #> Convert
YYYY-MM-DD to YYYYMMDD

set YYMMDD = `date -ud "${TODAYG}" +%y%m%d` #> Convert
YYYY-MM-DD to YYMMDD

set YYYYJJJ = $TODAYJ
#> Calculate Yesterday's Date

set YESTERDAY = `date -ud "${TODAYG}-1days" +%Y%m%d` #> Convert
YYYY-MM-DD to YYYYJJJ

#
=====

=====

#> Input Files (Some are Day-Dependent)

#
=====

=====

#> Initial conditions

if ($NEW_START == true || $NEW_START == TRUE ) then

setenv ICFIL ICON_20110630_bench.nc

setenv INITIAL_RUN Y #related to restart soil information file

```

```

rm -rf $LOGDIR/CTM_LOG*${RUNID}* # Remove all Log Files Since this is
a new start

mkdir -p $OUTDIR

else

set ICpath = $OUTDIR

setenv ICFILE CCTM_CGRID_${RUNID}_${YESTERDAY}.nc

setenv INITIAL_RUN N

endif

#> Boundary conditions

set BCFILE = BCON_${YYYYMMDD}_bench.nc

#> Off-line photolysis rates

#set JVALfile = JTABLE_${YYYYJJJ}

#> Ozone column data

set OMIfile = OMI_1979_to_2015.dat

#> Optics file

set OPTfile = PHOT_OPTICS.dat

#> MCIP meteorology files

setenv GRID_BDY_2D $METpath/GRIDBDY2D_${YYMMDD}.nc
setenv GRID_CRO_2D $METpath/GRIDCRO2D_${YYMMDD}.nc
setenv GRID_CRO_3D $METpath/GRIDCRO3D_${YYMMDD}.nc
setenv GRID_DOT_2D $METpath/GRIDDOT2D_${YYMMDD}.nc
setenv MET_CRO_2D $METpath/METCRO2D_${YYMMDD}.nc
setenv MET_CRO_3D $METpath/METCRO3D_${YYMMDD}.nc
setenv MET_DOT_3D $METpath/METDOT3D_${YYMMDD}.nc
setenv MET_BDY_3D $METpath/METBDY3D_${YYMMDD}.nc

setenv LAYER_FILE $MET_CRO_3D # Deprecated: MET_CRO_3D is now
read directly in CCTM

#> Emissions files

if ( $CTM_PT3DEMIS == 'N' ) then

```

```

#> Offline 3d emissions file name

set EMISfile = emis_mole_all_${YYYYMMDD}_cb6_bench.nc

else

#> In-line emissions configuration

set STKCASEG = 12US1_2011ek_cb6cmaq_v6_11g # Stack Group Version
Label

set STKCASEE = 12US1_cmaq_cb6e51_2011ek_cb6cmaq_v6_11g # Stack
Emission Version Label

set EMISfile = emis_mole_all_${YYYYMMDD}_cb6_bench.nc #> Surface
emissions

setenv NPTGRPS 5 #> Number of elevated source groups

setenv STK_GRPS_01
$IN_PTpath/stack_groups/stack_groups_ptnonipm_${STKCASEG}.nc

setenv STK_GRPS_02
$IN_PTpath/stack_groups/stack_groups_ptegu_${STKCASEG}.nc

setenv STK_GRPS_03
$IN_PTpath/stack_groups/stack_groups_othpt_${STKCASEG}.nc

setenv STK_GRPS_04
$IN_PTpath/stack_groups/stack_groups_ptfire_${YYYYMMDD}_${STKCASEG}.
nc

setenv STK_GRPS_05
$IN_PTpath/stack_groups/stack_groups_pt_oilgas_${STKCASEG}.nc

setenv LAYP_STTIME $STTIME

setenv LAYP_NSTEPS $NSTEPS

setenv STK_EMIS_01
$IN_PTpath/ptnonipm/inln_mole_ptnonipm_${YYYYMMDD}_${STKCASEE}.nc

setenv STK_EMIS_02
$IN_PTpath/ptegu/inln_mole_ptegu_${YYYYMMDD}_${STKCASEE}.nc

```

```

setenv                                                    STK_EMIT_03
$IN_PTpath/othpt/inln_mole_othpt_${YYYYMMDD}_${STKCASEE}.nc

setenv                                                    STK_EMIT_04
$IN_PTpath/ptfire/inln_mole_ptfire_${YYYYMMDD}_${STKCASEE}.nc

setenv                                                    STK_EMIT_05
$IN_PTpath/pt_oilgas/inln_mole_pt_oilgas_${YYYYMMDD}_${STKCASEE}.nc

setenv LAYP_STDATE $YYYYJJJ

endif

#> Lightning NOx configuration

if ( $CTM_LTNG_NO == 'Y' ) then

setenv LTNGNO "InLine" #> set LTNGNO to "Inline" to activate in-line
calculation

#> In-line lightning NOx options

setenv USE_NLDN Y #> use hourly NLDN strike file [ default: Y ]

setenv LTNGPARAM Y #> use lightning parameter file [ default: Y ]

if ( $USE_NLDN == Y ) then

setenv                                                    NLDN_STRIKES
$INPDIR/lightning/NLDN_12US1.${YYYYMMDD}_bench.nc

else

setenv LOG_START 2.0 #> RC value to transit linear to log linear

endif

setenv                                                    LTNGPARMS_FILE
$INPDIR/lightning/LTNG_AllParms_12US1_bench.nc #> lightning parameter endif

#> In-line biogenic emissions configuration

if ( $CTM_BIOGEMIS == 'Y' ) then

set IN_BEISpath = ${INPDIR}/land

set GSPROpath = ${IN_BEISpath}

setenv GSPRO $GSPROpath/gspro_biogenics_1mar2017.txt

setenv B3GRD $IN_BEISpath/b3grd_bench.nc

```

```

setenv BIOG_SPRO B10C6 #> speciation profile to use for biogenics
setenv BIOSW_YN N #> use frost date switch [ default: Y ]

setenv
BIOSEASON
$IN_BEISpath/bioseason.12US1.2006.09apr2012_bench.nc #> ignore season switch
setenv SUMMER_YN N #> Use summer normalized emissions? [ default: Y ]

setenv PX_VERSION Y #> MCIP is PX version? [ default: N ]

setenv INITIAL_RUN Y #> non-existent or not using SOILINP [ default: N ];
default          uses          setenv          SOILINP
$OUTDIR/CCTM_SOILOUT_${RUNID}_${YESTERDAY}.nc
#> Biogenic NO soil input file; ignore if INITIAL_RUN = Y
endif

#> Windblown dust emissions configuration
if ( $CTM_WB_DUST == 'Y' ) then
# Input variables for BELD3 Landuse option
setenv DUST_LU_1 $LUpath/beld3_12US1_459X299_output_a_bench.nc
setenv DUST_LU_2 $LUpath/beld4_12US1_459X299_output_tot_bench.nc
setenv MODIS_FPAR $LUpath/modis_bench.nc
if ( $CTM_ERODE_AGLAND == 'Y' ) then
setenv CROPMAP01 ${INPDIR}/land/BeginPlanting_12km_bench.nc
setenv CROPMAP04 ${INPDIR}/land/EndPlanting_12km_bench.nc
setenv CROPMAP08 ${INPDIR}/land/EndHarvesting_12km_bench.nc
endif
endif

#> In-line sea salt emissions configuration

setenv OCEAN_1 $SZpath/12US1_surf_bench.nc #> horizontal grid-dependent
surf zone file

#> Bidirectional ammonia configuration
if ( $CTM_ABFLUX == 'Y' ) then
setenv E2C_Soilfile ${INPDIR}/land/2011_US1_soil_bench.nc

```

```

setenv                                                    E2C_Fertfile
${INPDIR}/land/2011_US1_time${YYYYMMDD}_bench.nc

setenv B4LU_file ${INPDIR}/land/beld4_12kmCONUS_2006nlcd_bench.nc

setenv E2C_SOIL ${E2C_Soilfile}

setenv E2C_FERT ${E2C_Fertfile}

setenv BELD4_LU ${B4LU_file}

endif

#

=====

=====

#> Output Files

#

=====

=====

#> set output file name extensions

setenv CTM_APPL ${RUNID}-${YYYYMMDD}

#> set output file names

setenv S_CGRID "$OUTDIR/CCTM_CGRID_${CTM_APPL}.nc" #> 3D Inst.
Concentrations

setenv CTM_CONC_1 "$OUTDIR/CCTM_CONC_${CTM_APPL}.nc -v" #>
On-Hour Concentrations

setenv A_CONC_1 "$OUTDIR/CCTM_ACONC_${CTM_APPL}.nc -v" #>
Hourly Avg. Concentrations

setenv                                                    MEDIA_CONC

"$OUTDIR/CCTM_MEDIA_CONC_${CTM_APPL}.nc -v" #> NH3 Conc. in Media

setenv CTM_DRY_DEP_1 "$OUTDIR/CCTM_DRYDEP_${CTM_APPL}.nc
-v" #> Hourly Dry Deposition

setenv CTM_DEPV_DIAG "$OUTDIR/CCTM_DEPV_${CTM_APPL}.nc -v"

#> Dry Deposition Velocities

```

```

setenv CTM_PT3D_DIAG "$OUTDIR/CCTM_PT3D_${CTM_APPL}.nc -v"
#>

setenv B3GTS_S "$OUTDIR/CCTM_B3GTS_S_${CTM_APPL}.nc -v" #>
Biogenic Emissions

setenv SOILOUT "$OUTDIR/CCTM_SOILOUT_${CTM_APPL}.nc" #> Soil
Emissions

setenv CTM_WET_DEP_1 "$OUTDIR/CCTM_WETDEP1_${CTM_APPL}.nc
-v" #> Wet Dep From All Clouds

setenv CTM_WET_DEP_2 "$OUTDIR/CCTM_WETDEP2_${CTM_APPL}.nc
-v" #> Wet Dep From SubGrid Clouds

setenv CTM_VIS_1 "$OUTDIR/CCTM_PMVIS_${CTM_APPL}.nc -v" #>
On-Hour Visibility

setenv CTM_AVIS_1 "$OUTDIR/CCTM_APMVIS_${CTM_APPL}.nc -v" #>
Hourly-Averaged Visibility

setenv CTM_PMDIAG_1 "$OUTDIR/CCTM_PMDIAG_${CTM_APPL}.nc
-v" #> On-Hour Particle Diagnostics

setenv
CTM_APMDIAG_1
"$OUTDIR/CCTM_APMDIAG_${CTM_APPL}.nc -v" #> Hourly Avg. Particle
Diagnostic

setenv CTM_RJ_1 "$OUTDIR/CCTM_PHOTDIAG1_${CTM_APPL}.nc -v" #>
Photolysis Rxn Diagnostics

setenv CTM_RJ_2 "$OUTDIR/CCTM_PHOTDIAG2_${CTM_APPL}.nc -v" #>
Photolysis Rates Output

setenv CTM_SSEMIS_1 "$OUTDIR/CCTM_SSEMIS.${CTM_APPL}.nc -v" #>
Sea Spray Emissions

setenv
CTM_DUST_EMIT_1
"$OUTDIR/CCTM_DUSTEMIS.${CTM_APPL}.nc -v" #> Dust Emissions

setenv CTM_IPR_1 "$OUTDIR/CCTM_PA_1_${CTM_APPL}.nc -v" #>
Process Analysis

```



```
setenv CTM_IPR_2 "$OUTDIR/CCTM_PA_2_${CTM_APPL}.nc -v" #>
```

Process Analysis

```
setenv CTM_IPR_3 "$OUTDIR/CCTM_PA_3_${CTM_APPL}.nc -v" #>
```

Process Analysis

```
setenv CTM_IRR_1 "$OUTDIR/CCTM_IRR_1_${CTM_APPL}.nc -v" #>
```

Chem Process Analysis

```
setenv CTM_IRR_2 "$OUTDIR/CCTM_IRR_2_${CTM_APPL}.nc -v" #>
```

Chem Process Analysis

```
setenv CTM_IRR_3 "$OUTDIR/CCTM_IRR_3_${CTM_APPL}.nc -v" #>
```

Chem Process Analysis

```
setenv CTM_DRY_DEP_MOS "$OUTDIR/CCTM_DDMOS_${CTM_APPL}.nc -v" #> Dry Dep
```

```
setenv CTM_DRY_DEP_FST "$OUTDIR/CCTM_DDFST_${CTM_APPL}.nc -v" #> Dry Dep
```

```
setenv CTM_DEPV_MOS "$OUTDIR/CCTM_DEPVFST_${CTM_APPL}.nc -v" #> Dry Dep Velocity
```

```
setenv CTM_DEPV_FST "$OUTDIR/CCTM_DEPVMOS_${CTM_APPL}.nc -v" #> Dry Dep Velocity
```

```
setenv CTM_VDIFF_DIAG "$OUTDIR/CCTM_VDIFF_DIAG_${CTM_APPL}.nc -v" #> Vertical Dispersion
```

Diagnostic

```
setenv CTM_VSED_DIAG "$OUTDIR/CCTM_VSED_DIAG_${CTM_APPL}.nc -v" #> Particle Grav. Settling
```

```
setenv CTM_AOD_1 "$OUTDIR/CCTM_AOD_DIAG_${CTM_APPL}.nc -v" #>
```

Aerosol Optical Depth Diagnostic

```
setenv CTM_LTNGDIAG_1 "$OUTDIR/CCTM_LTNGHRLY_${CTM_APPL}.nc -v" #> Hourly Avg Lightning
```

NO

```

setenv CTM_LTNGDIAG_2

"$OUTDIR/CCTM_LTNGCOL_${CTM_APPL}.nc -v" #> Column Total Lightning
#> set floor file (neg concs)

setenv FLOOR_FILE ${OUTDIR}/FLOOR_${CTM_APPL}.txt

#> create output directory

if ( ! -d "$OUTDIR" ) mkdir -p $OUTDIR

#> look for existing log files and output files

set log_test = `ls CTM_LOG_???.${CTM_APPL}`

set OUT_FILES = "${FLOOR_FILE} ${S_CGRID} ${CTM_CONC_1}
${A_CONC_1} ${MEDIA_CONC} \
${CTM_DRY_DEP_1} $CTM_DEPV_DIAG $CTM_PT3D_DIAG $B3GTS_S
$SOILOUT $CTM_WET_DEP_1\
$CTM_WET_DEP_2 $CTM_VIS_1 $CTM_AVIS_1 $CTM_PMDIAG_1
$CTM_APMDIAG_1 \
$CTM_RJ_1 $CTM_RJ_2 $CTM_SSEMIS_1 $CTM_DUST_EMIT_1
$CTM_IPR_1 $CTM_IPR_2 \
$CTM_IPR_3 $CTM_IRR_1 $CTM_IRR_2 $CTM_IRR_3
$CTM_DRY_DEP_MOS\
$CTM_DRY_DEP_FST $CTM_DEPV_MOS $CTM_DEPV_FST
$CTM_VDIFF_DIAG $CTM_VSED_DIAG \
$CTM_AOD_1 $CTM_LTNGDIAG_1 $CTM_LTNGDIAG_2"

set OUT_FILES = `echo $OUT_FILES | sed "s; -v;;g" `

echo $OUT_FILES

set out_test = `ls $OUT_FILES`

#> delete previous output if requested

if ( $DISP == 'delete' ) then

#> remove previous log files

echo " ancillary log files being deleted"

foreach file ( $log_test )

```

```

echo " deleting $file"

/bin/rm -f $file

end

#> remove previous output files

echo " output files being deleted"

foreach file ( $out_test )

echo " deleting $file"

/bin/rm -f $file

end

else

#> remove previous log files

if ( "$log_test" != "" ) then

echo "**** Logs exist - run ABORTED ****"

echo "**** To override, set $DISP == delete in run_cctm.csh ****"

echo "**** and these files will be automatically deleted. ****"

exit 1

endif

#> remove previous output files

if ( "$out_test" != "" ) then

echo "**** Output Files Exist - run will be ABORTED ****"

foreach file ( $out_test )

echo " cannot delete $file"

/bin/rm -f $file

end

echo "**** To override, set $DISP == delete in run_cctm.csh ****"

echo "**** and these files will be automatically deleted. ****"

exit 1

endif

endif

```

```

#> for the run control ...

setenv CTM_STDATE $YYYYYJJJ

setenv CTM_STTIME $STTIME

setenv CTM_RUNLEN $NSTEPS

setenv CTM_TSTEP $TSTEP

setenv EMIS_1 $EMISpath/$EMISfile

setenv INIT_GASC_1 $ICpath/$ICFILE

setenv INIT_AERO_1 $INIT_GASC_1

setenv INIT_NONR_1 $INIT_GASC_1

setenv INIT_TRAC_1 $INIT_GASC_1

setenv BNDY_GASC_1 $BCpath/$BCFILE

setenv BNDY_AERO_1 $BNDY_GASC_1

setenv BNDY_NONR_1 $BNDY_GASC_1

setenv BNDY_TRAC_1 $BNDY_GASC_1

setenv OMI $OMIpath/$OMIfile

setenv OPTICS_DATA $OMIpath/$OPTfile

#setenv XJ_DATA $JVALpath/$JVALfile

set TR_DVpath = $METpath

set TR_DVfile = $MET_CRO_2D

#> species defn & photolysis

setenv gc_matrix_nml ${NMLpath}/GC_$MECH.nml

setenv ae_matrix_nml ${NMLpath}/AE_$MECH.nml

setenv nr_matrix_nml ${NMLpath}/NR_$MECH.nml

setenv tr_matrix_nml ${NMLpath}/Species_Table_TR_0.nml

#> check for photolysis input data

setenv CSQY_DATA ${NMLpath}/CSQY_DATA_$MECH

if (! (-e $CSQY_DATA) ) then

echo " $CSQY_DATA not found "

exit 1

```

```

endif

if ( ! (-e $OPTICS_DATA ) ) then
echo " $OPTICS_DATA not found "
exit 1
endif

#

=====

=====

#> Execution Portion

#

=====

=====

#> Print attributes of the executable
ls -l $BLD/$EXEC; size $BLD/$EXEC
unlimit
limit
date
#> Executable call for single PE, uncomment to invoke
# /usr/bin/time $BLD/$EXEC
#> Executable call for multi PE, configure for your system
# set MPI = /usr/local/intel/impi/3.2.2.006/bin64
# set MPIRUN = $MPI/mpirun
time mpirun -r ssh -np $NPROCS $BLD/$EXEC
date
#

=====

=====

#> Finalize Run for This Day and Loop to Next Day

```

```

#
=====

#> Save Log Files and Move on to Next Simulation Day
mv CTM_LOG_???.${CTM_APPL} $LOGDIR

#> The next simulation day will, by definition, be a restart
setenv NEW_START false

#> Increment both Gregorian and Julian Days
set TODAYG = `date -ud "${TODAYG}+1days" +%Y-%m-%d` #> Add a day
for tomorrow

set TODAYJ = `date -ud "${TODAYG}" +%Y%j` #> Convert YYYY-MM-DD
to YYYYJJJ

end #Loop to the next Simulation Day
exit

```

11.5 新源代码的测试和分发

CMAS 中心通过网站 <<http://www.cmaq-model.org>> 收集、测试和分发 CMAQ 的各种操作和开发版本。CMAQ 的官方版本（包括当前和过去的版本）和开发版本的存档可供用户社区使用。AER 公司开发的 CMAQMADRID 和 CMAQ-AMSTERDAM，可以从网站下载。作为 CMAQ 社区的一个好处，CMAS 会定期更新有关开发代码版本的文档，以根据用户使用这些版本的经验，可以及时提供反馈。有关 CMAQ 开发版本的问题或意见应提交给 AER 的开发人员。有关下载源代码和相关文档以及软件开发指南的问题或意见，可在<<http://www.mascenter.org>>进行交流。

基于开发版本的测试工作，CMAS 建议向社区 CMAQ 开发贡献代码的开发人员采用以下最低水平的编码和测试实践：

1. 为了在开发新代码时充分利用 CMAQ 特性，开发人员应查看本章前几节中提供的编码规范。另请参阅 EPA CMAQ 科学文档。
2. 新代码应尽可能使用当前可操作的 CMAQ 版本作为模板构建。这将使编码具有一致性，包括命名约定、在线文档以及编译时和运行时参数的规范。

3. 在向 CMAS 中心提交源代码之前,开发人员应验证代码是否与 CMAQ 的运行版本一致,尤其是在使用常见的 INCLUDE 文件(如水平和垂直网格定义文件)和运行参数设置时。在同一开发代码版本中混合使用不同版本的 CMAQ 模型的代码可能会导致运行 CMAQ 脚本时出现问题。

4. 源代码中包含的任何新的科学算法都应该提供全面的文档或其他同行评审的文献参考。

5. 开发人员必须记录用于测试的计算平台,包括处理器类型和速度、使用的编译器版本以及 CPU 使用情况。建议开发人员使用上述组合来测试旨 CMAS 中心发布的代码,以便 CMAS 工作人员进行基准测试和可移植性测试。关于不同计算平台之间模型输出潜在差异的任何文档,对于终端用户都是有用的。为此,开发人员使用多个平台进行代码测试是非常可取的。

6. 开发人员应为测试用例提供所有的输入数据,以便感兴趣的用户可以尝试运行代码并在自己的平台上重现结果。

7. 建议至少为一个 5 天的模拟提供测试的基准结果。较短的模拟不能提供足够的结果来辨别 spin-up 之后的模型趋势。

8. 对模型进行更改时,开发人员应提供结果文档,包括:(a) 气相物种偏差大于 1.0×10^{-6} ppm 的所有变量的结果,以及相同情况下基本模型结果的颗粒物种的偏差大于 $1.0 \times 10^{-4} \mu\text{g}/\text{m}^3$; (b) 分析了解这些差异的情况; (c) 结论分析。

9. 请注意,可能需要进行不止一次模拟,以充分证明结果中的季节性或区域偏差。模型仍在开发中的情况,可能无法分析与运行模型结果的所有差异。建议记录这些尚未解决的问题。

模型开发人员建议查看 CMAS 网站,是否有除上述介绍的内容外,还有其他文档指导。

11.6 参考文献

Fine, S. S., W. T. Smith, D. Hwang, T. L. Turner, 1998: Improving model development with configuration management, IEEE Computational Science and Engineering, 5(1, Ja-Mr), 56-65.

J. Rumbaugh, M. Blaha, W. Premerlani, F. Eddy, and W. Lorensen, 1991: Object-Oriented Modeling and Design, Prentice Hall

Young, J. O., ‘’ Integration of Science Code into Models-3, 1999. In Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, D. W. Byun and J. K. S.Ching (ed.), EPA/600/R-99/030, U. S. EPA, Research Triangle Park, NC.

大气污染模拟

第十二章 CMAQ 的分析工具

有多种免费工具可用来可视化、分析和评估 CMAQ 输入和输出文件。该列表包括 CMAQ 实用工具、m3tools、PAVE、VERDI、Panoply、大气模型评估工具 AMET、netCDF 运算符 NCO、UNIDATA 集成数据查看器 IDV 和 NCAR 命令行语言 NCL。其他一些商业软件包，包括 MATLAB 和 IDL，也支持 CMAQ 输入和输出的分析和可视化。大多数支持 netCDF 文件格式的可视化和分析软件，也适用于 CMAQ 输出文件。

本页简要描述了其中几个实用软件，并提供了它们的下载链接。有关其他信息，请参阅每个软件的文档。

此处介绍了两类分析工具 - 用于分析 CMAQ 输入/输出数据的命令行实用程序 - netCDF - appendwrf - bldoverlay - block_extract - combine - hr2day - sitecmp - sitecmp_dailyo3 - writesite - m3tools - netCDF Operators

用于 CMAQ 输入/输出数据的图形显示的可视化工具

- VERDI
- AMET
- PAVE
- IDV
- NCL

12.1 数据处理命令行

12.1.1 netCDF

<http://www.unidata.ucar.edu/software/netcdf/>

CMAQ 大部分输入和输出文件都是 netCDF 文件格式。如果用户已构建了用于编译 CMAQ 的 netCDF 库，则 ncdump 实用程序也应在用户的计算机上可用。此实用程序使用 NCAR 开发的 CDF 表示法生成 netCDF 文件的 ASCII 表示。

调用 ncdump 的 UNIX 语法如下：

```
ncdump [-h] [-c] [-n name] [inputfile]
```

其中：

-h 只在输出文件产生头文件信息；即维度、变量和属性，但没有变量的数据值。

-c 在输出文件中生成头文件信息和维变量的数据值。

-n 为 CDL 描述指定一个与默认名称不同的名称。

12.1.2 CMAQ 实用工具

<https://github.com/USEPA/CMAQ>

提供了几个基于 Fortran 的后处理工具。这些工具位于 CMAQ 发行版（5.2 及更高版本）中的 \$CMAQ_HOME/POST 目录中。这些工具直接用于 CMAQ 输出文件，可处理、格式化和准备来自各种环境监测网格的数据集，以便进行后续评估。这些网络包括美国环保署空气质量系统 AQS、保护视觉环境跨部门监测 IMPROVE、清洁空气状况趋势网络 CASTNET、特定趋势网络 STN、国家大气沉降计划 NADP、汞沉降网络 MDN 和东南气溶胶研究和特性研究 SEARCH。运行 sitecmp 和 sitecmp_dailyo3 实用程序所需的格式化观测数据文件可以在 CMAS 中心数据交换所“2000-2014 年北美空气质量观测数据”下获取：
<https://www.cmascenter.org/download/data.cfm>。

下面将介绍各种 CMAQ 实用工具。\$CMAQ_HOME/POST 目录为每个实用程序下提供了文档和示例运行脚本。

- appendwrf: 该程序将多个 WRF 输入或输出文件的变量连接到一个文件中，当用户的 WRF 输入或输出文件中时间较短时，可用于将它们合并成持续时间较长的文件。

- bldoverlay: 该程序创建一个观测覆盖文件，可以导入到 PAVE 和 VERDI。

- block_extract: 该程序可从原始 CMAQ 输出文件或 wrfout 输入文件中提取程序组合物种的时间序列到一个新的 I/O API 输出文件。物种可以聚合或转化为感兴趣的研究变量（即匹配从特定监测网络观测到的物种变量）。

- hr2day: 该程序从 I/O API 小时网格文件中创建 I/O API 逐日网格文件，如每日平均值、每日总和、日最大 8 小时均值等。

- sitecmp: 该程序生成一个 csv 逗号分隔文件，用于比较 CMAQ 浓度与观测浓度值。

- sitecmp_dailyo3: 该程序生成一个 csv 逗号分隔文件, 用于比较 CMAQ 逐日臭氧浓度和臭氧观测浓度值。指标包括在输出文件是: 每日小时最大臭氧浓度、观测仪器周边 9 个网格每天小时最大臭氧浓度、每日小时最大臭氧浓度发生时间、每日 8 小时最大臭氧浓度、观测仪器周边 9 个网格每日 8 小时最大臭氧浓度、每日 8 小时最大臭氧浓度发生时间、每日 W126 臭氧值和每日 SUM06 臭氧值。

- writesite: 该程序从 I/O API 数据文件为一组物种在指定的站点位置生成 csv 文件。

12.1.3 M3tools

<<https://www.cmascenter.org/ioapi/>>

已经开发了一套广泛的实用程序, 称为 m3tools, 它们使用 I/O API 库, 可供建模社区使用。这些实用程序可操作日期和时间、执行坐标转换、存储和调用网格、稀疏矩阵计算、数据操作和统计分析等。所有 m3tools 都可以在命令行上运行, 并且各种选项都可以以交互方式执行, 或者所有选项都可以存储在文件中作为脚本执行。

下面提供了这些实用程序的列表和简要说明。

- airs2m3: 从 AIRS AMP350 格式文本文件导入空气质量监测数据, 并将其导出到 I/O API 观测数据文件。

- bcwndw: 将数据从网格文件中提取到子网格窗口的边界。

- datshift: 采用日历日期 (形式 YYYYMMDD) 和天数 D, 并在 D 天后报告日期。

- gregdate: 计算日历日期 “Month DD, YYYY”, 夏令时朱丽安日期是否生效。

- juldate: 计算朱利安日期 YYYYDDD, 夏令时朱丽安日期是否生效。

- m3combo: 计算来自 I/O API 输入文件的线性变量组合, 并将生成的变量写入 I/O API 输出文件。

- m3cple: 复制到同一网格, 或插值到另一个网格, 从源文件到目标文件的所有变量的时间序列。

- m3diff: 计算变量的统计信息, 以及这些变量的不同操作结果。

- m3edhdr: 编辑头文件或文件描述性参数。

- **m3fake**: 根据用户规范创建文件，填充虚拟数据或从用户提供的文件读取数据。
- **m3merge**: 在指定时间段内从一组输入文件中合并选定变量，并将它们写入单个输出文件，并在过程中重命名可选变量。
- **m3pair**: 根据用户规范，在用户选择的网格内为两个文件中的两个变量构建一个文本文件。
- **m3stat**: 计算文件中变量的统计信息。
- **m3tproc**: 计算时间段，并将其写入输出文件。可用于创建运行平均值、日平均值、每日最大值等。
- **m3tshift**: 从文件复制/时间移位数据。
- **m3wndw**: 从网格文件到子网格的窗口数据。
- **m3xtract**: 从文件中提取变量子集，用于<时间间隔>。也可用于两个或多个具有不同时间段的文件的数据拼接到一个文件中。
- **m4filter**: 将第 3 代模型文件转换为当前版本文件。
- **mtxblend**: 使用稀疏矩阵文件将数据从输入文件插值/转换到"基"文件的网格，并将其与来自"基"文件的数据合并。
- **mtxbuild**: 由用户提供的文本文件创建稀疏矩阵转换文件。
- **mtxcalc**: 使用子采样算法构建网格稀疏矩阵转换文件。
- **mtxcple**: 使用稀疏矩阵文件从源文件到目标文件插值所有变量的时间序列。
- **presterp**: 使用 PRES_CRO_3D，从三维 sigma 坐标文件向新三维压力坐标进行插值。
- **selmrg2d**: 从多个网格输入文件中选择多个二维图层/变量组合，并将结果写入合并的二维网格输出文件。
- **utmtool**: 为 lat-lon、Lambert 和 UTM 坐标系执行坐标转换和网格相关计算。
- **vertot**: 计算文件中变量的总垂直列数。

12.1.4 nc 操作 (NCO)

<http://nco.sourceforge.net/>

netCDF 操作 (NCO) 是一种操作程序。每个操作符都是一个独立的命令行程序，在 UNIX shell 级别执行，类似于 ls 或 mkdir 命令。操作符将 netCDF 文件

作为输入，然后执行一组操作（例如导出新数据、求平均值、hyperlabbing、或元数据操作），并生成一个 netCDF 文件作为输出。操作人员的主要目的是帮助操作和分析网格化的科学数据。NCO 的单一命令风格允许用户使用简单的脚本交互地操作和分析文件，避免了高级编程环境的开销。

NCO 通过使用命令行选项来实现灵活性。这些选项在所有传统的 UNIX 命令中都以单字母开关的形式实现，例如"ls -l"。NCO 支持短格式（单字母）和长格式（多字母）选项。

下面概述了各种 netCDF 操作。

- **ncap** (netCDF 算术处理器): **ncap** 和 **ncap2** 算术处理 netCDF 文件。处理指令包含在 **fl.nc** 脚本文件中或一系列命令行参数中。
- **ncatted** (netCDF 属性编辑器): 编辑 netCDF 文件的属性，可以追加、创建、删除、修改和覆盖属性。此外，**ncatted** 允许将每个编辑操作应用于文件中的每个变量。这样可以节省在整个文件中更改属性约定的时间。
- **ncbo** (netCDF 二进制运算符): **ncbo** 对 **file_1** 中的变量和 **file_2** 中的相应同名变量执行二进制运算，并将结果存储于 **file_3** 中。二进制操作对整个文件进行操作。
- **ncea** (netCDF 集合平均器): **ncea** 对输入文件中的任意数量（集合）变量进行网格点平均，每个文件在平均中采用相同的权重。输出文件中的每个变量大小与输入文件中相同变量的大小相同，并且所有输入文件的大小必须相同。这与 **ncra** 不同，后者只在记录维度上取平均值（例如时间），并在记录维度上均匀地加权每个记录；**ncea** 始终平均坐标变量，而不考虑对非坐标变量执行的算术运算类型。所有维度都相同处理并保存在输出文件中。
- **ncecat** (netCDF 结合连接器): **ncecat** 将任意数量的输入文件拼接到单个输出文件中。新的记录维度充当将输入文件数据绑定在一起的粘合剂。每个输入文件中的每个变量将成为输出文件中同一变量中的一个记录。所有输入文件必须包含所有提取的变量。每个提取的变量在所输入文件的大小和级别上必须是常量。输入文件作为单个记录连续存储在输出文件中。因此，输出文件大小是输入文件中提取变量大小的总和。

- **ncflint (netCDF 文件插值器):** ncflint 创建一个输出文件，它是输入文件的线性组合。这种线性组合是加权平均、标准化加权平均或输入文件的插值。在任何情况下，坐标变量都未被处理；它们只是从 file_1 中复制。

- **ncks (netCDF 多功能工具):** ncks 结合了 ncdump、ncextr、nccut 和 ncpaste 程序的选定功能，成为一个多功能工具。ncks 从输入文件中提取数据子集，并将其作为文本文件打印到 stdout，以平面二进制格式将其写入二进制文件，并以 netCDF 格式输出文件。

- **ncpdq (netCDF 快速排列器):** ncpdq 执行两个选项其中一项- 包装或尺寸排列-但不是两者同时执行。ncpdq 经过优化，可以并行的方式执行这些操作，只需要最少的时间和内存。

- **ncra (netCDF 记录平均器):** ncra 对任意数量的输入文件中的变量进行记录平均。默认情况下，记录维度在输出变量中保留为退化维度（大小为 1）。

- **ncrcat (netCDF 记录连接器):** ncrcat 连接任意数量的输入文件的记录变量。默认情况下，最终记录维度是输入文件记录维度长度的总和。

- **ncrename (netCDF 重命名器):** ncrename 重命名 netCDF 文件中的维度、变量和属性。使用新名称列表中的相应名称重命名旧名称列表。所有新名称都必须是唯一的。

- **ncwa (netCDF 加权平均器):** ncwa 在任意维度上对单个文件中的变量进行平均，并带有指定权重、掩码和标准化的选项。

12.2 可视化工具

12.2.1 用于数据解释的可视化环境 (VERDI)

<http://www.verdi-tool.org>

VERDI 是一种灵活且模块化的基于 Java 的可视化软件工具，允许用户查看 SMOKE、CMAQ 和 WRF 等多变量网格化环境数据集，即网格化浓度和沉降场，用户需要可视化和时空上与观测数据进行比较。VERDI 的设计考虑到了 PAVE 的大部分功能，以与 PAVE 非常类似的方式分析和可视化模型输出，既使用命令行驱动脚本，也适用图形用户界面 (GUI)。此外，VERDI 仍在积极开发中，以增强其中功能从而超越 PAVE。

12.2.2 大气模型评估工具 (AMET)

<http://www.cmascenter.org>

AMET 用于气象和空气质量模型的分析 and 评估。AMET 将指定位置的模型输出数据与一个或多个监测站的相应观测数据进行匹配。然后这些匹配值（模型和观测）用于统计和图形化分析模型的性能。更具体地说，AMET 目前被设计用于分析 MM5、WRF、CMAQ、CAMx 以及 MCIP 的输出文件。AMET 的基本结构由两个分析场和两个进程组成。这两个分析场是 MET 和 AQ，对应气象和空气质量数据。这两个进程是数据库添加和分析。数据库添加是指在空间和时间对观测数据和模型数据进行匹配，随后写入 MySQL 数据库。分析是指对这些匹配值进行绘图分析。实际上，用户可能只对其中一个分析场进行研究，或者两个分析场。该决定基于研究范围。AMET 的三个主要软件组件是 MySQL（一种开源数据库软件系统）、R（一种用于统计计算和图形的免费软件环境）和 perl（一种开源的跨平台编程语言）。

12.2.3 环境数据分析和可视化软件包 PAVE

<http://paved.sourceforge.net>

PAVE 是一个灵活的、分布式的多变量网格化环境数据可视化应用。功能包括

- 基线图形与选项导出数据到高端商业包
- 能够访问和操作位于远程计算机上的数据集
- 支持多个可视化窗口
- 允许 PAVE 由外部进程控制
- 计算资源占用小
- 无软件分发成本

PAVE 被空气质量建模社区广泛使用，可以生成各种类型图，包括散点图、时间序列图、二维平面图、三维曲面图、条形图、风矢量图等。PAVE 的源代码也根据 GNU 版本 2 的条款分发。PAVE 可以在 Linux 命令提示符下运行，可以使用图形用户界面（GUI 调用各种命令/选项，或者所有这些命令/选项都可以存储在脚本文件中并通过运行脚本执行。但是，请注意，PAVE 不再更新，并且 CMAS 已停止对 PAVE 的支持，并鼓励用户转向 VERDI。

12.2.4 集成数据查看器 IDV

<http://www.unidata.ucar.edu/software/idv/>

IDV 是基于 Java 的软件，用于分析和可视化地球科学数据。IDV 发行版包括软件库和由该软件制作的参考应用程序。它使用 VisAD 库（<<http://www.ssec.wisc.edu/~billh/visad.html>>）和其他基于 Java 的实用程序包。

IDV 是由美国国家科学基金会资助的博尔德大气研究公司（UPC）开发的。该软件根据 GNU 条款免费提供。

IDV 是一个地球科学显示和分析软件系统，具有其他 Unidata 软件（如 GEMPAK 和 McIDAS）提供的许多标准数据显示。它汇集了显示和处理卫星图像、网格数据、地面、高空探测，NWS WSR-88D 二级和 III 级雷达数据，以及 NOAA 国家探测网络数据等功能，所有这些都在一个统一的接口中。它还提供了地球系统的三维视图，并允许用户交互式地切片、剖分和探测，创建多维数据集的横截面、剖面、动画和值读取。

IDV 可以显示任何被支持的格式提供的地球定位数据。

IDV 包括读取 I/O API netCDF 格式文件的功能，以及用于创建和操作图像和电影脚本的接口。脚本是通过 XML 文件完成的：IDV 脚本语言（ISL）。ISL 文件可以从正在运行的 IDV 打开，也可以作为命令行参数传递到 IDV：

```
runIDV capture.isl
```

12.3 NCAR 命令语言 NCL

<http://www.ncl.ucar.edu>

NCL 是一种免费的解释性语言，专门为科学数据处理和可视化而设计。NCL 具有强大的文件输入和输出功能。它可以读取 netCDF、HDF4、HDF4-eos、GRIB、二进制和 ASCII 数据。NCL 的输出图形质量高，可高度定制。

它在许多操作系统上均可运行，包括 Solaris、AIX、IRIX、Linux、MacOSX、Dec Alpha 和运行在 Windows 上的 Cygwin/X。它以二进制格式免费提供。

NCL 可以在交互式模式下运行，每行在用户工作站输入时被解释，也可以作为完整脚本以批处理模式运行。用户还可以使用命令行在 NCL 上设置选项或变量。

NCL 语言具有以下 3 方面优势：

- 文件输入和输出

- 数据分析
- 可视化

NCL 具有许多现代编程语言的共有特性，包括类型、变量、运算符、表达式、条件语句、循环、函数和过程。NCL 命令可以在命令提示符下执行，也可以将所有命令存储在文件中并按如下方式调用：

```
ncl commands.ncl
```

NCL 提供了许可用户可以轻松调用的预定义函数和资源。这些函数包括用于数据处理、可视化以及各种数学和统计分析的功能，例如经验正交函数(EOF)和奇异值分解(SVD)。例如，`contributed.ncl` 是 NCL 中用户贡献函数的库。此库与 NCL 一起分发，在用户 NCL 脚本的开头加载脚本可以访问函数。

```
load "$NCARG_ROOT/lib/ncarg/nclscripts/csm/contributed.ncl"
```

NCL 还能够调用外部 Fortran 或 C 程序。通过 WRAPIT 的 NCL 脚本启用。该文件是一个 C 程序，它描述所有参数，并在用户要调用的函数/过程和调用它的 NCL 脚本之间来回传递它们。因此，当用户在需要从 NCL 调用的 Fortran 代码上调用 WRAPIT 时，它会创建一个特殊的 C 包装文件，编译该文件和 Fortran 文件，并生成一个*.so 文件，以便用户可以使用外部语句加载到 NCL 中。

第十三章 CMAQ 支持资源

CMAQ 可从社区建模和分析系统中心（<<http://www.cmascenter.org>>）获得免费的技术和运营支持。CMAS 中心以电子邮件和网络邮件讨论组的方式，用于交流有关 CMAQ 的问题。除了这些基于社区的资源外，CMAS 中心还提供收费培训，并为 CMAQ 提供文档库，其中包括操作和技术指导手册，以及涉及 CMAQ 的主要文献参考。

13.1 CMAS 中心

依据与美国环保署签订的合同，北卡罗来纳大学教堂山环境研究所环境建模政策制定中心（CEMPD）对 CMAS 中心进行维护，以支持基于社区的空气质量建模。CMAS 是一种开发、应用和分析环境模型的方法，它依托模型领域的人才和资源，为模型的科学应用制定了新的标准。

从研究到应用，再到推广，CMAS 中心通过集中资源，为国内和国际环境建模社区成员服务，推进社区建模发展。

13.1.1 CMAS 功能

目前，CMAS 中心可提供以下服务：

- 在线帮助平台 - 获取有关 CMAS 产品的帮助
- 模型共享中心 - 下载 CMAS 产品
- 培训课程 - 参加有关排放建模、空气质量建模或其他培训课程
- 会议 - 参加年度 CMAS 会议，与社区互动
- 发展援助 - 为 CMAS 产品添加新科学模块
- 文档 - 访问 CMAS 产品的在线文档
- 与模型相关的研究 - 了解建模研究的最新发展
- 数据交换中心 - 访问社区周边的空气质量建模数据

13.2 获取 CMAQ 帮助

CMAS 中心网站（<<http://www.cmascenter.org>>）包括一个帮助平台，可用于协助处理 CMAQ 相关问题。CMAS 帮助平台免费给社区服务。帮助平台中的许

多服务都受益于使用率的增加，例如网络邮件讨论组。基于电子邮件的 CMAQ 技术咨询仅适用于注册的 CMAS 用户。

CMAS 中心可解决以下 CMAQ 相关问题。社区成员应按以下步骤使用这些资源。目前有一个大型的、可搜索的解决 CMAQ 问题支持数据库；在向帮助平台提交新请求前，请确保在数据库中搜索关键字，以查看问题以前是否已解决。第 11.3 节提供了第 11.2 节所引用的网页列表。

13.2.1 文档

寻找与 CMAQ 相关问题答案的第一个地方是查找 CMAQ 在线文档。CMAS 文档页包含 CMAS 支持的各种软件的当前和以前版本的可用文档的链接。在线文档包含常见问题解答和各种程序特定问题讨论。

13.2.2 互动资源

在搜索 CMAS 常见问题解答和列表服务搜索关于你的问题的信息。这些问题按主题进行归档，以方便搜索。查看 CMAS 模型共享中心，了解新版本，并阅读过去版本的发布说明，了解有关模型功能的详细信息。

13.2.3 教程/培训

有关模型安装或应用程序的一般问题可以在 CMAS 支持的在线教程中解决。更具体的教程将随着时间的推移而添加；用户可以通过联系 CMAS 中心来建议教程主题。

CMAS 中心在美国北卡罗来纳州教堂山环境研究所办公室提供 CMAQ 季度培训。CMAS 培训人员也可前往世界各地进行现场培训。目前可用的培训是 CMAQ 的入门课程，涵盖模型的配置、编译和基本操作。访问 CMAS 培训网页，查看即将举办的培训课程的议程、费用和时间表。

13.2.4 电子邮件支持

拥有支持账户的 CMAS 用户可以使用电子邮件支持，为所有 CMAS 支持的软件（包括 CMAQ）提供特定的支持。CMAS 电子邮件支持 CMAQ 用户交流有关安装或操作的问题。电子邮件还提供与 CMAQ 开发人员的交流服务，以了解有关模型建立、模型科学和代码集成的技术问题。请访问电子邮件支持页面，了解如何使用系统和完成注册。

13.3 联系 CMAS

CMAS 中心可在线访问，网址为<<http://www.cmascenter.org>>。表 13-1 列出了 CMAS 中心的主要联系人。

表 13-1.CMAS 联系信息和重要链接

Resource	Link
Main website	< http://www.cmascenter.org >
General Questions	cmas@unc.edu
Help Desk	< http://www.cmascenter.org/help_desk.cfm >
Training Information	< http://www.cmascenter.org/training.cfm >
Conferences and Workshops	< http://www.cmascenter.org/conference.cfm >
Downloads	< http://www.cmascenter.org/download.cfm >
Release Calendar	< http://www.cmascenter.org/release_calendar.cfm >
FAQs	< http://www.cmascenter.org/help/faq.cfm >
CMAQ Home Page	< http://www.cmaq-model.org >

13.4 附录 A：CMAQ v5.2 机制表

下表列出了 CMAQ v5.2 中可用的化学机制。MECHS 模块列中的条目对应于 CMAQ 生成脚本中的机制设置。此列中的条目链接到每个机制的文档。表中的后续两列定义了与每种机制兼容的气溶胶和云模块。第四列是机制定义，显示每个机制的化学计量学和动力学细节，最后一列是附录 A 中的物种表。有关 CMAQ 中光化学机制的更多信息，请参阅 CMAQ5.2 发行说明。

MECHS Module	Aerosol Module	Cloud Module	Mechanism Definition	Species Table
cb05e51_ae6_aq	aero6	aem_ae6 or aem_ae6_kmt	mech_cb05e51_ae6_aq.def	Table A.1
cb05e51_ae6nvPOA_aq	aero6	aem_ae6 or aem_ae6_kmt	mech_cb05e51_ae6nvPOA_aq.def	Table A.2
cb05eh51_ae6_aq	aero6	aem_ae6 or aem_ae6_kmt	mech_cb05eh51_ae6_aq.def	Table A.3
cb05mp51_ae6_aq	aero6	aem_ae6_mp	mech_cb05mp51_ae6_aq.def	Table A.4
cb05tucl_ae6_aq v5.0 v5.1	aero6	aem_ae6 or aem_ae6_kmt	mech_cb05tucl_ae6_aq.def	Table A.5
cb6r3_ae6_aq	aero6	aem_ae6 or aem_ae6_kmt	mech_cb6r3_ae6_aq.def	Table A.6

MECHS Module	Aerosol Module	Cloud Module	Mechanism	
			Definition	Species Table
cb6r3_ae6nvPOA_aq	aero6	acm_ae6 or acm_ae6_kmt	mech_cb6r3_ae6nvPOA_aq.def	
racm2_ae6_aq	aero6	acm_ae6 or acm_ae6_kmt	mech_racm2_ae6_aq.def	
saprc07tb_ae6_aq	aero6	acm_ae6 or acm_ae6_kmt	mech_saprc07tb_ae6_aq.def	
saprc07tc_ae6_aq	aero6	acm_ae6 or acm_ae6_kmt	mech_saprc07tc_ae6_aq.def	
saprc07tc_ae6nvPOA_aq	aero6	acm_ae6 or acm_ae6_kmt	mech_saprc07tc_ae6nvPOA_aq.def	
saprc07tic_ae6i_aq	aero6	acm_ae6	mech_saprc07tic_ae6i_aq.def	
saprc07tic_ae6i_aqkmti	aero6	acm_ae6i_kmt	mech_saprc07tic_ae6i_aqkmti.def	
saprc07tic_ae6invPOA_aq	aero6	acm_ae6 or acm_ae6_kmt	mech_saprc07tic_ae6invPOA_aq.def	

大气污染模拟

第十四章 术语

积聚模态 (Accumulation mode)。等效直径在 0.1 至 1.0 微米之间的气溶胶颗粒。这个术语基于这样一个概念：这种大小范围内的颗粒是由小的多的颗粒生长而在大气中积累起来的。生长可能是由于新的质量凝结在小的粒子上，或来自更小粒子的凝固。

自适应网格 (Adaptive grid)。一种网格结构，它在模型执行过程中根据某些模型参数的值而变化。例如，在光化学模型中，网格分辨率可能在氮氧化物高空间梯度区域中自动增加。这可以更准确地预测羽状背景浓度比，对光化学臭氧的产生有很大影响。在气象模型中，自适应网格可能会自动提高网格分辨率，在网格单元中存在较大大气压力变化的建模区域。

空气质量建模系统 (Air quality modeling system)。一种计算系统环境，它结合了一套描述大气过程的物理和化学模型，用于模拟大气中微量气体和颗粒物在大气中的分布情况。该系统通常包括气象模型、排放模型、化学传输模型以及与空气质量相关的分析和可视化工具。

爱根核模态 (Aitken mode)。等效直径在 0.01 至 0.1 微米之间的气溶胶颗粒。这些粒子是通过气相前体物的成核或源的直接排放在大气中形成的。最常见的来源是燃烧（例如，柴油烟尘）。

Arakawa-B。由 Arakawa 和 Lamb (1977 年) 描述的水平网格系统，在 MM5 中使用。质量变量和动量变量定义在间距等于 Δx 的单独水平间距网格上。两个网格在南北方向和东西方向上以 $0.5\Delta x$ 偏移。

Arakawa-C。由 Arakawa 和 Lamb (1977 年) 描述的水平网格系统，在 WRF-ARW 和 CCTM 中使用。质量变量和动量的每个水平分量都是用 Δx 的单独水平间距网格来定义的。

ArcInfo。一种高端地理信息系统 (GIS)，具有地理信息的自动化、修改、管理、分析和显示功能。

自动质量控制 (Automatic quality control)。无需用户干预即可自动完成的 QC 校正。

书签 (Bookmark)。在联机帮助中，书签标记了帮助文档的条目，以便以后可以快速访问它。书签列表将显示在帮助浏览器窗口的书签菜单中，也显示在书签窗口中。列表中的每个项目都是指向已标记项的超文本链接。

化学传输模型 (CTM)。一个模拟各种物理和化学过程的模型，这些过程对于了解大气微量气体和颗粒物分布非常重要。这些过程包括大气运输；垂直混合；气相、液相和气溶胶中的大气化学；云混合和降水清除；和表面清除过程。一般来说，化学传输模型基于气象模型来描述大气状态和运动，基于排放模型来描述进入大气中的人为和生物排放。

类 (Class)。与科学过程相关的软件模块的集合。

符合数据集 (Conforming datasets)。符合标准的数据集采用 I/O API 格式。CMAQ 系统中的大多数程序（模型、可视化和分析例程）都能够读写符合要求的数据集。此功能消除了数据转换的需要，即使在分布式计算环境中也是如此。

符合程序 (Conforming programs)。符合标准的程序通常使用 I/O API 库例程来读写数据。关键数据结构由全局共享信息定义。只要定义一次关键数据结构信息，它就会自动地在整个系统的符合规范的代码中使用。这个全局共享的信息作为对象永久存储在对象数据库中。在 CMAQ 中，这些对象是相关信息的存储集合，例如网格尺寸和分辨率、坐标系定义、化学机制物种和反应。

交叉点 (Cross point)。为定义所有标量的网格点。

守护进程 (Daemon)。在后台独立运行并执行某个功能的进程。例如，控制打印机作业队列的打印机守护进程。

决策支持系统 (Decision support system)。一种为决策提供信息的自动化系统。

域 (Domain)。CMAQ 模拟的区域，是感兴趣的水平地理区域（例如美国东部）。CMAQ 计算的是发生在这个水平地理区域上方大气中的物理和化学过程。

单点 (Dot point)。定义风矢量的网格点。

排放模型 (Emission model)。该模型计算了和环境气象条件和社会经济活动下，微量气体和颗粒物排放到大气的速率。计算来自自然和人为源的排放。SMOKE 是常用的排放模型之一。

环境建模系统 (Environmental modeling system)。一组计算模型，从数学上呈现真实环境大气演变的简化过程，以及管理处理的必要机制、数据处理和做出相关决策所需的分析和可视化工具。例如，环境污染物的产生和行为作为天气和化学作用的函数。研究人员使用这些缩小版的世界进行实验，这些试验非常危险、昂贵，或者在现实世界中不可能实现。

欧拉 (Eulerian)。流体运动规范，指的是人们关注空间点“x”发生的情况，因此自变量被视为该点时间的函数。

质量损失 (Evasion)。地表物质的质量损失（例如，从地表向上流动的汞）。

探索性模型 (Exploratory models)。用于开发科学算法的试验模型，未经过全面审查和评估。

Fortran。公式转换器（计算机编程语言）。

框架 (Framework)。管理计算模型的调度和执行的机制系统，由他们产生的数据，为理解它们的结果进行决策所必需的分析 and 可视化工具，以及所有这些功能的接口。

广义坐标系 (Generalized coordinate system)。用于构造坐标系方案，允许选择类型（例如，经纬度、兰伯特、墨卡托、极坐标、统一横轴墨卡托、矩阵等）和投影参数，以及各种垂直坐标的选择（例如，压力、离地高度、海拔高度、sigma-p 静力、sigma-p 非静力、sigma-z 等）。广义坐标系的优点是 CMAQ 模型能够适应多种可能的水平和垂直参数。

通用网格系统 (Generic grid system)。用于构建网格系统的方案，允许选择原点、方向和空间分辨率。它允许将模型表示为最适合表示控制方程的网格系统。对于规则的矩形网格系统，可以通过定义行数和列数、单元格大小以及位置和范围来将网格数据映射到地球表面。对于不规则网格系统，网格交叉点由一个参考位置的坐标来描述。

地理编码 (Geocoded)。具有与地理边界（例如州或县代码）相关联的标识符。

地理信息系统 (GIS)。一种基于计算机的系统，用数字和图形方式管理、分析、操作和显示地理信息。

空间 (Geospatial)。指地理边界的空间范围。

网格单元 (Grid cell)。网格的最小单元。

网格大小 (Grid size)。矩形网格单元的最短边长度。

网 格 (Grid)。一种由概念位置组成的网络，在其上进行数值计算。这个网络在水平方向上延伸到感兴趣的区域，在垂直方向上延伸到对流层。

增长因子 (Growth factor)。用于评估基准年份和预测年份之间源活动水平的增长因子。有效值为 0.00-99.99。

异构、分布式计算环境 (Heterogeneous, distributed computing environment)。异构计算环境由多台不同类型的计算机（例如超级计算机、图形工作站和工作站文件服务器）组成。分布式计算环境允许通过网络连接在一起的多台机器共同执行大型计算任务。因此，一个异构的分布式计算环境由许多不同类型的计算机网络组成。

流体静力 (Hydrostatic)。用于向模型表明，它假定大气处于流体静力平衡（即，恒定压力和恒定质量的表面重合并始终处于水平状态）。在重力和压力之间存在完全的平衡。

超文本链接 (Hypertext link)。超文本链接是以超文本标记语言 (HTML) 格式保存的文本形式显示的专门指定的单词和短语。超文本链接提供对文档条目的非顺序访问。在 CMAQ 中，帮助功能使用超文本完成。所有帮助条目都有超文本链接。

输入/输出应用程序接口 (I/O API)。读取和写入文件的一个软件库。它采用一种独立于机器的内部数据格式，符合广泛使用的大气研究网络通用数据格式 (netCDF)。I/O API 文件包含自描述头文件，包含使用 and 解释文件中包含的数据所需的完整信息。在如何编写头信息方面，I/O API 格式比标准 netCDF 格式有更多的限制。I/O API 库提供了多种数据结构类型和访问例程，这些例程可对数据进行选择性直接访问。支持的数据类型包括网格、边界、垂直剖面文件、网格嵌套、时间序列和事件驱动。有关 I/O API 的其他信息，请参阅第 4 章。CMAQ 数据在软件中可用；用户不必提供它们。示例包括查找表、范围和州/县名称列表。

清单数据分析器 (IDA)。用于排放清单输入和质量控制检验的程序。

清单 (Inventory)。排放处理系统，清单是指一个地区（国家、州、县）特定时间段（通常为整个特定年份）包含一组特定污染物的排放文件或数据库。

Irix。SGI 计算机操作系统。

关键字 (Key word)。关键字是一个字或短语，长度不超过 40 个字符，可使用查找屏幕来定位帮助文本或 CMAQ 对象（例如数据集、程序、研究或模型）中的实体。

层折叠 (Layer collapsing)。一种通过减少层数来修改气象模型所准备的层结构的过程。不建议这样做。

Linux。一个开源的类 UNIX 操作系统。根据 GNU 公共许可证的条款，它是可用的和可再分发的。

Makefile。Makefile 是用于执行挂载文件和编译源代码等活动的 UNIX 命令列表。

大规模并行处理 (Massively parallel processing)。采用多个 CPU 同时执行多个计算任务的计算机处理。大规模并行系统在同一任务上同时使用大量 CPU。相比之下，传统的计算机设计使用单个 CPU 以严格的线性顺序执行计算任务。

中尺度 (Mesoscale)。在气象学中，中尺度表示中等水平和垂直的空间尺度。水平尺度延伸到几百公里。垂直比例从几十米延伸到对流层深处。

元数据 (Metadata)。有关数据的信息以及生成数据的过程。特别是，有关数据结构、内部特征和历史记录以及数据存储环境中的位置信息，以及数据派生信息。

气象模型 (Meteorological model)。这类模型描述了大气运动、动量、湿度、热通量、湍流特性、云和降水以及大气辐射特性。目前大多数应用于空气质量模拟的气象模型最初是为天气预报而开发的。CMAQ 模型需要来自气象模型的信息，该模型旨在解决与空气质量建模相关的具体问题，例如行星边界层、云分布和混合特征、降水和地面通量等。

混合介质 (Mixed-media)。同时涉及一种以上的环境污染物介质，如空气和水。

模型开发人员 (Model developer)。他们构建和研究理论来解释物理和化学过程，并使用计算机模型来研究他们的理论。

模型用户 (Model users)。模型应用人员和学者，他们为模型生成有效的输入、运行建模系统、维护审计跟踪、分析输入输出的正确性，并生成建模结果的分析。

模型 (Model)。一种计划好的已存在的物体或状态的表示。

建模结构 (Modeling structure)。一种设计规范，为构造模型提供操作范例和接口规范。例如，在 CMAQ 模型中，模式是模块作为共享集中字段上的操作符，并且必须指定四种类型的接口（调用接口、包含文件接口、输入输出接口和 UNIX 环境接口）。

建模系统 (Modeling system)。一组计算模型和相关的数据处理器，共同提供对感兴趣过程的模拟。

CMAQ 组件 (CMAQ components)。CMAQ 框架中的各种子系统。每个组件都由其自己的图标表示。可用的组件包括数据管理器、模型生成器、程序管理器、科学模块管理器、计划管理器、研究规划器和工具管理器。

CMAQ。第三代空气质量模拟系统。它是一个灵活的系统，可解决多种空气质量问题，如区域和城市尺度臭氧和酸沉降问题。

模块 (Module)。是一个更大项目（如气象模型、排放模型或 CMAQ）的一部分。在模块化程序中，特定类型的所有模块（例如计算干沉降的模块）都是可互换的，允许您将一个模块替换为另一个模块，以确定每个模块如何影响建模结果。模块的示例包括科学模块、分析和可视化模块。

单调 (Monotonic)。在一定范围内严格增加或减少的性质。

多层嵌套 (Multilevel nesting)。指在嵌套网格中使用嵌套网格，可能有多层。

国家排放清单 (National Emissions Inventory)。美国环保署的一个数据库，包含有关排放标准空气污染物及其前体的来源以及有害空气污染物的信息。

嵌套网格 (Nested grids)。嵌套是指在粗分辨率网格中设置细分辨率网格。细分辨率网格从粗网格模拟中接收信息（如边界条件）。

不一致数据集 (Nonconforming datasets)。指那些不符合 I/O API 格式的数据集。它们可以在 CMAQ 框架中由专门设计用于读取这些数据集的程序使用。但是，在使用该数据集和程序时，用户必须知道如何匹配程序和数据集，以及不

同的数据格式和程序分别传输到计算机的哪些模块。这些注意事项由 Model3 框架自动管理，供那些使用符合数据集和符合程序的用户使用。

非静力 (Nonhydrostatic)。假定大气不处于流体静力平衡状态。不能假定空气相对于地球只有水平运动。

开源软件 (Open-source software)。开源软件最初是自由软件的市场营销活动。开放源码软件被定义为在符合"开源"定义的版权许可下提供可读源代码的计算机软件。这允许用户使用、更改和改进软件，并以修改或未修改的形式重新发布软件。它经常以一种公开、合作的方式发展。开源软件是开源开发最突出的例子，通常被拿来与用户生成的内容进行比较。

操作模型 (Operational models)。这些模型提供相关科学过程（如大气、排放和化学传输过程）的全功能模型。它们代表经过来重要的质量保证审查、同行审查和评估的最先进产品。这些模型的运行时间通常比筛选模型长得多，但又足够短，可以进行情景研究。

参数化 (Parameterize)。描述大尺度平均物理现象的行为，而不是根据潜在的物理和化学来描述亚网格尺度的行为。例如，一个参数化的云算法可以描述 80 平方公里单元上的平均云行为，尽管单个的云要比 80 平方公里小的多。

行星边界层 (Planetary boundary layer)。大气层靠近地球表面的大气部分，层高一般在 100 米至 2 公里之间，并受表面效应（如加热、摩擦）的显著影响。这些影响可能导致该层混合良好湍流运动，从而影响空气中污染物的分布。

弹出窗口 (Popup window)。弹出窗口是显示在线帮助条目的特殊窗口。当您选择特别指定的超文本链接时，窗口将打开。弹出窗口可用于快速显示简短、简洁的信息单元。您不能从弹出窗口跳转或进入其他目录。

准备 (Prepare)。读取和处理一个文件或一组数据集。

过程分析 (Process analysis)。在模拟中追踪化学物质的来源。过程分析的一个示例是确定一个物种浓度是来自该网格单元还是来自其他网格单元。另一个例子是确定哪些化学成分参与了由反应产生的物种（而不是从其他地方传输过来的）。

过程 (Process)。读取文件或数据集，执行所需的功能（质量控制、重新格式化、代数操作等），并将处理后的数据提交到下一组操作中。

质量控制 (Quality control)。读取数据 (清单、文件) 并检查其正确性、完整性和一致性的行为。可能涉及自动更正、替换或填充缺失数据。所有质量控制程序都要有质量控制报告。

注册数据 (Register data)。注册数据时是让系统知道已存在的东西 (例如, 文件)。

规则有效性百分比 (Rule effectiveness percent)。对预计的估计排放量数据进行调整, 以解释由于合规失败或大多数清单技术无法将这些错误包括在排放量中造成的排放量低估。该调整包括由于不遵守现有规则、控制设备停机或操作问题和流程故障等导致的排放低估。取值范围: 0 到 100。

规则渗透百分比 (Rule penetration percent)。对预计的估计排放量进行调整, 以考虑由于未能在整个模拟区域实施规则而造成的排放量低估。取值范围: 0 到 100。

可按比例的 (Scalable)。在并行计算机架构和算法环境中, 如果一个并行架构或算法的性能与所使用的处理器数量呈线性关系, 那么它被称为可按比例的。例如, 将处理器数量翻倍不会导致出现新的通信瓶颈, 而是使性能翻倍。

规模灵活性 (Scale flexibility)。建模系统能够精确模拟在不同时空尺度上描述大气污染物的物理和化学过程。一个可扩展的具有物理和化学过程算法的建模系统和一个通用的网格系统具有这些属性。

科学模块 (Science module)。模拟程序 (如气象模型、排放模型或 CMAQ) 的一个组成部分, 用于描述单个类别的物理或者化学过程 (例如, 干沉降、光化学、垂直对流)。

筛选模型 (Screening models)。这些模型简化了为快速评估研究设计的科学过程。当用户愿意降低模拟精度以缩短运行时间时, 可使用这些模型。典型的筛选研究包括进行大量的运行, 以确定情景情况, 以保证更详细地建模。

源代码分类代码 (SCC)。SCC 系统用于在排放数据清单中按组 (如汽车、锅炉、溶剂源) 对排放源进行分类。

源 (Source)。关于空气污染, 指产生和/或排放空气污染物的点源、面源或移动源。

物种形成 (Speciation)。在 CMAQ 中，指使用 CMAQ 中可用的化学机制将化学物质（污染物）分解为更简单的化合物。

物种 (Species)。在环境建模中模拟其行为的一种化学物质或一组相关物质。

次网格尺度过程 (Sub-grid-scale process)。在比建模系统的网格分辨率小的尺度上发生的物理过程，例如点源烟羽和对流云。由于尺度小于网格分辨率，因此必须对这些过程进行估计或参数化。

摘要报告 (Summary report)。通常是指进程执行后生成的自动短报告。

表面通量 (Surface fluxes)。地球表面和大气之间的物质、能量或动量交换。

时间步长 (Time step)。固定的时间单位。对于不同的处理器，一个模型可能具有一个或多个内部时间步长。在 CMAQ 框架中，使用时间步长来指示模型或模型中的进程的变量输出之间的时间长度。

对流层 (Troposphere)。对流层是地球大气层中最低层部分。它包含大约 75% 的大气质量，以及几乎所有的水蒸气 and 气溶胶。对流层的平均高度在中纬度约 11 公里 (7 英里)。在热带地区 (高达 20 公里 [12 英里]) 较高，在两极附近较低 (夏季约 7 公里 [4 英里]，冬季不确定)。在对流层内，温度随高度上升而下降。对流层的最低层是行星边界层 (PBL)，与地球表面摩擦影响着气流。此层通常高度为几百米至 2 公里 (1.2 英里)，具体取决于地形和一天中的时间。对流层和平流层之间的边界称为对流层顶。在这一层之上是逆温现象，也就是说，在平流层中，温度随海拔高度上升而升高。

可视化 (Visualization)。科学计算的一个重要方面，它提供了一种以图表和图形的方式快速而紧凑地呈现易于理解的数据。

[1] 未来对第四代模型系统会扩展连接和过程反馈，包括空气、水、土地和生物联系，以提供一种更全面的方法来模拟整个化学品和营养物质在生态系统中的传输和转化。

[2] CVS 文件与 CMAQ 模块设计实现没有内在的关系。