CALPUFF 大气模型多线程计算及业务系统

伯鑫[1,2]　马继[3]　李时蓓[1,2]　赵晓宏[1,2]

1. 环境保护部环境工程评估中心，北京　100012；
2. 国家环境保护环境影响评价数值模拟重点实验室，北京　100012；
3. 新疆兵团勘测设计院（集团）有限责任公司，乌鲁木齐　830002

摘　要　针对 CALPUFF 模型应用中存在的单线程运算方式效率较低的问题，需要对提高 CALPUFF 计算效率的可操作方案进行研究，通过对基于命令行的 CALPUFF 计算系统构建，选择天河一号作为未来基于命令行的 CALPUFF 计算系统进行云升迁时运行的支撑平台，完成系统业务流程设计及 CALPUFF 计算在线管理业务系统构建。

关键词　CALPUFF 模型　流程设计　系统构建

0　背景

CALPUFF 系统包括预处理工具（地理数据、地面数据、高空数据、降水数据），气象数据处理（CALMET），预测模式（CALPUFF）和后处理工具（CALPOST）等。CALMET 和 CALPUFF 模型的运算量较大，运行计算需耗费大量的时间，效率较低，不足以支撑对 CALMET 和 CALPUFF 模型业务化应用的需求。因此，本研究如何提升 CALMET 和 CALPUFF 模型计算效率和能力，有迫切的需要和重要意义。

针对 CALPUFF 模型应用中存在的单线程运算方式效率较低的问题，需要对提高 CALPUFF 计算效率的可操作方案进行研究，以大幅提升 CALPUFF 模型复杂计算能力。此外，CALPUFF 大气模拟作需对输入的 3D. DATA 高空气象数据和 CALMET 地面气象数据进行标准格式化处理。全国 WRF 气象数据应用于 CALPUFF 模型进行运算时，需开发出高空气象数据管理、数据标准格式化输出平台工具，将其转换为 3D. DAT 格式。

1　CALPUFF 系统简介

CALPUFF 由西格玛研究公司开发，是美国国家环保局（USEPA）期支持开发的法规导则模型，也是我国环境保护部颁布的《环境影响评价技术导则大气导则》推荐的模式之一，CALPUFF 是三维非稳态拉格朗日扩散模式，该模式在大气环评、大气规划等领域得到了广用，CALPUFF 模型系统包括 3 部分 CALMET、CALPUFF、CALPOST 以及一系列对常规气象、地理数据作预处理的程序，与传统的稳态高斯扩散模式相比，能更好地处理长距离污染物运输（50km 以上的距离范围）。

2　研究方法

2.1　任务分析

2.1.1　CALPUFF 模型并行计算的实现

CALPUFF 模型的运算量较大，耗费大量的时间。需要基于 Linux 系统充分利用服务器的 CPU 资源，对 CALPUFF 模型的各个独立处理步骤进行全面的分析、集成，开发操作方便，性能可靠基于 Linux 命令行的 CALPUFF 并行计算系统，以提高大气模拟业务的工作效率。

中国知网　https://www.cnki.net

2.1.2 CALMET 地面气象数据转换模块集成

CALMET 气象数据处理模型所需的原始数据由中尺度数值模式 WRF 模拟生成，但是无法直接作为输入数据，需要进行数据格式的调整匹配。由于数据量大，格式复杂，要求极其严格，研究人员对数据的阅读编辑困难，操作繁琐，会出现失误，导致数据无法使用或形成较大误差，效率及质量都无法保证。

需要构建并集成 CALMET 地面气象数据转换在线服务系统，实现 CALMET 地面气象数据自动标准化处理、输出等功能，构建并集成 CALMET 地面气象数据转换模块，实现 CALMET 地面气象数据自动标准化处理、输出等功能。

2.1.3 CALPUFF 计算在线业务系统构建

在完成基于命令行的 CALPUFF 多线程计算系统构建基础上，设计 CALPUFF 高效计算在线业务化运行方案，开发 CALPUFF 计算在线业务系统，包含完整用户及系统权限管理、订单服务、计算后台、计算进度监控（如短信消息提醒等方式）等功能，实现 CALPUFF 模型多线程计算系统的业务化运行。

同时，系统运行过程中需要对用户信息和业务记录进行查询管理，包括用户统一管理（含用户身份验证审批）、计算任务管理、自动计算服务、在线实时支付等主要功能。

2.2 技术路线

本研究的技术路线如图 1，分为 CALPUFF 计算在线业务管理系统构建、基于命令行的 CALPUFF 计算系统构建、3D. DAT 高空气象数据业务系统构建和 CALMET 地面气象数据转换系统。其中，CALPUFF 计算在线业务管理系统的构建分为用户管理与权限分配模块构建、计算业务数据管理模块构建、计算订单记录管理模块开发、在线支付接口开发；基于命令行的 CALPUFF 计算系统构建分为 CALPUFF 模型输入文件格式与参数分析、并行计算规则集成与计算进度提醒、安全机制设计；3D. DAT 高空气象数据业务系统构建分为高空气象数据研究、高空数据库构建、3D. DAT 格式转化工具集成、地图网格化区域选择功能集成；3D. DAT 高空气象数据业务系统和 CALMET 地面气象数据转换系统生成的标准化数据均对外提供服务。

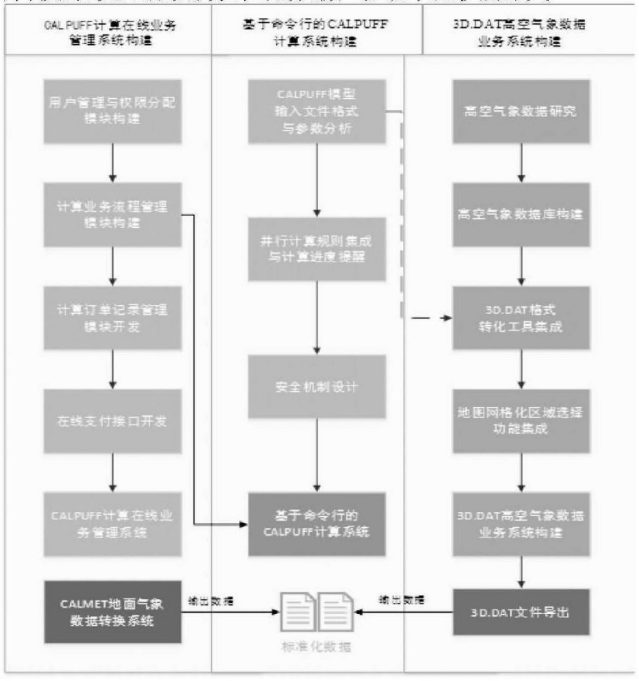


图 1 研究技术路线

中国知网 https://www.cnki.net

2.2　基于命令行的 CALPUFF 计算系统构建

2.2.1　并行规则研究

CALPUFF 模型的运算量一般较大，需要耗费大量的时间，为充分利用服务器的 CPU 资源，研究设计 CALPUFF 模型并行计算的规则和方案。CALPUFF 模型中存在具有计算的独立性多个子单元，可将其拆分为独立的计算单元，并同时进行计算。

根据用户设置的运行参数，系统能够自动生成并行计算组，通过运行命令行在多核 Linux 服务器或 Linux 集群服务器中同时运行 CALPUFF 模型的多个独立计算单元，实现多线程并行计算，提高 CPU 资源利用率和节省计算时间，并行规则如图 2。

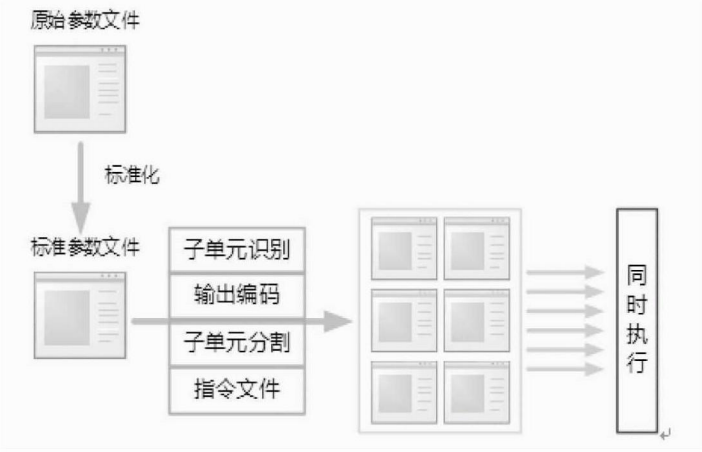


图 2　并行计算规则图

2.2.2　模型参数分析

分析梳理 CALPUFF 模型的输入文件格式及其参数形式，根据模型参数及其他运行参数设计开发 CALPUFF 模型的参数设置界面。用户可通过参数设置界面直观方便的设置各个模型参数和运行参数，系统将自动生成相应的 CALPUFF 模型输入文件及运行命令行。

2.2.3　CALPUFF 并行计算系统开发

基于模型参数分析、并行规则研究、安全机制设计和云平台调研的成果，开发基于命令行的 CALPUFF 并行计算系统。系统包括输入文件参数识别功能、并行计算组文件生成、并行计算命令发送执行与控制、计算进度监控（如短信消息提醒等方式）等功能。要求系统形成更加人性化易于使用的管理操作界面，以解决 CALPUFF 模型参数编辑困难和 Linux 系统的操作复杂，管理繁琐的缺点，系统为 C/S（客户端服务器）架构，以环保部环境工程评估中心前期研发的并行计算核心程序为基础进行集成开发，开发方案如图 3。

用户上传 CALPUFF 的 INP 总输入文件后，并行计算系统自动识别出 INP 文件中的各个参数，根据计算量生成相应的独立计算单元文件组，并与计算数据源及 CALPUFF 模式程序组成并行计算模块组发送至天河一号 Linux 集群中。用户只需操作界面化的 CALPUFF 并行计算系统，系统就可通过命令行远程控制天河一号 Linux 集群实现并行计算。计算过程中，系统会实时监测计算的进程，计算全部完成后，自动给用户发送短信通知，系统界面如图 4。

中国知网　https://www.cnki.net

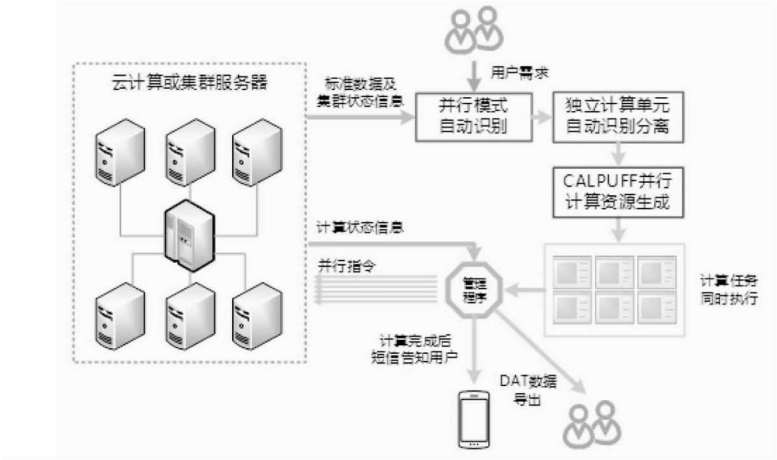


图 3　系统开发方案



图 4　CALPUFF 并行计算系统界面

2.3　CALMET 地面气象数据转换系统构建

2.3.1　系统开发方案

CALMET 模块要求输入尽量多的气象地面站的每日逐时观测资料，包括风速、风向、气温、云底高度、云量、气压和相对湿度。

SMERGE 气象预处理程序能够快速把地表气象时序数据转化成与 CALMET 模型相适应的 NCDC 格式，但 SMERGE 气象预处理程序目前是 C/S 架构软件，无法直接支持 CALMET 地面气象数据转换在线服务，因此需要对 SMERGE 气象预处理程序进一步基于 B/S（浏览器/服务器架构）集成，包括对其输入文件、运行参数的集成，系统控制自动化运行机制设计和实现，结果数据存储与输出接口开发，实现 CALMET 地面气象数据转换在线服务功能，系统开发路线如图 5。

2.3.2　系统业务流程设计

用户使用 CALMET 地面气象数据转换系统提供的数据产品之前，需要向 CALMET 地面气象数据转换系统管理团队提出注册申请，并提供指定的材料和接受用户协议的所有条款。系统管理员将对注册申请进行审核，通过审核后给用户分配使用权限。用户即可根据需求填写提交订单信息和计算参数信息，系统完成计算后，用户可在完成订单中查询，并下载计算结果。系统管理员可在后台对用户及订单进行管理。在线计算与管理业务流程见图 6。

中国知网 https://www.cnki.net

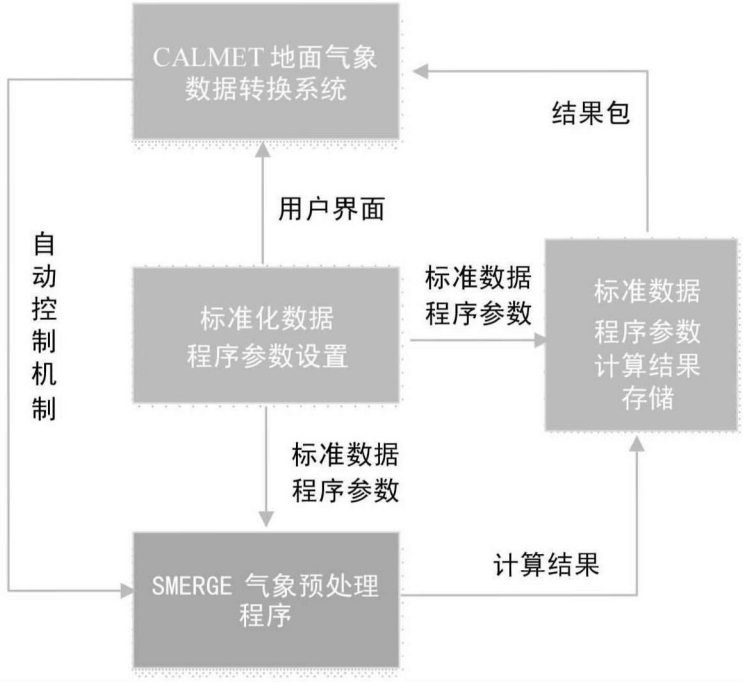


图 5　CALMET 地面气象数据转换系统开发路线

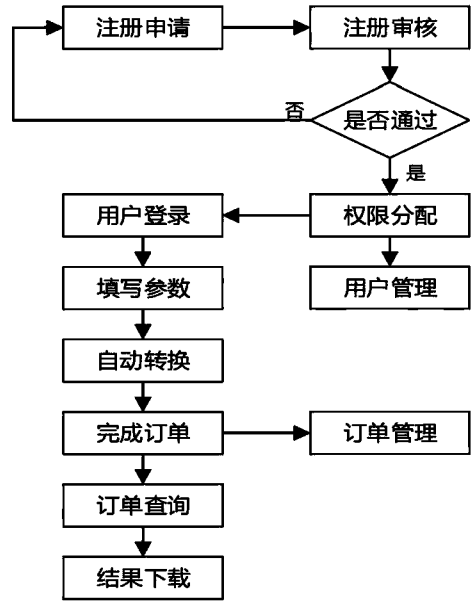


图 6　在线计算与管理业务流程图

2.4　CALPUFF 计算在线管理业务系统构建

2.4.1　系统业务流程设计

用户进入系统首先填写订单信息，其中订单编号、订单类型、客户名称和提交日期为自动填写，联系人、电话、数据年份为必填项，CALMET 输入文件、CALMET 数据包、CALPUFF 输入文件和 CALPUFF 数据包需要用户上传文件，地址、邮编等为选填信息。提交信息后，系统自动检查订单信息是否填写完整，不完整时返回给用户继续填写，填写完整后订单提交成功，并形成未审核订单。管理员可在待审核订单中，对用户提交的订单进行审核。审核过程中，订单状态改为审核中，用户可在正在审核订单中查询。订单不通过审核时，用户可在不通过订单中查询，并

中国知网　https://www.cnki.net

查看管理员的备注，对订单进行修改后再次提交。通过审核的订单，用户可在待付款订单中查询，并根据指定的付款途径进行付款。管理员确认用户已对订单付款后，在未付款订单中把订单标记为已付款，并根据用户的需求，在待开发票订单中确认发票开票情况，同时在待计算订单中，对订单进行计算确认，系统将对订单所需的数据进行计算生成结果。用户最后可在完成订单中对计算结果进行下载操作。在线计算与管理业务流程见图 7。

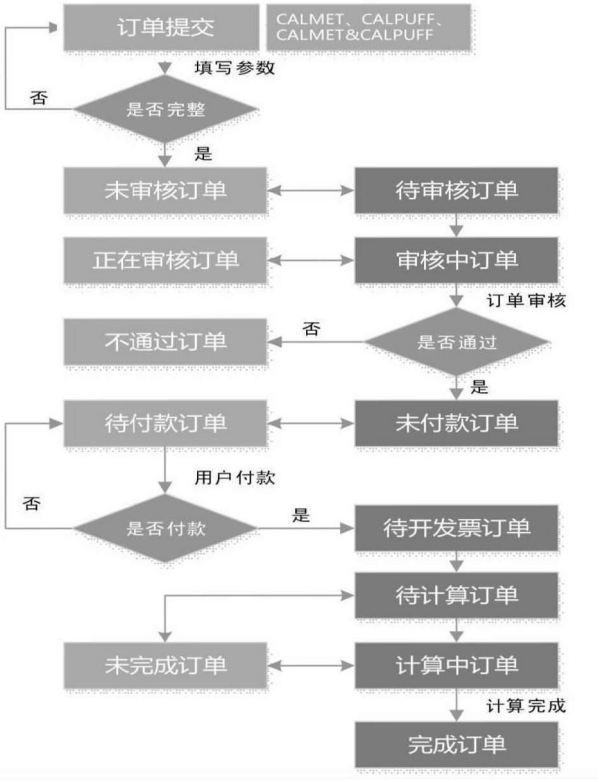


图 7　在线计算与管理业务流程

2.4.2　CALPUFF 计算在线管理业务系统开发

（1）数据结构设计，CALPUFF 计算在线管理业务系统以 Microsoft SQL Server 数据管理系统为数据库平台，存储订单信息、用户信息及系统信息等。系统数据库有 15 个数据表，订单信息和系统_ 用户为核心数据表，其他为系统辅助表。

（2）对象关系映射（ORM），用于实现 CALPUFF 计算在线管理业务系统中 C#编程语言与 Microsoft SQL Server 数据管理系统的数据之间的转换，包括了 34 个 ORM，订单提交、完成订单查询管理、订单详情等为核心部分。

（3）订单提交和订单浏览是用户使用的核心功能，订单提交包括 CALMET 计算订单、CALPUFF 计算订单、CALMET 与 CALPUFF 计算订单，订单浏览包括未审核订单、正在审核订单、不通过订单、待付款订单、未完成订单、已完成订单。

3　结　论

本研究基于命令行的 CALPUFF 计算系统构建，选择天河一号作为未来基于命令行的 CALPUFF 计算系统进行云升迁时运行的支撑平台，完成 CALPUFF 计算在线管理业务系统构建，建立了系统业务流程设计，弥补了 CALPUFF 模型应用中存在的单线程运算方式效率较低的问题。

中国知网　https://www.cnki.net

参 考 文 献

[1] SCIRE J S, STRIMAITIS D G, YAMARTINO R J. A user's guide for the CALMET dispersion model (Version 5) [M]. Concord, MA: Earth Tech, 2000: 1-79.

[2] SCIRE J S, STRIMAITIS D G, YAMARTINO R J. A user's guide for the CALPUFF dispersion model (Version 5) [M]. Concord, MA: Earth Tech, 2000: 1-79.

[3] 伯鑫, 丁峰, 徐鹤, 等. 大气扩散 CALPUFF 模型技术综述 [J]. 环境监测管理与技术, 2009, 03: 9-13.

中国知网 https://www.cnki.net