

Code Optimization Study Based on the Air Pollution Diffusion Mode of Letter-creation Environment

Lei Wang^{1,2} Fei Tian^{3*} Chuanhui Ren³ Aizhong Chen^{1,4} Jiabao Qu^{1,4}

1. State Environmental Protection Key Laboratory of Numerical Modeling for Environment Impact Assessment, Beijing, 100012, China

2. Jining Rencheng Ecological Environment Monitoring Center, Jining, Shandong, 272100, China

3. Shandong Academy of Environmental Science Co., Ltd., Jinan, Shandong, 250013, China

4. The Appraisal Center for Environment and Engineering, Ministry of Environmental Protection, Beijing, 100012, China

Abstract

The CALPUFF model is a complex numerical model widely used in atmospheric diffusion simulation and air quality assessment. However, with the development of China's information and software innovation (letter-creation) environment, the popularization of domestic hardware and operating systems has become a trend. However, CALPUFF is developed using Fortran77 and cannot fully adapt to China's information and innovation system. This paper proposes a research method based on the adaptation of letter-creation environments. By analyzing the source code structure of the CALPUFF model in depth, identifying syntax problems and errors, and making in-depth modifications to the source code, the data sharing and synchronization mechanism is optimized. The experimental results show that the optimized CALPUFF model can adapt to the letter-creation environment, and the output results are consistent with before the transformation. This study provides new ideas and methods for further exploring the application of atmospheric environment simulation.

Keywords

CALPUFF mode; innovation environment; code optimization; atmospheric diffusion simulation

一种基于信创环境大气污染扩散模型的代码优化研究

王磊^{1,2} 田飞^{3*} 任传慧³ 陈爱忠^{1,4} 屈加豹^{1,4}

1. 国家环境保护环境影响评价数值模拟重点实验室, 中国·北京 100012

2. 济宁市任城生态环境监控中心, 中国·山东 济宁 272100

3. 山东省环境保护科学研究设计院有限公司, 中国·山东 济南 250013

4. 环境保护部环境工程评估中心, 中国·北京 100012

摘要

CALPUFF模型是一种广泛应用于大气扩散模拟和空气质量评估的复杂数值模型,但随着中国信息化与软件化创新(信创)环境的发展,国产硬件和操作系统普及已是大势所趋,但CALPUFF采用Fortran77开发,不能完全与中国信创系统适配。论文提出了一种基于信创环境适配的研究方法,通过深入分析CALPUFF模型的源代码结构,识别语法存在的问题与错误,并对源代码的深入修改,优化数据共享与同步机制。实验结果表明,优化后的CALPUFF模型能够在信创环境下适配,并且输出结果与改造前一致。通过此次研究为进一步探索大气环境模拟领域应用提供了新思路和方法。

关键词

CALPUFF模型; 信创环境; 代码优化; 大气扩散模拟

1 引言

中国大气污染防治攻坚战中,大气污染扩散模型作为一种低价高效方法被广泛采用。以京津冀及周边 26 个城市

(简称“2+26”城市)大气污染防治为例,研究者采用网格模型开展预警预报与溯源分析,产生了地区空气质量预报、污染区域间的传输影响与行业占比分析等诸多成果。但随着中国大气环境治理的深入,对精准治理要求的不断提高,能开展点对点溯源的中小尺度模型逐渐被研究者重视,其中 CALPUFF 作为美国环境保护署 (U.S.Environmental Protection Agency, EPA) 与 HJ 2.2—2018《环境影响评价技术导则大气环境》推荐模型被广泛应用。

CALPUFF 是一种非稳态多尺度大气污染扩散模型,广

【作者简介】王磊 (1984—), 男, 中国山东济宁人, 本科, 从事大气污染数值模拟研究。

【通讯作者】田飞 (1985—), 男, 中国山东济南人, 硕士, 高级工程师, 从事大气污染模拟研究。

泛应用于环境评估、气象研究以及环境政策制定等领域。业界对 CALPUFF 的研究主要集中在部分污染源历史影响分析，重点关注模型的准确性，未对模拟的时效性提出要求。例如李国彦和高爽利用该模型对工业源排放对城区环境空气质量影响进行模拟，为精准化大气治理提供依据。Holnicki 与汪海等通过模型对机动车尾气进行环境影响预测，并与监测结果比对，结果吻合性较好。Wang 与王淑兰等通过 CALPUFF 模型对城市群的空气污染物扩散传输研究，探寻了它们之间的污染影响^[1]。

但随着中国信息化与软件化创新（信创）环境的发展，国产硬件和操作系统普及已是大势所趋，但现有 CALPUFF 开发语言为 Fortran77，国产编译器支持率较低，急需开展代码的优化升级。

在此背景下，论文探索在信创环境下对 CALPUFF 模型进行代码改造，以期保证模型的计算效率同时，保持模型输出的准确性和可靠性。本研究通过对 CALPUFF 模型的改造，不仅旨在提升 CALPUFF 模型的性能，也期望能够展示信创环境在处理复杂科学计算任务中的潜力，为未来更广泛的应用奠定基础，也试图为其他环境模型的优化提供参考和借鉴。

2 CALPUFF 与信创环境

2.1 CALPUFF 简介

CALPUFF 是一个非稳态拉格朗日烟团模型系统，可模拟三维流场随时间和空间发生变化时污染物在大气环境中的输送、转化和清除过程，该模型作为法规模型在世界上具有较高的工程应用。CALPUFF 模型系统包括以下几个子程序：模型预处理程序、气象诊断模型 CALMET、质量预测模型 CALPUFF、后处理模型 CALPOST。

2.2 信创环境

随着国际形势变化以及技术自主可控的重要性日益凸显，国产化已成为社会发展战略中的一个关键因素。国家对国产化的要求主要为以下三点：①技术自主可控：国家积极推动在关键技术领域，如芯片、操作系统、数据库、中间件等，实现自主知识产权。②产业链协同发展：国家鼓励上下游产业链的国产化替代，构建完整的国内生态系统。③持续监管与评估：国家建立国产化适配的监管机制，定期评估国产化进程的效果，及时调整策略以应对市场和技术的快速变化^[2]。

目前大气扩散模型仍以国外开源模型为主，随着国产信息化替代要求的提高，模型对信创环境的匹配性以及国产自主化的研究需求越发明显。

3 研究目标及内容

基于信创环境优化 CALPUFF 污染扩散数值模型源代码研究。通过分析源代码结构，识别语法存在的问题与错误，实现对源代码的深入修改，从而达到适配国产化的要求^[3]。

主要研究思路：①代码重构。由 Fortran77 升级为 Fortran 95，提高编程效率和代码可维护性，适配国产化需求。②代码优化。优化污染物烟团计算函数，对排放源模块中的关键数值计算进行优化，提高整体数值计算效率，以适应大

规模排放源数值计算需要。③框架升级。由串行计算框架升级为并行计算框架。对影响计算效率的函数进行多核优化，利用现代处理器的多核架构，实现高效的并行处理。

4 优化过程

4.1 国产化系统介绍

本研究全部基于国产化硬件与操作系统，具体见表 1。

表 1 国产化操作系统表

序号	软硬件	国产品牌
1	服务器	AnolisOS-23.0 服务器
2	操作系统	Anolis 23 国产操作系统
3	CPU	2 颗国产 Hygon 系列处理器 16C 32 线程，主频 3.5GHz
4	开发环境	VS2019+OneAPI2024.1
5	编译器	统信 UOS 和 AnolisOS-23 自带 gfortran

目前现有国产化系统对 CALPUFF 原始开发代码 Fortran 77 的适配性不够，所以为提高信创环境的适配，首先进行源代码重构升级，将现有 Fortran 77 升级到 Fortran 95，去除冗余、废弃以及已删除的特性。

4.2 CALPUFF 源代码问题分析

本研究对 CALPUFF V7 版本采用 GXCHK 全局静态分析工具、plusFORT 分析重构工具和人工逐行比对相结合的方式，进行源代码整体升级优化，升级 Fortran 77 到 Fortran 95，提高代码可读性和健壮性。

利用全局静态分析工具 GXCHK，对 calpuff 中 824 个子程序、142493 行源代码（不包括 INCLUDE 文件）、60859 条可执行语句进行静态安全检查，诊断了 1703 个错误和警告消息（表 2）。

表 2 GXCHK 诊断结果统计

问题类型	数量
使用但未定义的子程序	4
定义但未使用的子程序	82
子程序名称用于其他上下文	96
COMMON 块中没有任何内容被引用	1
参数从未使用	11
参数名称用于其他上下文	28
在不同位置定义参数	1
用不同值定义参数	1
COMMON 变量的命名不一致	138
COMMON 变量从未被引用	141
使用 COMMON 变量但从未给定值	30
其他上下文中使用的 COMMON 变量	422
在不同的 COMMONs 中出现 COMMON 变量	90
参数不匹配	633
子程序可以修改非变量自变量	28
从未引用 MODULE 变量	20
模块变量被赋予一个值但从未使用	4
合计	1730

CALPUFF 原始版本源代码约 16 万行, 893 个子程序, 76 个程序文件。用 SPAG 工具重构后, 程序文件由 76 个减少为 7 个, 892 个子程序被重新结构化、重新标记, 生成 2453 个诊断结果 (见表 3)。

表 3 SPAG 诊断结果统计

问题级别	问题明细	数量
致命错误	未完成字符常量	1
错误	INCLUDE 文件包含本地数据	2
	文件结束前出现 No END 语句	68
警告	声明重写被禁用	18
	已使用但未设置的本地变量	17
	VAX 源表单	1
	在 COMMON 中混合出现字符和数值数据	1232
	不可靠的实数相等性测试	191
变量	子程序参数不一致	96
	声明但未使用的变量	239
	未使用的 COMMON 块	3
	其他	585
	合计	2453

4.3 CALPUFF 源代码优化

在代码优化方面, 改动如下:

- ①去除 Fortran 90 前的字符限制, 去除字母 C 或者星号 (*), 去除 double precision 双精度实数变量等冗余数据类型, 更改 implicit 语句、dimension 语句、data 语句、parameter 语句等过时、废弃、和 / 或不必要的说明语句, 提高规范性。
- ②去除 COMMON 和 EQUIVALENCE 共享内存空间语句, 解决海量排放源内存资源消耗问题。
- ③去除另一子例程返回点、另一入口点、语句函数、将内置函数作为参数传递等不必要的子程序特性, 便于程序维护和调试, 防止参数传递混乱, 提高可靠性。
- ④去除 PAUSE、STOP、END、GOTO、DO 等语句的旧形式、算术 IF 语句等其他执行控制特性、格式描述符 H 等 I/O 语句的冗余特性, 提高可移植性^[4]。

重构后, CALPUFF 源文件数量从 76 个减少到 7 个,

源代码量从 16w+ 行减少到 14w+ 行, 可执行文件大小从 580M 减小到不足 9M, 且重构后的代码能够适配信创环境。

4.4 优化后预测结果分析

通过代码重构后的预测结果对比, 预测的 SO₂ 小时浓度场的空间分布一致、数据结果一致、结果文件大小一致, 说明 CALPUFF 源代码重构后没有影响模型预测结果的准确性, 能够在信创环境下进一步得到应用^[5]。

模型优化前后预测 SO₂ 小时浓度等值线图见图 1。

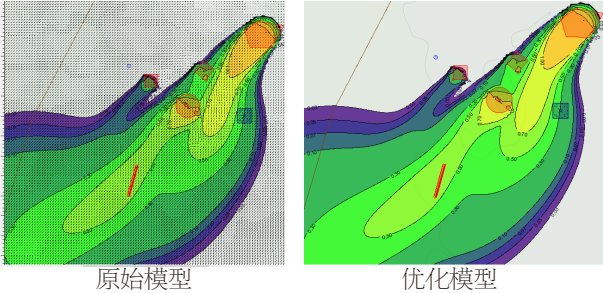


图 1 模型优化前后预测 SO₂ 小时浓度等值线图

5 结论

CALPUFF 作为中小尺度模型, 能够满足中国大气管控的需要。通过对模型算法、性能和输出的优化, 可进一步提高模型信创系统的适配性, 具体结论如下:

- ①现有 CALPUFF 模型源代码 Fortran 77 存在较多错误, 升级为 Fortran 95 后能够提高代码的稳定性。
- ②本研究通过 CALPUFF 代码重构, 能够适配国产化的信创环境。
- ③通过对比优化前后的模型预测结果, 浓度场分布有较好一致性, 可用于后期推广。

参考文献

[1] Wang.应用WRF/CALPUFF模型研究京津冀地区冬季的NO_x、SO、PM和PM的传输特征[Z].

[2] 李国彦.基于CALPUFF模型的兰州市NO_x污染及控制模拟研究[D].兰州:兰州大学,2021.

[3] 高爽,伯鑫,马岩,等.基于SOA转化机制的沧州市重点企业秋冬季大气污染模拟[J].环境科学,2019,40(4):1575-1584.

[4] 王淑兰,张远航,钟流举,等.珠江三角洲城市间空气污染的相互影响[J].中国环境科学,2005,25(2):133-137.

[5] 汪海.成都市二环高架路大气环境预测分析[D].成都:西南交通大学,2014.