

中尺度直接耦合氣象與大氣化學模式的發展

中央大學大氣物理研究所 張時禹

一、前言

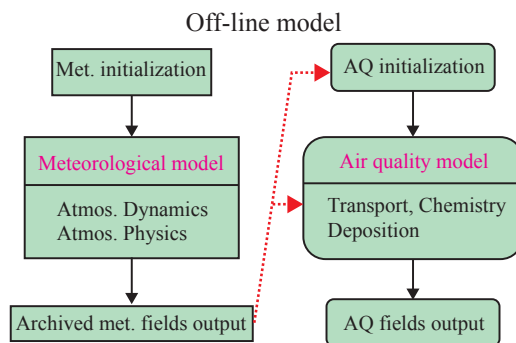
自上世紀以來，電腦計算模式已演變為大氣科學研究及應用所必需的工具之一。對大氣化學及空氣污染領域而言，此類模式更具有舉足輕重的地位。許多無法直接觀測到的大氣環境資料及國家環境政策的決策評估，都必須仰賴模式計算進行探討。對人類社會及生活最有影響的空氣品質問題都侷限於所謂的“中尺度範圍”，而全球變遷的問題也與大氣化學密不可分，因此都需要依賴大氣化學模式。對台灣社會而言，最密切的環境問題也多半是中尺度範圍的問題。所謂“中尺度”通常是指涵蓋範圍從數萬平方公里到數百萬平方公里的平面面積，中尺度大氣化學模式[1,2]則是在此範圍內模擬多類化學微量氣體的分佈與演變。

中尺度大氣化學模式中所考慮的物理及化學過程，包含大氣傳輸、大氣混合、氣體化學反應、液體化學反應、雲效應、氣溶膠、乾及濕沈降等。這些過程都有其不同的科學特性，也在理論描敘上有個別的數學特性，因此模式的運作及成效驗證頗為複雜。譬如大家所熟悉的氣象預報模式 (MM5[3], WRF[4])，一般來說需要考量的變數有十數項左右，但大氣化學模式除這些變數群外，還必須包含五十到一百個與大氣化學相關的變數[5]。因此近三十年來，每一代大氣化學模式都會使用到最先進的超級電腦，雖然如此，模式在電腦計算上仍都耗時耗力，因而限制了我們科學思考的空間。

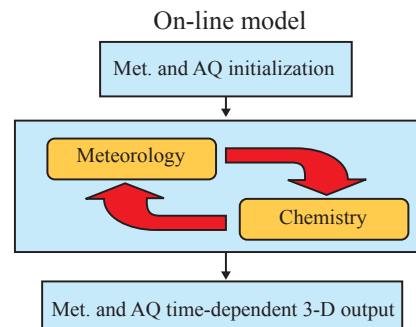
目前絕大多數的大氣化學模擬都使用所謂的離線模式 (off-line model，運算流程請見圖一)，意指有關氣象與化學的計算是分段執行的。一般而言，模式先執行有關氣象預報變數的模擬，然後使用輸出結果(output)來模擬大氣中化學物質來源(source)的時空分佈情況。更進一步，整合上述結果來推動大氣化學模式演算大氣中各種化學物質的時空分佈及演變。這種計算方

式的大膽假設是化學物質的演變對氣象場並沒有直接及明顯的影響。然而，我們也知道氣溶膠及雲過程對大氣輻射的影響應該對氣象場造成某種程度的改變，可是由於計算能力的限制，長年來我們必須暫時不考慮這方面的偶合作用 (coupling)。近期由於各等級 PC cluster 的發展，使我們得以嘗試將化學模式與氣象模式進行耦合及連線運算，產生新一代的連線模式 (on-line model，運算流程請見圖二)，是目前模式發展的趨勢[6]。此類模式具同步計算氣象與大氣化學過程的能力，更能符合真實大氣現況，以達到 off-line model 未能所及的境界。可預期的是，on-line model 對計算速度的要求極高，因此對計算方法的研發來說仍深具挑戰。

約八年前，美國國家大氣研究中心(NCAR)配合國家海洋與大氣總署(NOAA)及許多大學的研究群，共同合作推動新一代的中尺度天氣研



圖一 離線模式運算流程



圖二 連線模式運算流程

究與預報數值模式—WRF 模式 (Weather Research and Forecast Model)。自模式規劃前期就將大氣化學包含入此新氣象預報模式發展中，對氣象界而言是個重大突破。約兩年前，WRF 發展團隊宣佈完成 WRF-chem 第一版，首次完成中尺度的氣象與大氣化學的 on-line model。很可惜的是，為配合模式連線與耦合的需求，增加許多模式運算負載，使運算時間拖累整個模擬結果呈現的速度與分析問題的實用性。許多使用者都反應模式的計算速度過於緩慢，初步試用後即失去使用意願。針對此情況，國科會卓越發展延續計畫—「整合性中尺度環境評估系統」—第一個目標即為重新探討 WRF-chem 化學部門的演算方法及改進。目前我們已經初步發展成功 **WRF-chemT (WRF-chem Taiwan)**，總計算速度較 WRF-chem 快上一倍。經過計算程序分析，在全盤改編 WRF-chem 計算系統的條件下，WRF-chemT 應已達到最可能的計算速度極限。以下我們將介紹一些 WRF-chemT 初步成果。

二、WRF-chemT 發展進度

本計畫模式發展團隊先投入充分了解 WRF-chem 模組的演算方法及其他模式部份的聯繫，組合了一個新的 WRF-chem 化學次模組的計算方法，也配合了化學物質計算步階的改進。在維持原精確度的前提下，整體運算效能增快了一倍，其中化學程序快了四倍，而化學物質的傳輸程序則增快了一倍，見圖三。圖中顯示使用 WRF、WRF-chem 及 WRF-chemT 在不同演算組合下，所呈現的計算速度，CASE 1 是 WRF 僅考慮氣象部門，CASE 2~5 是 WRF-chem 的各種

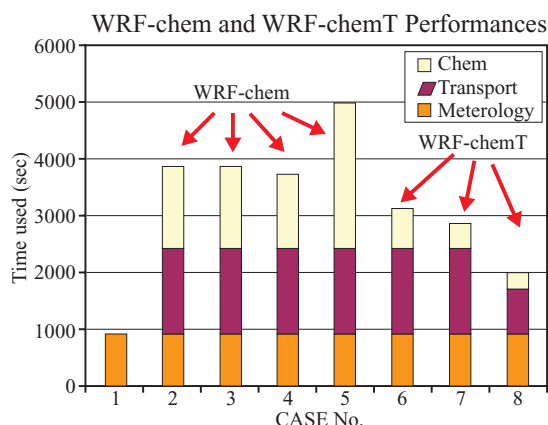
演算組合，CASE 6~8 則是 WRF-chemT 的不同演算組合。總體而言，WRF-chemT 較 WRF-chem 快了一倍(CASE 8 相較於 CASE 2~4)。經過進一步的探討，我們的認識是 WRF-chemT 演算的變數比 WRF 多了五倍以上，但總計算時間僅增加了一倍。在目前的 WRF 架構下，總運算速度應該沒有太多的增進空間，除非重新組合 WRF 整體計算策略及程序編寫，如此將影響 WRF 現有的平行計算架構，但我們建議不宜輕易更改。

從實際應用的角度來看，由於 WRF-chemT 是可以進行平行計算的模式。我們利用 128 顆 CPU 的 PC cluster 配合了 Infiniband 的 communication channel 運算實際案例，發現過去使用單一 CPU 需要運算 150 天的題目，經由此 PC cluster 平行運算的結果只需要一天半就可以完成，速度快上近百倍。然而若使用一般通用的 Gigabit ethernet 的 communication channel 來組合 PC cluster，則無法達到此速度。現在我們已經有能力投入整個東亞地區空氣品質的長期演變及氣候變遷條件下所導致的環境變遷等需要大量計算的大氣科學議題。據我們所知，WRF-chemT 可說是整個 WRF family 中全球最快的大氣化學 on-line model 的運算模式之一。我們目前正致力於繼續改良 WRF-chemT 的演算架構，使之更趨完美，並彌補 WRF-chem 不完整之處，以真正達到所謂的 on-line model，更進一步探討 on-line 及 off-line 間互補互助的效能研究。

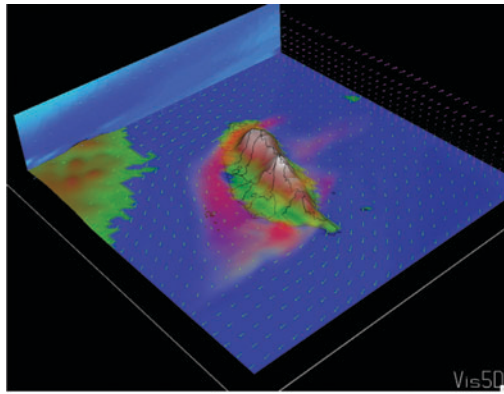
三、WRF-chemT 初步模擬成果

我們已利用 WRF-chemT 來探討台灣環境空氣污染與鄰近海域關係的問題，如圖四所顯示的 2004/4/26~30 為期五天的臭氧事件模擬。模擬參數設定是以單一 domain 為測試基礎，水平網格數為 83*80，網格大小為 9 公里，垂直層數為 35 層（使用不相等的層次厚度，高度自地面到約 16 公里處），涵蓋範圍包含整個台灣及外海部份。使用氣象初始場為 AVN 氣象資料，解析度 1 度 × 1 度。模擬結果如圖四(a)及(b)，分別顯示 4/27 17:00 及 4/28 16:00 時，台灣及周圍海域臭氧的分佈情形，圖中紅色的部份表示臭氧濃度為 65~75ppbv，此濃度相當於台灣都會區及工業區等高污染地區的一般臭氧濃度。

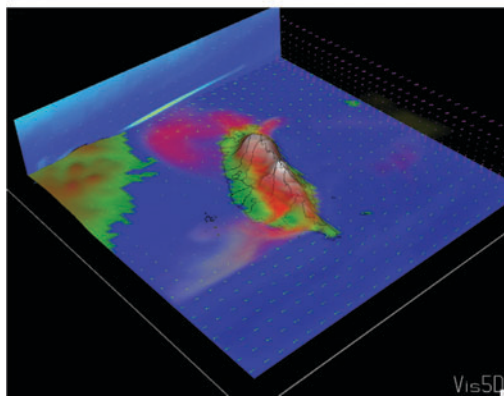
從一系列的個案分析中，我們可以清楚地了



圖三 WRF-chem 及 WRF-chemT 運算效能比較



(a) 2004/4/27 17:00



(b) 2004/4/28 16:00

圖四 2004/4/26~30 臭氧事件模擬結果

解台灣實在不是一座“孤島”。台灣不僅受到大陸地區的影響，本身也會影響四周海域及鄰近的陸地，如圖四(b)所顯示，北台灣的臭氧及前驅物質可出海一至兩百公里後，隨氣象風場的傳輸而回流影響到中台灣的空氣品質。在一系列的冷鋒面通過台灣及亞洲大陸高壓出海的氣象條件影響下，台灣的污染物甚至在連續五天內，環繞全島並出海傳播到百餘公里外。

四、小節

在本卓越計畫的規劃中，我們將利用 WRF-chemT 來建立一個台灣中尺度空氣品質評估系統，整合衛星遙感資料、即時調整各種大氣化學物質的排放量，並加入氣溶膠次模擬，來探討台灣空氣品質在東亞的角色，預計達到最現代化具世界水準的空氣品質驗證系統。未來將 WRF-chemT 加入 WRF family，使國內外專家得以認識及使用我們的發展成果。

參考文獻

- [1] J.S. Chang, R.A. Brost, I.S.A. Isaksen, P. Middleton, W.R. Stockwell and C.J. Walcek, *J. Geophys. Res.*, **92**, 14681 (1987).
- [2] Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, *EPA/600/R-99/030*, March (1999).
(<http://www.epa.gov/asmdnerl/CMAQ/CMAQscienceDoc.html>)
- [3] J. Dudhia, *Mon. Wea. Rev.*, **121**, 1493 (1993).
- [4] W.C. Skamarock, J.B. Klemp, J. Dudhia, D.O. Gill, D.M. Barker, W. Wang and J.G. Powers, *A Description of the Advanced Research WRF Version 2 NCAR/TN- 468+ STR* (2005).
- [5] W.R. Stockwell, P. Middleton, J.S. Chang and X. Tang, *J. Geophys. Res.*, **95 (D10)**, 16343 (1990).
- [6] G.A. Grell, S. E. Peckham, R. Schmitz, S. A. McKeen, G. Frost, W. C. Skamarock and B. Eder, *Atmos. Environ.*, **39**, 6957 (2005).