公告模式 CMAQ 使用國網方式指引

一、使用指引

(一)申請使用帳號

目前本署指定執行公告模式的電腦平台為位於「國家高速網路與計算中心」(以下簡稱國網)的「臺灣杉三號」主機,欲使用國網臺灣杉三號電腦資源,必須事先申請帳號,申請帳號請至國網計算資源服務網 iservice

(<u>https://iservice.nchc.org.tw/nchc_service/index.php</u>) 申 請。

(二)申請計畫並儲值

國網的臺灣杉三號計算資源並非無償使用,包括計算核心與資料儲存空間都是必須付費的,而且必須先儲值才能使用資源,而儲值之前必須先申請計畫,之後才能針對計畫儲值,而使用者才能使用計算資源。計算資源使用的費用,以及計畫申請與儲值相關細節請參考 iservice。

(三) 準備連線軟體

欲連線臺灣杉三號必須以提供 SSH 通訊協定的終端機連線軟體進行連線,登入時除了必須輸入自行設定的個人密碼外,也必須輸入動態密碼 (One-Time Password,以下簡稱 OTP,或稱 Mobile OTP,以下簡稱 MOTP),有關 OTP 的取得請參考 iservice 說明。

(四)連線指定之電腦平台

打開終端機連線軟體進行連線,輸入臺灣杉三號網址:

twnia3. nchc. org. tw

開始連線後,根據提示輸入帳號、個人密碼、以及 OTP (或 MOTP),輸入無誤後即可建立連線。連線方法或問題可參考臺灣杉三號使用手冊,或聯繫 iservice 取得協助。

(五)安裝公告模式與相關資料至個人工作空間

將公告模式程式和範例檔案複製到個人在臺灣杉三號的工作空間, 此檔案已打包為打包檔,放置路徑為:

/work/simenvipub01/download/cmaq_recommend.tar.xz 下載或複製打包檔至個人空間後,請解開並安裝至個人適當工作路徑(資料夾)。

(六) 將輸入檔案放置於對應路徑

從台灣杉三號主機中將公告模式各月分輸入檔複製到個人空間,路

徑位於:

/work/simenvipub01/download/input

並將其解開且放置於範例檔案對應位置。

(七)修改模式執行環境設定

根據自身狀況,以及想執行的標的與月份,修改相關控制檔中有關 的時間參數與工作路徑的位置:(以下路徑中斜體字部分可修改)

1. CMAQ/work/<u>2019-01</u>/project.config,其中建議修改的部分為cmaqproject:為輸出資料的存放工作路徑

START_DATE:模擬起始時間

END DATE:模擬結束時間

2. CMAQ/work/2019-01/grid03/cctm. raw/run. cctm. 03. csh,確認排放檔案檔名和使用排放檔數量等資訊,執行公告模式背景模擬的情況下,此檔案可以不用修改。

(八)修改模式執行設定

由於 CMAQ 屬於大型模式,也就是 CMAQ 的運算非常耗費電腦資源,包括 CPU 核心使用時間與儲存空間,臺灣杉三號是多人共享的計算平台,也就是同時間可能會有相當多使用者使用臺灣杉三號的計算資源,臺灣杉三號計算資源雖然強大,但終究有其極限,在這種情況下,臺灣杉三號是採用工作佇列的方式來管理各使用者的計算需求,也就是每個使用者必須將自身的計算工作以工作包的方式送進臺灣杉三號的計算佇列中排隊,系統一般會以先來後到的順序來判別是否有計算資源可以讓使用者使用,此時使用者的工作才會真正送進各計算節點進行運算。

因此,在臺灣杉三號執行 CMAQ 也要遵循這樣的規定,排隊等候模式執行,將 CMAQ 執行工作送進佇列的方式是以工作指令集的方式提送工作,使用者必須根據自身的狀況與需求修改此工作指令集,此工作指令集的位置為:

CMAQ/work/2019-01/grid03/cctm. raw/intel. sh, 其中使用者必須根據自身需求修改的部分為:

GOV110197 :計畫代號,即使用者在步驟(二)所申請計畫代號

CMAQ532 :工作名稱,使用者可根據自身需求修改

ntasks=200 :計算核心需求,使用者可根據需求修改核心需求數

(九)執行模式

以上步驟皆無誤且設定完成,即可將模式模擬工作送進佇列中等待 執行,指令為:

sbatch intel.sh

(十) 查看執行狀態

工作指令集送進佇列中等待執行後,可透過 "sacct"指令查詢模擬工作是否執行,以及執行狀態,執行完畢後,應查看執行記錄檔, 記錄檔位置與步驟(七)、(八)相同,其副檔名為.out,如果模式 執行順利完成,應該可以在工作記錄檔後面的位置看到下列訊息:

|>--- PROGRAM COMPLETED SUCCESSFULLY ---<|

如果有錯誤訊息,應根據錯誤訊息內容進行除錯。

(十一) 檢查分析模擬結果

模式模擬結果輸出檔放置位置為:

CMAQ/output/2019-01/grid03/cctm.raw

如果執行無誤,CMAQ模式模擬結果皆存放在此處,使用者可根據自 身需求對模擬結果進行後處理,得到需要的數據。

二、參考資料

可參考附件一之公告模式教育訓練簡報,但腳本可能有部分不同,以國網 上檔案為準。