

# 公告模式 CMAQ 使用方式指引

2022 年 2 月 22 日修訂

## 壹、使用方式

- 一、直接使用：在環保署（以下簡稱本署）指定的電腦平台，使用指定之工作指令集、模式執行腳本、模式執行檔、控制參數檔、以及輸入資料檔，執行空氣品質模式模擬，相關執行方式與相關設定與資料應符合公告模式使用規範。
- 二、下載使用：自本署指定的網站下載公告模式程式碼與相關資料，並自行編譯模式執行檔，執行時仍使用指定之控制參數檔與輸入資料檔，相關執行方式與相關設定與資料仍應符合公告模式使用規範。

## 貳、使用指引

- 一、直接使用：直接使用是指在本署所指定的可執行公告模式的電腦平台直接執行公告模式，執行公告模式必須使用指定控制參數與輸入資料，這些參數與資料檔皆已隨同公告模式本身建置，因此要在指定電腦平台執行公告模式進行空氣品質模式模擬時，只需複製或鏈接相關程式與資料，並根據自身需求修改相關檔案儲存路徑，即可執行，以下說明步驟。

### （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（[https://iservice.nchc.org.tw/nchc\\_service/index.php](https://iservice.nchc.org.tw/nchc_service/index.php)）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

將公告模式與相關資料複製到個人在臺灣杉三號的工作空間，公告模式與相關資料已打包為打包檔，放置路徑為：

/work/simenvipub01/download/cmaq\_recommmend.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) 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/2019-01/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，一般執行公告模式背景模擬的情況下，此檔案可以不用修改。

#### (七) 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

#### （八）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

#### （九）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）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、下載使用：下載使用是自本署指定的網站下載公告模式程式碼與相關資料，並自行編譯模式執行檔，執行時仍使用指定之控制參數檔與輸入資料檔，相關執行方式與相關設定與資料仍應符合公告模式使用規範。由於執行公告模式必須使用指定控制參數與輸入資料，所以下載使用公告模式時，也必須下載公告模式相關的參數與資料檔，以下說明步驟。

##### （一）申請使用帳號

目前本署指定下傳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「臺灣杉一號」主機，欲自國網臺灣杉一號下載資料，必須事先申請帳號，申請帳號請至國網計算資源服務網 iservice（[https://iservice.nchc.org.tw/nchc\\_service/index.php](https://iservice.nchc.org.tw/nchc_service/index.php)）申

請。

## (二) 準備連線軟體

欲自臺灣杉一號下載資料，必須使用可以提供 SSH 通訊協定的檔案傳輸軟體進行連線（例如 sftp），登入時除了必須輸入帳號與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。

## (三) 連線指定之電腦平台

打開檔案傳輸連線軟體開始並進行連線，輸入臺灣杉一號資料傳輸網址：

xdata1.twnia.nchc.org.tw 或 xdata2.twnia.nchc.org.t

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國網臺灣杉一號使用手冊，或聯繫 iservice 取得協助。

## (四) 下載公告模式與相關資料至個人工作站

公告模式存放在臺灣杉一號的工作空間，公告模式與相關資料已打包為打包檔，放置路徑為：

/work1/simenvipub01/download/cmaq\_recommend.tar.xz

下載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）。

## (五) 安裝公告模式與相關資料至個人工作空間

打包檔下載至個人空間後，請解開並安裝至個人適當工作路徑（資料夾）如下例，其中 CMAQ 即為公告模式 CMAQ 的家目錄：

/working\_path/CMAQ

## (六) 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. /working\_path/CMAQ/work/2019-01/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. /working\_path/CMAQ/work/2019-

01/grid03/cctm.raw/run.cctm.03.csh，一般執行公告模式背景模擬的

情況下，此檔案可以不用修改。

(七) 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：

```
nohup ./run.cctm.03.csh &
```

(八) 查看執行狀態

模擬工作送進電腦後，可透過“top”指令查看模擬工作的執行狀態，執行完畢後，應查看執行記錄檔，記錄檔位置與步驟（六）、（七）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) 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。