

CAS-ESM2.0.3 快速运行手册

中国科学院地球系统模式(Chinese Academy of Sciences Earth System Model, 简称 CAS-ESM) 由中国科学院大气物理研究所牵头, 联合中国科学院计算机网络信息中心、北京师范大学、中山大学、中国科学院计算技术研究所等多家单位共同研发。其首个版本 CAS-ESM1.0 于 2015 年 9 月发布, 第二个版本 CAS-ESM2.0 于 2020 年 1 月定型, 并参加了第六次国际耦合模式比较计划 CMIP6。CAS-ESM2.0.3 相比 CAS-ESM2.0, 在编译配置流程、代码结构等方面进行了优化, 使用起来更为便捷。本手册将介绍如何在地球系统数值模拟装置上快速运行 CAS-ESM2.0.3。

1. 获取 CAS-ESM

拷贝代码压缩包

```
cp /data/zhangh/CAS-ESM_release/cas-esm2.0.3.tar.gz .
```

解压

```
tar -xzf cas-esm2.0.3.tar.gz
```

得到 CAS-ESM 代码 cas-esm/

2. 配置 CAS-ESM 及环境

2.1 配置账号环境 (设置编译器, MPI 库, NetCDF 库等):

```
module purge  
module load compiler/intel/2017.5.239  
module load mpi/intelmpi/2017.4.239  
module load compiler/rocm/3.3  
module load mathlib/hdf5/intel/1.8.20  
module load mathlib/zip/intel/2.1.1  
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1  
module load apps/ncl_ncarg/6.3.0  
module load apps/nco/intel/4.8.1
```

(可在命令行输入, 也可写入 ~/.bashrc 中, 如下图,)

```

# .bashrc

# Source global definitions
if [ -f /etc/bashrc ]; then
    . /etc/bashrc
fi

module purge
module load compiler/intel/2017.5.239
module load mpi/intelmpi/2017.4.239
#module load mpi/hpcx/2.7.4/intel-2017.5.239
module load compiler/rocm/3.3
module load mathlib/hdf5/intel/1.8.20
module load mathlib/zip/intel/2.1.1
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1
module load apps/ncl_ncarg/6.3.0
module load apps/ncv/intel/4.8.1

```

修改完成后，在命令行输入 `source ~/.bashrc` 使之生效

2.2 配置 CAS-ESM

切换至 `cas-esm/scripts/casesm_utils/Machines` 目录

```
cd cas-esm/scripts/casesm_utils/Machines
```

打开 `config_machines.xml` 文件

```
vim config_machines.xml
```

修改 `MACH="huan_default"` 对应字段，将 `EXEROOT`（编译后的可执行程序目录）和 `DOUT_S_ROOT`（输出数据临时存放目录）设置为用户自定义的目录

```

<machine MACH="huan_default"
DESC="Huan Miyun, 64 pes/node, PES batch system"
EXEROOT="/data/user default/cas-esm/run/$CASE"
OBJROOT="$EXEROOT"
LIBROOT="$EXEROOT/lib"
INCROOT="$EXEROOT/lib/include"
DIN_LOC_ROOT_CSMDATA="/data/zhangh/data/inputdata"
DOUT_S_ROOT="/data/user default/cas-esm/run/archive/$CASE"
DOUT_L_HTAR="FALSE"
DOUT_L_MSROOT="csm/$CASE"
OS="Linux"
GMAKE_J="16"
MAX_TASKS_PER_NODE="64"
MPISERIAL_SUPPORT="TRUE"
PES_PER_NODE="64" />

```

假设用户名为“user1”，则将上图中的默认值/data/user_default，修改为/data/user1，保存修改并退出。

3. 创建 case（以 picontrl 试验为例）

切换至 cas-esm/scripts 路径

```
cd cas-esm/scripts
```

在命令行输入

```
./create_newcase -case picontrl_test -compset PI_C6 -res fd14_licom -mach huan_default
```

生成名为 picontrl_test 的目录，作为新 case 的目录。

创建 case 命令格式为

```
./create_newcase -case [case 名] -compset [耦合模式组合] -res [分辨率] -mach [机器名]
```

其中[case 名]为用户自定义,[耦合模式组合]和[分辨率]可选项目参见表 1,[机器名]为第 2 步骤中设置的 huan_default。

表 1 CAS-ESM 当前支持的 Compset

名称 (-compset)	分辨率	-res
PI_C6	1.4°×1.4°	fd14_licom
PI_C6_C	1.4°×1.4°	fd14_licom
HIST_C6_C	1.4°×1.4°	fd14_licom
HIST_C6_B	1.4°×1.4°	fd14_licom
AMIP_C6	1.4°×1.4°	fd14_fd14
	0.5°×0.5°	fd05_fd05
	1.0°×1.0°	fd1_fd1
	0.25°×0.25°	fd02_fd02
4XCO2	1.4°×1.4°	fd14_licom
1PCTCO2	1.4°×1.4°	fd14_licom
SSP126	1.4°×1.4°	fd14_licom
SSP245	1.4°×1.4°	fd14_licom

SSP370	1.4°×1.4°	fd14_licom
SSP585	1.4°×1.4°	fd14_licom
ESM_PI_C6_C	1.4°×1.4°	fd14_licom
ESM_HIST_C6_B	1.4°×1.4°	fd14_licom

注：PI 表示 piControl 试验，C6 是 CMIP6 的简写，HIST 是历史试验，4XCO2 为 4 倍 CO2 突增试验，1PCTCO2 为 CO2 每年 1% 递增试验，SSP 为未来情景预估试验，ESM_PI 为全耦合 piControl 试验，ESM_HIST 为全耦合历史试验。

4. 编译 CAS-ESM

切换至已创建的 case 目录，如 picontrl_test/

```
cd cas-esm/scripts/picontrl_test/
```

执行预编译

```
./configure -case
```

执行编译

```
./ picontrl_test.huan_default.build (以上面步骤中创建的 picontrl_test 试验为例)
```

5. 运行 CAS-ESM

在完成编译步骤之后，会生成对应上例中 picontrl_test 用例的运行路径

```
cas-esm/run/picontrl_test/run/
```

切换至 run 目录

```
cd cas-esm/run/picontrl_test/run/
```

该目录下包含根据不同 compset 所自动生成的各个分量模式的 namelist 文件，如 drv_in, atm_in, lnd_in, licon_in, ice_in 等，多数情况下，用户无需对上述文件进行修改，通常只需要在 drv_in 中设置模式运行起止时间的相关信息，常用的相关参数如下：

start_type: 设置积分类型，‘startup’为初始积分，‘continue’为重启动积分，‘branch’类似重启动，可修改一些重启动不允许修改的参数

start_ymd: 积分的起始时间，格式为 yyyyymmdd

stop_option: 积分时长的时间单位, 有效取值为‘nyears’, ‘nmonths’, ‘ndays’, ‘nhours’, ‘nseconds’, ‘nsteps’, ‘none’等

stop_n: 积分时长, 时间单位为‘stop_option’

restart_option: restart 文件的输出频次的时间单位, 取值同 stop_option

restart_n: restart 文件的输出频次, 时间单位为‘restart_option’

修改完 namelist 文件后, 即可编写作业脚本文件并提交作业。

vim run.slurm

参考作业脚本如下:

```
-----  
#!/bin/bash  
#SBATCH -J PI_C6  
#SBATCH -p cpu_parallel  
#SBATCH -N 16  
#SBATCH -n 512  
#SBATCH --ntasks-per-node=32  
#SBATCH --mem=200G  
#SBATCH -o casesm.o%j  
#SBATCH -e casesm.e%j  
#SBATCH --exclusive  
#SBATCH -t 1-00:00  
module purge  
module load compiler/intel/2017.5.239  
module load mpi/intelmpi/2017.4.239  
module load mathlib/hdf5/intel/1.8.20  
module load mathlib/zip/intel/2.1.1  
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1  
scontrol show hostname > nd  
NP=$SLURM_NPROCS  
mpirun -np $NP -machinefile nd ./casesm.exe  
-----
```

作业脚本中各参数的具体含义可以参考装置超算的用户手册，需要特别注意的是 `-n` 指的是试验运行所需要的总进程数（核数），该进程数应该与 `drv_in` 中的总进程数（各分量模式的最大核数）相同。

作业相关的常用的命令有：

提交作业：

`sbatch run.slurm`

查询作业状态：

`squeue`

查询队列状态：

`sinfo`

6. 关于输出数据

模式积分过程中的输出文件默认情况下和可执行程序 `casesm.exe` 在同一个目录下，即位于路径：`cas-esm/run/picontrol_test/run/`。各个分量模式的输出文件的文件名规则如表 2 所示。

表 2 各分量模式的输出文件

序号	分量	类型	名称
1	大气	历史文件	[case 名].iap.h0.[年]-[月].nc
2	大气	重启动文件	[case 名].iap.r.[年]-[月]-[日].nc [case 名].iap.rs.[年]-[月]-[日].nc
3	海洋	历史文件	MMEAN[年]-[月].nc
4	海洋	重启动文件	fort.22.[年]-[月]-[日]
5	陆面	历史文件	[case 名]-colm-[年]-[月].nc
6	陆面	重启动文件	[case 名]-colm-restart-[年]-[月]-[日]-00000
7	海冰	历史文件	[case 名].cice.h.[年]-[月].nc
8	海冰	重启动文件	[case 名].cice.r.[年]-[月]-[日]-00000.nc
9	耦合器	重启动文件	[case 名].cpl.r.[年]-[月]-[日]-00000.nc

注意事项及常见问题:

1. 关于 compsets

表 1 中列出的为已测试过的 compsets, 其他可选的 compsets 可参考 cas-esm/scripts/casesm_utils/Case.template/config_compsets.xml, 需要注意的是其中列表之外 compsets 并未开展测试, 用户使用时需自行验证评估。

2. 关于 namelists

提供了如下的 CMIP6 标准试验的 namelist 文件, 供用户试验时参考:
/data/zhangh/data/namelist/CMIP6/路径下 9 组试验的目录

1pctCO2	4xCO2	AMIP	B20TR	piControl	ssp126	ssp245	ssp370	ssp585
-------------------------	-----------------------	----------------------	-----------------------	---------------------------	------------------------	------------------------	------------------------	------------------------

3. 如何修改并行规模

根据不同的 compset 和分辨率, 创建 case 时会自动给出默认的核数配置, 对普通用户不建议修改核数。确需修改核数的, 需注意以下的事项:

1) 如需修改海冰模式的核数, 需要修改编译目录下的 env_mach_pes.xml 文件, 然后重新编译。修改其他分量模式的核数, 只需在 drv_in 中对各分量模式的核数 (如大气模式核数 atm_ntasks) 进行修改, 无需重新编译。

2) 大气模式模式的核数应与 atm_in 中的 npr_yz 相对应, 设

$$npr_yz = ny, nz, nz, ny$$

其中 ny 为沿经圈的剖分个数, 其最大值不超过纬度格点数的一半。nz 为垂直方向的剖分, 其最大值不超过垂直层数。大气模式的总核数应满足:

$$atm_ntasks = ny * nz$$

3) 海洋模式的总核数满足: ocn_ntasks = nx_proc * ny_proc, 其中 nx_proc 和 ny_proc 分别为经度和纬度的剖分, 在 licom_in 中进行设置。ocn_ntasks 的建议取值及其对应的 nx_proc 和 ny_proc 如下表所示。

表 3 海洋模式核数的配置建议

ocn_ntasks	nx_proc	ny_proc
15	3	5
30	3	10

60	5	12
120	12	10
240	20	12
480	60	8

4. 关于重新启动运行

重新启动运行时需注意两点，一是将 `drv_in` 中的 `start_type` 设置为 ‘continue’，另外要确保各个分量模式的 `rpointer.*` 文件的重启动文件的日期保持一致。

联系方式:

张贺, zhanghe@mail.iap.ac.cn

郝卉群, haohq@sccas.cn

柴兆阳, czy@mail.iap.ac.cn

(2023 年 4 月 14 日第一版)