

高性能计算平台使用手册

南京航空航天大学高性能计算中心

2020年6月

目录

| | |
|---------------------------|----|
| 1 平台资源概述..... | 1 |
| 1.1 计算资源..... | 1 |
| 1.2 应用软件资源..... | 1 |
| 2 使用模式、流程及规范..... | 3 |
| 2.1 使用模式..... | 3 |
| 2.2 使用流程..... | 3 |
| 2.3 使用规范..... | 4 |
| 3 使用方式..... | 5 |
| 3.1 账号绑定..... | 5 |
| 3.2 远程登陆..... | 7 |
| 3.2.1 准备工作..... | 8 |
| 3.2.2 Windows 系统..... | 8 |
| 3.2.3 类Unix 系统..... | 9 |
| 3.3 文件的上传和下载..... | 9 |
| 3.3.1 Windows 系统..... | 9 |
| 3.3.2 类Unix 系统..... | 11 |
| 3.4 Slurm 作业调度系统使用说明..... | 12 |
| 3.4.1 查看当前可用资源..... | 12 |
| 3.4.2 编写作业脚本..... | 13 |
| 3.4.3 提交作业..... | 13 |
| 3.4.4 查看作业..... | 13 |
| 3.4.5 调整作业..... | 14 |
| 3.4.6 取消作业..... | 15 |
| 3.5 加载环境变量..... | 15 |
| 3.5.1 module 常用命令..... | 16 |
| 3.5.2 模块命名规则..... | 16 |
| 附录 1 Linux 常用命令..... | 17 |
| 附录 2 常用脚本..... | 19 |
| 1 vasp 脚本试列..... | 19 |
| 2 lammgs 脚本..... | 19 |

| | |
|---------------------|----|
| 3 Gaussian 脚本 | 20 |
| 4 ms 脚本 | 20 |
| 5 fluent 脚本 | 20 |
| 6 lsdyna..... | 21 |
| 7 molpro..... | 22 |

1 平台资源概述

南京航空航天大学高性能计算平台（以下简称平台）是依托工信部十三五信息化专项—南京航空航天大学智慧校园（一期）建设的校级科学仪器公共平台，可提供 CPU 计算和 GPU 计算所需资源。

1.1 计算资源

平台硬件资源如下表所示，用户需要根据算例情况和计算需求从计算资源中选取合适的队列，确定 CPU 核数等参数编写脚本才能提交作业。

| 队列名 | CPU 类型 | GPU 类型 | 内存 | 节点数 |
|------|---|------------------------------------|------|-----|
| Cpu | 2 颗 Intel Xeon Cascade Lake Gold 6248, 2.5GHz, 20 核 | | 192G | 33 |
| Gpu4 | 2 颗 Intel Xeon Cascade Lake Gold 6248, 2.5GHz, 20 核 | 4 块 NVidia Tesla PCIE V100 32GB 显存 | 192G | 29 |
| Gpu8 | 2 颗 Intel Xeon Cascade Lake Gold 6248, 2.5GHz, 20 核 | 8 块 NVidia Tesla PCIE V100 32GB 显存 | 192G | 1 |

1.2 应用软件资源

平台上已经安装常用应用软件，所在目录为/data/software，用户可以进入该目录查看可用软件，编译或运行程序需设置正确环境变量。

为方便加载应用软件所需的环境变量，平台就常用的软件配置了 modulefile，详见第 3.5 节。

附录 2 提供 vasp、lammgs、Gaussian、fluent、ms 脚本样本，用户可以直接复制使用脚本样本。

特别说明：针对需要使用 python 的用户，本集群无法连接公网下载第三方模块，集群提供了 anaconda3 环境供用户使用，可使用 module load

命令加载 anaconda3 的环境。如 anaconda3 中缺少第三方模块，请联系管理员协助安装所需的第三方模块。

2 使用模式、流程及规范

2.1 使用模式

平台采用预付费制，用户预交机时费并签署合同，设立用户账号。使用模式包括：

1) 付费排队：用户付费将作业提交到收费队列，用户作业参与公共排队；

2) 付费独占：用户付费租用某些计算节点以独占方式使用，用户可以自主使用其租用的计算节点而无需排队等待。

2.2 使用流程

1) 开户：用户在网上办事大厅办理《高性能计算平台用户申请》。通过审批后由平台管理员开户，并通过邮箱发送账号初始信息，请及时修改密码并在平台管理系统完善个人信息。



2) 签订服务协议：用户与高性能计算中心签订服务协议，约定双方权责及收费标准。

3) 缴费：用户按照使用模式及资费标准预缴费，预缴费后可使用计算资源。

4) 使用：用户按照用户手册及相关管理规定使用高性能计算平台资源。

5) 充值：余额为零或者欠费，需要缴费充值才能继续提交作业；如果收到欠费通知 30 日内没有补足费用，账号将被注销，收回存储空间。

6)销户:若不再需要继续使用高性能计算平台资源,可主动注销账户。

2.3 使用规范

1) 用户应遵守《中华人民共和国保守国家秘密法》等国家保密相关法律法规,禁止使用平台处理涉密数据或信息。

2) 用户应遵守《中华人民共和国网络安全法》等网络安全相关法律法规,禁止使用平台从事违法犯罪活动。

3) 用户使用平台时,一律通过安装在相应集群上的作业管理系统提交作业,进行计算和获取结果,不可绕过作业管理系统使用平台资源。

4) 不得擅自转让、出借账号,将口令随意告诉他人;也不得借用他人账号使用计算资源。

5) 不得窃取他人账号或口令,非法入侵他人账号,阅读他人文件,窃取他人计算和研究成果或受法律保护的资源。

6) 用户不得利用平台制造和传播计算机病毒;禁止破坏数据、破坏程序或其他恶意行为。

7) 用户应高度重视作业和结果的安全,及时收取计算结果,防止数据损坏、丢失或泄露。

8) 增强自我保护意识,及时反映违反用户行为规范的人和事。平台有权停止账号的使用权限,并对违规用户做出相应的处罚。

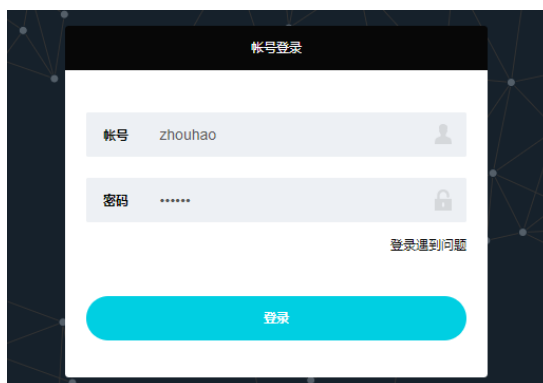
9) 用户有义务及时反馈平台存在的问题,有义务积极配合平台进行的统计、测试等各项工作。

3 使用方式

3.1 账号绑定

在登陆前，请先用手机在软件商店中下载 FreeOTP 软件（此软件是一个软令牌认证，用于获取动态码，软件无安全隐患，大小在 2M 左右。以后每次登陆平台都会用到，请不要删除）。首次登录必须使用 Web 浏览器登陆进行账号绑定操作，常用浏览器即可，具体操作如下：

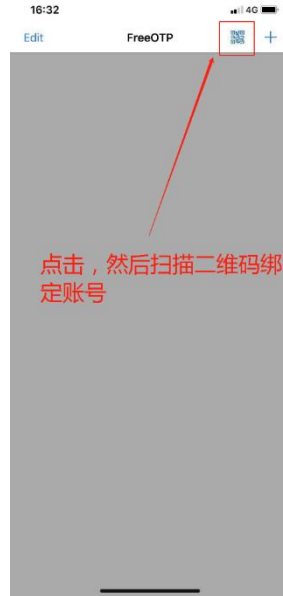
1) 打开浏览器，在地址栏输入：<https://sc.nuaa.edu.cn/> 或 <https://211.65.101.76/shterm/login>，输入平台管理员为您开设的账号密码。



2) 点击登录，页面中会出现如下图的二维码。此二维码只有在首次登陆绑定账号时出现，请将此二维码截图或拍照保存，可分享给同组用户。



3) 用手机下载的 FreeOTP 软件扫描此二维码。



4) 扫描二维码后出现如下界面。



5) 扫码后请回到 Web 页面，点击图片中的完成绑定。



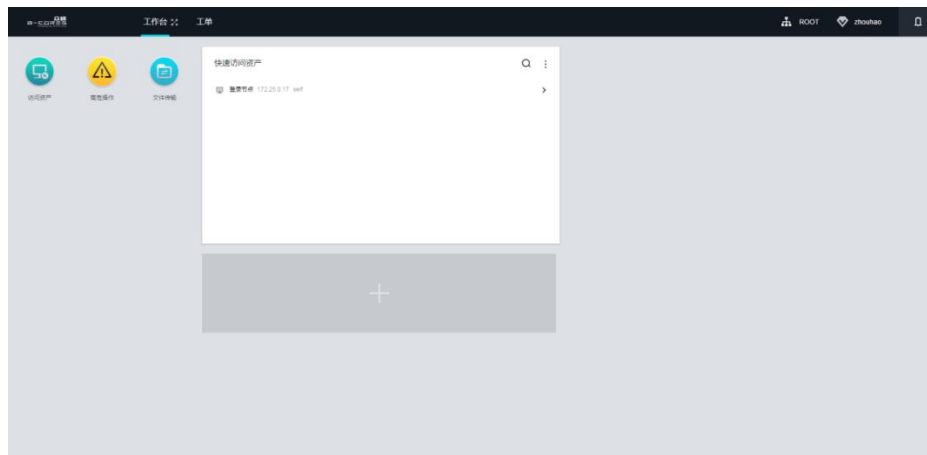
6) 点击完成绑定后，会出现如下界面。



7) 此时请将手机 FreeOTP 中的当前 6 位数字输入到两步认证密码栏中 (6 位数的验证码变动刷新频率约为 30s，所以请及时输入)，然后点击提交。



8) 点击提交后，出现如下界面，表示账号已绑定成功。



3.2 远程登陆

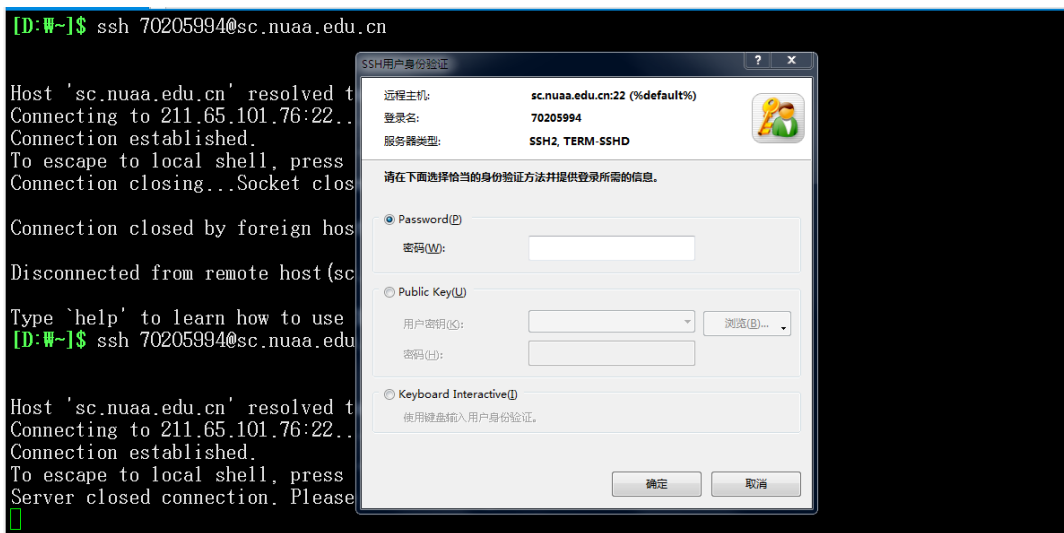
完成绑定后即可使用远程连接工具，以 ssh 会话方式远程连接。

3.2.1 准备工作

登录之前请先打开手机上的 FreeOPT，并点击对应的动态码条目生成动态码，因动态码刷新时间较短，在登录过程中如遇动态码刷新，请在输入密码过程中及时使用最新显示的动态码。

3.2.2 Windows 系统

以 Xshell 远程登录工具为例，命令：`ssh username@sc.nuaa.edu.cn`，回车。密码格式：密码+空格+动态验证码。如图所示：



如遇下述情况需要保留主机密钥，选择“接受并保存”。如图所示：



如图所示表示登录成功。

```
[D:W-]$ ssh 70205994@sc.nuaa.edu.cn

Host 'sc.nuaa.edu.cn' resolved to 211.65.101.76.
Connecting to 211.65.101.76:22...
Connection established.
To escape to local shell, press 'Ctrl+Alt+]'

*****
* 齐治交互终端 v3.3.8 *
* 版权所有 2006-2019 浙江齐治科技股份有限公司。保留一切权利。 *
*****

欢迎使用南京航空航天大学高性能计算集群

Connecting to self@登录节点(10.12.5.12) ...
Last login: Sat Jun 27 12:23:04 2020 from 10.12.5.16
[70205994@login ~]$
```

3.2.3 类 Unix 系统

注意：因不同发行版（包括 Mac/CentOS/Ubuntu 等）命令行的差异，下述的-p 参数可能是-P，或其他可能的参数，请自行确定后再次尝试。

Mac/CentOS/Ubuntu 等系统，命令：`ssh username@sc.nuaa.edu.cn`，回车。密码格式：密码+空格+动态验证码。如图所示：

```
[root@localhost ~]# ssh 70205994@sc.nuaa.edu.cn
The authenticity of host 'sc.nuaa.edu.cn (211.65.101.76)' can't be established.
RSA key fingerprint is SHA256:4bZmv609cJSufom80bysdN+wr+YRv2x5BNUBfyNjcAA.
RSA key fingerprint is MD5:30:bb:b5:f1:2c:82:32:1f:b6:69:13:38:28:2d:bb:3a.
Are you sure you want to continue connecting (yes/no) yes
Warning: Permanently added 'sc.nuaa.edu.cn,211.65.101.76' (RSA) to the list of known hosts.
Password authentication
Password:
*****
* 齐治交互终端 v3.3.8 *
* 版权所有 2006-2019 浙江齐治科技股份有限公司。保留一切权利。 *
*****

欢迎使用南京航空航天大学高性能计算集群

WARNING: Terminal type 'xterm-256color' is not supported, 'xterm' will be used as default.

Connecting to self@登录节点(10.12.5.12) ...
Last login: Sat Jun 27 12:31:45 2020 from 10.12.5.16
[70205994@login ~]$
```

3.3 文件的上传和下载

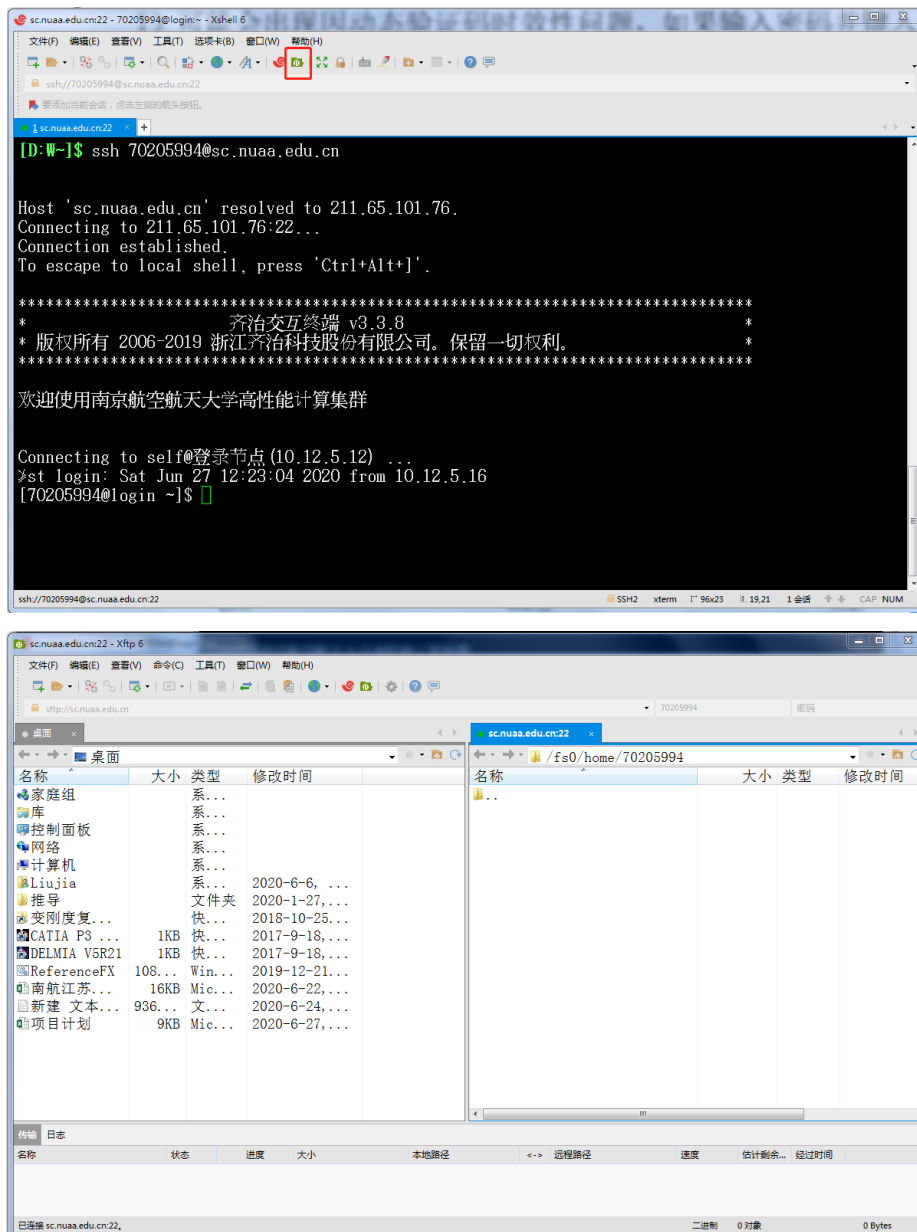
3.3.1 Windows 系统

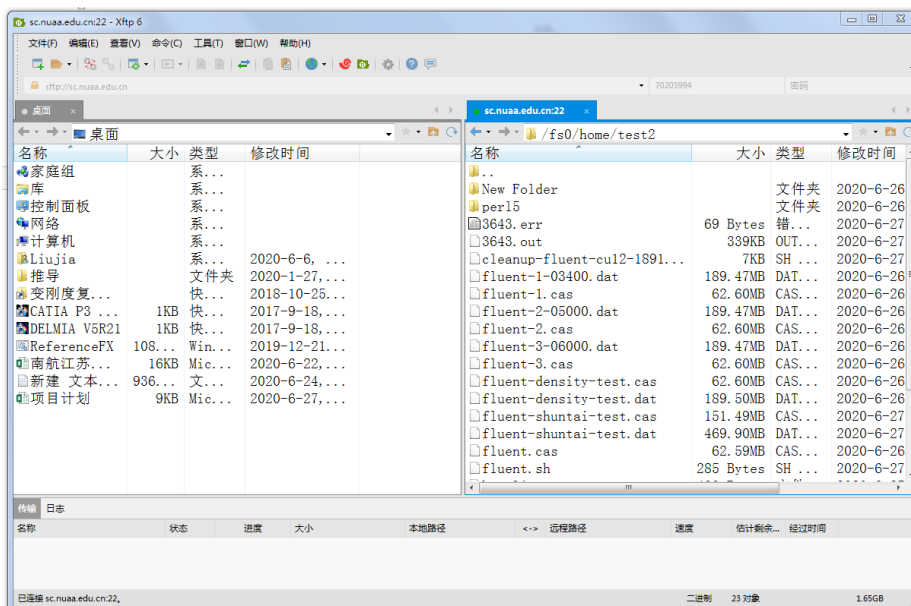
需要参照 3.2.2 节的步骤通过 Xshell 远程登录软件使用 ssh 登录集群的登录节点。ssh 登录成功后点击 Xshell 工具栏中的“新建文件传输”图标，在提示窗口输入密码（密码+空格+动态验证码）。在 Xftp 登录成功后即

可用拖拽的方式从左侧本地电脑窗口将所需要上传的文件拖拽至右侧代表集群空间的窗口从而实现文件的上传。如需从集群空间下载文件，则请反向操作。如图所示：

注意：

- 1) 可能会出现因动态验证码时效性问题，如果输入密码并键入回车键后依然没有能够登录，请再次输入密码，如此尝试 3-5 次。
- 2) 如果出现大文件上传失败请联系工程师以协助定位并解决问题。





3.3.2 类 Unix 系统

针对 Mac/CentOS/Ubuntu 等发行版的 Linux 系统，如果您已安装了对应系统的 Xshell 软件则参照 3.3.1 节中的步骤。如果没有，则需要使用命令行的方式进行文件传输。命令为：

sftp username/sc.nuaa.edu.cn/self@10.12.5.12 回车。密码格式：
密码+空格+动态验证码。如图所示：

```

[70205994@login ~]$ sftp 70205994/sc.nuaa.edu.cn/self@10.12.5.12
70205994/sc.nuaa.edu.cn/self@10.12.5.12's password:
Connected to 10.12.5.12.
sftp>
sftp> cd ..
sftp> ls
70205994      frank      haidi      hyshi      jzb        pengxh     shuaizg    shuaizhigTHU
test1       test2     test4     yangguang  zh         zhouhao
sftp>

```

Sftp 登录后的命令行中可以使用部分当前 Linux 系统所提供的部分命令（如 ls/cd 等命令），通过输入问号 (?) 获取 Sftp 命令行界面所支持的所有命令。如图所示：

```
File Edit View Search Terminal Tabs Help
root@systemtap--
sftp> ?
Available commands:
bye                               Quit sftp
cd path                           Change remote directory to 'path'
chgrp grp path                    Change group of file 'path' to 'grp'
chmod mode path                  Change permissions of file 'path' to 'mode'
chown own path                   Change owner of file 'path' to 'own'
df [-hi] [path]                  Display statistics for current directory or
                                  filesystem containing 'path'
exit                               Quit sftp
get [-afPpRr] remote [local]     Download file
reget [-fPpRr] remote [local]    Resume download file
reput [-fPpRr] [local] remote    Resume upload file
help                               Display this help text
lcd path                          Change local directory to 'path'
lls [ls-options] [path]          Display local directory listing
lmkdir path                       Create local directory
ln [-s] oldpath newpath          Link remote file (-s for symlink)
lpwd                              Print local working directory
ls [-lafhlNrSt] [path]          Display remote directory listing
lumask umask                      Set local umask to 'umask'
mkdir path                        Create remote directory
progress                          Toggle display of progress meter
```

从本地电脑上传文件到集群空间：

上传单个文件： sftp> put /opt/testfile

上传文件夹： sftp> put -r /opt/testdir

从集群空间下载文件到本地电脑：

下载单个文件： sftp> get /data/home/zhouhao/testfile

下载文件夹： sftp> get -r /data/home/zhouhao/testdir

3.4 Slurm 作业调度系统使用说明

集群使用 Slurm 作业调度系统管理所有计算作业，该系统接受用户的作业请求，并将作业合理的分配到合适的节点上运行，因此所有用户均应通过作业调度系统提交计算作业，不可直接在登陆节点或其他任何节点上直接运行。用户使用 sbatch 命令向作业调度系统提交作业，sbatch 可用参数非常繁多，可对作业进行非常细致的控制，这里简要介绍常用参数和方法。

3.4.1 查看当前可用资源

提交作业应遵循以下步骤：

1) 首先参照“2.1 计算资源”中的表格了解当前集群的队列配置，以选择合适的队列。

2) 使用 `si` 命令可以获取当前空闲的队列和节点信息，以了解当前有哪些资源是空闲的。

3.4.2 编写作业脚本

按照用户的使用模式，作业可以分为三种类型：交互作业、批处理作业和分配模式作业。平台目前全部使用批处理作业，如需使用交互作业和分配模式，请联系管理员。

批处理作业是指用户编写作业脚本，指定资源需求约束，然后作为作业提交。提交作业后，作业在系统中等待调度，在资源需求被满足时，作业被分配到合适的计算节点。因此正确的作业脚本是成功运行作业的前提条件，附录 2 提供了部分常用的作业脚本供用户参考，用户可以复制修改。

3.4.3 提交作业

作业脚本正确编写后，使用 `sbatch` 命令提交。具体命令为：

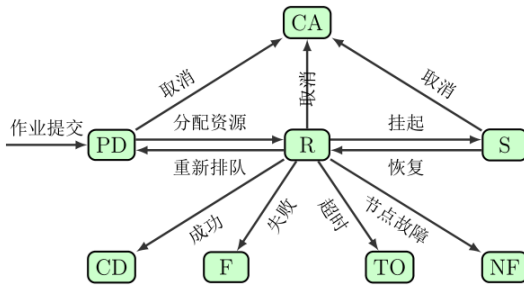
```
sbatch job.slurm(job.slurm 为作业脚本名称)
```

批处理作业脚本是一个文本文件。脚本文件的第一行应以“`#!`”开头，指定脚本文件的解释程序。在脚本中，如果一行以“`#SBATCH`”开头，则该行中的其余部分被当作命令行选项，被 `sbatch` 处理。

3.4.4 查看作业

命令：`sq`

作业在提交到系统中后，将经历一系列的状态，如图所示：



作业状态说明

- R: 作业正在运行
- Priority: 作业优先级不够高
- Resources: 当前可用资源不能满足作业需求
- PartitionNodeLimit: 作业请求的节点数超过分区的作业节点数限制
- AssociationJobLimit: 关联的作业限制已满
- AssociationResourceLimit: 关联的资源限制已满
- AssociationTimeLimit: 关联的运行时间限制已满
- ReqNodeNotAvail: 作业请求的节点不可用

注意 sq 输出中状态为 CG 的作业是具有 COMPLETING 标志的作业，这些作业已经运行结束，只是在等待确认其任务及相关进程的退出。不需要再用 scancel 取消这些作业，scancel 也不能去除其 COMPLETING 标志。

3.4.5 调整作业

其他有关作业参数修改的命令如下：

```
scontrol update jobid=1252 partition=bcores40 改变排队作业的队列
```

```
scontrol update jobid=295375 name=myjob 改变排队作业
```

的名字

`scontrol show job JOBID` 查看作业详细信息，如：提交时间，运行时间，作业目录等

3.4.6 取消作业

用户可以使用 `scancel` 命令取消自己的作业或作业步，具体用法：

`scancel JOBID` 取消作业号为 `JOBID` 的作业

`scancel -u test` 取消用户 `test` 的所有作业

`scancel -p bcores40 -t pd` 取消队列 `bcores40` 中排队状态的所有作业

3.5 加载环境变量

本集群使用 Environment Modules 以模块的形式对环境变量进行管理。在高性能计算集群系统中，安装有多种软件及其不同版本，它们需要设置不同的环境变量，Environment Module 可以将这些环境变量做成模块文件 (modulefile)。模块可以被加载 (load)、卸载 (unload)、切换 (switch) 等，这些操作会改变相应的环境变量设置，让用户方便的在不同环境之间切换。相比将环境变量设置写入 `/etc/profile`、`~/.bashrc` 或 `~/.bash_profile`，Environment Module 操作只影响当前用户的当前登录环境；相比直接 `source` 文件，Environment Module 的操作可以撤销 (卸载)。普通用户还可以自己编写 module，具有很好的定制性。用户不仅可以在命令行中 Environment Modules，也能在作业提交脚本中使用，对编译和计算环境都能够很好的控制。

3.5.1 module 常用命令

- 显示 module 帮助: module help
- 显示所有可用模块: module avail
- 显示已加载模块: module list
- 加载模块: module load MODULEFILE
- 卸载模块: module unload MODULEFILE
- 切换模块: module switch OLD_MODULEFILE NEW_MODULEFILE (等价于: module unload OLD_MODULEFILE; module load NEW_MODULEFILE)
- 卸载所有已加载模块: module purge
- 显示模块说明: module whatis MODULEFILE
- 显示模块内容: module display MODULEFILE

3.5.2 模块命名规则

软件名/版本-编译器-版本-库-版本, 如下示例:

```
root@model7 ~# module avail
查看所有模块
----- /data/module/
blas/6.14.1      cmake/3.27.0      gaussian/g09      intel/2017u5      lammps/31Mar17     matlab/2017a      openmpi/1.10.1     vasp/5.4.4
amcanda3/4.7.12  comsol/5.4         gcc/7.5.0         intel/2019u1      lammps/7Aug19     apich/3.1.4-gcc7.5.0  openmpi/1.8.6
root@model7 ~#
root@model7 ~# module list
查看当前已加载模块
No Modulefiles Currently Loaded.
root@model7 ~#
root@model7 ~# module load intel/2017u5
加载intel2017u5模块
root@model7 ~#
root@model7 ~# module list
查看当前已加载模块
Currently Loaded Modulefiles:
  1) /intel/2017u5
root@model7 ~#
root@model7 ~# module unload intel/2017u5
卸载已加载模块
root@model7 ~#
root@model7 ~# module list
模块已被卸载
No Modulefiles Currently Loaded.
root@model7 ~#
root@model7 ~# module load intel/2019u1
如需加载另一版本如intel2019u1
root@model7 ~#
root@model7 ~# module list
查看当前已加载模块
Currently Loaded Modulefiles:
  1) /intel/2019u1
root@model7 ~#
root@model7 ~#
```

附录 1 Linux 常用命令

命令行界面登陆成功后，即可进行操作，下面列举了常用的 Linux 系统命令：

1. 查看目录下有哪些文件：ls
2. 查看文件属性：ls -l
3. 切换目录：cd 目录名称，如 cd /data/software
4. 查看文件：cat 文件名，如 cat /data/home/zhouhao/testfile
5. 查看文件：more 文件名，如 more /data/home/zhouhao/testfile，
空格键向下翻页
6. 删除文件：rm 文件名，如 rm /data/home/zhouhao/testfile
7. 删除文件夹：rm 文件夹名，如 rm -r /data/home/zhouhao/testdir
8. 编辑文件：vim 命令，vim 常用有两种模式：
 - 1) 阅读模式，用 vim 打开一个文件后就进入到阅读模式，在阅读模式下可以通过上下键调整页面阅读所打开的文件内容。
 - 2) 编辑模式，需要输入特定的键才能对文件内容进行编辑。
 - 3) 阅读模式——>编辑模式：
 - a 键：当前光标所在处的后一个字符处编辑内容
 - i 键：当前光标所在处编辑内容
 - o 键：当前光标所在行的下一行编辑内容
 - O 键：当前光标所在行的上一行编辑内容
 - 4) 编辑模式——>阅读模式：Esc 键
 - 5) 退出 vim 编辑界面，需要在阅读模式下先输入冒号，冒号后面可输

入以下字符

w 保存不退出

wq 保存退出

wq! 保存并强制退出

q 不保存退出

q! 不保存强制退出

附录 2 常用脚本

常用参数选项如下：

-J 作业名称
-p 队列名称
-N 节点数量
-n 核数
--error 作业报错输出文件
--output 作业日志输出文件

1 vasp 脚本试列

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test          ###提交作业的名字，可自己更改作业名###
#SBATCH -p bcores40     ###提交作业的队列，可自己更改队列###
#SBATCH -N 1            ###提交作业的节点数，根据节点的核数改###
#SBATCH -n 40           ###提交作业的核数，可自己更改提交核数###
#SBATCH --error=%J.err  ###作业报错输出文件###
#SBATCH --output=%J.out ###作业运行输出文件###
module load intel/2017u5
module load vasp/5.4.4
mpirun vasp_std        ###调用的 5.4.4 版本的 vasp，根据需求更改版本路径 ###
scontrol show job $SLURM_JOBID
```

2 lammps 脚本

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test          ###提交作业的名字，可自己更改作业名###
#SBATCH -p bcores40     ###提交作业的队列，可自己更改队列###
#SBATCH -N 2            ###提交作业的节点数，根据节点的核数改###
#SBATCH -n 80           ###提交作业的核数，可自己更改提交核数###
#SBATCH --error=%J.err  ###作业报错输出文件###
#SBATCH --output=%J.out ###作业运行输出文件###
module load intel/2017u5
module load lammps/7Aug19
mpirun -np 80 lmp_mpi < in.cutting  ###in.cutting 为算例输入文件，根据
实际情况改###
scontrol show job $SLURM_JOBID
```

3 Gaussian 脚本

高斯的版本比较多，目前只装了高斯 09 D 的版本，后续根据用户需求

完善版本

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test                ###提交作业的名字，可自己更改作业名###
#SBATCH -p bcores40           ###提交作业的队列，可自己更改队列###
#SBATCH -N 1                  ###提交作业的节点数，根据节点的核数改###
#SBATCH -n 40                 ###提交作业的核数，可自己更改提交核数###
#SBATCH --error=%J.err        ###作业报错输出文件###
#SBATCH --output=%J.out       ###作业运行输出文件###
G16ROOT=/data/home/sunfeihit/soft/g09_D01_em64t/g09
GAUSS_EXEDIR=$G16ROOT
GAUSS_SCRDIR=/data/home/sunfeihit/soft/g09_D01_em64t/scratch
LD_LIBRARY_PATH=$G16ROOT/:$LD_LIBRARY_PATH PATH=$G16ROOT/:$PATH
export G16ROOT GAUSS_EXEDIR GAUSS_SCRDIR LD_LIBRARY_PATH PATH
g09 1.gjf                      ###1.gjf 为算例名称，根据实际算例改####
scontrol show job $SLURM_JOBID
```

4 ms 脚本

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J testx              ###提交作业的名字，可自己更改作业名###
#SBATCH -p bcores40-1        ###提交作业的队列，可自己更改队列###
#SBATCH -N 1                  ###提交作业的节点数，根据节点的核数改###
#SBATCH -n 40                 ###提交作业的核数，可自己更改提交核数###
###
#SBATCH --error=%J.err        ###作业报错输出文件###
#SBATCH --output=%J.out       ###作业运行输出文件###
#/data/software/MaterialsStudio/ms2017/LicensePack/etc/lp_profile
export MS_INSTALL_ROOT=/data/software/MaterialsStudio/ms2018
export
PATH=$PATH:$MS_INSTALL_ROOT/MaterialsStudio18.1/etc/DMol3/bin:$MS_INSTALL_R
OOT/MaterialsStudio18.1/bin
export
LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$MS_INSTALL_ROOT/MaterialsStudio18.1/lib:$
MS_INSTALL_ROOT/BIOVIA_LicensePack/linux/lib
#export DMol3__TMP=/data/tmpdata
RunDMol3.sh -np 40 Li2S8
scontrol show job $SLURM_JOBID
```

5 fluent 脚本

```
#!/bin/bash
```

```

#SBATCH -J test1          ###提交作业的名字,可自己更改作业名###
#SBATCH -p bcores40      ###提交作业的队列,可自己更改队列###
#SBATCH -N 1             ###提交作业的节点数,根据节点的核数改
###
#SBATCH -n 40            ###提交作业的核数,可自己更改提交核数
###
#SBATCH --error=%J.err   ###作业报错输出文件###
#SBATCH --output=%J.out  ###作业运行输出文件###
srun -N 1 hostname -s > hostlist    ###将主机名写到 hostlist 文件,给
fluent 调用
/data/software/ansys18.0/v180/fluent/bin/fluent -ssh -g 3ddp -t40 -
cnf=hostlist -mpi=intel -i fluent.jou    #####fluent.jou
需要单独编写#####
scontrol show job $SLURM_JOBID

```

fluent 分瞬态和稳态

稳态的 fluent.jou 写法

```

/file/read-case "C-10.cas"    ###算例输入文件###
/file/read-data "C-10.dat"    ###算例输入文件###
/solve/iterate 1000          ###算例跑多少步,根据实际情况改步数###
exit
yes

```

瞬态的 fluent.jou 写法

```

/file/read-case "C-10.cas"    ###算例输入文件###
/file/read-data "C-10.dat"    ###算例输入文件###
/file/auto-save/data-frequency 500  ###算例 500 步自动保存一次,根据实际
情况改保存步数###
/solve/set/time-step 0.0001    ###算例步长为 0.0001,根据实际情况
改###
/solve/dual-time-iterate 50000 80  ###算例总共跑 50000 步,每步迭代 80
次###
exit
yes

```

6 lsdyna

```

#!/bin/bash
#SBATCH -J lsdyna-test
#SBATCH -p bcores40
#SBATCH -N 1
#SBATCH -n 24
#SBATCH --error=%J.err
#SBATCH --output=%J.out
unset SLURM_GTIDS

```



```

ulimit -s
source /data/software/intel2017-u5/bin/compilervars.sh intel64
PATH=$PATH:/data/software/ansys/17.2/v172/ansys/bin
lsdyna -np 24 i=ship_impact_center_fender_2m_s.k -lsdynampp memory=1000m
memory2=400m

```

7 molpro

```

#!/bin/bash
#SBATCH -J huxixi-test      ###提交作业的名字，可自己更改作业名###
#SBATCH -p bcores64      ###提交作业的队列，可根据当前各队列排队情况更
改队列###
#SBATCH -N 1              ###提交作业的节点数，根据节点的核数改###
#SBATCH -n 64             ###提交作业的核数，可自己更改提交核数###
#SBATCH --error=%J.err    ###作业报错输出文件###
#SBATCH --output=%J.out   ###作业运行输出文件###
module load intel/2017u5
module load molpro/2015
mpirun -np 64 molpro p1-1.com
scontrol show job $SLURM_JOBID

```