



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

LSF作业调度系统和超 算队列介绍

中国科学技术大学·超级计算中心

张运动

2019/3/14

常见问题在线查询系统



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

SCC_FAQ v1.2 中国科大超级计算中心用户常见问题在线查询系统

TC4600超算系统

基本信息

1. 本系统配置
2. 使用资源限制
3. 作业队列设置
4. module管理环境变量设置(必看内容)

作业提交计算方法

1. 作业任务计算的操作步骤
2. LSF常用命令说明
3. 提交作业命令bsub的常用参数介绍
4. 作业常见状态介绍
5. 自定义bjobs命令输出格式与内容
6. 作业排队的常见原因说明
7. 对作业参数进行调整
8. 作业异常退出原因

常用计算软件使用说明

1. gaussian作业提交说明
2. vasp作业提交说明
3. Castep/DMol3作业提交说明
4. Fluent作业提交说明
5. Matlab作业提交说明
6. OpenFoam作业提交说明

CentOS Linux系统常用命令介绍

1. 获取操作命令的使用帮助
2. 查看目录下有哪些文件及文件内容的命令ls、cat、more等
3. 新建、移动、删除、拷贝文件操作命令touch、mkdir、rm、cp等
4. 编辑文件的常用命令vi
5. 压缩与解压缩文件常用命令gzip、tar等
6. 查找文件常用命令find等

作业调度系统的作用



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 计算任务按照提交先后顺序进入队列排队
- 监控节点状态，分配节点给作业使用，并完成计算
- 制定限制规则，保障长期使用的合理性、公平性等
- 记帐功能



作业调度系统的使用步骤



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 1.准备输入文件：
 - 通过sftp等方式将已准备好的计算任务文件上传到超算系统上，或可直接在超算系统上使用vim等编写输入文件。注意Windows系统上传文件时请使用二进制文件格式或在上传之后使用dos2unix命令对文件进行格式转换。
- 2.提交计算任务：
 - 使用bsub命令将作业提交到LSF作业调度系统上。若提交成功，系统会显示提示信息，已提交的任务将分配得到一个作业号，并进入队列排队。
 - 利用bjobs命令可查看已提交的作业。若提交不成功，请根据系统提示执行后续操作。

作业调度系统的使用步骤



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

• 3.调整队列中的作业参数:

- 尚在队列中排队的作业可以调整提交参数，已经开始运行的作业无法再调整提交参数，使用命令为**bmod**。比如，更改作业所在队列、计算所需进程数、输出结果文件名、调整用户自己排队中作业的前后顺序等。

• 4.调度资源与分配运行:

- LSF作业调度系统会实时的监测各个计算节点的空闲情况及状态，判断是否满足队列中排队作业的计算使用需求。若满足需求，则会为作业分配计算节点进行计算。



作业调度系统的使用步骤



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 5.作业开始计算：
 - LSF监测并收集正在执行的作业状态信息及输出信息，并将输出结果信息生成在作业提交时的文件目录下或作业提交时指定的文件中。
- 6.作业查询与终止：
 - 可通过查看作业默认或指定的输出文件或使用**bpeek**命令进行输出状态查询。若程序计算异常，可使用**bkill**命令终止删除作业。
- 7.获取计算结果：
 - 可使用**more**、**cat**等Linux系统命令在系统上直接查看结果文件。或将文件通过**sftp**等方式下载到个人电脑上后期处理分析。

作业调度系统的使用步骤



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 以上，4、5步骤将由LSF作业调度系统自动完成，无需用户参与。
- 及时观察作业提交、运行后的执行情况，异常作业请及时杀掉。
- 严格禁止跳过作业调度系统提交作业，否则受罚。
- 简单三步走：准备输入文件、提交计算、处理计算结果

前期准备：了解系统配置



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

按节点配置不同设置不同队列，根据需要选择使用
配置参数越高计算越快

- node1-node300:

- 节点配置：24核2.5GHz CPU、64GB内存、56Gbps IB网络
- 使用队列：testv3、smallib、mediumib、独占队列、ahedu、qsce，适合小规模并行作业

- node301-node450:

- 节点配置：28核2.4GHz CPU、128GB内存、100Gbps OPA网络
- 使用队列：smallopa、longopa、largeopa，适合大规模并行作业

前期准备：了解系统配置



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

按节点配置不同设置不同队列，根据需要选择使用

- node451-node490:
 - 节点配置：4核**3.5GHz** CPU、32GB内存、100Gbps IB网络
 - 使用队列：e3v5，适合CPU高主频小作业
- node491-node494:
 - 节点配置：144核2.2GHz CPU、**1TB内存**、100Gbps OPA网络
 - 使用队列：fat144，适合大内存需求作业
- K801-k804:
 - 节点配置：28核2.4GHz CPU、**2块k80 GPU**、128GB内存、100Gbps OPA网络
 - 使用队列：k80，GPU需求作业

前期准备：了解系统配置



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

按节点配置不同设置不同队列，根据需要选择使用

- node500:
 - 节点配置：36核2.3GHz CPU、8块 V100 GPU、256GB内存、100Gbps IB网络
 - 使用队列：v100，GPU需求作业，深度学习等
- dgx1:
 - 节点配置：80核2.0GHz CPU、8块 V100 GPU、512GB内存、100Gbps IB网络
 - 使用队列：dgx1，GPU需求作业，深度学习等
- knl1-knl8:
 - 节点配置：64核1.3GHz CPU、96GB内存、100Gbps OPA网络
 - 使用队列：knl，适合低主频多核作业，空闲较多

LSF常用命令介绍



- **bsub**: 提交作业
- **bhosts**: 显示指定节点状态，默认显示全部节点状态
- **bjobs**: 显示用户作业信息
- **bkill**: 杀掉指定的作业
- **bmod**: 更改已提交作业的参数
- **bpeek**: 显示处于运行时作业的标准输出和标准错误输出信息
- **bqueues**: 显示作业队列信息
- **lsload**: 显示节点当前负载

查看节点信息bhosts



```
tcadmin: ~# bhosts node306 node381 node382
HOST_NAME      STATUS      JL/U      MAX      NJOBS      RUN      SSUSP      USUSP      RSV
node306        closed      -         28       28         0        0         0         28
node381        closed      -         28       28         20       0         0         8
node382        ok          -         28       0          0        0         0         0
```

- STATUS: 节点状态
 - ok节点可用，可接受新的作业
 - closed: 结点已满、被预留、被关闭
 - unavail、unreach: 节点故障，请联系管理员处理
- RSV: 被预留的节点核数

查看节点负载lsload



```
tcadmin: ~# lsload node165 node432 node382
HOST_NAME      status  r15s   r1m    r15m   ut     pg    ls     it     tmp     swp     mem
node382        ok      0.0    0.1    0.7    0%     0.0   0     1162   196G   3.7G   124G
node432        ok      28.1   28.3   28.1   100%    0.0   0     2e+5   196G   3.9G   114G
node165        lockU   24.0   24.1   21.7   100%    0.0   0     2e+5   244G   4G     45.7G
```

• status:

- ok, 节点可用状态
- luckup, 排他型作业, 作业提交时使用了-x参数占用
- unavail、-ok, 节点异常状态, 请联系管理员处理
- r15s、r1m、r15m: 15秒、1分钟、15分钟CPU使用率的负载平均值, 若大于节点核心数较多则异常。

队列设置



bqueues -l 队列名，查看详细配置参数

- 免费队列：**testv3**、**testv4**，仅供测试作业是否可正常计算，正常计算的程序需提交到其他队列开始正式计算。
- 付费排队队列：**smallib**、**mediumib**、**smallopa**、**longopa**、**largeopa**、**e3v5**、**fat144**、**k80**、**kn1**、**v100**、**dgx1**，队列按实际使用机时进行统计收费，作业排队期间不计费。
- 独占队列：**bsanders**、**chenjiej**、**chunzhao**、**ckduan**、**fhuang**、**fucf**、**fuyao**、**helx**、**hscai**、**jnac**、**kmh**、**lixx**等，各课题组使用自己的，每半年重新申请一次，不超过总节点数的1/3。
- 安徽省网用户队列：**ahedu**，仅限安徽省教育与科研网学校师生使用。年度免费机时有限。
- 中科院超算网格用户队列：**qsce**，网格用户使用免费，网格系统上也可免费使用其他分中心节点：<http://cscgrid.cas.cn/yhfw/ksjs/>

队列参数介绍bqueues



```
tcadmin: ~# bqueues testv3 smallib longopa e3v5
QUEUE_NAME      PRIO STATUS      MAX JL/U JL/P JL/H NJOBS  PEND  RUN  SUSP
testv3           58  Open:Active   72  48  -   -    0     0    0    0
smallib          57  Open:Active  1224 480  -   -   2420  1484  936  0
longopa          59  Open:Active  2352 952  -   -   7222  5366  1614 0
e3v5             58  Open:Active   160 160  -   -    272   112   160  0
```

- QUEUE_NAME:队列名
- STATUS: 状态
 - Open: 队列开放，可以接受提交新作业
 - Closed: 队列关闭，不接受提交新作业
 - Active: 队列已激活，队列中作业可以分配运行
 - Inact: 队列未激活，队列中作业不会被分配运行

队列参数介绍bqueues



```
tcadmin: ~# bqueues testv3 smallib longopa e3v5
```

QUEUE_NAME	PRIO	STATUS	MAX	JL/U	JL/P	JL/H	NJOBS	PEND	RUN	SUSP
testv3	58	Open:Active	72	48	-	-	0	0	0	0
smallib	57	Open:Active	1224	480	-	-	2420	1484	936	0
longopa	59	Open:Active	2352	952	-	-	7222	5366	1614	0
e3v5	58	Open:Active	160	160	-	-	272	112	160	0

- MAX: 本队列最大可用作业数（CPU核数）
- JL/U: 单个用户同时可以使用的CPU核数限制
- JL/P、JL/H: - 为没有做限制
- NJOBS: 队列中已有的作业总数
- PEND: 队列中排队的作业总数
- RUN: 队列中运行中的作业总数
- SUSP: 队列中被挂起的作业总数

队列详细参数bqueues -l



```
tcadmin: ~# bqueues -l smallib
```

```
QUEUE: smallib
```

```
-- Maximum number of job slots that each user can use in this queue is 480 . This is the default queue.
```

```
PARAMETERS/STATISTICS
```

PRIO	NICE	STATUS	MAX	JL/U	JL/P	JL/H	NJOBS	PEND	RUN	SSUSP	USUSP	RSV
57	20	Open:Active	1224	480	-	-	2420	1460	960	0	0	0

```
Interval for a host to accept two jobs is 0 seconds
```

```
RUNLIMIT
```

```
43200.0 min
```

```
TASKLIMIT
```

```
12 12 72
```

```
SCHEDULING PARAMETERS
```

	r15s	r1m	r15m	ut	pg	io	ls	it	tmp	swp	mem
loadSched	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
loadStop	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

	adapter_windows	poe	nrt_windows
loadSched	-	-	-
loadStop	-	-	-

```
SCHEDULING POLICIES: EXCLUSIVE
```

```
USERS: scc_group/ paiduigroup/
```

```
HOSTS: paiduinodes/
```

```
POST_EXEC: /home2/user_input/collectViaPOST_EXEC/script/collectAll.sh
```

```
RES_REQ: span[ptile=24]
```

队列限制参数 bqueues -l



- 默认队列：This is the default queue，提交作业时若不指定-q queue name选项，则作业会自动被分配到此队列。
- 运行时间限制：RUNLIMIT，从开始运行到结束运行的最大时间段。自然时间，与作业核数无关。
- 作业核数限制：TASKLIMIT，单个作业的核数限制，第一参数为最小值，第二参数为默认值，第三参数为最大值。提交作业时-n选项。
- 用户限制：USERS，可以使用该队列的用户组
- 节点限制：HOSTS，该队列使用的节点组
- 资源原则：RES_REQ，默认为按节点核数分配

队列作业个数限制



- 仅供参考，会根据实际使用情况随时调整。若遇到限制，在排队作业的排队原因说明中可以看到。

Begin	Limit	
PER_QUEUE	PER_USER	JOBS
kn1	all	5
k80	all	2
e3v5	all	6
fat144	all	1
largeopa	paidigroup	1
longopa	paidigroup	1
smallopa	paidigroup	1
mediumib	paidigroup	4
smallib	paidigroup	8
ahedu	out_group	4
qsce	scegroup	2
testv3	all	1
testv4	all	1
End	Limit	

提交作业命令 bsub



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- `bsub`，详细命令参数可用命令 `man bsub` 查看。
- 作业提交首先要确认预计算的程序有可执行权限：

```
$ ls -l hello.sh
```

```
-rwxr--r-- 1 hmlj nic 24 11月 5 15:52 hello.sh
```

以上举例列出的红色文件属性为用户权限，蓝色为组权限，黑色为其他用户权限，其中 `r` 为可以查看文件内容的读的权限，`w` 为可以编辑文件内容的写的权限，`x` 为可以对文件进行执行操作的可执行权限。

使用 `chmod` 命令修改权限

提交作业命令 bsub



- 作业提交举例：`bsub -q mediumib -n 48 -m node33 -o %J.log -e %J.err mpijob ./example_job`

系统会提示：Jobs <818500> is submitted to queue <mediumib>.

- 说明：

- 将用户帐号当前目录下的可执行文件example_job并程序，申请使用48个CPU核，提交到mediumib队列并指定到node33节点进行排队计算。
- 作业提交成功后，系统提示分配到作业号818500。由于指定了-o %J.log -e %J.err参数，在作业运行完成后，将在提交作业的目录下生成818500.log和818500.err文件。

提交作业命令 bsub



- -q 指定作业提交的队列名。
- -n 指定作业提交申请的CPU核数
- -m 指定作业运行的节点，不建议使用。
- -o 指定作业的标准输出文件。-o参数后若指定为%J.log，则输出文件为提交作业之后的作业号日志文件。
- -e 指定作业的标准错误输出文件。
- -J 指定提交作业的作业名。
- -i 指定提交作业的输入文件
- mpijob mpi程序调用命令，后跟用户自己的执行程序或脚本
- example_job 为用户可执行程序，其后可加自己单独的参数。

其他提交方式方法



- 一次一个作业

```
bsub -q smalllib -n 24 -o %J.log -e  
%J.err g16 123.com
```

- 一次多个作业

- 一次提交同时算多个作业

```
$ cat g16-sub.sh
```

```
cd 621 && OMP_NUM_THREADS=8 g16 1.com &
```

```
cd 622 && OMP_NUM_THREADS=8 g16 2.com &
```

```
cd 623 && OMP_NUM_THREADS=8 g16 3.com &
```

```
$ bsub -q smalllib -n 24 -o %J.log -e  
%J.err ./g16-sub.sh
```

其他提交方式方法



- 一次提交顺序算多个作业

```
$ cat g16-sub.sh
```

```
g16 1.com
```

```
g16 2.com
```

```
g16 3.com
```

```
$ bsub -q smalllib -n 24 -o %J.log -e  
%J.err ./g16-sub.sh
```


其他提交方式方法



- LSF脚本设置参数提交

```
$ cat g16-sub.sh
#!/bin/sh
#BSUB -q smallib
#BSUB -o %J.log
#BSUB -e %J.err
#BSUB -n 24
g16 123.com
$ bsub < g16-sub.sh
```

需要<传递给bsub命令运行，不可直接运行或bsub ./***方式

- PBS作业调度系统

```
$ cat g16-sub.pbs
#!/bin/sh
#PBS -o job.log
#PBS -e job.err
#PBS -q smallib
#PBS -l nodes=1:ppn=24
cd $PBS_O_WORKDIR
g16 123.com
$ qsub < g16-sub.pbs
```

作业常见状态bjobs



- 作业状态：
 - PEND 作业在排队中
 - RUN 作业在运行中， `bjobs -l JOBID` 查看详细信息
 - UNKNOWN 作业处于未知状态，一般为节点故障，请联系管理员处理
 - PSUSP、USUSP、SSUSP：作业被挂起
- 可使用命令 `bjobs -l JOBID` 查看作业详细信息，例如排队原因等。 `bjobs -UF JOBID` 的显示效果比较好。

```
tcadmin: ~# bjobs 1335535 1357762
JOBID    USER    STAT  QUEUE          FROM_HOST    EXEC_HOST    JOB_NAME    SUBMIT_TIME
1335535  sunx    RUN   mediumib      tc4600v3     24*node15    ./HSE       Feb 26 23:46
                                                24*node51
                                                24*node61
                                                24*node7
1357762  lixx    PEND  lixx          tc4600v4     *sp54-2D-C  Mar 14 10:01
```

自定义作业状态查询输出



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 用户可自己定义需要输出的各项信息，节省屏幕输出，方便查看自己需要的定制化信息。

```
tcadmin: ~# export LSB_BJOBS_FORMAT="id:-2 user:- stat queue:8 job_name:- submit_time:- start_time:- run_time:-"
tcadmin: ~# bjobs 1335535
JO      USER STAT QUEUE      JOB_NAME  SUBMIT_TIME  START_TIME  RUN_TIME
13      sunx  RUN  mediumib  ./HSE Feb 26 23:46 Feb 27 16:59 1278262 second(
```

- id等为输出项，各输出项可参考man bjobs中-o参数的项目自己替换定义。
- :之后的-2、-、8等内容为定义输出对齐的格式，可自定义数字。
- 可将export的这一行内容写入~/.bashrc文件中，以便每次登录后均保持自定义设置有效。

常见作业排队原因



- 查询作业排队原因的命令：`bjobs -p JOBID`
- User has reached the per-user job slot limit of the queue
 - 作业所在队列有对用户使用CPU核数的限制，已经运行中的作业使用CPU核数已达到或接近上限限制，无法分配当前排队中的作业。当用户运行中的作业结束掉，同时又有足够的剩余限制数满足排队作业的申请条件时，排队中的第一个作业将分配运行
- Job slot limit reached : 100 hosts
 - 作业所在队列有对所有用户可使用计算节点数的总的限制（此处提示为100个计算节点）。队列中当前所有用户运行中的作业使用的节点数已达到或接近上限限制。

常见作业排队原因



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- The user has reached his/her job slot limit
 - 作业调度系统对用户可使用的CPU核数有限制。用户已经运行中的作业使用CPU核数已达到或接近上限限制。限制数可用命令"busers"查看。
- The queue has reached its job slot limit
 - 作业调度系统对此队列有可使用CPU核数的限制，该队列中当前所有用户的已经运行中的作业使用CPU核数已达到或接近上限限制。



对作业参数进行调整



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

仅排队中作业可调整参数

- 更改作业提交参数命令**bmod**
 - 参数更改后，当作业被分配运行时，计算使用的是更改后的参数或程序文件。例如队列、核数等
- 更改作业的前后顺序的命令**btotop**、**bbot**
 - 影响的仅自己作业的顺序
- 删除作业的命令**bkill**
 - 仅可删除自己的作业，**bkill 0** 命令将自己所有作业全部删除，慎重使用

对作业参数进行调整



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 挂起或恢复未完成作业的命令 **bstop**、**bresume**
 - 可将未完成的作业挂起，挂起的运行中的作业将终止计算，但作业进程并不结束。可使用命令 **bresume** 将挂起的作业恢复。
 - 另一种处理方法的命令是，挂起作业：**bkill -s STOP**，恢复作业：**bkill -s CONT**

此命令中心不建议使用，因挂起的作业仍会占用计算节点上的系统内存，可能会影响其他用户的后续计算使用，且经常恢复失败。



查看作业实时运行状态



- 可以登录计算节点后查看作业实时运行状态
- Load average 节点负载
- PID 进程号
- S 进程状态
 - R 运行
 - S 休眠
 - D 死掉, 异常杀掉
 - Z 僵尸, 异常杀掉
- %CPU 进程使用CPU
- %MEM 进程使用内存
- TIME+ 进程CPU时间
- COMMAND 运行命令

```
[sunx@tcadmin .lsbatch]$ ssh node15
top - 11:49:50 up 230 days, 4:15, 1 user, load average: 24.25, 24.16, 24.15
Tasks: 475 total, 25 running, 450 sleeping, 0 stopped, 0 zombie
%Cpu(s): 0.1 us, 0.3 sy, 99.6 ni, 0.0 id, 0.0 wa, 0.0 hi, 0.0 si, 0.0 st
KiB Mem : 65688500 total, 2883836 free, 18166292 used, 44638372 buff/cache
KiB Swap: 8191996 total, 5471768 free, 2720228 used. 45928188 avail Mem
```

PID	USER	PR	NI	VIRT	RES	SHR	S	%CPU	%MEM	TIME+	COMMAND
2690	sunx	39	19	1869164	745568	28952	R	100.0	1.1	21107:52	vasp
2698	sunx	39	19	1869172	743092	24032	R	100.0	1.1	21144:59	vasp
2703	sunx	39	19	1869168	757336	31532	R	100.0	1.2	21134:28	vasp
2705	sunx	39	19	1869168	749988	26468	R	100.0	1.1	21159:47	vasp
2709	sunx	39	19	1869172	754576	29564	R	100.0	1.1	21146:51	vasp
2691	sunx	39	19	1869168	736844	26828	R	99.7	1.1	21118:09	vasp
2692	sunx	39	19	1869168	740908	24992	R	99.7	1.1	21135:21	vasp
2693	sunx	39	19	1869172	740248	24200	R	99.7	1.1	21137:08	vasp
2694	sunx	39	19	1869156	739544	24864	R	99.7	1.1	21141:00	vasp
2695	sunx	39	19	1869168	747580	24688	R	99.7	1.1	21146:36	vasp
2696	sunx	39	19	1869164	737840	23996	R	99.7	1.1	21151:35	vasp
2697	sunx	39	19	1869168	738132	24728	R	99.7	1.1	21148:13	vasp
2699	sunx	39	19	1869168	745280	26408	R	99.7	1.1	21140:27	vasp
2700	sunx	39	19	1869168	739324	28464	R	99.7	1.1	21144:25	vasp
2704	sunx	39	19	1869168	751656	27032	R	99.7	1.1	21140:19	vasp
2707	sunx	39	19	1869168	756024	34432	R	99.7	1.2	21146:08	vasp
2708	sunx	39	19	1869164	752684	31000	R	99.7	1.1	21158:16	vasp
2710	sunx	39	19	1869164	758712	36668	R	99.7	1.2	21149:12	vasp
2712	sunx	39	19	1869172	752576	32944	R	99.7	1.1	21140:11	vasp
2711	sunx	39	19	1869168	745128	26092	R	99.3	1.1	21155:00	vasp
2701	sunx	39	19	1869168	755756	32840	R	99.0	1.2	20841:46	vasp
2702	sunx	39	19	1869172	741864	31244	R	98.7	1.1	21124:19	vasp
2689	sunx	39	19	1880856	761716	37116	R	98.3	1.2	20826:16	vasp
2706	sunx	39	19	1869168	754308	33272	R	96.0	1.1	21160:07	vasp
30383	root	20	0	283292	3088	904	S	4.0	0.0	12069:49	pcnt
32197	sunx	20	0	166504	2764	1684	R	0.7	0.0	0:00:03	top
10	root	20	0	0	0	0	S	0.3	0.0	303:32.97	rcu_sched
6655	root	20	0	89106	8780	1466	S	0.0	0.0	11:16:56	

查看作业实时输出bpeek



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- `bpeek`命令可查看作业的屏幕正常输出
- `bpeek -f JOBID` 可以连续查看作业的连续屏幕输出
- 如在运行中指定了`-o`和`-e`选项，或输出重定向，也可以通过指定的文件查看屏幕输出



查看作业输出~/lsbatch目录



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

每个运行中的作业均会在用户帐号的~/lsbatch目录下产生作业对应文件，举例如下：

```
[sunx@tcadmin .lsbatch]$ pwd
/home/phys/sunx/.lsbatch
[sunx@tcadmin .lsbatch]$ ls *.1335535*
1551196010.1335535      1551196010.1335535.hostfile
1551196010.1335535.err 1551196010.1335535.out
```

- 绿色文件：作业对应部分环境变量信息
- .hostfile：作业使用节点
- .err文件：作业错误输出信息
- .out文件：作业正常输出文件
- 可使用tail -f ~/lsbatch/1551196010.1335535.out命令，连续实时查看作业计算输出信息。

作业常见异常退出原因



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- **libxxx.so.x**函数库文件未找到
 - 程序执行需要的函数库文件缺失，多为环境变量加载不全。
- **XXX command not found**
 - 作业计算需要的可执行文件没有找到，需指明文件所在路径
- 请指定一个可执行文件
 - 多为指定的计算程序没有可执行权限。需使用命令**chmod u+x XXXX**为指定程序添加可执行权限。
- **out of memory**
 - 作业运行时需求的内存超出了计算节点配置的内存，此种情况作业输出文件中一般会有提示。可选择调整输入文件参数减小计算规模或者增大并行计算的CPU核进程数规模或者使用大内存的专有队列计算测试。

作业常见异常退出原因



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

• 程序段错误

- 作业输出文件中会有提示信息，一般为用户的计算程序文件问题，请检查程序后再测试计算。

• 磁盘空间不够

- 默认情况下，用户个人可使用的磁盘空间为50GB，用户文件占用空间达到此上限时，帐号下无法新建文件，会导致计算的程序异常退出。
- 及时备份重要文件、删除陈旧文件，确有需求可申请扩大限额。

• 秒退

- 刚提交就没了，多为作业已运行但瞬间退出，多为用户作业本身问题，请检查-o、-e指定文件或作业输出文件的提示信息

查看历史作业



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 一小时内退出作业：
 - `bjobs -l JOBID`
 - `bjobs -d JOBID`
 - `bhist -l JOBID`，此命令的统计信息较全面
- 一小时外退出作业：
 - `bacct -l JOBID`，可查询所有作业记录，参数较多，使用 `man bacct` 查看详细介绍。举例：
`bacct -u hmli -l -C 2019/01/01,2019/03/13`



特殊软件注意事项Gaussian



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

权限自查，例如scc和user006帐号：

```
$ id scc
```

```
uid=506(scc) gid=505(nic) 组=505(nic),506(g09),1213(g16)
```

有g09和g16使用权限

```
$ id user006
```

```
uid=670(user006) gid=542(sce) 组=542(sce)
```

没有g09和g16使用权限



Gaussian



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

3. 加载环境变量

```
[scc@tc4600v4 ~]$ module avail gaussian/  
----- /opt/Modules/app -----  
gaussian/g09/D01          gaussian/g16/A03/AVX2  
[scc@tc4600v4 ~]$ module load gaussian/g16/A03/AVX2  
[scc@tc4600v4 ~]$ module list  
Currently Loaded Modulefiles:  
  1) gaussian/g16/A03/AVX2  
[scc@tc4600v4 ~]$ which g16  
/opt/gaussian16/avx2/g16/g16
```

4. 高斯计算程序输入文件里的nproc参数指定的作业进程数应与提交命令中-n参数指定的进程数保持一致。
5. 高斯作业提交计算，注意只能单节点内计算。

举例：

提交一个24进程的高斯g16作业example.com到smallib队列上运行：
bsub -q smallib -n 24 -o %J.log -e %J.err g16 example.com

特殊软件注意事项

MaterialsStudio-castep



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 仅支持命令行下提交计算，不支持客户端模式使用。
- 材料学院郝绿源老师开设有暑期课程
- DMol3等模块使用类似

系统上/opt目录下安装有6.0、7.0、8.0、2017R2、2018.01共5个版本的MS软件，建议使用2018.01版本的。环境变量设置可用2种方法：

1.module命令加载环境变量：

例：

```
[scc@tc4600v4 ~]$ module avail MaterialsStudio
```

```
----- /opt/Modules/
app -----
```

```
MaterialsStudio/2017R2 MaterialsStudio/2018.1 MaterialsStudio/6.0      MaterialsStudio/7.0      MaterialsStudio/8.0
```

```
scc@tc4600v4 ~]$ module load MaterialsStudio/2018.1
```

```
scc@tc4600v4 ~]$ module list
```

```
urrently Loaded Modulefiles:
```

```
1) MaterialsStudio/2018.1
```

```
scc@tc4600v4 ~]$ which RunCASTEP.sh
```

```
opt/MaterialsStudio/2018.1/BIOVIA/MaterialsStudio18.1/etc/CASTEP/bin/RunCASTEP.sh
```

2. 在/opt/MaterialsStudio/2018.1目录下统一安装了Materials Studio 2018.1软件，用户在使用前需要在自己的~/.bashrc文件中设置环境变量：

```
. /opt/MaterialsStudio/2018.1/BIOVIA/BIOVIA_LicensePack/etc/lp_profile
export MS_INSTALL_ROOT=/opt/MaterialsStudio/2018.1/BIOVIA/MaterialsStudio18.1
export PATH=$PATH:$MS_INSTALL_ROOT/etc/CASTEP/bin:$MS_INSTALL_ROOT/share/bin
export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$MS_INSTALL_ROOT/lib:$MS_INSTALL_ROOT/lib/32
export CASTEP_TMP=/tmp
export DMol3_TMP=/tmp
```

以上2种方法任选其一使用。



MaterialsStudio-castep



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 两种提交方法，推荐第二种，便于检查错误输出日志；
-np参数要与-n参数保持一致。

3. 提交作业举例：

例：

提交一个申请使用72进程数的castep作业到mediumib队列上：

```
RunCASTEP.sh -q mediumib -np 72 seedfile
```

或者

```
bsub -q mediumib -n 72 -o %J.log -e %J.err runMSserver.sh Castep -np 72 seedfile
```

注意：

-n 和-np参数的数值要保持一致。

seedfile需替换为自己的输入文件，在提交时不需要文件扩展名。 seedfile输入文件可以同时写多个，以空格相间隔
Dmol3等模块的使用方法与上边类似。



特殊软件注意事项Fluent



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 对网络延迟要求高，参数指定-pib使用高速计算网络

```
[scc@tc4600v4 ~]$ module avail ansys
----- /opt/Modules/app -----
ansys/cfx/15.0.17  ansys/cfx/16.1.0  ansys/fluent/15.0.17  ansys/fluent/16.1.0  ansys/fluent/18.0
[scc@tc4600v4 ~]$ module load ansys/fluent/18.0
[scc@tc4600v4 ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) ansys/fluent/18.0
[scc@tc4600v4 ~]$ which fluent
/opt/ansys/18.0/v180/fluent/bin/fluent
```

计算举例:

提交一个申请使用72个CPU核计算的作业到mediumib队列上计算，需根据实际计算修改必要的参数，保持-n与-t参数一致：
bsub -q mediumib -n 72 -o %J.log -e %J.err fluent -lsf 3ddp -g -t72 -pib -ssh -i example.jou



特殊软件注意事项MATLAB



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- 全校正版，可个人电脑上安装使用
- 没有图形界面，只能启动字符界面
- 使用`matlab -r` 脚本文件名（不包括.m扩展名）来非交互模式运行程序

```
[scc@tc4600v4 ~]$ module avail matlab
----- /opt/Modules/app -----
matlab/2018a matlab/2018b
----- /opt/Modules/not_recommended -----
matlab/2015a matlab/2016a matlab/2016b matlab/2017a matlab/2017b

[scc@tc4600v4 ~]$ module load matlab/2018b
[scc@tc4600v4 ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) matlab/2018b
[scc@tc4600v4 ~]$ which matlab
/opt/MATLAB/R2018b/bin/matlab
```

2. 采用`matlab -r inputfile` 方式提交时，输入文件`inputfile.m`需要去除.m的文件扩展名。

举例：
串行任务：`bsub -q testv3 -n 1 -o %J.log -e %J.err matlab -r serial_job >result`
并行任务：`bsub -q testv3 -n 24 -o %J.log -e %J.err matlab -r parallel_job >result`

联系方式



中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

- QQ群： 8355136
- Email: sccadmin@ustc.edu.cn
- 电话： 63602248、 63601541、 63600316 (8:00~12:00, 14:00~18:00)
- 办公室： 东区新图书馆1楼126室、 124室， 网络中心 204室

