

# **地球系统数值模拟装置**

## **用户手册**

**2024-01-23**

## 目录

前言 .....	3
1 地球系统数值模拟装置使用规范 .....	4
2 地球系统数值模拟装置计算平台访问 .....	4
2.1 地球系统数值模拟装置 VPN 登录介绍 .....	4
2.2 地球系统数值模拟装置 ssh 客户端登录 .....	5
2.2.1 下载 ssh 密钥文件 .....	5
2.2.2 使用 Xshell 登录 .....	6
2.2.3 使用 Putty 登录 .....	9
2.2.4 使用 Visual Studio Code 登录 .....	11
2.2.5 常见问题 .....	12
2.3 平台账号找回密码 .....	13
2.4 平台账号修改密码 .....	14
3 地球系统数值模拟装置资源介绍 .....	15
4 地球系统数值模拟装置计算平台功能介绍 .....	17
4.1 地球系统数值模拟装置计算平台概览 .....	17
4.2 E-Shell--Linux 命令行终端 .....	17
4.3 E-File--文件上传/下载管理 .....	19
4.4 作业提交（图形界面） .....	19
4.5 作业管理 .....	22
5 地球系统数值模拟装置的使用 .....	22
5.1 软件环境加载 .....	22
5.2 作业调度系统的使用 .....	23
5.3 作业提交 .....	24
6 其他相关使用事项 .....	27

# 前言

地球系统数值模拟装置的科学目标是深入认识地球环境复杂系统基本规律，探索地球系统大气圈、水圈、冰冻圈、生物圈、岩石圈的物理、化学、生物过程，探究各圈层及其相互作用对地球系统整体和我国区域环境的影响，融合模拟与观测数据以提高预测的准确性，实现对地球系统复杂过程在中尺度分辨率的定量描述与模拟，为国家防灾减灾、应对气候变化、大气环境治理等重大问题提供科学支撑；推动地球系统科学不同学科之间的科学交叉和融合，促进我国地球系统科学整体向国际一流水平跨越。

为了能够更好的使用本装置开展各项工作，本文档将对装置使用的相关方面进行介绍。

# 1 地球系统数值模拟装置使用规范

- 装置登录节点仅供提交任务，上传下载文件等非计算类任务使用，禁止在装置登录节点运行计算任务，一经发现立刻进行清理，所有计算任务均使用调度系统提交到计算节点
- 账号仅能登录提交任务的计算节点，任务完成后登录会话被自动终止
- 禁止在装置内运行任何挖矿类程序或疑似病毒类程序，禁止任何形式尝试暴力破解或提权类非法操作，一经发现将会立即禁用账号并追究账号所有者相关责任
- 每个账号存储空间有限，请及时清理存储空间

## 2 地球系统数值模拟装置计算平台访问

新用户需要统一向中国科学院大气物理研究所申请账号开设，审批完成后用户将会获得登录装置的 VPN 账号密码和计算平台的账号，初次登录请先在平台首页重置密码。

地球系统数值模拟装置计算平台登录地址：

<https://earthlab-ac.iap.ac.cn> 需要登录 VPN 后才可以访问。

### 2.1 地球系统数值模拟装置 VPN 登录介绍

VPN 客户端下载地址：<https://www.leagsoft.com/doc/article/103107.html>

上网地区	网关地址	端口
大气所北郊园区上网	103.165.83.237	47240
其他所/教育网/电信/联通/移动等	cstnet.vpn.earthlab.iap.ac.cn	47240

**注：初次登录 VPN 提示需修改 VPN 密码，在大气所密云园区办公网内上网时可以直接访问装置计算平台，不用登录 VPN。**

## 2.2 地球系统数值模拟装置 ssh 客户端登录

计算平台支持 ssh 客户端访问，出于安全考虑 ssh 客户端仅支持密钥登录。密钥文件需要从计算平台下载。密钥有效期为距离最近密钥修改时间+7 天，超过有效期需要从平台下载新的密钥进行登录。

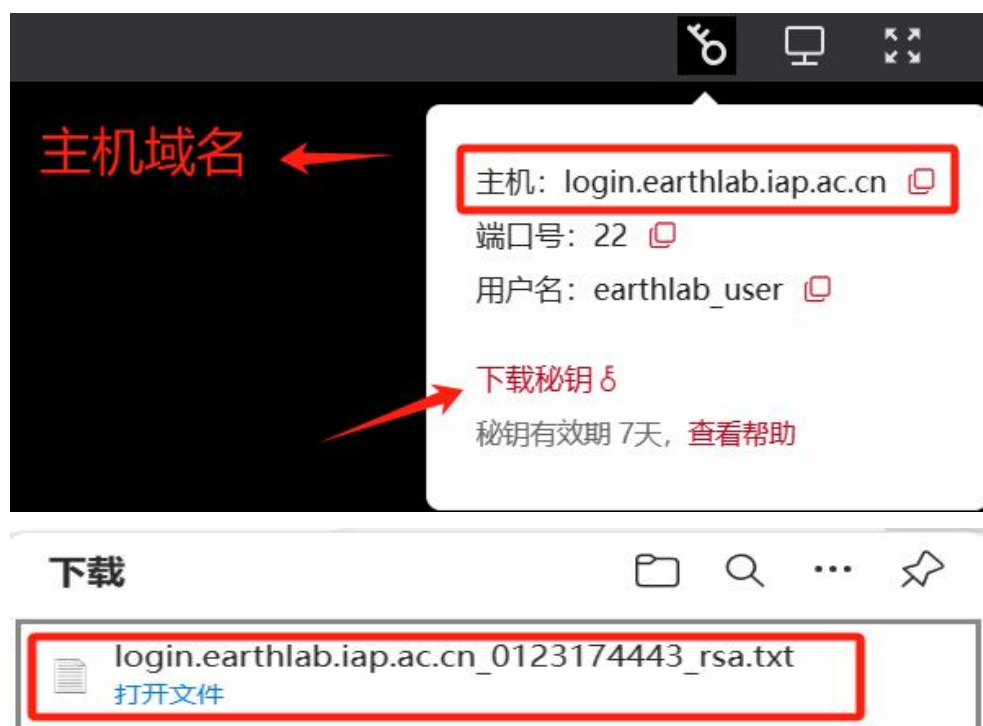
### 2.2.1 下载 ssh 密钥文件

**注：主机地址统一使用主机域名 login.earthlab.iap.ac.cn。**

点击“命令行 E-shell”



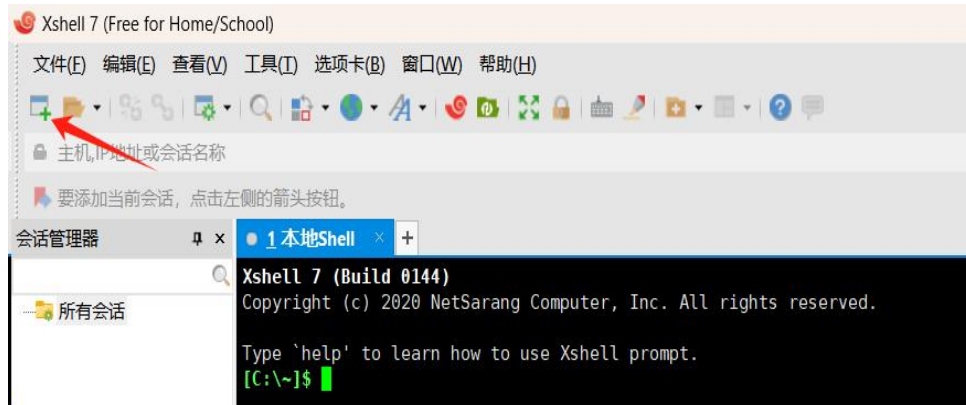
点击“密钥”按钮，选择“下载密钥”，复制主机域名。



## 2.2.2 使用 Xshell 登录

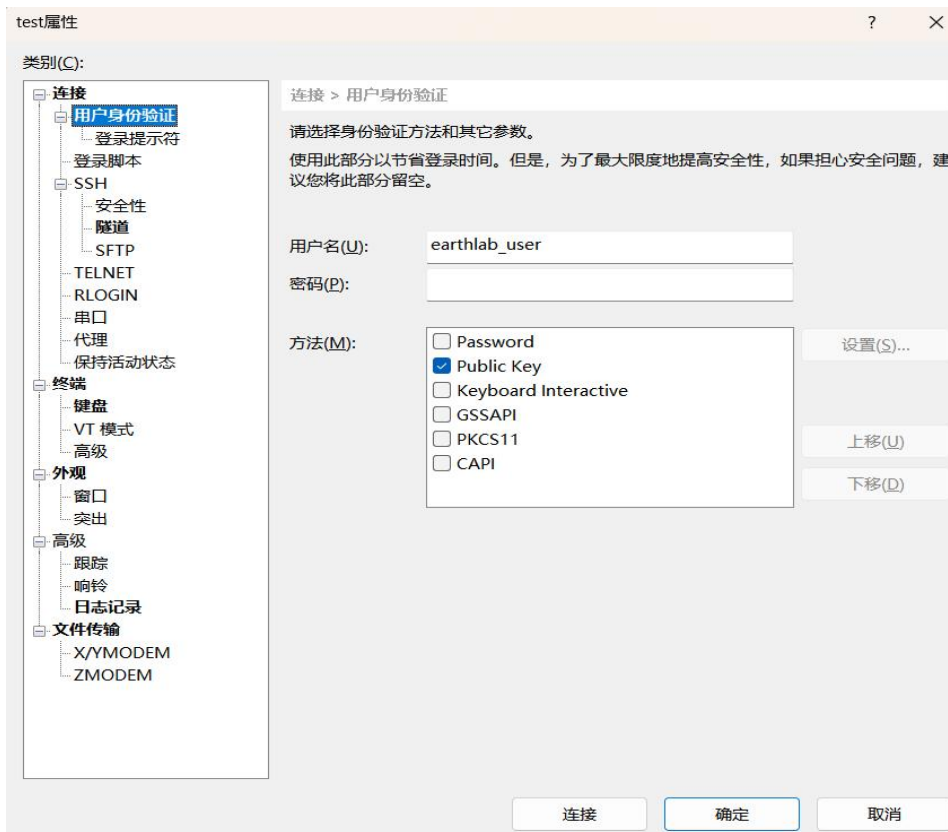
1 打开 xshell，选择“新建”或右键点击已有会话，选择“属性”进行配置。

点击“新建”

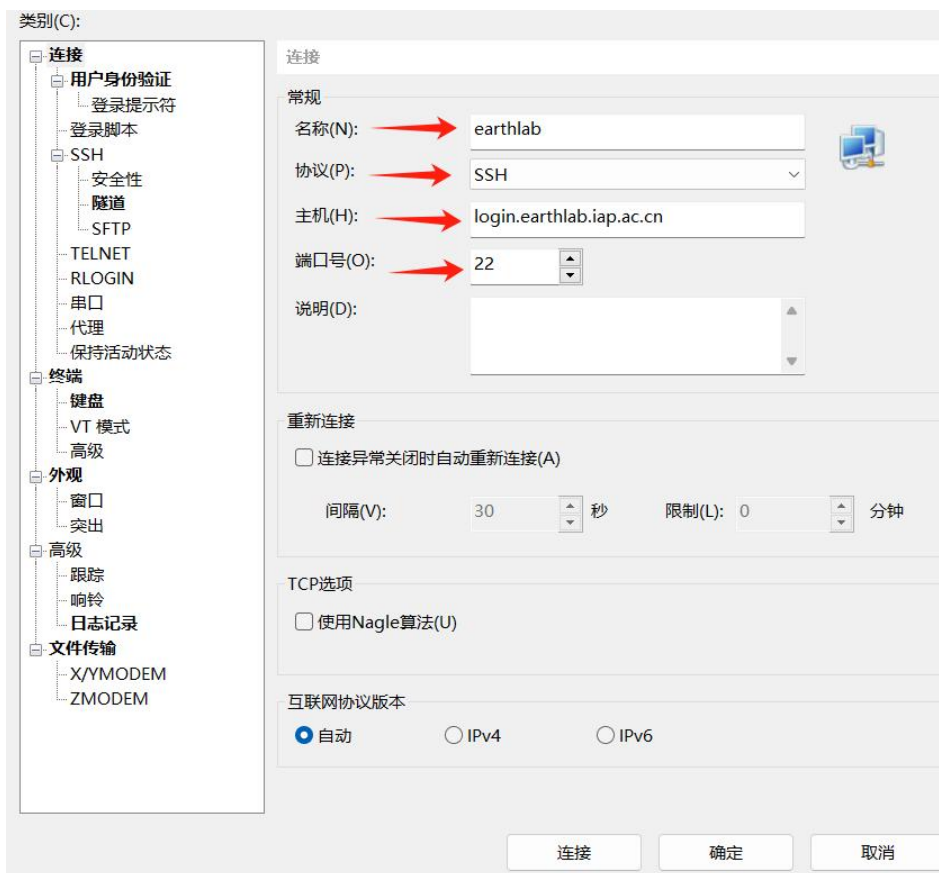


右键选择对应会话的“属性”按钮

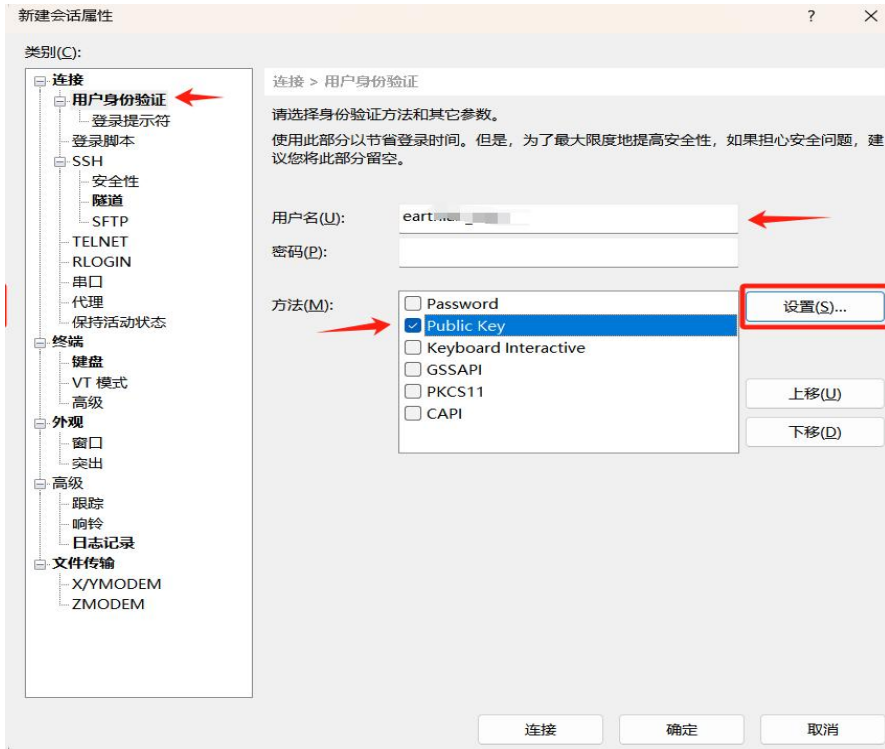




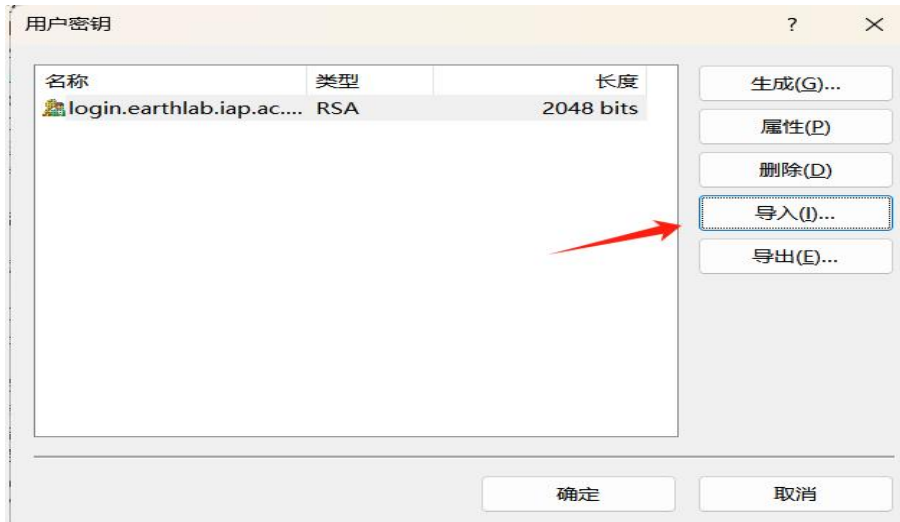
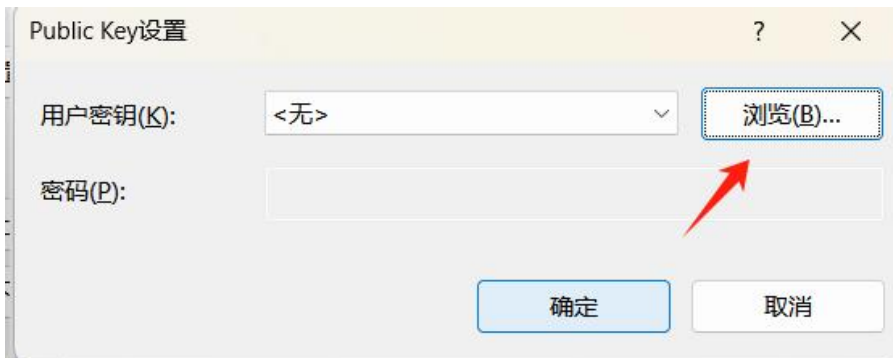
2 依次填写“会话名称”、“主机地址”和“端口号”。



3 点击“用户身份验证”，选择“Public Key”，点击“设置”。

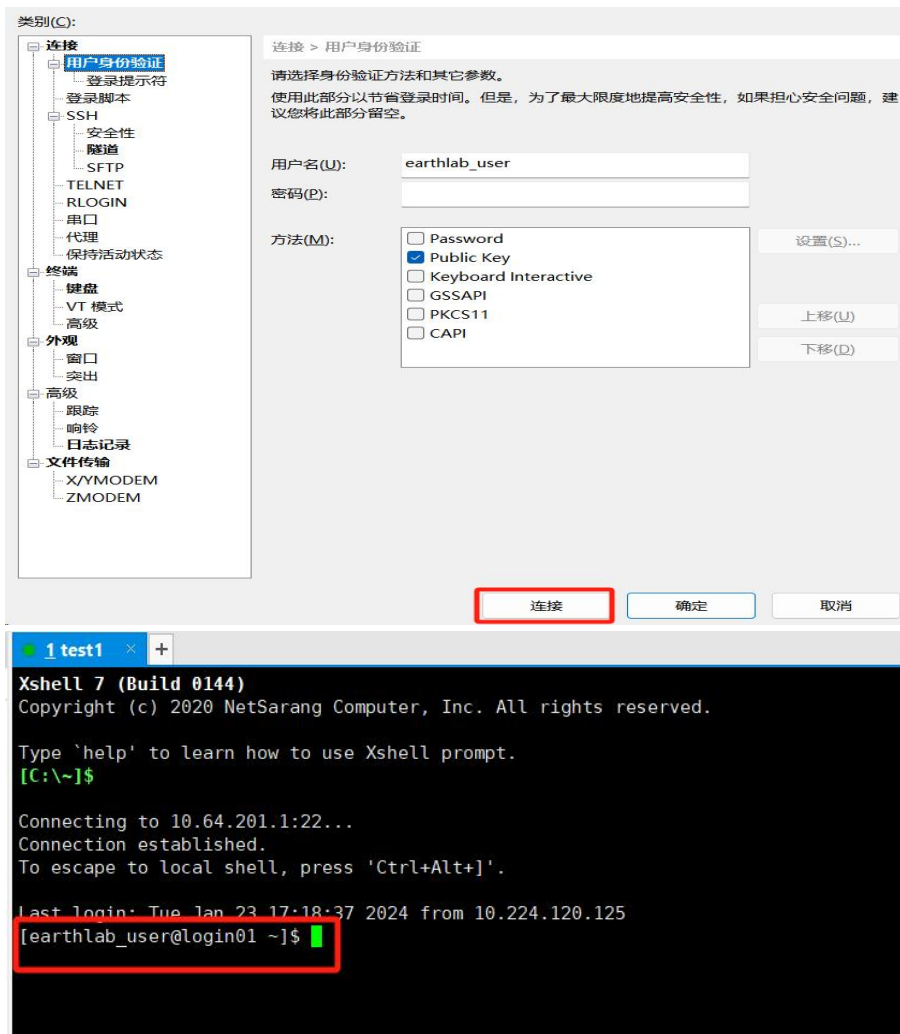


4 选择“浏览”，导入我们通过 AC 平台下载的密钥文件。点击“确定”。



5 点击“连接”，登录集群。

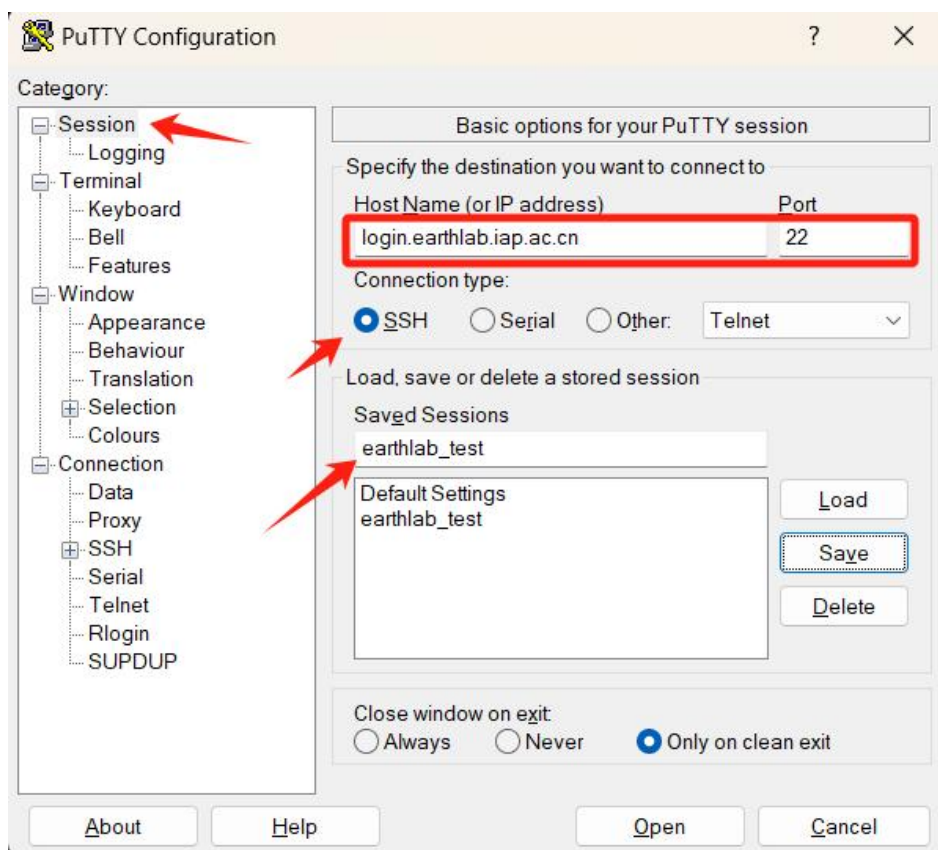




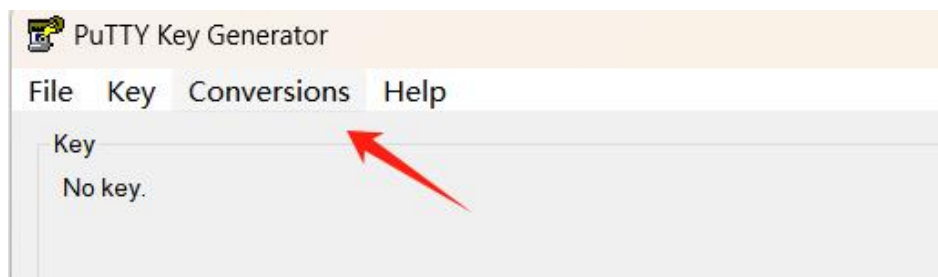
## 2.2.3 使用 Putty 登录

**注：putty 方式密钥登录，需要将密钥转换为 ppk 格式的文件。**

1 打开 putty, 选择“ session” , 依次填写 “Host Name (IP address)”、“Port” 和 “Connection Type”, Saved Sessions 自定义一个名字。

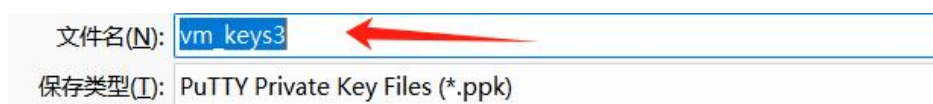


2 打开 puttygen, 选择 “Conversions” - “Import key”, 选择下载的密钥文件。

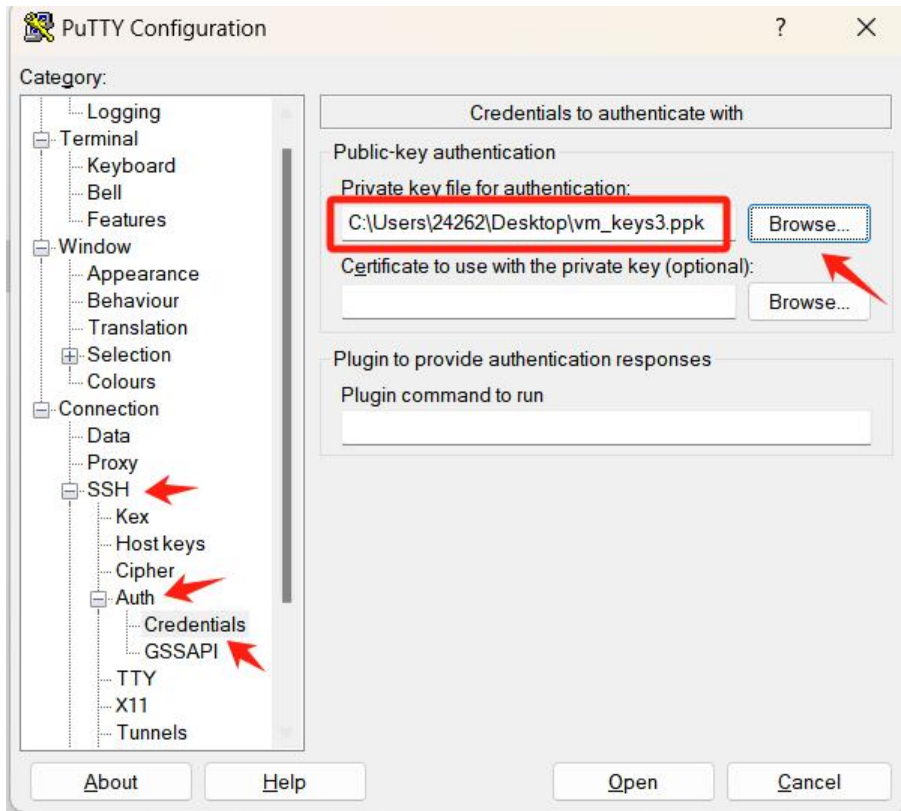


login.earthlab.iap.ac.cn\_0123175844... 2024/1/23 17:58 文本文档

3 点击 “Save private key”, 保存转换后的 ppk 格式的文件。



4 点击 “SSH”, 选择 “Auth” - “Credentials”, 输入转换后的 ppk 格式的密钥文件。

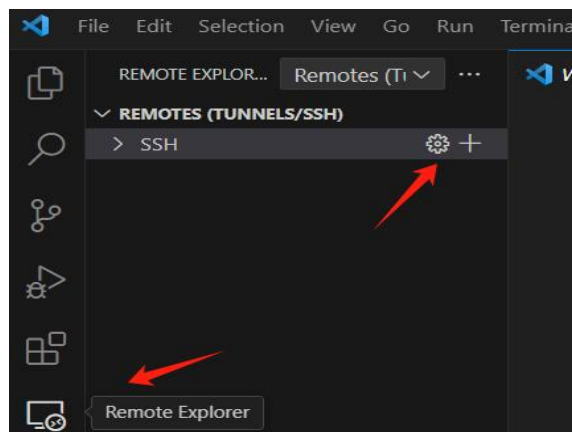


5 点击 “open”，输入登录的用户名，密钥登录成功。



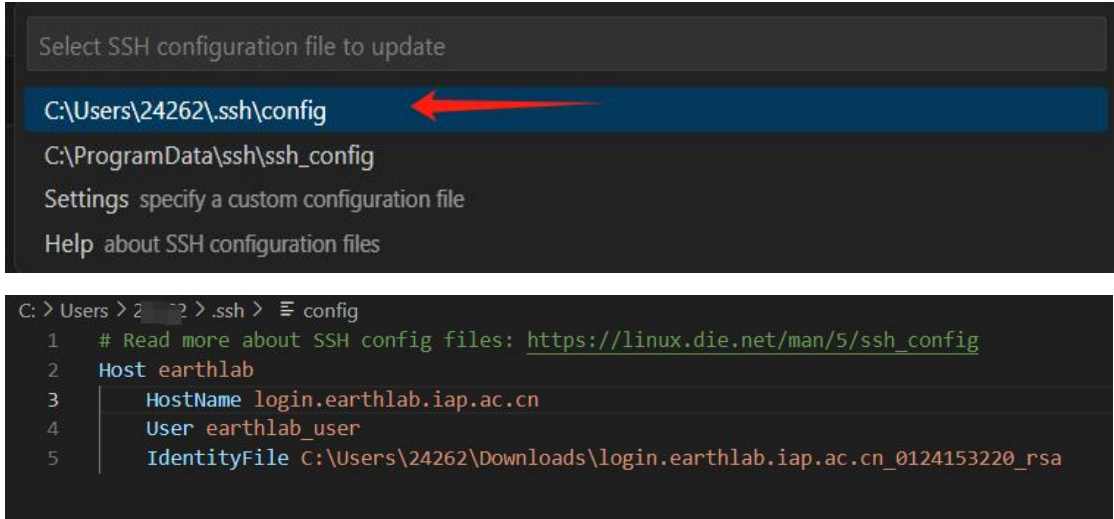
## 2.2.4 使用 Visual Studio Code 登录

1 打开 Visual Studio Code, 选择 “Remote Explorer”, 选择 “Open SSH Config File” 按钮。

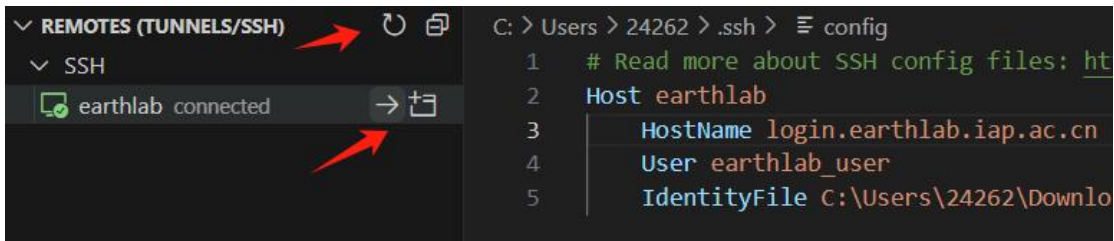


2 配置 ssh 登录的配置文件，按照要求依次填写“HostName(IP 地址)”、“User(用户名)”和“IdentityFile(密钥文件)”。

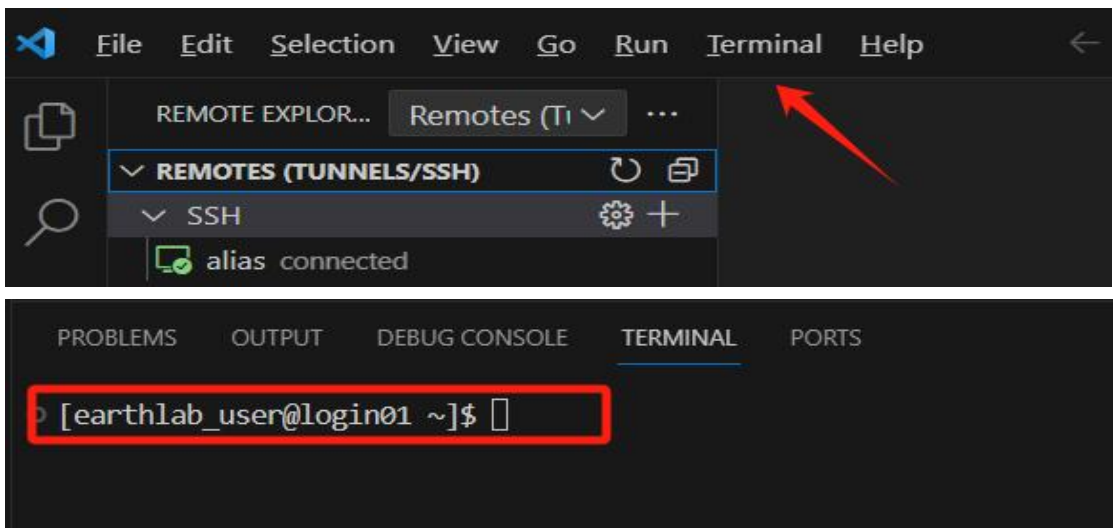
注：下载的密钥文件为 txt 格式，此处需要去掉.txt 后缀的密钥密钥



3 点击“Refresh”按钮，选择“Connect in Current Windows”连接远程服务器。



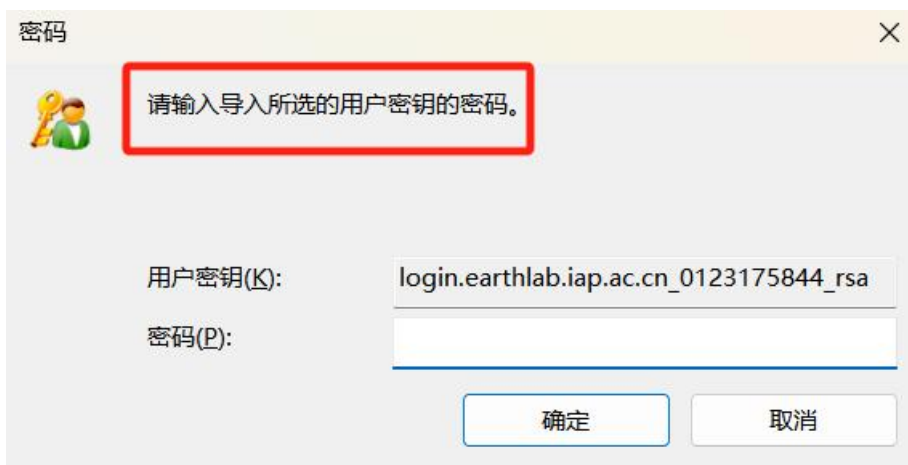
4 选择“Terminal”，成功连接远程服务器。



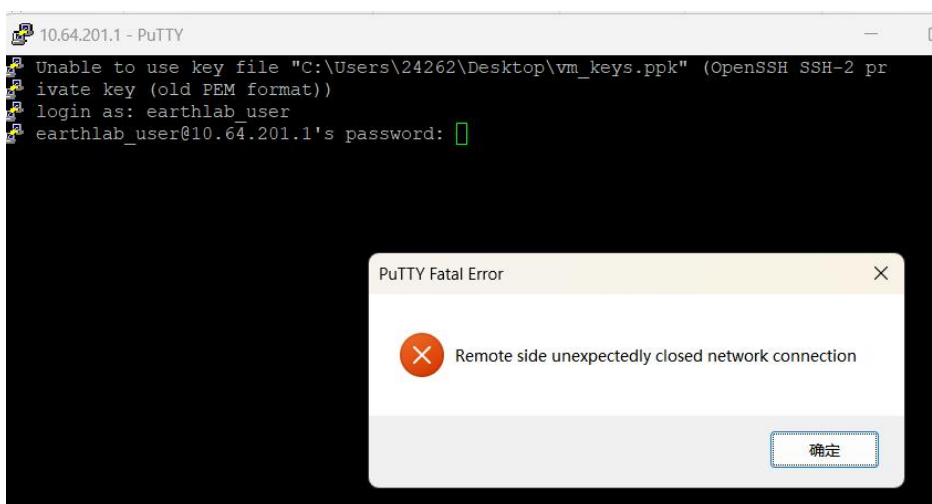
## 2.2.5 常见问题

1 xshell 导入密钥提示“请输入导入所选的用户密钥和密码”说明密钥已经过期，请重

新下载密钥，并按照 2.2.2 步骤进行配置。

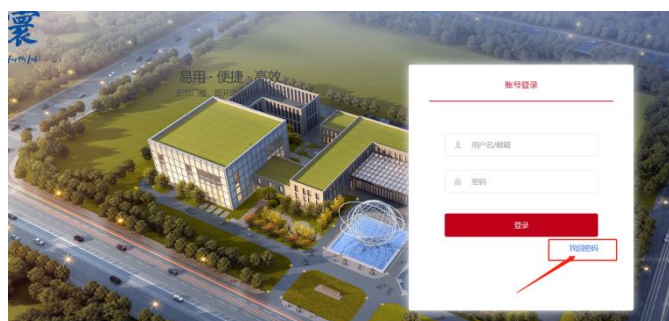


2 putty 导入密钥后登录仍然提示输入密码说明密钥已经过期，需要重新下载密钥并  
按照 2.2.3 步骤进行配置。



## 2.3 平台账号找回密码

平台首页点击“找回密码”，输入申请账号时提供的邮箱地址



然后登录邮箱查看重置密码的链接并访问

【地球系统数值模拟装置统一认证中心】打开以下链接重置您的密码: [https://earthlab-ac.iap.ac.cn/sso/reset\\_pwd?](https://earthlab-ac.iap.ac.cn/sso/reset_pwd?)

**修改密码**

请重置您的密码。 [返回立即登录](#)

新密码

- 6~30位字符
- 只能包含大小写字母、数字以及标点符号（除空格）
- 大写字母、小写字母、数字和标点符号至少包含3种

确认密码

**确认**

## 2.4 平台账号修改密码

登录计算平台后，依次点击右上角用户名---->个人中心



点击“修改”按钮

**系统安全** 账号安全级别: 中

**[安全等级高]** 登录密码 [修改](#) [重置](#)

建议选择至少包含三种字符（大/小写字母，符号或数字）的密码，长度不低于6个字符，并定期更换密码。

**修改密码**

\* 原密码

\* 新密码

不可为空

密码复杂度:

- 6~30位字符
- 只能包含大小写字母、数字以及标点符号（除空格）
- 大写字母、小写字母、数字和标点符号至少包含3种

\* 确认密码

不可为空

**保存**

输入符合复杂度要求的密码，保存即可。

### 3 地球系统数值模拟装置资源介绍

计算资源情况如下：

- 每个账号最多可以同时使用 400 节点 (25600 核心)，可用机时在审核时批准
- 使用超过最大核心数或节点数则作业无法提交或提交失败无法运行
- 机时不足会导致作业无法运行

队列名称	单节点配置	最大运行时间	最大作业数	使用说明
cpu_single	64 核心 256GB 内存	3 天 (72 小时)	10	CPU 串行计算节点, 单个作业最多使用 1 个节点, 64 核心
cpu_parallel	64 核心 256GB 内存	30 天 (720 小时)	10	CPU 并行计算节点, 单个作业最少使用 2 个节点, 120 核心
dcu	64 核心 128GB 内存	30 天 (720 小时)	10	DCU 加速卡节点, 也可以用于 CPU 作业计算, 节点不做限制
bigmem	64 核心 512GB 内存	15 天 (360 小时)	5	大内存节点 适用于内存占用较高的程序, 节点不做限制
matlab	64 核心 512GB 内存	1 天 (24 小时)	5	Matlab 专用节点
debug	64 核心	1 小时	1	程序调试专用节点

	256GB 内存			
--	----------	--	--	--

存储资源情况如下：

目录功能	配额限制	说明
主目录	500GB	用户主目录，用户存放代码、文档等少量数据，不建议作为计算使用  主目录路径规则： /public/home/用户名/
数据目录	20TB	数据目录容量较大，主要用于计算或存放数据  数据目录路径规则：  (1) /data/share/用户名/  (2) /data1/share/用户名/  (3) /data2/share/用户名/  具体以实际情况为准。

注：

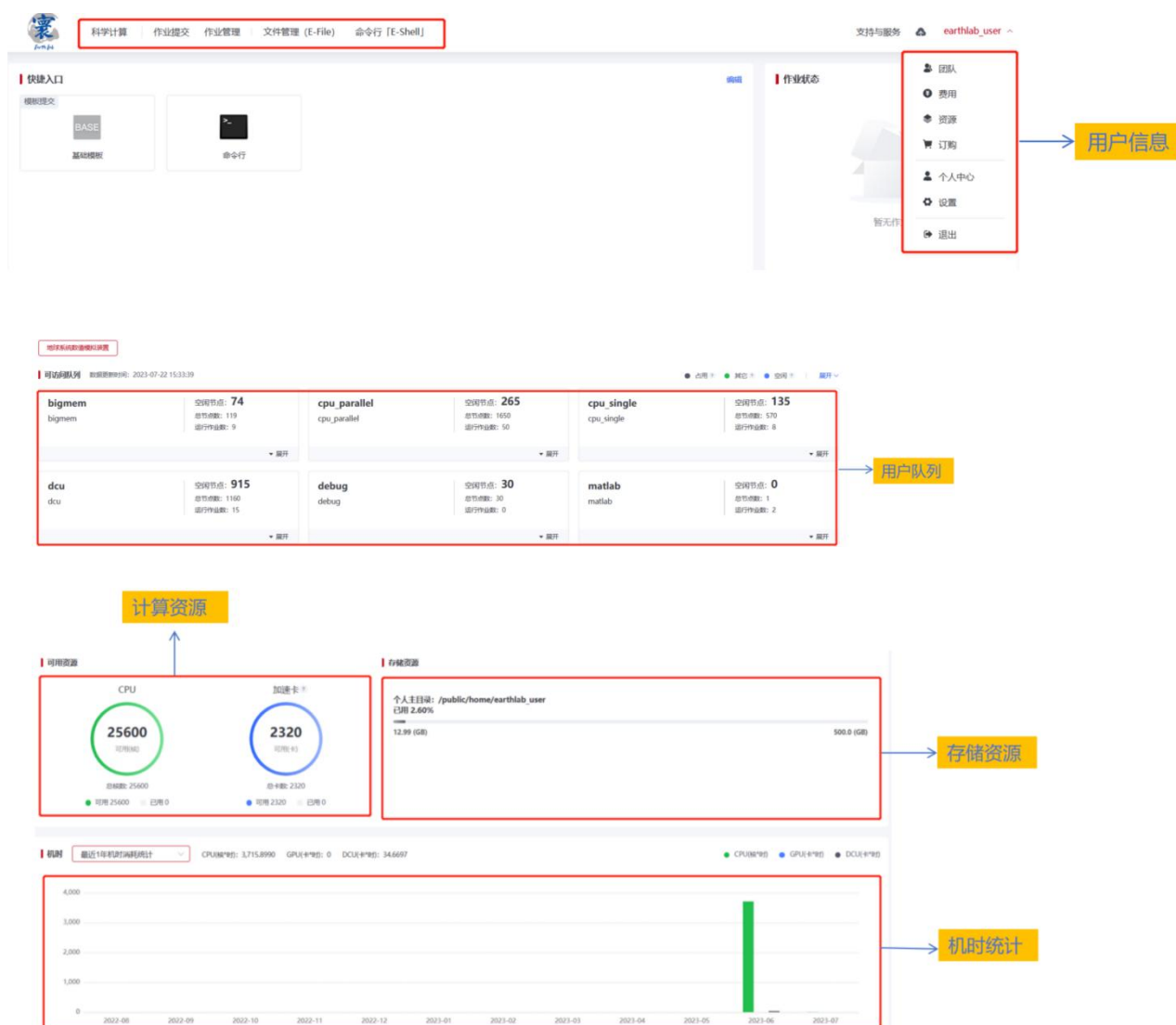
- **cpu\_single 队列提交作业，最多使用 64 核心或 1 节点**
- **cpu\_parallel 队列提交作业，最少使用 120 核心或 2 节点**
- **机时采用预扣方式，提交作业时会根据申请的核心数与作业最大运行时间进行计算，如剩余机时不足时无法运行作业，可以通过设置参数减少作业运行时间**
- **机时资源或存储资源不足或扩容申请，请联系装置办进行审批**



## 4 地球系统数值模拟装置计算平台功能介绍

### 4.1 地球系统数值模拟装置计算平台概览

地球系统数值模拟装置计算平台，支持在线查看计算资源概况、存储信息、用户队列及机时统计信息，可以在线修改或者重置账户密码，统一登录门户，免装客户端。



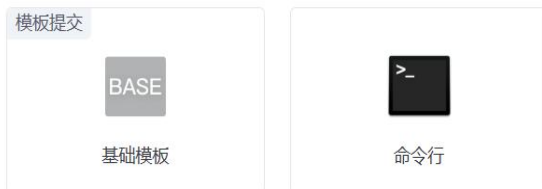
### 4.2 E-Shell--Linux 命令行终端

E-Shell 提供了修改字体大小、设置主题、登录节点切换、全屏模式切换、集群调度命令查询、常用快捷键查询等基本功能。

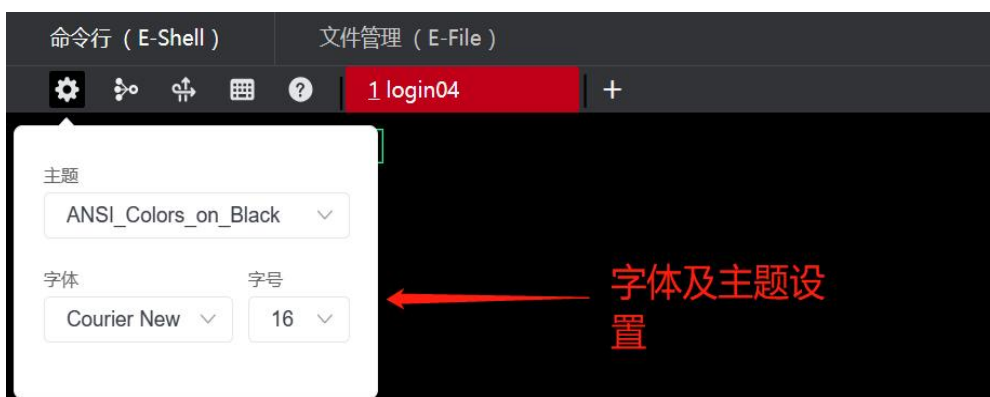
点击“命令行[E-Shell]”，进入 E-Shell 终端模式：



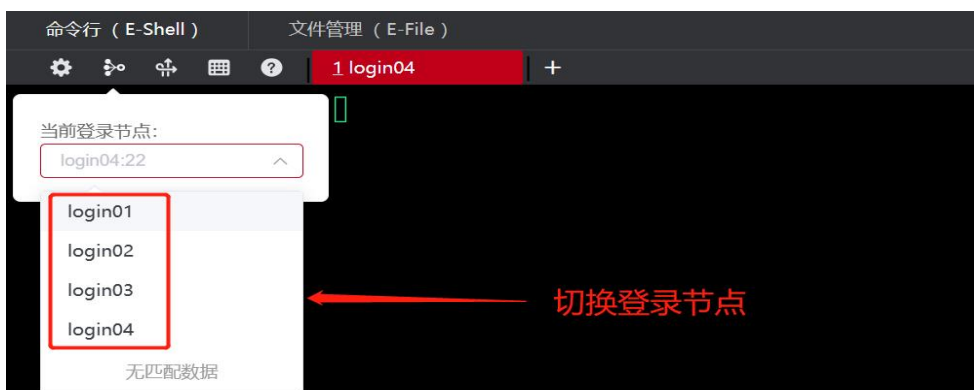
### 快捷入口



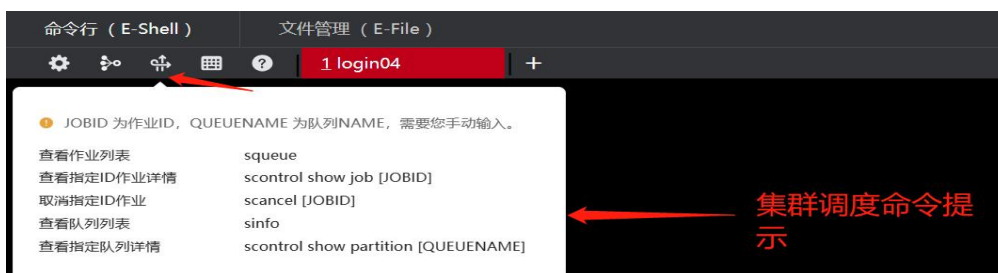
### 设置字体及主题



### 切换登录节点



### 调度器命令选择



### 切换全屏模式

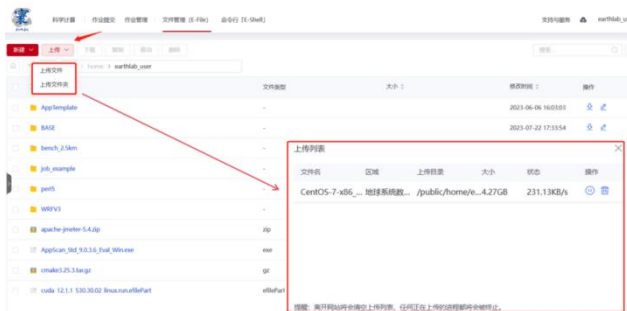


**注：请不要在登录节点直接运行作业（编译除外），以免影响其余用户的正常使用。**

## 4.3 E-File--文件上传/下载管理

E-File 提供了文件上传和下载管理功能。用户可以对自已的文件或者目录进行上传、下载、删除、重命名、复制、移动等操作。

**点击“上传”，选择上传文件或者文件夹（此处以上传文件为例）**



**注：默认访问目录为用户的home目录**

## 4.4 作业提交（图形界面）

地球系统数值模拟装置计算平台支持图形界面提交作业。图形界面提供了在线选择作业提交方式、在线设置作业名称、设置核心数、节点选择、运行时限、工作目录及脚本内容在线编写等功能。

**点击“基础模板”**



### 基础模板作业提交参数设置项介绍

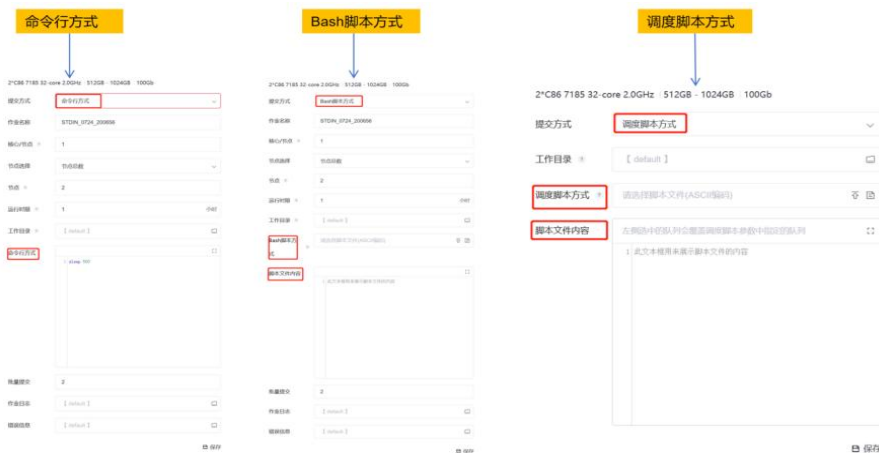
设置项	设置项功能说明
提交方式	命令行方式、Bash 脚本方式、调度脚本方式
作业名称	设置提交作业名称
核心/节点数	设置作业每节点使用的核心数
节点选择	设置运行作业需要的节点总数或者节点列表
运行时限	设置作业运行时长
工作目录	设置作业运行目录
批量提交	设置作业批量提交数目
作业日志	设置作业运行日志文件保存路径
错误信息	设置作业运行错误日志文件保存路径

注:

- 作业提交方式选择“命令行方式”或者“Bash 脚本方式”提交作业时，作业名称、核心/节点数、节点选择、节点、运行时限、工作目录、批量提交、作业日志、错误信息设置项均需要在线设置，命令行方式或者脚本文件内容项只需要填写作业具体业务运行

程序即可；

- 作业提交方式选择“调度脚本方式”提交作业时，作业名称、核心/节点数、节点选择、节点、运行时限、工作目录、批量提交、作业日志、错误信息及作业具体业务运行程序均需要填写在“脚本文件内容”项。



在线提交作业举例（此处以“命令行方式”举例）：

bigmem

2\*C86 7185 32-core 2.0GHz | 512GB - 1024GB | 100Gb

提交方式	命令行方式
作业名称	STDIN_0722_173349
核心/节点	1
节点选择	节点总数
节点	2
运行时限	1 小时 /public/home/earthlab_user/BASE/STDIN_0722_173349
工作目录	[ default ]
脚本文件内容	sleep 6000

作业ID: 8962791 提交成功! [继续提交](#) [查看详情](#)

点击“查看详情”，可以查看作业运行详细信息：

[返回](#) 作业详情

STDIN\_0722\_171813 【作业ID:8962665】

[重新运行](#) [取消运行](#)

作业概要

[工作目录](#) [作业日志](#) [错误信息](#) [详细信息](#)

区域: 地球系统数值模拟装置	目录 [ /public/home/earthlab_user/BASE/STDIN_0722_171813 ]	文件名: 多个文件名之间以","分隔	Q	🔄	📄	
状态: <span style="color: blue;">●</span> 运行		文件名	大小	修改时间	权限	操作
应用: BASE		stderr.8962665	118 B	2023-07-22 17:17:10	rw-rw...	📄
队列: bigmem		job_STDIN_0722_171813_8962665_2c_2n.ma	24 B	2023-07-22 17:17:10	rw-rw...	📄
核数: 2		job_STDIN_0722_171813_8962665.log	131 B	2023-07-22 17:17:10	rw-rw...	📄
所有者: earthlab_user		job_BASE.slurm	1.8 KB	2023-07-22 17:18:37	rwxf-x...	📄
开始时间: 2023-07-22 17:18:38		std.out.8962665	131 B	2023-07-22 17:17:10	rw-rw...	📄
已运行时长: 2分钟10秒						
运行时限: 1小时 <a href="#">延长</a>						

## 4.5 作业管理

作业管理支持当前作业和历史作业信息查询功能。

点击“作业管理”---->“当前作业”，可以指定作业 ID、作业状态及作业工作队列对

当前正在运行的作业进行精准查询：

作业ID	作业名	应用	队列	区域	开始时间	运行时长	状态	操作
898882_1	test_cpu	BASE	cpu_single	地球系统数值模拟装置	2023-07-24 16:21:44	00:06:01	运行	📄 ⬆ ⬇
898882_2	test_cpu	BASE	cpu_single	地球系统数值模拟装置	2023-07-24 16:21:44	00:06:01	运行	📄 ⬆ ⬇

点击“作业管理”---->“历史作业”，可以指定作业 ID、作业结束时间、作业状态、

作业类型及作业工作队列对历史作业信息进行精准查询：

作业ID	作业名	应用	队列	区域	结束时间	运行时长	状态	操作
8962701	STDIN_0722_173349	BASE	bigmem	地球系统数值模拟装置	2023-07-22 18:34:02	1小时16秒	超时	📄
8962700	STDIN_0722_173220	BASE	bigmem	地球系统数值模拟装置	2023-07-22 18:22:32	1小时15秒	超时	📄
8962665	STDIN_0722_171813	BASE	bigmem	地球系统数值模拟装置	2023-07-22 18:19:02	1小时24秒	超时	📄
8932609	test_node	BASE	bigmem	地球系统数值模拟装置	2023-07-20 14:54:50	6小时20秒	完成	📄

## 5 地球系统数值模拟装置的使用

### 5.1 软件环境加载

本装置已经预装了常用的编译器、数学库、MPI、DCU 加速卡等运行环境

可以使用 module 命令进行查看和使用，具体方法如下：

#### 1、查看所有可使用软件环境

## module av

```
----- /public/software/modules -----
apps/anaconda3/5.3.0          compiler/rocm/4.0             mathlib/netcdf/intel/4.4.1
apps/esmf/intelmpi/7.0.0      mathlib/antlr/gnu/2.7.7     mathlib/pio/gnu/hpcx-2.7.4-gcc7.3.1-2.5.1
apps/Lammps-DCU2/hpcx-gcc-7.3.1 mathlib/antlr/intel/2.7.7   mathlib/pio/gnu/openmpi-4.0.4-gcc4.8.5-2.5.1
apps/m4/Universal/1.4.10     mathlib/cdo/intel/1.10.19   mathlib/pio/intel/2.5.1
apps/ncl_ncarg/6.3.0         mathlib/grib_api/intel/1.19.0 mathlib/pnetcdf/gnu/hpcx-2.7.4-gcc7.3.1-1.12.1
apps/ncl_ncarg/6.6.2         mathlib/hdf4/gnu/4.2.13     mathlib/pnetcdf/gnu/openmpi-4.0.4-gcc4.8.5-1.12.1
apps/nco/gnu/4.8.1           mathlib/hdf4/intel/4.2.13   mathlib/pnetcdf/intel/1.12.1
apps/nco/intel/4.8.1         mathlib/hdf5/gnu/1.8.20     mathlib/szlib/gnu/2.1.1
apps/ncview/gnu/2.1.7        mathlib/hdf5/intel/1.10.3   mathlib/szlib/intel/2.1.1
apps/ncview/intel/2.1.7      mathlib/hdf5/intel/1.8.20   mathlib/udunits/gnu/2.2.28
apps/PyTorch/1.7.0-mmcv/pytorch-1.7-mmcv1.3.8-rocm-4.0.1 mathlib/jasper/gnu/1.900.1 mathlib/udunits/intel/2.2.28
apps/singularity/3.8.0       mathlib/jasper/intel/1.900.1 mathlib/wr/lib2/2.0.8
apps/TensorFlow/tf1.15.3-rocm4.0.1/hpcx-2.7.4-gcc-7.3.1 mathlib/jpeg/gnu/9a         mathlib/zlib/gnu/1.2.11
apps/TensorFlow/tf2.5.0-rocm4.0.1/hpcx-2.7.4-gcc-7.3.1 mathlib/jpeg/intel/9a      mathlib/zlib/intel/1.2.11
benchmark/imb/intelmpi/2017 mathlib/lapack/gnu/3.9.1    mpi/intelmpi/2017.4.239
compiler/emake/3.20.1        mathlib/lapack/intel/3.9.1  mpi/intelmpi/2021.3.1
compiler/dtk/22.04.2         mathlib/libpng/gnu/1.2.12  mpi/intelmpi/2022.1.0
compiler/intel/2021.3.1      mathlib/libpng/intel/1.2.12 mpi/openmpi/gnu/4.0.4
compiler/intel/2022.1.0      mathlib/netcdf/gnu/4.4.1
----- /opt/hpc/software/modules -----
compiler/devtoolset/7.3.1    compiler/intel/2017.5.239   compiler/rocm/3.3         mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1    mpi/hpcx/2.7.4/intel-2017.5.239 mpi/openmpi/4.0.4/gcc-7.3.1
```

## 2、查看已加载的环境

module li

```
Currently Loaded Modulefiles:
 1) compiler/devtoolset/7.3.1  2) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
```

## 3、加载环境

module load xxx 或 module add xxx

```
module add mathlib/netcdf/intel/4.4.1
```

## 4、删除环境

删除单个环境

module rm xxx 或 module unload xxx

```
module unload mathlib/netcdf/intel/4.4.1
```

删除全部环境

module purge

```
module purge
```

注：若没有所需要的软件，可以在账号的主目录或数据目录自行安装

## 5.2 作业调度系统的使用

所有需要运行的作业均必须通过作业提交命令提交，提交后可利用相关命令查询作业状态等。

下面介绍两个常用命令：

## 查看全部队列信息

sinfo

```
[sghpc2@login04 ~]$$sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
serial    up    infinite   20    idle cmac[0011-0030]
normal    up    infinite    1    drain* cmac1174
normal    up    infinite   192    drain cmac[1091-1173,1175-1282,1304]
normal    up    infinite    54    alloc cmac[0035-0048,0057-0088,0094-0101]
normal    up    infinite  1257    idle cmac[0049-0056,0089-0093,0102-1090,1283-1303,1305-1538]
operation up    infinite    1    drain* cmac1174
operation up    infinite   192    drain cmac[1091-1173,1175-1282,1304]
operation up    infinite    54    alloc cmac[0035-0048,0057-0088,0094-0101]
operation up    infinite  1257    idle cmac[0049-0056,0089-0093,0102-1090,1283-1303,1305-1538]
sgtest    up    infinite    54    alloc cmac[0035-0048,0057-0088,0094-0101]
sgtest    up    infinite   747    idle cmac[0049-0056,0089-0093,0102-0835]
```

## 查看当前账号全部作业状态

squeue

```
[zlei@login01 job_example]$ squeue
      JOBID PARTITION     NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
      308712   normal     test      zlei  R          0:01      1 a3110n01
```

## 5.3 作业提交

常用的作业提交参数如下，以下参数适用于所有作业提交方式：

参数	参数说明
-J 或 --jobname	指定作业名称
-p 或 --partition	指定使用的队列
-N 或 --nodes=	指定使用的节点数量
-n 或 --ntasks=	指定使用的总 CPU 核心数
--ntask-per-node=	指定每个节点的任务数（CPU 核心数），最大为 64
--cpus-per-task=	指定每任务 CPU 核心数对应多线程场景，可能需配合 OMP_NUM_THREADS 变量使用
--mem=	预留申请内存容量，单位 MB、GB，不能大于节点物理内存
--gres=dcu:	申请 DCU 卡数，模拟器环境最大为 2，仅 dcu 队列需要
-w 或者 --odelist=	指定申请的节点，格式可以为 node1, node2 或者 node[1-10]



-x 或者 --exclude=	排除指定的节点, 格式可以为 node1, node2 或者 node[1-10]
-o 或者 --output=	指定 stdout 的输出文件, 如果指定文件已经存在, 它将被覆盖
-e 或者 --error=	指定 stderr 的输出文件, 如果指定文件已经存在, 它将被覆盖
-t 或者 --time=	指定作业运行时间, 例如 7- 08:00 代表 7 天 8 小时
--exclusive	设置独占节点, 被设置独占节点的作业机时一律按满核心计算

**常用的作业提交方式有三种:**

### **方式 1、申请计算资源手动执行**

salloc -j 作业名 -p 队列名 -N 申请节点数 -n 申请核心数

执行完成后用户可以登录被分配的节点手动运行作业, 作业运行完成或超过最大运行时间后, 资源被回收退出登录, 适合调试程序。

### **方式 2、交互式作业**

srun -j 作业名 -p 队列名 -N 申请节点数 -n 申请核心数 作业运行命令

### **方式 3、批处理作业提交 (推荐)**

通过编写作业脚本然后使用 sbatch + 脚本名称的方法提交, 这种方式功能最全面, 适用于大部分场景, 是最常使用的作业提交方式

sbatch job.slurm

**下面介绍一些常用作业脚本范例:**

## 作业脚本示例2—通用作业脚本 OpenMPI

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J JOB_NAME
#SBATCH -p normal
#SBATCH -N 4
#SBATCH -n 240
#SBATCH --ntasks-per-node=60
#SBATCH -o log.%j
#SBATCH -e log.%j
#SBATCH --exclusive
#SBATCH -t 7-24:00

module purge
module load compiler/intel/2017.5.239
module load mpi/hpcx/2.7.4/intel-2017.5.239
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1

mpirun -np 240 ./wrf.exe
```

指定作业名称

指定作业队列

指定作业申请的资源，包括节点数、进程数等

指定作业输出日志

设定申请节点独占

设定作业运行时间

加载或设置作业所需的环境变量

作业执行语句

## 作业脚本示例3—串行作业脚本

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J Serial
#SBATCH -p normal
#SBATCH -N 1
#SBATCH -n 1
#SBATCH -o log.%j
#SBATCH -e log.%j
#SBATCH -t 7-24:00

module purge
module load compiler/intel/2017.5.239
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1
#module load ...

srun /path/to/app

/path/to/app
```

指定作业名称

指定作业队列

指定作业申请的资源，包括节点数、进程数等

指定作业输出日志

设定作业运行时间

加载或设置作业所需的环境变量

对于串行作业，可以在脚本中只用srun执行任务也可以直接运行可执行程序

## 作业脚本示例4—MPI/OpenMP作业脚本

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J JOB_NAME
#SBATCH -p normal
#SBATCH -N 2
#SBATCH -n 120
#SBATCH --ntasks-per-node=2
#SBATCH --cpus-per-task=30
#SBATCH -o log.%j
#SBATCH -e log.%j
#SBATCH --exclusive
#SBATCH -t 7-24:00

export OMP_NUM_THREADS=30      ##--cpus-per-task=30
module purge
module load compiler/intel/2017.5.239
module load mpi/intelmpi/2017.4.239
module load mathlib/netcdf/intel/4.4.1
#module load ...

export I_MPI_FABRICS=shm:dapl
export I_MPI_DAPL_UD=1
export I_MPI_DAPL_UD_RDMA_MIXED=1
export I_MPI_LARGE_SCALE_THRESHOLD=8192
export I_MPI_DAPL_UD_ACK_SEND_POOL_SIZE=8704
export I_MPI_DAPL_UD_ACK_RECV_POOL_SIZE=8704
export I_MPI_DAPL_UD_RNDV_EP_NUM=2
export DAPL_UCM_REP_TIME=8000
export DAPL_UCM_RTU_TIME=8000
export DAPL_UCM_RETRY=10
export DAPL_UCM_CQ_SIZE=2000
export DAPL_UCM_QP_SIZE=2000
export DAPL_UCM_DREQ_RETRY=4
export DAPL_UCM_DREP_TIME=200
export DAPL_UCM_WAIT_TIME=10000

scontrol show hostname > nd
NP=$(SLURM_NPROCS)
mpirun -np $NP -machinefile nd /path/to/app
```

指定作业名称  
指定作业队列  
指定作业申请的资源，包括节点数、进程数等  
指定作业输出日志  
设定申请节点独占  
设定作业运行时间  
通过OMP\_NUM\_THREADS变量设置单个进程发起的线程数  
通常情况这个值应该与cpus--per-task相同  
在模拟器环境中 ntask-per-node \* cpus-per-task 最大不超过64

加载或设置作业所需的环境变量

生成节点列表  
作业执行语句

作业脚本示例路径如下：

脚本路径	脚本说明
/public/software/run.slurm-serial	串行作业脚本
/public/software/run.slurm-intelmpi	基于 intel 编译器+intelmpi 并行作业脚本
/public/software/run.slurm-hpcx	基于 intel 编译器+hpcx 并行作业脚本
/public/software/run.slurm-openmp	基于 intel 编译器+intelmpi+openmp 作业脚本
/public/software/run.slurm-DCU	DCU 加速器脚本，绑定部分与 single_process.sh 使用
/public/software/single_process.sh	DCU 加速器卡绑定文件参考

注：以上示例脚本仅供参考，需要根据实际作业情况对相关参数或命令进行修改

## 6 其他相关使用事项

- 装置使用过程中遇到的环境与运行问题可以通过邮件发送到问题受理邮箱，我们会尽力

进行解答，请详细描述问题的内容，如问题现象、报错信息、作业 ID 等，并提供可供问题排查复现的作业脚本路径，以便进行问题的跟踪与解决。

- 如有数据拷贝需求，我们支持邮寄硬盘拷贝的方式（双向邮寄费用自付），请提前发邮件到问题受理邮箱说明情况。
- 统一问题受理邮箱：[earthlab-techsupport@mail.iap.ac.cn](mailto:earthlab-techsupport@mail.iap.ac.cn)