

北京市计算中心 工程类计算软件使用指南



目 录

1、登录平台	3
2、提交作业	3
2.1、通过 SSH 客户端提交作业	3
2.1.1、模型上传及结果下载	4
2.1.2、作业提交及监控	5
2.2、工程计算软件使用	6
2.2.1、 Abaqus	6
2.2.2、 ansys dyna	7
2.2.3、 ANSYS	7
2.2.4、 Fluent	8
2.2.5、 自行安装软件	9
附件一： vi 编辑器基本使用方法	11
附件二： Linux 常用操作命令	12

1、登录平台

首先安装 SSH 客户端。

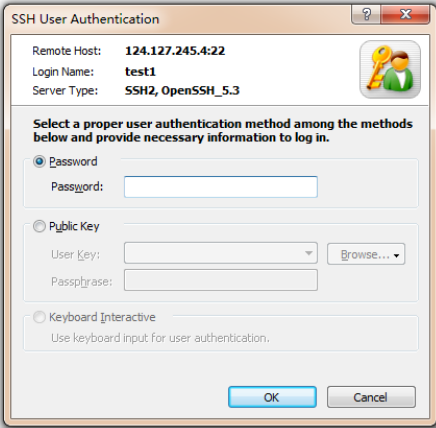
账号开通完成后，用户会得到云平台的用户名和密码。

登录到平台的 IP 地址是电信：124.127.245.4，联通：114.251.219.4，教育：42.247.5.149，根据用户本地情况，选择网络（如用户本地是电信网络，则选择电信地址）。以平台用户名 test1 为例，以 Xshell 作为登录客户端，在 Xshell 命令行提示符后输入如下命令：

```
Xshell for Xmanager Enterprise 4 (Build 0208)
Copyright (c) 2002-2012 NetSarang Computer, Inc. All rights reserved.

Type `help' to learn how to use Xshell prompt.
Xshell:\> ssh test1@124.127.245.4

Connecting to 124.127.245.4:22...
Connection established.
To escape to local shell, press 'Ctrl+Alt+J'.
█
```



The dialog box titled "SSH User Authentication" shows the following details: Remote Host: 124.127.245.4:22, Login Name: test1, Server Type: SSH2, OpenSSH_5.3. The "Password" method is selected, with an empty password field. Other methods like "Public Key" and "Keyboard Interactive" are also visible but not selected.

在弹出的窗口中输入平台密码，即可登录到平台，登录成功显示如下：

```
Xshell for Xmanager Enterprise 4 (Build 0208)
Copyright (c) 2002-2012 NetSarang Computer, Inc. All rights reserved.

Type `help' to learn how to use Xshell prompt.
Xshell:\> ssh test1@124.127.245.4

Connecting to 124.127.245.4:22...
Connection established.
To escape to local shell, press 'Ctrl+Alt+J']'.

Last login: Wed Jun  1 17:11:53 2016 from 192.168.105.53
[test1@login2 ~]$█
```

2、提交作业

2.1、通过 SSH 客户端提交作业

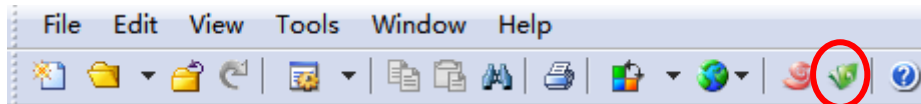
一个正常作业基本步骤如下：

- (1) 模型准备——用户准备模型数据文件；
- (2) 模型上传——通过 FTP 工具将模型数据文件和脚本文件上传至 FTP server；
- (3) 作业提交——通过 SSH 客户端登录北京工业云计算平台，提交作业；
- (4) 作业监控——通过 LSF 作业管理命令监控作业的执行情况；
- (5) 结果下载——计算完成后，利用 FTP 工具从 FTP Server 下载结果文件；
- (6) 自助式后处理——如果用户需要自助式后处理，可以另行定制。

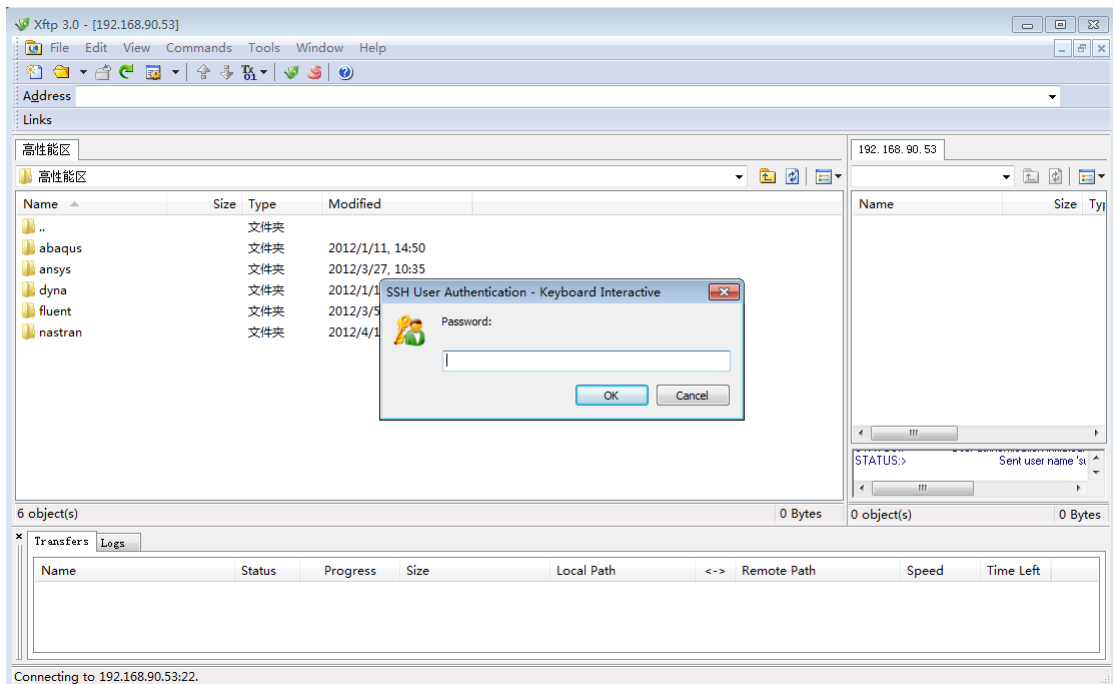
2.1.1、模型上传及结果下载

- (1) 通过 SSH 客户端登录到北京工业云平台
- (2) 上传及下载

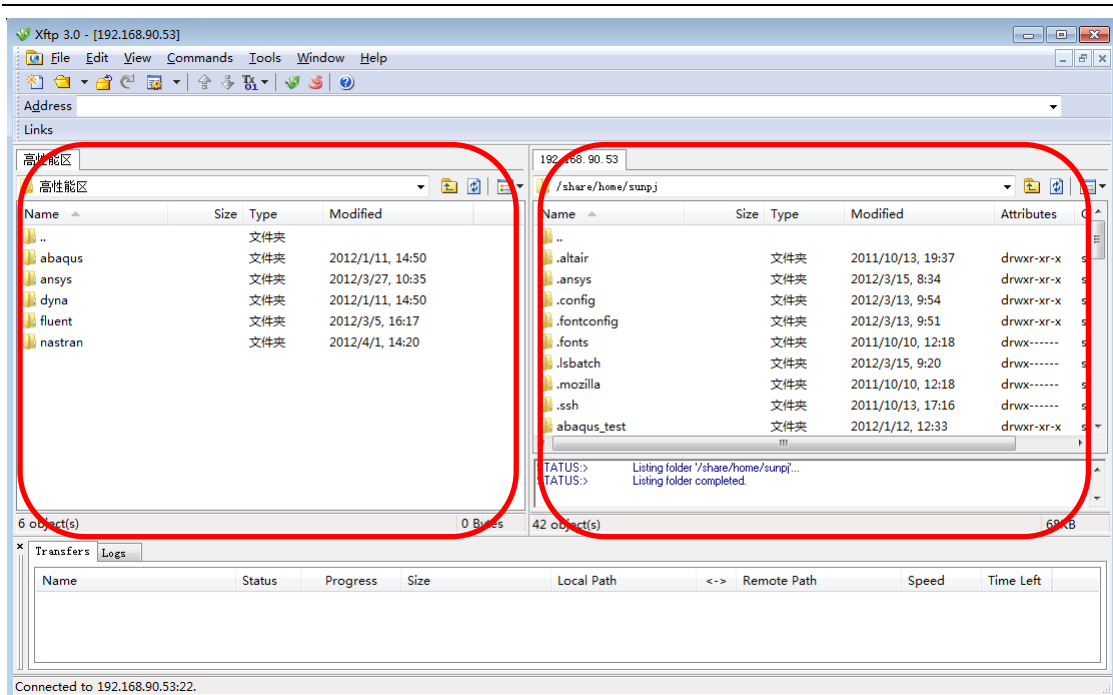
使用 Xftp 将本地机器上的计算模型数据文件上传至平台用户目录下。
在 Xshell 的菜单栏中点击 Xftp 快捷按钮，输入平台密码，进入 Xftp。



点击上图红色线圈中的图标后，弹出如下对话框：



在 password 中输入平台密码，登录 Xftp，如下图所示：



从左侧本地目录中找到将要上传的计算模型数据文件，按住左键不动拖至右侧平台上；下载结果则从右侧目录中找到将要下载的结果文件，按住左键不动拖至左侧本地目录中。

2.1.2、作业提交及监控

在 LSF 作业管理系统下，计算任务是通过脚本文件提交到工业云计算平台上的。脚本文件是一个常规文本文件，具有可执行权限，可以直接在登入节点通过 vi 编辑器编辑，也可异地编写，然后上传至用户目录下，但要注意用 *dos2unix* 文件名 命令转换一下格式。脚本文件名无特殊规定，起一个可以识别的名字即可。

脚本文件的基本格式如下：

脚本参数	含义
APP_NAME=XXX	指定计算任务所要进入的队列, 注意队列名称区分大小写。
NP=XX	计算所需全部 CPU 核数, 设置为 12 的倍数。
NP_PER_NODE=24	指定每个节点上分配给作业运行的 CPU 核数。 NP_PER_NODE 值设置为 24。
RUN= “XXX XXX”	执行软件的命令参数, 详细信息请参考 2.2 节内容。

以下是提交、监测作业的简单命令：

bsub 作业脚本名——提交作业

bsub -J jobname 作业脚本名——使用-J 选项指定作业名，否则作业名为脚

本名

bjobs——不加作业号可以查看所有正在执行和挂起的作业

bjobs -a——查看所有作业，包括已经结束的

bjobs 作业号——查看作业的具体信息

```
weiad@bcchpc:~> bjobs 115166
JOBID  USER  STAT  QUEUE  FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
115166  weiad  RUN   biology  bcchpc     12*blade115  lsb       Mar  8 17:16
                                     12*blade118
```

上图显示的信息依次是作业号、用户名、作业状态、队列名、提交作业的节点名、执行作业的节点、作业名、提交作业时间。

bjobs -l 作业号——查看作业的详细信息

bkill 作业号——杀死作业

busers username——查看用户能使用的最大核数

bpeek -f 作业号——只显示最近 10 行的标准输出

一个作业提交到队列后，将有可能为以下的几种状态之一：

状态	状态意义
PEND	任务在队列中排队等待
RUN	任务正在执行
PSUSP	任务在队列中排队等待时被用户挂起
SSUSP	任务被系统挂起
USUSP	任务被用户自行使用 <i>bstop</i> 命令挂起
DONE	作业正常结束
EXIT	作业退出

2.2、工程计算软件使用

2.2.1、Abaqus

step1: 编写脚本文件

进入相应目录，使用 *vi* 编辑器编辑作业提交脚本（*vi* 编辑器使用方法详见附件二）。

以输入文件 *s4b.inp*、CPU 核数 48 为例。首先进入 *vi* 编辑器，将脚本命名为 *abaqus.lsf*，作业脚本书写格式如下：

```
APP_NAME=abaqus  
NP=48  
NP_PER_NODE=24  
RUN="abaqus job=s4b"
```

若要调用 for 文件，在最后一行加上相应的参数，作业脚本书写为：

```
APP_NAME=abaqus  
NP=48  
NP_PER_NODE=24  
RUN="abaqus job=s4b user=for_file.f"
```

step2: 提交并查看作业

提交 abaqus 作业的命令：bsub abaqus.lsf。

使用 bjobs 命令查看作业运行状态。

使用 tail -f *.sta 监控作业运行情况。

使用 bkill 作业 ID 杀死作业。

2.2.2、 ansys dyna

step1: 编写脚本文件

进入相应目录，使用 vi 编辑器编辑作业提交脚本。

以输入文件 Combine.k、CPU 核数 24 为例。首先进入 vi 编辑器，将脚本命名为 dyna.lsf，作业脚本书写格式如下：

```
APP_NAME=dyna  
NP=24  
NP_PER_NODE=24  
RUN="lsdyna162 -i Combine.k -memory 200M"
```

step2: 提交并查看作业

提交 dyna 作业的命令：bsub dyna.lsf。

使用 bjobs 命令查看作业运行状态。

使用 tail -f dyna.log.txt 命令监测作业运行情况。

使用 bkill 作业 ID 杀死作业。

2.2.3、 ANSYS

step1: 编写脚本文件

进入相应目录，使用 vi 编辑器编辑作业提交脚本。

以输入文件 v13ln-1.dat、CPU 核数 24 为例。首先进入 vi 编辑器，将脚本命名为 ansys.lsf，脚本书写格式如下：

```
APP_NAME=ansys
NP=24
NP_PER_NODE=24
RUN="ansys140 -b -dis -i V13ln-1.dat -o ansys.out"
```

step2: 提交并查看作业

提交 ansys 作业的命令：bsub ansys.lsf。

使用 bjobs 命令查看作业运行状态。

注意：

1、输入文件名称区分大小写，例如 V13ln-1.dat 中的 V 一定要大写，否则提交的任务不能正常运算。

2、必须写入 NP_PER_NODE 参数，且该参数值是小于等于 12 的正整数。

2.2.4、Fluent

step1: 编写脚本文件

进入相应目录，首先编辑 journal 文件，然后编辑作业提交脚本。

稳态算例的 journal 文件

以输入文件 aircraft_2m、CPU 核数 24 为例，将 journal 文件命名为 fluent.jou，文件格式如下：

```
/file/rcd aircraft_2m
/solve/it 400
/file/wcd result
o
/exit
y
```

瞬态算例的 journal 文件

以输入文件 jobname、CPU 核数为 24 为例，将 journal 文件命名为 fluent.jou，文件格式如下：


```
/file/rcd jobname
/solve/set/time-step 0.01
/solve/dual-time-iterate
3000
20
/file/wcd result
o
/exit
y
```

编写完 journal 文件后编写作业提交脚本文件，稳态和瞬态算例的脚本文件内容相同，将脚本文件命名为 fluent.lsf，脚本文件格式如下：

```
APP_NAME=fluent
NP=96
NP_PER_NODE=24
RUN="fluent -r140 3d -g -i journal >fluent.log.txt -lsf"
```

注意：

1、最后一行参数 3d 表示使用 3d 单精度方式，若使用 3d 双精度请将参数 3d 改为 3ddp;选择使用 2d 单精度方式参数为 2d,2d 双精度为 2ddp。

step2: 提交并查看作业

提交 fluent 作业的命令：`bsub fluent.lsf`。

使用 `bjobs` 命令查看作业运行状态。

使用 `tail -f fluent.log.txt` 命令监测作业运行情况。

2.2.5、自行安装软件

step1: 安装软件

用户请在 home 目录下自建文件夹安装软件：

```
[test1@login2 ~]$pwd
/share/home/test1
```

需要输出的环境变量请在 .bashrc 文件中输出：

```
[test1@login2 ~]$pwd
/share/home/test1
[test1@login2 ~]$ll .bashrc
-rw-r--r-- 1 test1 test1 1130 May 31 10:12 .bashrc
```

step2: 提交作业

新建作业目录，上传计算文件。

先输出如下环境变量：

```
export LSF_FROM_WEB=Y
```

提交作业的命令格式为：

```
bsub -q 队列名 -n 核数 -o output.%J 软件命令
```

该环境变量输出后不支持 `bsub *lsf` 格式提交作业，需要退出重新登录才能使用 `bsub *lsf` 格式提交作业。

step3: 提交并查看作业

使用 `bjobs` 命令查看作业运行状态。

使用 `bkill 作业ID` 杀死作业。

以上为我中心在北京工业云计算平台上的使用说明，为提高计算效率，大模型请尽量选用 24 倍数的 `cpu` 核数进行求解。如果使用过程中遇到问题，请联系我们，我们将及时为您解决。

附件一：vi 编辑器基本使用方法

1、vi 的基本概念

vi 是 Linux 系统中最常用的编辑器，功能非常强大，通过使用 vi 编辑器可以对文本进行创建、查找、替换、删除、复制和粘贴等操作。

vi 编辑器有 3 种基本工作模式，分别是命令模式、插入模式和末行模式。在使用时，一般将末行模式也算入命令行模式。各模式的功能区分如下。

命令行模式：

控制屏幕光标的移动，字符、字或行的删除，移动、复制某区域及进入插入模式，或者到末行模式。

插入模式：

只有在插入模式下才可以做文字输入，按“ESC”键可回到命令行模式。

末行模式：

将文件保存或退出 vi 编辑器，也可以设置编辑环境，如寻找字符串、列出行号等。

2、vi 的基本操作

step1: 进入 vi 编辑器

在系统 shell 提示符下输入 vi 及文件名称后，就进入 vi 编辑画面。进入 vi 后，系统处于命令行模式，要切换到插入模式才能够输入文字。

step2: 切换至插入模式编辑文件

在命令行模式下按字母“i”就可以进入插入模式，这时候就可以开始输入文字了。

step3: 退出 vi 及保存文件

在命令行模式下，按冒号“:”可以进入末行模式。

输入“wq”，存盘并退出 vi。

输入“q”，不存盘并退出 vi。

输入“q!”，不存盘并强制退出 vi。

附件二：Linux 常用操作命令

1、显示工作目录路径：**pwd**

功能说明：显示当前用户所处的工作目录的绝对路径。

2、更改工作目录路径：**cd [目录名]**

功能说明：更改工作路径。

3、列出子目录和文件信息：**ls**

功能说明：对于目录，该命令将列出其中的所有子目录与文件信息；对于文件，该命令将输出其文件名以及所要求的其他信息。

语法：**ls [选项] [目录或文件]**

ls -a——查看所有文件，包括隐藏文件

ls -l——查看文件权限，不包括隐藏文件，也可以写成 **ll**

ll -h——可以显示文件大小

4、创建目录：**mkdir [目录名]**

功能说明：创建目录。

5、删除空目录：**rmdir [目录名]**

功能说明：删除空目录。

6、复制文件和目录：**cp [源文件或目录] [目标文件或目录]**

功能说明：复制文件和目录。

7、文件和目录改名：**mv [源文件或目录] [目标文件或目录]**

功能说明：文件和目录改名。

8、删除文件和目录：**rm**

功能说明：删除一个或多个文件和目录，对于链接文件，只是断开链接，源文件保持不变。

语法：**rm [文件名]**

rm -r/R [目录名]

9、显示文本文件：**cat [文件名]**

功能说明：显示文本文件内容。

10、回卷显示文本文件：**less [文件名]**

功能说明：回卷显示文本文件。

11、以 M 为单位显示当前目录中文件的大小：**du -h**