超算中心

提交bsub < 任务名 查看任务bjobs 查看路径 bjobs -l 删除任务 bkill

物理学院/超硬

提交 qsub 查看任务 qq或qstat 删除任务 qdel

脚本基本格式：

#!/bin/bash

#PBS -q CT1 节点名

#PBS -l nodes=1:ppn=12 核心数

#PBS -j oe

#PBS -V

#PBS -N QE-phonon 任务名

cd $PBS\_O\_WORKDIR

mpirun -np 12 /share/apps/compiler/QE/espresso-5.4.0/bin/ph.x <ph.in> ph.out

执行文件路径、输入输出文件

或者

$PH\_COMMAND < ph.in > ph.out

即格式为${命令名}\_COMMAND < 输入 > 输出

天津超算VPN密码

lwFT\_9nb34PG

列出:yhq

提交:tt ww yhbatch -p TH\_BM（不同队列

删除:qq

天津超算airss脚本:

如需要提交TH\_BM大内存队列，airss提交脚本内改为airss-BM.pl