**高性能计算平台上机流程**

**作业运行范例**

1. 测试用户：test
2. 测试程序：vasp
3. 测试目录：/share/home/test/1\_10\_H2Omd

 Ip:202.198.98.8

1. 作业提交节点：mgt003
2. 作业脚本名称：test.sh

#!/bin/sh

#BSUB -J XXXX作业名称

#BSUB -n 128 作业申请核数

#BSUB -qXXXX 作业使用队列

#BSUB -o hpl.out 作业输出文件

##for openmpi 1.10.1声明openmpi所在位置

export PATH=/share/apps/openmpi-1.10.1/bin/:$PATH

export LD\_LIBRARY\_PATH=/share/apps/openmpi-1.10.1/lib/:$LD\_LIBRARY\_PATH

for i in `seq 1 100`;do

mpirun -np 64 --mcabtlopenib,self /share/software\_tar/vasp.5.2/vasp ;

done

1. 作业提交：

在/share/home/test/1\_10\_H2Omd目录下，执行

bsub < test.sh

1. 作业查看：

