LSQC 软件集成使用说明

1、点击应用中心,搜索 LSQC,点击"申请使用"。

应用中心											- 0 >
应用分类 全部 超質云服务 应用云 工程 物理		全部 LSQC 日前使用								LSQC	Q
2、点击	"LSQC	〕图标"	,打开	应用集	成窗口,	再点击	告"提 交	作业"	0		
账号管理	Xshell		SSH		武士 风雷云	lepro_linu	Abinit				
侈 使	CESSARCEM STAR-CCM	COMSOL	Fluent 交互式 fluent	Gaussian Z	LoongSTA	RMC RMC	LSQC				
Putty	Fluent Fluent	СР2К	会员中心	openSees OpenSees	LoongSA	QFLOW Q-Flow	MaaS平台				
WinScp	VASP	Lammps	云服务客户 美清理工具		LoongCALF	VNC (3D)					
同 述演試	Materials	OpenFOAM	STAR- CCM+	ABACUS	2010年1月1日	мспрб					
应用中心	Gaussian	Autodyn Autodyn	ANSYS- Fluent	R	双签合同确 认	BigModel					
计费中心	CFX	ANSYS	Jupyter	STAR- CCM+		QQQ 科研助手 beta版					



3、选择软件版本(根据自己的算例类型选择合适的版本),设定单节点使用的进程数、节

	f放试用了,去试试?	试用专业版	不再把
)作业参数			
	作业名称 (firstMainFileN	lame)_(timestamp) 软件版本 3.0	~
(LSQC)	作业规模	3.0 20 sherin	
ALL R.	每个节点使用的进程数	4	
		超算中心	限制
		● 北京超级云计算中心T6分区 v6_384 43968 68448 0 N/A sch11386 ∨ 命	0
	详细参数		
	节点数 ①	1	v
	每个进程使用的cpu核数	24	
	时间上限(分)①		
)输入文件			洪海
	业选 [*.gjf] 可选 [可选文/	件史] 可选 问选其他文件]	ALL P

点数、每个进程使用的核数;接着点击"选择"上传输入文件。

4、进入文件查询页面,支持本地文件和远端文件(超算端)单个或多个同时上传。

1 作业列表	2 提交	× +	
本地文件 远端文件			
必选 [*.gjf]	> / > public5	> home > t6s001978 > test-minimum > test1-cim-mp2	~ 0
mp2.gjf ×	3 名称	◆ 最近修改 ◆ 文件大小 ◆ 扩展名 ◆	
可选 [可选文件夹]	🖉 📘 mp2.nif		
可选 [可选其他文件]	sub	6.32.39 1.32KB .sh	
	右击进	题"添加为输入文件"	
			精定返回

提示: 算例名字最好不要有空格, 否则会提交不了作业。

5、等待上传完成, 点击"提交"即可。

1 作业列表	2 提交	× +						\$	-		×
		 北京超级云计算中心T6分区 	v6_384 44	832 70752	0	N/A	t6s001978	6	0		
	详细参数										
	节点数 ①	1							V		
	每个进程使用的cpu核数	24									
	时间上限(分) ①										
② 输入文件											
	mp2.gjf							\bigcirc	取消	۲ų N	
③ 输出文件											
	远端输出目录 /public5/ho	me/t6s001978/jobs							更	X	
								,			_
A									Ë	詨	

6、提交后,进入作业运行查看画面,分为"详情模式"和"简洁模式",可查看作业运行状态, 输出文件和输出日志。

图片									
1 作业列表	+							© − 1	
提交作业	用户	₽	×取消作业	 ⑤ 重新提交 					
作业名称 Q	h2o_ccsd.gjf_20250313212841	LSQC	基本信息						1
图形化 ∨	ID: 23251851 核政: 96	RUN	作业名称:	h2o ccsd.gjf 2025031321	运行状态:	RUN	核败:	96	- 1
DD 详情模式 🛛 🖯 筒洁模式	提交: 2025-03-13 21:27:01	0:0:8	运行时长:	0:0:8	提交时间:	2025-03-13 21:27:01	开始时间:	2025-03-13 21:29:37	- 1
☑ 我的作业			结束时间:	N/A	队列:	v6_384	超算中心:	北京超级云计算中心T6分[z
 ・ ・ 运行状态 	nacl.gjf_20250312164653	LSQC	分配节点:	m3cm1507	超算账号:	t6s001978	用户:		e
PENDING	ID: 23233339 核数: 96	DONE	应用:	Isqc	作业编号:	23251851	卡数:	N/A	- 1
RUN	提交: 2025-03-12 16:45:08	0:6:33	备注:	N/A					- 1
DONE			作业信息	资源监控					
FAIL	wat.gjf_20250312164319	LSQC	输出文件	上 文件名		Q 输出日志 slurm-2325	1851.out	×	0
CANCEL	ID: 23233302 核数: 96	DONE	« jobs > h2o	_ccsd.gjf_20250313212841 > outp	out 🗸		> t5:001070 - j:	ha ha contai 2025031.	
UNKNOWN	提交: 2025-03-12 16:43:04	0:8:39	○ 名称	\$ 最近修改	♦ 文件大小	<pre></pre>	ot overwrite d ccsd	irectory	61
	h2o_ccsd.gjf_20250312164141	LSQC	□ □ h2o_cc	sd.gjf 2025-03-13 21:28:59	5 89	Input file: h2	o_ccsd.gjf		
	ID: 23233291 核数: 96	DONE	🕑 📃 slurm-	23251851 2025-03-13 21:29:4	2 8	35B			. .
	提交: 2025-03-12 16:41:30	0:0:27							
	cc.gjf_20250312164030	LSQC							
	ID: 23233280 核数: 96	DONE							
	提交: 2025-03-12 16:39:50	0:0:11							.
回收站 >	< 1 >								
			$\leftarrow \ \rightarrow$	@ @ ⊡ ் ⊻				a ^g	(E)