高性能计算平台 CPU1 队列 使用手册

南京航空航天大学高性能计算中心

2024年7月

1	平台	资源概述	1
	1.1	CPU1/GPU 队列	1
	1.2	应用软件资源	1
2	快速	入门	2
3	登录	队列和文件上传下载	3
	3.1	Windows 系统登录	3
	3.2	Linux/Mac 系统登录	8
	3.3	图形化节点登录	8
	3.4	校外用户登录 VPN1	1
	3.5	Windows 系统文件上传下载1	1
	3.6	类 Unix 系统文件上传下载1	3
4	提交	作业1	4
	Sluri	m 作业调度系统使用说明1	4
	4.1	sbatch 提交作业1	5
	4.2	salloc 交互式运行作业1	7
	4.3	sinfo 查看资源空闲状态1	7
	4.4	squeue/sq 查看作业队列1	8
	4.5	scancel 取消作业1	9
5	常见	问题及注意事项2	0
	5.1	Xshell 工具在哪下载?	0
	5.2	我想用的计算软件没有怎么办?2	0
	5.3	我要用的计算软件作业脚本不会写怎么办?2	0
	5.4	提交作业报错如下错误2	0
	5.5	作业没有运行,并且显示 QOSGrpCpuLimit2	,0
	5.6	怎么修改账号密码2	0

目录

1 平台资源概述

南京航空航天大学高性能计算平台(以下简称平台)是依托工信部十三五信 息化专项--南京航空航天大学智慧校园建设的校级科学仪器公共平台,平台包含 了 CPU0 队列(部署于云平台)、CPU1 队列(部署于平台一期)、CPU2 队列 (部署于平台二期)、GPU 队列(部署于平台一期)、GPU 人工智能队列(部 署于 AI-GPU 平台)五部分,可提供 CPU 计算和 GPU 计算所需资源。

1.1 CPU1/GPU队列

高性能计算平台 CPU1/GPU 队列硬件资源如下表所示,用户需要根据算例 情况和计算需求从计算资源中选取合适的队列,确定 CPU 核数或 GPU 卡数等参 数编写脚本才能提交作业。

队列名	CPU 类型	GPU 类型	内存	节点数
cpu	2 颗 Intel Xeon Cascade Lake Gold 6248, 2.5GHz, 20 核	/	192G	62

表 1 CPU1 队列配置

表 2 存储配置

型号	主要规格	套数
	硬盘 334*6T HDD 2*800G SSD	
联想 DSS-G	千兆网口 8*10G	1
	IB网口 8*100GB InfiniBand 端口	
存储	容量合计: 2PB 读写带宽 20GB/s	

1.2 应用软件资源

平台上已经安装常用应用软件,所在目录为/fs0/software,用户可进入该目录 查看可用软件,编译或运行程序需设置正确的环境变量。

2 快速入门

本章让用户快速掌握如何使用高性能计算平台 CPU1 队列提交作业。

用户在获取上机账号后,Linux/Mac用户可直接使用系统通过ssh命令:ssh 用户名@sc.nuaa.edu.cn 登录队列,Windows 用户则可以通过ssh 客户端(例如 Xshell)登录队列(注意,队列首次登录详细步骤见第3章),为了方便文件传 输,可同时下载并安装 Xftp,安装完后点击软件左上角新建连接,输入 IP 和用 户名密码即可登录。

登录队列后,编写作业脚本,并通过 sbatch 指令将作业提交到计算节点上执行;此外,队列上安装了常见的计算软件,通过 module 指令导入计算环境。假设我们的计算过程为:在计算节点上运行 hostname 指令,那么就可以这么编写作业脚本:

#!/bin/bash
#SBATCH -J test
#SBATCH -p cpu
#SBATCH -n 40
#SBATCHerror=%J.err
#SBATCHoutput=%J.out
Hostname

假设上面作业脚本的文件名为 job.sh, 通过以下命令提交:

sbatch job.sh

队列安装了常见的计算软件,可以通过 module 指令导入计算环境;

可以通过 module 加载平台上装有的软件环境,也可以自行安装配置需要的计算环境,下面的作业脚本加载了 intel/2017u5 的软件环境,具体可用的软件环境可使用命令 module avail 指令进行查看。

#!/bin/bash
#SBATCH -J test
#SBATCH -p cpu
#SBATCH -n 40
#SBATCHerror=%J.err
#SBATCHoutput=%J.out
module purge
module load intel /2017u5

3 登录队列和文件上传下载

3.1 Windows 系统登录

(1) 登录方式 1: 直接用命令行 ssh 登录

以Xshell 远程登录工具为例,输入命令: ssh user_name@sc.nuaa.edu.cn,回 车。user_name 为用户平台账号,弹出用户身份验证框后输入用户密码,用户密 码由管理员开户时发送至用户邮箱,注意平台账号字母均为小写字母。如图1所示:

[D:₩~]\$ ssh 70205994@sc.nuaa.edu.cn							
Host 'sc.nuaa.edu.cn' resolved t Connecting to 211.65.101.76:22 Connection established. To escape to local shell, press Connection closingSocket clos	SH用户身份验证 过程主机: 登录名: 服务器关型: 请在下面选择恰当的身份验证	sc.nuaa.edu.cn:22 (%default%) 70205994 SSH2, TERM-SSHD 方法井提供登录所需的信息。	? *				
Connection closed by foreign hos	 Password(P) 密码(W): 						
Disconnected from remote host(sc Type `help' to learn how to use [D:₩~]\$ ssh 70205994@sc.nuaa.edu	Public Key(U) 用户密钥(L): 密码(L):	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	浏览(8)				
Host 'sc.nuaa.edu.cn' resolved t Connecting to 211.65.101.76:22 Connection established. To escape to local shell, press Server closed connection. Please	 Keyboard Interactive() 使用键盘缩入用户身份验 	证。 确定	取消				

图 1 远程登录

如遇下述情况需要保留主机秘钥,选择"接受并保存",如图2所示:



图 2 接收秘钥

如下图 3 所示表示登录成功:

[D:₩~]\$ ssh 70205994@sc.nuaa.edu.cn
Host 'sc.nuaa.edu.cn' resolved to 211.65.101.76. Connecting to 211.65.101.76:22 Connection established. To escape to local shell, press 'Ctrl+Alt+]'.

欢迎使用南京航空航天大学高性能计算集群
Connecting to self@登录节点(10.12.5.12) ≽st login: Sat Jun 27 12:23:04 2020 from 10.12.5.16 [70205994@login ~]\$ [

图 3 登录成功

(2)登录方式 2: 新建连接, 输入主机名后登录

1) 进入 Xshell,点击新建连接图标(如图4所示),或者点击文件 -> 新建(如图5所示)。



图 4 新建连接

9	Xshell 6			-			×
Ż	:(件(F) \$	编辑(E) 查看(V) 工具(T) 选项卡(B) 窗口(W) 帮助(H)				
	. 新建(N	N) Alt+N] • • • · /] • · • • 10 12 14 14 14 14 14 14 14 14 14 14 14 14 14				
	打开(0	D) Alt+O					
	5 断开(0	D) Alt+C	я. Я.				
4) 重新连	i接(C) Ctrl+Shift+R	thttpshell × ■				
20	重新连	ē报所有(L)			-		
E	另存为	∋(A)	nell 6 (Build 0095)				
	导入())	pyright (c) 2002 NetSarang Computer, Inc. All rights reserved.				
	49-LL(C	-)	ne `help' to learn how to use Yshell prompt				
-	1 打印(P +TCDZ2	P)	the left to reach now to use Asherr prompt:				
	71009 页面设	23(V) }≣(U)	• • • • • •				
	(http://	D					
	日志(0	3)	• •				
	、 屋件(F	R) Alt+P					
	湯出の	ο					
所有	会话属性						
名称		值					
名称		所有会活					
天空	E	6					
							~
创建	新会话。		xterm I* 75x2E 巡.5,9 1 会活	+	+ (CAP NU	м.,

图 5 文件-连接

在弹出的新建连接对话框中输入名称,如 C1,在主机中输入 sc.nuaa.edu.cn,端口号输入 22,点击确定。

阴nuaatest1测试属性					?	2
矧(C):						
连接	连接					
□ 用户身份验证 登录提示符 登录提示符 登录脚本 ○ SSH 安全性 ◎ KTP TELNET RLOGIN SERIAL 代理	常规 名称(N): 协议(P): 主机(H): 端口号(O): 说明(D):	SSH sc.nua 22	a.edu.cn	~		
 株式 は し し<td>重新连接</td><td>B时自动重新 0</td><td>连接(A)</td><td>▼ 限制(L): 0</td><td><u>*</u> 分钟</td><td>2</td>	重新连接	B时自动重新 0	连接(A)	▼ 限制(L): 0	<u>*</u> 分钟	2
跟踪 钟 日志记录 文件传输 X/YMODEM ZMODEM	TCP选项 使用Nagle銷	ī法(U)				
			连接	确定	取消	

图 6 新建会话属性

在左侧会话管理器中双击 C1, 如图 7。



图 7 选择会话

输入用户名和密码,即为平台账户密码,如图8、9所示:

🕑 C1 - Xshell 6						_		\times
文件(F) 编辑(E) 查看(V) 工具(T) 选项卡(B) 窗口(W) 幕	5助(H)						
🗖 🖻 • % % 🖪 • Q	📫 • 🔵 • 🦽 • 🔮 🖬	a 🔯 🔒 🖮 🥒 🕯	🖸 • 🔳 • 🛛 😨 📮	0				
ssh://36.22.184.197:65091								•
▶ 要添加当前会话,点击左侧的箭头								
会话管理器 # ×	• <u>1</u> C1 × +						()	
G 所有会活 G G G G G G G G G	Xshell 6 (Buil Copyright (c) Type `help' to [D:\~]\$ SSH用户 Connectir 远程主切 Connectic 服务器块 To escape 書稿入程 口记住邦	Ld 0095) 2002 NetSar o learn how 室 記: 36.22.184.10 団(日本) (日本) (日本) (日本) (日本) (日本) (日本) (日本)	rang Comput to use Xsh 97:55091 (C1) 55H_7.4	eer, Inc. All nell prompt. ※ ②]'. 取消	l rights n	reser	ved.	~
C1 唐性								
								~
ssh://36.22.184.197:65091				xterm 1° 65x	24 9.10,1 1 会读	£ ++	CAP NU	M

图 8 输入用户名

SSH用户身份验证			? ×	
远程主机: 登录名: 服务器类型:	sc.nuaa.edu.cn:22 (新建会话) 82220073 SSH2, TERM-SSHD		23	
请在下面选择恰当的身份验证	方法并提供登录所需的信息。			
• Password(P)				
密码(W):				
O Public Key(U)				
用户密钥(K):		~	浏览(B)	
密码(H):				
○ Keyboard Interactive(I)				
使用键盘输入用户身份验证	E.			
□ 记住密码(R)				
	确定		取消	

图 9 输入密码

3.2 Linux/Mac 系统登录

注意:因不同发行版(包括 Mac/CentOS/Ubuntu 等)命令行的差异,下述的-p参数可能是-P,或其他可能的参数,请自行确定后再次尝试。

Mac/CentOS/Ubuntu 等系统,命令: ssh user_name@sc.nuaa.edu.cn,回车。 密码由用户第一次登录平台时设置。详细操作代码如图 10 所示:



图 10 Linux/max 系统登录命令

3.3 图形化节点登录

注: CPU1 队列无法提交图形化作业,队列提供一台图形节点仅限于数据前 后处理,不要进行计算。

打开浏览器,在地址栏中输入 https://sc.nuaa.edu.cn,输入账号和密码,账户 密码即为管理员开户时发送至用户邮箱的账户密码。



图 11 堡垒机登录界面

点击访问资产,如图12:

南京航空航天大學	工作台 🐕	用户	资产	权限	工单	

图 12 访问资产

启动图形化,如图13:

南京航空航天大學	工作台 27 用户 资产 权限 二	ΣŴ				🛔 воот		٩
5	Linux 9.898 • Q	更产名称非个就要说明"运统称号						
访问资产	· 元产名称 :	表"P ÷	同责记的 ¢	快捷登录	石橋会店	8920	810	1
Linux	00800	10.12.5.8		xdmcp root	委向	V)同•	☆	
	□ ▲ 国用化处理节点	10.12.1.60		xdmcp Foot 25+	動利 sh xdmcp sftp	以同・	\$	
	□ ▲ 國形化市点	10.12.6.25	图形化登录节点	xdmcp root 200 -	系itw号· 「tef (現用产版)	8) -	☆	
	۵۳% <u>۵</u>	10.12.5.30	100万点	> ssh root ⊞≉∽		CR (R0)	☆	
	▲ 25 0/4 <u>地里</u> 南政					0 4527	50 • C 1	1

图 13 启动图形化

登陆图形化桌面,如图 14:

Cancel	Other chwj_shrx Log in	用户名 静态密码	
			7 CENTOS

图 14 登录图形化桌面

启动命令行终端,如图15:



图 15 启动命令行终端

Applications	Fluent Launcher 2020 R1 III Terminal - root@cu60:~			展开	17:15 root
	Terminal - root⊚cu60: -	e _ n x			
File Edit View	r Terminal Tabs Help				
[root@cu60 ~ 15 0 7/ 17 1]# /fs0/software/ansys/				
[root@cu60 ~]# /fs0/software/ansys/20.1/v201/fluent/b	in/fluent			
/fs0/softwar	e/ansys/20.1/v201/fluent/fluent20.1.0/bin	/fluent -r20.1.0			
	0.	Fluent Lau	ncher 2020 R1	0.50	
	Flue	ent Launcher		ANSYS	
	Mest	Simulate a wide rang	e of industrial app issing capabilities	ilications using the general-purpose setup, of ANSYS Fluent.	
	and the second se	Get Started With		Dimension	
	Solu	ition (Case)(Case and Data) O 2D	
	Icing	(Mesh)	journal) • 3D	
		Recent Files		Options	
				O Display Meth After Reading	
		11/100		O Load ACT	
		Villa.		Start Server	
				Parallel (Local Machine)	
				Solver Processes 1	
04		100		Solver GPGPUs per Machine 0	
				· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
	× sh	ow More Options Y Show Learning Besour			
		Start Res	et Cancel	Help	
				🔞 Q 🚞	
			and the second se		

启动应用(以 fluent20 为例),如图 16:

图 16 启动应用

3.4 校外用户登录 VPN

校外用户打开浏览器,在地址栏中输入 <u>https://v.nuaa.edu.cn</u>



图 17 校外访问 VPN



输入用户名和密码点击登录,如下图所示登录成功:

图 18 登录成功

3.5 Windows 系统文件上传下载

Windows 系统文件上传/下载需先参照 3.1 节的步骤通过 Xshell 远程登录软件使用 ssh 登录集群的登录节点, ssh 登录成功后点击 Xshell 工具栏中的"新建文件传输"图标,在提示窗口输入密码。在 Xftp 登录成功后即可用拖拽的方式从左侧本地电脑窗口将所需要上传的文件拖拽至右侧代表集群空间的窗口从而实现文件的上传。如需从集群空间下载文件,则请反向操作。如下图所示:



图 19 文件下载

注意:

1)集群使用 Xshell 登入可能会出现因动态验证码时效性问题,如果输入密码并键入回车键后依然没有能够登录,请再次输入密码,如此尝试 3-5 次。

2) 如果出现大文件上传失败请联系工程师以协助定位并解决问题。

sc.nuaa.edu.cn:22 - Xf	tp 6	-							
文件(F) 编辑(E) 查看	i(V) 命令(C)	工具(T) 番	印(W) 帮助(H)						
📮 🖿 = % %			= 🏐 🖺 🌑 - 🕑 I	os 🎄 🕗 🚍					-
Sftp://sc.nuaa.edu.cr	n					• 70205994		密码	
• 卓面 ×				< →	sc.nuaa.edu.cn:22 ×				
←・→・■ 貞而				- + • 🕅 (•	← · → · ▶ /fs0/ho	mo/70205994			🖪 😯
2称	大小	米刑	修改时间		2称	Jile/ 10203334	大小	米刑	修改时间
▲ 家 府 组	7.1.	系	IS RUN IN				7.1.	天王	IS LOCK J [4]
二 定		系							
◎控制面板		系							
●阿络		系							
■计算机		系							
B Liujia		系	2020-6-6,						
■推导		文件夹	2020-1-27,						
◎ 受削度复	170	快	2018-10-25						
DELMIA VSR21	1 KB	伏	2017-9-18,						
ReferenceFX	108	Win	2017 5 18,						
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	16KB	Mic	2020-6-22						
■新建 文本	936	文	2020-6-24,						
■项目计划	9KB	Mic	2020-6-27,						
						III			F
传输 日志									
名称	状态	5	进度 大小	本地路径	<-> 远程路径	速度	估计剩余	经过时间	
已连接 sc.nuaa.edu.cn:22。							性制 0 对象a		0 Bytes

图 20 文件下载

sc.nuaa.edu.cn:22 - Xf	tp 6							_ 0 %
文件(F) 编辑(E) 音素	' {(V) 命令(C)	工具の一番	1□(W) 報助(H)		100			
🗖 📂 - 1 9% 9% 1		IRRI	⇒ @ [b] @ - @ [
					- 7020599	4	क्रम्य	•
sitp://sciluaa.euu.cr					. 102033			
● 桌面 ×				< >	• sc.nuaa.edu.cn:22 ×			
◆ • → • ■ 桌面				🗕 🔹 🕈 🔽 🕞	+ + /fs0/home/test2			🚽 🕸 • 🕅 🔿
名称	大小	类型	修改时间		名称 ^	大小	类型	修改时间 ^
 ● 家庭组 ◎ 库 ◎ 厚控制面板 ● 网络 ● 计算机 ⑧ Liujia ◎ 推导 ◎ 变刚度复 圖 CATIA P3 圖 DELMIA V5R21 圖 ReferenceFX ● 前廠航江苏 ● 新建 文本 ● 町 ● 町 ● 四 	1KB 1KB 108 16KB 936 9KB	然系系系系系文快快快Win、	2020-6-6, 2020-1-27, 2018-10-25 2017-9-18, 2017-9-18, 2020-6-22, 2020-6-24, 2020-6-27,		New Folder per15 3643. err 3643. out cleanup-fluent-cu12-1891 fluent-1-03400. dat fluent-1. cas fluent-2-05000. dat fluent-2. cas fluent-3-06000. dat fluent-3. cas fluent-density-test. cas fluent-density-test. dat fluent-shuntai-test. dat fluent. cas fluent. cas fluent. sh fluent. sh fluent. sh	69 Bytes 339KB 7KB 189.47MB 62.60MB 189.47MB 62.60MB 189.47MB 62.60MB 62.60MB 189.50MB 151.49MB 62.59MB 285 Bytes	文件夹 文件夹 钳 OUT SH DAT CAS DAT CAS DAT CAS DAT CAS DAT CAS SH	2020-6-26 2020-6-27 2020-6-27 2020-6-27 2020-6-26 2020-6-26 2020-6-26 2020-6-26 2020-6-26 2020-6-26 2020-6-26 2020-6-26 2020-6-26 2020-6-27 2020-6-27 2020-6-27
名称	状态	5	进度 大小	本地路径	<-> 远程路径 速	夏 估计剩余	k 经过时间	
已连接 sc.nuaa.edu.cn:22。						二进制 23 对象		1.65GB

图 21 文件下载

3.6 类 Unix 系统文件上传下载

针对 Mac/CentOS/Ubuntu 等发行版的 Linux 系统,如果用户已安装了对应系统的 Xshell 软件则参照 3.2 节中的步骤。如果没有,则需要使用命令行的方式进行文件传输。命令为: sftp username/10.12.1.64/self@sc.nuaa.edu.cn 回车,输入密码。如图所示:



图 22 类 Unix 文件下载

sftp 登录后的命令行中可以使用部分当前 Linux 系统所提供的部分命令(如 ls/cd 等命令),通过输入问号(?)获取 sftp 命令行界面所支持的所有命令。如图 所示:

rest@rustemt			rest@sustemtan_	
Toolgisystemi	ah		roor@systemap.~	~ <u>~</u> •
sttp> ?				
Available commands:				
bye	Quit sftp			
cd path	Change remote directory t	o 'path'		
chgrp grp path	Change group of file 'pat	h' to 'grp'		
chmod mode path	Change permissions of fil	e 'path' to 'mode'		
chown own path	Change owner of file 'pat	h' to 'own'		
df [-hi] [path]	Display statistics for cu	rrent directory or		
	filesystem containing 'pa	th'		
exit	Quit sftp			
get [-afPpRr] remote [local]	Download file			
reget [-fPpRr] remote [local]	Resume download file			
reput [-fPpRr] [local] remote	Resume upload file			
help	Display this help text			
lcd path	Change local directory to	'path'		
lls [ls-options [path]]	Display local directory l	isting		
lmkdir path	Create local directory			
ln [-s] oldpath newpath	Link remote file (-s for	symlink)		
lpwd	Print local working direc	tory		
ls [-1afhlnrSt] [path]	Display remote directory	listing		
lumask umask	Set local umask to 'umask	1		
mkdir path	Create remote directory			
progress	Toggle display of progres	s meter		

图 23 命令汇总

上传下载命令如下:

从本地电脑上传文件到集群空间:

#上传单个文件:sftp> put /opt/testfile #上传文件夹:sftp> put -r /opt/testdir	
从集群空间下载文件到本地电脑:	
#下载单个文件: sftp> get /data/home/zhouhao/testfile #下載文件来: sftp> get r /data/home/zhouhao/testfile	

4 提交作业

Slurm 作业调度系统使用说明

CPU1 队列使用 Slurm 作业调度系统管理所有计算作业,该系统接受用户的 作业请求,并将作业合理的分配到合适的节点上运行。下图为用户提交作业的示 意图:



图 24 提交作业示意图

本节将介绍运行作业的两种方式,一种是将计算过程写成脚本,通过 sbatch 指令提交到计算节点执行,另一种是通过 salloc 申请到计算节点,再 ssh 连接到

计算节点进行计算本节还将介绍如何 sinfo、squeue、scancel 等命令具体操作。

4.1 sbatch 提交作业

注意:本文命令中所有 "cpu" 均代表 CPU1 队列, "gpu4"、 "gpu8" 分 别代表 GPU 节点的 4 卡、8 卡 GPU 队列。

用户使用 sbatch 命令向作业调度系统提交作业, sbatch 可用参数十分丰富, 可对作业进行非常细致的控制,这里简要介绍常用参数和方法。

运行作业的第一种方式是将整个计算过程,写到脚本中,通过 sbatch 指令提 交到计算节点上执行。首先介绍一个简单的例子,假设我们的计算过程为,在计 算节点上运行 hostname 指令,那么就可以如下编写作业脚本:

#!/bin/bash
#!/bin/bash
#SBATCH -J test
#SBATCH -p cpu
#SBATCH -n 64
#SBATCHerror=%J.err
#SBATCHoutput=%J.out
hostname

假设上面作业脚本的文件名为 job.sh, 通过以下命令提交:

sbatch job.sh

随后我们介绍脚本中涉及的参数:

-J test # 作业在调度系统中的作业名为 test;

-p cpu # 作业提交的指定分区为 cpu

-n 64 # 这个作业使用 64 核运行,如果程序不支持多线程(如 openmp),这个数不应 该超过 1;

--error=%J.err # 脚本执行的错误输出将被保存在当%j.err 文件下,%j表示作业号; --output=%J.ou # 脚本执行的输出将被保存在当%j.out 文件下,%j表示作业号;

除此之外,还有一些常见的参数:

```
--help #显示帮助信息;
-D, --chdir=<directory> #指定工作目录;
--get-user-env #获取当前的环境变量;
--gres=<list> #使用 gpu 这类资源,如申请两块 gpu 则--gres=gpu:2
-J, --job-name=<jobname> #指定该作业的作业名;
--mail-type=<type> #指定状态发生时,发送邮件通知,有效种类为(NONE,
BEGIN, END, FAIL, REQUEUE, ALL);
--mail-user=<user> #发送给指定邮箱;
-n, --ntasks=<number> #sbatch并不会执行任务,当需要申请相应的资源来运行
脚本,默认情况下一个任务一个核心, --cpus-per-task 参数可以修改该默认值;
-c, --cpus-per-task=<ncpus> #每个任务所需要的核心数,默认为1;
```



接下来是一个 GPU 作业的例子, 假设我们想要申请一块 GPU 卡, 并通过指令 nvidia-smi 来查看申请到 GPU 卡的信息, 那么可以这么编写作业脚本:



脚本中的一些参数说明如下

#SBATCH --gres=gpu:1

最后是一个跨节点多核心的例子,假设我们想用两个节点,每个节点 40 个核心来运行 vasp,那么可以这么编写作业脚本:

每个节点上申请一块 GPU 卡

#!/bin/bash
#SBATCH -J test
#SBATCH -p cpu
#SBATCH -N 2
#SBATCHntasks-per-node=40
#SBATCHerror=%J.err
#SBATCHoutput=%J.out
导入 MPI 运行环境
module load intel/2017u5
导入 VASP 运行环境
module load vasp/5.4.4
执行 VASP 并行计算程序
mpirun -n 80 vasp_std
scontrol show job \$SLURM_JOBID

4.2 salloc 交互式运行作业

运行作业的第二种方式是通过 salloc 交互式运行作业,首先需要申请计算 节点,然后登录到申请到的计算节点上运行指令。salloc 的参数与 sbatch 相 同,以下提供申请一个节点 6 个核心,并跳转到该节点上运行程序示例:

	salloc -p cpu -N1 -n6
	# salloc 申请成功后会返回申请到的节点和作业 ID 等信息, 假设申请到的是 cu01 节
点,	作业 ID 为 1078858
	ssh cu01 # 直接登录到刚刚申请到的节点 cu01 调式作业
	scancel 1078858 # 计算资源使用完后取消作业
	squeue -j 1078858 # 查看作业是否还在运行,确保作业已经退出,避免产生不必要的
费丿	₹

随后是一个 GPU 节点的使用案例;

申请一个 GPU 节点, 6 个核心, 1 块 GPU 卡, 并跳转到节点上运行程序;

```
salloc -p gpu4 -N1 -n6 --gres=gpu:4
  # 假设申请成功后返回的作业号为 1078858, 申请到的节点是 gpu05
  ssh gpu05 # 登录到 gpu05 上调式作业
  scancel 1078858 # 计算结束后结束任务
  squeue -j 1078858 # 确保作业已经退出
   最后介绍一个跨节点使用案例:
   申请两个节点,每个节点12个核心
  salloc -p cpu -N2 --ntasks-per-node=80
  # salloc 申请成功后会返回申请到的节点和作业 ID 等信息, 假设申请到的是
a8u03n[05-06]节点,作业 ID 为 1078858
  # 这里申请两个节点,每个节点12个进程,每个进程一个核心
  # 根据需求导入 MPI 环境
  module load intel/2017u5
  # 根据以下命令生成 MPI 需要的 machine file
  srun hostname -s | sort -n > slurm.hosts
  mpirun -np 80 -machinefile slurm.hosts hostname
  # 结束后退出或者结束任务
  scancel 1078858
```

4.3 sinfo 查看资源空闲状态

sinfo 可查询各分区节点的空闲状态, 输入 sinfo 命令, 返回状态显示 idel

为空闲, mix 为节点部分核心可以使用, alloc 为已被占用, maint 为维护中, 如下所示:

[root@cu60	0~]# s	info			
PARTITION	AVAIL	TIMELIMIT	NODES	STATE	NODELIST
cpu*	up	infinite	2	maint	cu[02,60]
cpu*	up	infinite	3	mix	cu[01,03,62]
cpu*	up	infinite	7	alloc	cu[04,17-21,61]
cpu*	up	infinite	50	idle	cu[05-16,22-59]
gpu4	up	infinite	1	mix\$	gpu07
gpu4	up	infinite	1	alloc\$	gpu04
gpu4	up	infinite	1	maint	gpu08

sinfo 的一些常用参数:

help # 显示 sinfo 命令的使用帮助信息;
-d # 查看集群中没有响应的节点;
-i <seconds> # 每隔相应的秒数,对输出的分区节点信息进行刷新</seconds>
-n <name_list> # 显示指定节点的信息,如果指定多个节点的话用逗号隔开;</name_list>
-N # 按每个节点一行的格式来显示信息;
-p # <partition> 显示指定分区的信息,如果指定多个分区的话用逗号隔开;</partition>
-r # 只显示响应的节点;
-R #显示节点不正常工作的原因;

4.4 squeue/sq 查看作业队列

用户可以通过 squeue 或 sq 命令查看提交作业的排队情况,如下所示输入 sq 命令:

sq

默认情况下 squeue 或 sq 输出的内容如下,分别是作业号,分区,作业 名,用户,作业状态,运行时间,节点数量,运行节点(如果还在排队则显示 排队原因)。

JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)

squeue 的常见参数:

--help #显示 squeue 命令的使用帮助信息;
-A <account_list> #显示指定账户下所有用户的作业,如果是多个账户的话用 逗号隔开;
-i <seconds> #每隔相应的秒数,对输出的作业信息进行刷新
-j <job_id_list> #显示指定作业号作业信息,如果是多个作业号的话用逗号隔开;
-n <name_list> #显示指定节点上作业信息,如果指定多个节点的话用逗号隔开;
-t <state_list> #显示指定状态的作业信息,如果指定多个状态的话用逗号隔开;
-u <user_list> #显示指定用户的作业信息,如果是多个用户的话用逗号隔开;
-w <hostlist> #显示指定节点上运行的作业,如果是多个节点的话用逗号隔开;

4.5 scancel 取消作业

用户可以通过 scancel 命令取消账号中已提交的作业,如下所示:

	#	取消作业	ID 为	123	的作业	
--	---	------	------	-----	-----	--

scancel 123

也可通过 scancel 命令取消自己账号上所有作业:

注意 whoami 前后不是单引号

scancel -u user_name

scancel 常见参数:

	help	#显示 scancel 命令的使用帮助信息;
	-A <account></account>	# 取消指定账户的作业,如果没有指定 job_id,将取消所
有;		
	-n <job_name></job_name>	# 取消指定作业名的作业;
	<pre>-p <partition_name> #</partition_name></pre>	取消指定分区的作业;
	-q <qos></qos>	# 取消指定 qos 的作业;
	-t <job_state_name> #</job_state_name>	取消指定作态的作业, "PENDING", "RUNNING" 或
"SU	SPENDED";	
	-u <user_name></user_name>	# 取消指定用户下的作业;

5 常见问题及注意事项

5.1 Xshell 工具在哪下载?

答:可以通过 Xshell 官方网站申请免费版 Xshell,具体申请地址如下: https://www.xshell.com/zh/free-for-home-school/

5.2 我想用的计算软件没有怎么办?

答: 计算软件可自行安装到宿主目录中, 如不会安装请联系集群管理员协助 安装。

5.3 我要用的计算软件作业脚本不会写怎么办?

答:用户所需具体脚本可通过询问集群管理员寻找目标软件的作业模板。如 ansys、comsol、vasp、lammps 等。

5.4 提交作业报错如下错误

sbatch:error:Batch job submission failed:Invalid account or account/partition combination specified

答:导致如上报错的原因较多,大概原因有:脚本中队列设置错误, slurm 账 号没有绑定等。具体问题需联系管理员逐个排查。

5.5 作业没有运行,并且显示 QOSGrpCpuLimit

答:出现此英文字符是因为账号核数有所限制,正在运行的作业达到核数限 制后,其他作业状态则变为正在排队。

5.6 怎么修改账号密码

答: 登录高性能计算平台管理系统修改密码,具体步骤可参考《高性能计算 平台二期平台管理系统用户端操作手册》。

(使用流程及使用规范、常用计算软件使用及常用命令和脚本模板请参考高性能 计算平台用户手册)