

超算平台上机步骤

中国科学技术大学·超级计算中心

沈瑜

2014/4/8

从浏览网页开始

<http://scc.ustc.edu.cn>



The image shows the homepage of the Supercomputing Center of USTC. The header features the USTC logo and the text "中国科学技术大学 超级计算中心" and "Supercomputing Center of USTC". Below this is a navigation bar with links: "首页", "系统平台", "新闻公告", "业界动态", "培训信息", "计算项目", "运行监控", "用户申请", "资料手册", and "联系方式". The "用户申请" link is highlighted with a red box. Below the navigation bar, there is a section titled "中国科大超级计算中心简介" with a small image. To the right, there is a "新闻公告" section with a list of news items and dates. The background of the header is a blue-tinted image of a server room.

中国科学技术大学 超级计算中心
Supercomputing Center of USTC

推动科学计算 促进人才培养

首页 系统平台 新闻公告 业界动态 培训信息 计算项目 运行监控 用户申请 资料手册 联系方式

中国科大超级计算中心简介

新闻公告

- 超算中心招聘启事 2013-04-10
- ChinaGrid高性能计算集群启用Ganglia InfiniBand网络监控 2014-03-01
- 中科院超算中心主任刘崇禧在超算联盟用户大会上 2014-03-27

申请账户

1. 阅读申请注意事项
2. 下载申请表填写
3. 用email将申请表发给
sccadmin@ustc.edu.cn

注意：学生申请前要得到导师同意，给sccadmin发email要抄送给导师。

首页 > 用户申请

申请注意事项

- [申请注意事项（申请前请务必先看）](#)

用户管理条例

- [中国科学技术大学超级计算中心管理委员会章程-讨论稿](#)
- [中国科学技术大学超级计算中心管理条例](#)

用户申请表下载

- [注册帐号申请表（本校教师）](#)
- [注册帐号申请表（本校学生）](#)
- [注册账号申请表（校外人员）](#)

VPN帐号申请

- [超级计算中心VPN帐号注册申请](#)

年度计算成果统计

- [超级计算中心用户门户](#)

登录软件下载

- [用户登录](#)
- [xshell+xftp软件](#)
- [PuTTY](#)

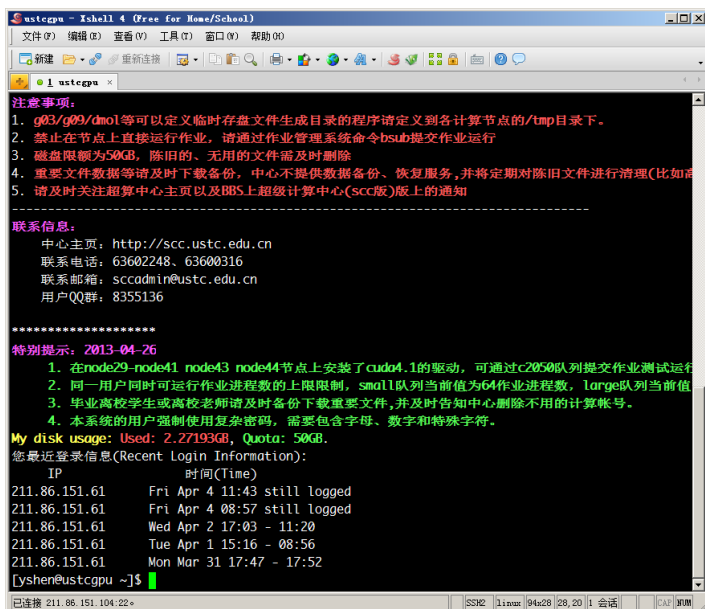
软件设置与登录

XShell+XFTP

- 界面更友好
- 多tab窗口适合同时登录多个服务器

PuTTY+WinSCP

- PuTTY界面更简洁
- WinSCP可根据文件类型调用不同的编辑器



```
ustcgpu - Xshell 4 (Free for Home/School)
文件(F) 编辑(E) 查看(V) 工具(T) 窗口(W) 帮助(H)
新建 重新连接
1 ustcgpu
注意事项:
1. g03/g09/dm1等可以定义临时磁盘文件生成目录的程序请定义到各计算节点的/tmp目录下。
2. 禁止在节点上直接运行作业。请通过作业管理系统命令bsub提交作业运行
3. 磁盘限额为50GB, 陈旧的、无用的文件需及时删除
4. 重要文件数据等请及时下载备份, 中心不提供数据备份、恢复服务, 并将定期对陈旧文件进行清理(比如隔
5. 请及时关注超算中心主页以及BBS上超级计算中心(scc版)版上的通知
-----
联系信息:
中心主页: http://scc.ustc.edu.cn
联系电话: 63602248、63600316
联系邮箱: sccadmin@ustc.edu.cn
用户QQ群: 8355136
-----
特别提示: 2013-04-26
1. 在node29-node41 node43 node44节点上安装了cuda4.1的驱动, 可通过c2050队列提交作业测试运行
2. 同一用户同时可运行作业进程数的上限限制, small队列当前值为64作业进程数, large队列当前值
3. 毕业离校学生或离校老师请及时备份下载重要文件, 并及时告知中心删除不用的计算帐号。
4. 本系统的用户强制使用复杂密码, 需要包含字母、数字和特殊字符。
My disk usage: Used: 2.27193GB, Quota: 50GB.
您最近登录信息(Recent Login Information):
IP                时间(Time)
211.86.151.61     Fri Apr 4 11:43 still logged
211.86.151.61     Fri Apr 4 08:57 still logged
211.86.151.61     Wed Apr 2 17:03 - 11:20
211.86.151.61     Tue Apr 1 15:16 - 08:56
211.86.151.61     Mon Mar 31 17:47 - 17:52
[ylshen@ustcgpu ~]$
```



```
yshen@ustcgpu: ~ [80x24]
联系信息:
中心主页: http://scc.ustc.edu.cn
联系电话: 63602248、63600316
联系邮箱: sccadmin@ustc.edu.cn
用户QQ群: 8355136
-----
特别提示: 2013-04-26
1. 在node29-node41 node43 node44节点上安装了cuda4.1的驱动, 可通过c2050队列提交作业测试运行。对应编译器在/opt/cuda-4.1.28目录下。
2. 同一用户同时可运行作业进程数的上限限制, small队列当前值为64作业进程数, large队列当前值为128作业进程数, small和large队列同时上限值为128作业进程数。
3. 毕业离校学生或离校老师请及时备份下载重要文件, 并及时告知中心删除不用的计算帐号。
4. 本系统的用户强制使用复杂密码, 需要包含字母、数字和特殊字符。
My disk usage: Used: 2.27193GB, Quota: 50GB.
您最近登录信息(Recent Login Information):
IP                时间(Time)
211.86.151.61     Fri Apr 4 11:44 still logged
211.86.151.61     Fri Apr 4 11:43 still logged
211.86.151.61     Fri Apr 4 08:57 still logged
211.86.151.61     Wed Apr 2 17:03 - 11:20
211.86.151.61     Tue Apr 1 15:16 - 08:56
[ylshen@ustcgpu ~]$
```

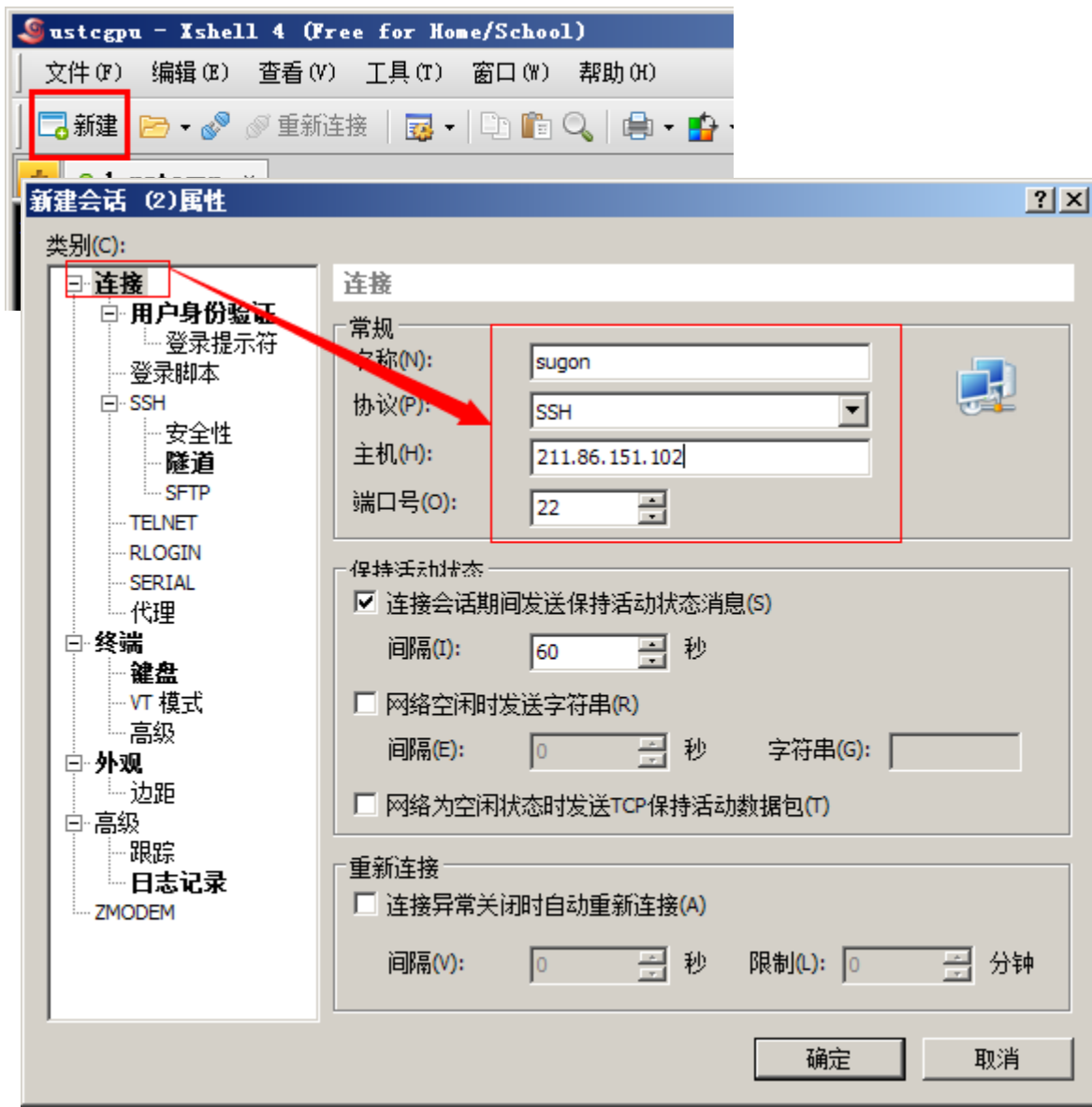
XShell设置：服务器

名称：自己设置

协议：SSH

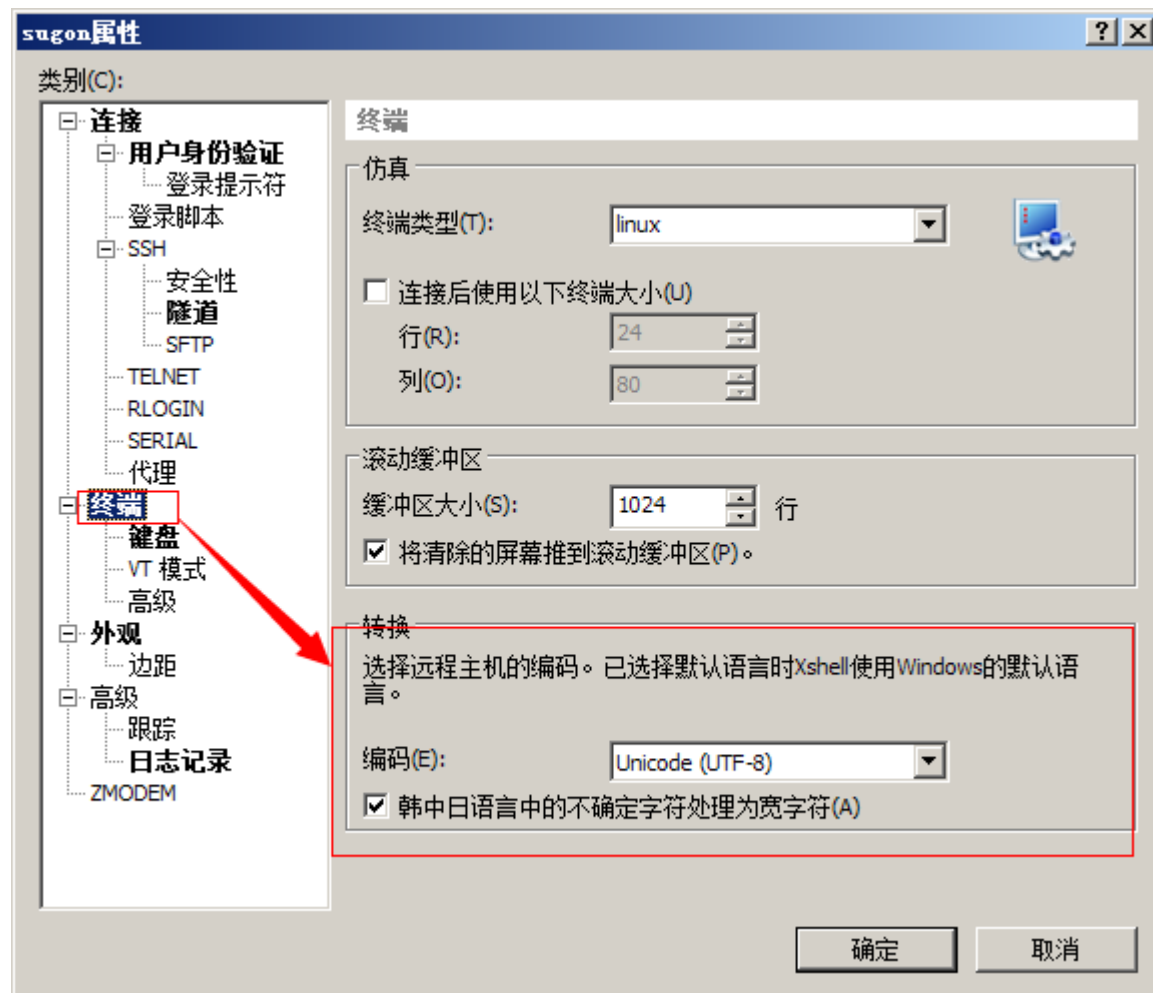
主机：服务器IP地址

端口号：22



Xshell设置： 字符编码

服务器默认使用UTF-8编码以支持中文



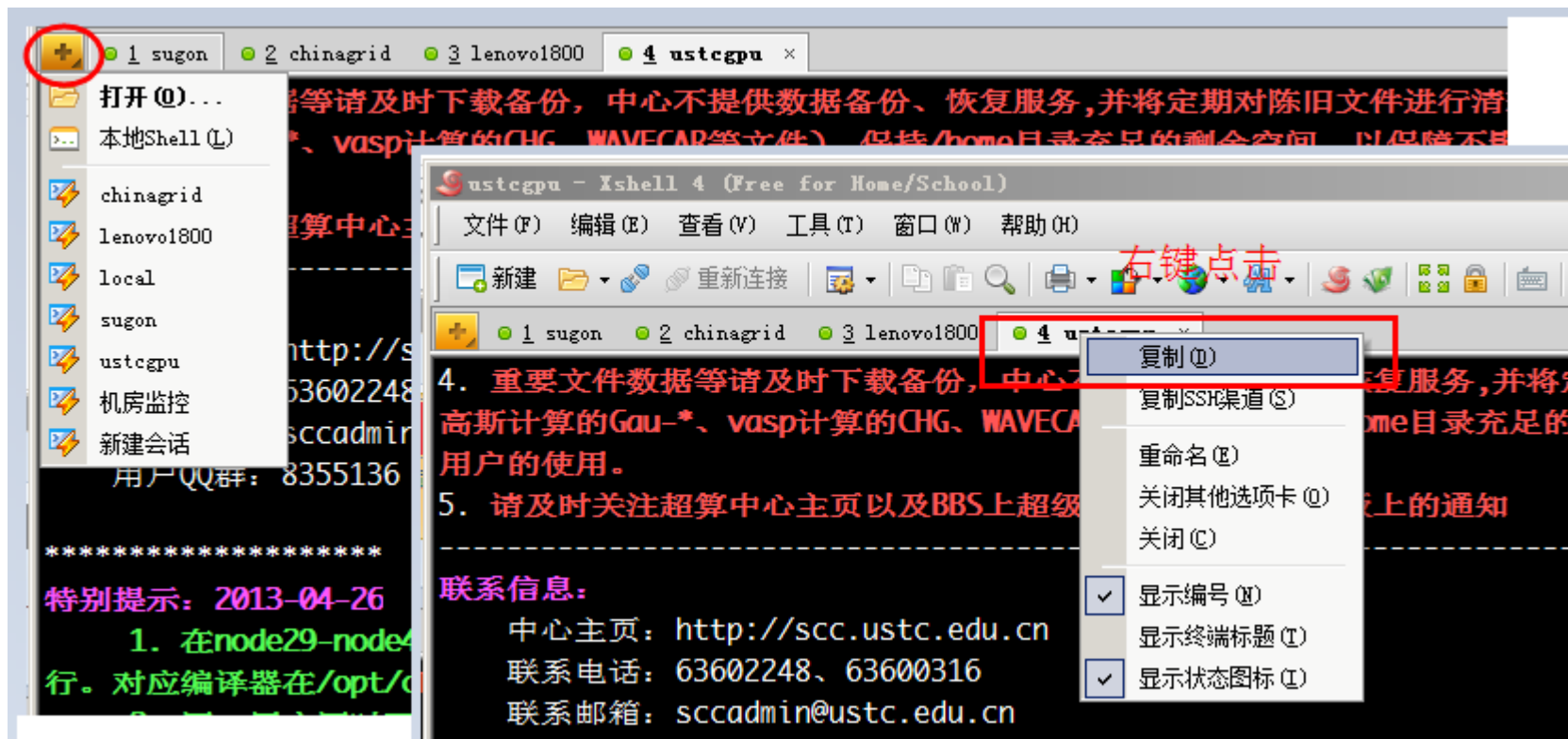
Xshell使用：常用工具



设置

配色，编码和字体

启动XFTP传输文件

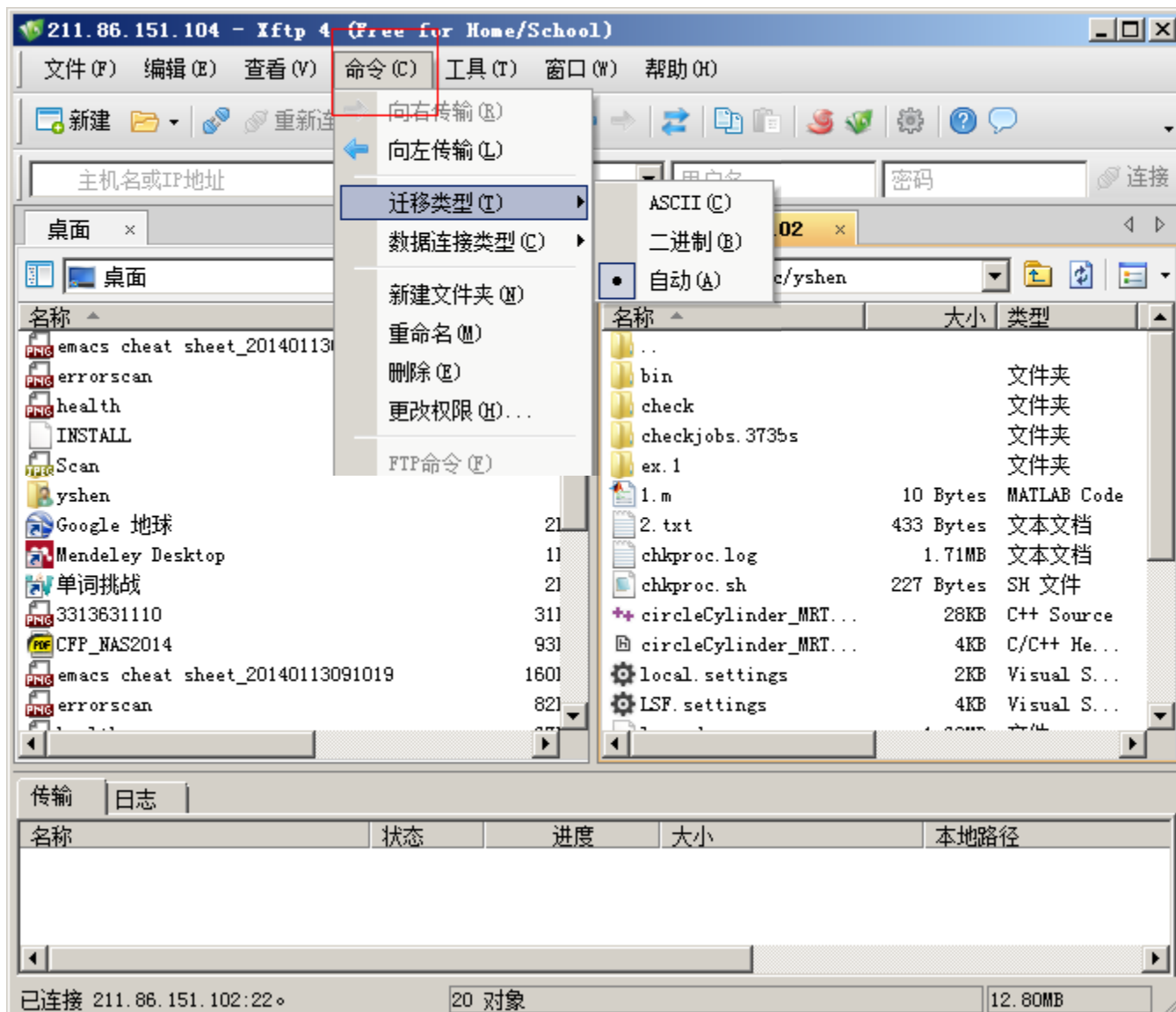


XFTP使用

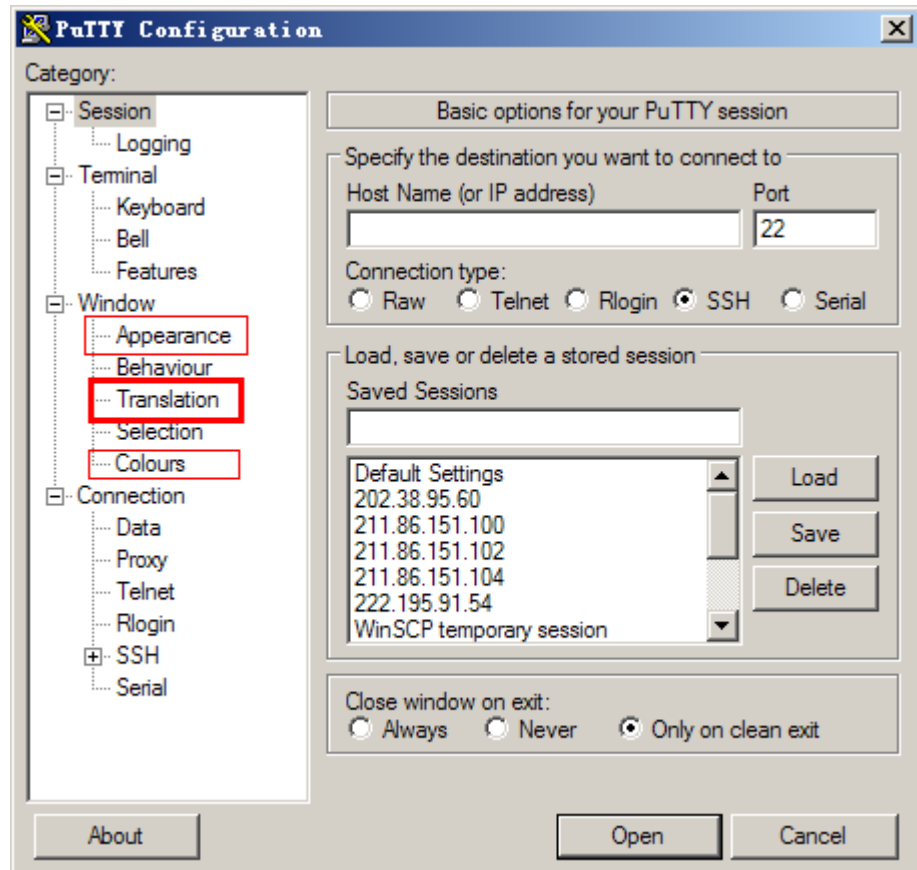
文件传输

注意传输模式：

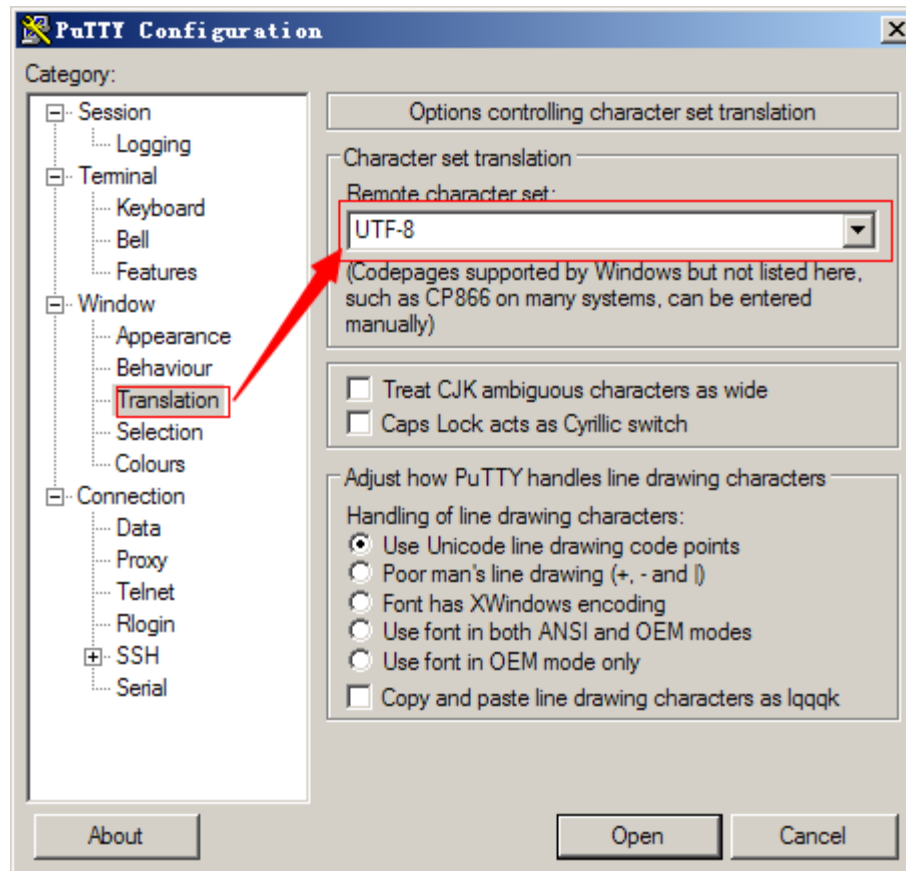
- 二进制
- 文本



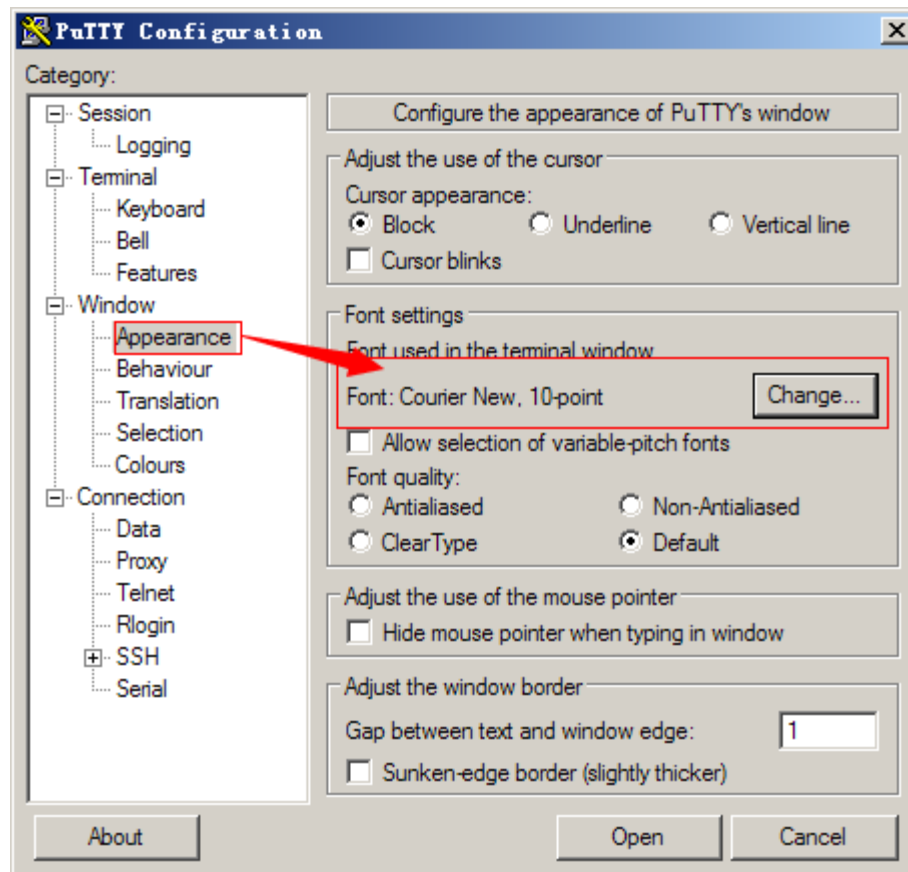
PuTTY设置： 服务器



PuTTY设置：编码



PuTTY设置：字体



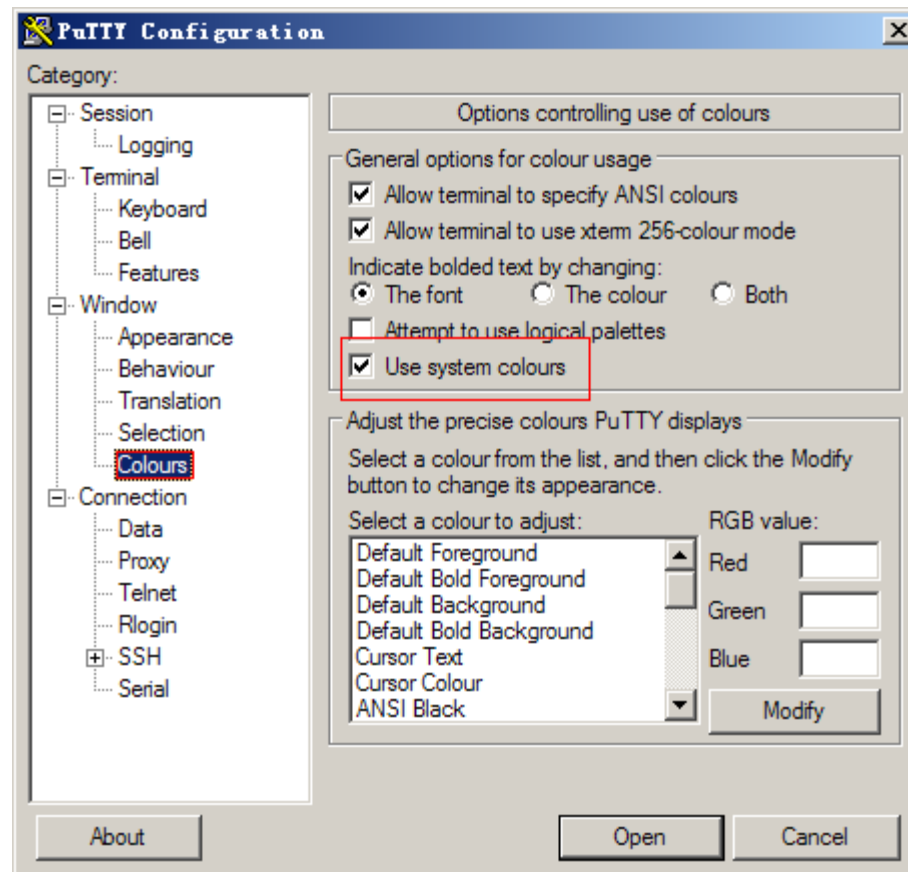
插曲：常用字体

- 等宽字体，方便缩进对齐
- 能够明显区分容易混淆的数字字母： 0,O; l,I,1

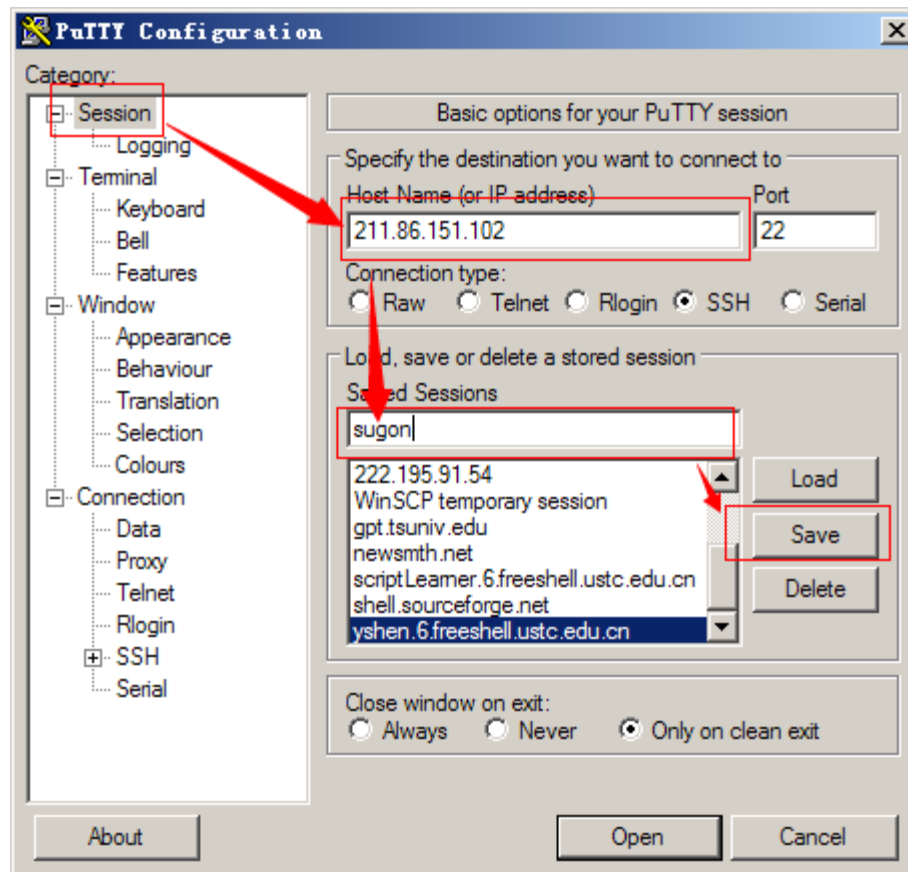
```
Source Code Pro                               Consolas
drwxr-xr-x 3 yshen nic 4096 3月 10 17:12 gaussian
drwxr-xr-x 3 yshen nic 4096 3月 18 11:59 matlab
drwxr-xr-x 2 yshen nic 4096 3月 24 16:43 matlab_batch
drwxr-xr-x 3 yshen nic 4096 3月 31 16:40 matlab_parjob
-rwxr-xr-x 1 yshen nic 0 4月 1 14:46 test.sh
-rw-r--r-- 1 yshen nic 0 4月 1 14:46 test.txt
drwxr-xr-x 2 yshen nic 4096 3月 19 08:41 variable
drwxr-xr-x 4 yshen nic 4096 3月 10 10:44 vasp
drwxr-xr-x 2 yshen nic 4096 3月 31 17:09 新建文件夹

Inconsolata                                   Monaco
drwxr-xr-x 3 yshen nic 4096 3月 10 17:12 gaussian
drwxr-xr-x 3 yshen nic 4096 3月 18 11:59 matlab
drwxr-xr-x 2 yshen nic 4096 3月 24 16:43 matlab_batch
drwxr-xr-x 3 yshen nic 4096 3月 31 16:40 matlab_parjob
-rwxr-xr-x 1 yshen nic 0 4月 1 14:46 test.sh
-rw-r--r-- 1 yshen nic 0 4月 1 14:46 test.txt
drwxr-xr-x 2 yshen nic 4096 3月 19 08:41 variable
drwxr-xr-x 4 yshen nic 4096 3月 10 10:44 vasp
drwxr-xr-x 2 yshen nic 4096 3月 31 17:09 新建文件夹
[yshen@sugon test]$
```

PuTTY设置：颜色



PuTTY设置：保存



PuTTY使用：启动

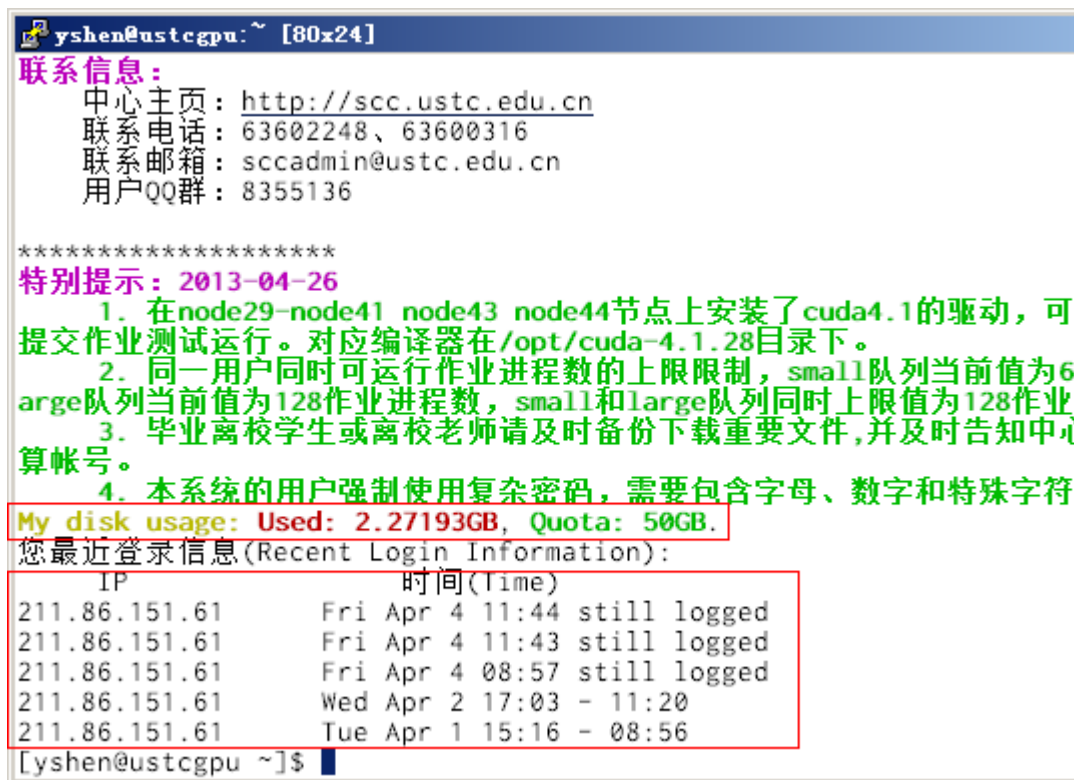
首次启动会有提示：对服务器
验明正身

输入用户名密码（密码不回显）

出现登录提示：系统介绍，提
交作业范例，注意事项，近日
提示等等

检查1.磁盘空间是否正常最近2.
登录IP是否正常

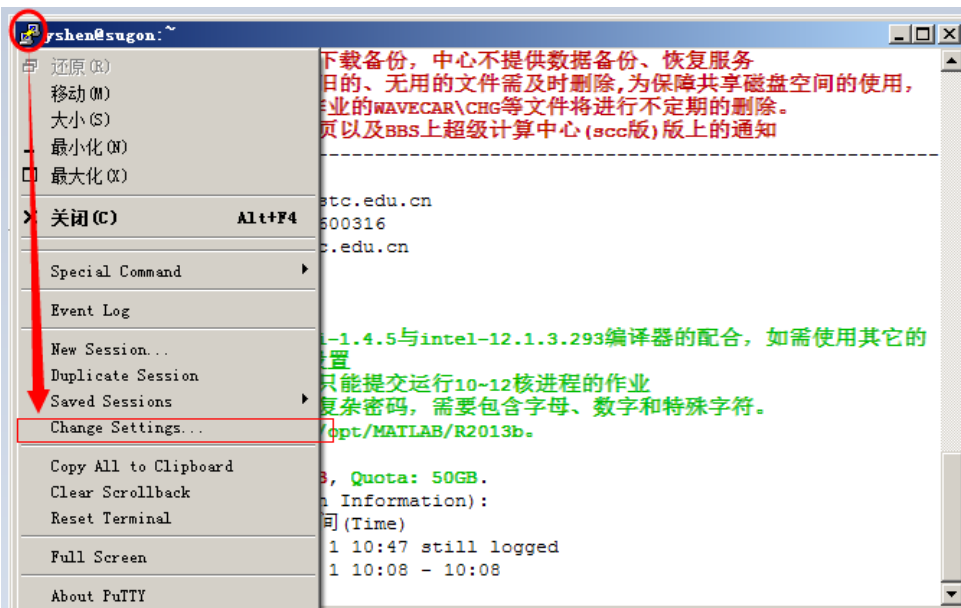
再次查看登录提示：
cat /etc/motd



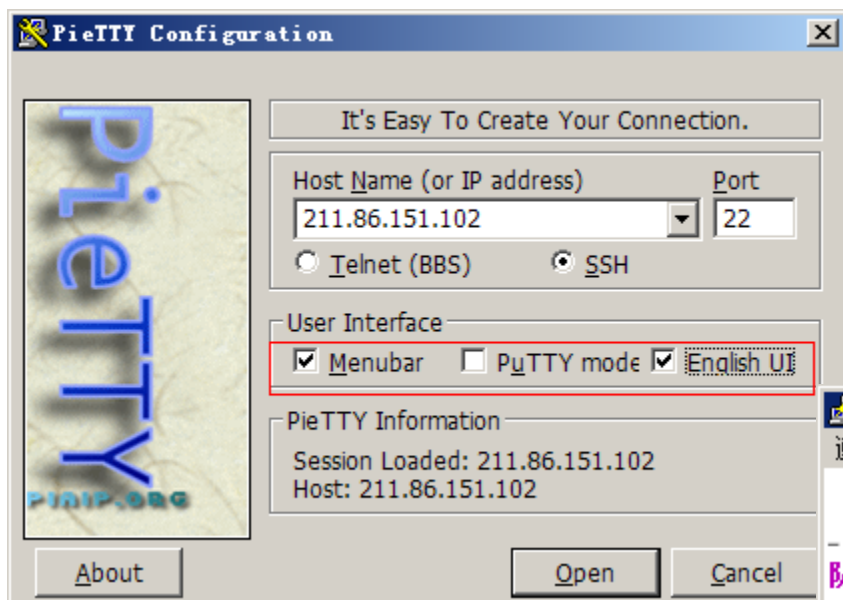
PuTTY使用：菜单

PuTTY会把所有键盘指令传给服务器，因此不支持windows标准的键盘快捷键（比如F10、ALT+Space等等）

点击窗口左上角图标或者右键点击标题栏可调出菜单



界面更友好的PuTTY: PieTTY



```
yshen@sugon:~ [132x64]
連線(C) 編輯(E) 檢視(V) 視窗(W) 選項(O) 說明(O)
bqueues: 显示作业队列信息
lsload: 显示指定节点当前负载
-----
队列设置: 会根据使用情况或用户意见作出调整
serial: 1~2进程作业队列, 提交作业时需加参数-q serial, 每用户可
normal: 仅运行10~12核的作业, 运行于node1~node80其中之一节点,
long: 可运行大于12核的跨节点并行作业, 运行于node1~node80节点
mem48: 可运行每进程需求内存较大但一个作业总需求内存小于48GB的
优先级较高。
mem64: 可运行每进程需求内存较大但一个作业总需求内存小于64GB的
优先级较高。
mem96: 可运行每进程需求内存较大但一个作业总需求内存小于96GB的
优先级较高。
fat48: 运行大共享内存作业, 每节点48CPU核, 提交作业时需加参数
请使用权限。
fat64: 运行大共享内存作业, 每节点64CPU核, 提交作业时需加参数
请使用权限。
8cpu: 作业运行在node93~node103节点上, 作业设置请使用进程数才
可使用bqueues -l查看各队列设置的详细说明。
```

账户安全问题

- 弱密码的危害
 - 黑客破解使用弱密码的普通用户 → 利用系统漏洞获得管理员权限
- 危险客户端
 - 非官网下载的putty客户端被修改，导致用户账户密码泄露
- 怎么创建一个好密码：一句话首字母（符号）组合；某些字母换成数字符号（火星文）
- 用密码管理软件记住无规律的复杂软件：
Keepass

WinSCP设置： 服务器

文件协议：SFTP

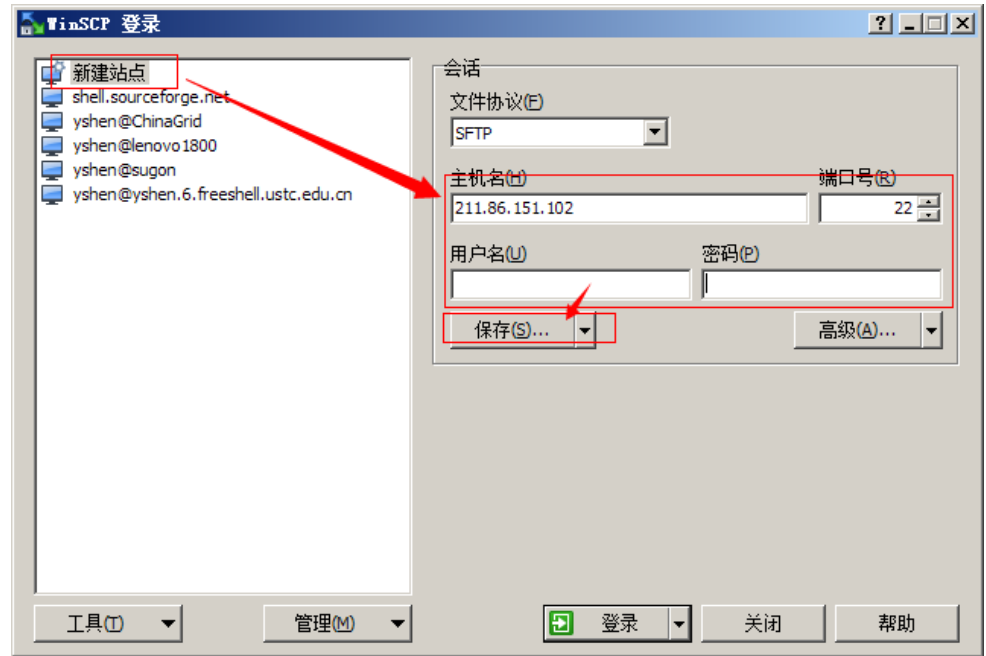
主机名：服务器IP地址

端口号：22

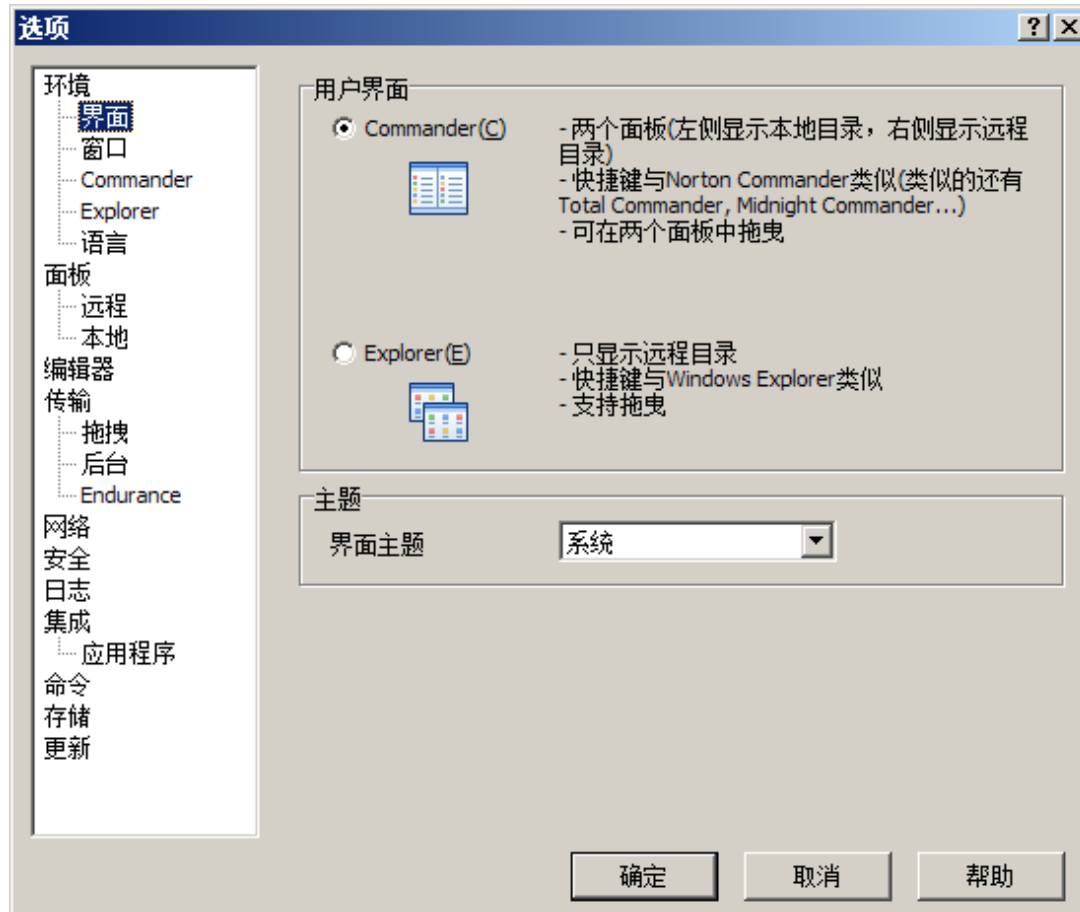
用户名：ssh用户名

密码：用户密码

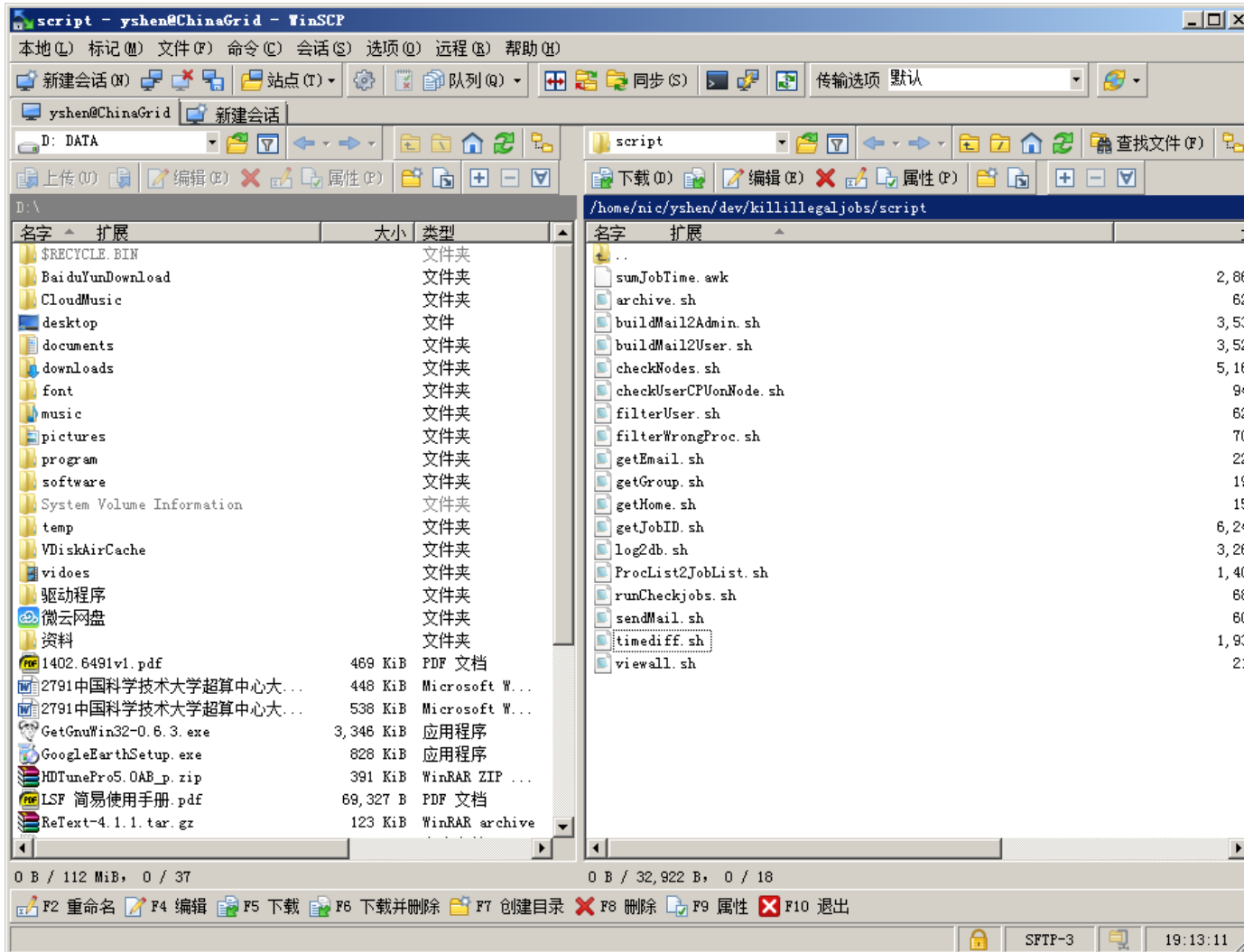
右键点击站点名称可进行重命名等各种操作



WinSCP设置：界面



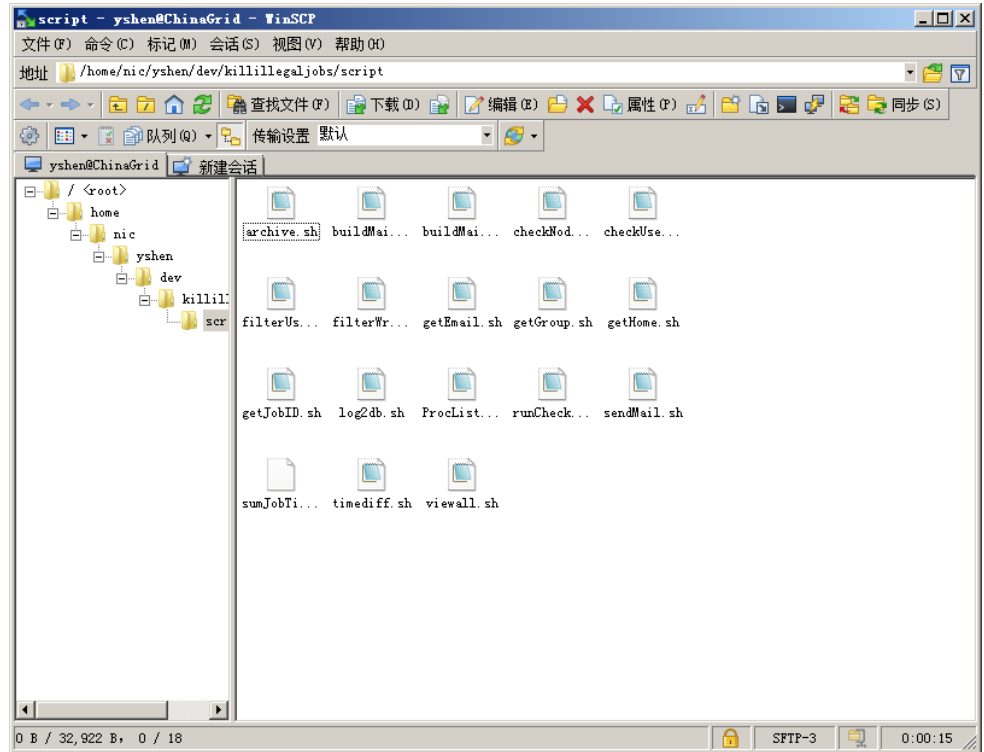
WinSCP界面：Commander



WinSCP界面： Explorer

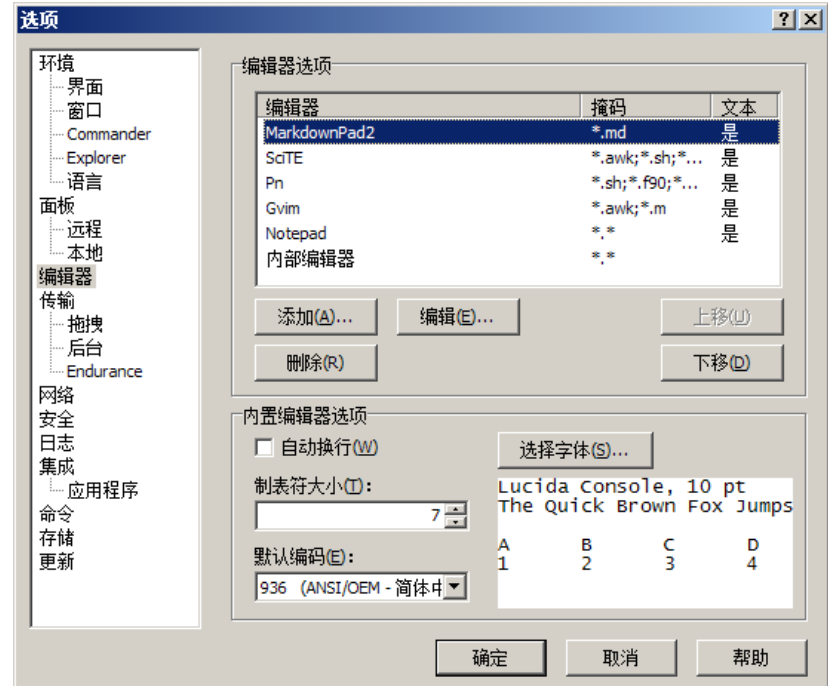
类似Windows的文件管理器

可以鼠标拖动方式管理文件、
传输文件，鼠标双击打开编辑
文件



WinSCP设置：编辑器

- Windows下编辑，保存后自动上传服务器
- 针对不同的文件类型设置不同的编辑器
 - 例子：Fortran文件用
Programmers notepad;
 - Shell、awk脚本用SciTE;
 - Matlab脚本用Gvim; Markdown标记语言用markdownpad2.....;
- 双击自动下载打开编辑，保存后自动上传更新。

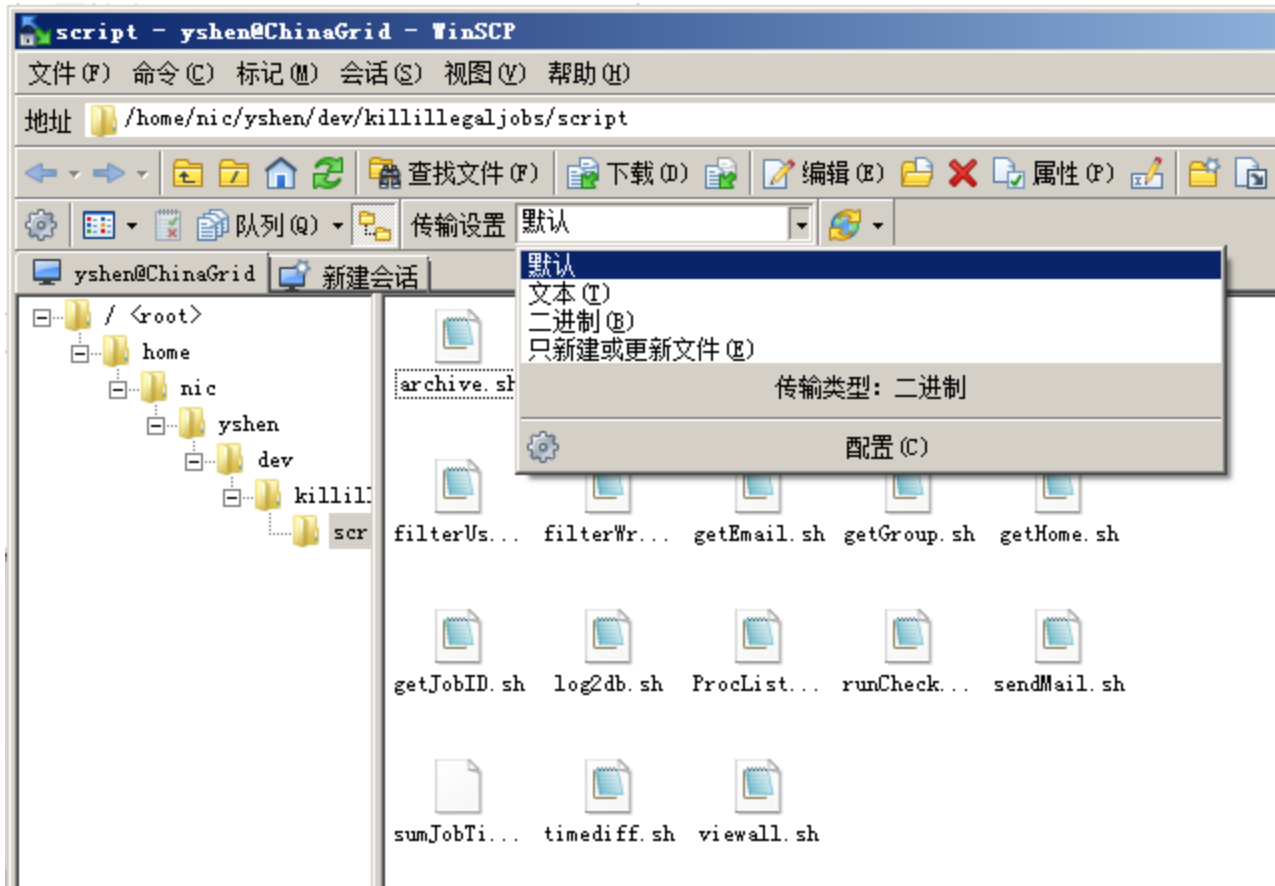


插曲：编辑器

- 区别不显示字符（空格与tab，LF与CR+LF）
- 语法高亮
- 自动补全
- 代码折叠
- 对不等宽字体的支持
- ...

文件传输

- 二进制模式和文本模式：换行问题



Linux基本命令

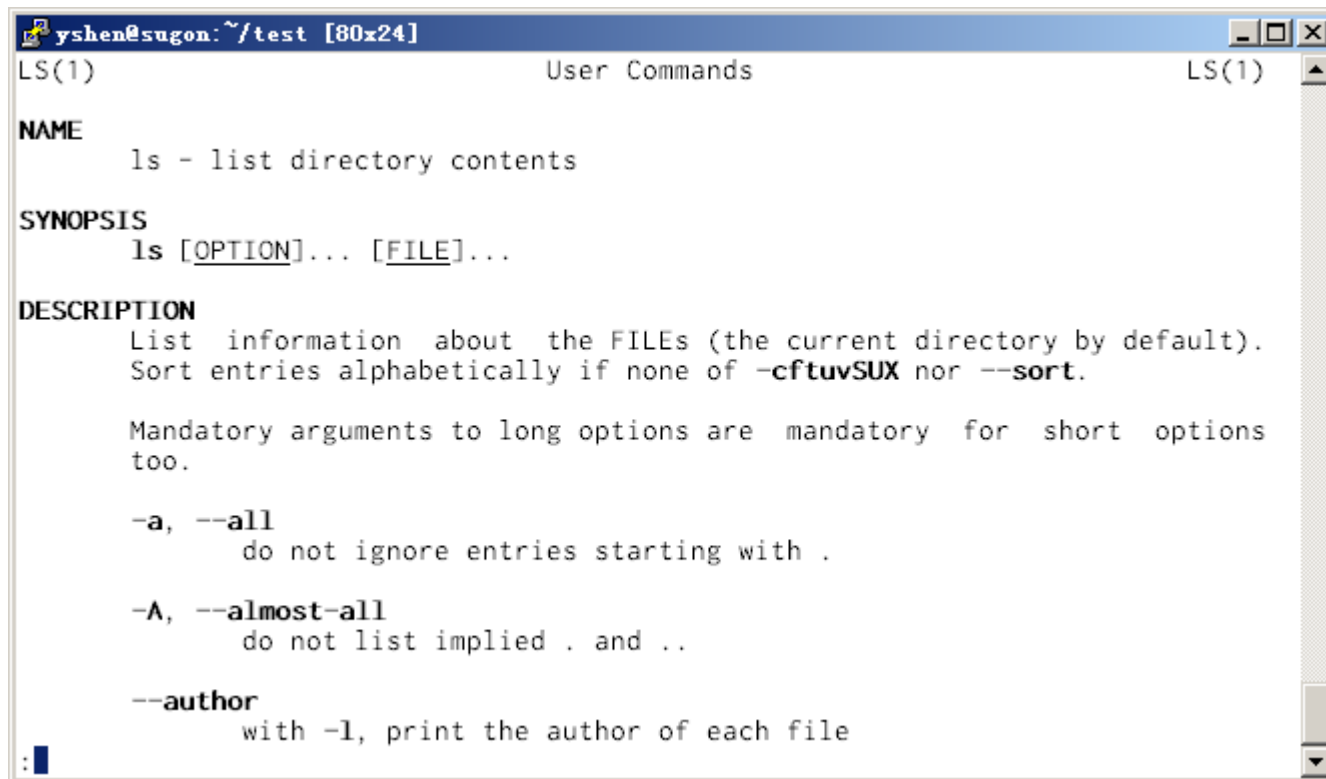
- 登录服务器后进入linux字符界面，当前目录为各人的主目录（~），除IBM JS22外，其他服务器的Shell是Bash。
- 常用Bash命令：
 - ls: 列出当前目录下文件(参数: -h, -l, -a, ...)
 - cd: 改变目录
 - pwd: 查看当前工作目录
 - cat: 查看文件内容
 - more/less: 分页显示
- 常用linux程序：
 - 编辑器: nano, vim
 - 压缩打包程序: tar, gzip, bzip

Tab补全: 输入命令或者参数前几个字符后按tab, 如果只有一种可能则自动补全, 否则再按一次tab会列出所有可能选择。

--help:一般命令加上-h可输出提示信息。

Linux查看帮助

- 查看帮助命令：man



```
yshen@sugon: ~/test [80x24]
LS(1) User Commands LS(1)
NAME
  ls - list directory contents
SYNOPSIS
  ls [OPTION]... [FILE]...
DESCRIPTION
  List information about the FILEs (the current directory by default).
  Sort entries alphabetically if none of -cftuvSUX nor --sort.

  Mandatory arguments to long options are mandatory for short options
  too.

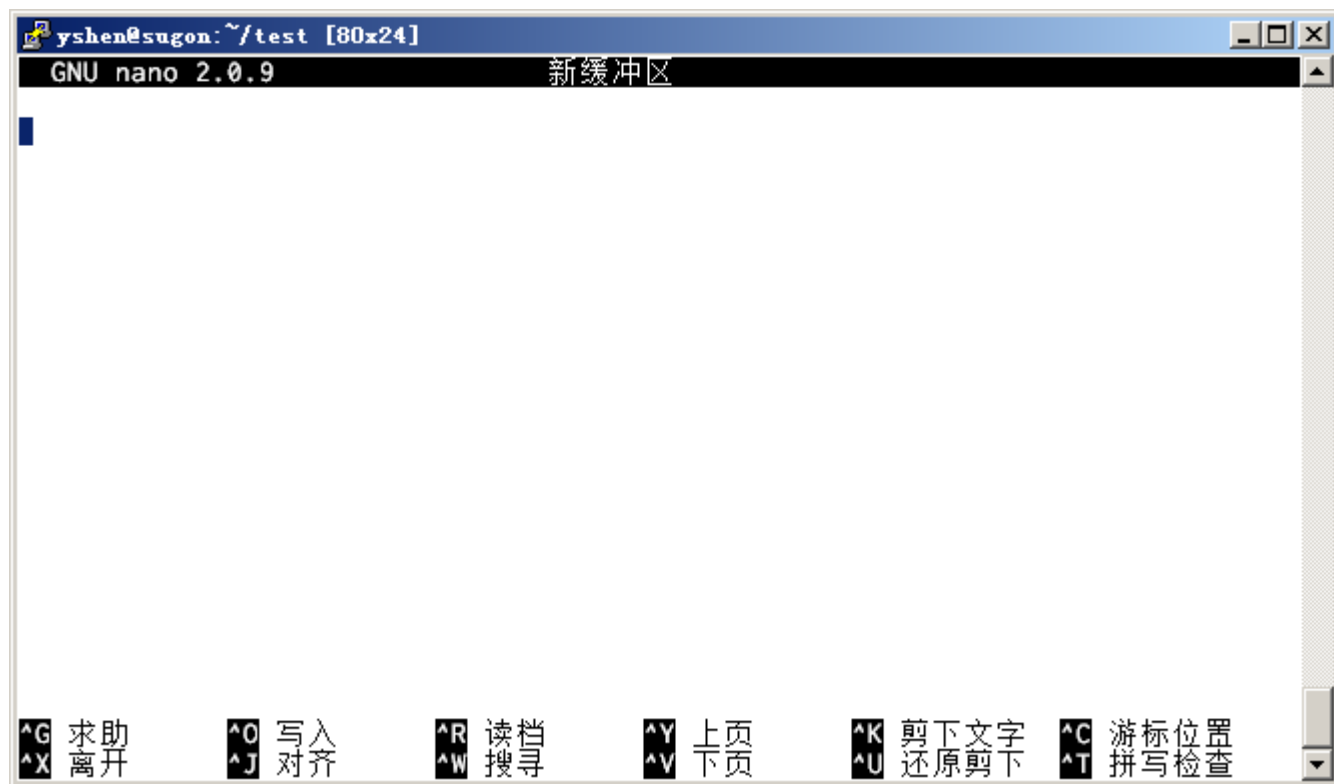
  -a, --all
        do not ignore entries starting with .

  -A, --almost-all
        do not list implied . and ..

  --author
        with -l, print the author of each file
```

编辑文件:Nano

- 单模式编辑器
- 大部分指令都是ctrl/alt/快捷键
- Ctrl+G: 获取帮助(Get help)



编辑文件：VIM

多模式编辑器

- 普通模式：启动后默认进入普通模式。该模式下可执行一般的编辑命令，比如复制、剪切、粘贴移动光标等。编辑命令为普通按键，一般无需`ctrl`或者`alt`；任何模式下按`Esc`键都会返回普通模式。
- 插入模式：在普通模式下按`i`（在光标当前位置插入文本）或者`a`（在光标后面一个字符的位置插入）等命令可进入插入模式。该模式下可输入文件内容。
- 可视模式：在普通模式下按`v`进入可视模式（按`ctrl+v`进入列选择模式）。在可视模式下移动光标会选择一段文本，这时执行其他命令将作用到选中的文本上。
- 命令模式：在普通模式下按`:`进入。可进行打开/保存文件（`:o:e`），退出`vim(:q :q!)`，搜索/替换（`/?s`）等操作

编辑文件：VIM

- 简单指令：
 - i/a/o/O（在当前位置/下个字符/下一行/上一行插入文字）
 - h/j/k/l（向左/上/下/右移动光标），
 - gg/G/O/\$（移动光标到文件开始/文件结束/当前行开始/当前行结束）
 - w/W/b/B (按单词/词组移动)
 - x（剪切/删除一个字符），
 - p/P（下个字符位置/当前位置上粘贴），
- 复杂指令：动词+宾语，数字修饰，其他修饰
 - 动词：y（复制），d（删除），c（更改：删除已有内容并进入插入模式），.....
 - 宾语：gg（文件头），G（文件尾），O（行首），\$（行尾），w（单词），b/[/{（小/中/大括号），'/'（单/双引号），.....
 - 数字修饰：命令前加数字表示重复该命令几次
 - 其他修饰：i（括号/引号内部），a（包括括号/引号所有内容）
 - 快捷操作：yy（复制当前行），dd（删除当前行）.....
 - 例子：
 - 从当前光标复制到行尾：y\$
 - 删除2个单词：2dw
 - 改变单引号内容：光标移动到括号部分后顺序按下 ci ‘
 - 删除包括小括号的所有内容：光标移动到括号部分后顺序按下 dab

编辑文件：VIM

- 文件操作：
 - :e+文件名 – 打开文件
 - :e+目录名 – 打开目录文件列表
 - :e! – 将文件恢复到上一次保存时状态
 - :w – 保存文件
 - :w+文件名 – 将编辑内容保存到文件
 - :q – 退出vim
 - :q! – 放弃未保存的修改强制退出vim
- 简单搜索命令： /（向后搜索）?（向前搜索）*（搜索光标处单词）
- 替换命令：
 - 当前行替换： :s/xxx/yyy
 - 全文替换： s前加%， :%s/xxx/yyy
 - 替换一行中的多个匹配项： 最后加/g， :s/xxx/yyy/g
- 自动补全： 插入模式下按ctrl+p

编译程序： Intel FORTRAN

- 单文件编译：
 - `ifort -o 可执行文件名 源程序文件名`
 - 一般应加入`-O2`优化参数
- 多文件编译：
 - 直接编译：`ifort -o 可执行文件名 所有源程序文件列表`
 - 写`makefile`然后使用`make`命令
- 编译OpenMP程序：
 - 加入 `-openmp`参数：`ifort -openmp -o可执行文件名 源程序文件名`
 - 运行前要设置并行线程数：`export OMP_NUM_THREADS=16`
- 编译MPI并程序：
 - 用`mpiifort`代替`ifort`编译
 - 提交作业运行时要加入`mpijob`参数

我要提交任务

- 排队不插队——用**bsub**而不是直接运行
- 日志文件很重要 `-o %J.log -e %J.err`
- 具体队列设置请看登录提示或者登录服务器后使用 `cat /etc/motd` 命令
- 注意：合理使用队列
 - 直接运行的程序会被随时中止
 - 实际使用CPU超出申请CPU的任务也会被随时中止

使用VASP

- 提示：VASP通信开销大，尽量避免跨节点运行，如果必须跨节点运行要使用带infiniband的服务
器：ustcgpu和ChinaGrid
- 服务器上有编译好的vasp，在~/.bashrc里面加入：
 - `PATH=$PATH:/opt/vasp5.2/vasp; export PATH`（sugon和chinagrid集群）
 - `PATH=$PATH:/opt/vasp5.2/vasp5.2/vasp; export PATH`（ustcgpu 集群）

来设置PATH环境变量；或者将相应目录里面的vasp复制到个人的~/bin目录即可使用。

- 运行VASP，需要使用mpijob队列
`bsub -q long -n 96 -o %J.log -e %J.err mpijob vasp`
- 参考资料：http://scc.ustc.edu.cn/ztsc/jsrj/201011/t20101108_75098.html

使用Gaussian

- 跨节点并行效果差
- 可能消耗内存较大：如果有必要请申请sugon集群上的大内存队列fat48和fat64
- 使用Gaussian的用户需要在申请表中说明
- Gaussian用户环境变量设置
将下面设置加入用户的.bashrc中
g09root=/opt/g09-D01
GAUSS_SCRDIR=/tmp
export g09root GAUSS_SCRDIR
. \$g09root/g09/bsd/g09.profile
- 运行Gaussian
 - bsub -q normal -n 12 -o %J.log -e %J.err g09 jobname
- 参考资料：http://scc.ustc.edu.cn/zlsc/jsrj/201011/t20101108_75104.html

使用Gaussian: 更多设置

- 内存设置
 - 默认使用256MB (32MW) 动态内存
 - 使用%Mem设置内存, 单位可以是双精度字(8字节), KB, MB, GB, TB, KW, MW, GW, TW
 - `%Mem=40000000` (使用320MB)
 - `%Mem=1GB`
 - 一般来说, 使用N个基函数的话需要最少 $3N^2$ 双精度字
- 临时文件设置
 - 临时文件包括: 检查点文件 (.chk), 读写文件 (.rwf), 双电子积分文件 (.int), 双电子积分的导数文件 (.d2e)。其中, 一般情况下读写文件是最大的。
 - 临时文件可以指定名称和位置:
 - %RWF=路径
 - %Int=路径
 - %D2E=路径
 - 临时文件还可以分割为多个文件, 例如:
 - %RWF=位置1, 大小1, 位置2, 大小2,
 - 注意: 目录必须在末尾包含斜线(/)

使用MATLAB

- 设置环境变量：
在.bashrc里面加入：
`PATH=$PATH:/opt/MATLAB/R2013b/bin; export PATH`
- 没有图形界面，使用`matlab -nodisplay`启动字符界面
- 使用`matlab -nodisplay -r` 脚本文件名（不包括.m扩展名）来非交互模式运行程序
- 提交任务示例：
串行任务：
`bsub -q serial -o %J.log -e %J.err matlab -nodisplay -r serial_job> result`
并行任务：
`bsub -q normal -n 12 -o %J.log -e %J.err matlab -nodisplay -r parallel_job > result`

我的任务怎么样了

- 我自己有什么任务： `bjobs`
- 我要看所有人的任务： `bjobs -u all`
- 哪些人在排队： `bjobs -p -u all`
- 终于运行了，看看怎么样了： `bpeek`

我的任务正常么？

- 查看系统实时运行情况：top
- 更方便的查看：网页监控，Ganglia监控

查看系统实时负载: top

- 使用ssh登录系统
- 找到自己作业所在的计算节点:bjobs
- ssh到该节点后运行top命令
- 在top运行界面按1可查看每个cpu核心负载
- 注意检查负载是否正常, 比如sy占用率很高则表明系统没有完全用来计算(比如在sugon系统上跨节点计算vasp造成通信占用时间过长。)

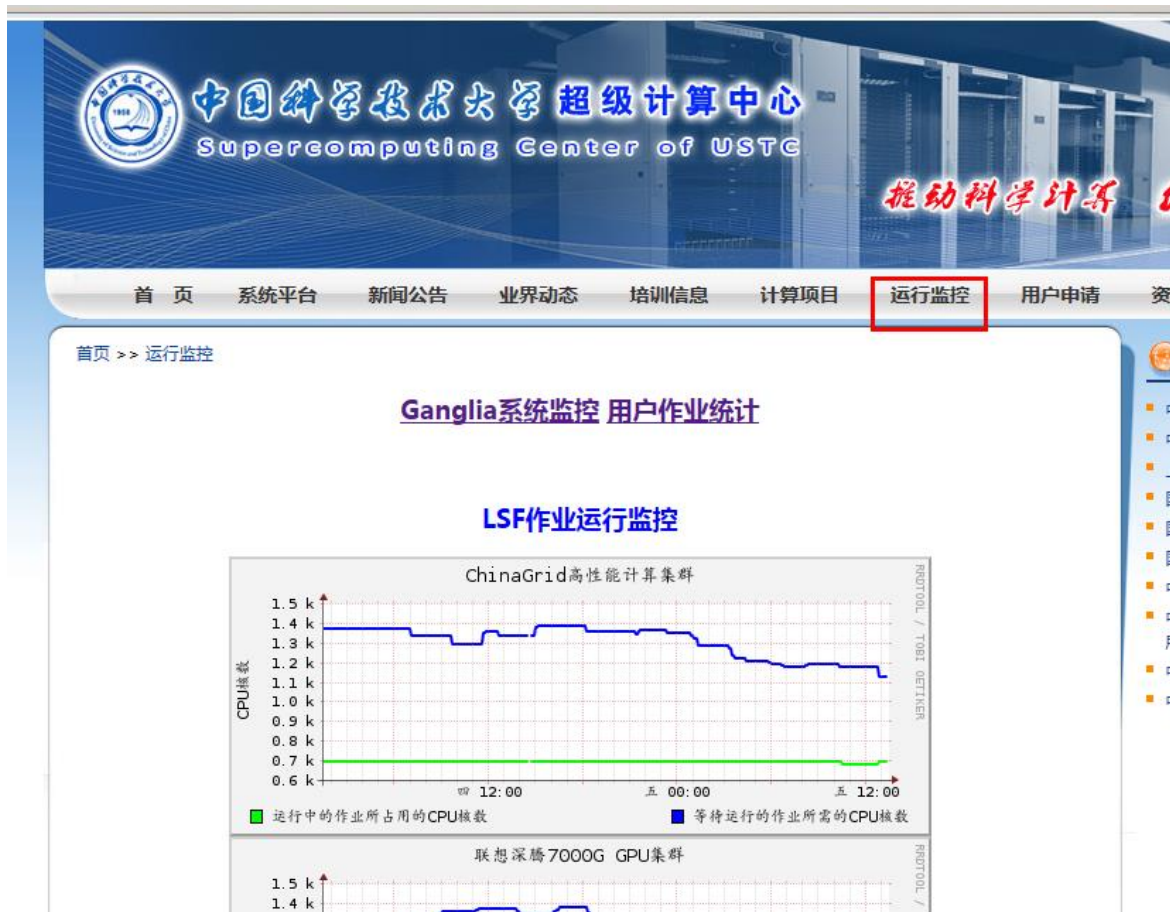
```
yshen@node22: ~ [133x126]
top - 18:30:01 up 50 days, 1:58, 1 user, load ave
Tasks: 274 total, 13 running, 259 sleeping, 1 sto
Cpu0  : 22.0%us, 61.5%sy, 2.9%ni, 13.5%id, 0.0%wa,
Cpu1  : 23.8%us, 65.8%sy, 2.9%ni, 6.6%id, 0.0%wa,
Cpu2  : 23.2%us, 64.1%sy, 2.9%ni, 8.9%id, 0.0%wa,
Cpu3  : 21.7%us, 60.5%sy, 2.9%ni, 14.8%id, 0.0%wa,
Cpu4  : 22.2%us, 60.3%sy, 2.9%ni, 13.6%id, 0.0%wa,
Cpu5  : 23.8%us, 65.6%sy, 2.9%ni, 6.7%id, 0.0%wa,
Cpu6  : 26.3%us, 67.4%sy, 2.9%ni, 2.4%id, 0.0%wa,
Cpu7  : 26.3%us, 67.5%sy, 2.9%ni, 2.2%id, 0.0%wa,
Cpu8  : 26.4%us, 68.0%sy, 2.9%ni, 1.7%id, 0.0%wa,
Cpu9  : 25.7%us, 67.0%sy, 2.8%ni, 4.5%id, 0.0%wa,
Cpu10 : 25.9%us, 66.8%sy, 2.8%ni, 3.4%id, 0.0%wa,
Cpu11 : 25.2%us, 65.8%sy, 2.7%ni, 6.2%id, 0.0%wa,
Mem: 24596896k total, 5512620k used, 19084276k fre
Swap: 6143992k total, 0k used, 6143992k fre

  PID USER      PR  NI  VIRT  RES  SHR  S  %CPU  %MEM
18107 juming    20   0  832m 336m 21m  R 100.0  1.4
18112 juming    20   0  816m 322m 21m  R 100.0  1.3
18117 juming    20   0  819m 324m 21m  R 100.0  1.4
18109 juming    20   0  818m 320m 21m  R  99.6  1.3
18110 juming    20   0  818m 322m 21m  R  99.6  1.3
18115 juming    20   0  816m 322m 21m  R  99.6  1.3
18111 juming    20   0  816m 319m 21m  R  91.1  1.3
18118 juming    20   0  816m 323m 21m  R  90.0  1.3
18113 juming    20   0  819m 321m 21m  R  84.7  1.3
18116 juming    20   0  817m 324m 21m  R  84.2  1.3
18114 juming    20   0  819m 325m 21m  R  80.5  1.4
18108 juming    20   0  816m 318m 21m  R  69.8  1.3
18830 yshen     20   0 19408 1532 1056  R   1.1  0.0
   1 root      20   0 23596 1656 1320  S   0.0  0.0
   2 root      20   0     0     0     0  S   0.0  0.0
```


网页监控

超算主页 → 运行监控

点击图片可查看系统运行统计信息

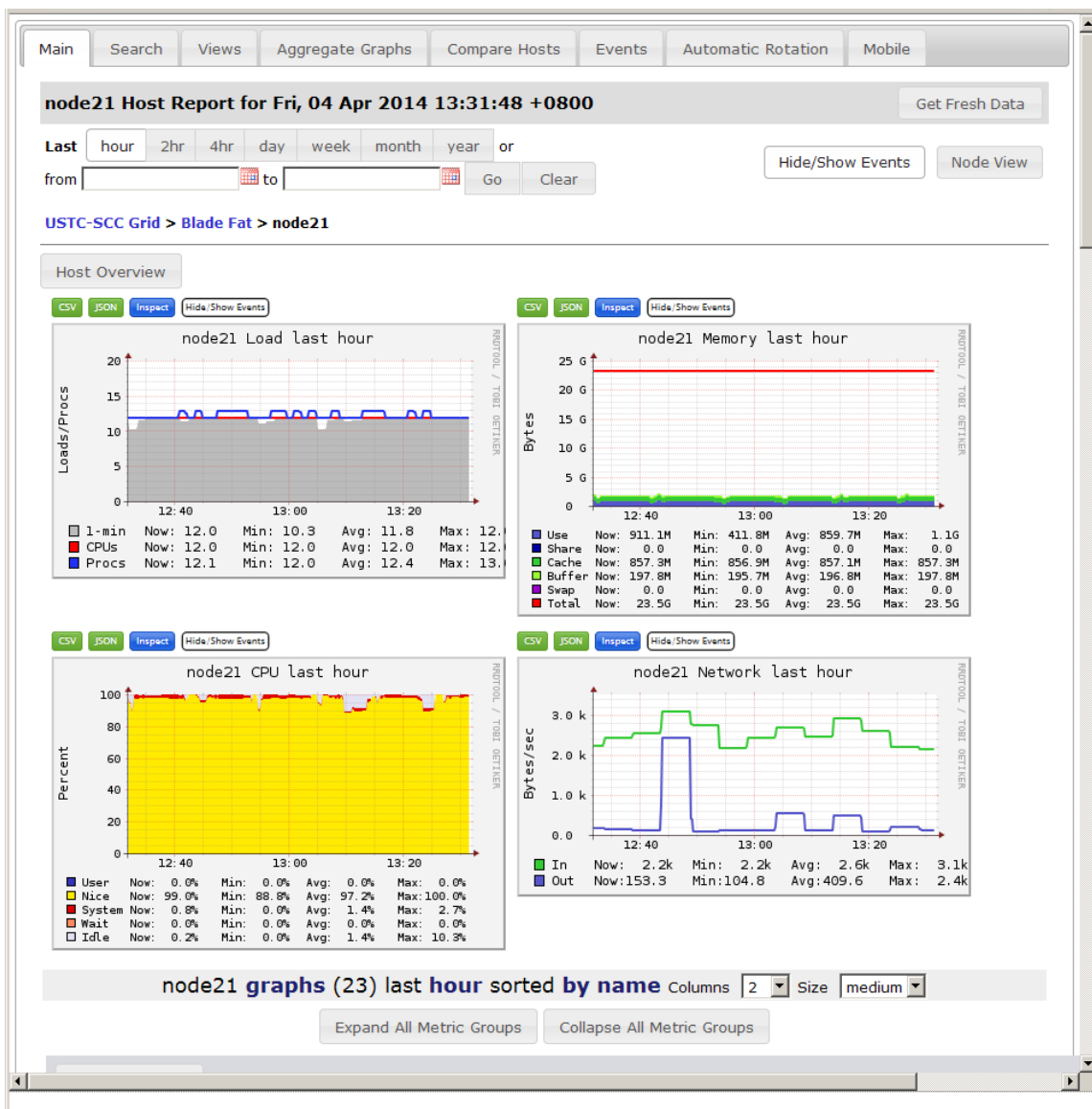


Ganglia监控

超算主页 → 运行监控 → Ganglia
系统监控

可查看各个计算节点CPU、内存、硬盘、网络等具体信息

ChinaGrid集群还可以查看
Infiniband利用情况



校外使用

- 服务器仅限校内直接登录，校外使用需要通过VPN服务。
- 教师请使用网络中心提供的免费VPN服务
- 学生可申请超算中心VPN：<http://scc.ustc.edu.cn/vpn>
- VPN无法连接时请提供具体登录信息

有问题了怎么办

- 使用QQ群、email、电话咨询
 - QQ群：8355136 (可直接留言提问)
 - Email: sccadmin@ustc.edu.cn
 - 电话：63602248 (8:00~12:00, 14:00~18:00)
- 提供完整的信息：服务器、用户名、工作目录、任务id等
- Log文件很重要