北京航空航天大学校级计算平台项目

用户手册

（正式版 V1.1）

2020-12-01

目录

1. 系统简介

1.1. 硬件配置

本系统配置了 3 个登录节点，260 个 CPU 计算节点，10 个 GPU 计算节点，一套 1.8P 共享存储。所有节点通过 100Gb/s EDR Infiniband 互联组成计算和存储网络。系统详细配置如下：

1） 登录管理节点：共 3 个登录节点。

2） GPU 计算节点：共 10 个 GPU 计算节点，每个节点配置 2 颗 Intel Golden 6240 系列处理器，共 36 个物理核，384GB 内存，8 个 NVIDIA V100 GPU 卡。

3） CPU 计算节点：共 260 个 CPU 计算节点，每个节点配置 2 颗 Intel Golden 6240 系列处理器，共 36 物理核，384GB 内存（根据 IB 网络配置，单个作业最多使用 160 个计算节点）。

4） 并行存储系统：配置一套 DDN 并行存储系统，共配置 1.8PB 存储容量。

5） 管理网络：配置一套千兆管理网；

6） 带外管理网络：配置一套千兆带外管理网；

7） 计算网络：配置一套 100Gb/s 高速 Infiniband 网。

1.2. 软件配置

系统软件配置环境如下：

1） 操作系统：采用 CentOS 7.6 版本操作系统；

2） 作业调度软件：采用 Slurm 19.04 作业调度系统；

3） 并行文件系统：采用 DDN 并行文件系统；

4） 编译环境：GNU、Intel 编译环境、CUDA;

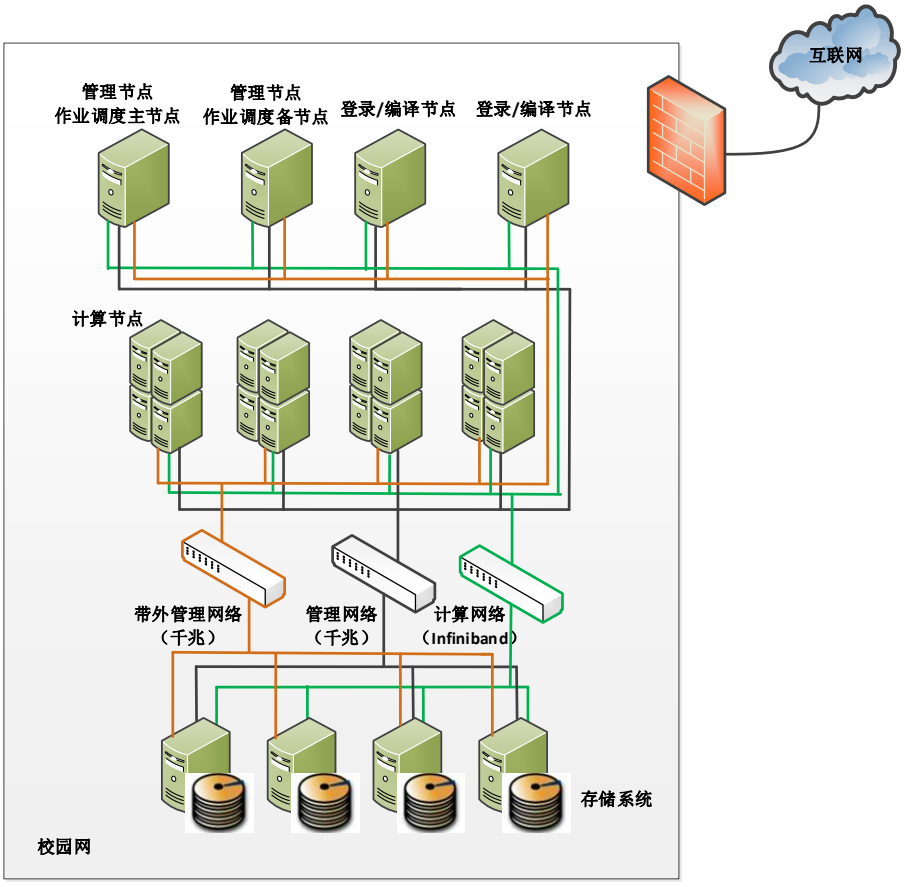
5） 并行环境：MPICH、MVAPICH、OPENMPI、Intel MPI;

6） 应用软件：Gromacs、Lammps、R、 VASP（需要授权）、OpenFoam、Ansys（试用）、Fluent（试用）、CFX（试用）、Matlab、Moose 等；

7） 其他工具软件：Anaconda、fftw、CAFFE、HDF5、QT、Tensorflow。

1.3. 系统架构

系统硬件架构图如下：



2. 快速入门

北京航空航天大学 HPC 平台将于 2020 年 12 月 8 日起开始切换正式运行环境，支持师生用户交费充值。使用计量计费查询系统、用户注册等相关系统将在正式运行后陆续上线，为了保持用户的使用习惯，申请账号的基本流程与试运行阶段保持一致。

本手册中提交至高算平台执行的作业也称为任务。

2.1. 系统计费

2.1.1. 计费标准

根据学校相关管理办法，北航 HPC 平台的收费标准如下：

1） 计算资源收费标准

序号	费用名称	单位	单价（元）	QOS	分区名	最大资源限制	最大运行时长	服务质量
1	CPU 计算费	核/时	0.05	cpu-low	cpu-low	无	7 天	低
2		核/时	0.07	cpu-normal	cpu-normal	无	7 天	中
3		核/时	0.1	cpu-high	cpu-high	无	7 天	高
4		核/时	0.05	cpu-quota	cpu-quota	无	7 天	学科科研优先
5	GPU 计算费	卡/时	2.50	gpu-low	gpu-low	2 卡、8 核	7 天	低
6		卡/时	3.75	gpu-normal	gpu-normal	4 卡、16 核	7 天	中
7		卡/时	5.00	gpu-high	gpu-high	8 卡、36 核	7 天	高
8		卡/时	2.50	gpu-quota	gpu-quota	8 卡、36 核	7 天	学科科研优先

2.1.2. 计费策略

1） 计费的最小单元是 0.01 小时；

2） QOS 的优先级越高，单位时间的价格越高；

3） 机时计算方法如下：

- CPU 分区机时：CPU 核数*作业运行时间
- GPU 分区机时：GPU 卡数*作业运行时间

4） 收费机时和奖励机时不支持退费。

5） 系统每天零时对账户进行一次检测，对于欠费账户，其管理的所有用户将不能再提交作业，已经提交和运行的作业不受影响。

2.2. 平台规则设置

根据平台前期运营情况，从以下几方面设定规则进行统一管理。

2.2.1. 登录安全设置

1） 管理节点和登录节点设置为 root 不能登录；

2） 短时间内 3 次密码错误登录，那么登录时所使用 IP 将被自动封锁 5 分钟，需要等待 5 分钟再认证。

2.2.2. 登录节点限制

登录节点不能运行负载大的任务，设置定时任务，对负载大的任务进行定时清理。基本规则包括：进程 CPU 使用率>=100%且运行时间超过 15 分钟、进程内存使用大小超过 10GB；

2.2.3. 存储配额限制

本系统用户默认的存储配额为 2TB，存储空间超出 2TB 以后读写文件将提示错误。

2.3. 客户端连接

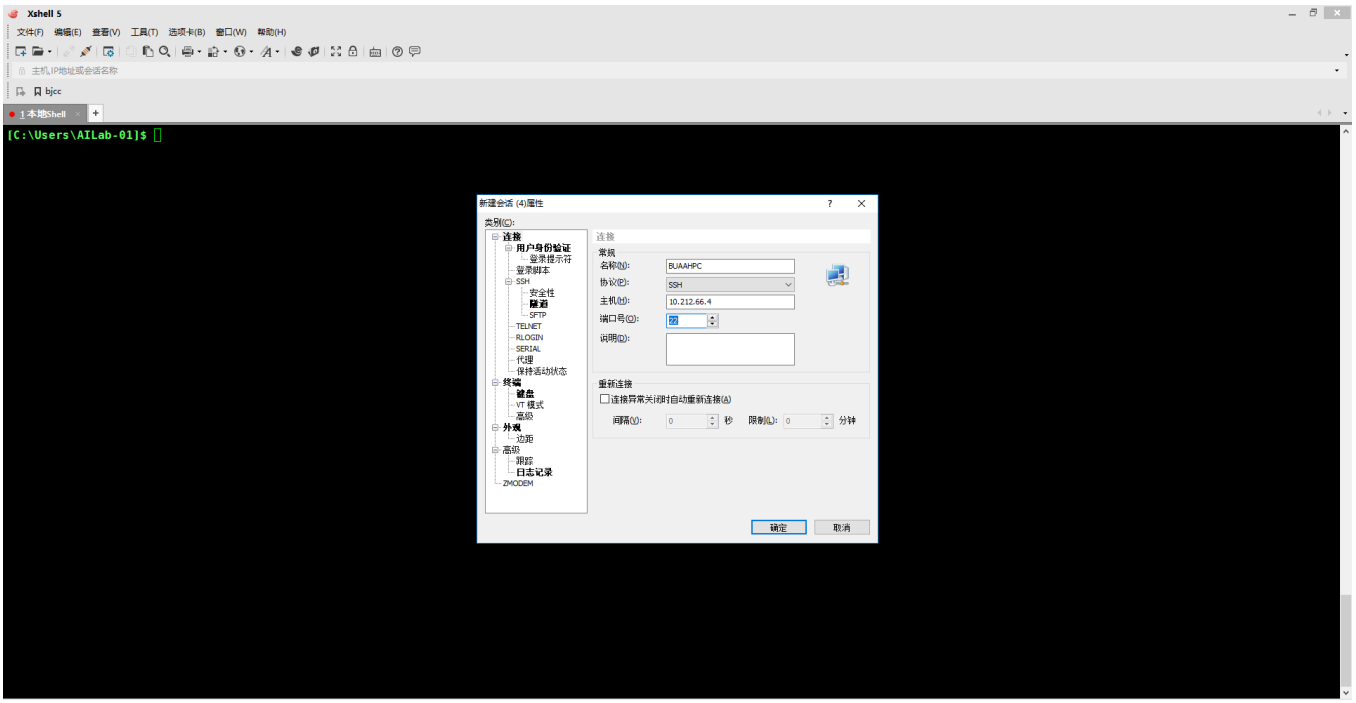
系统试运行阶段，测试用户可通过 IP 直接登录。

建议采用 XShell 或 Putty 等软件连接。

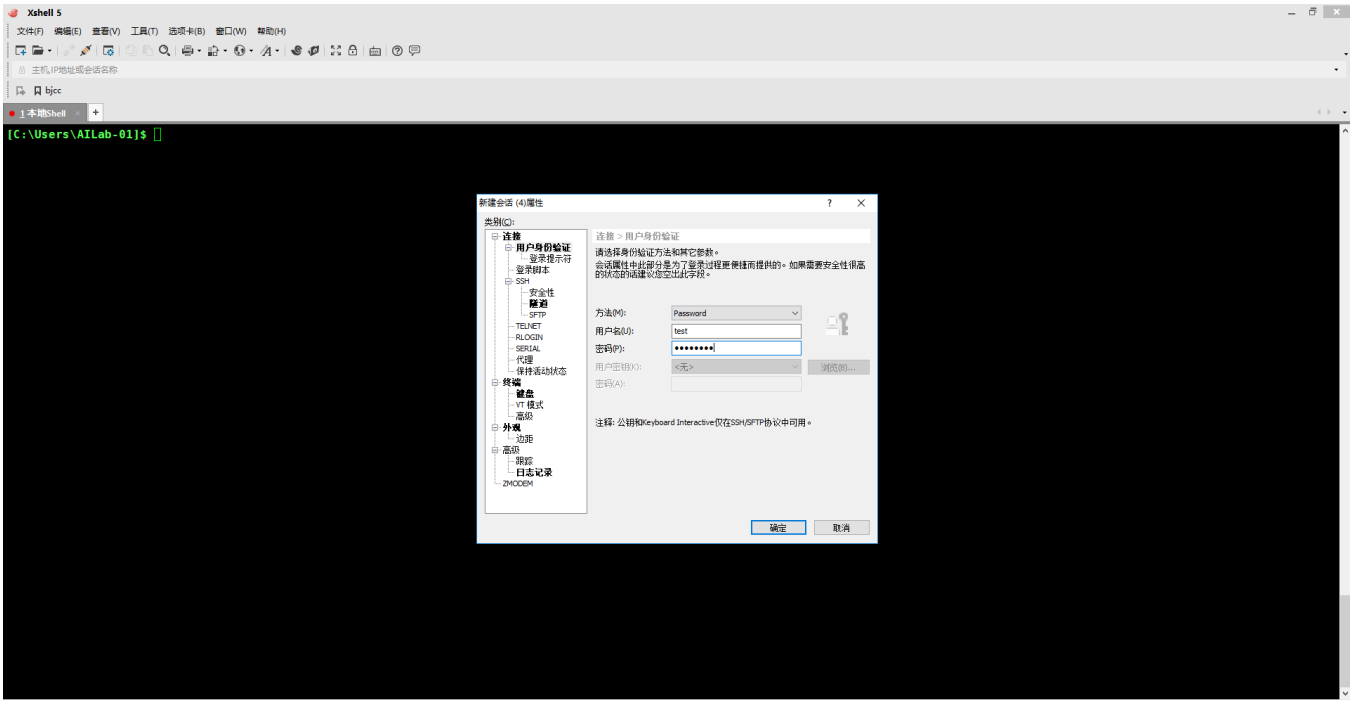
登录节点的 IP 地址为：10.212.66.4/10.212.66.5/10.212.70.128。

下面为 XShell 登录基本操作：

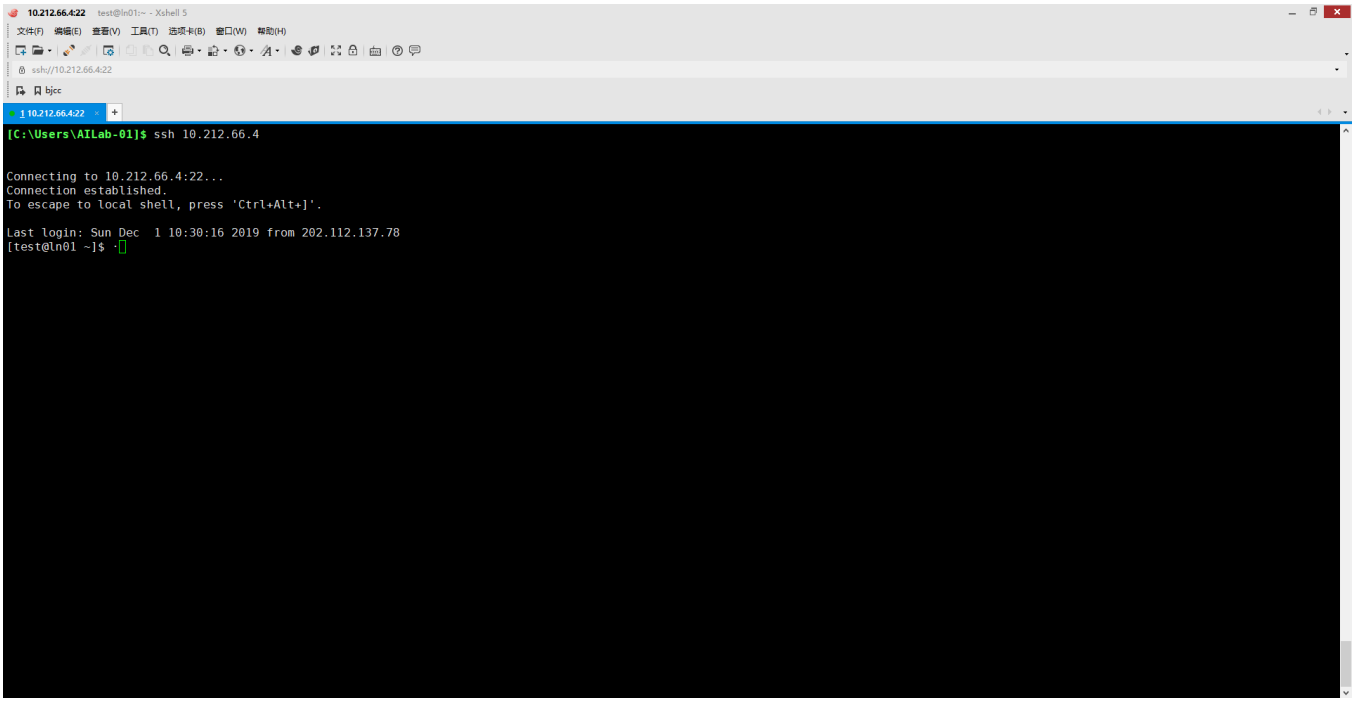
1) 打开 XShell 软件，新增连接，填入主机 IP 地址和端口号，选择 SSH 协议：



2) 输入用户名和密码：



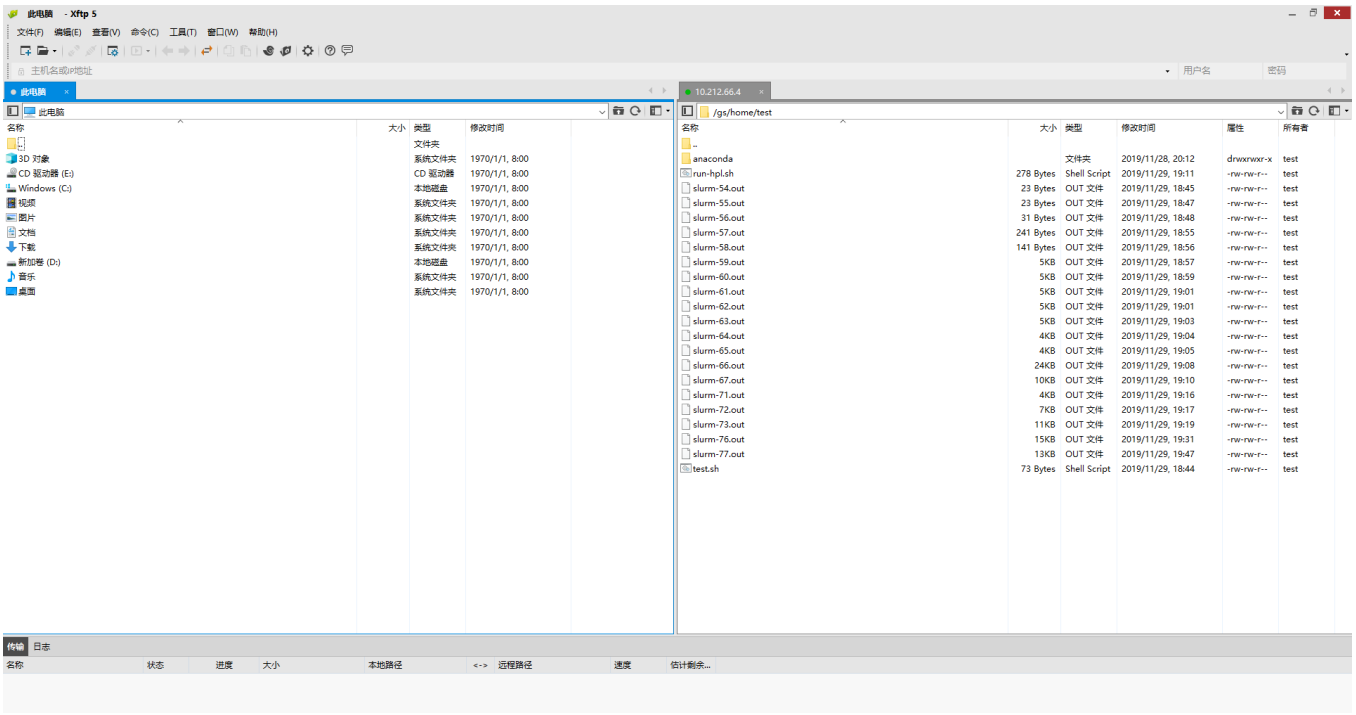
3) 点击确定，登录系统：



2.4. 准备程序和文件

在登录成功后，就可以准备测试程序和文件了，您可以直接在服务器上编辑，也可以通过 Xftp 将程序和文件上传到服务器上。

系统为每个用户配置了持久化保存的目录，保存在/gs/home 下，您需要长久保存的文件可以放置在这个目录中，这个目录是共享目录，所有节点都挂载。



2.5. 指定运行环境

程序源码准备完毕后，您需要为程序搭建其所需的运行环境。例如准备相应的库以及编译成可执行程序等。不建议将本地编译好的程序直接上传，因为服务器的环境可能与本地不相同，这样容易导致程序运行出错。

如果程序依赖于系统的环境变量和库，则需要通过 Environment Module 进行模块的载入，详细可参考文档第 4 节“配置运行环境”。

这里，我们假设您准备的程序是一个简单的 C 程序，不依赖于更复杂的库，程序如下：

```
[test@ln01 ~]$ vim helloworld.c
#include <stdio.h>

int main(void)

{
    printf( "Hello,World!\n" );

    return 0;
```

```
}
```

2.6. 编译程序

```
[test@ln01 ~]$ gcc -o helloword helloworld.c
[test@ln01 ~]$ ls
anaconda  helloworld  helloworld.c  run-hpl.sh  test.sh
```

2.7. 编写作业提交脚本

完成上述操作后，您就可以通过作业调度系统提交作业。

本平台配置了 Slurm 作业调度系统，您可以参考文档“作业管理”了解作业调度系统的详细说明，本节只给出一个最基本的例子。

使用 Slurm 时需要编辑已给作业调度提交脚本，请参考如下示例：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test             # 作业名是 test
#SBATCH -p cpu-low              # 提交到 cpu-low 分区
#SBATCH -N 1               # 使用一个节点
#SBATCH -n 1               # 使用一个进程（cpu 核）
#SBATCH -t 5:00             # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o test.out          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 test.out
#SBATCH -e test.err          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 test.err

./helloworld                    # 执行我的 ./helloworld 程序
Sleep 200
```

以上的脚本的第一行指定了这个脚本的解释器为 bash。每次编写脚本都必须写上这一行。之后有 #开头的若干行表示 SLURM 作业的设置区域，它告诉工作站运行任务的详细设定，它被提交到 cpu-low 分区当中，申请 1 个节点的 1 个 核心，限制任务最大运行时间是五分钟，将标准输出放在 test.out 中，标准错误输出放在 test.err 中。 它的主体内容就是在当前目录执行编译好的程序 helloworld。

关于分区的类型，可以先使用 sinfo 查看可用资源情况（服务队列）。

```
[test@ln01 ~]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
cpu-low      up   infinite    260   idle compute-[001-260]
cpu-low        up   infinite    260   idle compute-[001-260]
cpu-high       up   infinite    260   idle compute-[001-260]
cpu-quota      up   infinite    260   idle compute-[001-260]
gpu-low        up   infinite    10   idle   gpu-[01-10]
gpu-normal        up   infinite    10   idle   gpu-[01-10]
gpu-high        up   infinite    10   idle   gpu-[01-10]
gpu-quota        up   infinite    10   idle   gpu-[01-10]
```

其中 PARTITION 表示分区，NODES 表示结点数，NODELIST 为结点列表，STATE 表示结点运行状态。其中，idle 表示结点处于空闲状态，allocated 表示结点已经分配了一个或多个作业。

本系统分为 4 个 cpu 队列（包含 260 个计算节点），4 个 gpu 队列（包含 10 个 GPU 计算节点），**其中*-low 为优先级最低的作业队列，计算费用最便宜；其次是*-normal，优先级比*-low 高，计算费用同样略高于*-low；然后是*-high，优先级和计算费用比前两个队列高；最后是*-quota，该队列为学科科研优先队列，具有最高优先级，只有经相关部门认定后购买的机时才能享受该队列。**当分区存在空闲状态(idle)时，作业可以提交。

2.8. 提交作业

准备好 SLURM 脚本之后，可以使用 sbatch 提交作业：

```
[test@ln01 ~]$ sbatch run.slurm
Submitted batch job 85
[test@ln01 ~]$ squeue
  JOBID PARTITION     NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
     85    cpu-low     test     test  R       0:13      1 compute-001
```

在上面的输出中，sbatch 返回的信息是 “Submitted batch job 85”，这表示我的作业已经成功

提交，作业号是 85。而 squeue 显示我提交的作业的具体信息，在这里看到我的作业被放到 cpu-low 分区上运行，占用 1 个节点 comput-001，状态(ST)是运行状态(R)，并且已经运行了 13 秒钟。

2.9. 使用图形交互

通常情况下，在集群中我们都在命令行中操作。但是有时我们需要打开某些软件的图形界面，此时我们需要借助 X11 转发。

注意：在网络不好的时候请谨慎使用此功能，此时经过 X11 转发的界面操作起来有明显卡顿。尽量在校内有线网或信号较好的无线网的环境下使用。

2.9.1. Linux

在 Linux 环境中启用 X11 转发非常简单，只需要在登录时加入-X 参数。

```
test@lcaol: $ ssh -X user@server_ip
```

此后登录集群可以直接输入命令开启图形界面的程序。例如：

```
(base) [test@ln01 ~]$ module load matlab/R2019b
(base) [test@ln01 ~]$ matlab
MATLAB is selecting SOFTWARE OPENGL rendering.
```

2.9.2. MacOS

使用 MacOS 系统时需要安装第三方支持 X11 的软件 XQuartz。

安装完毕后，在登录集群时加入 -X 参数。

```
test@test: $ ssh -X user@server_ip
```

此后登录集群可以直接输入命令开启图形界面的程序。例如：

```
(base) [test@ln01 ~]$ module load matlab/R2019b
(base) [test@ln01 ~]$ matlab
MATLAB is selecting SOFTWARE OPENGL rendering.
```

2.9.3. Windows

推荐使用 MobaXterm 客户端进行连接。

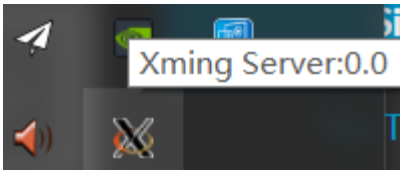
在默认情况下 MobaXterm 会自动打开 X11 的转发，因此只需正常登录然后直接输入打开软件的命令即可。（使用 Xshell 系列的用户需要额外下载 Xmanager）

使用 PuTTY 配合 Xming

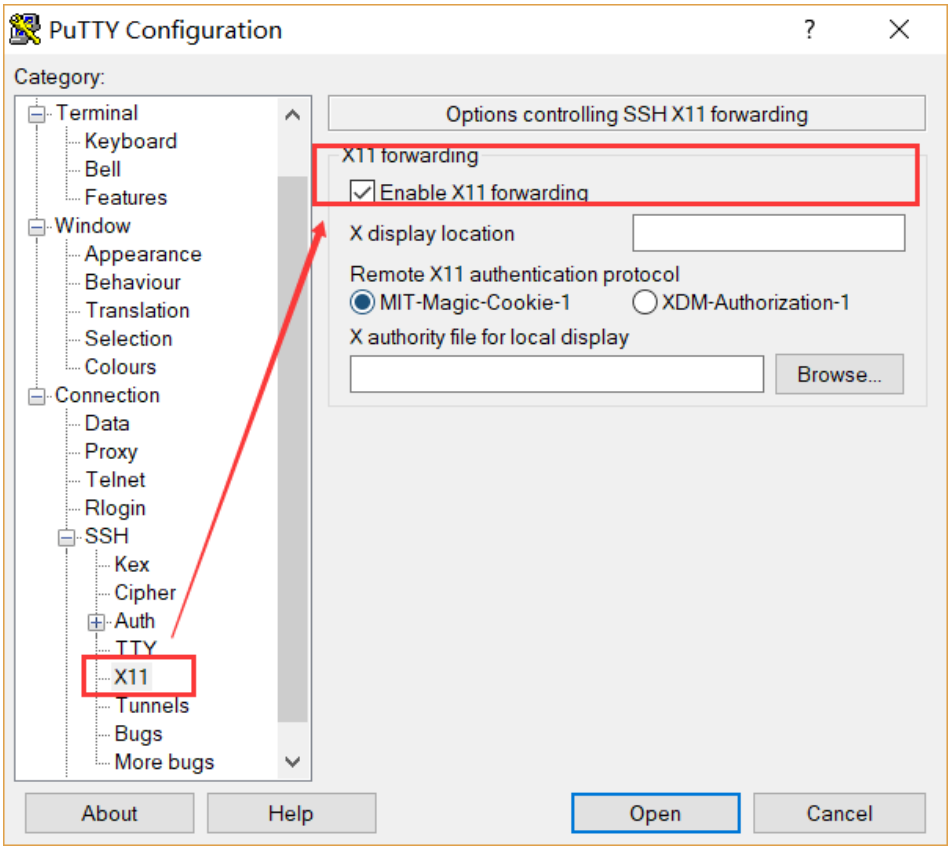
PuTTY 用户可配合 Xming 软件完成 X11 的转发。

首先下载 Xming。

安装完成后双击 Xming.exe 打开 Xming 的 Xserver，此时会在系统任务栏的 右下角看到 Xming 正在运行。



然后打开 PuTTY 客户端，选择服务器的相应 Session 配置，点击 Load 载入这个配置。 在左边面板选择 SSH -> X11，在右边勾选 Enable X11 Forwarding。 最后回到 Session 界面点击保存即可。



3. 配置运行环境

为了满足同学们计算任务的需求，服务器中安装了各种版本的软件。大家可在同一软件的不同版本之间切换，也可以在同一功能的不同软件之间切换，以此来选择最合适的编程环境和运行环境。使用系统命令 module 可以快速地达到这一效果。

3.1. 查看 module

在你使用某个软件之前，您必须通过 module 命令来配置此软件的运行环境，否则将无法使用此软件或者使用一个错误的版本。

例如，在没有载入任何 module 的情况下，输入 python 来尝试打开 python

```
[test@ln01 ~]$ python
Python 2.7.5 (default, Oct 30 2018, 23:45:53)
[GCC 4.8.5 20150623 (Red Hat 4.8.5-36)] on linux2
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>>
```

注意到此时 python 命令代表系统内置的 python，版本是 2.7.5。这是一个比较旧的版本，里面少了很多功能，和最新的许多包都无法兼容。

此时我们用 module 查看当前可用的模块，可以看到系统安装了 anaconda3：

```
[test@ln01 ~]$ module avail
------------------------------------------------------------------------
----- /opt/ohpc/pub/modulefiles
------------------------------------------------------------------------
-----
   EasyBuild/3.9.2    anaconda3/2019.10    autotools    cmake/3.14.3
gnu8/8.3.0    hwloc/2.0.3    intel/18.0.3.222    intel/19.0.5.281 (D)
pmix/2.2.2    prun/1.3    valgrind/3.15.0
```

使用 module load anaconda3 命令载入较新的 anaconda3

```
[test@ln01 ~]$ module load anaconda3
[test@ln01 ~]$ python
Python 3.7.4 (default, Aug 13 2019, 20:35:49)
[GCC 7.3.0] :: Anaconda, Inc. on linux
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>
```

3.2. 卸载 module

卸载 module 负责对加载的 module 进行卸载：

```
[test@ln01 ~]$ module list
Currently Loaded Modules:
  1) anaconda3/2019.10
[test@ln01 ~]$ module unload anaconda3
[test@ln01 ~]$ module list
No modules loaded
```

一个模块删除之后，您将无法直接使用与之相关的命令。对应软件的执行目录无法被直接访问，或者是还原成系统默认的版本。

有的时候，模块之间会有所冲突，您无法在同一时间同时加载两个模块。例如同一软件的不同版本，或者是接口相同的不同软件。当你载入其中一个后，再载入另一个就会出错。

3.3. 在作业调度系统中使用 module

module 命令仅作用在当前节点上，如果使用 SLURM 脚本提交任务，那么实际运行任务的节点和当前节点是不同的，因此方便的做法是将 module 命令一并写在 SLURM 脚本中，例如：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test
#SBATCH -p cpu-low
#SBATCH -t 5:00
```

```
module load anaconda/3


# do your computation jobs...
```

3.4. 定制默认载入的 module

当您登录系统时，系统会默认载入一些 module。如果这些 module 不是你需要的，或者需要载入更多的 module，那么请直接在个人 HOME 目录下的.bashrc 文件的最后添加“module load 需要加载的模块”。

3.5. module 与 anaconda

随着大数据、机器学习技术的发展，基于 Python 技术的应用场景越来越宽广，传统高性能计算环境也需要使用这些技术。Anaconda 指的是一个开源的 Python 发行版本，其包含了 conda、Python 等 180 多个科学包及其依赖项。conda 是一个开源的包、环境管理器，可以用于在同一个机器上安装不同版本的软件包及其依赖，并能够在不同的环境之间切换。

本系统允许用户在 Environment Module 的基础上，使用 Conda 自定义自己的环境，用户可以在自己的环境下安装需要的库，这些不会对其他人的环境产生影响。

由于登录节点到其他节点的 ssh 权限被限制，用户需要通过 srun 进行交互式操作，下面的操作是申请一个带 GPU 卡的交互环境，并且在该环境下配置 conda 环境（黑色加粗代表输入的命令，其他是系统输出内容）。

```
[test@ln01 ~]$ srun -p gpu --gres=gpu:1 bash
nvidia-smi
Tue Mar 10 18:41:17 2020
+-----------------------------------------------------------------------------+
| NVIDIA-SMI 418.87.00    Driver Version: 418.87.00    CUDA Version: 10.1     |
|-------------------------------+----------------------+----------------------+
| GPU  Name        Persistence-M| Bus-Id        Disp.A | Volatile Uncorr. ECC |
| Fan  Temp  Perf  Pwr:Usage/Cap|         Memory-Usage | GPU-Util  Compute M. |
|===============================+======================+======================|
|   0  Tesla V100-SXM2...  On   | 00000000:BE:00.0 Off |                    0 |
| N/A   42C    P0    68W / 300W |  14376MiB / 32480MiB |      0%      Default |
+-------------------------------+----------------------+----------------------+
```

用户可以首先加载 Anaconda 模块：

```
module load anaconda3/2019.10
```

加载后，您可以检查 Python 的版本：

```
which python
/gs/software/anaconda3/bin/python
python -V
Python 3.7.4
```

在使用 Anaconda 时，您可能需要更新已安装的软件包以及安装一些新的软件包。由于 Anaconda 已安装到共享存储中，并且您在其中没有写访问权限，因此需要在具有写访问权限的位置（您的家目录，但您需要注意您的磁盘配额）创建 Anaconda 环境。

检查 Conda 的环境：

```
conda env list
# conda environments:
#
base                  *  /gs/software/anaconda3
```

在您的家目录，创建.condarc 文件，内容如下：

```
cat ~/.condarc
channels:
  - defaults
ssl_verify: true
envs_dirs:
  - /gs/home/test/anaconda/envs
pkgs_dirs:
  - /gs/home/test/anaconda/pkgs
```

这个配置把 conda 环境放到共享存储中的家目录下，其中 test 为用户名。

添加清华的 anaconda 源作为安装源，修改.condarc 文件：

```
show_channel_urls: true
default_channels:
```

```
  - https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/main
  - https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/free
  - https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/r
custom_channels:
  conda-forge: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/cloud
  msys2: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/cloud
  bioconda: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/cloud
  menpo: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/cloud
  pytorch: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/cloud
  simpleitk: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/cloud
```

创建一个名字为 testenv 的 Conda 环境：

```
conda create --quiet --yes --name testenv
Collecting package metadata (current_repodata.json): ...working... done
Solving environment: ...working... done

## Package Plan ##

  environment location: /gs/home/test/anaconda/envs/testenv



Preparing transaction: ...working... done
Verifying transaction: ...working... done
Executing transaction: ...working... done
```

激活 testenv 的 conda 环境，星号为当前使用的环境：

```
conda activate  testenv
conda env list
```

```
# conda environments:
#
testenv               *  /gs/home/test/anaconda/envs/testenv
base                     /gs/software/anaconda3
```

列出 testenv 环境已安装的包列表：

```
conda list
```

退出 testenv 的 conda 环境：

```
conda deactivate
```

安装 scipy 包的例子：

```
conda activate  testenv

conda install --quiet --yes scipy

Collecting package metadata (current_repodata.json): ...working... done
Solving environment: ...working... done

## Package Plan ##

  environment location: /gs/home/test/anaconda/envs/testenv

  added / updated specs:
    - scipy


The following packages will be downloaded:
(包列表在这省略)
Preparing transaction: ...working... done
Verifying transaction: ...working... done
Executing transaction: ...working... done
```

```
(testenv) [test@ln01 ~]$  python -c "import scipy; print(scipy.__version__)"
1.3.1
```

conda 清理没用的安装包：

```
[test@ln01 anaconda]$ conda clean –t
[test@ln01 anaconda]$ conda clean –p
[test@ln01 anaconda]$ conda clean -all
```

-t 参数：删除没用的包

-p 参数：删除 tar 包

-all 参数：删除索引缓存、锁文件、不用的 cache 安装包以及 tar 包。

删除 testenv 的 conda 环境

```
[test@ln01 anaconda]$ conda env remove -n testenv

Remove all packages in environment /gs/home/test/anaconda/envs/testenv:

[test@ln01 anaconda]$ conda env list
# conda environments:
#
base                  *  /gs/software/anaconda3
```

4. 作业管理

下面对作业管理进行介绍，作业管理相关的操作主要包括：查看作业调度系统状态、查看作业状态、交互式作业提交、批处理作业提交、分配式作业提交、结束作业、追踪作业、更新作业、使用作业数组以及分区详解。有关作业管理的相关内容，如果需要更详细的信息，请参考 Slurm 官方网站：https://slurm.schedmd.com/。

4.1. 查看系统状态

使用 sinfo 可以查看系统的状态：

```
[test@ln01 ~]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
cpu-normal     up   infinite    260   idle compute-[001-260]
cpu-low        up   infinite    260   idle compute-[001-260]
cpu-high       up   infinite    260   idle compute-[001-260]
cpu-quota      up   infinite    260   idle compute-[001-260]
gpu-low        up   infinite    10   idle   gpu-[01-10]
gpu-normal        up   infinite    10   idle   gpu-[01-10]
gpu-high        up   infinite    10   idle   gpu-[01-10]
gpu-quota        up   infinite    10   idle   gpu-[01-10]
```

其中 PARTITION 表示分区，NODES 表示结点数，NODELIST 为结点列表，STATE 表示结点运行状态。其中，idle 表示结点处于空闲状态，allocated 表示结点已经分配了一个或多个作业。

本系统分为 4 个 cpu 队列（包含 260 个计算节点），4 个 gpu 队列（包含 10 个 GPU 计算节点）。

4.2. 分区介绍

不同的节点的特性和硬件属性不同，设置分区可以帮助用户更好确定节点的特点，进而选择最适合自己的节点进行运算。此外，如果集群中部分机器是私有的，那么设置分区可以使得只有部分用户能在这个分区提交作业。总的来说，分区(Partition)可看做一系列节点的集合。

目前我们只有两类可以提交作业的分区：

gpu 分区：包含 10 个 GPU 计算节点

cpu 分区：包含 260 个 CPU 计算节点

其中*-low 为优先级最低的作业队列，计算费用最便宜；其次是*-normal，优先级比*-low 高，计算费用同样略高于*-low；然后是*-high，优先级和计算费用比前两个队列高；最后是*-quota，该队列为学科科研优先队列，具有最高优先级，只有经相关部门认定后购买的机时才能享受该队列。

4.3. 查看作业状态

查看作业状态的命令为 squeue：

```
[test@ln01 ~]$ squeue
JOBID PARTITION     NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
 86     cpu-low     test     test  R       0:10      1   compute-001
```

其中 JOBID 表示任务 ID，Name 表示任务名称，USER 为用户，TIME 为已运行时间，NODES 表示占用结点数，NODELIST 为任务运行的结点列表。

4.4. 交互式作业提交

交互式作业是指在 Shell 窗口中执行 srun 命令，主要的命令格式如下：

```
srun [options] command
```

sun 的常用选项包括：

- -n, --ntasks=number

指定要运行的任务数。请求为 number 个任务分配资源，默认为每个任务一个处理器核。

- -c, --cpus-per-task=ncpus

告知资源管理系统控制进程，作业步的每个任务需要 ncpus 个处理器核。若未指定此选项，则控制进程默认为每个任务分配一个处理器核。

- -N, --nodes=minnodes[-maxnodes]

请求为作业至少分配 minnodes 个结点。调度器可能觉得在多于 minnodes 个结点上运行作业。可以通过 maxnodes 限制最多分配的结点数目（例如“-N 2-4″或“--nodes=2-4″）。最少和最多结

点数目可以相同以指定特定的结点数目（例如，“-N 2″或“--nodes=2-2″将请求两个且仅两个结点）。分区的结点数目限制将覆盖作业的请求。如果作业的结点限制超出了分区中配置的结点数目，作业将被拒绝。如果没有指定-N，缺省行为是分配足够多的结点以满足-n 和-c 参数的需求。在允许的限制范围内以及不延迟作业开始运行的前提下，作业将被分配尽可能多的结点。

- -p, --partitions=partition name

在指定分区中分配资源。如未指定，则由控制进程在系统默认分区中分配资源。

- -w, --nodelist=node name

请求指定的结点名字列表。作业分配资源中将至少包含这些结点。列表可以用逗号分隔的结点名或结点范围（如 cn[1-5,7,...]）指定，或者用文件名指定。如果参数中包含“/”字符，则会被当作文件名。如果指定了最大节点数，如：-N 1-2，但是文件中有两个多余的节点，则请求列表中只会使用前两个节点。

- -x, --exclude=node name

不要将指定的节点分配作业。如果包含“/”字符，参数被当作文件名。Srun 将把作业请求提交到控制进程，然后在远程节点上启动所有进程。如果资源请求不能被立即满足，srun 将阻塞等待，直到资源可以运行作业。如果指定了–immediate 选项，则 srun 将在资源不是立即可用时终止作业。

- -h, --help

如果需要使用 srun 的更多选项，可以通过-h 或–help 选项查看。

4.5. 批处理作业提交

批处理作业是指用户编写作业脚本，指定资源需求约束，提交后台执行作业。提交批处理作业的命令是 sbatch，用户提交命令即返回命令行窗口，但此时作业进入调度状态，在资源满足要求时，分配完计算节点之后，系统将在所分配的第一个计算节点（不是登录节点）上执行用户的作业脚本。

批处理作业的脚本为一个文本文件，脚本第一行以“#!”字符开头，并制定脚本文件的解释程序，如 sh，bash。由于计算节点为精简环境，只提供 sh 和 bash 支持。

使用 Slurm 时需要编辑已给作业调度提交脚本，请参考如下示例：

4.5.1. 串行作业

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test              # 作业名是 test
#SBATCH -p cpu-low               # 提交到 cpu-low 分区
#SBATCH -N 1                # 使用一个节点
#SBATCH -n 1                # 使用一个进程（cpu 核）
#SBATCH -t 5:00              # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o test.out          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 test.out
#SBATCH -e test.err          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 test.err

./helloworld                     # 执行我的 ./helloworld 程序
Sleep 200
```

以上的脚本的第一行指定了这个脚本的解释器为 bash。每次编写脚本都必须写上这一行。之后有 # 开头的若干行表示 SLURM 作业的设置区域，它告诉工作站运行任务的详细设定：它被提交到 cpu-low 分区当中，申请 1 个节点的 1 个 核心，限制任务最大运行时间是五分钟，将标准输出放在 test.out 中，标准错误输出放在 test.err 中。 它的主体内容就是在当前目录执行编译好的程序 helloworld。

当一次性提交的作业数量比较多的时候，可以在同一个作业中生成批量任务，如下例子所示：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test              # 作业名是 test
#SBATCH -p cpu-low               # 提交到 cpu-low 分区
#SBATCH -N 1                # 使用一个节点
#SBATCH -n 1                # 使用一个进程（cpu 核）
#SBATCH -t 5:00              # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o test.out          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 test.out
#SBATCH -e test.err          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 test.err

srun --exclusive ./helloworld &
```

```
srun --exclusive ./helloworld &
srun --exclusive ./helloworld &
srun --exclusive ./helloworld &

wait
```

上面示例的这个作业中一次性生成了 4 个子任务，该作业将在这 4 个子任务全部结束之后才正常结束。这里的--exclusive 是为了防止子任务同时运行发生资源抢占。

4.5.2. 并行作业

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J vasp            # 作业名是 vasp
#SBATCH -p cpu-low             # 提交到 cpu-low 分区
#SBATCH -N 2               # 使用 2 个节点
#SBATCH -n 16               # 使用 16 个进程（cpu 核）
#SBATCH --ntasks-per-node=8    # 每个节点启动 8 个进程
#SBATCH -t 5:00            # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o vasp.out         # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 vasp.out
#SBATCH -e vasp.err         # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 vasp.err

srun hostname | sort > machinefile.${SLURM_JOB_ID}
NP=`cat machinefile.${SLURM_JOB_ID} | wc -l`

module load intel/18.0.3.222

mpirun -genv I_MPI_FABRICS shm:dapl -np ${NP} -f ./machinefile.${SLURM_JOB_ID}
/gs/software/vasp/vasp.5.4.4/bin/vasp_std          # 执行我的 vasp 程序
```

4.5.3. GPU 作业

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J gputest            # 作业名是 gputest
```

```
#SBATCH -p gpu-normal              # 提交到 gpu-normal 分区
#SBATCH -N 1               # 使用 1 个节点
#SBATCH -n 1               # 使用 1 个进程（cpu 核）
#SBATCH --gres=gpu:2        # 使用两个 GPU 卡
#SBATCH -t 5:00             # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o gputest.out          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 gputest.out
#SBATCH -e gputest.err          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 gputest.err

module load anaconda3

python MNIST.py # 执行 GPU 程序
```

4.6. 分配式作业提交

salloc 命令为分配式作业提交命令，命令结束后将释放分配的资源，基本语法为：

```
salloc [options] command
```

如果后面的 command 为空，则执行 slurm 的配置 slurm.conf 中通过 SallocDefaultCommand 设定的命令。如果 SallocDefaultCommand 没有设置，则将执行用户默认的 shell。

salloc 的主要选项如下：

- --core-per-socke=cores

分配的节点需要至少每颗 CPU 核

- -I, --immediate=seconds

在 seconds 秒内资源未满足的情况下立即退出。

- -J, --job-name=job name

设定作业名

- -N, --nodes=minnodes[-maxnodes]

请求为作业至少分配 minnodes 个结点。调度器可能觉得在多于 minnodes 个结点上运行作业。可以通过 maxnodes 限制最多分配的结点数目（例如“-N 2-4″或“--nodes=2-4″）。最少和最多结

点数目可以相同以指定特定的结点数目（例如，“-N 2″或“--nodes=2-2″将请求两个且仅两个结点）。分区的结点数目限制将覆盖作业的请求。如果作业的结点限制超出了分区中配置的结点数目，作业将被拒绝。如果没有指定-N，缺省行为是分配足够多的结点以满足-n 和-c 参数的需求。在允许的限制范围内以及不延迟作业开始运行的前提下，作业将被分配尽可能多的结点。

- -n, --ntasks=number

指定要运行的任务数。请求为 number 个任务分配资源，默认为每个任务一个处理器核。

- -p, --partitions=partition name

在指定分区中分配资源。如未指定，则由控制进程在系统默认分区中分配资源。

- -w, --nodelist=node name

请求指定的结点名字列表。作业分配资源中将至少包含这些结点。列表可以用逗号分隔的结点名或结点范围（如 cn[1-5,7,...]）指定，或者用文件名指定。如果参数中包含“/”字符，则会被当作文件名。如果指定了最大节点数，如：-N 1-2，但是文件中有两个多余的节点，则请求列表中只会使用前两个节点。

- -x, --exclude=node name

不要将指定的节点分配作业。如果包含“/”字符，参数被当作文件名。salloc 将把作业请求提交到控制进程，然后在远程节点上启动所有进程。如果资源请求不能被立即满足，salloc 将阻塞等待，直到资源可以运行作业。如果指定了–immediate 选项，则 srun 将在资源不是立即可用时终止作业。

- -h, --help
- 如果需要使用 srun 的更多选项，可以通过-h 或–help 选项查看。

4.7. 结束作业

使用 scancel 命令可以取消自己的作业，命令格式如下：

```
scancel jobId
```

Jobid 可以通过 squeue 获得。对于排队的作业，取消作业将简单地把作业标记为 CANCELED 状态而结束作业。对于运行中或挂起的作业，取消作业将终止作业的所有作业步，包括批处理作业脚本，将作业标记为 CANCELED 状态，并回收分配给作业的节点。批处理作业取消后马上终

止，交互作业的进程会感知到任务的退出而终止，分配式作业的进程不会自动退出，除非作业执行用户命令因作业或任务的结束而终止。

4.8. 追踪作业

SLURM 提供了丰富的追踪任务的命令，例如 scontrol，sacct 等。这些 命令有助于查看正在运行或已完成的任务状态。当用户认为任务异常时，可使用这些 工具来追踪任务的信息。

对于正在运行或排队的任务，可以使用以下命令：

```
scontrol show job jobID
```

其中 JOBID 是正在运行的作业 ID，如果忘记 ID 可以使用 squeue -u USERNAME 来 查看目前处于运行中的作业。

```
[test@ln01 ~]$ squeue
  JOBID PARTITION     NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
   87     cpu-low     test     test  R       0:12   1     compute-001
[test@ln01 ~]$ scontrol show job 87
JobId=87 JobName=test
   UserId=test(1193) GroupId=test(1193) MCS_label=N/A
   Priority=4294901723 Nice=0 Account=hpc QOS=cpu-low
   JobState=RUNNING Reason=None Dependency=(null)
   Requeue=1 Restarts=0 BatchFlag=1 Reboot=0 ExitCode=0:0
   RunTime=00:00:19 TimeLimit=00:05:00 TimeMin=N/A
   SubmitTime=2019-12-01T19:37:09 EligibleTime=2019-12-01T19:37:09
   AccrueTime=2019-12-01T19:37:09
   StartTime=2019-12-01T19:37:10 EndTime=2019-12-01T19:42:10 Deadline=N/A
   SuspendTime=None SecsPreSuspend=0 LastSchedEval=2019-12-01T19:37:10
   Partition=cpu-low AllocNode:Sid=ln01:27360
   ReqNodeList=(null) ExcNodeList=(null)
   NodeList=compute-001
   BatchHost=compute-001
```

```
   NumNodes=1 NumCPUs=1 NumTasks=1 CPUs/Task=1 ReqB:S:C:T=0:0:*:*
   TRES=cpu=1,node=1,billing=1
   Socks/Node=* NtasksPerN:B:S:C=0:0:*:* CoreSpec=*
   MinCPUsNode=1 MinMemoryNode=0 MinTmpDiskNode=0
   Features=(null) DelayBoot=00:00:00
   OverSubscribe=OK Contiguous=0 Licenses=(null) Network=(null)
   Command=/gs/home/test/run.slurm
   WorkDir=/gs/home/test
   StdErr=/gs/home/test/test.out
   StdIn=/dev/null
   StdOut=/gs/home/test/test.out
   Power=
```

作业完成后，需要用 sacct 命令来查看历史作业。默认情况下，用户仅能查看属于自己的历史作业。直接使用 sacct 命令会输出从当天 00:00:00 起到现在的全部作业。

```
[test@ln01 ~]$ sacct
JobID    JobName  Partition    Account  AllocCPUS      State ExitCode
------------ ---------- ---------- ---------- ---------- ---------- --------
81       hotname    cpu-low       hpc         1     FAILED     2:0
82       hostname    cpu-normal       hpc         1  COMPLETED     0:0
83         bash       gpu-normal       hpc         1  COMPLETED     0:0
84          test    cpu-normal       hpc         1  COMPLETED     0:0
84.batch       batch                hpc         1  COMPLETED     0:0
85             test    cpu-normal       hpc         1  COMPLETED     0:0
85.batch       batch                hpc         1  COMPLETED     0:0
86             test    cpu-normal       hpc         1  COMPLETED     0:0
86.batch       batch                hpc         1  COMPLETED     0:0
87             test    cpu-low       hpc         1  COMPLETED     0:0
87.batch       batch                hpc         1  COMPLETED     0:0
```

使用“sacct -S MMDD”命令可以输出从 MM 月 DD 日起的所有历史作业，默认情况会输出作业 ID，作业名，分区，账户，分配的 CPU，任务结束状态，返回码。 当然我们还可以使用 --format 参数来指定到底要输出那些指标。

```
[test@ln01 ~]$ sacct --format=jobid, user, alloccpu, allocgres, state%15,
exitcode
       JobID     User  AllocCPUS    AllocGRES         State ExitCode
------------ --------- ---------- ------------ --------------- --------
81              test         1                    FAILED      2:0
82              test         1                 COMPLETED      0:0
83              test         1       gpu:2      COMPLETED      0:0
84              test         1                 COMPLETED      0:0
84.batch                     1                 COMPLETED      0:0
85              test         1                 COMPLETED      0:0
85.batch                     1                 COMPLETED      0:0
86              test         1                 COMPLETED      0:0
86.batch                     1                 COMPLETED      0:0
87              test         1                 COMPLETED      0:0
87.batch                     1                 COMPLETED      0:0
```

4.9. 更新作业

有时我们很早就提交了任务，但是在任务开始前却发现作业的属性写错了（例如提交错了分区，忘记申请 GPU 个数），取消了重新排队似乎很不划算。如果作业恰好没在运行 我们是可以通过 scontrol 命令来修改作业的属性。

使用以下命令可以修改 JOBID 任务的部分属性：

```
scontrol update jobid=JOBID ...
```

4.10. 使用作业数组

很多时候我们需要运行一组作业，这些作业所需的资源和内容非常相似，只是一些参数 不相同。这个时候借助 Job Array 就可以很方便地批量提交这些作业。Job Array 中的 每一个作业在调度时视为独立的作业，仍然受到队列以及服务器的资源限制。

在 SLURM 脚本中使用 #SBATCH -a range 即可指定 Job Array 的数字范围，其中的 range 参数需要是连续或不连续的整数。下面几种指定方式都是合法的。

- #SBATCH -a 0-9 作业编号范围是 0 到 9，均含边界；
- #SBATCH -a 0,2,4 作业编号是 0,2,4；
- #SBATCH -a 0-5:2 同上，作业编号为 0,2,4；
- #SBATCH -a 0-9,20,40 混合指定也是可以的。

在脚本运行中，SLURM 使用环境变量来表示作业数组，具体为

- SLURM_ARRAY_JOB_ID 作业数组中第一个作业的 ID；
- SLURM_ARRAY_TASK_ID 该作业在数组中的索引；
- SLURM_ARRAY_TASK_COUNT 作业数组中作业总数；
- SLURM_ARRAY_TASK_MAX 作业数组中最后一个作业的索引；
- SLURM_ARRAY_TASK_MIN 作业数组中第一个作业的做引。

可用以上变量来区分不同组内的任务，以便于处理不同的输入参数。

对于每个数组内的作业，它的默认输出文件的命名方式为 slurm-JOBID_TASKID.out。

下面是一个很小的 SLURM 脚本例子，它使用 Job Array 来返回一些预设数组中的不同元素。 在实际应用中，这些不同的字符串或许就是程序所需输入的文件名。当然您也可以使用一 个脚本来包装你的程序，然后在这个脚本中获取这个环境变量。

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J jobarray             # 作业名是 jobarray
#SBATCH -p cpu-low              # 提交到 cpu-low 分区
```

```
#SBATCH -N 1                # 使用一个节点
#SBATCH --cpus-per-task=1    # 每个进程占用一个 cpu 核心
#SBATCH -t 5:00             # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o test.out          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 test.out
#SBATCH -a 0-2              # 设置作业数组包含 3 步

input=(foo bar baz)
echo "This is job #${SLURM_ARRAY_JOB_ID}, with parameter
${input[$SLURM_ARRAY_TASK_ID]}"
echo "There are ${SLURM_ARRAY_TASK_COUNT} task(s) in the array."
echo "  Max index is ${SLURM_ARRAY_TASK_MAX}"
echo "  Min index is ${SLURM_ARRAY_TASK_MIN}"
sleep 5
```

提交上面的作业，使用 squeue 查看作业运行情况：

```
[test@ln01 ~]$ sbatch jobarray.slurm
Submitted batch job 94
[test@ln01 ~]$ squeue
JOBID PARTITION     NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
94_0  cpu-low jobarray   test  R       0:11      1    compute-001
94_1  cpu-low jobarray   test  R       0:11      1    compute-001
94_2  cpu-low jobarray   test  R       0:11      1    compute-001
```

取消作业数组的部分或全部任务可以使用 scancel 命令。

- scancel 94_[1-2]: 取消 94 号作业数组 TASK_ID 为 1 和 2 的作业。
- scancel 94_0 94_2: 取消 94 号作业数组 TASK_ID 为 0 和 2 的作业。
- scancel 94: 取消 94 号作业数组的全部作业。

5. 应用使用示例

5.1. Ansys

在/gs/script/ansys 下有 Ansys 的提交脚本和测试算例：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J ansys            # 作业名是 ansys
#SBATCH -p cpu-low             # 提交到 cpu-low 分区
#SBATCH -N 2               # 使用 2 个节点
#SBATCH -n 16               # 使用 16 个 CPU 核
#SBATCH --ntasks-per-node 8    # 每个节点使用 8 个 CPU 核
#SBATCH -t 5:00            # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o ansys.out          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 ansys.out
#SBATCH -e ansys.err          # 将屏幕的错误输出结果保存到当前文件夹的 ansys.err

srun hostname | sort > machinefile.${SLURM_JOB_ID}

NP=`cat machinefile.${SLURM_JOB_ID} | wc -l`

mech_host=""
for host in ` sort -u machinefile.${SLURM_JOB_ID}`;do
  n=$(grep -c $host machinefile.${SLURM_JOB_ID})
       mech_host=$(echo "$host:$n:$mech_host")
done
mech_host=$(echo $mech_host|sed "s/:$//")

module load ansys/v191
```

```
ansys191 -b -dis -mpi ibmmpi -machines $mech_host -i vm240.txt -o vm240.out
```

5.2. Fluent

在/gs/script/fluent 下有 fluent 的提交脚本和测试算例：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J fluent            # 作业名是 fluent
#SBATCH -p cpu-low             # 提交到 cpu-low 分区
#SBATCH -N 2               # 使用 2 个节点
#SBATCH -n 16               # 使用 16 个 CPU 核
#SBATCH --ntasks-per-node 8    # 每个节点使用 8 个 CPU 核
#SBATCH -t 5:00            # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o fluent.out         # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 fluent.out
#SBATCH -e fluent.err         # 将屏幕的错误输出结果保存到当前文件夹的 fluent.err

srun hostname | sort > machinefile.${SLURM_JOB_ID}

NP=`cat machinefile.${SLURM_JOB_ID} | wc -l`

mech_host=""
for host in ` sort -u machinefile.${SLURM_JOB_ID}`;do
  n=$(grep -c $host machinefile.${SLURM_JOB_ID})
       mech_host=$(echo "$host:$n,$mech_host")
done
mech_host=$(echo $mech_host|sed "s/,$//")
echo $mech_host

module load ansys/v191
module load intel/18.0.3.222
```

```
fluent 2d -g -ssh -pib -mpi=intel -t$NP  -cnf="$mech_host" -i inputfile
```

5.3. CFX

在/gs/script/cfx 下有 cfx 的提交脚本和测试算例：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J cfx              # 作业名是 cfx
#SBATCH -p cpu-low              # 提交到 cpu-low 分区
#SBATCH -N 2                # 使用 2 个节点
#SBATCH -n 16                # 使用 16 个 CPU 核
#SBATCH --ntasks-per-node 8    # 每个节点使用 8 个 CPU 核
#SBATCH -t 5:00             # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o cfx.out          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 cfx.out
#SBATCH -e cfx.err          # 将屏幕的错误输出结果保存到当前文件夹的 cfx.err

srun hostname | sort > machinefile.${SLURM_JOB_ID}

NP=`cat machinefile.${SLURM_JOB_ID} | wc -l`

mech_host=""
for host in ` sort -u machinefile.${SLURM_JOB_ID}`;do
  n=$(grep -c $host machinefile.${SLURM_JOB_ID})
       mech_host=$(echo "$host*$n,$mech_host")
done
mech_host=$(echo $mech_host|sed "s/,$//")
echo $mech_host

module load ansys/v191
```

```
    cfx5solve -def perf_AirliftReactor.def -start-method "IBM MPI Distributed
Parallel" -par-dist "$mech_host"
```

5.4. VASP

在/gs/script/vasp 下有 vasp 的提交脚本和测试算例：

```
    #!/bin/bash
    #SBATCH -J vasp             # 作业名是 vasp
    #SBATCH -p cpu-low              # 提交到 cpu-low 分区
    #SBATCH -N 2                # 使用 2 个节点
    #SBATCH -n 16                # 使用 16 个 CPU 核
    #SBATCH --ntasks-per-node 8    # 每个节点使用 8 个 CPU 核
    #SBATCH -t 5:00             # 任务最大运行时间是 5 分钟
    #SBATCH -o vasp.out          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 vasp.out
    #SBATCH -o vasp.err          # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 vasp.err

    srun hostname | sort > machinefile.${SLURM_JOB_ID}

    NP=`cat machinefile.${SLURM_JOB_ID} | wc -l`

    module load intel/18.0.3.222

    mpirun -genv I_MPI_FABRICS shm:dapl -np ${NP} -f ./machinefile.${SLURM_JOB_ID}
/gs/software/vasp/vasp.5.4.4/bin/vasp_std          # 执行我的 vasp 程序
```

5.5. Lammps

在/gs/script/lammps 下有 lammps 的提交脚本：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J lammps            # 作业名是 lammps
#SBATCH -p cpu-low             # 提交到 cpu-low 分区
#SBATCH -N 2               # 使用 2 个节点
#SBATCH -n 16               # 使用 16 个 CPU 核
#SBATCH --ntasks-per-node 8    # 每个节点使用 8 个 CPU 核
#SBATCH -t 5:00            # 任务最大运行时间是 5 分钟
#SBATCH -o lammps.out         # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 lammps.out
#SBATCH -o lammps.err         # 将屏幕的输出结果保存到当前文件夹的 lammps.err

srun hostname | sort > machinefile.${SLURM_JOB_ID}

NP=`cat machinefile.${SLURM_JOB_ID} | wc -l`

module load lammps/20191030


mpirun -genv I_MPI_FABRICS shm:dapl -np ${NP} -f ./machinefile.${SLURM_JOB_ID}
lmp_mpi
```