

中国科技云·超算云 使用手册

目 录

1. 产品概述	1
2. 应用中心	2
2.1 超算云服务	3
2.2 应用软件作业模板	3
3. 超算账号绑定.....	4
4. 登录超算	5
4.1 内部集成的 WEB SSH.....	5
4.2 第三方登录软件	6
5. 文件传输	8
5.1 快传工具	8
5.2 WINSCP 工具.....	10
6. 作业提交	12
6.1 命令行提交	12
6.2 集成界面提交作业	12
7. 可视化功能	15
8. 计费中心	17
9. 其他功能	18
9.1 系统配置	19
9.2 检查新版本	19
9.3 清理缓存	19
9.4 联系客服	20
9.5 关注超算动态	20

1.产品概述

中国科技云·超算云是基于互联网与云计算技术，依托中国国家网格，提供超算计算资源、优化网络、应用与工具、软件与服务的一站式平台，累计服务用户（单位）15000+，长期以来秉承优质的服务宗旨，为各类科研院所及企业提供优质的超级计算和云计算服务，包括科学计算、工业仿真、气象海洋、新能源、生物医药、人工智能等 20 多个重点行业应用领域。

温馨提示：

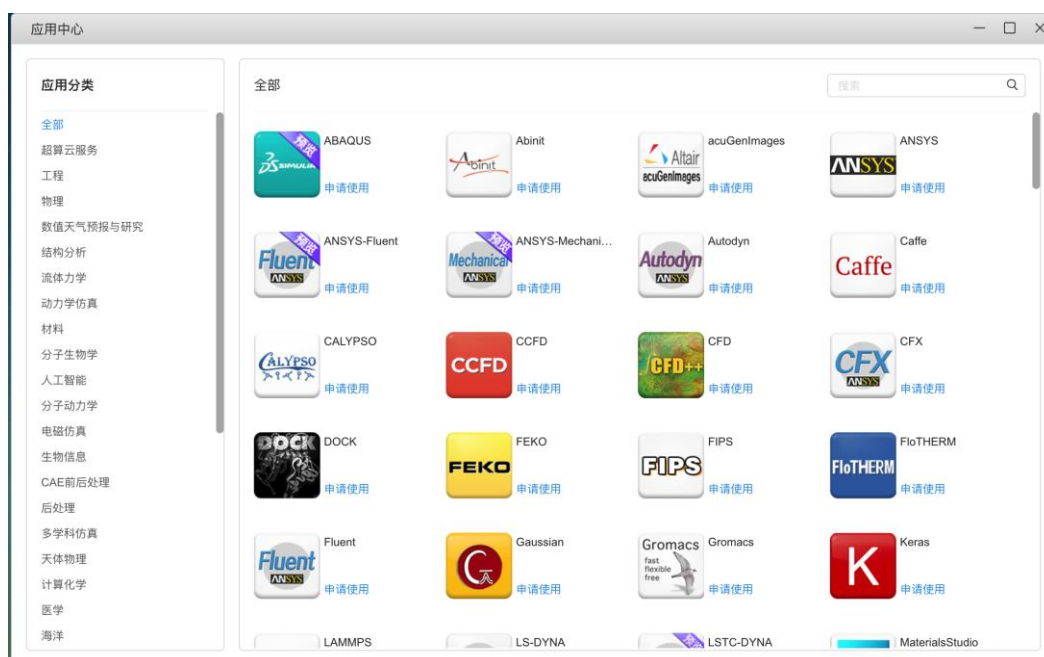
- ❖ 首次使用需要访问链接 <https://cloud.blsc.cn/>
- ❖ 点击下图红框注册账号，点击下图绿框下载安装客户端
- ❖ 用户也可以通过“中国科技云通行证”注册登录。





2.应用中心

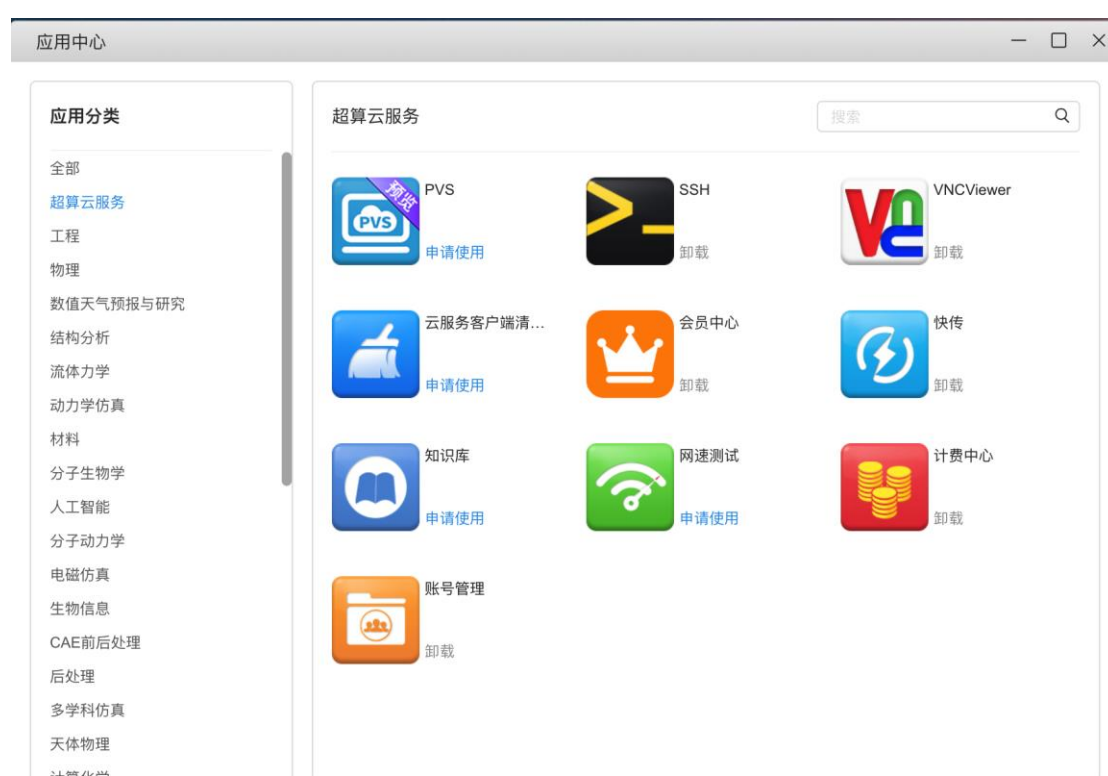
应用中心是中国科技云·超算云“桌面”上的一个图标，它将平台各项功能以“APP”的形式进行封装，里面包含了“超算云服务”工具以及常用的计算应用软件作业模板。可以方便用户简化超算作业提交操作。



2.1 超算云服务

在“应用中心”中，点击“超算云服务”，可以查看平台提供的常用工具，如 Web SSH、快传、计费中心等（各项功能介绍请参考后续章节）。

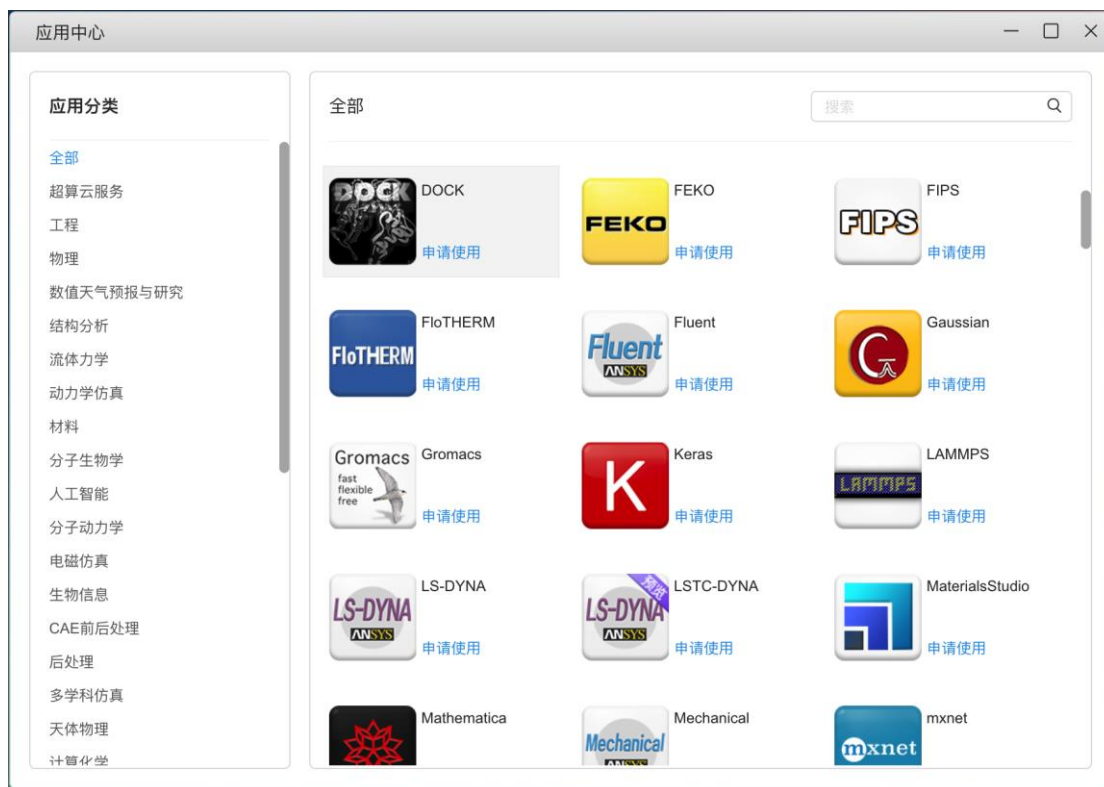
点击“申请使用”，即可打开并添加至中国科技云·超算云“桌面”。



2.2 应用软件作业模板

在“应用中心”中，我们根据用户的需求，集成了不同行业、不同版本的应用程序，为用户提供计算应用程序模板，可以通过图形化方式完成计算任务的提交与管理，简化用户的操作，提高工作效率。

用户可以通过左侧的分类或搜索，进行应用程序的查找。



温馨提示:

❖ 应用中心里的商业软件仅仅是图标，需要由客户上传安装包到账号下，联系客服进行安装集成，集成好之后就可以用图形界面提交作业。

❖ 若用使用商业软件，需要客户提供商业软件相关授权。

3.超算账号绑定

当用户登录到平台以后，默认没有与超算的账户进行关联。您可以通过联系销售获得超算账号，后台会自动为您绑定好，账号信息同时以邮件方式发送给您。

点击“桌面”上“账号管理”功能，可自助实现账号的绑定与解绑。



4. 登录超算

中国科技云·超算云提供多种登录超算的方式，包括内部集成的 Web SSH 和第三方登录软件（如 Putty、Xshell、SecureCRT）。

4.1 内部集成的 Web SSH

登录中国科技云·超算云以后，在“桌面“上点击“SSH 图标”，鼠标点击“连接”即可登录。

温馨提示：WEB SSH 功能可在“应用中心”、“超算云服务”中找到，并添加至桌面。



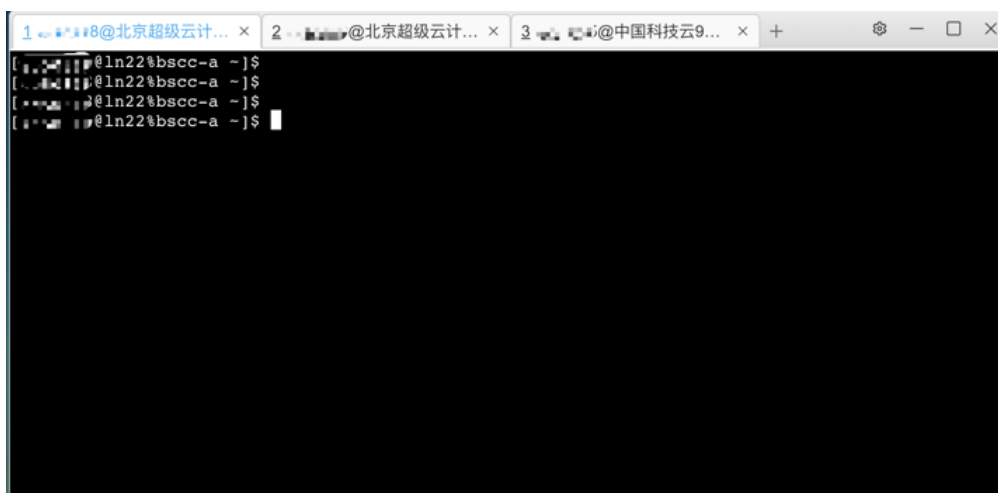


用户无需记忆 IP 地址及密码，支持多标签页，可以同时访问多个超算。

通过 linux 命令及作业调度系统，即可开展计算任务的提交与管理工作。

温馨提示：

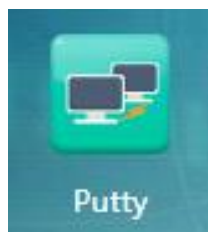
中国科技云·超算云支持多种网络链路，Web SSH 将自动选择最优网络链路。



4.2 第三方登录软件

可以使用 Putty、Xshell、secureCRT 等其他第三方登录软件。

以 Putty 为例说明：可以点击桌面上的“应用中心”图标，点击“超算云服务”，安装相应的软件，之后会在桌面上生成相应的图标，选择自己本地 Putty 的文件，即可使用 Putty 登录超算。



使用 Putty 有多种链路可供选择，可选择网络延迟最小的链路登录超算。如果您支持 ipv6 网络，可以用 window 客户端版本中国科技云·超算云桌面中的 Putty 图标通过专线登录超算，以提高速度，节省流量。



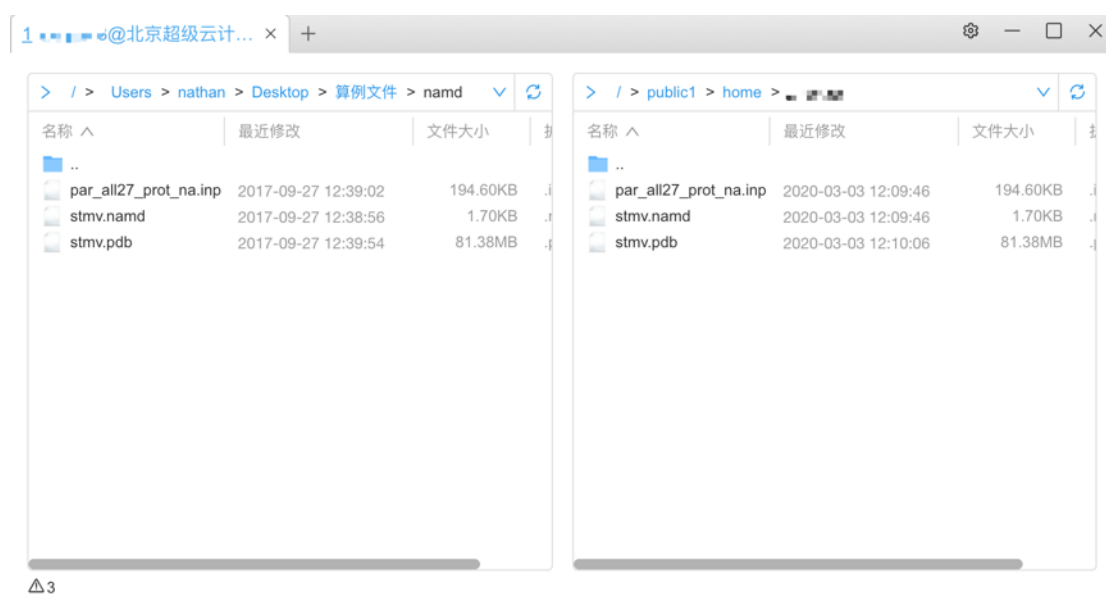
5. 文件传输

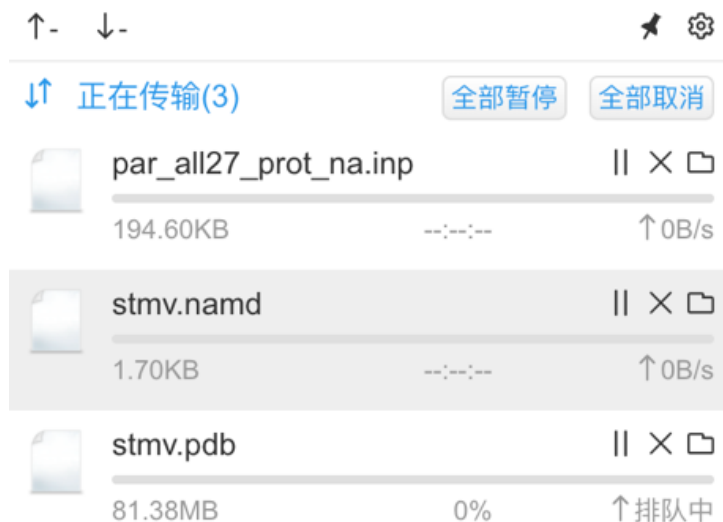
可以通过快传工具、WinSCP 工具，实现本地与超算间的文件传输。

5.1 快传工具

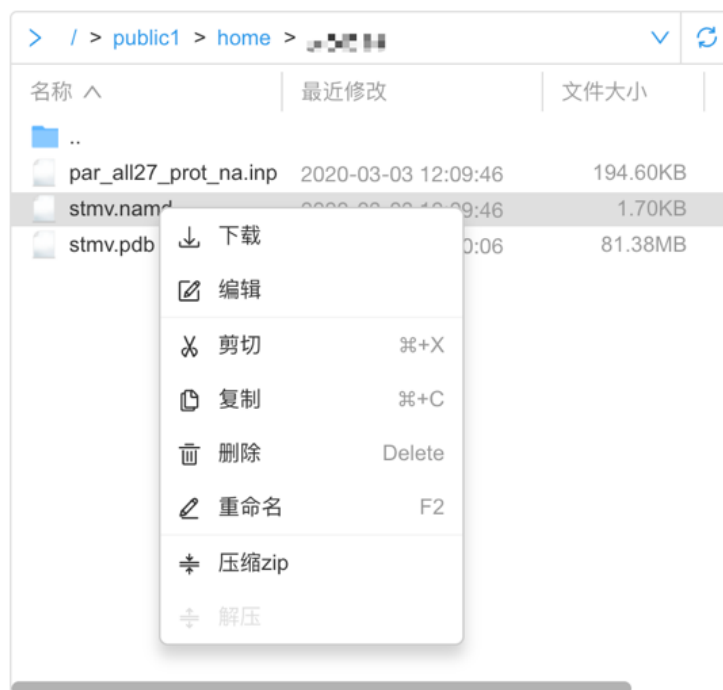
快传工具，可以有效利用用户本地的带宽，传输速率可达普通 WinSCP 的 3-4 倍，同时支持在第三方数据传输工具无法使用的场景下（例如，通过浏览器方式访问超算、MAC 和 Linux 环境等）。

双击“桌面”上的快传图标。即可使用快传工具。文件进行拖拽即可实现上传与下载，并且可以看到文件的传输速度、状态等信息。





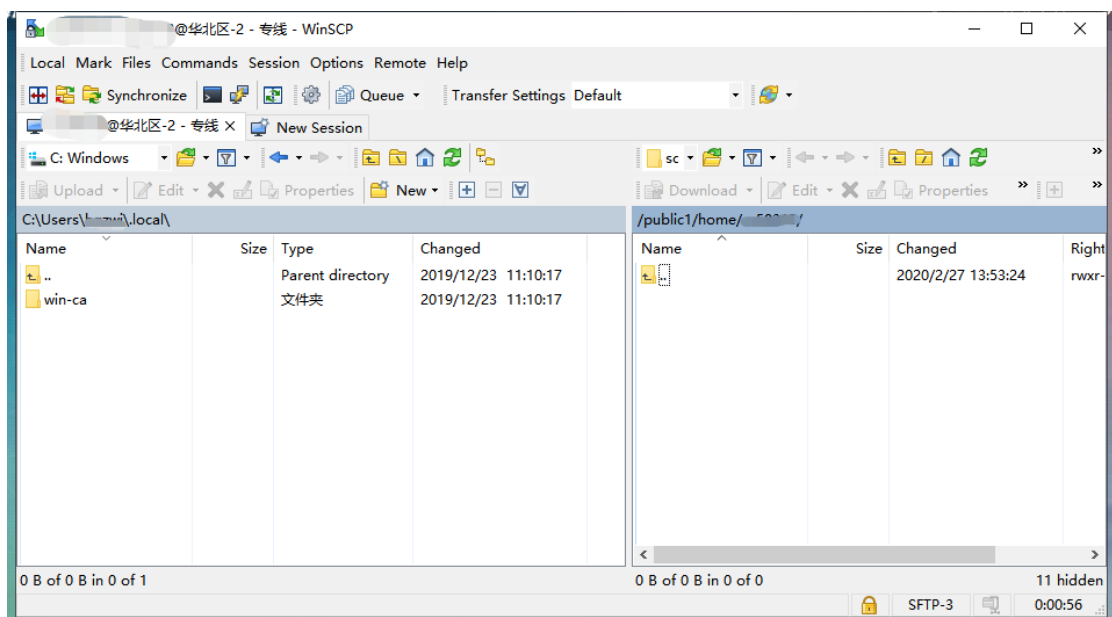
快传工具支持对文件进行重命名、编辑、压缩、解压等操作。
在文件上右击即可看到相关功能。



5.2 WinSCP 工具

WinSCP 传输工具（仅 windows 版），智能接入点选择，可自动根据速度/带宽占用率选择最佳接入点。

登录中国科技云·超算云后，左击桌面上的 WinSCP 图标，连接登录即可使用 WinSCP 进行数据传输。



温馨提示：

❖ 您如果上传或下载速度比较慢，可以用中国科技云·超算云自带的网速测试软件进行网速测试，并截图给客服，联系我们。

6. 作业提交

6.1 命令行提交

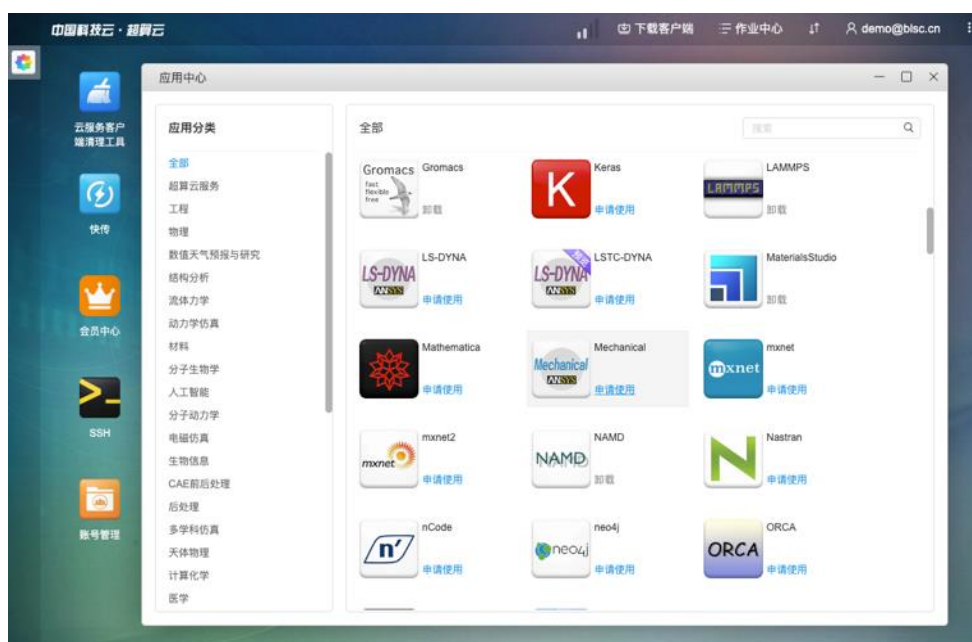
登录超算，可以通过书写作业脚本的方式提交计算任务，作业调度系统的使用可以咨询在线客服。

6.2 集成界面提交作业

中国科技云·超算云集成了一些应用程序，用户无需登录超算、无需命令行，只需要填写计算参数、上传计算文件，即可提交作业。

集成的软件经过了优化，能够达到最高的计算效率。点击“应用中心”图标，选择您需要使用的软件，上传相应的软件包，客服可以帮您集成。





温馨提示:

❖ 应用中心里的商业软件仅仅是图标，需要由客户上传安装包到账号下，联系客服进行安装集成，集成好之后就可以用图形界面提交作业。

❖ 若用使用商业软件，需要用户提供商业软件相关授权。

提交计算任务举例

1) 选中计算软件图标



2) 点击“提交作业”

The screenshot displays the VASP job management interface. On the left, there is a sidebar with a '提交作业' (Submit Job) button highlighted in red. Below it, there are tabs for '图形化' (Graphical) and '详细模式' (Detailed Mode). The main area shows a list of jobs with columns for '用户' (User), '运行状态' (Running Status), and '作业ID' (Job ID). The jobs listed are:

- INCAR_20200303113744 (VASP, ID: 441340, 核数: 24, DONE, 提交: 2020-03-03 11:37:49, 0:3:39)
- INCAR_20200119142022 (VASP, ID: 291629, 核数: 24, DONE, 提交: 2020-01-19 14:20:34, 0:0:3)
- INCAR_20200119141840 (VASP, ID: 3051506, 核数: 24, DONE, 提交: 2020-01-19 14:18:47, 0:0:8)
- INCAR_20200116170010 (VASP, ID: 3032950, 核数: 24, CANCEL, 提交: 2020-01-16 17:00:18, 0:0:30)
- INCAR_20200116135749 (VASP, ID: 3032950, 核数: 24, CANCEL, 提交: 2020-01-16 17:00:18, 0:0:30)

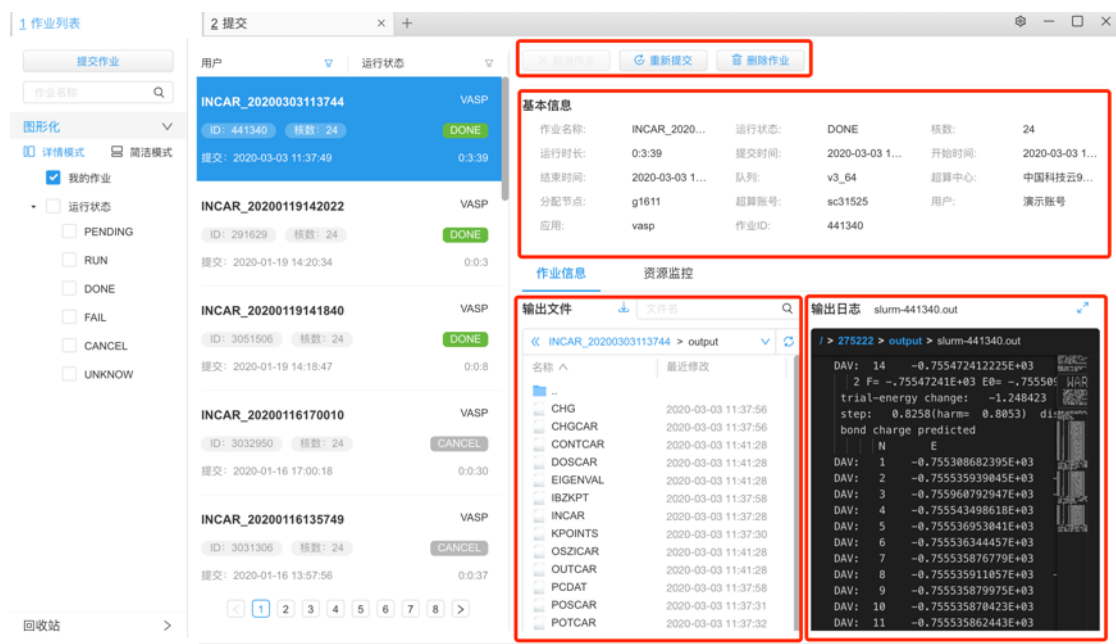
On the right, there is a '基本信息' (Basic Information) section showing job details for 'INCAR_20200303113744'. Below this, there is a '输出文件' (Output Files) section showing a list of files with their modification times. On the far right, there is a '输出日志' (Output Log) section showing the output of the job, including the 'trial-energy change' and 'bond charge predicted'.

3) 选择计算规模、并上传计算文件

The screenshot displays the VASP job submission interface. The '提交' (Submit) step is active, showing the '作业参数' (Job Parameters) section. The 'CPU核数' (CPU Cores) is set to 12, and the '超算中心' (Supercomputing Center) is set to '超算云' (Supercomputing Cloud). The '版本' (Version) is set to 5.4.4. Below this, there is a section for '输入文件' (Input Files) with buttons for '必选 [INCAR]', '必选 [KPOINTS]', '必选 [POSCAR]', and '必选 [POTCAR]', and a '选择' (Select) button. The '输出文件' (Output Files) section shows a text input field for the '远端输出目录' (Remote Output Directory) and an '更改' (Change) button. At the bottom right, there is a '提交' (Submit) button.

4) 管理计算任务

可以查看指定计算任务的工作状态、输出文件、输出日志。

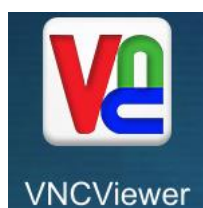


7.可视化功能

中国科技云·超算云提供了 VNC 可视化功能，用户可以联系客服开通。

1) 打开“VNC Viewer”图标

可以从“桌面”或“应用中心” – “超算云服务”中找到。



2) 点击“提交作业”

可以编辑使用的核数、作业最长运行时间，设置好后，点击提交，即可完成 VNC 作业的提交。

1 作业列表

提交作业

作业名称

当前作业

提交用户

☒ 我的作业
 ☐ 所属组的作业

运行状态

☐ PENDING
☐ RUN
☐ DONE
☐ FAIL
☐ CANCEL
☐ UNKNOWN

回收站

作业编号	作业名称	应用	运行状态	核数	提交时间
307945	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-28
3051529	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-19
3037571	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-17
271012	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-16
270537	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-16
266486	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-15
266431	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-15
266424	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-15
	VNCView_202001...	VNCView	UNKNOWN		2020-01-15
266413	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-15
266403	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-15
264460	VNCView_202001...	VNCView	CANCEL	48	2020-01-14

<

1

2

3

4

>

1 作业列表

2 提交

软件版本

作业名称

CPU核数

1.0

test

24

超算中心	队列	剩余核数	运行核数	排队核数	license	用户	队列限制情况
<input type="radio"/> 中国科技云9区(CSTC9)	v3_test	48	0	0	N/A		
<input type="radio"/> 北京超级云计算中心A分区	amd_test	128	0	0	N/A		
<input type="radio"/> 北京超级云计算中心D分区	v4_256	3040	0	0	N/A		
<input type="radio"/> 北京超级云计算中心D分区	v4_test	32	0	0	N/A		
<input type="radio"/> 北京超级云计算中心A分区	amd_256	3904	0	0	N/A		
<input checked="" type="radio"/> 中国科技云9区(CSTC9)	v3_64	8592	0	0	N/A		

节点数量

1

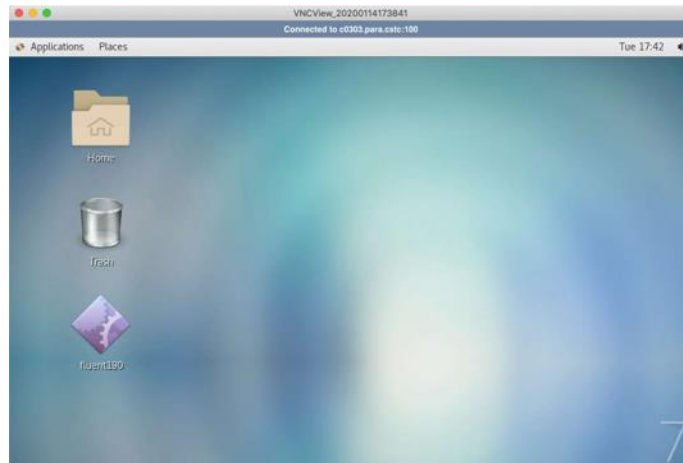
最长运行时间(分)

60

0表示没有上限。缺省60表示图形作业限制为60分钟

提交

3) 可以打开图形桌面，运行相关的软件，进行图形处理。



4) 当处理完成时，请停止 VNC 任务，避免浪费机时

1 作业列表

提交作业

作业名称

当前作业

提交用户

我的作业

所属组的作业

☐ 运行状态

☐ PENDING

☐ RUN

2 提交

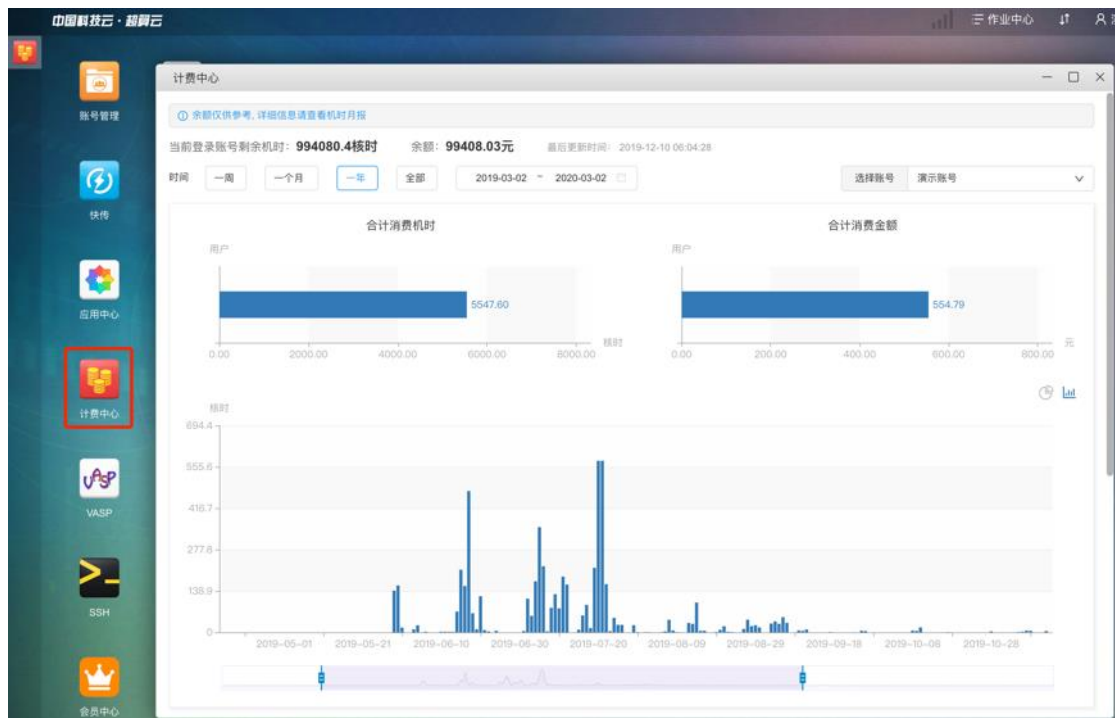
作业编号	作业名称	应用	运行状态	核数	提交时间	运行时长	操作
307945	VNCView_2020012...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-28 09:44:23	0:0:52	<div><div></div><div></div><div></div><div></div></div>
3051529	VNCView_2020011...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-19 14:30:17	0:1:55	<div><div></div><div></div><div></div><div></div></div>
3037571	VNCView_2020011...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-17 09:23:58	0:1:47	<div><div></div><div></div><div></div><div></div></div>
271012	VNCView_2020011...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-16 13:09:47	0:4:6	<div><div></div><div></div><div></div><div></div></div>
270537	VNCView_2020011...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-16 11:22:56	0:2:16	<div><div></div><div></div><div></div><div></div></div>
266486	VNCView_2020011...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-15 18:06:30	0:3:28	<div><div></div><div></div><div></div><div></div></div>
266431	VNCView_2020011...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-15 17:51:18	0:7:31	<div><div></div><div></div><div></div><div></div></div>
266424	VNCView_2020011...	VNCView	CANCEL	24	2020-01-15 17:46:47	0:3:18	<div><div></div><div></div><div></div><div></div></div>

8. 计费中心

中国科技云·超算云提供了计费查看功能，点击计费中心，即可看到具体的机时详情。

温馨提示：

计费中心的信息每天凌晨三点更新，若计费中心显示的消费详情与您实际使用不吻合，请联系我们进行查询。



9.其他功能

点击中国科技云·超算云右上角的“配置”，可以进行系统设置、软件版本更新、注销登录等操作。



9.1 系统配置

在“系统设置”中，可以更改显示的语言，进行中英文切换。



9.2 检查新版本

对于中国科技云·超算云的客户端用户，可以通过“检查新版本功能”随时更新软件。

9.3 清理缓存

如果您再使用中国科技云·超算云的过程中出现异常，可以通过点击桌面“清理工具”，通过清理缓存的方式解决，如果清理后异常还未解决，请联系我们。



9.4 联系客服

在使用超算的过程中，遇到任何问题，欢迎客户服务微信群里提出，或者加客服好友，为您及时解答。



9.5 关注超算动态

用户登录时，会提示关注“科技云超算云服务”微信公众号，添加公众号，能够及时接收到超算系统的通知和报警消息。

用户可以在“桌面”右上角“用户账号”，进入个人中心，通过点击“新增绑定”的方式完成绑定过程。