

# 北大未名超算FDTD使用指南

Qing-xin Ji,  
Peking University,  
School of Physics

# 目录:

概况

注意事项

软件下载

未名一号登录

在图形界面使用FDTD

在交互界面使用FDTD

使用sbatch提交FDTD作业 (推荐)

结点类型

常用链接

FAQ

# 概况

本教程是装在北大超级计算机未名一号上的FDTD的使用教程。

未名一号是北京大学自己建立的高性能超级计算机，采用cluster架构，操作系统为redhat (linux)，使用module管理软件，使用slurm作业管理系统。

2018年11月13日，我们购买的FDTD在超级计算上成功开始运行。我们FDTD的license为floating trust storage类型，可以在任何一个结点上实现分布式计算，支持impi, mpich2, openmpi等并行计算软件，与我们组的服务器相比性能有巨大的提升。

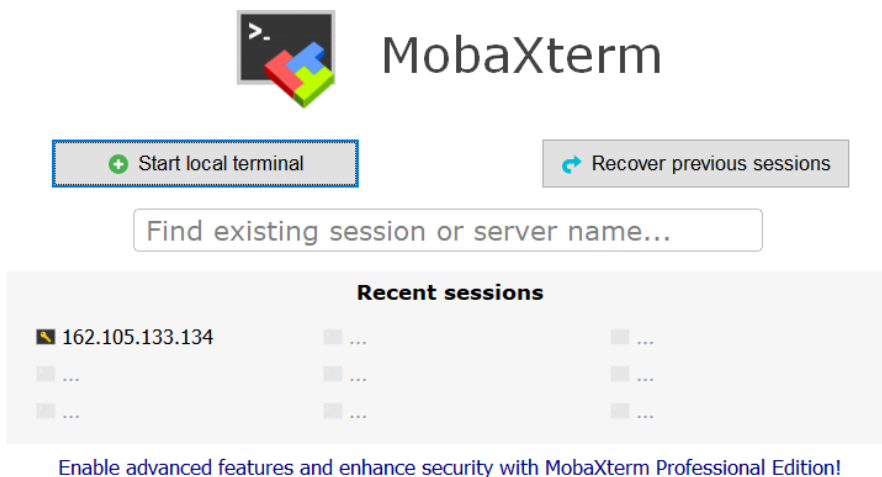
在未名一号上使用FDTD需缴费，故请谨慎使用。

## 注意事项（必读）：

- 1.我们组所用的账号为公共账号且没有设置权限，请不要随意删除超算上的文件，或者停止某个程序的运行。
- 2.对于不熟悉linux的用户，请**不要随意使用rm**命令，尤其不要使用rm -rf（linux系统**没有回收站**）
- 3.不要运行来路不明或者含义不清楚的代码
- 4.由于我们只有一个license，我们**不能同时运行多个FDTD**，因此请与他人协调使用。
- 5.由于计算需要交费，在提交作业之前，请其他地方将fsp文件编写完成，并事先检查程序的正确性，对于计算量不大的程序或者测试程序，请在服务器或者自己电脑上完成。
- 6.计算时请使用**计算结点**，**不要**在登录节点运行大型的程序。
- 7.如果需要存储数据，请建立自己的文件夹；如果需要存储大量数据（超过50GB），请与我联系。
- 8.在上机操作之前，请**务必将FAQ之前的说明通读一遍**。

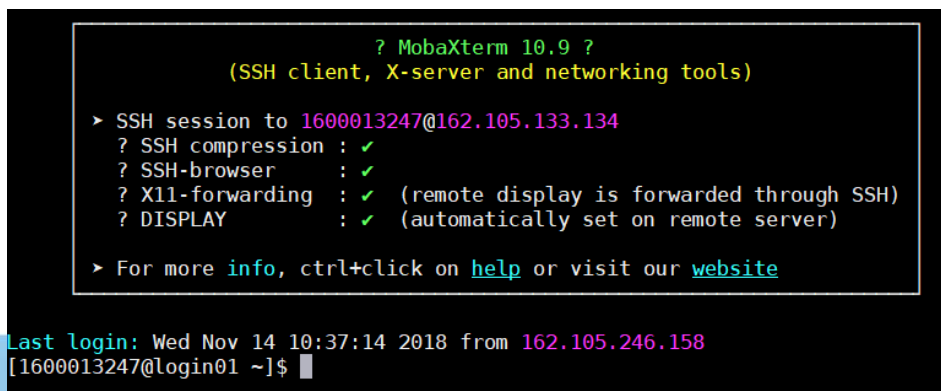
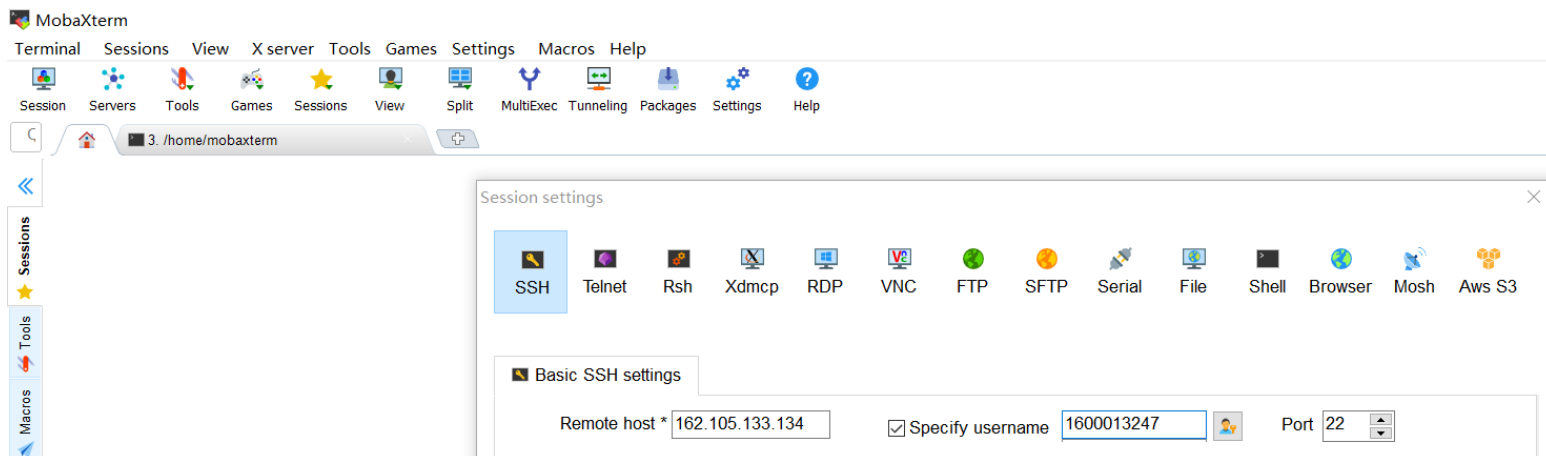
# 软件下载

1. 登录用：MobaXterm：在登录结点可以用图形界面或者Putty：小而轻，快捷键比较方便
2. 文件传输：建议使用FileZilla



# 未名一号登录

1. 打开MobaXterm, 点击左上角session, 选择ssh, 输入IP 162.105.133.134, 账户1600013247, 点击ok
2. 在新的窗口中输入密码: bigboss666, 回车, 即可登录到未名一号



# 在图形界面使用FDTD

登录到未名一号，直接输入fDTD-solutions，即可运行FDTD。

```
[1600013247@login01 ~]$ fDTD-solutions
```

注意：此时使用的是登录结点，故请不要在此直接运行程序。

在图形界面下，用户可以查看fsp文件，导出数据，用法与windows系统下的FDTD相同。

# 在交互界面使用FDTD进行计算

(结合下一张幻灯片看，适用于耗时短的作业，不推荐)

1.使用salloc命令申请结点：

-N：结点数，通常为1

-n：核心数（示例中为24）

-p：使用结点所在的分区，根据自己的需求决定。

如果申请成功，将显示申请结点的名称（这里为a4u09n03）

2.利用ssh连接到相应的结点，并且中再次输入密码。

3.利用FDTD运行程序

```
1600013247@a4u09n03 ~]$ ~/opt/lumerical/fdtd/bin/fdtd-run-local.sh -n 24 ~/FDTD/usr_ring.fsp
```

命令的前半部分为使用的软件，无需更改；-n 24表示利用24个核心，最后为要运行的fsp文件名称；运行过程中需保持连接不间断。

4.运行结束后，输入两遍exit来退出结点，否则将持续计费。

5.为了确保计费已经结束，可以输入queue来查看自己的作业是否仍在运行。



# 在交互界面使用FDTD进行计算

```
[1600013247@login01 ~]$ salloc -N 1 -n 24 -p C032M0128G
salloc: Granted job allocation 906440
salloc: Waiting for resource configuration
salloc: Nodes a4u09n03 are ready for job
[1600013247@login01 ~]$ ssh a4u09n03
Warning: Permanently added 'a4u09n03,172.19.0.31' (ECDSA) to the list of known hosts.
1600013247@a4u09n03's password:
[1600013247@a4u09n03 ~]$ ~/opt/lumerical/fdtd/bin/fdtd-run-local.sh -n 24 ~/FDTD/usr_ring.fsp
+ /gpfs/share/home/1600013247/opt/lumerical/fdtd/bin/./mpich2/nemesis/bin/mpiexec -n 24 /gpfs
me/1600013247/FDTD/usr_ring.fsp
0% complete. Max time remaining: 1 min, 40 secs. Auto Shutoff: 1
1% complete. Max time remaining: 36 secs. Auto Shutoff: 1
3% complete. Max time remaining: 32 secs. Auto Shutoff: 1
6% complete. Max time remaining: 20 secs. Auto Shutoff: 0.366159
12% complete. Max time remaining: 14 secs. Auto Shutoff: 0.129313
24% complete. Max time remaining: 10 secs. Auto Shutoff: 0.058177
36% complete. Max time remaining: 16 secs. Auto Shutoff: 0.0171552
42% complete. Max time remaining: 13 secs. Auto Shutoff: 0.0138739
54% complete. Max time remaining: 9 secs. Auto Shutoff: 0.00596531
66% complete. Max time remaining: 6 secs. Auto Shutoff: 0.0026308
78% complete. Max time remaining: 4 secs. Auto Shutoff: 0.00153411
90% complete. Max time remaining: 2 secs. Auto Shutoff: 0.00117443
100% complete. Max time remaining: 0 secs. Auto Shutoff: 0.00065114
+ set +x
[1600013247@a4u09n03 ~]$ exit
logout
Connection to a4u09n03 closed.
[1600013247@login01 ~]$ exit
exit
salloc: Relinquishing job allocation 906440
[1600013247@login01 ~]$
```

-N 结点数, 设为1  
-n 核心数  
-p 设置结点类型

登录到申请到的结点

输入使用的仿真软件路径（无需修改）、使用结点个数（不超过申请到的）和仿真文件的位置

正常情况下, 将自动显示作业进度

仿真结束后, 输入两次exit退出结点, 防止持续计费。

# 使用sbatch提交作业

(结合下一张幻灯片看)

- 1.将编写好的fsp文件放在合适的位置。
  - 2.编写slurm脚本文件（推荐使用vim编辑器），示例文件在~/FDTD/Test下，名称为usr\_ring.slurm（不要直接修改）
- Vim的使用方法请自行学习

<code>#!/bin/bash</code>	
<code>#SBATCH -n 32 # Number of cores requested</code>	申请的核的个数
<code>#SBATCH -N 1 # Ensure that all cores are on one machine</code>	申请的结点个数，通常为1
<code>#SBATCH -p C032M0128G # Partition to submit to</code>	申请结点所在的分区
<code>#SBATCH -o usr_ring.out # Standard out goes to this file</code>	输出数据的文件，自己更改文件名
<code>#SBATCH -e usr_ring.err # Standard err goes to this file</code>	输出错误信息的文件，自己修改名称
<code>#SBATCH --mail-type=END,FAIL # notifications for job done &amp; fail</code>	设置如果任务完成或者出错，给用户发邮件
<code>#SBATCH --mail-user=qxji@pku.edu.cn # send-to address</code>	提醒邮件的收件人地址，改为自己的邮箱
 <code>echo "Jobid: "\$SLURM_JOBID</code>	没啥用处
 <code>source new-modules.sh</code>	没啥用处
 <code>module intel/2017.1 mpich/3.2.1-intel-2017.1</code>	加载并行计算的软件包，没有特殊需求不用改
 <code>echo "module loaded"</code>	没啥用处
<code>date</code>	输出时间
<code>-n 4</code>	-n 4使用的核心个数，不超过申请核的个数
<code>-t 1</code>	-t 1 设置最大的运行时间，超出时间自动停止，不超过5天，特殊情况联系管理员
<code>~/opt/lumerical/fdtd/mpich2/nemesis/bin/mpiexec</code>	使用的编译器名称，一般不用改（与并行计算的软件对应）
<code>~/opt/lumerical/fdtd/bin/fdtd-engine-mpich2nem</code>	使用的编译器名称，一般不用改（与并行计算的软件对应）
<code>~/FDTD/usr_ring.fsp</code>	你自己的fsp文件的路径和名称
<code>date</code>	输出时间
<code>exit</code>	退出

# 使用sbatch提交作业

- 3.编辑结束后，保存并退出
- 4.利用slurm系统提交作业

```
[1600013247@login01 ~]$ sbatch ~/FDTD/Test/usr_ring.slurm  
Submitted batch job 906449
```

提交成功之后将显示作业的编号

- 5.查看作业的情况：使用命令squeue
  - 6.取消进行中的作业：scancel +作业编号
- 示例：scancel 906449

7.作业完成后，将收到如下的邮件：

**SLURM Job\_id=906449 Name=usr\_ring.slurm Ended, Run time 00:00:03, COMPLETED, ExitCode 0**

发件人： "PKU\_Super\_Computer" <hpc@pku.edu.cn>

收件人： "Qing-xin Ji" <qxji@pku.edu.cn>

示例程序成功运行完成，耗时3秒。

# 关于使用结点的类型

序号	费用项目	费用名称	单位	单价	QOS	分区名	节点数	核心数	GPU数	内存		
1	CPU100	计算节点 机时费	核心 小时	0.04	low	C032M0128G	141	32	0	128G		
2	CPU110			0.06	normal							
3	CPU120			0.08	high							
4	CPU200			0.05	low	C032M0256G	50			256G		
5	CPU210			0.07	normal							
6	CPU220			0.10	high							
7	CPU300			0.06	low	C032M0512G	5			512G		
8	CPU310			0.08	normal							
9	CPU320			0.12	high							
10	BIG100	胖节点机 时费		0.10	low	C072M0512G	1	72	0	512G		
11	BIG110			0.12	normal							
12	BIG120			0.18	high							
13	BIG200			0.12	low	C144M4096G	2			144	0	4096G
14	BIG210			0.15	normal							
15	BIG220			0.20	high							
16	GPU100	GPU节点 机时费	卡小 时	2.00	low	GPU	10	12	2	256G		
17	GPU110			3.00	normal							
18	GPU120			4.00	high							
19	KNL100	众核节点 机时费	节点 小时	0.30	low	KNL	8	68	0	192G		
20	KNL110			0.45	normal							
21	KNL120			0.60	high							
22	HPC	账号管理 费	月	50.00								

通常使用计算结点即可实现超过服务器的高性能计算，根据需求可以自己选择结点类型，并在-p选项中进行更改。

(一般最差的结点就可以)

参见链接：

[http://hpc.pku.edu.cn/guide\\_6.html](http://hpc.pku.edu.cn/guide_6.html)

# 常用链接

1.北京大学高性能计算平台:

<http://hpc.pku.edu.cn/about.html>

2.Linux文件操作简单教程:

<http://www.92csz.com/study/linux/6.htm>

只需学会rm、ls、cd等简单命令即可。

3.Vim教程:

<https://www.jianshu.com/p/bcbe916f97e1>

4.谷歌大法好:

<https://www.google.com.hk/>

5.Lumerical官网:

<https://www.lumerical.com/learn/>

<https://www.lumerical.com/products/fdtd-solutions/>

6.欢迎与我联系:

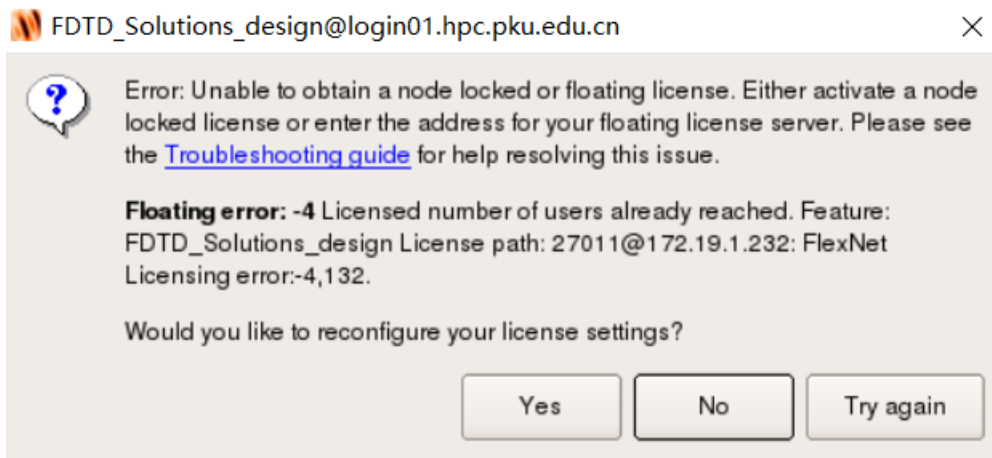
qxji@pku.edu.cn

# FAQ

1.我可以在计算结点使用图形界面吗？

不能。图形界面只能在登录结点使用而且效率不高。

2.我在使用FDTD时遇到了以下提示，请问是什么原因？



有其他人正在使用FDTD，或者FDTD意外退出，因此暂时无法使用。请确认下有没有人在同时使用，或者重新登录重试。

# FAQ

3.我能否在使用sbatch的时候即时查看作业进度？

可以。用户可以随时打开产生的\*.log文件（在\*.fsp所在的文件夹中）查看作业进度。

4.我能否在未名一号上查看视频or图片？

一般情况下不行，可以尝试，但是最好不要，因为这样会显著减低运行速度。建议将文件保存到本地在进行处理。

5.我可能要运行大量的仿真文件，存储较多数据，怎么办？  
请与我联系，我可以给你的账号装一个fdtd。