

# 计算中心登录和使用说明

张壮壮

2021 年 10 月

# 目录

1 账户 .....	1
2 登录及账户管理 .....	1
2.1 登录步骤 .....	1
2.2 文件传输 .....	2
2.3 账户管理 .....	3
3 设备介绍和使用 .....	4
3.1 计算资源介绍 .....	4
3.2 软件介绍 .....	4
3.3 注意事项 .....	4
4 提交作业 .....	5
4.1 作业流程 .....	5
4.2 slurm 作业介绍 .....	5
4.3 利用 sbatch 提交作业 .....	5
4.4 利用 salloc 提交作业 .....	7
4.5 利用 srun 提交作业 .....	8
5 作业提交软件 .....	8
6 常用命令和资源 .....	9

内容仅为个人查阅资料总结所写，难免存在错误和纰漏。请及时批评指正。

## 基础概念

**节点：**每个节点相当于一台电脑。只是多个节点共享一个显示屏和网络等。

**队列：**节点的分组。一个节点可以在不同的队列、一个队列包含多个节点。

**作业：**本文所述的作业指在计算中心的各种操作，包括启动软件和软件操作、文件管理等。

# 1 账户

账户向管理员赵成明申请。可自己提前定好密码并告知管理员，否则将使用默认密码。

## 2 登录及账户管理

计算中心可多用户同时登录。

使用软件“MobaXterm\_Personal\_20.3.exe”进行登录和其他操作。该软件可上传和下载文件。软件见压缩包“MobaXterm\_Portable\_v20.3.zip”。

刚登录进去即进入登录节点。

### 2.1 登录步骤

1.启动软件并左上角的 session。

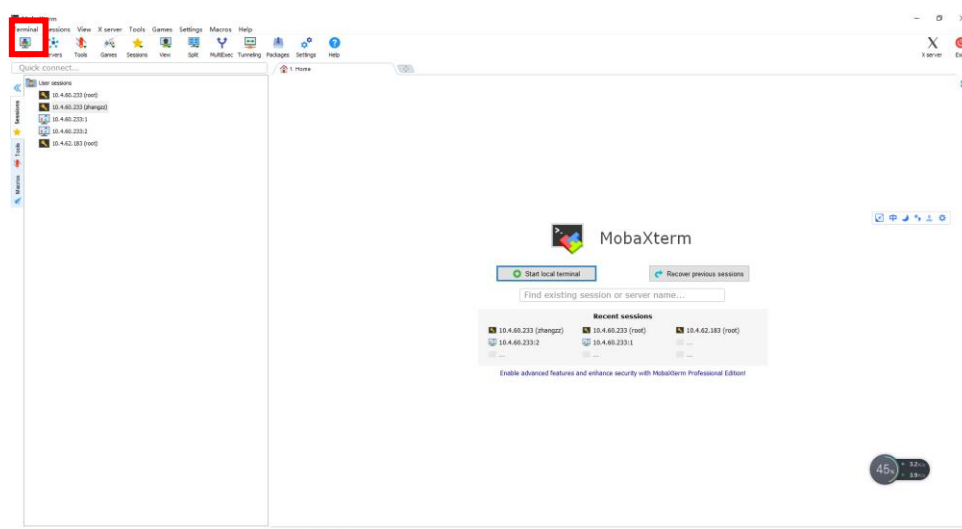
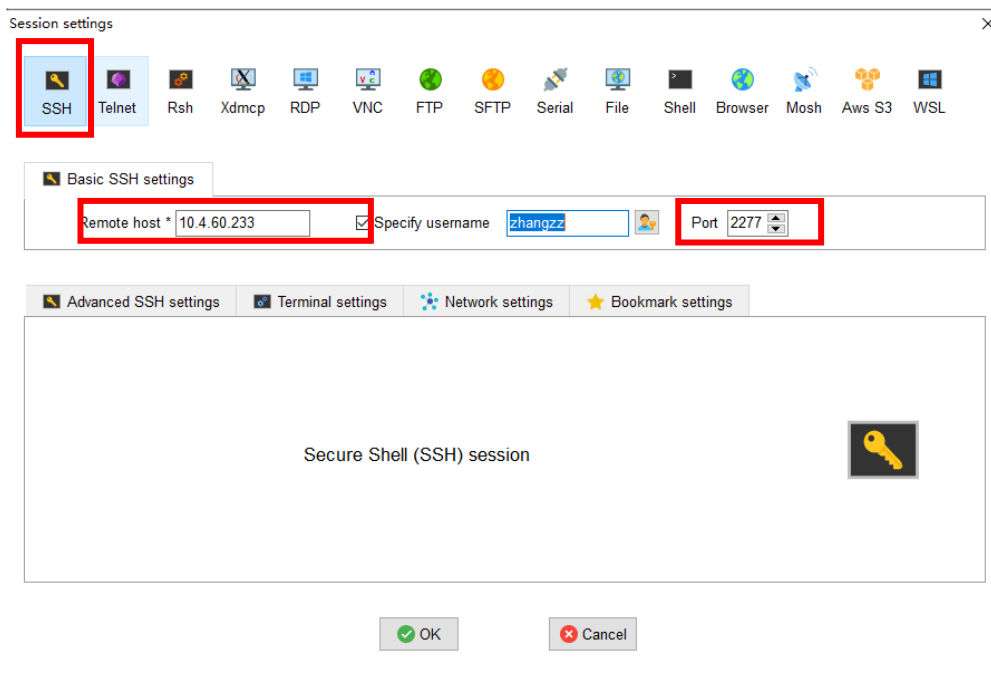
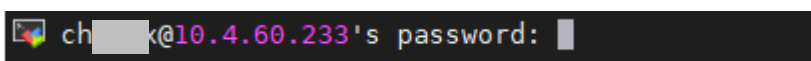


图 1 登录初始界面

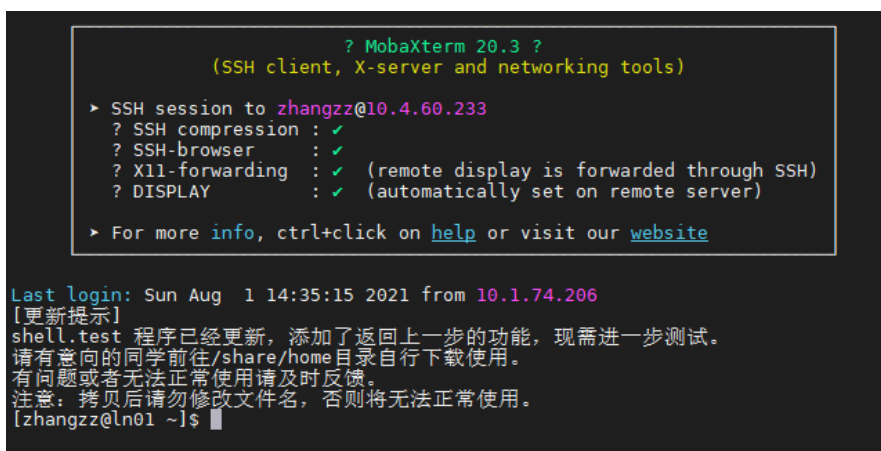
2.点击左上角的 SSH。输入 remote host 和 port，具体参数见图。同时可勾选 specify username 并填入账户名称。完成后点击 OK。



3.提示输入密码。输入密码并按 enter 键，输入密码时无\*号或者其他提示。第一次登录会有提示设置登录软件密码的选项，此时单独设置登录软件管理密码即可，也可取消。

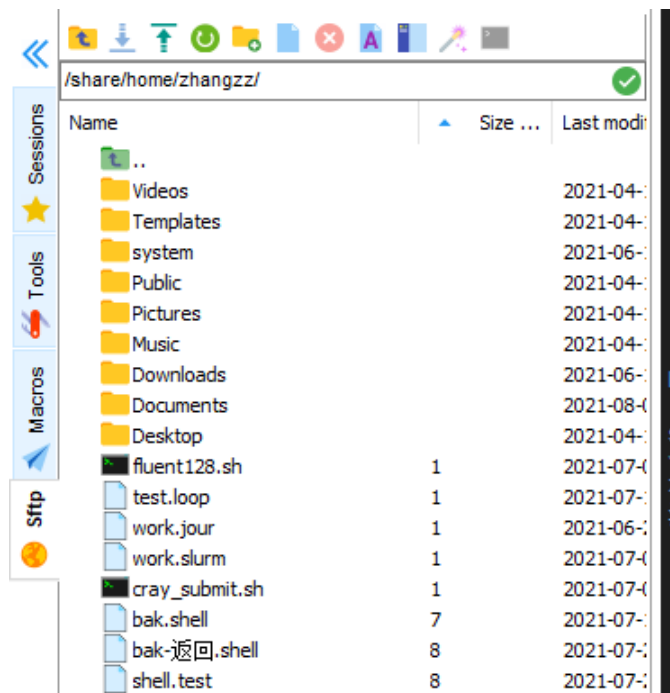


4.正确输入密码后，界面如下图所示。此时即可正常使用计算中心。



## 2.2 文件传输

登录进入系统后，在登录软件左侧会显示如下的文件系统窗口。文件传输只需要对自己电脑或者计算中心的文件简单拖动即可。比如，将自己电脑上的文件拖到下图窗口中，即可将自己电脑上的文件传到计算中心。



## 2.3 账户管理

在 home 的页面进行。鼠标放在 1 框中的账户上右击，选择 delete session 即可删除账户。若在登录时选择保存账户密码，下次点击 1 或者 2 中的账户即可登录。



## 3 设备介绍和使用

### 3.1 计算资源介绍

登录节点：ln01。

管理节点：mgt01。

计算节点：

GPU 节点：g01, g02;

CPU 节点：n01, n02, n03, n08, n05, n06, n07, n08。

可用节点：

g01-g02, n01-n08。

CPU 数量：

g01-24 核, g02-40 核, n01-n08 均包含 40 核。

队列名称：

gpu: 包含 g01, g02;

compute: 包含 n01-n08;

all: 包含 g01-g02 和 n01-n08。

### 3.2 软件介绍

已安装的软件包和软件:

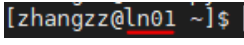
ansys16	comsol55	openfoam8	matlab2019R
ansys19.2	comsol56	openfoam9	

软件启动：

ansys16, ansys19.2, comsol55, comsol56, matlab2019R 等软件请在 share/soft 文件夹中寻找相应的启动器运行软件;

openfoam 软件直接在命令窗口输入 openfoam8-linux 或 openfoam9-linux 即可。

软件使用：

1. 勿在登录节点使用软件，以免影响他人登录。即在左图中@ln01 状态下不要进行工作计算。
2. 可通过 ssh 命令转到可用节点后，启动软件并进行运算。

### 3.3 注意事项

- 先申请资源再运行计算工作。
- 注意资源占用量，勿过量占用计算资源。
- 及时释放使用的资源。计算完成后请注意查看任务列表，如未正常释放资源，使用 scancel 命令手动释放计算资源。
- 及时清理无用文件、及时删除过时文件、及时转移已完成的计算文件。

- 如需安装软件请先找到软件资源，并联系管理员统一安装。
- 请勿在登录节点上直接进行计算工作，以免他人无法正常登录计算中心。

## 4 提交作业

### 4.1 作业流程

登录：登录流程和方式见 2.1，登录后即在登录节点 ln01。位于哪个节点请查看

```
[zhangzz@ln01 ~]$
```

@字符后的提示(ln01、g01,n01 等)即为节点名称。

作业：先申请资源，后进行作业。申请的作业资源仅位于可用节点列表（见 3.1 节）。申请计算资源后请转到相应的计算节点进行作业，或通过命令在登录节点调用申请到的资源进行作业。完成作业后请查看计算资源是否释放，如未释放请及时手动释放计算资源。

资料传输：请参考 2.2 节。资料 and 文件传输不需要申请计算资源，可直接在登录窗口随时进行。

### 4.2 slurm 作业介绍

通过 slurm 提交作业或者申请资源有 3 种方式：sbatch 作业、salloc 作业、srun 作业。3 种分别需要 sbatch、salloc、srun 等 3 个命令进行。

sbatch 作业需要编写脚本，脚本中包含需要申请的资源和具体作业内容。

salloc 作业先申请资源后转到相应的节点进行作业。此种方式建议用于申请资源和作业操作需要分开进行的作业。比如，先申请资源，再转到申请到的资源启动软件进行运算。

srun 作业需要同时输入申请资源的命令和作业的内容。

srun 和 salloc 作业需要依赖于窗口。关闭窗口或者网络出现波动可能直接导致作业终止。

### 4.3 利用 sbatch 提交作业

通过 sbatch 提交的作业可脱离窗口而独立运行。不受断网、关闭登录软件、切换窗口等的影响。该类型作业多用于批量作业和大型长时间计算。

作业步骤为：编写 slurm 脚本→提交作业脚本→自动进行作业→完成作业自动或手动释放资源。

#### 4.3.1 slurm 脚本

Slurm 脚本是记录 slurm 作业的文件。其中设置了 slurm 作业的作业名、资源申请和计算时间等参数，并在该文件中设置作业的具体内容。基础格式如下：



## slurm 命令和作业介绍

### ❑ slurm 批处理脚本命令

slurm脚本：记录计算资源请求和相关设置的文本文档。

```
[zhangzz@ln01 Documents]$ cat test.slurm
#!/bin/bash

#SBATCH -J fluent-test
#SBATCH --partition compute

#SBATCH --nodes=4
#SBATCH --ntasks-per-node=2
#SBATCH -t 08:00:00

JOURNAL_FILE=/share/home/zhangzz/Documents/test.jour
FLUENT=/share/soft/ansys16/ansys_inc/v160/fluent/bin/fluent

$FLUENT 3ddp -g -slurm -t4 -nm -ssh -i $JOURNAL_FILE > test.log
```

作业资源申请和设置—通用部分

作业内容和参数—定制部分

**--partition( fluent 建议使用compute 队列)**

- all: 2个GPU节点+8个CPU节点
- gpu: 2个GPU节点
- compute: 8个CPU节点

13

PS. 对于fluent,  $--nodes \times --ntasks-per-node$  = 需要的最大并行计算核数

通用部分为计算资源和相关基础设置。定制部分为作业的具体内容，包括相应的环境变量等。

-J 为作业名参数，后面跟着作业名 (fluent-test)；

--partition 为队列参数，后面跟着队列名 (compute)；

--nodes 为节点申请参数，4 为申请的节点数；

--ntasks-per-node 为每个节点上的任务数，2 表示每个节点上两个任务。某些软件中可将任务数视为 cpu 核数。

-t 为作业时间参数，设置预计的作业时间（时：分：秒）。

更多参数可参考资料和 slurm 官方网站。

### 4.3.2 提交作业

提交作业的格式为 sbatch 作业脚本。

```
sbatch test.slurm
```

提交成功后，会有提示 submitted batch job \*\*\*。

```
Submitted batch job 149
```

### 4.3.3 查看作业进程

如果 slurm 脚本中设置了作业日志的保存文件，此时可输入命令 `tail -f 日志文件名`，查看日志。



## 4.4 利用 salloc 提交作业

salloc 作业受限于作业窗口和网络。若出现作业窗口关闭、或者连接的网络波动等，作业将自动停止并被清除。在作业完成之前无法在同一窗口进行其他操作。该类型作业一般用于短时间的小型计算。

作业步骤为：申请计算资源→转到申请的节点→输入命令进行作业→作业结束释放资源。

### 4.4.1 申请作业资源

申请资源的命令如下：

```
salloc -J zhang -p compute -N 1 --tasks-per-node=2 -t 1:00:00
```

salloc 为关键字，必须输入且为第一个输入；

-J zhang 为设置作业的名称，以方便识别不同的作业。zhang 为本次的作业名称，可根据自己的情况进行调整。

-p compute 为选择 compute 队列的节点。compute 为队列名，可更改为其他队列名。

-N 1 为申请的节点数。1 表示 1 个节点，可根据自己的实际情况调整。

--tasks-per-node=2 为每个节点上运行的任务数，一般不能多个节点上运行少于节点数的任务。2 表示每个节点上运行 2 个任务，可根据自己的实际情况调整。

-t 1:00:00 为设置作业时间，超过设置的作业时间作业自动停止并清除。1:00:00 表示 1 小时，可根据实际情况调整。该项为非必选项。

### 4.4.2 转到申请的节点

流程：查看得到的节点→转到节点。

通过下图命令申请到了计算资源，并获得了 JOBID 为 1135 的作业序号：

```
[zhangzz@n08 ~]$ salloc -N 1 -p all --tasks-per-node=4
salloc: Granted job allocation 1135
```

利用 squeue 命令（图中为 sq 命令，此为额外设置的简易命令。未设置时需要输入完整 squeue）查看申请到的计算节点，结果如下图：

```
[zhangzz@n08 ~]$ sq
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
1019 compute 0.125A10 tianwen R 22-01:01:30 1 n01
1042 compute 0.125A20 tianwen R 17-20:16:39 1 n07
1100 compute 0.25A15 tianwen R 5-07:40:40 2 n[05-06]
1107 compute v_change zhangzz R 4-06:25:23 2 n[03-04]
1118 compute cp10mpa chenjx R 2-07:53:33 1 n02
1133 compute 8Hz-1 zhaoheqi R 3:12 1 n08
1135 all bash zhangzz R 0:04 1 g01
```

由 squeue 命令的输出结果可知作业 1135 获得的计算节点为 g01。

通过 ssh 命令转到 g01 节点。如下图，其中 -X 为设置可使用图形界面，若不需要使用图形界面 -X 可不输入。

```
[zhangzz@n08 ~]$ ssh -X g01
```

### 4.4.3 进行作业

根据实际的作业要求进行作业相关操作，直至作业完成。

### 4.4.4 释放计算资源

作业结束之后，可输入 exit 退出分配到的节点，回到登录节点。再输入 exit 命令释放作业资源。（假设已申请了 1137 号作业）如下图：

```
[zhangzz@g01 ~]$ exit
logout
Connection to g01 closed.
[zhangzz@ln01 ~]$ exit
exit
salloc: Relinquishing job allocation 1137
```

也可利用 scancel 命令直接取消作业。

```
[zhangzz@ln01 ~]$ scancel 1137
```

## 4.5 利用 srun 提交作业

该作业的资源分配与任务加载均通过 srun 命令进行。在该终端需等待任务结束才能继续其它操作，提交作业的窗口断开则任务终止。一般用于短时间小作业测试。

### 4.5.1 提交作业

作业的提交命令如下，需要在一行命令中同时设置申请的资源参数和作业参数。

```
srun -N 1 --tasks-per-node=1 -p compute //share/soft/ansys16/ansys_inc/v160/fluent/bin/fluent 3ddp -t20 -g
```

srun 为基础命令，必须输入且位于第一位置。

-N, --tasks-per-node, -p 等命令和 salloc 一样，具体请参考 4.2 节。

//share/soft/ansys16/...为具体作业内容。

## 5 作业提交软件

为方便使用，编写了作业提交软件，运行界面如下图。作业软件名暂定为 Seletor，目前仅支持 fluent、ls-dyna 使用。后期将逐步更新其他软件的使用调用程序。

使用方式：启动 Seletor 后，按照软件提示输入命令和参数即可。

```

-----
Provided by Waterjet Drilling & Completion Lab, CUPB
Supported by Waterjet Drilling & Completion Lab, CUPB
version 1.0
-----
*****
*                               使用说明(测试版)                               *
*1.目前仅限fluent, ls-dyna使用, 后期将逐步增加其他;                        *
*2.请合理使用计算和储存资源。并行可加速计算, 但超量核数效果并不理想;      *
*3.工作路径选择从家目录开始, 不必反复将本文件复制到不同工作路径;        *
*4.工作路径文件夹命名请勿使用空格。可用下划线或短划线等代替;              *
*5.使用中遇到报错、对使用方法有疑惑、或有建议意见等, 均请反馈。          *
*****
请选择软件并输入相应编号后按空格键。
1 fluent
2 lsdyna

```

## 6 常用命令和资源

### 6.1 squeue 命令

该命令用于查看已经提交且未完成的作业信息。结果如下, ST 为作业的状态, 主要状态有 R-运行中、PD-排队、CG 等; NODELIST (reason) 为正在运行的作业所使用的节点, 若作业为 PD 状态则该列不显示具体的节点信息。

```

[zhangzz@ln01 ~]$ squeue
      JOBID PARTITION    NAME    USER  ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
      1019   compute  0.125A10  tianwen  R   55-03:42:24      1 n01
      1100   compute  0.25A15  tianwen  R   38-10:21:34      2 n[05-06]
      1221   compute  60v0.9   zhangzz  R   10-09:57:15      1 n02
      1250   compute  60v0.7   zhangzz  R    5-10:49:51      1 n08
      1251   compute  60v0.3   zhangzz  R    5-10:48:50      1 n08
      1252   compute  0dia320  zhangzz  R   2-20:54:37      1 n02
      1253   compute  10-0.04  zhaoheqi R   1-22:41:56      1 n03
      1254   compute  45-0.04  zhaoheqi R   1-22:33:31      1 n03
      1262   compute  sine10   zhaoheqi R    6:13:53      1 n04
      1263   compute  square10 zhaoheqi R    6:08:34      1 n04
      1264   compute  trangle1 zhaoheqi R    6:01:53      1 n04
      1267   compute  sine11   zhaoheqi R    3:57:21      1 n04
      1268   compute  square11 zhaoheqi R    2:39:09      1 n07

```

### 6.2 sinfo 命令

sinfo 命令用于查看节点和队列状态。命令执行结果如下, 其中 STATE 为队列的状态, idle-空闲、mix-部分可使用、alloc-被完全占用、drain & draining-不正常状态。

```

[zhangzz@ln01 ~]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
gpu        up       infinite    2     idle g[01-02]
all        up       infinite    1     mix  n07
all        up       infinite    7     alloc n[01-06,08]
all        up       infinite    2     idle g[01-02]
compute*   up       infinite    1     mix  n07
compute*   up       infinite    7     alloc n[01-06,08]

```

## 6.3 scancel 命令

该命令用于取消完成的作业或者取消未正常设置的作业。使用形式为 `scancel JOBID`，例 `scancel 1019`。

## 6.4 linux 和 slurm 学习资源

Linux 基础:

[CentOS 8.1 Linux 安装与使用教程\\_50 集视频课程\\_哔哩哔哩\\_bilibili](#)

slurm 学习:

[MATLAB · 北京大学高性能计算使用指南 \(pku.edu.cn\)](#)

[手册页 - Slurm 中文用户](#)

Slurm 英文手册: [Slurm Workload Manager - Documentation \(schedmd.com\)](#)

[上海交大超算平台用户文档 — 上海交大超算平台用户手册 文档 \(sjtu.edu.cn\)](#)