并行®超算云服务 简明使用手册

(2019冬季版)

北京并行科技股份有限公司

目录

1	并行®超算云服务简介	1
2	并行®超算云服务登陆超算	3
	2.1 内部集成的 webssh	
	2.2 第三方登录软件	3
3	并行®超算云服务文件传输	6
	3.1 WinSCP	6
	3.2 并行快传	8
4	并行®超算云服务作业提交	11
	4.1 命令行提交作业	11
	4.2 集成界面提交作业	11
	4.3 一些商业软件作业提交	12
	4.4 可视化功能	13
5	并行®超算云服务计费中心	15
6	并行®超算云服务其他功能	16
	6.1 配置	16
	6. 2 关于	16
	6.3 注销	16
	6.4显示桌面	16
	6.5 联系客服	16
	6.6 关注超算动态	17
7.	并行®超算云服务常见问题	19

1 并行®超算云服务简介

并行®超算云服务是使用最新 HTML5 技术开发的新一代超算用户使用界面,可以直通国内各大超算以及自己的私有云系统,具有高速稳定的链路,开通快、登陆快、操作快、传输快、计算快、分析快等特点,无需使用 VPN,一键点击登陆超算,给用户使用超算资源提供良好的体验。

温馨提示:

- ❖ 点击链接 https://cloud.paratera.com/ 下载安装客户端
- ◆ 通过联系销售获得并行账号(登录并行®超算云服务的账号)和超算账号,之后我们会将您的并行账号和密码、超算账号以及可以使用的队列分区以邮件方式发送给您。按照后面小节提供的方法即可方便快捷使用超算资源。
- ◆ 一般用户登陆并行®超算云服务后,默认已经绑定可以使用的超算账号;如果您的账号没有绑定对应的超算账号,您及时在专属微信群联系我们进行绑定处理。如果有不需要的超算账号需要解绑,可以按照以下方法进行操作:

点击账号管理图标,点击相应账号右边的×号(下图红框所示)即可解绑。



图 1-1 解绑超算账号流程图

2 并行®超算云服务登陆超算

并行®超算云服务提供多种登陆超算的方法,包括内部集成的 webssh 和第三方登录软件: Putty、Xshell、secureCRT。

温馨提示:

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 客户端版本并行®超算云服务中的 Putty 图标(见图 2-1 (a))通过并行专线登录超算,以提高速度,节省流量。

2.1 内部集成的 webssh

登录并行®超算云服务后,会看到界面上有 SSH 的默认图标,见图 2-1 (b),鼠标左击图标即可登录相应的超算。



图 2-1 并行®超算云服务登录超算界面图标: (a) Putty 图标; (b) SSH 图标

2.2 第三方登录软件

并行®超算云服务自带 Putty 客户端,登录并行®超算云服务后,会看到界面上有默认图标,见图 2-1 (a),鼠标左击图标,选择延迟最小的链路,即可登录相应的超算。

温馨提示:

- ◆ 如果 putty 过久未操作自动掉线,可选择【Connection】—Seconds between keepalives (0 to turn off)为 60
 - ❖ Putty 配置选项设置
- (1) 首先在 Putty 主窗口上方右击,选择【Change Settings】打开配置窗口,按下图方法进行字体和大小的设置:

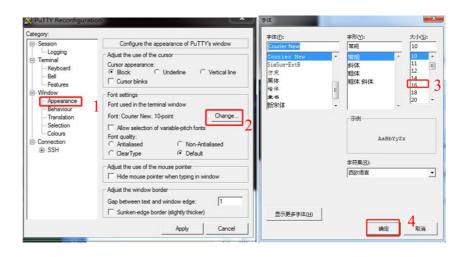


图 2-2 Putty 更改字体设置

(2) 选择【Session】一【登录并行®超算云服务的账号】一【Save】一【Apply】;以后新开的 Putty 窗口都会采用本次设置的参数。

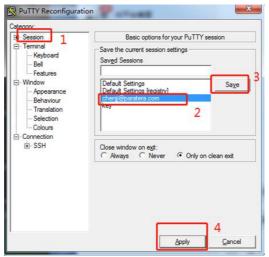


图 2-3 Putty 配置选项设置

注意事项:

- (1) 此方法针对 2.4.0stable 及以上版本生效,对于比 2.4stable 低的版本该设置方法 只对当前设置的窗口生效,新开的窗口需要再次设置,不具有永久保存功能,为了使用 方便建议您更新并行®超算云服务版本至少到 2.4.0stable 版。
- (2)设置永久保存功能时,并行®超算云服务桌面里的 Putty 只能开一个窗口,如果开的窗口多余一个会导致所选的设置对从并行®超算云服务桌面里新打开的 Putty 窗口不生效。
- ◆ 如果习惯使用 Xshell、secureCRT 等其他第三方登录软件(以 Xshell 为例说明),可以点击并行®超算云服务桌面上的应用软件中心图标,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 Xshell 的文件,即可使用 Xshell 登录超算。





图 2-4 Xshell 配置

- ❖ 对于网络较卡的用户,可点击【配置】中【启用 SSH 加速】,能改善使用 Putty 等第 三方 ssh 工具时的体验
 - ❖ 如果您支持 ipv6 网,可以使用并行专线,提高速度

3 并行®超算云服务文件传输

要想实现本地与超算间的文件传输,可选择并行®超算云服务桌面的 WinSCP、并行快传。

3.1 WinSCP

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

使用方法:

- 1、登录并行®超算云服务后,左击并行®超算云服务界面上默认的 WinSCP 图标(见图 3-1),选择最优链路(自动)连接登陆
 - 2、拖拽文件进行文件传输



图 3-1WinSCP 图标

温馨提示:

◆ 并行®超算云服务 WinSCP 功能仅限于 Windows 系统,其他系统要传输可以使用 linux 版或 MAC 版的 ParaAPP, 下载链接:

https://www.paratera.com/cloudService05.html(下载界面见图 3-2)



图 3-2linux 版和 MAC 版的 ParaAPP 下载界面

目前 ParaAPP 支持在 CG2 超算上 ln1, ln2 和 ln4 和一些超算数据互传,以 CG2 超算和广州超算同步方法为例说明,使用方法如下:

pg2004@ln1%pg2 ~]\$ papp cloud rsync -i pp214.id pp214@gz:/HOME/pp214/soft ./

上面示例表示将广州超算 pp214 用户的 /HOME/pp214/soft 目录(也可以是某个文件)同步到 PG2004 用户的当前目录下,为避免同步过程由于命令行窗口关闭导致中断,建议与 screen 配合使用。同步过程中断后可续传。

其他超算同步方法可通过 papp cloud -h 查看帮助。

in - 济南超算 sce - 国家网格 sz - 深圳超算 bi - 北京市计算中心

cs - 长沙超算 gz - 广州超算 tj - 天津超算 pg1 - ParaGrid1

ll - 吕梁超算 pac - PAC wx - 无锡超算

支持 ivp6 网络的用户,可以用 window 系统下并行®超算云服务的 WinScp 并行专线进行数据上传和下载,提高传输速度。(并行专线界面见图 3-3)



图 3-3 并行专线

- ❖ WinSCP 常见问题处理方法
- 1) WinSCP 刷新快捷键是 Ctrl+r, 也可以设置成自动刷新,操作步骤如下: (见图 3-4)
- ① 按 Ctrl+Alt+r,使得自动刷新功能呈 turn on 状态,(看左下角提示,如果是 turn off 状态,则再按一次);
 - ② 点击 preference-勾选 remote-refresh remote panel every, 会定期自动刷新。

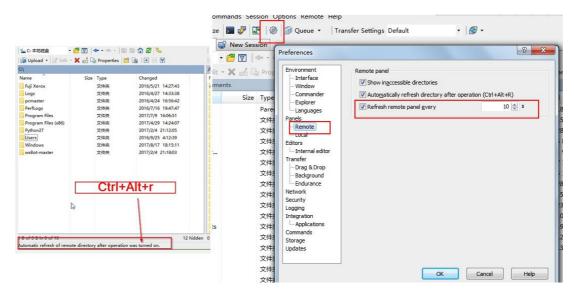


图 3-4 WinSCP 传输界面

2)使用并行®超算云服务 WinSCP 传输文件时,点击"_"最小化后无法扩大化,不能显示 (见图 3-5): 可使用 Tab+Alt 键切换到 WinSCP 传输界面即可扩大化显示。

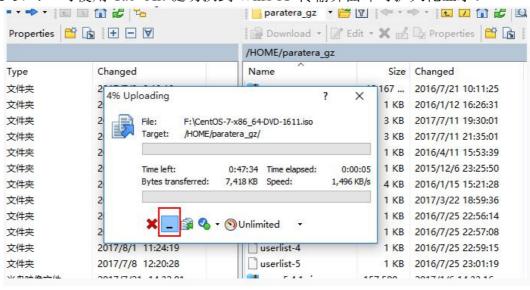


图 3-5 WinSCP 传输界面

3.2 并行快传

并行快传(图标见 3-6 (a)) 采用全新方式传输文件,可以有效利用用户本地的带宽,传输速率最高可达普通 WinSCP 的 3-4 倍,同时支持在第三方传输工具无法使用的场景(例如通过浏览器方式访问超算和传输数据、MAC 和 Linux 环境下等)。双击并行®超算云服务桌面上的并行快传图标 3-6 (a),即可使用并行快传,使用方法类似 WinSCP,对文件进行拖拽即可实现上传和下载,传输界面见图 3-6 (c),从中可看到传输文件的传输进度,速度,状态等信息。

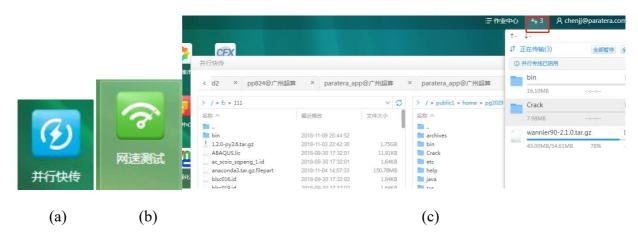


图 3-6 并行快传与网速测试: (a)并行快传图标; (b) 网速测试图标; (c) 传输界面 如果打开并行快传无法使用,请在命令行执行开通命令,然后重新打开快传进行使用。各超算开通快传命令如下:

Paragrid 1 超算:

ssh c01n03 "PCDS_SHARE_USER=pcds /opt/pcds/public/bin/pcds_auto.sh" cngrid 2 超算:

ssh ln9 "PCDS SHARE USER=pcs/opt/pcs/public/bin/pcds auto.sh"

广州超算:

ssh 12.11.70.134 "PCDS_SHARE_USER=paratera_59 /home/paratera_59/public/bin/pcds_auto.sh 长沙超算:

ssh ln4 "PCDS_SHARE_USER=para50 /vol6/home/para08/para_env/bin/pcds_auto.sh" 无锡超算:

ssh 173.0.100.100 "PCDS_SHARE_USER=para052 /home/export/online1/para052/public/bin/pcds auto.sh"

中科院人工智能平台(https://ai.sccas.cn):

ssh login1 "PCDS_SHARE_USER=scta001 /home/SCTAHOME/scta001/public/bin/pcds_auto.sh" PAC

ssh ln01 "PCDS_SHARE_USER=pac001 /home/pac001/pcs/public/bin/pcds_auto.sh" 深圳超算:

NSGG 分区

ssh gcn04 "PCDS_SHARE_USER=nsgg225_HRP1 /home-gg/users/nsgg225_HRP1/pcs/public/bin /pcds_auto.sh"

NSYG 分区

ssh ygcn02 "PCDS_SHARE_USER=nsyg017_HRP1 /home-yg/users/nsyg017_HRP1/pcs/public/bi

n/pcds_auto.sh"

CSTC9

ssh ln1 PCDS_SHARE_USER=pcs /public1/home/pcs/public/bin/pcds_auto.sh

BSCC-D

ssh ln1 "PCDS_SHARE_USER=pcs /opt/pcs/public/bin/pcds_auto.sh"

CG12

ssh 10.31.2.102 "PCDS SHARE USER=pcs/opt/pcs/public/bin/pcds auto.sh"

CSTC13

PCDS_SHARE_USER=pcs /opt/pcs/public/bin/pcds_auto.sh

温馨提示:

- ❖ 您如果上传或下载速度比较慢,可以用并行®超算云服务自带的网速测试软件(在应用集市点击安装)进行(图 3-6 (b))网速测试,并截图给客服,联系我们。
- ◆ 并行快传界面内支持对文件进行重命名,编辑,压缩,解压,等操作。右键需要操作的文件即可看到相关功能,点击进行操作。

10

4 并行®超算云服务作业提交

4.1 命令行提交作业

登录超算书写脚本,通过脚本命令提交作业,具体方法见超算使用指南。

4.2 集成界面提交作业

并行®超算云服务集成了一些软件,可以通过并行®超算云服务平台使用。无需登陆超算、 无需命令行,只需上传输入文件,选择规模一键提交。集成的软件经过了优化,能够达到最 高的计算效率。可以点击"应用集市"图标(见图 4-1),选择您需要的软件,上传相应的 软件包,告知客服,我们帮您集成。



图 4-1 应用集市: (a) 应用集市图标 (b) 应用集市界面

联系我们帮您集成后,在"应用集市"点相应图标下方的"安装",即可在并行®超算 云服务上添加软件图标(也可以点击"作业中心",查看可使用的软件),集成作业界面见 图 4-2,使用方法如下:

- 1. 点击软件,上传输入文件,选择规模等参数
- 2. 选择输出路径,进行计算

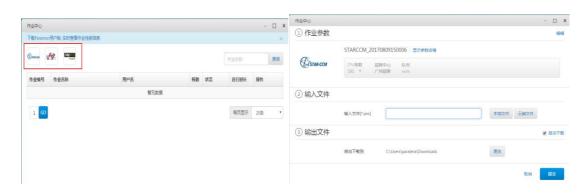


图 4-2 集成作业界面

温馨提示:

◆ 应用集市还有些关于并行®超算云服务的其他软件,您可以点击"应用集市"图标, 点击"并行®超算云服务"进行安装和卸载(见图 4-3)。其中,"知识库"是关于并行®超 算云服务的简明使用手册;"计费中心"可查看当前账号机时消费情况。

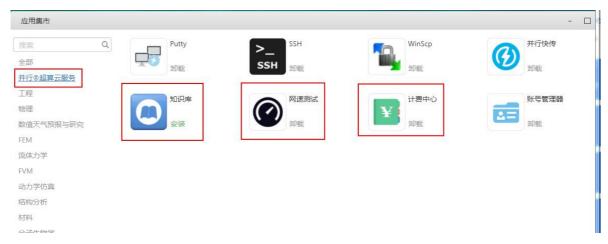


图 4-3 应用集市一并行®超算云服务界面

◆ 应用集市里的商业软件仅仅是个图标,需要您上传安装包到账号下,联系客服进行安装集成,集成好之后才可以用图形界面提交作业。

4.3 一些商业软件作业提交

广州超算提供多种商业软件,比如: ANSYS, ABAQUS等, 开通商用队列后, 您可通过并行®超算云服务登陆天河星光平台, 避免了传统登陆广州超算商用软件系统的繁琐, 并且可以直接图形界面使用软件进行前后处理和计算, 节省学习 Linux 命令和熟悉超算的时间成本。联系客户经理开通该平台即可在并行®超算云服务桌面上生成相应的图标(见图 4-4)。



图 4-4 商业软件图标

使用方法:

- 1. 点击并行®超算云服务里的"新天河星光"图标,输入账号,密码登陆星光平台
- 2. 选择需要使用的软件,点击上传输入文件,提交作业
- 3. 在作业列表里,查看作业运行情况(如下图)

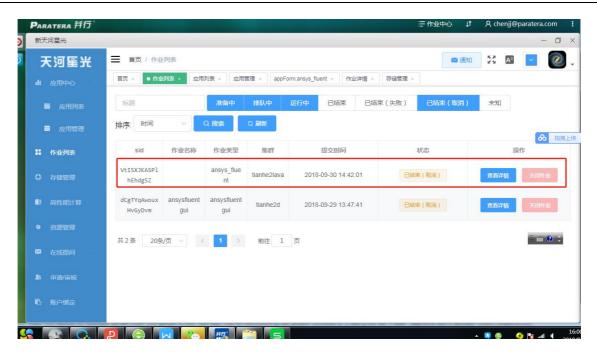


图 4-5 星光平台

温馨提示:

◆ 软件种类和具体使用方法可联系机时客服进行咨询,有些集成软件可能未上线,可以 联系客服获取最新消息

4.4 可视化功能

并行®超算云服务提供了可视化功能,可以打开图形界面,具体使用方法如下:

(1)联系我们开通可视化功能(可以在微信群里提出)



图 4-6 可视化软件功能

(2) 开通后,在"并行@超算云服务软件"桌面的 vnc 软件,操作方法见下图,点击编辑参数可以设置使用的核数,提交的作业运行时间等,设置好后点击提交,即可提交 vnc 作业。



图 4-7 vnc 提交作业界面

(3)提交后,点击下图红框,即可打开图形界面



图 4-8 打开 vnc 可视化界面

(4)结束使用时,一定要点击停止 vnc 服务,结束作业,以免浪费机时



图 4-9 停止 vnc 可视化作业

温馨提示:

❖ vnc 提交的作业结束使用时,要到命令行用查询作业命令进行查询,确保作业已被杀掉,以免浪费机时。

5 并行®超算云服务计费中心

并行®超算云服务提供了计费查看功能,一般并行®超算云服务界面默认安装了计费中心应用(若界面里没有计费中心图标,可以在应用中心搜索安装),点击桌面的计费中心,即可看到具体的机时详情。



图 5-1 计费中心功能

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核实。

6 并行®超算云服务其他功能

6.1 配置

点击并行®超算云服务右上角"配置"选项,可进行语言、SSH加速的更改。



6-1 清理缓存方法

温馨提示:

◆ 您如果在使用并行®超算云服务的过程中出现异常,可以通过点击配置里面的清理缓存解决,如果清理缓存后异常还未解决,请联系我们。

6.2 关于

点击并行®超算云服务右上角"配置"选项,可查看当前并行®超算云服务版本。

6.3 注销

点击并行®超算云服务右上角"注销"选项,退出并行®超算云服务平台。

6.4 显示桌面

点击并行®超算云服务左上角空白处,有一个隐藏按钮"显示桌面"图标(见 5-1),点击此按钮可显示并行®超算云服务的主页面。



6-2 显示桌面按钮图标

6.5 联系客服

使用手机,扫描并行®超算云服务面右下角"微信客服"二维码,加客服好友。7*24 在

线支持为您服务。

6.6 关注超算动态

扫描"超算云服务公众号"二维码,添加公众号,能够及时收到超算系统的通知和报警消息。从并行®超算云服务 3.2 版本开始,首次安装、版本更新软件后,会弹窗提示关注公众号,具体方法如下:

(1) 首次安装或者版本更新后,会弹出如下左面的提示框:



6-3 绑定公众号界面

使用手机微信"扫一扫"扫描二维码,手机端会弹出公众号界面,点"关注公众号",即可完成关注过程。成功关注后,并行®超算云服务软件会自动进入 6-3 右面的界面,显示"绑定成功",点"进入云桌面"即可正常使用。下次登陆不再提示。

(2) 用户暂时不关注

如果用户没有带手机,可以暂时不关注。点击弹窗下面的"我已关注",会弹出一个"免责声明",用户点击"确定"既可进入正常使用。

(3) 其他情况希望关注公众号

点击软件右上角的用户账号,进入"个人中心",在"个人信息"栏点击"新增绑定", 会弹出公众号二维码,用户通过扫描二维码,可以完成绑定过程。

(4) 用户确认已关注或者不想关注

确认已关注的用户也可以通过完成正常的关注流程完成关注过程,不影响用户收到公众号消息。



如果用户确定不想关注公众号,可以通过在弹出界面选择"不再提示",然后点击"我 已关注",确认免责声明后进入界面使用,用户以后登录就不会再提示用户关注公众号。

温馨提示:

- ◆ 微信公众号是超算发布超算动态和长时间作业提醒报警消息的主要平台,建议您按照 上述方法关注并绑定公众号,及时便捷了解超算动态。
- ◆ 如果在您的并行®超算云服务软件里的个人中心里面有您绑定的微信昵称,说明绑定成功,可接收公众号消息。



6-4 确认是否绑定公众号界面

7. 并行®超算云服务常见问题

(1)如果登录并行®超算云服务,输错密码,在登录界面左上角(图 7-1)会显示尝试输入密码的剩余次数,如果密码输入错误次数达到十次,会导致账号被锁,为避免账号被锁,可以点击界面的"忘记密码",进行密码重置。如果账号因输入错误密码次数太多,导致被锁,账号会在三个小时后自动解锁,解锁后在登录界面,点击"忘记密码"重置即可。



7-1 输入密码次数提醒和重置密码界面

- (2)如果想更改并行®超算云服务密码,可点击并行®超算云服务右上交账号按钮,进行并行®超算云服务的密码更改。
- (3) 并行®超算云服务支持老版本自动升级,如果有发布新的版本,在联网条件下打开并行®超算云服务,会收到升级提醒,无需卸载旧版本即可升级为新版本。
- (4) 并行®超算云服务也支持消息推送,您会收到磁盘配额满等提醒,为您使用超算提供更多便捷。
- (5)并行®超算云服务的应用中心里面有知识库,通过知识库小工具,大家可以便捷的了解到云桌面的使用方法。
- (6)通过并行®超算云服务登陆超算后,提交作业请使用 slurm 调度命令发送到计算节点,请勿在登陆节点运行作业。如有发现此类不规范操作,管理员将终止进程。并通知违规用户。两次警告无效后,每次违规操作,将会禁止账号登陆一天。具体脚本模板见各超算使用手册。