

集群机使用基础

——集群系统概述及linux基本使用

清华大学高性能计算平台

主讲：林皎



培训内容

- 集群系统概述
- Linux常用命令
- Vi编辑器的使用
- 作业管理软件

集群机的三大优势

- 计算节点

- ✓ 每个节点为一个独立的工作站/服务器
- ✓ 节点配置：
 - 两颗 Intel Xeon X5670六核处理器 (2.93GHz, 12MB Cache)
 - 370个节点32GB内存, 370个节点48GB内存

- 高速网络:

- ✓ InfiniBand QDR通信网络构成, 理论带宽40Gb

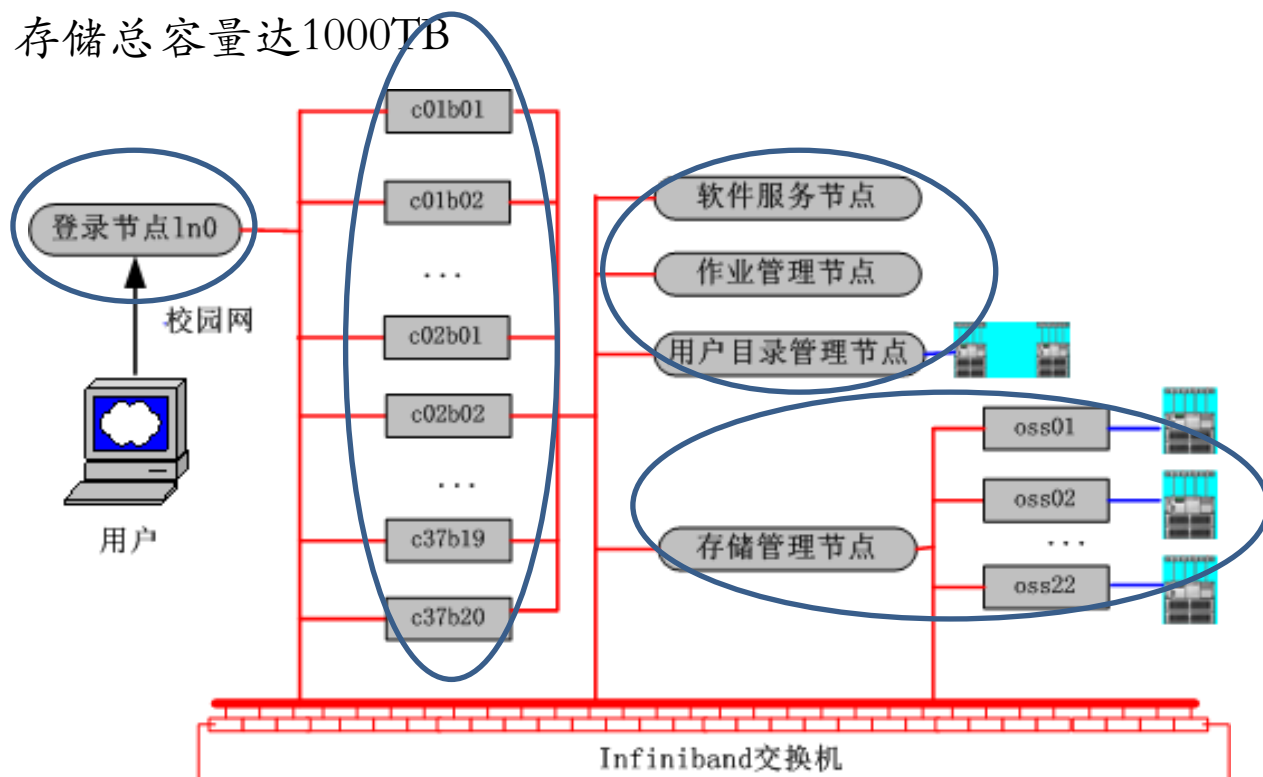
- 超大容量存储系统:

- ✓ 存储容量: 1000TB的存储容量
- ✓ 文件系统读写效率: 实测写带宽4GB/s

集群部署示意图

- “探索100”百万亿次集群机

- 共有740个计算节点，8880个处理器核
- 系统的理论峰值浮点计算性能达到104TFlops
- 存储总容量达1000TB



什么样的程序需要使用超算？

- 批处理作业
 - ✓ 单核，运行上百次
 - ✓ 仿真模拟、统计运算
- 并行程序
 - ✓ 超算主要计算类型
 - ✓ 程序本身就是并行程序
 - ✓ Parallel/MPI
- 内存需要量比较大的程序

培训内容

- 集群系统概述
- Linux常用命令
- Vi编辑器的使用
- 作业管理软件

Linux命令基本格式

- 命令行操作
- 格式：命令 + <选项> + 目标文件或目录（文件夹）
- 目录：文件夹，树形目录结构
 - ✓ /
 - ✓ ./（运行命令一定要加./（或者绝对路径），如./a.out）
 - ✓ ~/

目录操作（课后练习）

- ls: 显示目录下所有文件及目录
 - ls -al /ll (注意隐藏文件)
 - 在WORK目录及其子目录下，文件数较多时，请尽量不要使用ls，防止登录节点死机
- cd: 从当前目录转移到指定目录
 - cd WORK/students/online (offline) /username
 - cd ..
 - cd ~ (~代表/home/username)
- pwd: 显示当前目录的绝对路径
- mkdir: 创建子目录
 - cd WORK/students/online/username
 - mkdir test
- rmdir: 删除子目录
 - rmdir test/rm -rf test

文件操作（课后练习）

➤ touch: 创建文件

- touch aa

➤ cp: 复制文件 ()

- cp aa aa.bak (修改文件之前，养成备份的习惯)
- mkdir test; cp aa test
- cp -r ~/course/ ./(-r为目录拷贝)

➤ mv: 移动文件

- mv aa.bak test
- mv aa bb

➤ rm: 删除文件

- rm bb (不要在~使用rm -rf *,删除自家目录的隐藏文件)

文件显示（课后练习）

先进入course目录： `cd course`

➤ `cat`:显示文件/合并文件

- `cat POTCAR`

- `cat list1 list2 >list3`

➤ `more`:分页显示文件

- `more POTCAR`

➤ `head`:显示文件头部

- `head POTCAR`

- `head -n 20 POTCAR`

➤ `tail`:显示文件尾部

- `tail POTCAR`

- `tail -n 20 POTCAR`

其他文件相关命令（课后练习）

- ln:创建链接文件(确认在WORK/students/online/username下)

- ln -s course/run ./
- ln -s course/vasp.Hg/ vasp.Hg

- diff:比较文本文件(cd course)

- diff job job.bak

- chmod:修改文件属性

- chmod +x job

读权限：4 写权限：2 可执行权限：1

- grep:文本搜索工具

- grep mpi *.c

- find:递归搜索目录下文件

- find ~ -name '*.txt'
- find ~/ -name '*.txt' -exec rm {} \;

(注意rm 与{}与\都有空格,以;为结尾, 这个语句不要执行!!!!)

- find ./ -atime +90> dfile90

正则表达式操作符

名称	操作符	使用举例	意义	支持的工具
析取		x y z	x,y或者z	awk,egrep
任意字符	.	/L..e/	Love,Live,...	所有工具
字符串首字符	^	^x	以字符 x 开始的串	所有工具
连接		xyz	xyz	所有工具
字符串尾字符	\$	x\$	以字符 x 结束的串	所有工具
转义字符	\	*	*	sed,vi
组合	()或\(\)	(xy)+	xy,xyxy,...	所有工具
可选	?	xy?	x,xy	awk,egrep
重复(零次或更多)	*	xy*	x,xy,xyy,xyyy,...	所有工具
重复(一次或更多)	+	xy+	xy,xyy,xyyy,...	所有工具
集合	[][^]	[Hh]ello[^A-KM-Z]ove	hello Love, Hello Love	所有工具

正则表达式举例（选择练习）

- 例一：搜寻特定字符串：

```
grep -n 'the' regular_express.txt
```

```
grep -vn 'the' regular_express.txt
```

```
grep -in 'the' regular_express.txt
```

- ◆ 例二：利用 [] 来搜寻集合字元

```
grep -n 't[ae]st' regular_express.txt
```

```
grep -n '^[^g]oo'  
regular_express.txt
```

```
grep -n '[0-9]' regular_express.txt
```

- ◆ 例三：行首与行尾字元 ^ \$：

```
grep -n '^the' regular_express.txt
```

```
grep -n '^[^a-zA-Z]'  
regular_express.txt
```

```
grep -n '\.$' regular_express.txt
```

- ◆ 例四：任意一个字元 . 与重复字元 *：

```
grep -n 'g..d' regular_express.txt
```

```
grep -n 'ooo*' regular_express.txt
```

```
grep -n 'goo*g' regular_express.txt
```

```
grep -n 'g*g' regular_express.txt
```

```
grep -n '[0-9][0-9]*'  
regular_express.txt
```

- ◆ 例五：限定连续字符范围 {}

```
grep -n 'o\{2\}' regular_express.txt
```

```
grep -n 'go\{2,5\}g'
```

```
regular_express.txt
```

```
grep -n 'go\{2,\}g' regular_express.txt
```

文件压缩与解压缩（课后练习tar和tar.gz）

- .tar

解包：tar xvf FileName.tar

打包：tar cvf FileName.tar DirName

- .gz

解压1：gunzip FileName.gz

解压2：gzip -d FileName.gz

压缩：gzip FileName

- .tar.gz 和 .tgz

解压：tar zxvf FileName.tar.gz

压缩：tar zcvf FileName.tar.gz DirName

- .zip

解压：unzip FileName.zip

压缩：zip FileName.zip DirName

- .bz2

解压1：bzip2 -d FileName.bz2

解压2：bunzip2 FileName.bz2

压缩：bzip2 -z FileName

- .tar.bz2

解压：tar jxvf FileName.tar.bz2

压缩：tar jcvf FileName.tar.bz2 DirName

- .Z

解压：uncompress FileName.Z

压缩：compress FileName

- .tar.Z

解压：tar Zxvf FileName.tar.Z

压缩：tar Zcvf FileName.tar.Z DirName

重定向及管道符（课后练习）

- 重定向: 命令的输入、输出、错误信息可以利用文件的重定向功能重定向到其他文件
 - < : 标准输入
 - `cat < host`
 - >: 标准输出 (常用)
 - `ls -l / > aa`
 - >>: 原有文件后面追加内容 (常用)
 - `ls -al >> aa`
- 管道: 一条命令的标准输出成为另外一条命令的标准输入
 - `ll | grep job`
 - `history | more`

系统操作（课后练习）

- echo:显示变量的值
 - echo \$PATH
- ps:用于查看当前系统中的活跃进程
 - ps -ef|grep -v root
- kill:终止指定进程
 - kill 1511
- history:显示历史指令记录内容, 下达历史纪录中的指令
 - history 10
 - !331
- which: 在环境变量\$PATH设置的目录里查找命令
 - which ls
- du: 统计目录占磁盘空间大小（文件数多的情况下，使用du命令易死机）
 - du -smh ./
 - du -h --max-depth=1 一级子目录的磁盘空间大小

网络操作及其他（课后练习）

- ssh: 登录远程主机
 - ssh test02
 - ssh username@hostname
- scp,rsync: 远程拷贝、同步数据
 - scp -r course train1@test02:~/WORK/students/online/linjiao/test
 - rsync -avz train1@test02:~/WORK/students/online/linjiao/course course1

（支持断点续传）
- man: 帮助命令
 - man ls
- top: 动态观察程序的变化

常用快捷操作

 - **ctrl +c** : 终止当前命令
 - **Tab**键: 命令补齐
 - 上下键

培训内容

- 集群系统概述
- Linux常用命令
- Vi编辑器的使用
- 作业管理软件

Vi 简要使用流程（课后练习）

- 创建文件job.sh

- 使用 "vi [选项] [文件 ..]" 命令打开要编辑的文件

- vi job.sh

- 按下 "i" 进入编辑模式

- 编辑,输入文档

```
#!/bin/bash  
date >> job.txt
```

- 按 "Esc" 键退出编辑模式

- 输入 ":w" 回车保存，再输入":q" 回车退出。或者直接输入 ":wq"
回车，代表保存并退出

两种操作模式（课后练习）

- 编辑模式：对文本进行编辑处理

- i: 进入编辑模式

- ls - al >>job.txt

- Esc: 退出编辑模式

- 命令模式: 接收按键指令执行操作，如复制、粘贴、搜索、替换、保存、另存为等

- 移动光标

- 搜索与替换

- 删除(剪切)、复制与粘贴

- 管理命令

命令模式详解（选择性练习）

➤ 搜索与替换

- /word: 从光标处开始，向后搜索文本中出现word的字符串
- :n1,n2s/word1/word2/g: 在第 n1行与第n2行之间搜索word1，并将其替换为word2

➤ 删除(剪切)、复制与粘贴

- x: x 为向后删除一个字符
- u: 撤消上一操作
- yy: 复制光标所在行的内容
- p: p 为将复制或剪切的内容粘贴在光标下一行
- dd: 删除光标所在行

➤ 管理命令

- :num: 跳到文件的某一行
- :set nu: 显示正文的行号。
- :set nonu: 取消行号。
- :![命令]: 暂时离开 vi 编辑器，并在 shell 中执行命令

练习（课后练习，重要）

- 建立脚本job.sh
- 编辑运行一个脚本

```
#!/bin/sh  
date > job.txt  
ls -al >>job.txt
```

- ./job.sh

`bash: ./job.sh: Permission denied`（没有可执行权限）

- `chmod +x job.sh`

- `./job.sh`（注意./）

- 脚本格式：

- `unix2dos job.sh`

- `./job.sh`

`-bash: ./job.sh: /bin/sh^M: bad interpreter: No such file or directory`

- `cat -v job.sh`

- `dos2unix job.sh`

- 用户尽量在linux环境中撰写脚本，避免上传作业产生的格式错误

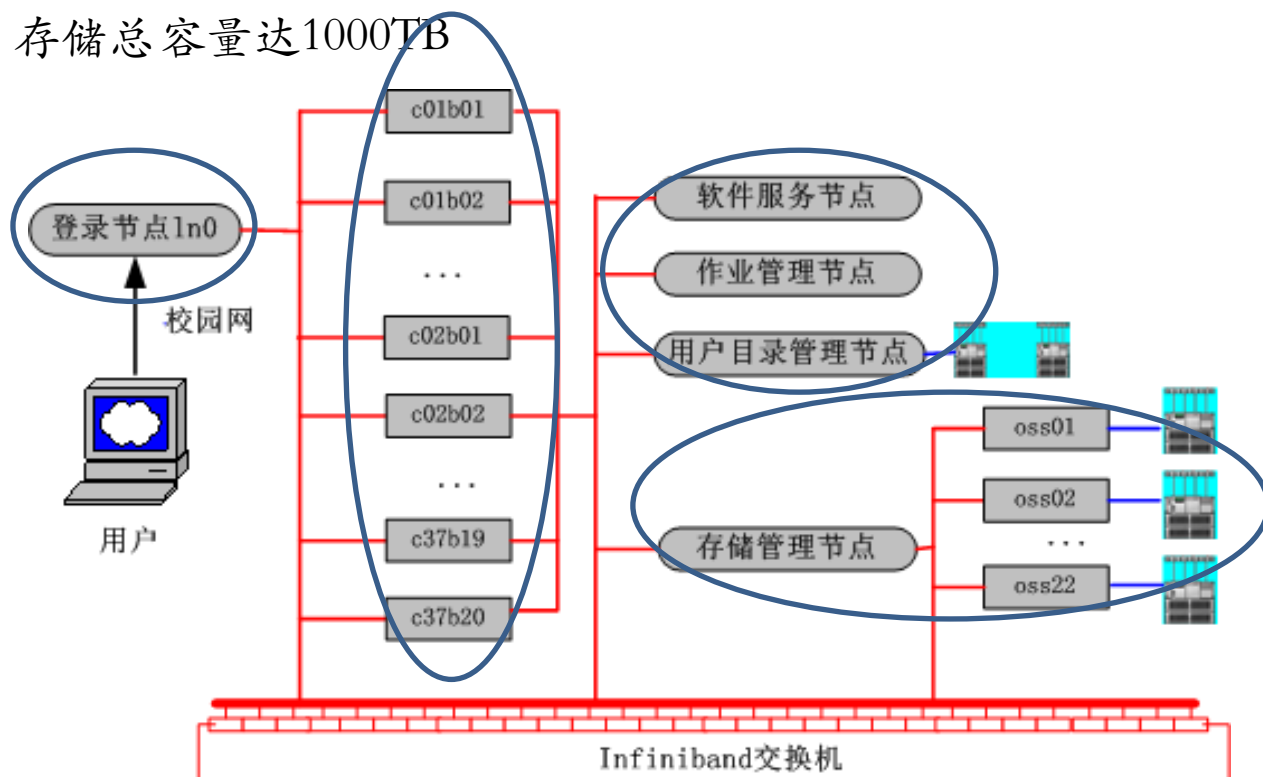
培训内容

- 集群系统概述
- Linux常用命令
- Vi编辑器的使用
- 作业管理软件

系统部署示意图

- “探索100”百万亿次集群机

- 共有740个计算节点，8880个处理器核
- 系统的理论峰值浮点计算性能达到104TFlops
- 存储总容量达1000TB



作业提交

- 平台必须通过slurm提交作业使用集群计算资源
- E5集群机按照**先来先服务**原则进行分配
- 提交作业节点：
 - 登录节点：ln01
 - 测试节点：test01-test04
- WORK目录使用注意事项：
 - 新的应用程序务必在测试节点完成测试后，再通过slurm提交
 - 提交作业必须在./WORK下进行

Slurm 脚本详解

```
#!/bin/bash
```

```
#SBATCH -J vasp02 （作业名称）
```

```
#SBATCH -p course （使用course队列）
```

```
#SBATCH -N 4 （使用4个节点）
```

```
#SBATCH -o stdout.%j （屏幕输出）
```

```
#SBATCH -e stderr.%j （错误输出）
```

```
#SBATCH --no-requeue
```

```
#SBATCH --ntasks-per-node=28 （每个节点28核）
```

```
module load compiles/intel/2019/u4/config （环境变量设置）
```

```
mpiexec.hydra -n 112 /apps/soft/vasp/vasp.5.4.4/e5_2680v4/opa/vasp.5.4.4/bin/vasp_std  
（可执行程序exe）
```

提交作业实例

- 上传输入文件至WORK目录
- 撰写脚本：job.vasp （必须使用vi编辑器）

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J linjiao
#SBATCH -p course
#SBATCH -N 1
#SBATCH -o stdout.%j
#SBATCH -e stderr.%j
#SBATCH --no-requeue
#SBATCH --ntasks-per-node=4
module load compiles/intel/2019/u4/config
mpiexec.hydra -n 4
/apps/soft/vasp/vasp.5.4.4/e5_2680v4/opa/vasp.5.4.4/bin/vasp_std
```

- 提交作业： `sbatch job.vasp`
- 注意：操作目录必须在WORK目录下，用户可离线等待结果

Slurm基本操作命令

- 查看作业状态
 - ✓ `squeue -u 用户名`
 - ✓ `scontrol show job JOBID`
- 查看作业结果：
 - ✓ 查看stdout及stderr文件
- 删除作业：
 - ✓ `scancel jobid`
- 节点状态查询：
 - ✓ `sinfo`

单节点运行：matlab

- 直接运行命令：（a.m为matlab 源程序）

`/apps/soft/MATLAB/R2018a/bin/matlab -r "a;quit"`

- 建立lsf脚本job.matlab

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J Matlab
#SBATCH -p cnall
#SBATCH -N 1
#SBATCH -o stdout.%j
#SBATCH -e stderr.%j
#SBATCH --no-requeue
#SBATCH --ntasks-per-node=4
/apps/soft/MATLAB/R2018a/bin/matlab -r "a;quit"
```

- 提交脚本： `sbatch job.matlab`

MPI程序运行：lammps

- 直接运行命令：

```
mpirun -np 4 /home/train1/WORK/package/lammps-  
stable_29Oct2020/src/lmp_mpi <input > log
```

- 建立lsf脚本job.lammps

```
#!/bin/bash  
#SBATCH -J Matlab  
#SBATCH -p cnall  
#SBATCH -N 1  
#SBATCH -o stdout.%j  
#SBATCH -e stderr.%j  
#SBATCH --no-requeue  
#SBATCH --ntasks-per-node=4  
module load compiles/intel/2019/u4/config  
module load lib/gcc/9.2.0/config  
mpiexec.hydra -n 4 /home/train1/WORK/package/lammps-  
stable_29Oct2020/src/lmp_mpi < input > log
```

提取主机信息：Abaqus

- 配置：

- 建立软件配置文件：abaqus_v6.env

/apps/soft/abaqus_6.14-4/6.14-4/SMA/site/abaqus_v6.env

在137行中间添加一行：

```
mp_host_list=[c05b01n01,28],[c05b01n02,28]
```

- 运行：

```
/apps/soft/abaqus_6.14-4/Commands/abaqus job=thermal user=thermal  
cpus=56 memory=20000mb interactive
```

联系方式

- linjiao@tsinghua.edu.cn
- 办公电话：62798981
- 平台公众号：THU高性能计算平台

