

HPC云使用操作培训

国家超级计算天津中心
高性能计算部
2019.11



宣传图背景为蓝色，带有网络节点和彩色光点装饰。左上角有NSCC标志。中央大字标题为“天河HPC云平台”，下方副标题为“让中国的超级计算更好用”。底部有一个白色框，标题为“背景”，内容为对天河HPC云平台的介绍。

NSCC

天河HPC云平台

让中国的超级计算更好用

背景

天河HPC云是国家超级计算天津中心自主开发的高性能计算云上服务平台。借助天河系统强大的计算能力和完善的应用软件环境，通过云服务的方式为广大用户提供方便快捷、安全可靠、一站式的科研工作环境，让中国的超算更好用。

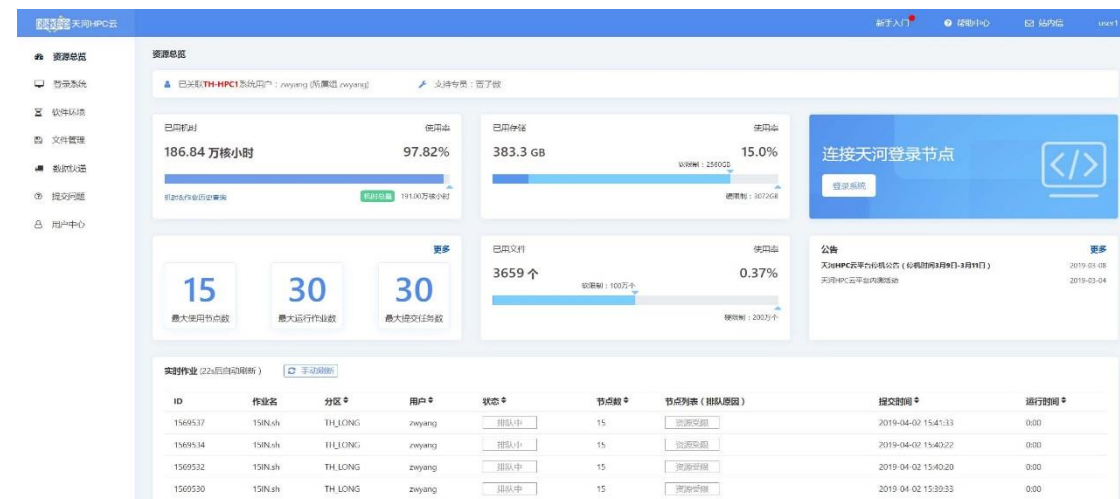
特色功能：

- 快捷登录
- 统一资源查询
- 远程登录系统
- 模块化的软件管理
- WEB文件管理
- 数据快递服务
- 在线技术支持
- 在线帮助文档

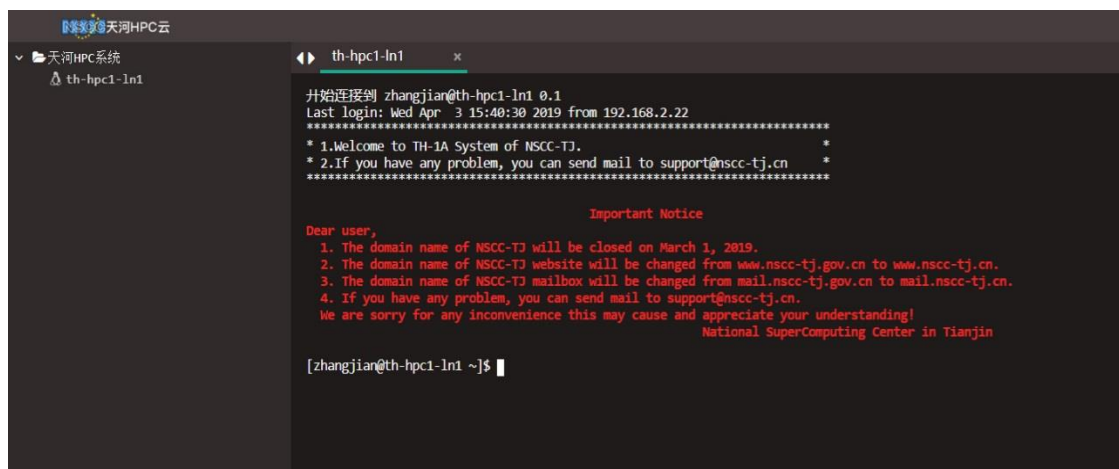
服务端主要功能页面



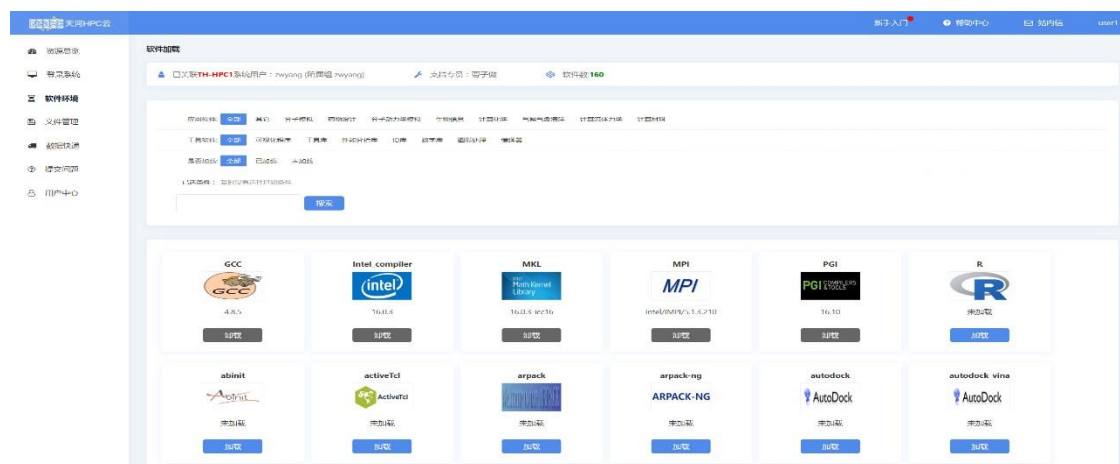
登录页面



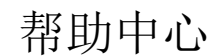
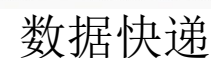
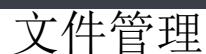
资源总览



登录系统



软件环境



天河

HPC云的功能模块 --- 登陆

<https://hpc.nsccl-tj.cn>



天河高算系统

@HPC

让中国的超级计算更好用

登录天河HPC云

hpctest

.....

登录验证

忘记密码 手机登录

NSCC 天河HPC云

[新手入门](#)
[帮助中心](#)
[站内信](#)
[hpctest](#)

资源总览

登录系统

软件环境

文件管理

数据快递1

提交问题

用户中心

已关联TH-HPC1系统用户: hpctest (所属账户 hpctest)

支持专员: 张健

已用机时

使用率

0.00 万核小时

0.00%

机时&作业历史查询

机时总量 100.00万核小时

已用存储

使用率

0.4 GB

0.1%

软限制: 500GB

硬限制: 1024GB

已用文件

使用率

110 个

0.01%

软限制: 100万个

硬限制: 200万个

3

最大使用节点数

30

最大运行作业数

30

最大提交任务数

连接天河登录节点

登录系统

公告

更多

天河HPC云平台内测活动 (第二轮)

2019-05-06

天河HPC云平台停机公告 (停机时间3月9日-3...

2019-03-08

天河HPC云平台内测活动

2019-03-04

实时作业 (29s后自动刷新)

手动刷新

ID	作业名	分区	用户	状态	节点数	节点列表	提交时间	运行时间	操作
1893433	sub.sh	debug	hpctest	运行中	1	cn42	2019-11-14 14:28:05	0:03	设置提醒

资源总览 > 机时&作业历史查询

7天内

31天内

90天内

自定义时间区间:

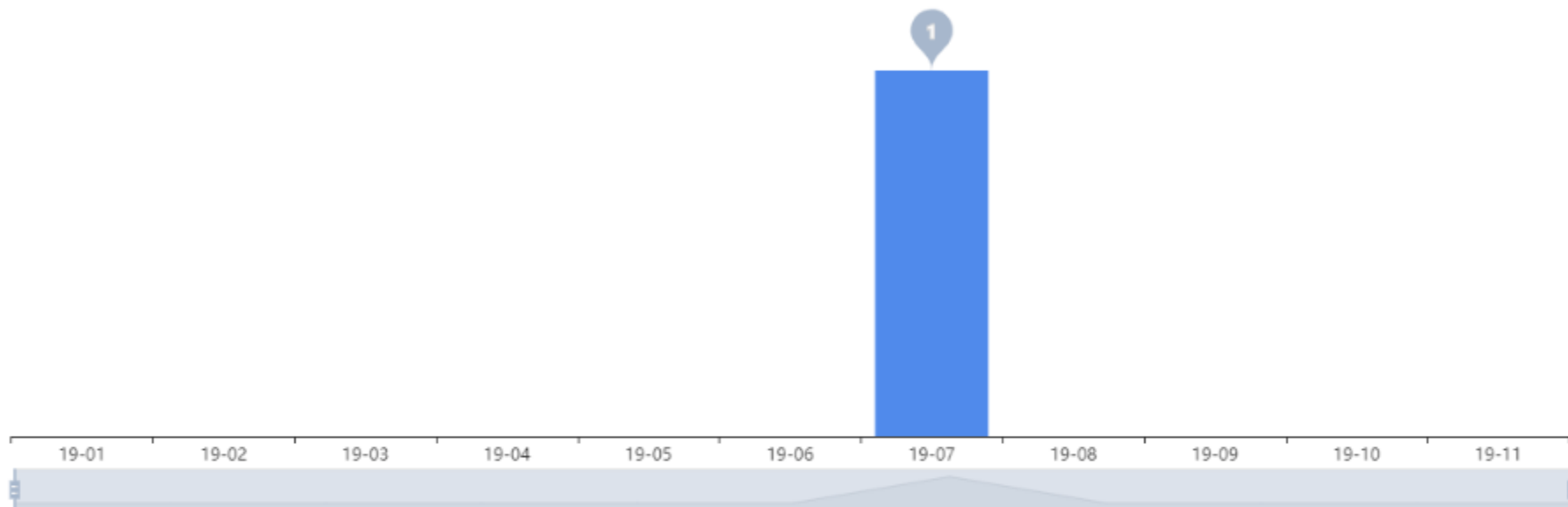
2019-01-01

至

2019-11-14

2019-01-01 至 2019-11-14账号总机时: 1核小时,作业数:13

自 刷新 导出



作业列表 (本页作业数:13,总作业数:13)

上一页 1 下一页 共1页 到第 页 确定

ID	作业名	分区	用户	状态	节点数	节点列表 (排队原因)	提交时间	运行时间
1893433	sub.sh	debug	hpctest	已完成	4	cn42	2019-11-14 14:28:05	00:00:09
1893425	sub.sh	debug	hpctest	已完成	4	cn42	2019-11-14 14:23:25	00:00:15
1893187	sub.sh	debug	hpctest	已完成	4	cn40	2019-11-14 11:23:11	00:00:15

资源总览 > 账户权限详情

账户资源权限详情

用户组	用户	计算分区	运行任务数	计算节点数	计算cpu核数	提交任务数
hpctest			30	3	84	30
hpctest	hpctest	THL6	None	None	None	None
hpctest	hpctest	th_hpc1	30	3	84	30

账户配额权限详情

用户组	用户	已使用 (GB)	软限制 (TB)	硬限制 (TB)	已用文件数	软限制 (个)	硬限制 (个)
hpctest	hpctest	0.43	0.49	1.00	110	1000000	2000000



资源总览

登录系统

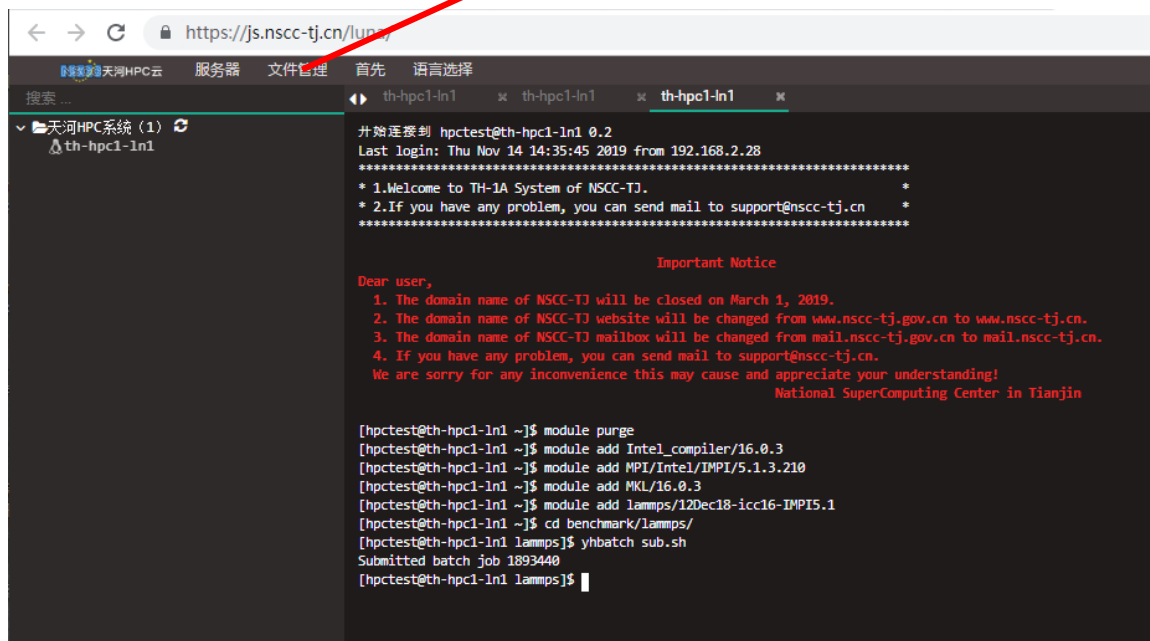
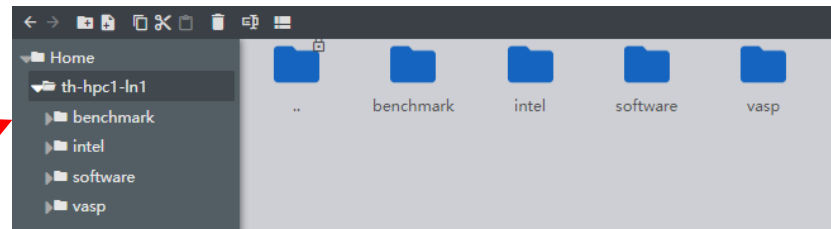
软件环境

文件管理

左侧导航栏点击“登录系统”



总览页面选择“连接天河登陆节点”



- 支持多标签
- 支持分辨率调节
- 支持字体大小调整
- 支持中文/英文界面
- 跳转到文件管理

NSCC 天河HPC云

资源总览

登录系统

软件环境

文件管理



软件加载

已关联TH-HPC1系统用户: hpctest (所属账户 hpctest)

支持专员: 张健

软件数: 179

应用软件: 全部 其它 分子模拟 药物设计 分子动力学模拟 生物信息 计算化学 气候气象海洋 计算流体力学 计算材料

工具软件: 全部 可视化程序 工具库 性能分析库 IO库 数学库 图形处理 编译器

是否加载: 全部 已加载 未加载

已选条件: 暂时没有选择过滤条件

搜索

GCC

4.8.5

卸载

Intel_compiler

16.0.3

卸载

MKL

16.0.3

卸载

MPI

Intel/IMPI/5.1.3.210

卸载

PGI

未加载

加载

R

未加载

加载

软件加载

软件加载

hpc.nsc-tj.cn 显示

软件加载

已关联

应用软

工具软

是否加

已选条件

grom

2018.4-double-icc16-IMPI5.1

卸载

开始连接到 hpctest@th-hpc1-ln1 0.2

Last login: Thu Nov 14 14:48:02 2019 from 192.168.2.28

* 1.Welcome to TH-1A System of NSCC-TJ. *

* 2.If you have any problem, you can send mail to support@nsc-tj.cn *

Important Notice

Dear user,

1. The domain name of NSCC-TJ will be closed on March 1, 2019.
2. The domain name of NSCC-TJ website will be changed from www.nsc-tj.gov.cn to www.nsc-tj.cn.
3. The domain name of NSCC-TJ mailbox will be changed from mail.nsc-tj.gov.cn to mail.nsc-tj.cn.
4. If you have any problem, you can send mail to support@nsc-tj.cn.

We are sorry for any inconvenience this may cause and appreciate your understanding!

National SuperComputing Center in Tianjin

[hpctest@th-hpc1-ln1 ~]\$ which gmx_mpi_d

/THL6/software/gromacs/2018.4-double-icc16-IMPI5.1/bin/gmx_mpi_d

[hpctest@th-hpc1-ln1 ~]\$



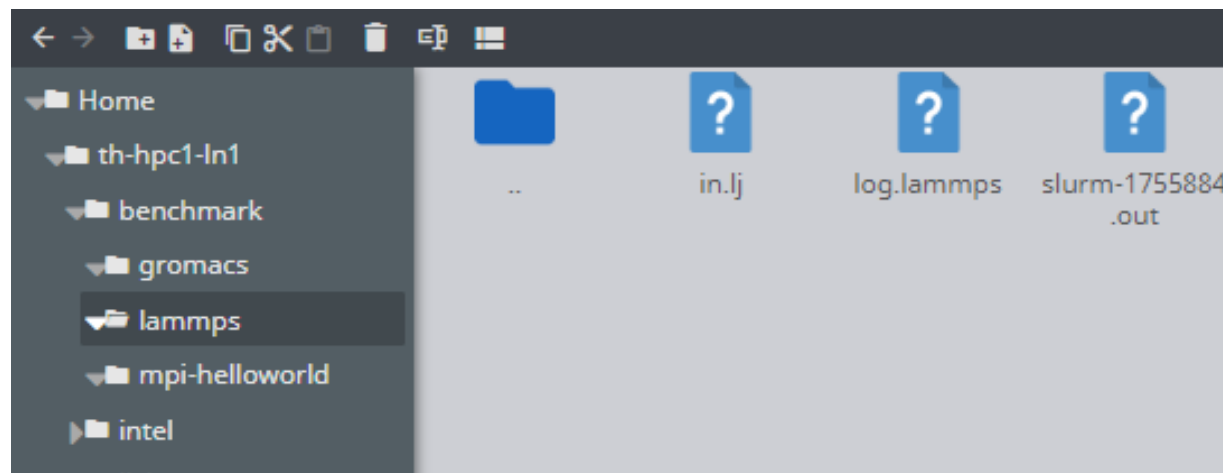
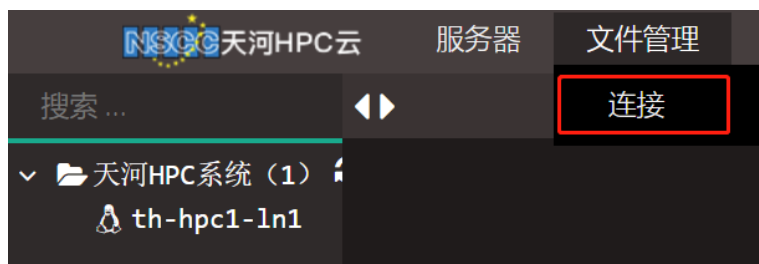
资源总览

登录系统

软件环境

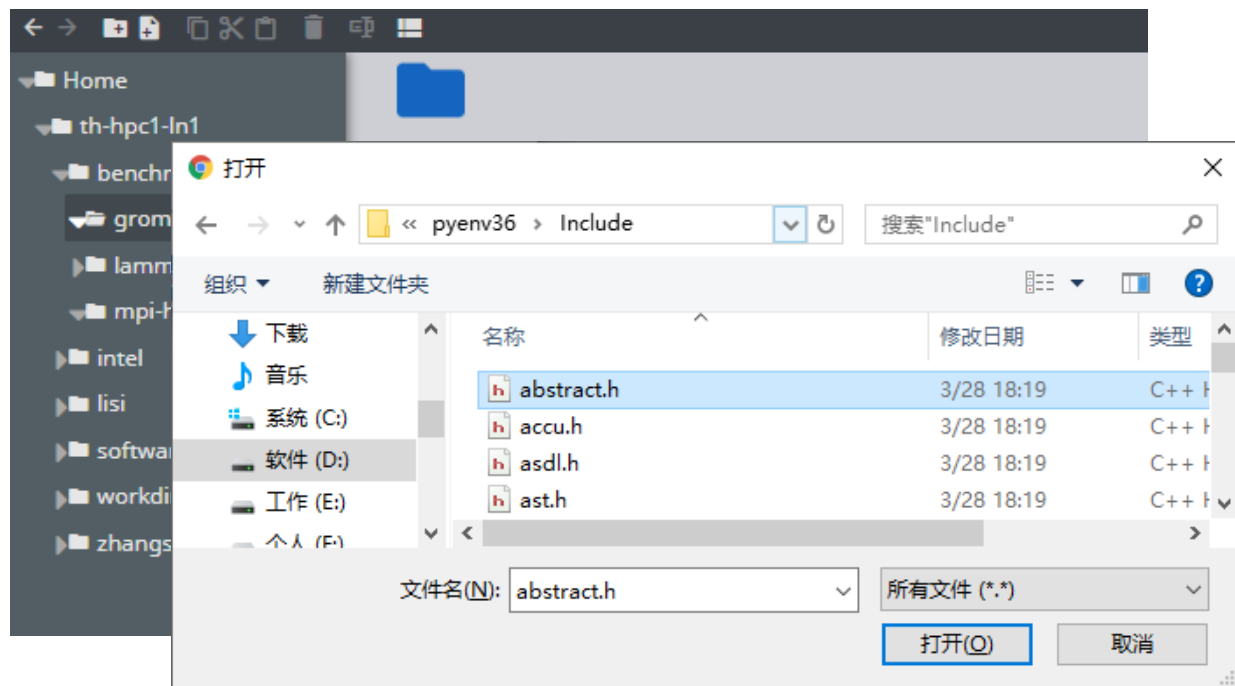
文件管理

左侧导航栏点击“文件管理”

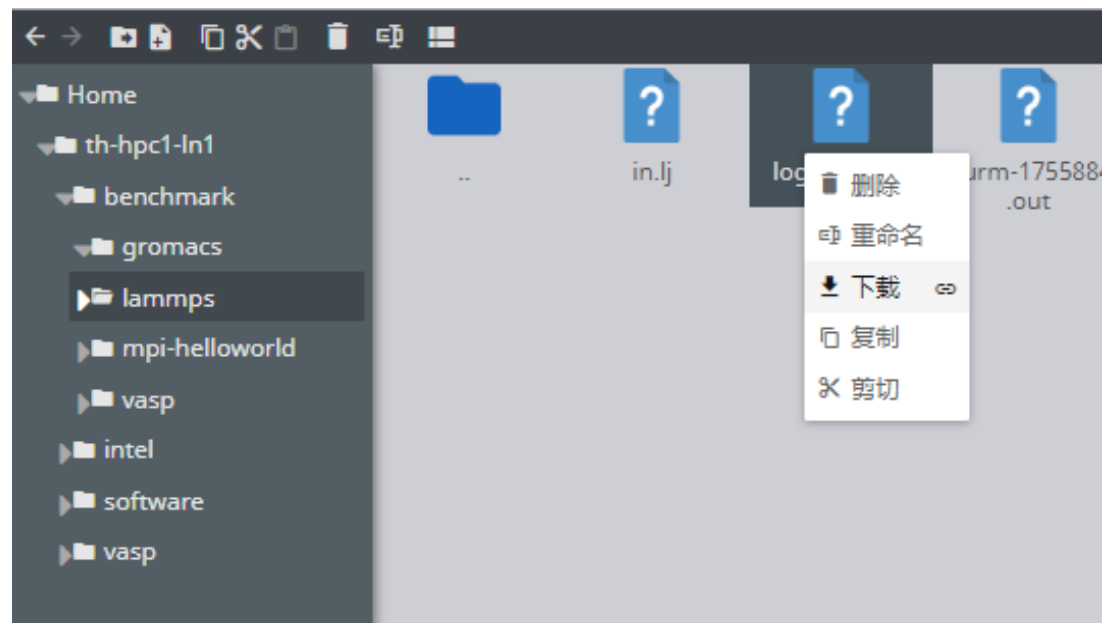


在连接天河的命令行界面选择-文件管理-连接

文件上传



文件下载



NSCC 天河HPC云

[新手入门](#)
[帮助中心](#)
[站内信](#)
[hpctest](#)

[资源总览](#)
[登录系统](#)
[软件环境](#)
[文件管理](#)
[数据快递1](#)
[提交问题](#)
[用户中心](#)

数据快递

提供便捷的数据快递服务

硬盘接口支持USB和SATA

发起任务

上门取件

快递寄出

中心签收

数据拷贝

拷贝完成

快递寄回

用户签收

11

每年剩余免费次数

发起数据快递

寄件人信息

我发起的任务 [刷新](#)

1月内

半年内

1年内

搜索

编号	联系人	全部	集群	硬盘数量	发起时间	完成时间	操作
1517	孙福兴	上门收件	TH-HPC1	1	2019年9月4日 11:39	尚未完成	查看详情

```

graph LR
    A[发起任务] --> B[上门取件]
    B --> C[快递寄出]
    C --> D[中心签收]
    D --> E[数据拷贝]
    E --> F[拷贝完成]
    F --> G[快递寄回]
    G --> H[用户签收]
  
```

使用流程

1. 进入数据快递模块

用户通过导航栏的数据快递链接进入该模块，进入模块后，模块首页显示用户已有的数据拷贝任务记录，用户剩余免费快递次数等信息以及发起数据快递和编写寄件人信息入口，如图所示：

数据快递

提供便捷的数据快递服务

硬盘接口支持USB和SATA

发起任务 → 上门取件 → 快递寄出 → 中心签收 → 数据拷贝 → 拷贝完成 → 快递寄回 → 用户签收

11 每年剩余免费次数

发起数据快递

寄件人信息

我发起的任务 [刷新](#)

1月内 半年内 1年内 [搜索](#)

编号	联系人	全部	集群	硬盘数量	发起时间	完成时间	操作
1517	孙福兴	上门收件	TH-HPC1	1	2019年9月4日 11:39	尚未完成	查看详情

2. 创建/维护寄件人信息

用户首先点击寄件人信息按钮进入填写寄件人信息表单页面，在此页面，用户可以新增修改删除寄件人信息，如图所示：

新增联系人

×

*姓名

*手机号

*地址

请选择省份

请选择城市

请选择区

请输入详细地址

*公司名称

提交

取消

数据快递 > 寄件人信息

寄件人列表

刷新

新增寄件人

最多可存储10个联系人

编号	姓名	手机号	地址	单位名称	操作	是否默认地址
1	孙福兴	186223	天津 天津市 滨海新区		编辑 删除 设为默认	默认地址

3. 发起寄件任务，填写硬盘信息

数据快递 > 发起新任务

*选择联系人

孙福兴 天津 天津市 滨海新区

寄件人列表

*选择集群

TH-HPC1

*硬盘信息

硬盘1

接口类型

USB

格式化类型

NTFS

+

提交

取消

4. 查看任务进展

用户提交完任务后，可在数据快递模块首页点击查看详情链接查看任务详细情况，包括任务进行状态和硬盘拷贝状态，如图所示：



5. 登录系统SSH终端

支持专员签收硬盘后，会将硬盘插到智能拷贝硬盘柜上，硬盘在系统中的挂载路径会以短信形式发给用户。用户在“登陆总览”页面点击“登录系统”按钮进入ssh终端。



6. 数据拷贝

登陆到数据拷贝节点

用户登录到支持专员提供的数据拷贝节点，确认挂载路径可用。

- 对于 TH-1A 系统，我们常用的登陆节点为 `ln3` (ip 为 192.168.2.5)。先登录 `ln3` 登陆节点，然后使用 `ssh ns1` 命令，跳转到数据拷贝节点 `ns1`。

检查拷贝路径

用户执行 `df -h` 可看到挂载路径。该路径只有用户有权限读写，用户可以直接用 `cd` 命令进入该路径查看自己硬盘内的数据文件，然后用 `cp` 或 `rsync` 命令进行数据的拷贝。

如下，可以看到硬盘挂载路径为 `/mnt/zhenggang`。

6. 数据拷贝

拷贝方法1：使用cp命令进行拷贝（少量数据推荐）

Bash

```
1 cp $源路径 $目标路径
```

拷贝方法2：使用rsync命令进行拷贝（强烈推荐）

同步命令

Bash

```
1 nohup rsync -avP $源路径 $目标路径 >log 2>log.err &
```

说明：

- `nohup ... &`：提交到后台，这样能够提供可靠性，避免由于前端网页断开导致任务终止；
- `rsync -avP`：同步命令+同步参数，无需更改
- `$源路径 $目标路径`：从哪里同步到哪里
- `>log`：将标准输出定向到名为log的文件，方便查看进度
- `2>log.err`：将标准错误输出定向到名为log.err的文件，方便查看报错

6. 数据拷贝

同步进度

通过查看 `log` 文件，可以看到数据拷贝的情况。

Bash

```
1 # 查看当前进度
2 tail -f log
```

取消同步

Bash

```
1 # 1. 获得进程号
2 ps aux | grep 自己用户名 | grep rsync
3
4 # 2. kill掉任务
5 kill -9 $进程号
```

7. 拷贝完成

当用户的每块硬盘拷贝完成后，用户需要在相应硬盘处点击确认拷贝完成触发umount硬盘操作，硬盘状态变更为等待卸载，管理员接到消息拔出硬盘后，硬盘状态回变更为拷贝完成，当任务内所有硬盘均拷贝完成，则任务状态变更为完成拷贝，如图所示：



8. 确认完成

提示:用户提交任务后，当顺丰快递员尚未取到邮件之前可以取消快递，点击取消按钮即可，该按钮在快递寄出之后消失。用户在收到邮件后，需要点击确认拷贝完成按钮来结束拷贝任务，如图所示：





资源总览

登录系统

软件环境

文件管理

数据快递 1

提交问题

提交问题

提供高效的技术支持服务

支持专员: 郑刚, 电话: 022-65375527, 手机号: 15022366002

7X24小时系统值班电话: 022-65375560 技术支持邮箱: support@nsc-tj.cn

0

待回复问题

0

已回复问题

2

已解决问题

常见问题

编译问题

作业问题

登录问题

存储问题



提问题

我发起的问题

编号	标题	提交用户	系统类型	问题类型	提交时间	问题状态	操作
35-197	test	zhenggang	TH-HPC1	系统登录问题	2019-04-01 14:19:30	已完成	查看详情
35-171	test	zhenggang	TH-HPC1	系统登录问题	2019-03-20 11:12:47	已完成	查看详情

左侧导航栏点击“提交问题”

文档中心 > 问题与解答 > 编译问题 > 常见问题

文档中心 > 问题与解答 > 作业运行问题 > 常见问题

文档中心 > 问题与解答 > 登陆问题 > VPN问题

文档中心 > 问题与解答 > 存储问题 > 常见问题

常见问题

VPN

我使用 ls 命令查看目录下的文件，可是一直停留下那里，没有显示

遇到这个问题，您可以等待一会，再重新使用 ls 命令查看目录文件。

原因之一：可能是登录节点负载比较重，造成使用终端命令受到影响

原因之二：可能是用户客户端的网络负载比较重，出现比较严重的网络延迟

原因之三：可能是存储正在进行恢复调整。

执行文件操作时提示：Disk quota exceeded

原因为用户的磁盘配额已超限，天河系统针对用户的数据量和文件数量分别设有上限，可通过 `lfs quota` 命令查看具体信息；可通过删除临时数据来降低数据量和文件数量。命令行下输入 `lfs quota -g 用户名 / 存储文件系统名`，用于查看所在用户组的配额权限；命令行下输入 `lfs quota -u 用户名 / 存储文件系统名`，用于查看所在用户的配额权限。

作业运行提示forrtl: Input/output error

可能是存储某时刻压力较大，造成 IO 错误，请您重新提交作业。

常见问题

我使用 ls 命令查看目...

执行文件操作时提示...

作业运行提示forrtl: I...

作业运行时报错: for...



NSCC 天河HPC云

- 资源总览
- 登录系统
- 软件环境
- 文件管理
- 数据快递 1
- 提交问题
- 用户中心**

用户中心

用户名: zhenggang
 手机号: 150****6002 [修改手机](#)
 邮 箱: zhenggang@nscj-tj.cn [修改邮箱](#)
 密 码: ***** [修改密码](#)

选择提醒服务方式

用户中心 > 服务提醒设置

选择作业提醒服务方式

用户是否订阅短信提醒信息	用户是否订阅邮件提醒	用户是否订阅微信公众号提醒
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

5分钟(作业运行时间提醒阈值:运行时间超过该值进行提醒)

选择机时提醒服务方式

用户是否订阅短信提醒信息	用户是否订阅邮件提醒	用户是否订阅微信公众号提醒
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

左侧导航栏点击“用户中心”

 天河HPC云
 控制台

文档中心

🔍



🔍 新手入门

功能介绍
资源总览
登录系统
软件加载
文件管理
数据快递
提交问题
用户中心

🔍 平台架构

登录结点
计算结点
互连网络
存储系统

🔍 任务提交

运行环境
使用限制
状态查看
作业提交
作业取消

🔍 软件环境

应用软件
编译器
数学库
图形库
IO库
性能分析工具
工具库
其它

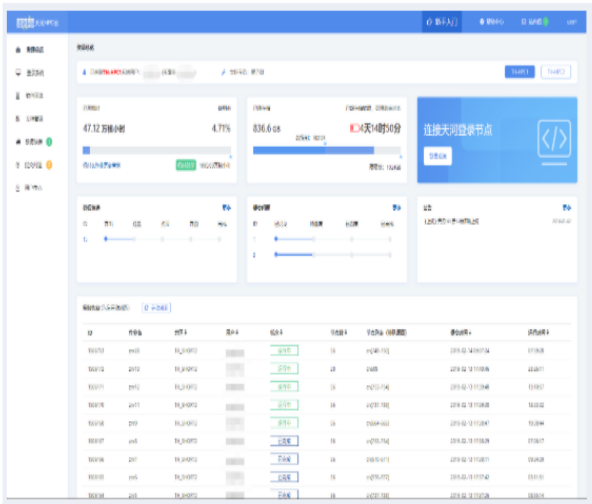
🔍 问题与解答

登陆问题
编译问题
作业运行问题
存储问题
其他问题

文档中心 > 新手入门 > 资源总览 > 模块介绍

模块介绍

登录平台后，首先可以看到的是资源总览页面。可以看到页面侧边栏右侧的主体部分分为8个模块。



自上而下、自左而右分别为：

模块介绍

- 1.系统关联信息
- 2.机时/核数查询
- 3.存储查询
- 4.登录系统入口
- 5.数据快速总览
- 6.技术支持总览
- 7.公告总览
- 8.实时作业

TH-1A系统

共五个登陆节点供用户使用：

- 名称：TH-1A-LN1，IP地址：192.168.2.3
- 名称：TH-1A-LN2，IP地址：192.168.2.4
- 名称：TH-1A-LN3，IP地址：192.168.2.5
- 名称：TH-1A-LN8，IP地址：192.168.2.8
- 名称：TH-1A-LN9，IP地址：192.168.2.9

其中LN3和LN9作为用户的数据传输结点

LN1/LN2/LN3

指标	参数
CPU*8	8块8核16线程的CPU芯片
L3缓存	18432KB
内存	62GB/189G
操作系统	版本 NeoKylin release 3.2 内核 2.6.32-358.11.1.2.ky3.1.x86_64

LN8/LN9

指标	参数
CPU*2	2块6核12线程的CPU芯片
L3缓存	15360KB
内存	32GB
操作系统	版本 NeoKylin release 3.2 内核 2.6.32-358.11.1.2.ky3.1.x86_64

文档中心 > 任务提交 > 运行环境 > 软件环境

软件环境

HPCL1系统采用Environment modules工具用来快速设置和修改用户编译运行环境。Environment modules通过加载和卸载modulefile（环境配置文件）可直接改变用户的环境变量，用户不需要频繁修改.bashrc文件，从而避免误操作。

如下为Modules常用命令，如果用户计划使用某一软件，先在shell命令行下输入 `module av` 查看所需软件是否已在系统中安装；若已安装，则通过 `module help` 命令具体查看所需软件的版本、依赖环境等；然后在shell命令行下通过 `module add` 加载环境变量，最后提交脚本。

表1-3 Modules常用命令

命令	作用
<code>module av</code>	查看系统中可用的软件
<code>module help</code>	查看具体软件的信息
<code>module add / load</code>	加载环境变量
<code>module rm / unload</code>	卸载环境变量
<code>module list</code>	显示用户已加载的环境变量
<code>module show</code>	显示具体的Module配置文件
<code>module swap / switch</code>	替换环境变量
<code>module purge</code>	卸载当前shell环境下的所有环境变量

软件环境

- 1.3.1 编译器
- 1.3.2 MPI编译环境
- 1.3.3 基础应用软件
- 1.3.4 常用科学计算...
- 1.3.5 Python集成环境

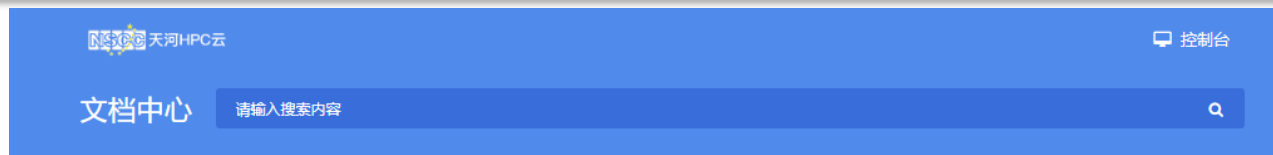
新手入门

平台架构

提交任务



软件环境



全部文档

应用软件

ABINIT

AutoDock

Bcftools

Beagle

Bedtools

BerkeleyGW

Blast

Blat

BoltzTraP

BowTIE

BowTIE2

Breakdancer

BWA

CNVnator

Control-FREEC

CP2K

Quantum ESPRESSO

FastQC

文档中心 > 软件环境 > 应用软件 > ABINIT

ABINIT



什么是ABINIT?

官方主页: <http://www.abinit.org>

ABINIT 的主程序使用赝势和平面波, 用密度泛函理论计算总能量, 电荷密度, 分子和周期性固体的电子结构, 进行几何优化和分子动力学模拟, 用 TDDFT (对分子) 或 GW 近似 (多体微扰理论) 计算激发态。

此外还提供了大量的工具程序。程序的基组库包括了元素周期表 1-109 号所有元素。

ABINIT 适于固体物理, 材料科学, 化学和材料工程的研究, 包括固体, 分子, 材料的表面, 以及界面, 如导体、半导体、绝缘体和金属。

软件版本

目前TH-HPC1系统安装的版本为:

软件名	版本号	编译器版本	MPI版本
ABINIT	8.2.2	intel2016u3	mvapich2

TH-1A系统安装的版本为:

...
-----	-----	-----	-----

ABINIT

什么是ABINIT?

软件版本

使用方法

使用方法

1.准备输入文件

准备ABINIT需要的输入文件, 比如 `test.file` 文件。

```
1. mkdir test
2. cd test
```

将用户的 `test.file` 输入文件上传到该目录。

2.创建脚本文件

```
1. vim sub.sh
```

里面写入:

```
1. #!/bin/bash
2. yhrun -N 1 -n 28 abinit < test.file > test.out
```

3.命令行提交作业

```
1. yhbatch -N 1 -n 28 -p debug sub.sh
```

说明:

-N 1 表示使用1个节点

-n 28 表示使用一共28个CPU核

-p debug 表示使用debug计算分区 (如正式计算, 请使用 `yhi` 查看用户可用分区, debug分区仅做测试用)

abinit 是ABINIT软件的可执行程序名称, 使用前请加载ABINIT软件

下一篇: AutoDock>

文档中心

gromacs



全部文档



搜索结果

文档中心 > 搜索结果 (本页3条, 共3条)

GROMACS

...gromacs-logo[/media/gromacs-logo-480X360.png "gromacs-logo") ## 什么是GROMACS? 官方主页:
<http://www.gromacs.org/> GROMACS 是用于研究生物分子体系的分...

来自: 帮助中心 > 软件环境 > 应用软件

NAMD

...GROMACS, OPLS 等多种力场, 而且可以兼容 Amber, CHARMM 的文件格式。NAMD 支持几乎所有操作系统, 而且免费获取, 开放源代码。如配合分子可视化、结果分析软件 VM以及格点计算。## 软件版本
目前TH-HPC1系统安装的版本为: ...

来自: 帮助中心 > 软件环境 > 应用软件

作业提交

...GROMACS`使用 **1)在登陆节点命令行下加载`GROMACS`所需环境变量: ** ``bash module add
Intel_compiler/16.0.3 module add MPI/Intel/IMPI/5.1.3.210 mo...

来自: 帮助中心 > 任务提交 > 作业提交

天河

谢谢



国家超级计算天津中心 郑刚

zhenggang@nscg-tj.cn