

燕山大学计算机学科 GPU 集群用户手册

V3.0

2021 年 10 月

目录

一 集群硬件综述.....	4
1.1 概述.....	5
1.2 硬件配置.....	5
1.3 网络配置.....	6
二 集群软件综述.....	7
2.1 系统介绍.....	7
2.2 系统存储结构.....	7
2.3 软件环境.....	7
2.3.1 查看当前已安装软件.....	7
2.3.2 加载软件.....	8
2.3.3 卸载软件.....	8
2.3.4 将软件添加至环境变量.....	8
2.4 预装软件.....	8
2.4.1 机器学习.....	8
2.4.2 编译器.....	9
2.4.3 科学计算.....	9
2.4.4 其他.....	9
三 上机说明.....	10
3.1 校园网内访问.....	10
3.2 外网访问.....	10
四 作业调度系统使用.....	11
4.1 节点信息查询.....	11
4.2 当前作业情况查询.....	11
4.3 交互式任务提交（不推荐）.....	12

4.4 脚本式任务提交（推荐）	12
4.4.1 作业提交流程	12
4.4.2 GPU 作业提交脚本	12
4.4.3 MPI 作业提交脚本	13
4.5 取消作业	13
4.6 QOS 质量服务	13
附录	15
A 上网认证	15
登录	15
登出	15
查看用户信息	15
确认是否联网	15
B 相关资源	15
C 运维支持	16
D 更新说明	16
v3.0	16
v2.1	16

集群用户服务条款

1. 燕山大学计算机学科 GPU 集群（下文简称集群），免费为计算机学科教师提供计算服务。
2. 集群用户禁止将集群账号以租借，出售等任何形式转让给他人。账号申请人有义务保证账号的安全。
3. 受不可抗力因素影响，集群不负责保证用户数据的安全，对于重要数据请用户自行备份到本地。
4. 严禁将集群用于不限于挖矿等非科研用途，一经发现，将对该账号做删号处理，并上报学院。
5. 禁止在集群登录节点运行作业，一经发现，将会限制该账号的提交作业数，以及运行作业数。
6. 为了满足多用户均等享受服务，作业执行时间上限为 150 个小时，超出时限后自动结束该作业。如果遇到超时限作业，须教师预估作业运行时间并报送审核，审核通过后在集群的用户群里通告。
7. 使用集群产生科研成果，请在致谢中注明曾使用该集群。
8. 目前每位老师默认 3 个账号，每个账号可以同时提交 2-3 个作业，因此，无须额外申请。如有特殊情况，每个教师最多总共可拥有 6 个账号。
9. 作为使用集群的第一责任人，教师应起到对名下账号的管理责任，有义务监管学生按照《燕山大学计算机学科 GPU 集群使用手册》规范安全地使用集群。

一 集群硬件综述

1.1 概述

本套集群系统共有八台高性能主机组成，其中一台为登录节点（主控节点，无加速计算卡），其余七台为计算节点。计算节点的主要计算设备为 GeForce GTX TITAN X，GeForce RTX 3090，Tesla P100，其中 GeForce GTX TITAN X 和 GeForce RTX 3090 单精度浮点运算能力强，适合进行适合于做大规模的可视化渲染，机器学习模型训练等计算，Tesla P100 双精度浮点运算能力强用于科学计算等双精度浮点运算应用。用户可以根据需求选择不同的设备运行作业，达到最好的加速效果。

1.2 硬件配置

节点名称	CPU	GPU	内存
manager	Intel(R) Xeon(R) Gold 5218R CPU @ 2.10GHz	None	128G
compute01	Intel(R) Xeon(R) Gold 5218R CPU @ 2.10GHz	2×GeForce RTX 3090	128G
compute02	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v2 @ 2.10GHz	4×GeForce GTX TITAN	128G
compute03	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v2 @ 2.10GHz	4×GeForce GTX TITAN	128G
compute04	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v2 @ 2.10GHz	2×GeForce RTX 3090	144G
compute05	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v2 @ 2.10GHz	2×GeForce RTX 3090	144G
compute06	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v2 @ 2.10GHz	2×Tesla P100	144G
compute07	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v2 @ 2.10GHz	2×Tesla P100	144G

1.3 网络配置

集群使用千兆以太网作为集群管理网络，使用 56GB/s Infiniband 高速网作为集群计算网络。

节点名称	以太网	Infiniband
manager	10.1.1.1	11.1.1.11
compute01	10.1.1.2	11.1.1.2
compute02	10.1.1.3	11.1.1.3
compute03	10.1.1.4	11.1.1.4
compute04	10.1.1.5	11.1.1.5
compute05	10.1.1.6	11.1.1.6
compute06	10.1.1.7	11.1.1.7
compute07	10.1.1.8	11.1.1.8

二 集群软件综述

2.1 系统介绍

集群使用 BrightComputing Cluster Manager (BCM v9.1) 集群管理系统，系统基于 CentOS 7.9 发行版构建，调度系统采用 SLURM。集群使用过程中只可登入主节点和作业所在的计算节点进行操作，作业的配置等预处理操作应在主节点完成，后提交至调度系统进行调度。

2.2 系统存储结构

集群使用管理节点搭载的磁盘构建集群的文件存储系统

磁盘	配额	挂载点	用途
1×14TB 机械硬盘	无限制	/cm/online	用户作业数据
3×1TB SSD	5GB	/cm/home	用户家目录

注意：如果用户磁盘配额需要提升磁盘配额，可以按照要求填写《燕山大学计算机学科 GPU 集群磁盘配额申请表》，管理员会根据用户使用情况，为用户提升磁盘配额。

2.3 软件环境

集群使用 tcl module 进行软件环境管理，用户可以根据自己的需要加载相应的软件。基本命令如下：

2.3.1 查看当前已安装软件

```
module avail
```

2.3.2 加载软件

`module load <软件名>`

注意：由于相同的软件存在不同的版本，加载同一软件的不同版本可能存在冲突！

2.3.3 卸载软件

`module unlaod <软件名>`

2.3.4 将软件添加至环境变量

对于一些常用软件，可以将其设置为登陆时自动加载到用户环境变量：

`module initadd <软件名>`

2.4 预装软件

2.4.1 机器学习

名称	描述	版本
cuda	GPU 通用并行计算架构	10.0, 10.2, 11.0, 11.1, 11.2, 11.3, 11.4
cudnn	cuda 深度学习库	7.6, 8.1
pytorch	开源的 Python 机器学习框架	1.6.0, 1.9.0
tensorflow	开源的 Python 机器学习框架	1.15.5, 2.5.0, 2.2.0
onnx	跨框架的模型中间表达框架	1.7.0, 1.9.0, 1.6.0
tensorrt	神经网络推理加速工具	7.0
horovod	分布式深度学习框架	0.20.3, 0.22.3
mxnet	开源的 Python 机器学习框架	1.8.0, 1.7.0,

keras	开源的 Python 机器学习框架	2.3.1
-------	-------------------	-------

2.4.2 编译器

名称	描述	版本
pgi	高性能编译器套件	19.10
gcc	GNU 编译器套件	5.5.0, 8.4.0, 10.2.0
clang	轻量级编译器	10.0.1
intel compiler	Intel 高性能编译器	2021.3.0, 2019.0.5

2.4.3 科学计算

名称	描述
cuda	GPU 通用并行计算架构
Intel oneAPI hpckit	Intel 高性能计算套件
fftw	开源傅里叶变换库
oeplib	开源线性运算库
lapack	线性数学库

2.4.4 其他

名称	描述
jupyter	交互式笔记本
opencv	开源计算机视觉库

三 上机说明

3.1 校园网内访问

使用 putty、xshell 等终端软件通过 ssh 协议连接进行使用。也可通过 sftp 协议进行传输文件。链接地址为校园网 IP: 192.168.80.100, 无公网 IP。

3.2 外网访问

首先确认您已拥有学校堡垒机账号（堡垒机账号申请请参考群文件《燕山大学运维升级系统用户申请表》），使用 putty、xshell 等终端软件通过 ssh 协议连接堡垒机。堡垒机 IP 地址：202.206.243.186, ssh 端口号：60022。成功连接后会出现如下界面：

```
" Press <j>/<k> or <DOWN>/<UP> to move and then <ENTER> for login.
" Press </> for search and then <n>/<N> to go to next and previous.
" Press <u>/<p> or <PageUp>/<PageDown> for page turning.
" Press <:[ssh|telnet|rlogin] {user@host:port}> for login.
" Press <:{num}> for goto line and then Type 'q' for quit.
" Press <r>/<q> for reload and quit.
"=
ShellCommand
1: 超算服务器登录节点 211.81.240.112:None SSH [EMPTY]
2: 超算服务器登录节点 211.81.240.112:None TELNET [EMPTY]
3: 超算服务器登录节点 211.81.240.112:None Rlogin [EMPTY]
4: 信院GPU集群登录节点 192.168.80.100:None SSH [EMPTY]
5: 信院GPU集群登录节点 192.168.80.100:None TELNET [EMPTY]
6: 信院GPU集群登录节点 192.168.80.100:None Rlogin [EMPTY]
```

通过键盘上下键选择信院 GPU 集群登录节点 SSH，回车，输入 GPU 集群账号密码登录即可。

四 作业调度系统使用

登录节点没有配置 GPU 卡，主要用于配置程序运行环境，编译程序等操作，如作业需要使用 GPU 资源，请参考如下说明：

4.1 节点信息查询

sinfo

查询当前可用的作业提交队列以及节点状态。当前可用作业队列如下：

名称	节点	用途
dlq	compute01-compute05	可视化渲染，机器学习模型训练
hpcq	compute06-compute07	科学计算

常见节点状态以及说明如下：

状态	说明
idle	空闲
alloc	独占
down	下线
mix	已有作业运行，但可以运行作业
drain	排空

注意：除 idle 和 mix，其他状态节点均无法运行作业！

4.2 当前作业情况查询

squeue

当前运行和等待运行的作业列表，其中 NODES NODELIST(REASON)为作业所在节点，或未执行的作业的等待原因。

4.3 交互式任务提交（不推荐）

`srun` <申请资源> <运行命令>

用户可以通过 `squeue` 查看分配的到的节点，并 `ssh` 到节点进行调试，程序运行结果会输出到屏幕。

4.4 脚本式任务提交（推荐）

4.4.1 作业提交流程

1. 构建任务提交脚本，具体参数见 4.4.2 及 4.4.3
2. 执行命令，提交作业

`sbatch` <提交脚本>

4.4.2 GPU 作业提交脚本

```
#!/bin/bash

#SBATCH -J JobName           #作业名为 JobName
#SBATCH -p dlq               #作业队列为 dlq
#SBATCH -o Job.out           #标准输出重定向到 Job.out
#SBATCH -N 1                 #作业申请 1 个节点
#SBATCH --ntasks-per-node=1  #单节点启动任务数为 1
#SBATCH --cpus-per-task=1    #单任务使用的 CPU 核心数
                             #为 1
#SBATCH -t 1:00:00           #任务运行时间最长为 1 小时
#SBATCH --gres=gpu:1         #单个节点使用一块 GPU 卡

./my_script.sh #作业
```

注意：

- 仅请求一个 GPU 时 CPU 个数不能超过 6。
- 默认情况下内存占用与每节点 CPU 个数成正比。

4.4.3 MPI 作业提交脚本

```
#!/bin/bash

#SBATCH -J JobName           #作业名为 JobName
#SBATCH -o Job.out           #标准输出重定向到 Job.out
#SBATCH -N 2                  #作业申请 1 个节点
#SBATCH --ntasks-per-node=4   #单节点启动任务数为 4
#SBATCH -t 1:00:00           #任务运行时间最长为 1 小时

mpirun ./my_script.sh #作业
```

说明：

- 该作业将申请 2 个节点，每个节点运行 4 个进程，一共开启 8 个进程。

4.5 取消作业

`scancel <作业 ID>`

取消相应作业的等待或执行，作业 ID 可以通过 `squeue` 查询。

4.6 QOS 质量服务

名称	用户	最大提交作业	最大运行作业	最大作业时长
normal	基础用户	3	2	05:00:00
expr	实验用户	1	1	00:05:00

注意：

- 超出作业最大时长，作业将被杀死；
- 超出最大提交作业，作业将提交失败；
- 超出最大运行作业，作业将被挂起

Q&A

1. 使用 Pytorch 的时候出现 libmpi.so not found 的问题？

答：使用如下命令加载 Pytorch

```
module load openmpi4/cuda/4.1.0
```

```
module load pytorch-py37-<cuda 版本>-gcc8/
```

2. 如何查看当前磁盘剩余空间？

答：使用 quota 命令，block 即为已使用空间。

3. 模型训练过程中出现 Cuda runtime error (48) : no kernel image is available for execution 的问题？

答：该问题是由于 3090 的 GPU 不支持 cuda11.0 之前的 cuda，换用更高版本的 cuda 即可。

4. 没有存放大文件，但是 home 目录下磁盘空间占用量变大？

答：使用 pip 安装 python 库会默认安装到 home 目录的.local 隐藏目录下，建议使用 conda 进行安装，或者手动指定安装路径。如有需求可以申请提升磁盘配额。

附录

A 上网认证

集群默认不连接外网，如果需要联网下载请参考如下说明，使用校园网账号进行认证：

登录

```
netlogin <上网 id> <密码> [运营商: 校园网(def)|中国移动(1)|中国联通(2)|中国电信(3)]
```

登出

```
netlogin logout
```

注意：集群所有用户共用一个校园网账号，为了避免流量被他人使用，请使用完后及时下线账号。

查看用户信息

在认证成功情况下，运行：

```
netlogin info
```

PS:该命令目前尚存 BUG，第一次运行会出现错误，如确认已经认证成功结果显示“出现错误”，请再次运行。

确认是否联网

```
curl baidu.com
```

B 相关资源

SLURM 官网：<https://slurm.schedmd.com/>

BrightComputing 用户手册:

<https://support.brightcomputing.com/manuals/9.1/user-manual.pdf>

modules wiki:

<https://modules.readthedocs.io/en/stable/index.html>

C 运维支持

- 邮箱: beinggod@foxmail.com
- QQ: 1085779572
- 燕大计算机学科 GPU 集群使用 QQ 群: 912716188

D 更新说明

v3.0

1. 重新组织手册结构
2. 更新集群硬件信息描述
3. 更新集群软件信息描述
4. 增加集群用户服务条款

Contributor: BeingGod

v2.1

1. 补充使用堡垒机在外网访问 GPU 集群的内容;
2. 补充 MPI 任务提交的内容;
3. 补充查看当前认证用户信息的内容;
4. 补充并修正集群软件环境;
5. 修正 sbatch 脚本式任务提交选项;
6. 修正若干细节错误。

Contributor: BeingGod

V2.0

Contributor: opluss