

# 计算集群使用培训

## HEPS光束线站

杜然，胡庆宝，葛孟源，石京燕

计算中心

2020-03-10

# 大纲

## ❖ 计算集群简介

- 从PC机到计算集群
- Slurm计算集群简介
- HEPS光束线站可使用的计算资源

## ❖ 使用计算集群

- 申请集群账号
- 准备计算软件
- 准备存储空间
- 准备作业脚本
- 提交、查看作业

## ❖ 计算服务支持

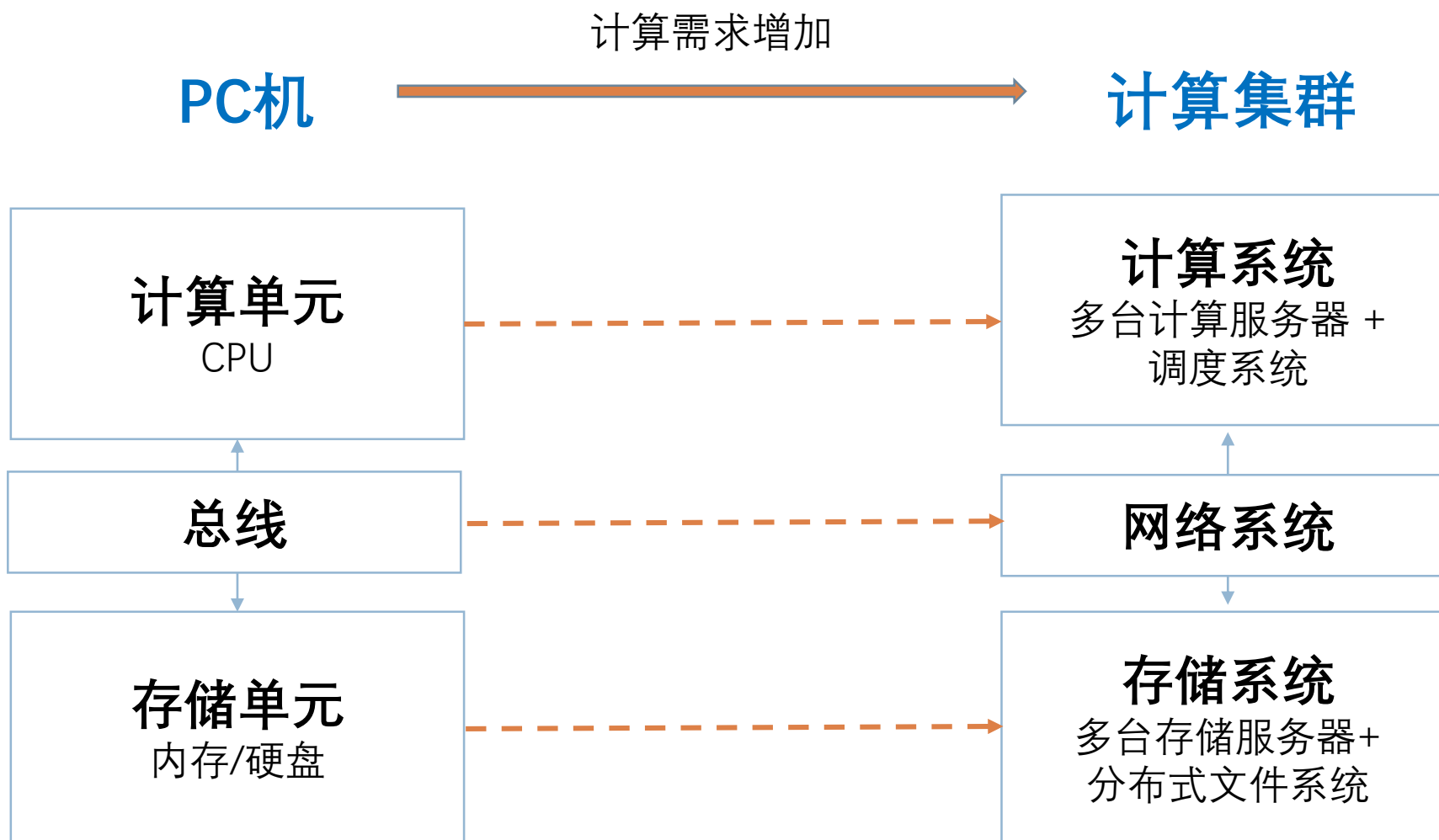
- User Manual
- 代码版本管理
- Helpdesk

---

# 1 计算集群简介

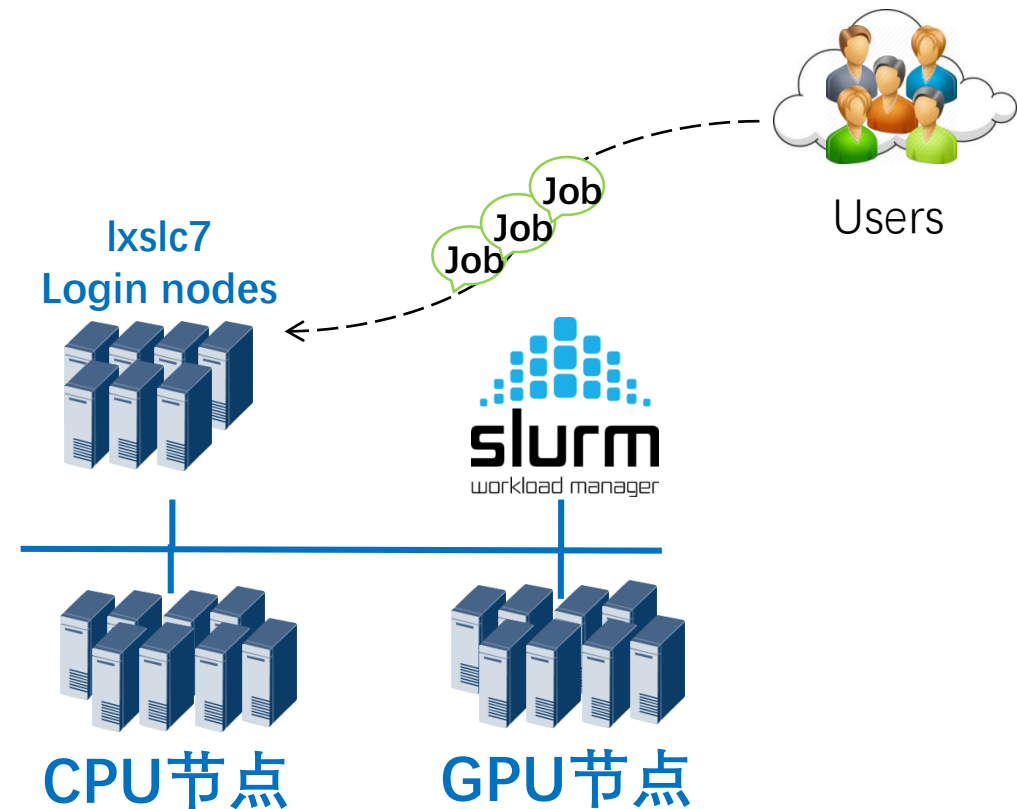
---

# 1.1 从PC机到计算集群



# 1.2 Slurm计算集群简介

- ❖ Slurm计算集群的计算资源分为两类
  - CPU节点 和 GPU节点
- ❖ 分别用于运行CPU并行作业和GPU作业
- ❖ 用户使用集群账号登入登录节点
- ❖ 提交的作业由Slurm系统进行统一调度
- ❖ 作业运行用户指定的代码/程序/软件
- ❖ 运行的输出文件保存在指定的存储系统中



# 1.3 HEPS光束线站可使用的计算资源

## ❖ CPU节点：运行CPU并行作业

Partition	Nodes	account/group	QOS	专用/共享
bldesign	3 nodes, 108 CPU Cores, 128GB / node	bldesign	blregular	专用

## ❖ GPU节点：运行GPU作业

Partition	Nodes	account/group	QOS	专用/共享
gpu	11nodes, 86 NVIDIA V100 nvlink GPU cards, 32GB / card	bldesign	bldebug, blnormal	共享

---

## 2 使用计算集群

---

## 2.1 申请集群账号

❖ 用户可通过如下网页申请集群账号：

<http://afsapply.ihep.ac.cn/ccapply/userapplyaction.action>

❖ 需提供相关信息并选择所属实验应用后提交

❖ 实验负责人将会收到用户申请账号相关邮件

❖ 实验负责人回复“同意用户申请”邮件，并说明是使用**CPU或GPU资源**，计算中心会为该用户建立集群账号。

❖ AFS账号建立后，申请用户会收到：

- 关于账号名及密码的邮件通知
- 用户手册

AFS Account Application [Read Me](#)

---

Name *	<input type="text"/>	Full Name *	<input type="text"/>
Sex	<input checked="" type="radio"/> male <input type="radio"/> female	Phone *	<input type="text"/>
Email *	<input type="text"/>	Project group	<input type="text"/>
Shell Type *	<input checked="" type="radio"/> bash <input type="radio"/> tcsh <input type="radio"/> csh		
Application *	<input type="text"/> <a href="#">Read Me</a>	User Group *	<input type="text"/>

---

contact person (supervisor/primary investigator)info

Name *	<input type="text"/>	Email *	<input type="text"/>
Phone	<input type="text"/>		

---

Remark

Security Code  FEE7RW

If you can not see the security code,please use Internet Explorer(IE). [Help](#)



## 2.2 准备计算软件

- ❖ 用户使用如下命令登陆计算环境：

```
# 将user_name替换为集群账号
$ ssh user_name@lxslc7.ihep.ac.cn
```

- ❖ 登陆后默认自动获取tokens. 若无tokens, 操作如下图所示

```
[root@hepsblldesign]# kinit username
Password for huqb@IHEPKRB5:
[root@hepsblldesign]# aklog -d
Authenticating to cell ihep.ac.cn (server afsdb1.ihep.ac.cn).
Trying to authenticate to user's realm IHEPKRB5.
Getting tickets: afs/ihep.ac.cn@IHEPKRB5
Using Kerberos V5 ticket natively
About to resolve name huqb to id in cell ihep.ac.cn.
Id 10517
Set username to AFS ID 10517
Setting tokens. AFS ID 10517 @ ihep.ac.cn
[root@hepsblldesign]# tokens

Tokens held by the Cache Manager:

User's (AFS ID 10517) tokens for afs@ihep.ac.cn [Expires Mar  5 11:44]
--End of list--
```

- ❖ 软件安装路径

/afs/ihep.ac.cn/soft/hepsblldesign/

- ❖ 实验组软件管理员有写权限，其他用户只有读权限。

- ❖ 实验组软件管理员账号请告知系统管理员添加。

- ❖ 添加后，由实验组软件管理员将该组所需软件写入该目录

- ❖ 计算集群所有节点均可以访问该路径下的软件。

- ❖ 软件安装如遇问题，请联系石京燕老师：shijy@ihep.ac.cn

## 2.3 准备存储空间

- ❖ 提交CPU并行作业的用户，其存储空间为：/scratchfs

存储空间	Quota(空间限额)	文件个数限制
/scratchfs/heps/user_name 注：将user_name 替换为个人集群账号	500GB	20万个

- ❖ 提交GPU作业的用户，其存储空间为：/hpcfs

个人存储目录	Quota(空间限额)	文件个数限制
/hpcfs/heps/bldesign/user_name 注：将user_name 替换为个人集群账号	500GB	30万个

- ❖ 用户使用存储空间的注意事项：

- 该空间为数据存储目录，用于存放作业的输入、输出文件
- 尽量使用大文件，避免使用小文件
- 不再使用的文件可删除或打包成一个大文件存储
- 一旦超出使用限额，存储空间将会被锁定

## 2.4 准备作业脚本 1/3

- ❖ 用户的作业脚本可以放在AFS个人目录中 或者 workfs目录中
  - 登录计算环境后，使用命令 `cd ~` 可到AFS个人目录下
  - workfs目录：`/workfs/heps/user_name` #请使用个人集群账号替换 `user_name`
  - 注意：AFS个人目录和workfs不可用作作业输出目录，请使用 `/scratchfs` 和 `/hpcfs` 目录
- ❖ slurm集群作业脚本为shell脚本，样例作业脚本可在下图所示目录中找到
- ❖ 样例脚本cp到AFS个人目录后，可在此基础上修改为用户所需的作业脚本

```
# 登录到登录节点，其中user_name为集群用户名
> ssh user_name@lxslc7.ihep.ac.cn

# 找到样例脚本所在的目录
> cd /cvmfs/slurm_nightlies.ihep.ac.cn/software/slurm_sample_script

# 查看样例脚本
> ls -lht
-rw-rw-r-- 1 cvmfs cvmfs 1.4K 8月 12 2019 slurm_sample_script_gpu.sh
-rw-rw-r-- 1 cvmfs cvmfs 2.2K 8月 2 2019 slurm_sample_script_cpu.sh
```

## 2.4 准备作业脚本 2/3

- ❖ 提交CPU并行作业用户请在**slurm\_sample\_script\_cpu.sh**上修改
- ❖ 提交GPU作业的用户请在**slurm\_sample\_script\_gpu.sh**上修改
- ❖ 需要修改的参数如下:

作业类型	partition	account	qos	ntasks	gres	mem-per-cpu	output
CPU作业	bldesign	bldesign	blregular	所需CPU核数	不需要使用该参数	所需内存数	/scratchfs下的输出文件名
GPU作业	gpu	bldesign	bldebug, blnormal	所需CPU核数	所需GPU卡数	所需内存数	/hpcfs输出文件名

## 2.4 准备作业脚本 3/3

❖ 每个QOS的资源限制如下：

qos	作业类型	作业最长运行时间	提交作业个数	CPU/GPU	内存
blregular	CPU作业	30天	每个用户 $\leq 200$ 个, 整组 $\leq 1000$ 个	CPU $\leq 108$	mem_per_cpu $\leq 4$ GB
bldebug	GPU测试作业, GPU短作业	15分钟	每个用户 $\leq 4$ 个, 整组 $\leq 12$ 个	每个用户GPU $\leq 2$ , 整组GPU $\leq 6$	mem_per_cpu $\leq 30$ GB
blnormal	其他GPU作业	2天	每个用户 $\leq 8$ 个, 整组 $\leq 20$ 个	每个用户GPU $\leq 4$ , 整组GPU $\leq 10$	mem_per_cpu $\leq 30$ GB

## 2.5 提交/查看作业

### ❖ 提交作业

```
# 请使用ssh命令登录
ssh <AFS_account>@lxslc7.ihep.ac.cn

# 其中<AFS_account>为用户的AFS账号
```

```
# command to submit a job
sbatch <job_script.sh>

# <job_script.sh> is the name of the script,e.g: v100_test.sh, then the command is:
sbatch v100_test.sh

# There will be a jobid returned as a message if the job is submitted successfully
```

### ❖ 查看作业

```
# command to check the job queue
squeue

# command to check the jobs submitted by user
sacct
```

### ❖ 删除作业

```
# command to cancel the job
scancel <jobid>

# <jobid> can be found using the command sacct
```

---

# 3 计算服务支持

---

## 3.1 用户手册/User Manual

- ❖ 用户手册中有关于计算集群使用更详细的信息
- ❖ 访问it.ihep.ac.cn, 计算服务->用户手册 可查看



用户手册 | 账号申请 | 设备上架 | 密码重置 | 常见问题 | 求助方式

- ❖ 其中，Slurm集群的用户手册可通过如下链接访问：

<http://afsapply.ihep.ac.cn/cchelp/zh/local-cluster/jobs/slurm/>



## 3.2 代码管理

- ❖ 用户可使用git管理代码：[http://code.ihep.ac.cn/users/sign\\_in](http://code.ihep.ac.cn/users/sign_in)
- ❖ 使用统一认证账号（通常为所邮件地址）即可登录

### GitLab Community Edition

1, IHEP SSO Account sign in/高能所统一认证帐号，可以直接登录。

2, Others, apply for IHEP SSO Account /其他人需要申请统一认证帐号：  
<https://login.ihep.ac.cn>

3, Helps/帮助平台：<http://helpdesk.ihep.ac.cn>  
Tel./电话: 88236855

#### IHEP SSO Account

IHEP SSO Account Username

Password

☐ Remember me

Sign in

## 3.3 Helpdesk

- ❖ 使用集群过程中如遇问题，可登录helpdesk提交票单
- ❖ 票单将由各系统管理员回答，帮助用户解决问题
- ❖ 访问地址：<http://helpdesk.ihep.ac.cn/>
- ❖ 提交票单，请特别注意提供全面的信息，信息越全，处理速度越快，可提供的信息包括：
  - 用户集群账号
  - 涉及文件读写的文件全路径
  - 遇到问题的描述
  - 问题或报错信息截图

---

# 谢谢！