中山大学高性能计算公共平台（珠海校区）使用指南

一、超算使用概述

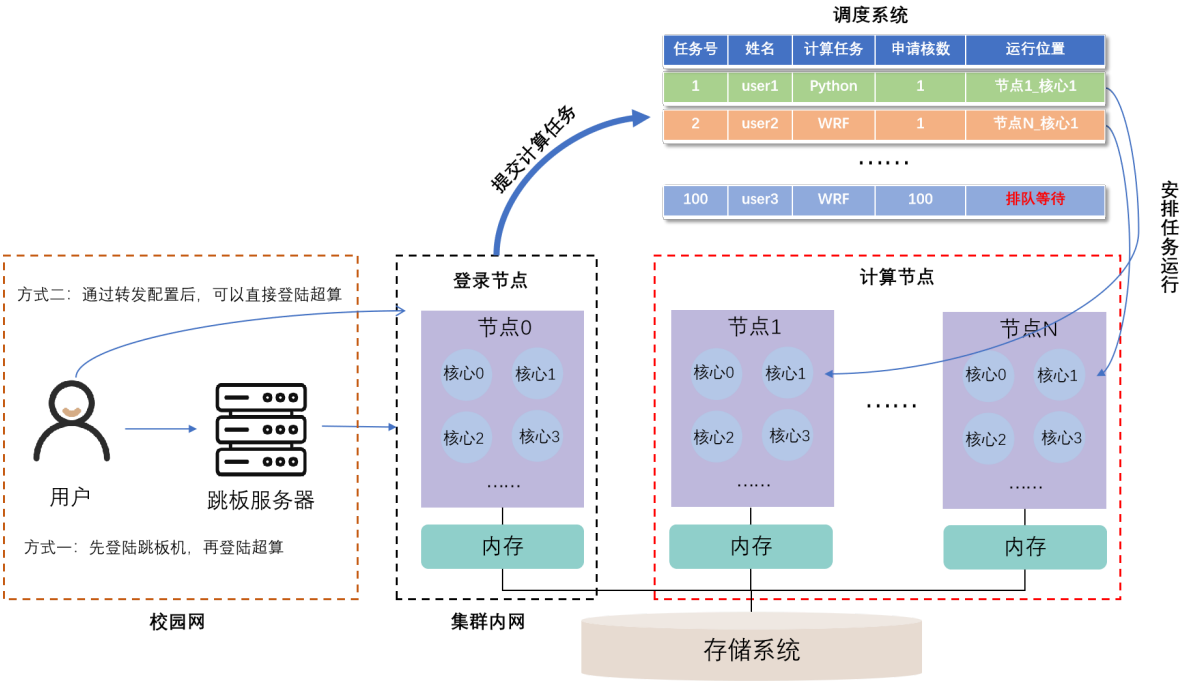
1.1 超算组成

超算主要由四部分组成：跳板服务器、登陆服务器、计算服务器、调度系统

- 跳板服务器。一台既连接了校园网又连接了超算内网的服务器。用户通过该机器可以从校园网中访问处于内网中的超算集群。**IP地址为：`172.16.108.134`，端口为22。**
- 登陆服务器。**专门给用户远程登陆使用的服务器。IP地址为：`192.168.10.15`，端口为22。**用户凭集群及密码登入服务器，然后在服务器上可进行**文件上传下载、文件编辑、程序编译、软件安装、计算任务提交**等操作，但**不能直接运行计算任务**，否则会导致机器卡顿，影响其他用户登陆及使用。
- 计算服务器。**专门用来运行计算任务的服务器。**计算服务器配置：**Intel(R) Xeon(R) Gold 6348 CPU \56核\512G内存\8块Nvidia A800 80G显存，总共7台**
- 调度系统。所有计算服务器由调度系统分配管理。用户首先向调度系统申请计算资源，然后再由调度系统将计算任务投放到分配的计算服务器上运行。

1.2 使用步骤

1. **用户先登陆跳板机。**为了保证安全，目前超算集群放置在内网中，只有一台位于校园网中的跳板机可以访问超算。因此，为了使用超算，我们需要先登陆到跳板机。
2. **再通过跳板机登陆到登陆节点。**登陆到跳板机后，我们可以通过ssh等方式登陆到登陆节点，进行任务脚本的编写和提交。
3. **编写计算任务提交脚本。**这个脚本包含了向调度系统申请计算资源的指令，以及定义程序运行命令的参数。通过编写这个脚本，我们可以灵活地配置计算任务的提交方式，以满足不同的计算需求和优化要求。
4. **执行任务提交脚本。**将计算任务投放到计算服务器上运行。
5. **执行命令查看程序运行状态。**



> 第一步和第二步，经过一定配置后，可以融合为一步，用户进行一次操作，即可直接访问处于内网的登陆节点，具体设置请参考2.2

二、集群登陆

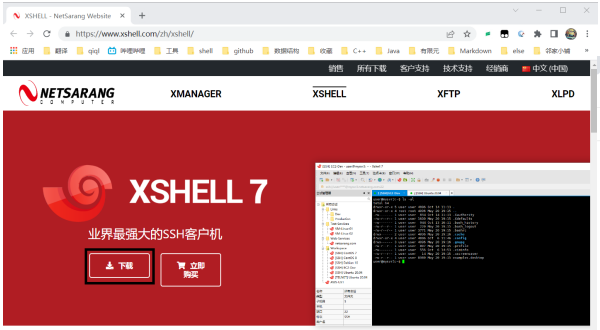
2.1 Windows系统下的集群登陆

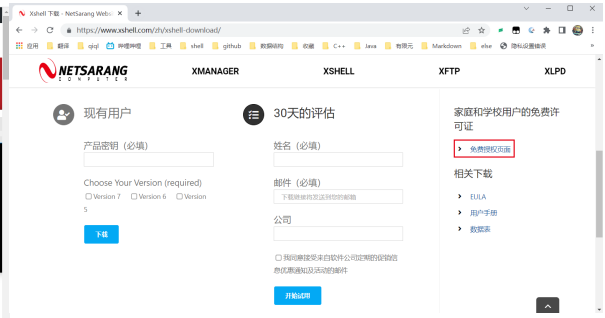
2.1.1 集群登陆软件Xshell下载与安装

什么是 Xshell ?

Xshell 是一个用来在 Windows 连接远程服务器的终端工具，Xshell 使用方便且免费。

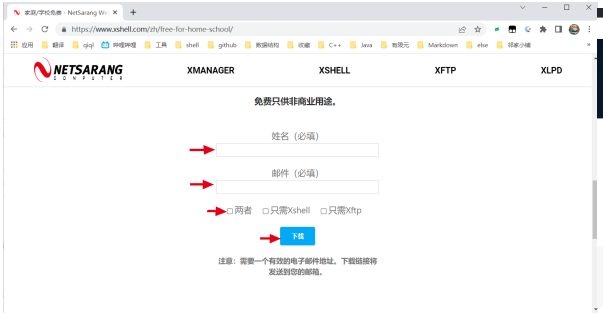
进入XShell的中文官网:https://www.xshell.com/zh/xshell/ 进入如下界面，目前版本为 Xshell7，点击下载，点击免费授权页面

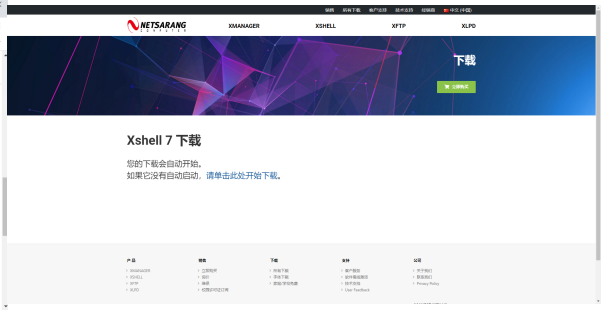




Xshell的优点

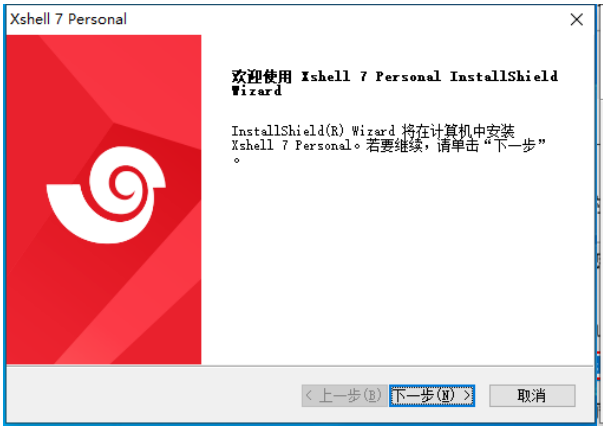
进入免费授权页面后，填写姓名和邮件，勾选两者（Xftp 也需要使用），点击下载。注意：需要一个有效的邮件地址，下载链接将发送到邮箱。然后点击邮箱中的下载链接，浏览器将自动下载 Xshell 和 Xftp 的安装包。



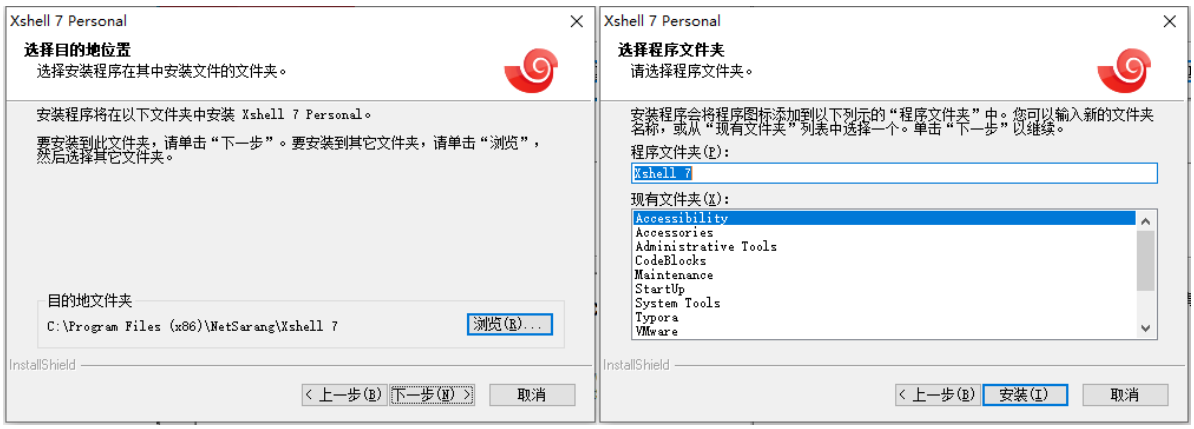


Windows 下安装 Xshell

打开 Xshell7 安装包，点击下一步，勾选我接受，点击下一步



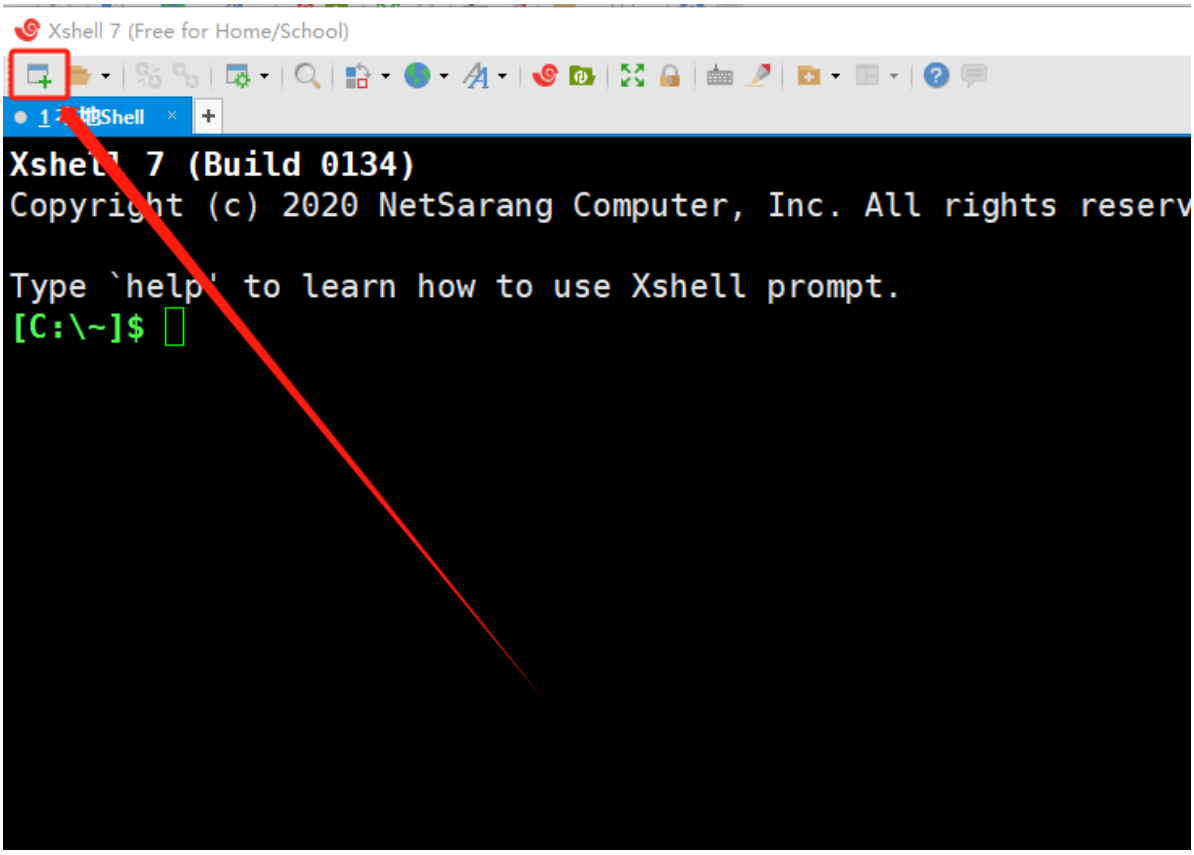
可以选择安装路径或直接点击下一步，点击安装



安装完成

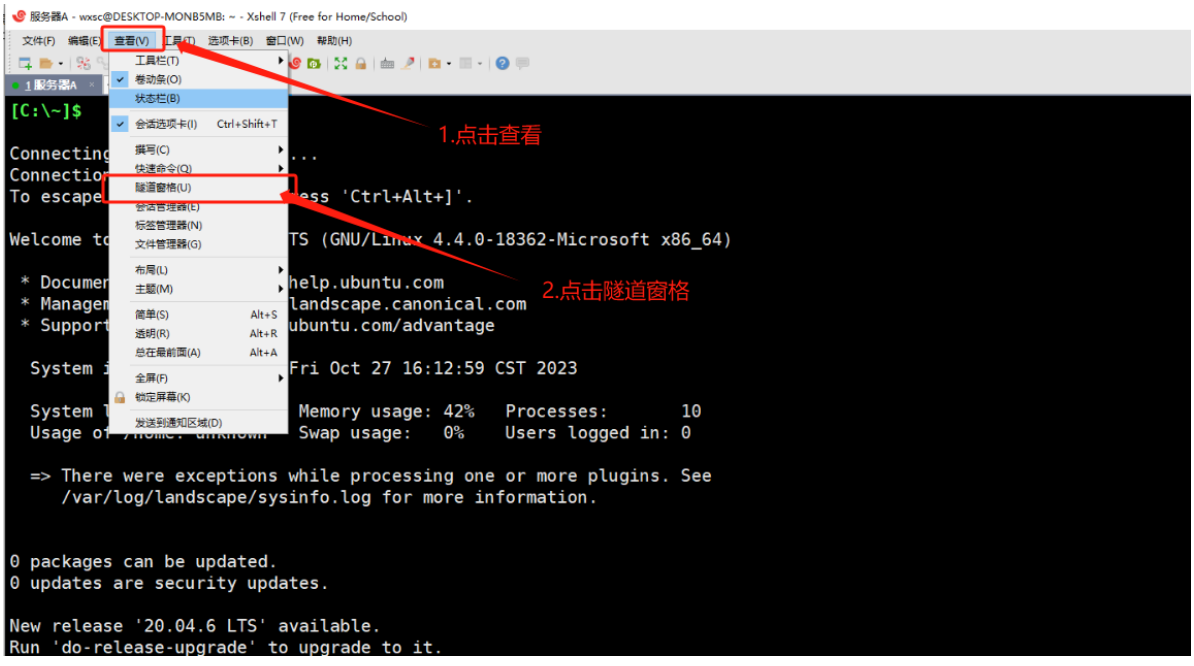
2.1.2 使用Xshell登陆集群

1. 打开xshell，点击左上角“新建”按钮

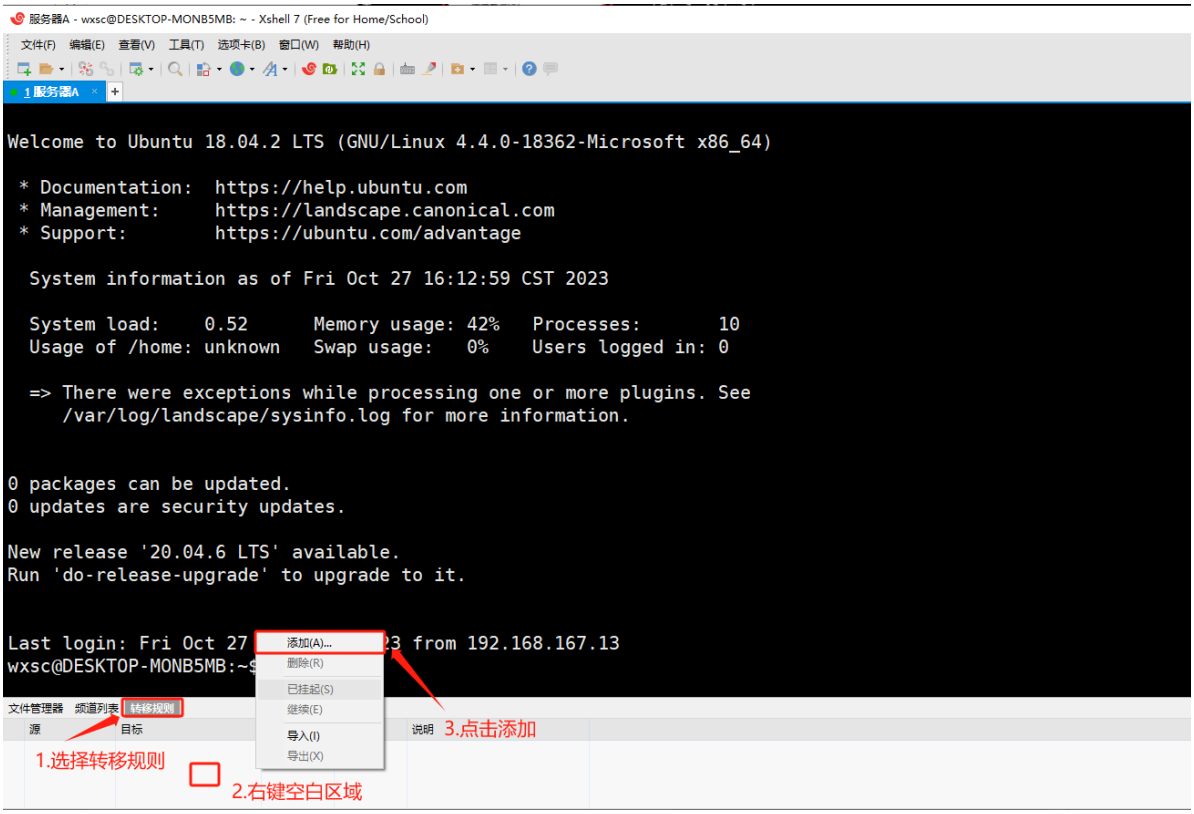


2. 输入跳板机名称，IP：`172.16.108.134`，端口：`22`，名称可以任意，然后点击“连接”

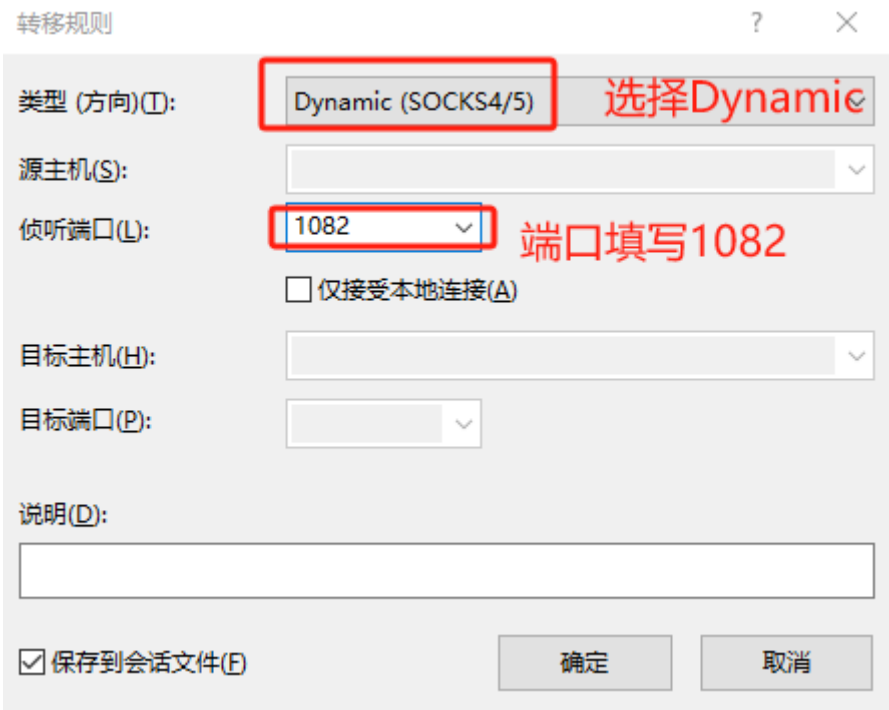
3. 登陆成功之后，点击”查看“，然后点击”隧道窗格“，创建隧道，步骤如下图



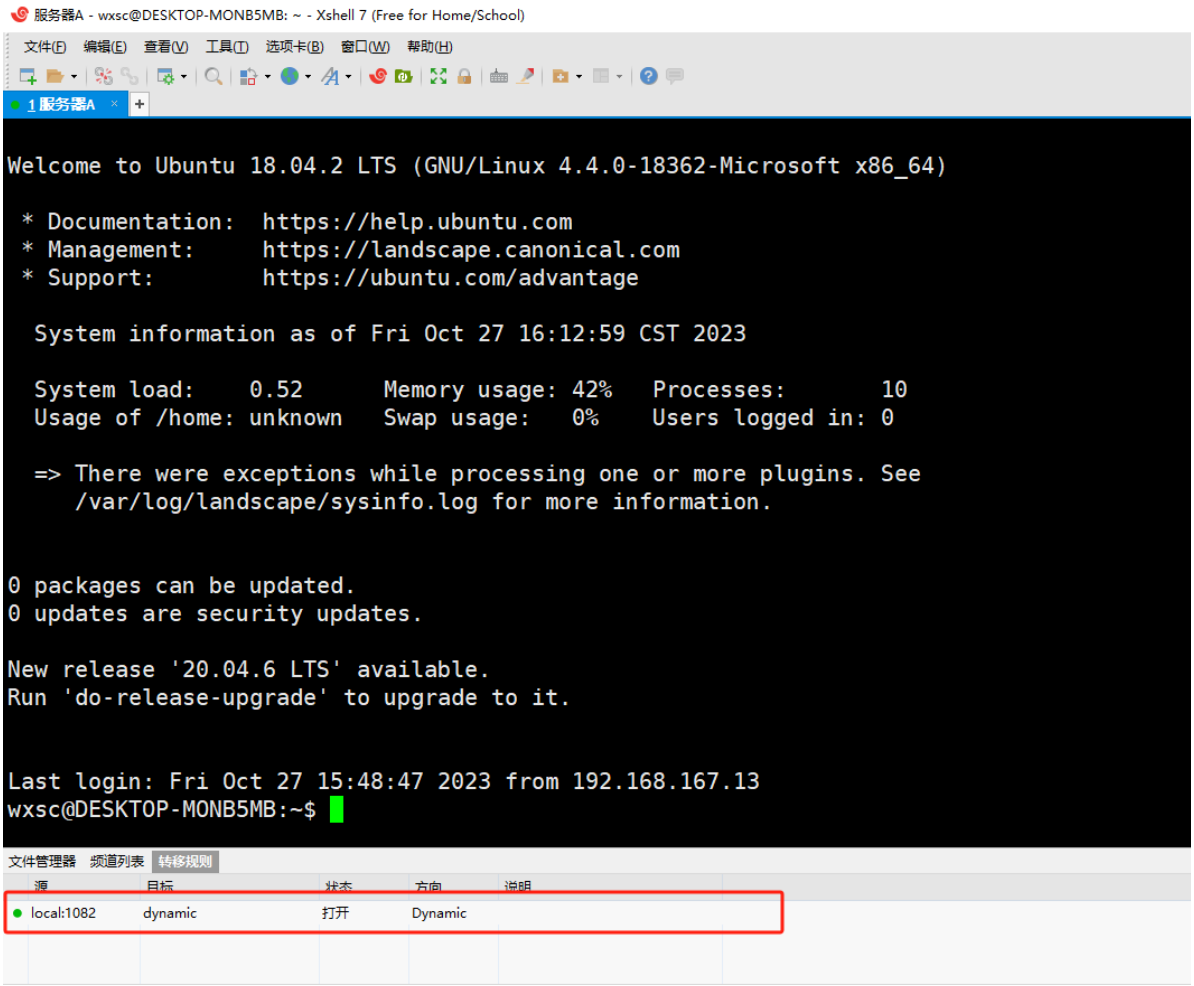
此时xshell下方会出现窗格，点击”转移规则“，右键空白区域，点击”添加“



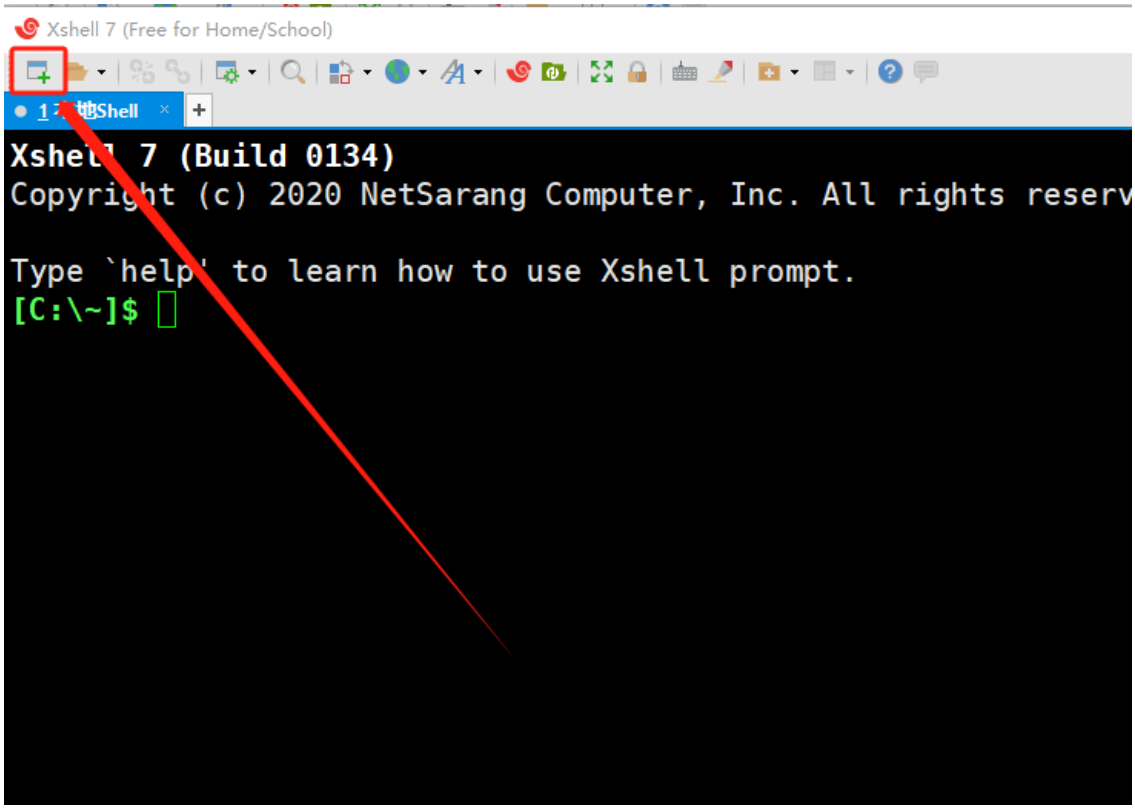
转移规则中，类型选择“Dynamic（SOCKS4/5)”，侦听端口填写`1082`，最后点击“确定“



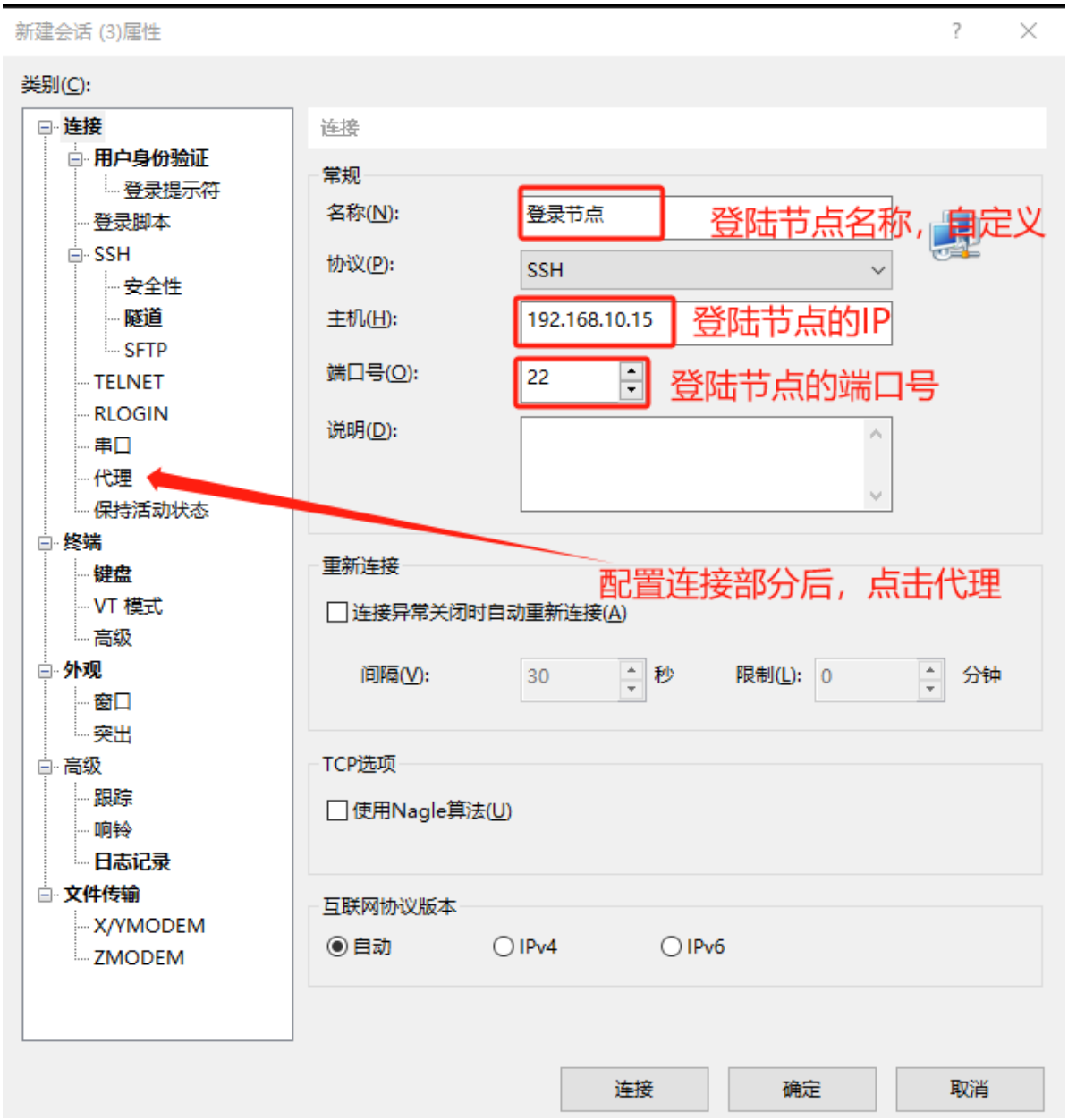
转移规则中，显示出规则并颜色显示为绿色，表示添加并使用成功，跳板机的隧道建立成功



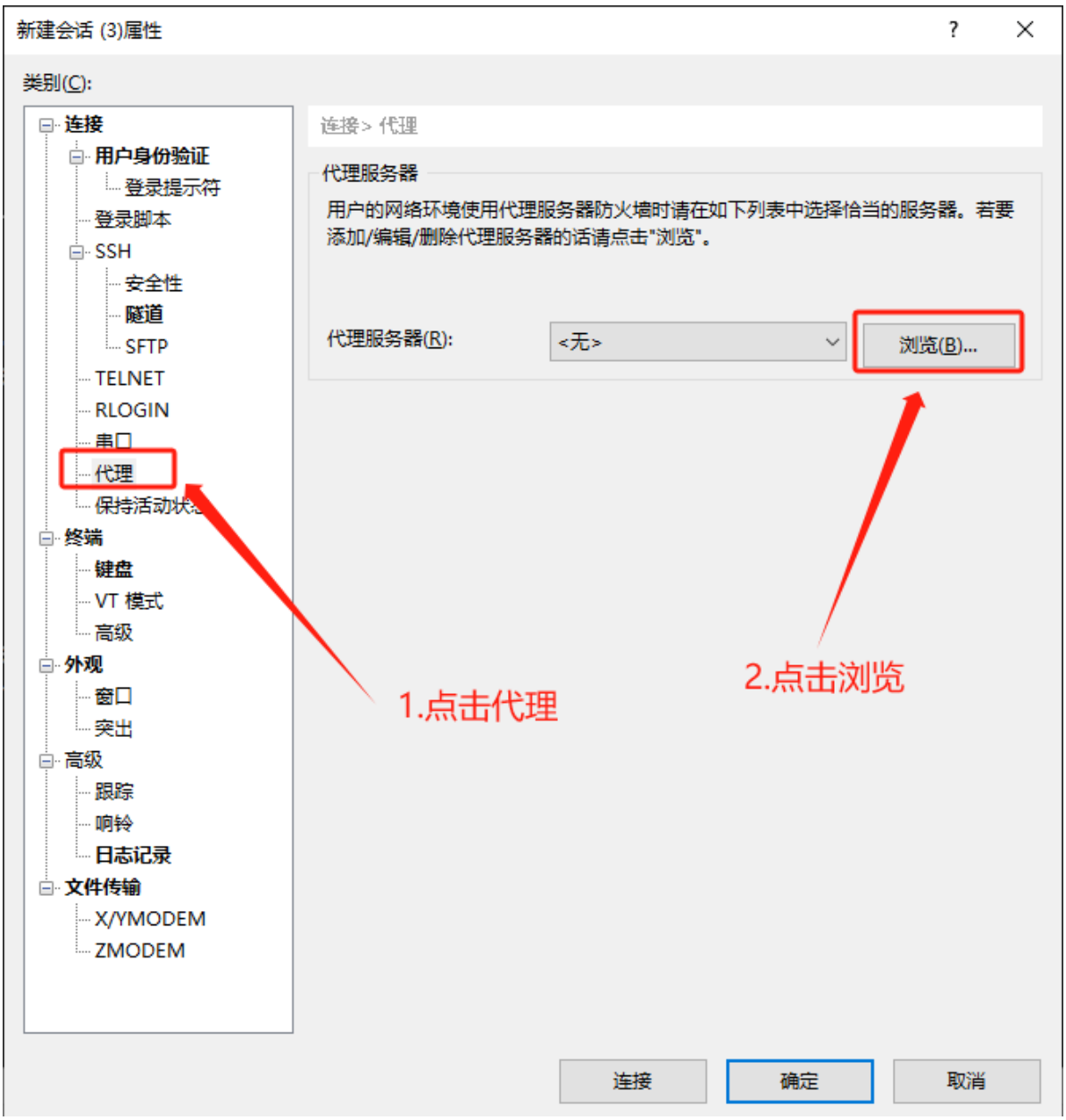
4. 进行登陆节点的配置，进入Xshell首页，点击左上角"新建"按钮



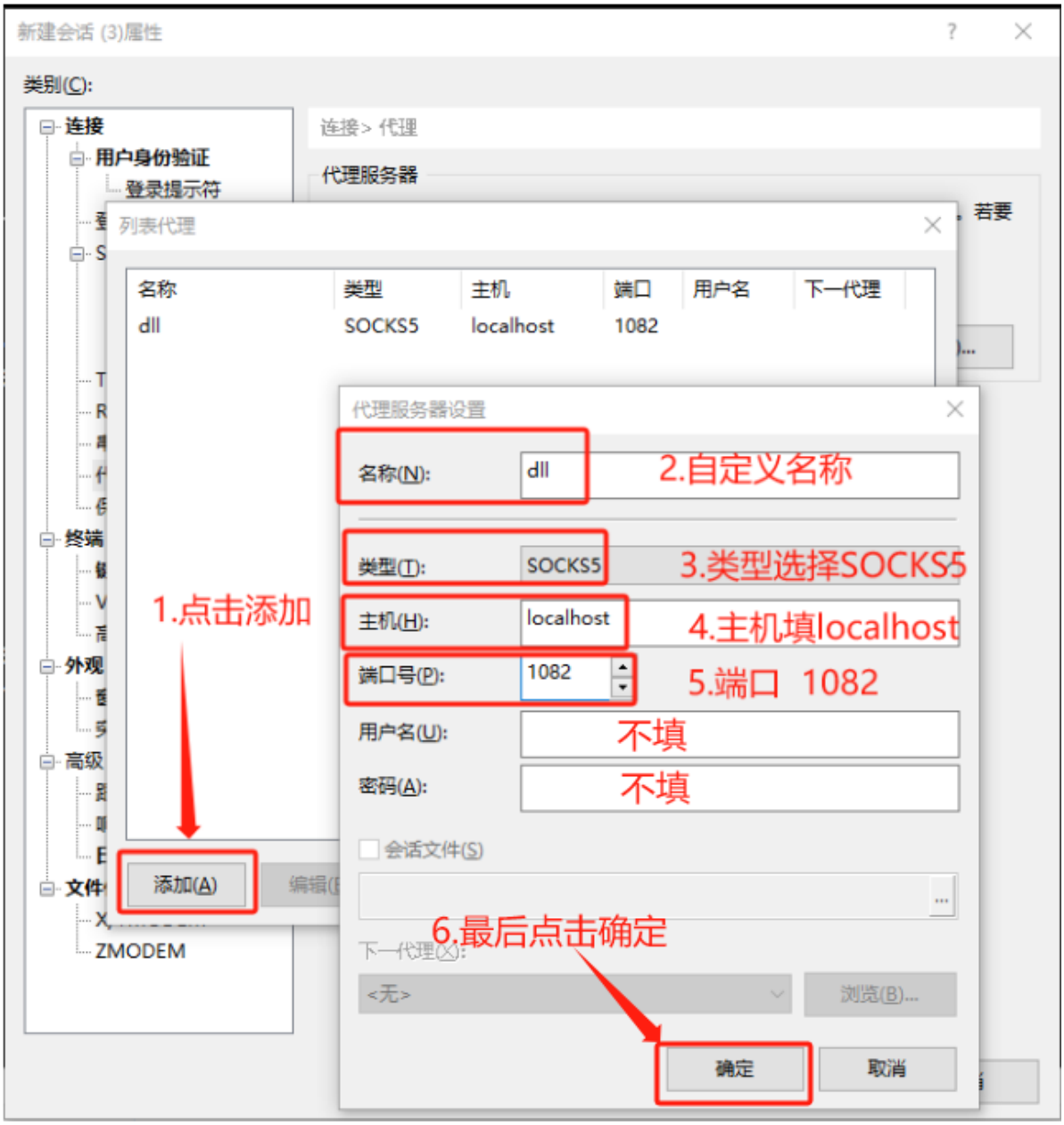
输入登陆节点的名称，IP：`192.168.10.15`，端口：`22`，名称可以任意



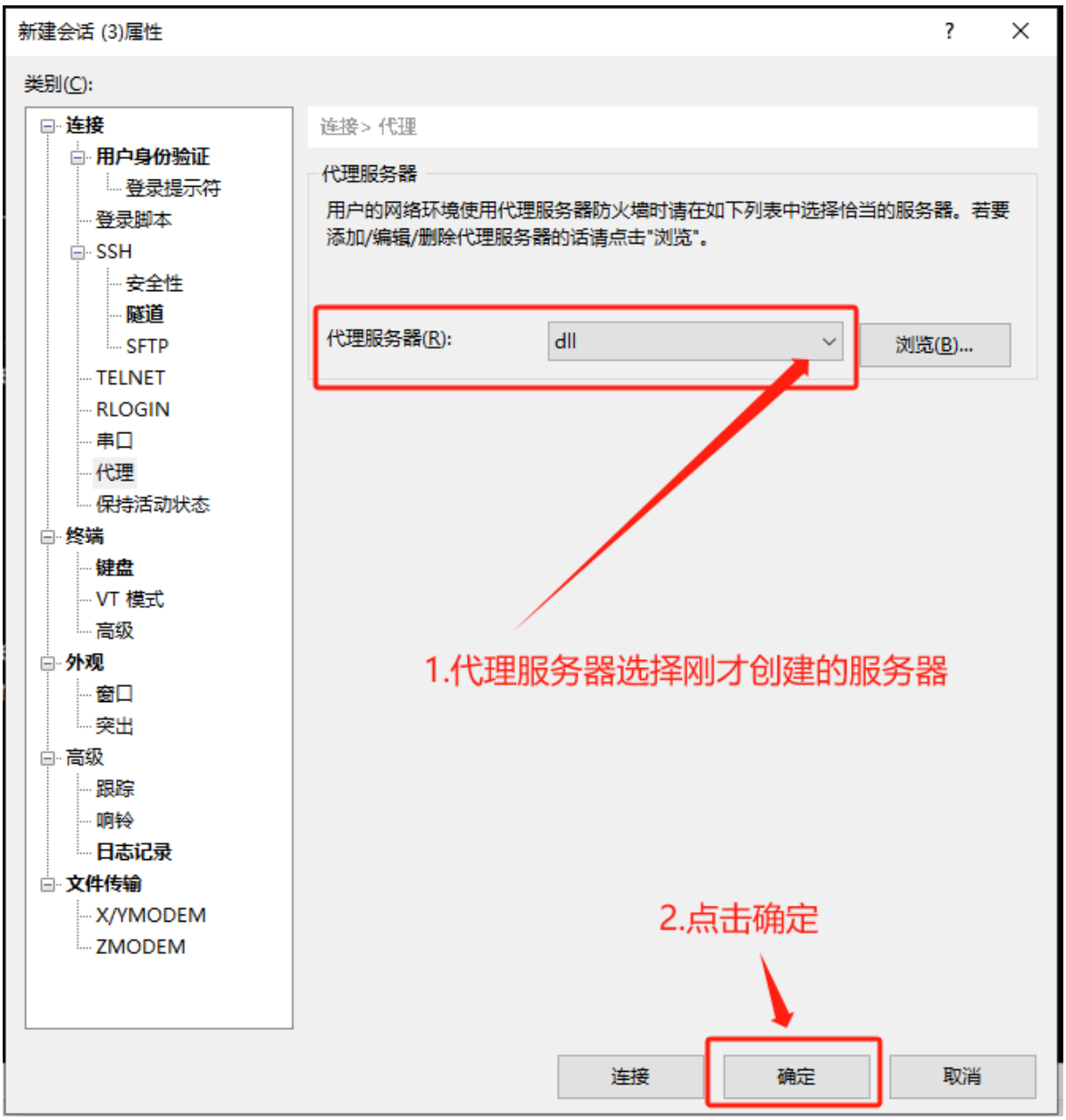
点击左侧“代理”，进入代理配置界面，点击代理服务器右侧的“浏览”



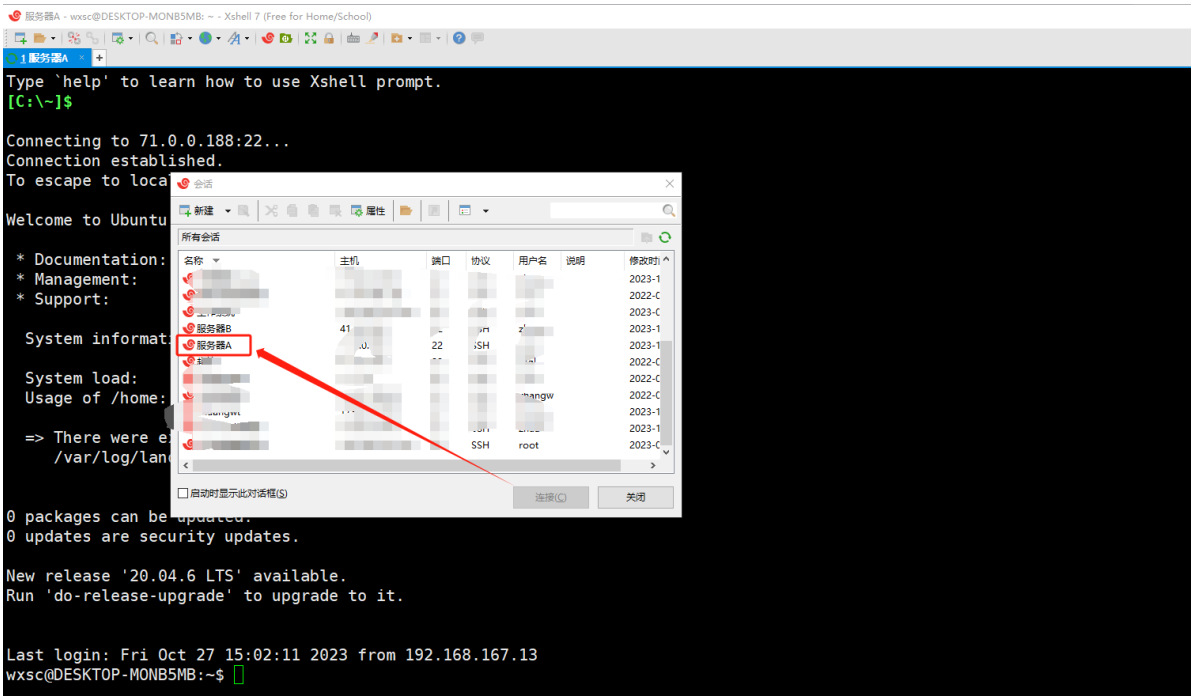
点击“添加”，代理服务器的名称自行定义，类型选择`SOCKS5`，主机填写`localhost`，端口号`1082`，用户名和密码不需要填写，最后点击“确定”



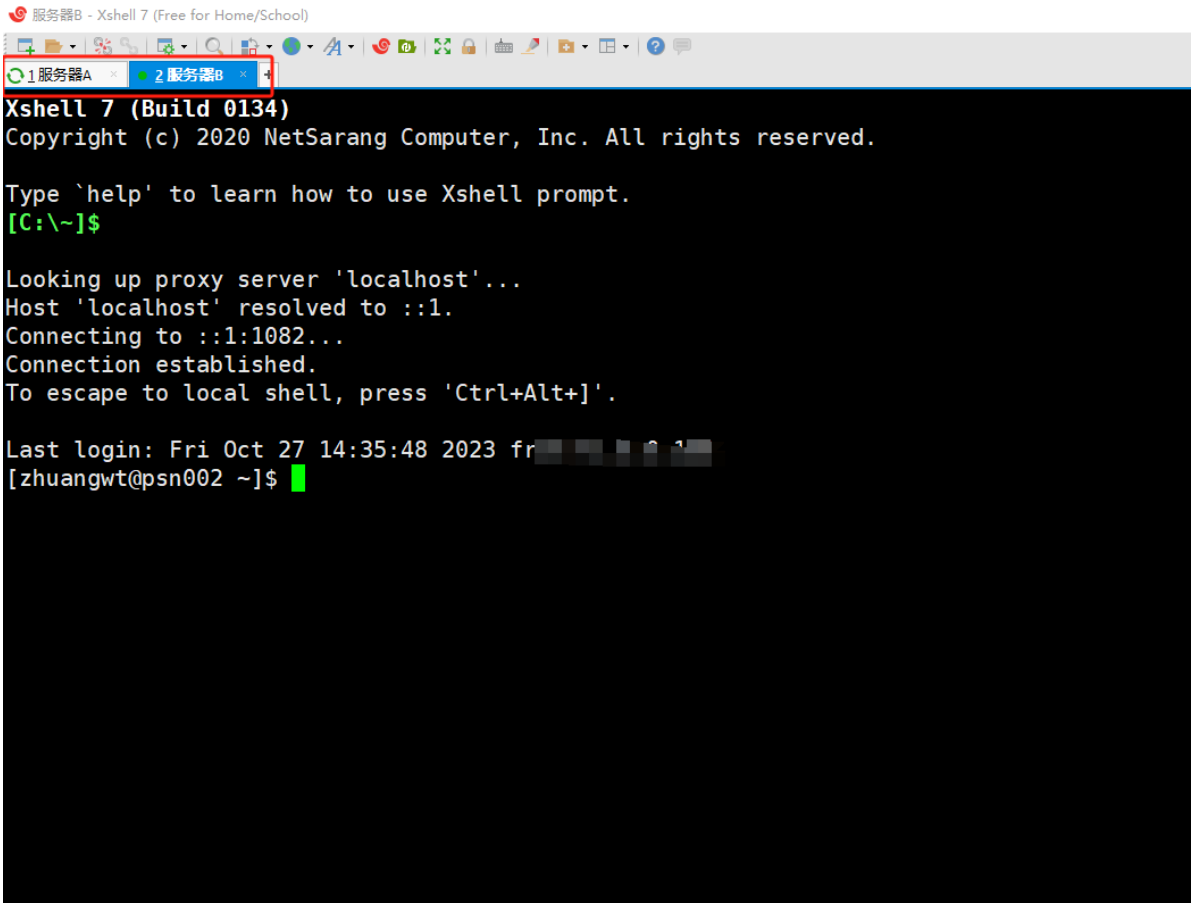
在代理配置界面，将代理服务器选择为创建的代理服务器，并点击“确定”，Xshell配置完成



4.先选择跳板机（名称根据自定义名称进行选择，我这里为服务器A），选择后进行连接，登陆成功



选择登陆节点（名称根据自定义名称进行选择，我这里为服务器B），选择后进行连接，登陆成功



2.2 Linux系统下的集群登陆

在linux系统下登陆集群，我们也可以实现一步登陆，即采用`ssh`的`-J`选项，来指定跳板机的地址和用户名，然后通过跳板机访问登陆节点。

命令格式为：

```
ssh -J username1@172.16.108.134 username2@192.168.10.15
```

其中`172.16.108.134`为跳板机的主机地址，`username1`为登陆跳板机时使用的用户名。

`192.168.10.15`为登陆服务器的主机地址，`username2`为登陆服务器时使用的用户名。

三、集群文件上传与下载

3.1 Windows系统下的文件上传与下载

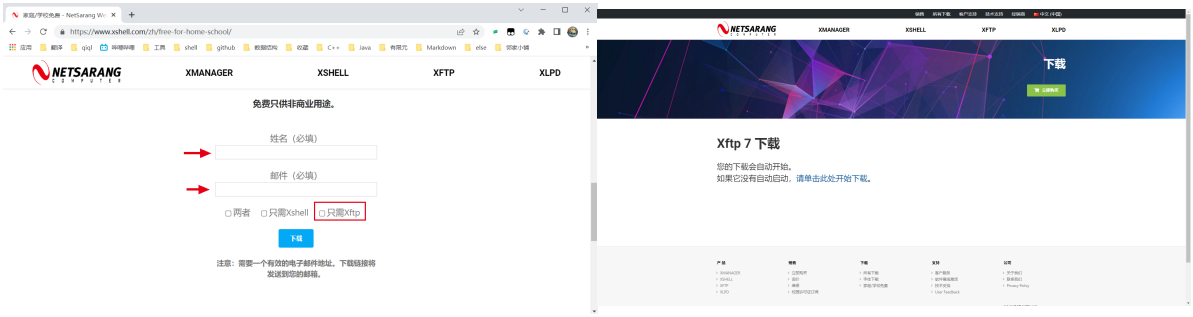
3.1.1 集群文件传输软件Xftp安装

Xftp 是一个功能强大的 SFTP、FTP 文件传输软件。使用 Xftp 可以方便的在 Windows 主机和远程 Linux 集群之间传文件

浏览器下载 Xftp

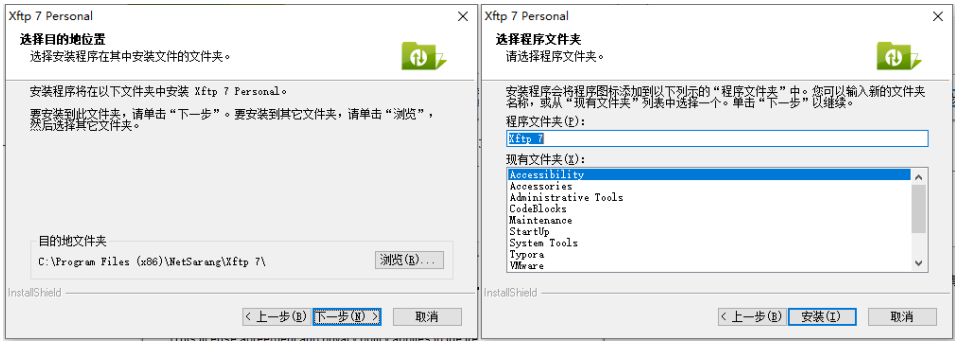
如果在刚才下载 Xshell 的页面中已经勾选了两者，那么邮箱中应该还有一个下载Xftp的链接，可以直接点击该链接进行下载，或者在浏览器输入https://www.xshell.com/zh/free-for-home-school/，跳转到如下界面，输入姓名及**有效**邮箱，勾选 Xftp，点击下载

点击邮箱中的下载链接，进入以下界面，浏览器自动下载



打开 Xftp7 安装包，点击下一步，勾选我接受，点击下一步

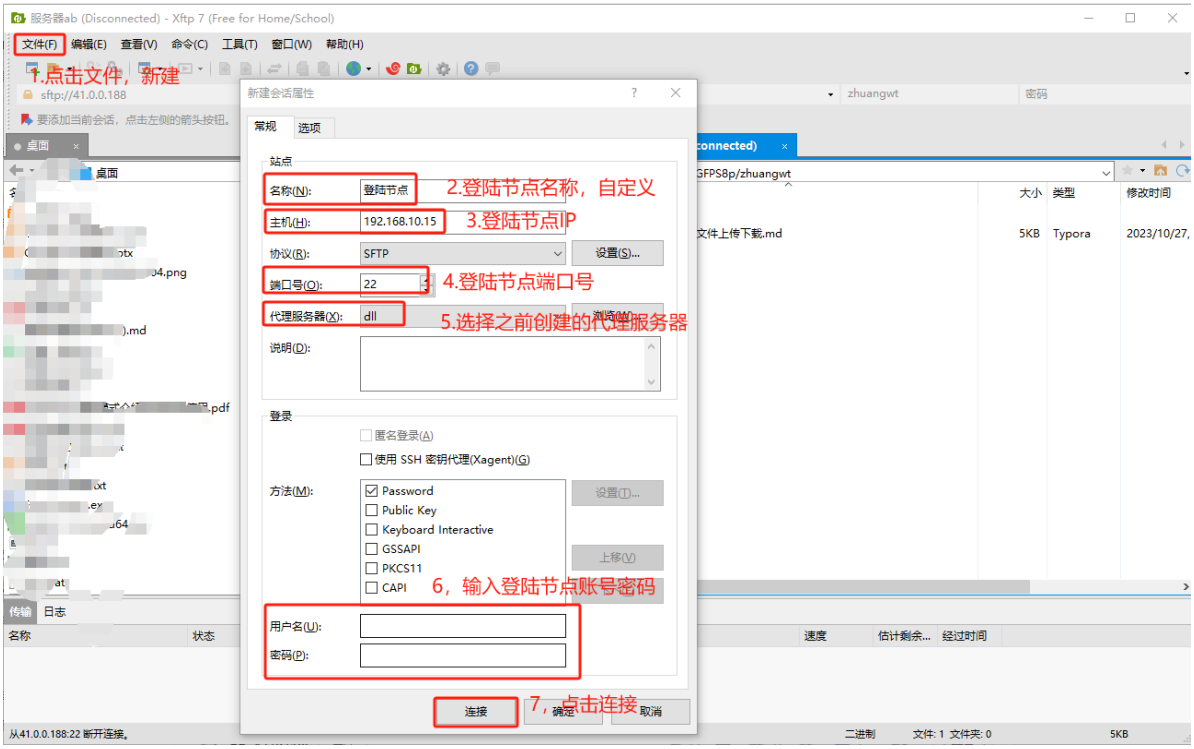
选择安装路径，也可以不更改安装路径，点击下一步，点击安装



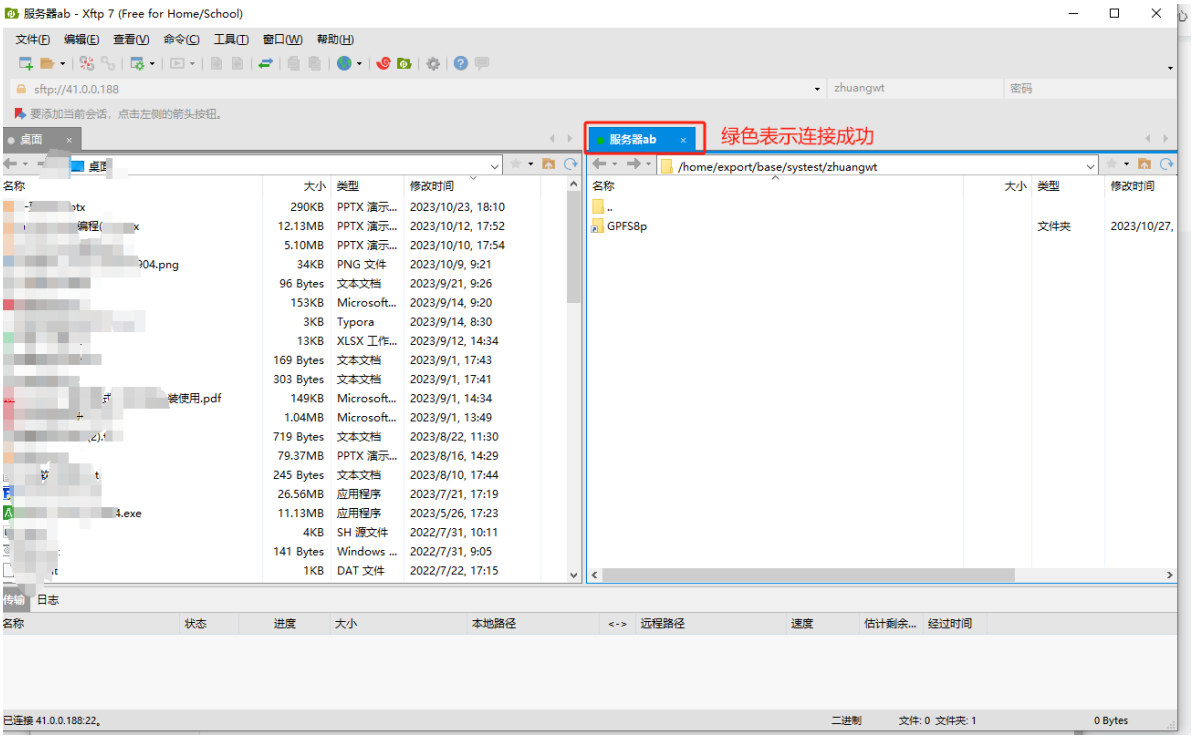
安装完成

3.1.2 使用Xftp上传下载文件

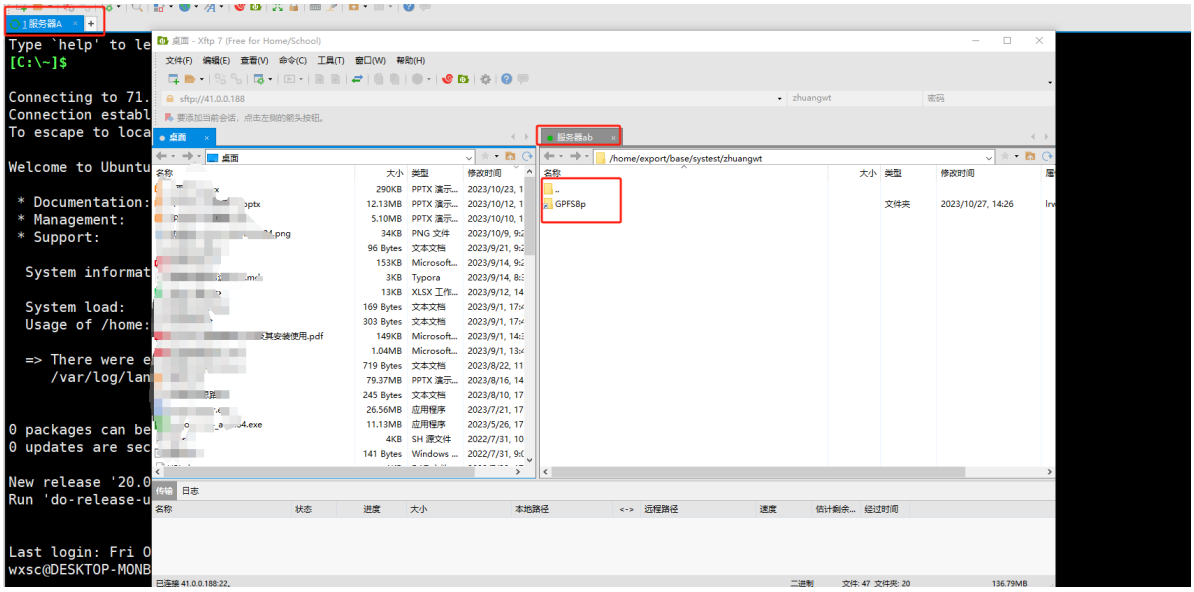
进入Xftp首页，点击左上角“文件”，点击”新建“，输入登陆节点的名称，IP：`192.168.10.15`，端口：`22`，名称可以任意，选择之前添加的代理服务器，输入登陆节点的”账号“和”密码“，点击”连接“，连接到登陆节点的文件系统



连接之后，绿色标识即表示连接成功



在之后的连接中，需要跳板机处于登陆状态下，在Xftp中选择登陆节点，可进入到登陆节点的文件系统中



3.2 Linux系统下的文件上传和下载

在linux系统下进行文件的上传和下载，我们可以一步实现文件的上传和下载，即采用`scp`的`-o ProxyJump=`选项，来指定跳板机的地址和用户名，利用跳板机向登陆节点上传或下载文件。

上传文件的命令格式为：

```
scp -o ProxyJump=username1@172.16.108.134 /root/data/file
username2@192.168.10.15:~
```

`/root/data/file`为本地文件，此命令是将该文件`file`从本地上传到登陆节点的用户目录`~`下.

下载文件的命令格式为：

```
scp -o ProxyJump=username1@172.16.108.134 -r username2@192.168.10.15:~/file ~
```

`~/file`是登陆节点用户目录下`file`文件的路径，此命令是将登陆节点下的`file`文件下载到本地用户目录`~`下。

`172.16.108.134`为跳板机的主机地址，`username1`为登陆跳板机时使用的用户名。

`192.168.10.15`为登陆服务器的主机地址，`username2`为登陆服务器时使用的用户名。

四、集群任务提交与管理

4.1任务提交

4.1.1 编写任务提交脚本

新建文件`run.sh`，输入以下内容：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -p x86_64_GPU
#SBATCH -n 1
#SBATCH -G 1
#SBATCH -o job.out

python a.py
```

- `#!/bin/bash`，固定内容，不用修改
- `#SBATCH -p x86_64_GPU`，向调度系统申请`x86_64_GPU`队列的计算资源。调整队列名，即更换队列运行计算任务。
- `#SBATCH -n 1`，申请1个核
- `#SBATCH -G 1`，申请1块GPU卡
- `#SBATCH -o job.out`，程序的运行输出保存在`job.out`文件，该文件文件名可以随意修改
- `python a.py`程序自身的运行命令

4.1.2 提交计算任务

执行`sbatch  run.sh`提交计算任务

```
[admin@manage tmp]$ sbatch run.sh
Submitted batch job 3656
```

4.1.3 查看任务状态

执行`squeue -u 用户名`查看计算任务运行状态

```
[addmin@manage tmp]$ squeue -u admin
             JOBID PARTITION     NAME     USER ST       TIME  NODES
NODELIST(REASON)
              3656 q_amd_sha   run.sh    admin  R       0:23     10 bn[054-063]
```

- JOBID，任务编号
- ST，任务状态，作业状态包括`R`(正在运行)，`PD`(正在排队)，`CG`(即将完成)，`CD`(已完成)
- TIME，运行时间
- NODES，占用节点（也称服务器，下同）个数
- NODELIST，占用服务器的编号

4.1.4 查看程序输出

计算任务运行起来后，执行`tail -f job.out`可以查看程序的实时输出，执行`Ctrl+C`退出查看

```
[admin@manage tmp]$ tail -f job.out
Hello world from processor bn060, rank 896 out of 1280 processors
Hello world from processor bn060, rank 897 out of 1280 processors
```

4.2 任务管理

4.2.1 查看分区计算资源使用情况

```
[admin@manage tmp]$ sinfo
PARTITION    AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
q_amd_share*    up   infinite     43  alloc bn[023-050,334-336,345-356]
q_amd_share*    up   infinite     52   idle bn[053-096,337-344]
```

节点状态包括：

`drain`(节点故障)，`alloc`(节点在用)，`idle`(节点可用)，`down`(节点下线)，`mix`(节点部分占用，但仍有剩余资源)

4.2.2 计算任务停止

执行 `scancel 任务编号` 停止计算任务，“任务编号”通过 `squeue -u 用户名` 可以查到。

```
scancel  3656
```

4.2.3 计算任务详细信息查看

执行 `scontrol show job 任务编号` 可以查到计算任务的工作目录、输出文件等详细信息

```
scontrol show job 3644
```

五、存储使用情况查看

`lfs quota -u zizhanghao /share -h`

这个命令是查看用户自己的子账号的存储使用情况（zizhanghao 为自己的子账号用户名），用户可以自己执行的

`lfs quota -g zuzhanghu /share -h`

这个命令是查看组账户(用户组)的存储使用情况（zuzhanghu 为当前组账户名），用户也可以自己执行查看

六、任务账单查看

计费系统网址：https://172.16.108.134:8090/

登录后可查询相应的作业和账单

账号：集群子账号名 / 组账户名

初始密码：para@1234

注意：登录后请及时修改密码