

北京科技大学校级高性能计算平台 用户手册 V1.2

信息化建设与管理办公室

2024. 11. 18

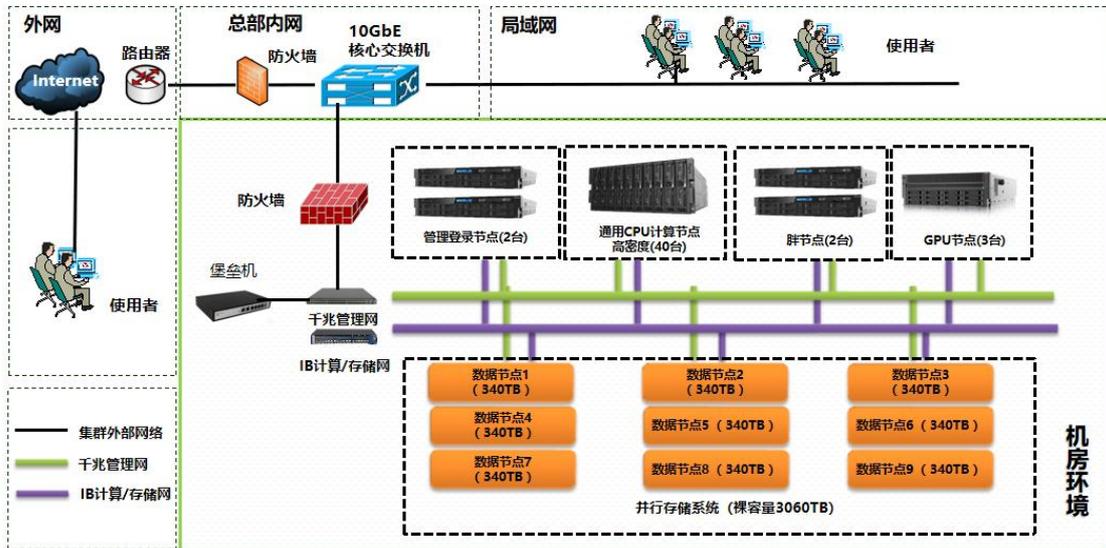
目录

1 平台简介	- 1 -
2 账号注册及资源申请流程	- 2 -
2.1 账号注册流程	- 2 -
2.2 资源申请流程	- 3 -
3 作业提交	- 6 -
3.1 模板提交	- 6 -
3.1.1 人工智能模块	- 7 -
3.1.2 容器功能模块	- 9 -
3.1.3 真实作业案例	- 10 -
3.2 命令行提交	- 12 -
3.3 文件传输与下载	- 14 -
3.3.1 文件传输	- 14 -
3.3.2 文件下载	- 14 -
4 作业管理	- 15 -
5 用户中心	- 16 -
5.1 团队	- 16 -
6. 远程 SHELL 连接	- 19 -
1. xshell 连接	- 19 -
2. shell 连接容器	- 20 -

1 平台简介

北京科技大学校级高性能计算平台是由学校信息化建设与管理办公室统一规划建设，以高性能计算、AI 计算等软硬件为基础，面向全校师生提供大规模科学计算和数据处理服务的公共服务平台，可以我校多领域的科学研究和工程计算按需提供可靠、高效的运行环境，进一步强化信息化建设对学校科学研究和人才培养的支撑力度。

高性能计算平台分为 HPC 服务器集群（通用 CPU 计算节点）、AI 服务器集群、虚拟化平台、分布式存储设备、管理登陆节点、网络设备、平台管理软件、平台安全防护设备等 8 个模块，集群总计算能力达到 450 TFlops。平台架构如下图所示：



资源概览：

节点类别	型号	主要规格	节点数
管理/登录节点	R620 G40	Intel 4314 2.4G 24M 16C 135W*2, 128G	2
CPU节点	BX50 G40	Intel 6348 2.6G 11.2UPI 42M 28C 235W*2, 256G	40
胖节点	R840 G30	Intel 6230 2.1G 10.4UPI 27.5M 20C 125W*4, 1T	2
GPU节点	X660 G45	Intel 6348 2.6G 28C*2, 2T NV HGX A100 8-GPU Nvlink 80GB*1	3
存储节点	CloudStor	Hygon 7255*2, DDR4 2666 32G*4, 10TB 3.5吋7.2K 6Gb SATA硬盘*34, 600G 2.5吋10K 12Gb SAS硬盘*2, 960G 2.5 6Gb R SSD*2	9
管理节点：2，计算节点：45，CPU核心：2600个，GPU卡：24卡，存储容量：3.06 PB			
算力：双精度浮点峰值可达 450.96 Tflops			

2 账号注册及资源申请流程

2.1 账号注册流程

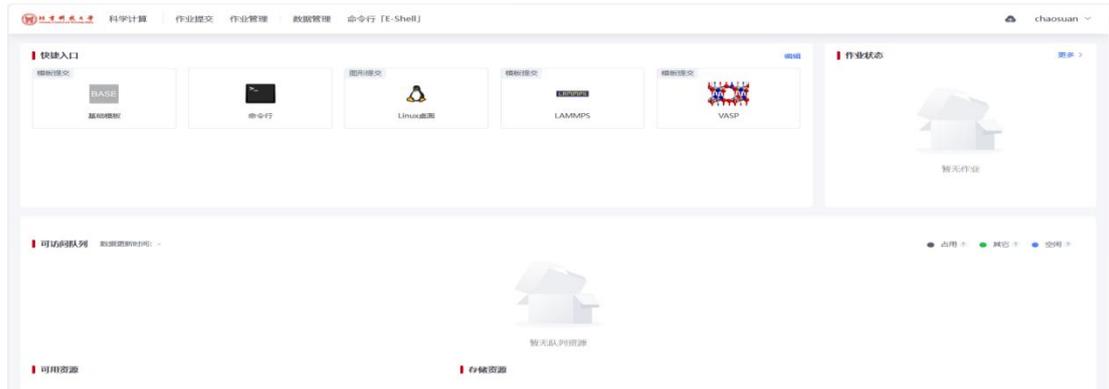
1.在学校内网下，打开浏览器，输入网址“https://h.ustb.edu.cn/”进入学校信息门户：



2.在此界面，可以选择扫码登录，也可以选择账号密码登录；登录后进入到以下界面找到“高性能计算”应用。如下图所示：



3.点进后进入到高性能计算平台首页，至此，账号注册完成。



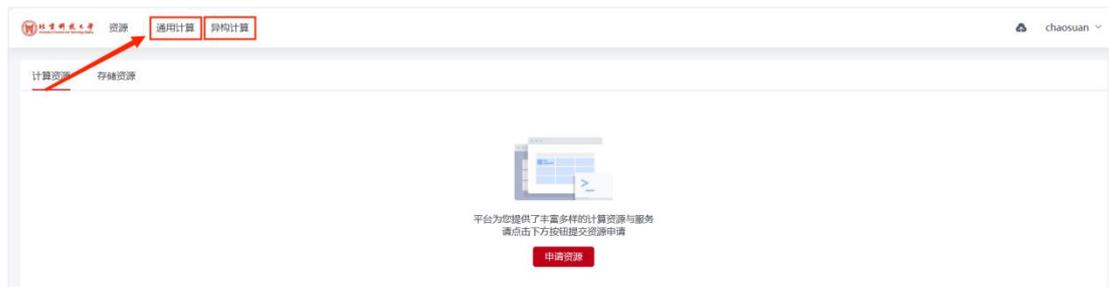
注：校内所有师生都可以注册账号，查看高性能计算平台概况。

2.2 资源申请流程

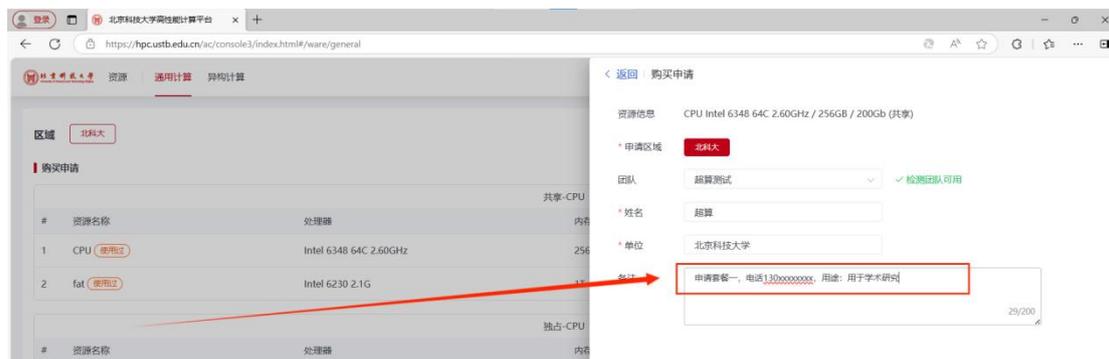
1.在导航栏找到“科学计算”，选择“资源”，如下图：



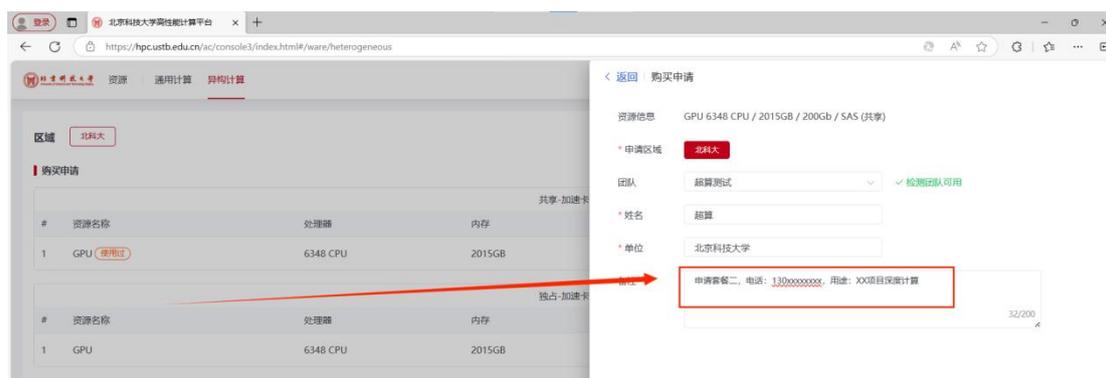
2.进入后，可以选择“通用计算”或“异构计算”资源申请，如下图：



4.以下“通用计算（CPU）”计算资源申请示范：



5. 以下为“异构计算 GPU（A100 加速卡）”计算资源申请示范：



注:

(1)资源申请需在备注栏填写：真实电话、用途及所试用的套餐编号；

①套餐一：试用资源包含 CPU 核心 40 核心，使用期限为 15 天；

②套餐二：试用资源包含 CPU 核心 7 核心、GPU 加速卡 1 卡，使用期限为 15 天；

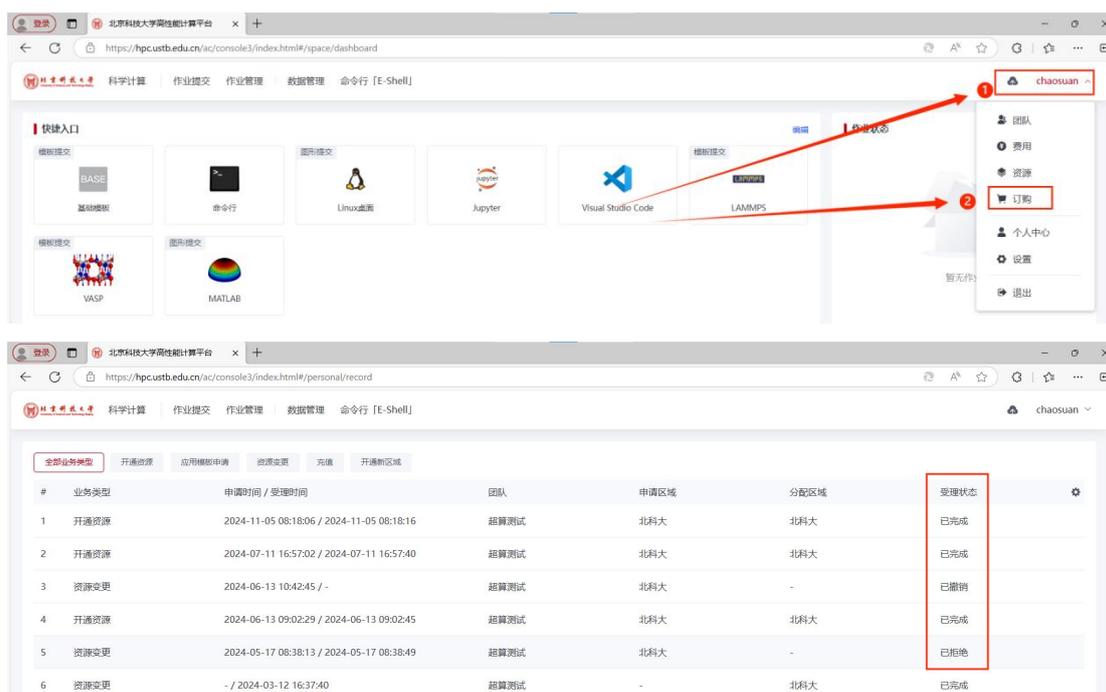
③套餐三：定制资源，此套餐为定制资源，请在备注中写明所需资源并联系管理员。

(2)单人默认分配 50GB 共享目录存储资源、用户主目录 150GB 存储资源；

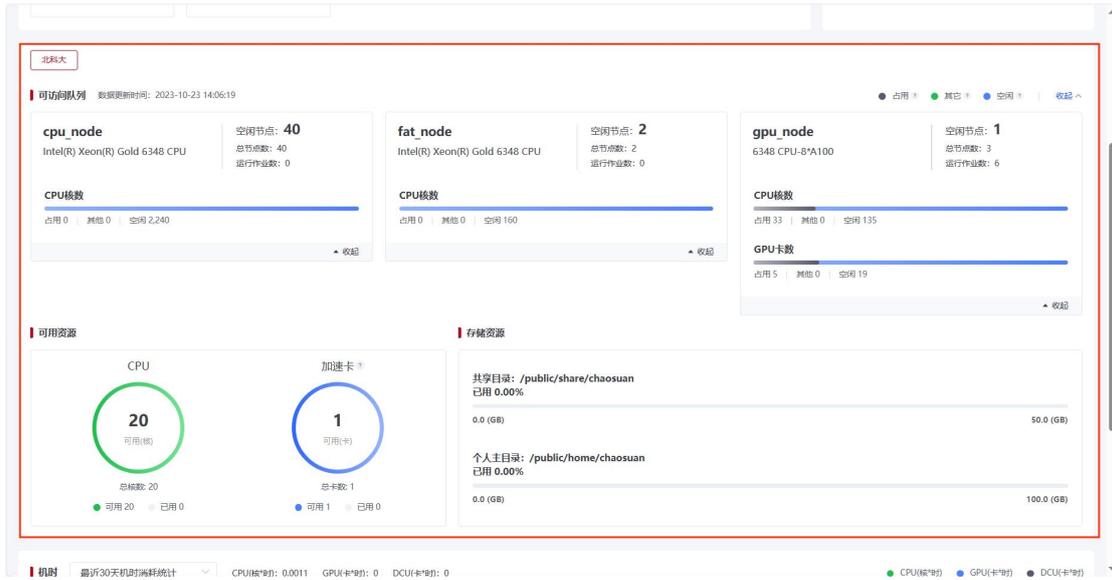
(3)所有资源，以资源审批完成时间为节点，有效期为 15 天且所有资源均为共享式资源。

6. 申请资源后，管理员会在三个工作日内审批。

期间可通过导航栏最右侧订购选项中查看“受理状态”



审批通过后，在首页会显示可用资源，如下图所示：



3 作业提交

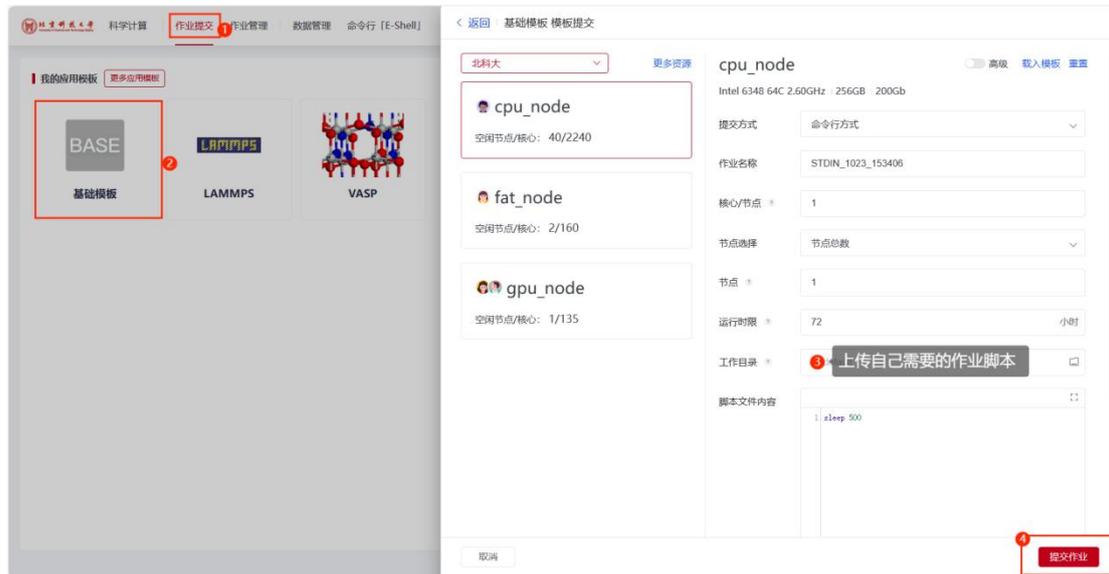
高性能计算平台提供了两种作业提交方式，分别为模板提交和命令行提交。

3.1 模板提交

模板提交适用于零基础的用户，作业提交流程、配置参数全可视化界面。应用中心中包含了学术科研、生命科学、工业制造、气象环保、半导体、生态合作伙伴和自定义共七类应用。

应用软件分为商业软件和开源软件，若是开源软件，直接订阅应用即可，订阅后会显示在我的应用列表作为快捷入口直接进行作业提交；商业软件，请咨询管理员；

1. 点击导航栏作业提交后，点击基础模版即可出现模板提交作业，按标签进行操作，核心数、节点数和运行时限可自行分配，如下图所示：



2. 查看作业详情：

作业提交后，点击“查看详情”按钮，或点击导航栏中“作业管理”按钮，可查看当前作业详情。另外，组管理员可通过勾选“展示组成员作业”来查看组成员的作业情况：

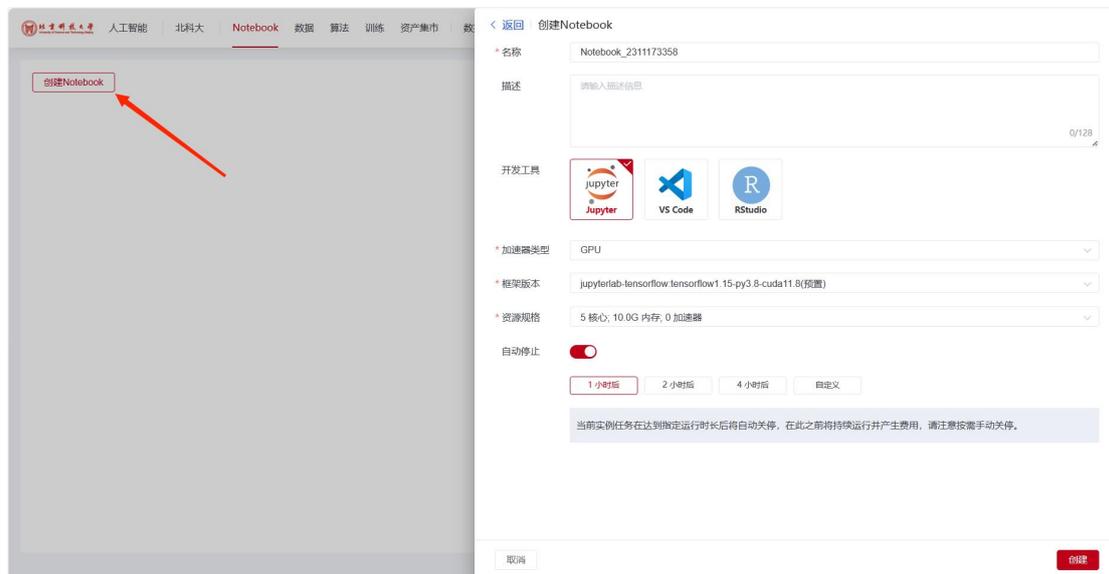


3.1.1 人工智能模块

1.在导航栏点击“人工智能”即可进入 Notebook 页面，主要功能为创建 Notebook 任务，展示已创建的 Notebook 任务列表，并包含列表的查询功能。如下界面：



2.点击创建 Notebook，即可进入 Notebook 任务创建界面，如下所示：

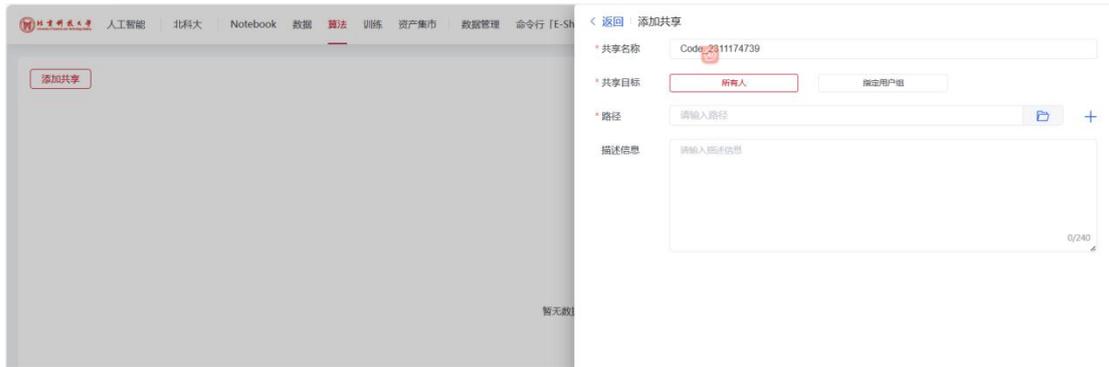


3.同理，选择导航栏数据、算法、训练，即可进入界面创建自己所需的功能。在资产集市模块可以添加共享的数据等文件。如下所示：

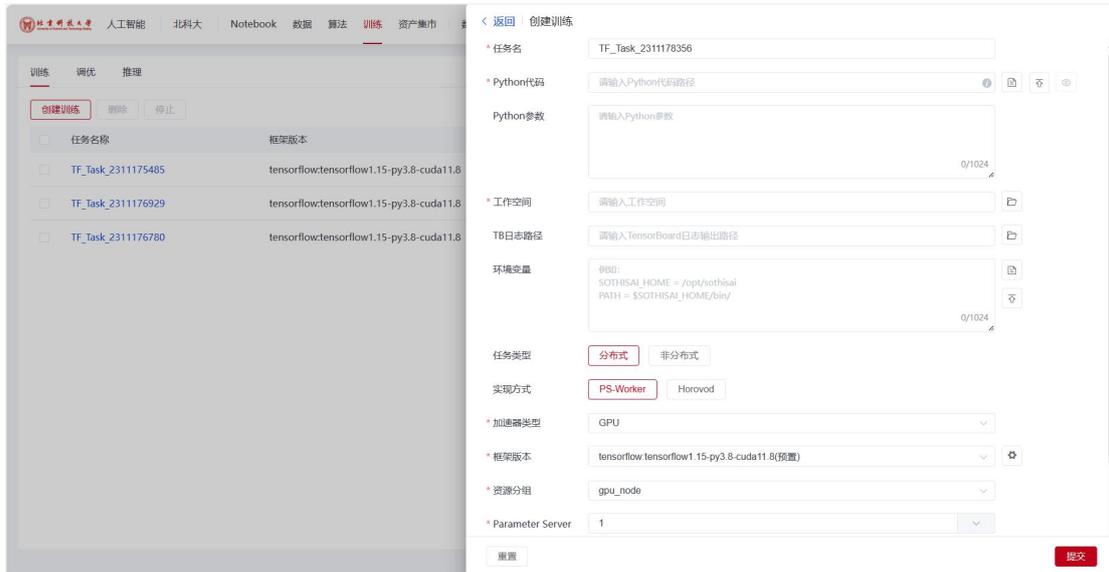
添加数据集：



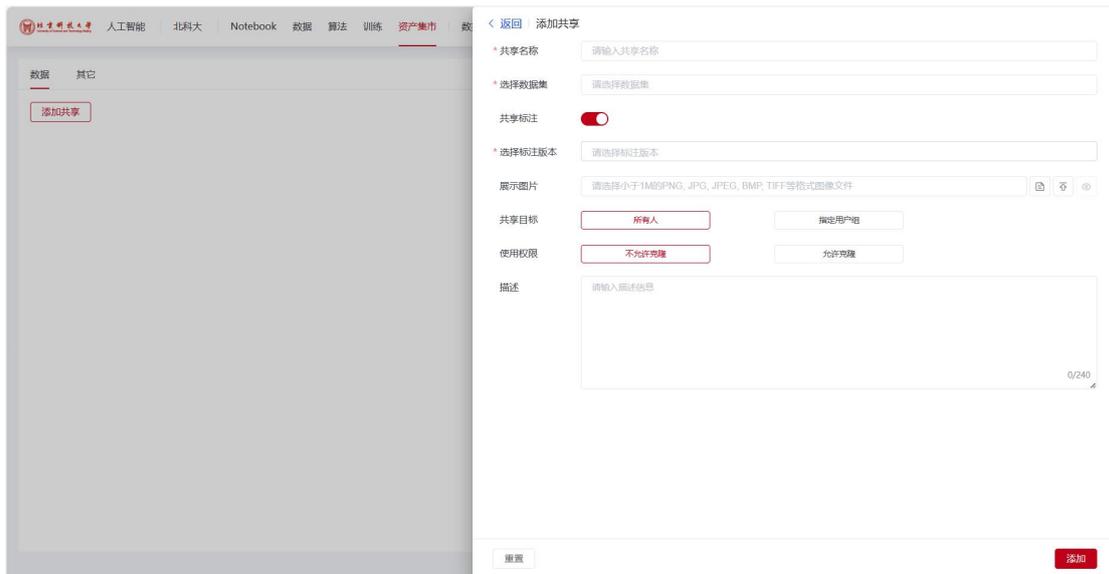
4.添加共享算法：



5.创建训练、创建调优、创建推理：

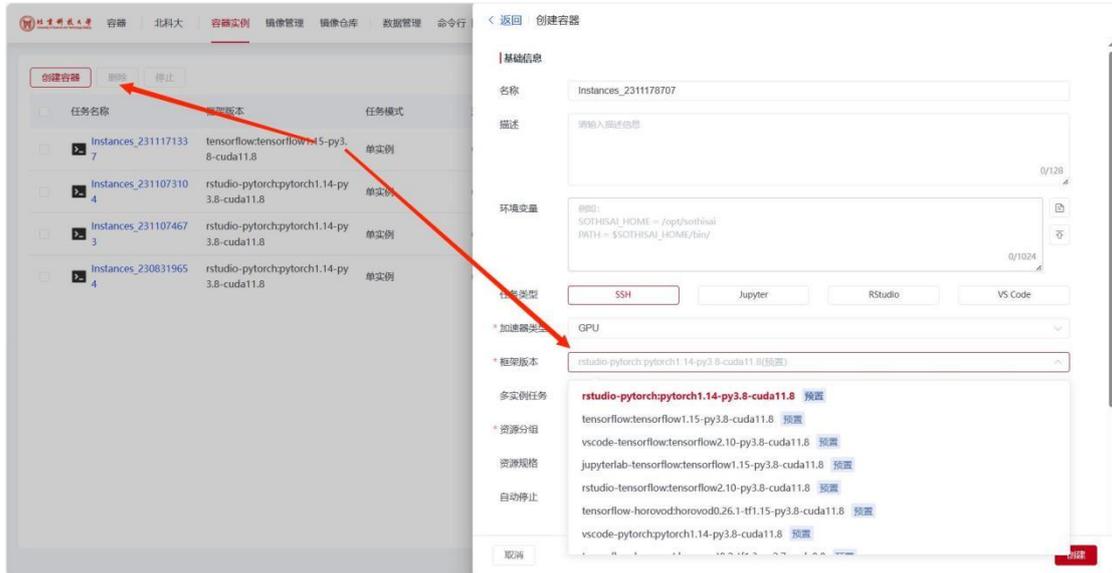


6.平台还支持共享文件功能，在此可以添加共享文件等。

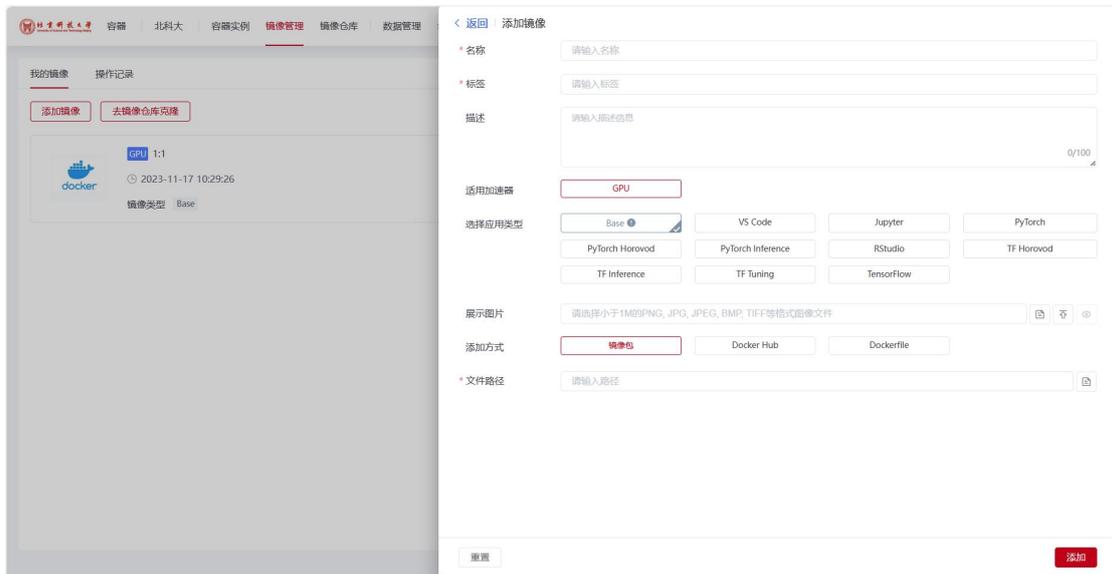


3.1.2 容器功能模块

1. 点击容器服务进入容器示例管理页面，页面展示所创建的所有容器列表，平台在框架版本，为大家提供一些模板镜像，可供大家使用，如下所示：



2. 在镜像管理界面，可自己镜像管理添加自己创建好的镜像，上传方式支持多种类型，可自行选择，创建完成后，可在容器创建框架版本中选择自己添加的镜像创建容器。

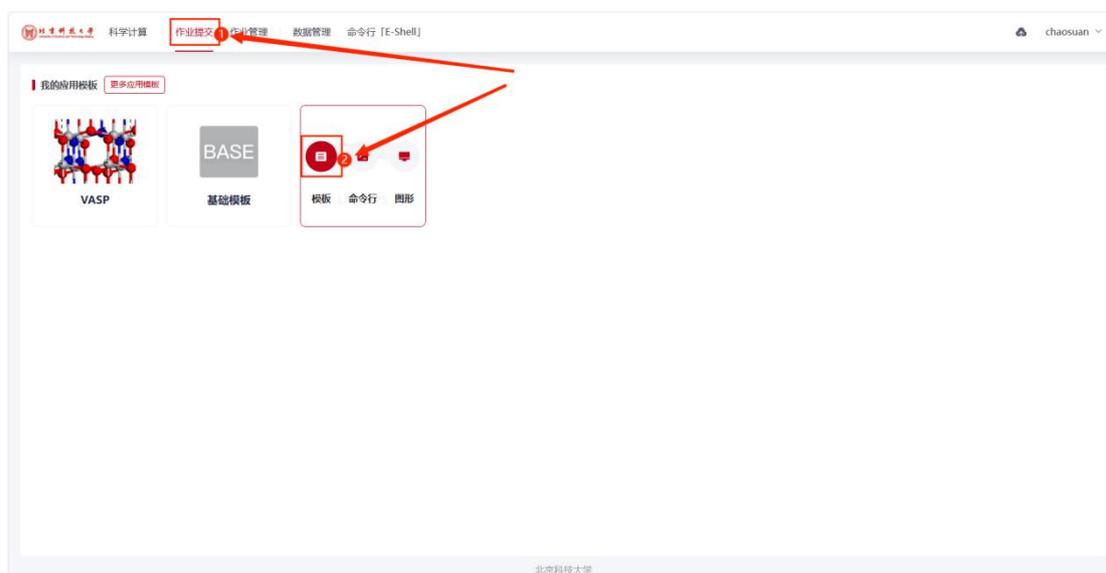


3. 镜像也可以在平台进行共享，镜像仓库共享自己创建的镜像，可指定共享目标，如下所示：

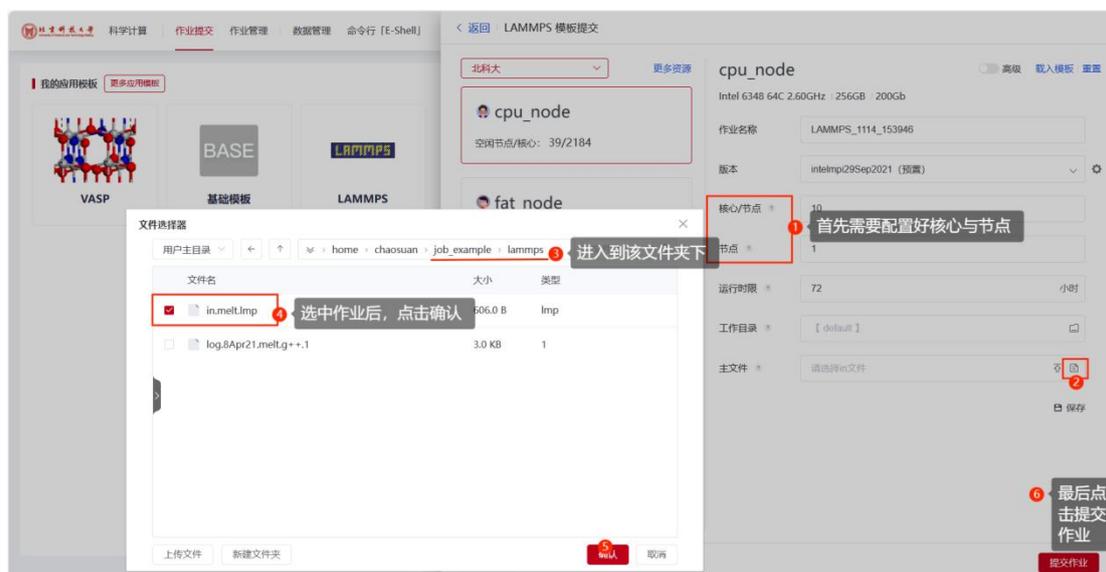


3.1.3 真实作业案例

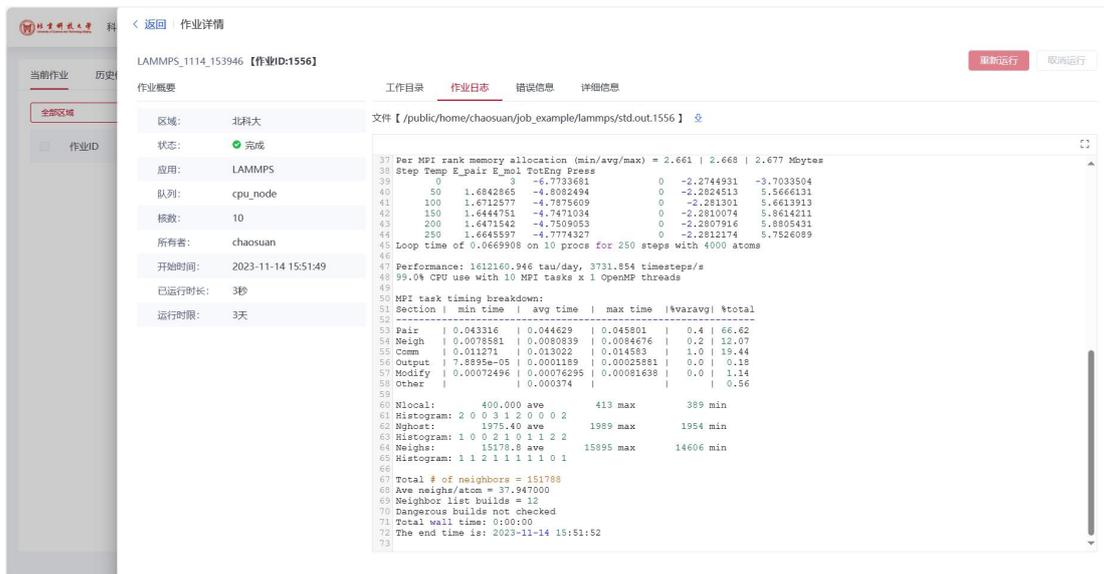
1. 首先进入到作业提交界面，鼠标移动到 LAMMPS 应用，选择模板提交作业，如下图所示：



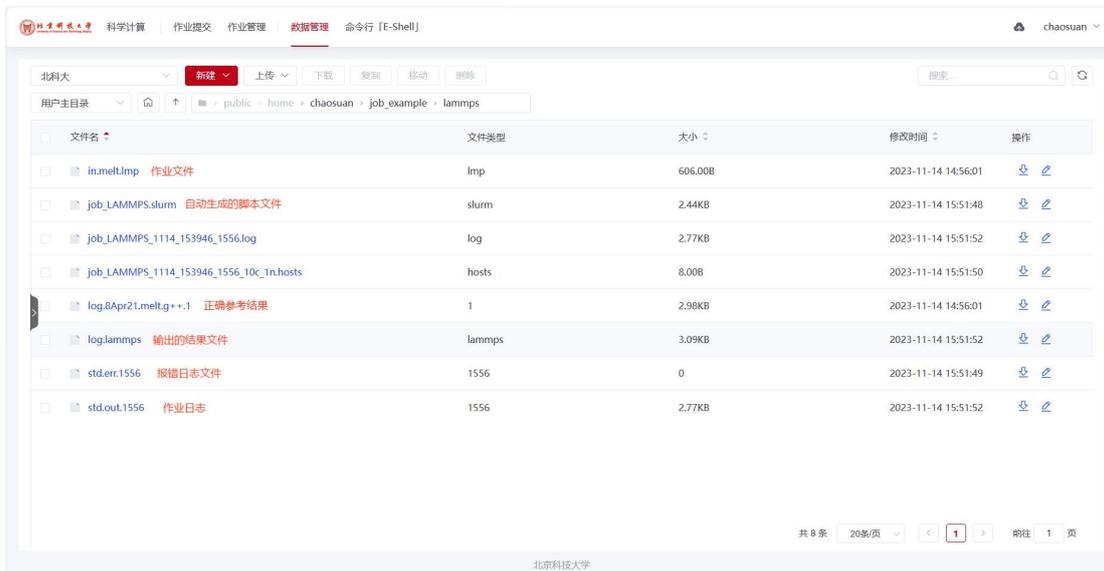
2. 点击模板提交之后，会进入作业提交界面，配置好核心与节点数量，接着按照标识选择提交的作业（在用户主目录下，为大家提供一个真实作业案例），进入到标识下选中 `in.melt.lmp` 文件后，选择确认后，点击提交作业即可，如下图所示：



3.提交作业后，在作业管理界面可以查看作业详情，如下图所示：



4.在文件管理界面，可查看提交作业自动生成的脚本、报错日志、作业运行完生成的日志文件等，如下图所示：



输出结果对比正确参考结果即可验证以上操作是否正确。

注：此作业案例由冶金学院李正韬提供。

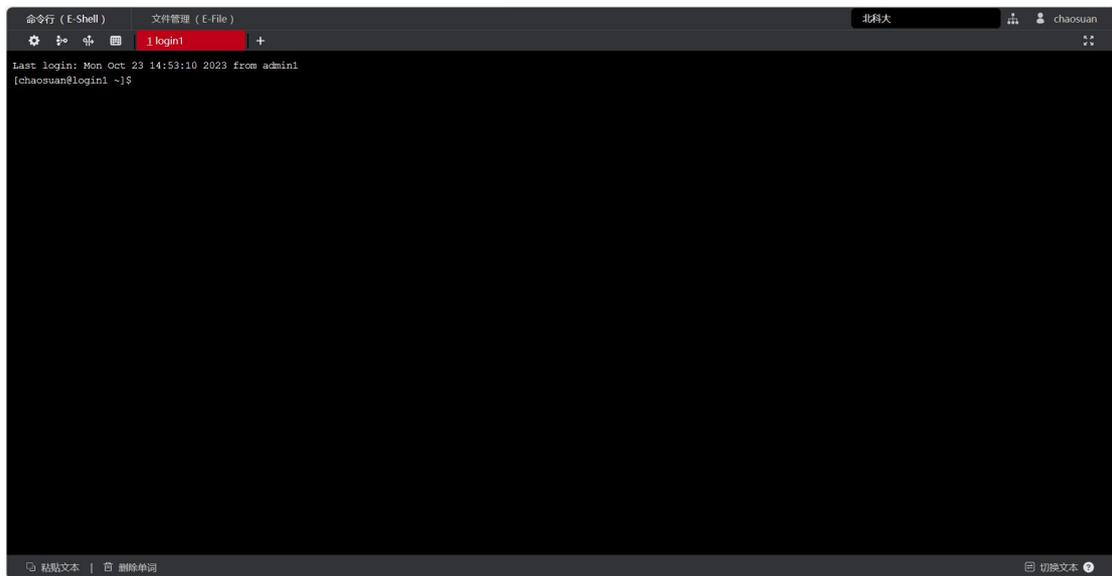
3.2 命令行提交

命令行提交作业使用的是 `slurm` 命令集群调度系统，方便习惯于通过命令行进行作业提交和管理的高级用户在 Web 界面进行快速操作的可能。

点击设置按钮 ，可以设置您的主题、字体及字号大小。我们在调度器命令  和快捷键  中提供了 `slurm` 常用命令和组合键快捷操作以便使用。粘贴文本按钮  粘贴文本功能请注意浏览器的剪切板权限提醒，首次选择允许后即可使用。删除单词按钮  删除单词功能可删除当前光标到最近空格的字符。

可按照如下步骤进行操作：

1. 点击导航栏的命令行 `命令行 [E-Shell]`，进入 E-Shell 控制台，如下图所示：



可通过命令 `sbatch` 提交作业，先进入脚本目录下，然后运行脚本命令。一个单的例子提供给大家：

2. 假设我们的计算过程为：在计算节点上运行 `date` 指令，那么就可以这么编写作业脚本；首先，创建一个名为 `time` 的 `.sh` 文件，然后通 `vi` 编辑 `time.sh` 脚本的内容，如下所示：



3.进入到 time.sh 文件之后，进行编写输出时间的脚本内容，如下所示：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J test
#SBATCH -p cpu_node
#SBATCH -N 1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH --time 72:00:00
#SBATCH --comment=test
#SBATCH -o std.out.%j
#SBATCH -e std.err.%j

date
```

注：进入到文件后，按下字母 i 即可进入编辑模式，编辑好需要的内容后，按 Esc 按键即可退出编辑模式，此时同时按下 Shift+; 在左下角会出现：表示，这时只需输入 wq 按下回车键，即可保存并退出 time.sh 文件。

```
#!/bin/bash
#!/bin/bash
#SBATCH -J test          #-J参数用于指定作业名称，即test
#SBATCH -p cpu_node     #-p参数用于指定作业提交的分区，即使用cpu完成这个脚本
#SBATCH -N 1            #-N参数用于指定所需的节点数，即1个节点
#SBATCH --ntasks-per-node=1  #--ntasks-per-node参数用于指定每个节点上所用的核心数量，即1个核心
#SBATCH --time 72:00:00  #--time参数用于指定作业的运行时间限制，即最长运行时间为72小时
#SBATCH --comment=test   #--comment 参数用于指定作业的注释或描述信息，可以理解为备注使用的应用
#SBATCH -o std.out.%j    #-o 参数用于指定标准输出的文件名，%j 是一个Slurm变量，表示作业ID。这里将标准输出重定向到名为
"std.out.<作业ID>" 的文件
#SBATCH -e std.err.%j   #-e 参数用于指定标准错误输出的文件名。同样使用了作业ID变量，将标准错误输出重定向到名为
"std.err.<作业ID>" 的文件

date
```

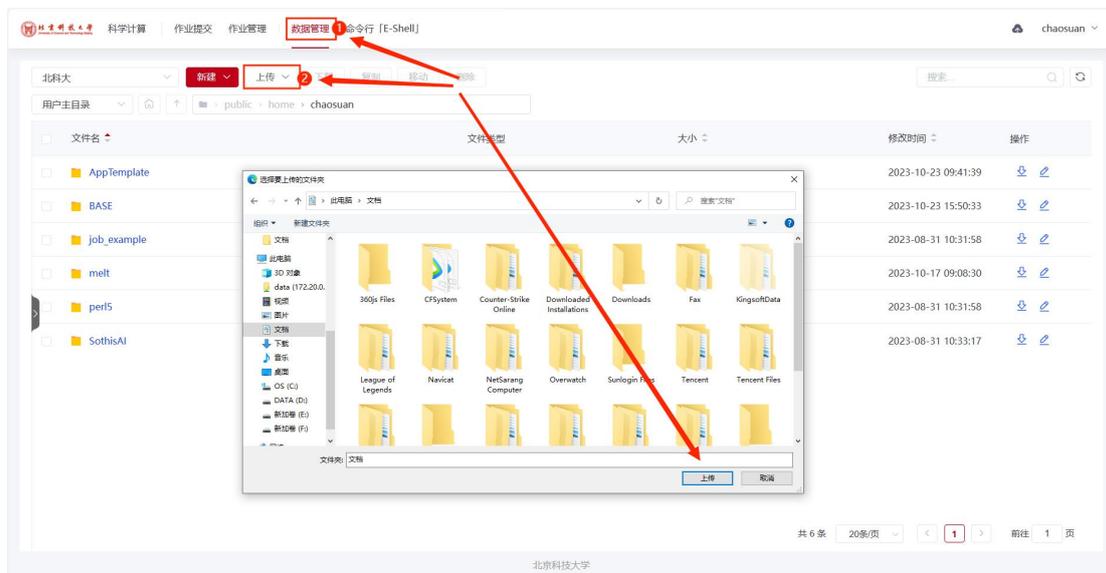
4.此时我们只需提交作业即可得到结果，通过 ls 查看新生成的文件，使用命令 cat std.out.1506 查看作业输出情况，输出结果为脚本运行结束时间，即为正确输出，如下所示：

```
[chaosuan@login1 ~]$ ls
AppTemplate  BASE  lib  melt  perl5  SothisAI  std.err.1506  std.out.1506  time.sh
[chaosuan@login1 ~]$ cat std.out.1506
Thu Nov 9 14:47:53 CST 2023
[chaosuan@login1 ~]$
```

3.3 文件传输与下载

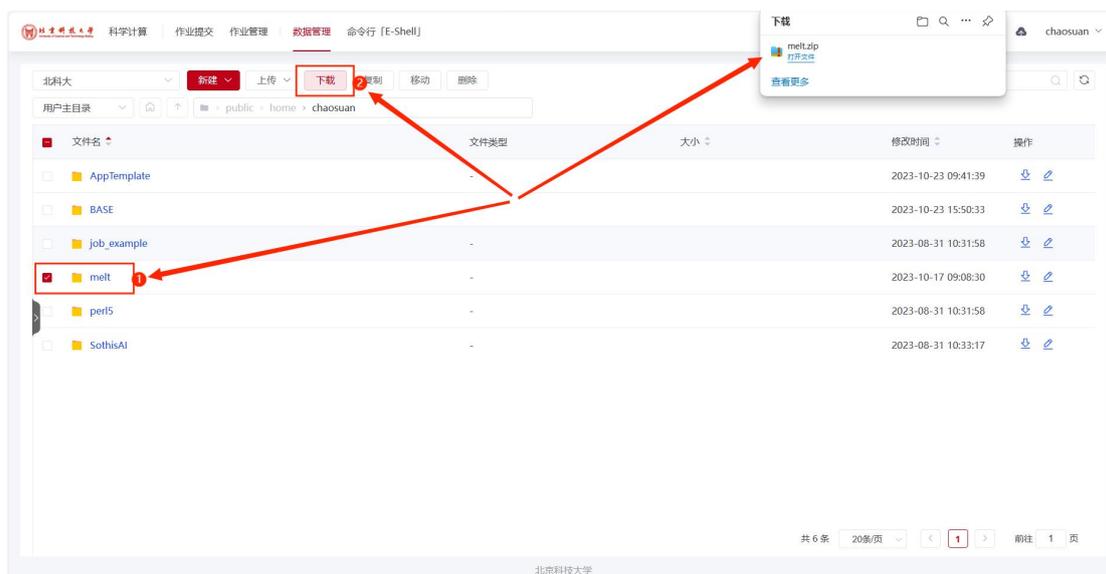
3.3.1 文件传输

在导航栏数据管理>文件管理(E-File)页面，点击“新建”来创建文件或文件夹，也可以点击“上传”选择自定义目录，然后点击“打开”上传文件，如下图所示：



3.3.2 文件下载

在数据管理>文件管理(E-File)页面，首先选中要下载的文件或文件夹，然后点击下载，即可将文件或文件夹下载到本地（文件夹会以压缩包的形式下载到本地），如下图所示：



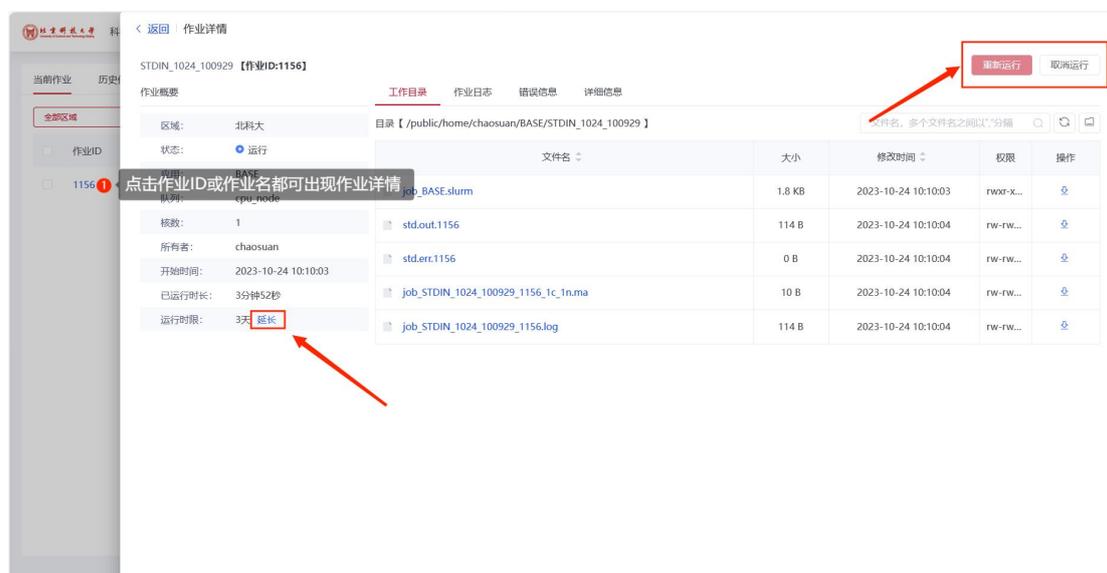
4 作业管理

1.用户可点击当前作业，来查看当前作业运行状态，并可按状态、队列、作业名、作业 ID 进行作业搜索查找。作业列表每隔 30s 刷新一次。



2.点击当前作业栏，可查看作业详情或下载作业的工作目录、作业日志、错误信息和详细信息等。作业详情中支持对当前正在运行作业重新运行、取消运行，也可以手动延长运行时限。

如下图所示：



3.另外，工作目录、作业日志、错误信息也可以在当前作业的操作栏中点击查看：



4.历史作业与当前作业功能相同，也可按作业名、作业 ID、状态、应用、队列进行搜索查找，也可查看历史作业的工作目录、作业日志、错误信息、详细信息等作业详情。组管理员可选择点击查看组成员的历史作业列表及详情。

作业ID	作业名	所有者	应用	队列	区域	结束时间	运行时长	状态
1144	STDIN_1023_155031	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 16:39:15	8分钟20秒	完成
1143	STDIN_1023_155031	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 16:34:21	8分钟21秒	完成
1141	STDIN_1023_155031	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 16:32:25	8分钟21秒	完成
1140	STDIN_1023_155031	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 16:26:36	8分钟21秒	完成
1142	STDIN_1023_155031	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 16:24:20	0	失败
1139	STDIN_1023_155031	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 16:18:00	0	失败
1138	STDIN_1023_155031	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 16:17:02	0	失败
1137	STDIN_1023_155031	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 15:58:55	8分钟21秒	完成
1136	STDIN_1023_153234	chaosuan	BASE	cpu_node	北科大	2023-10-23 15:41:47	8分钟21秒	完成

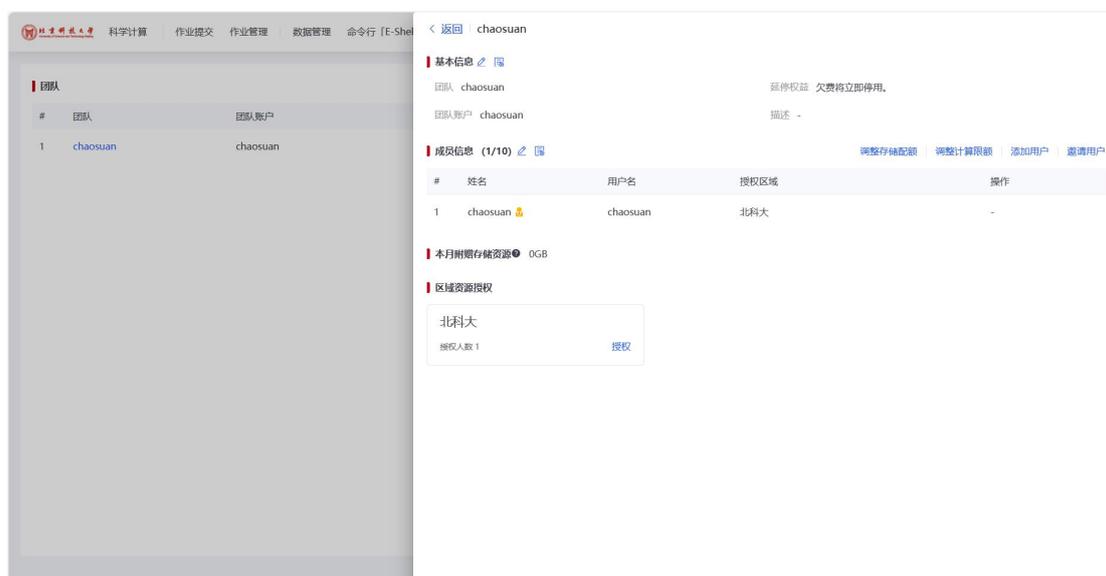
5 用户中心

5.1 团队

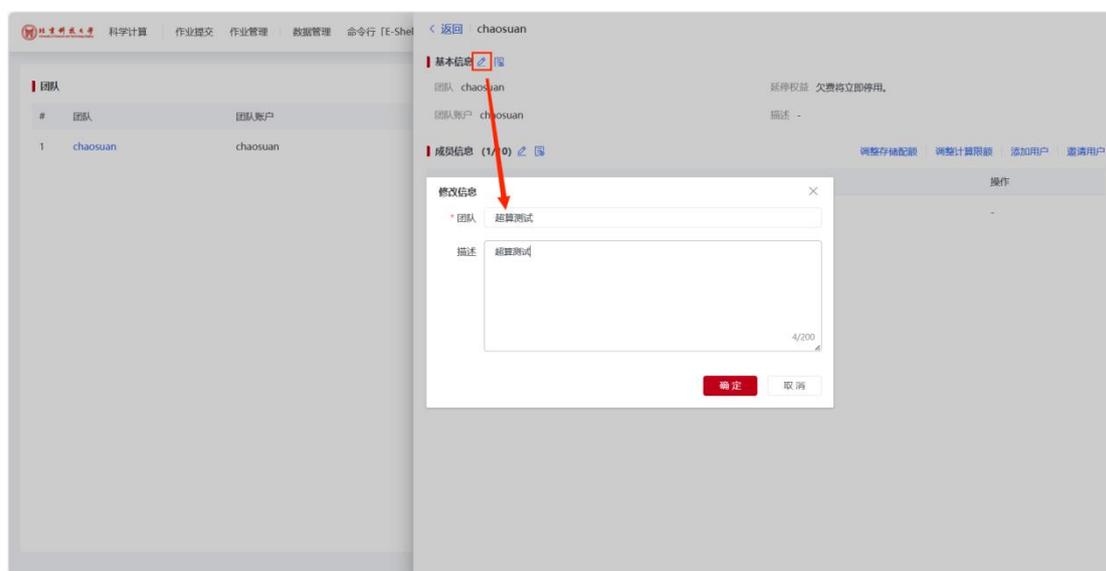
1.团队管理员会对应一个团队账户，用来管理团队账户、成员等相关信息；已授权绑定团队的用户。

#	团队	团队账户	人数	团队管理员	授权资源
1	chaosuan	chaosuan	1	chaosuan(我)	北科大

2. 点击团队名称，可以查看已有的团队列表，并支持团队管理员进行用户基本信息修改，为团队添加新用户，邀请已有用户以及分配存储和调整授权。



3. 该页面支持修改团队名称，如下图所示：

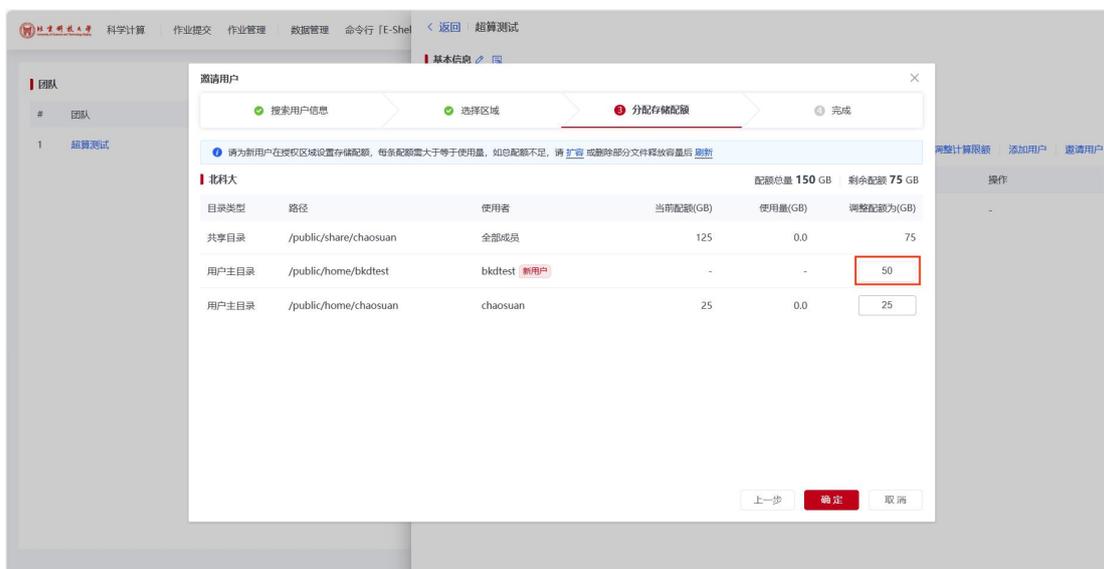


4.为团队“邀请已有用户”（已有用户指已经注册了（高性能计算平台的用户）

- 1) 选择添加已有用户，根据提示在搜索框中输入“用户名”；
- 2) 用户组可以对新添加的用户进行区域授权；
- 3) 完成填写后，点击“搜索”，找到需要邀请的用户，选中用户后，点击下一步，按下图操作：



5.选择分配的区域资源后继续点下一步，可以为新邀请的用户分配存储资源，如下图所示：



5) 分配完毕后，点击确定即可完成用户邀请。

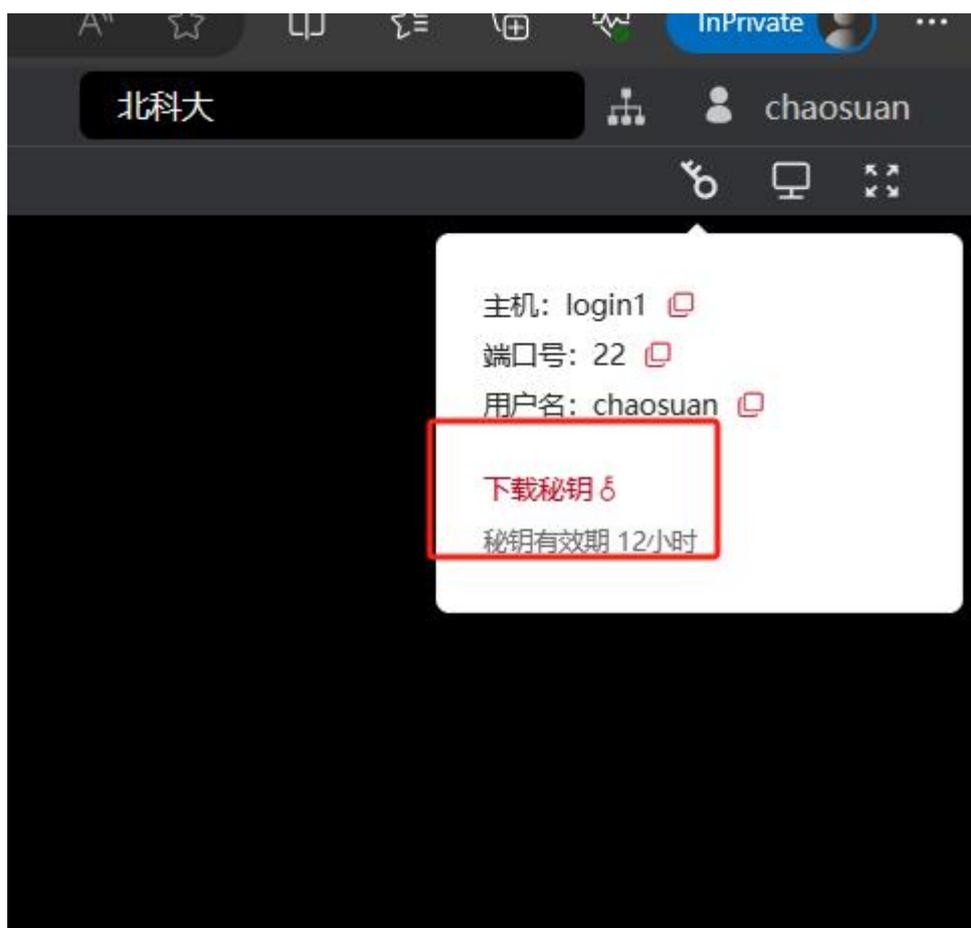
6.团队管理员可以查看团队成员的当前作业情况、历史作业情况和消费明细，还可以移除团队成员：



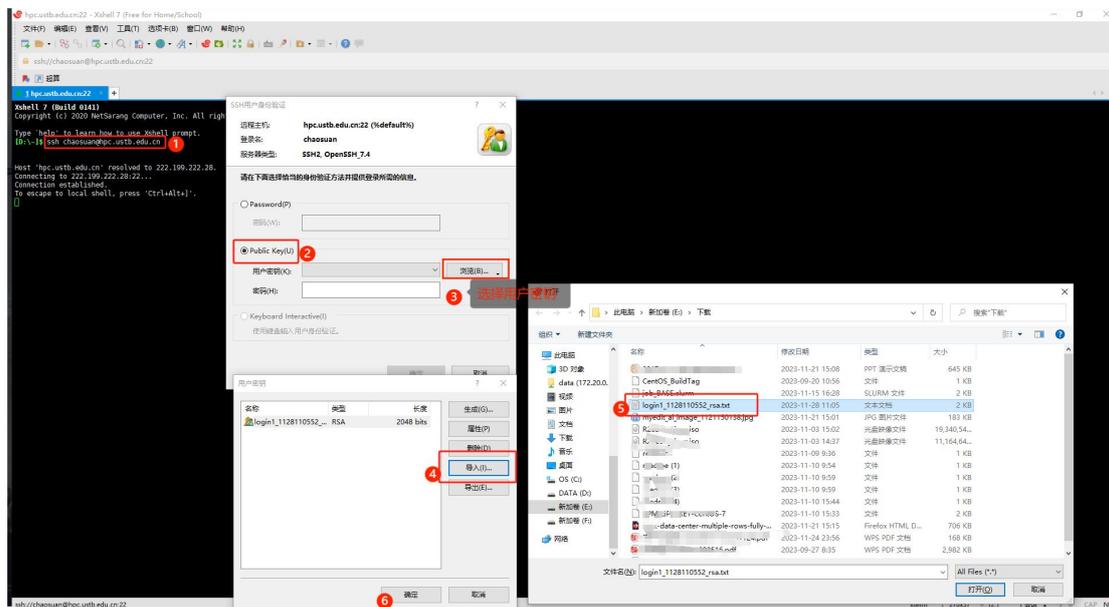
6.远程 shell 连接

1.xshell 连接

1.以 xshell 为例，首先需要打开高性能计算平台的 webshell，下载秘钥如下图所示：



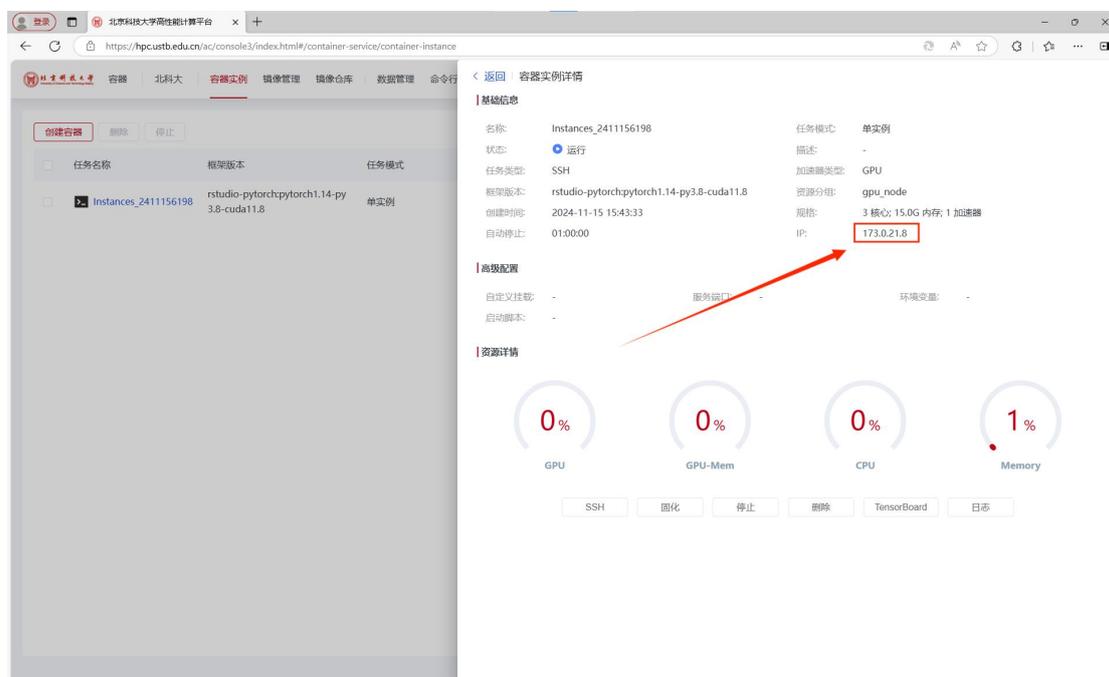
2.打开本地的 xshell 应用，按如图所示操作即可完成本机 shell 连接



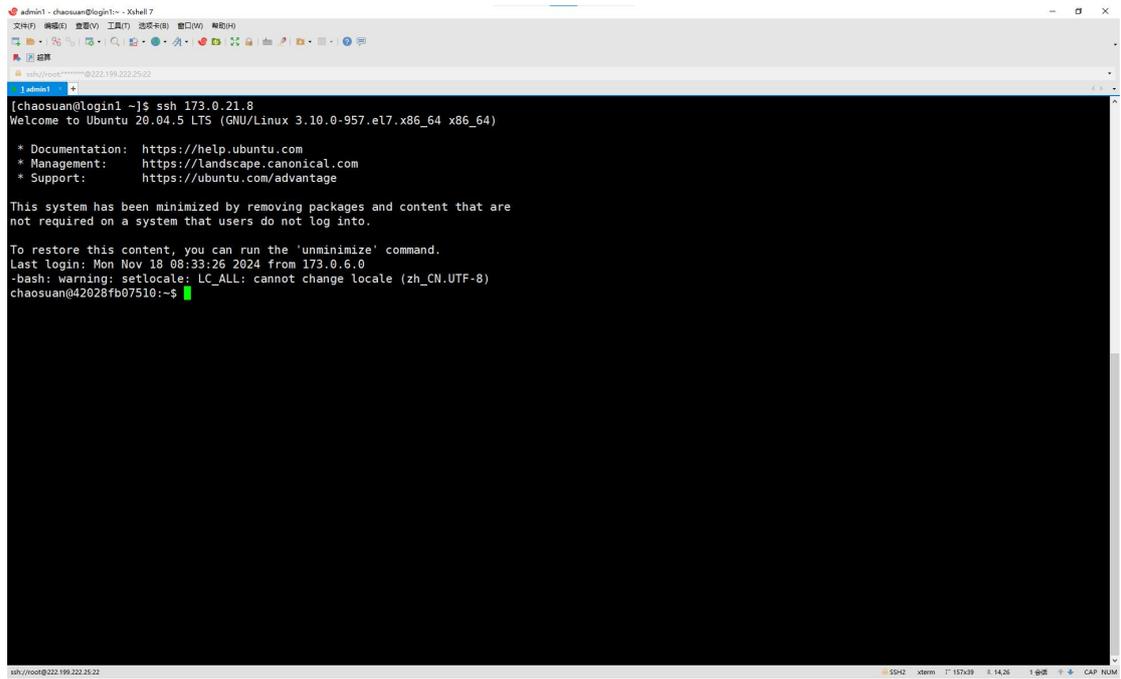
2.shell 连接容器

在超算平台除了通过平台 ssh 连接到容器内，我们还可以通过远程软件进行连接容器，具体操作如下：

1.首先需要完成创建容器，如下图找到容器的 ip



2.通过 xshell（其他已连接到集群的远程软件），以命令 `ssh ip` 连接到容器，如下图所示：



```
admin1 - chaosuan@login1 - Xshell7
[chaosuan@login1 ~]$ ssh 173.0.21.8
Welcome to Ubuntu 20.04.5 LTS (GNU/Linux 3.10.0-957.el7.x86_64 x86_64)

 * Documentation:  https://help.ubuntu.com
 * Management:    https://landscape.canonical.com
 * Support:       https://ubuntu.com/advantage

This system has been minimized by removing packages and content that are
not required on a system that users do not log into.

To restore this content you can run the 'unminimize' command.
Last login: Mon Nov 18 08:33:26 2024 from 173.0.6.0
-bash: warning: setlocale: LC_ALL: cannot change locale (zh_CN.UTF-8)
chaosuan@42028fb07510:~$
```