

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

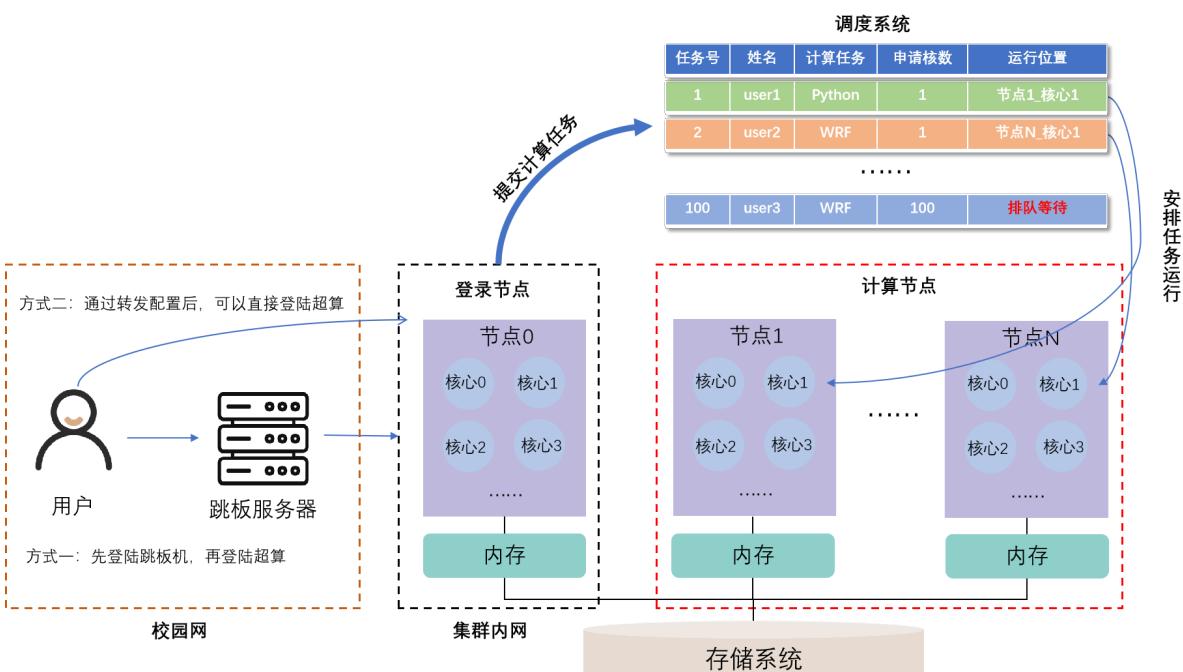
1.1 超算组成

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

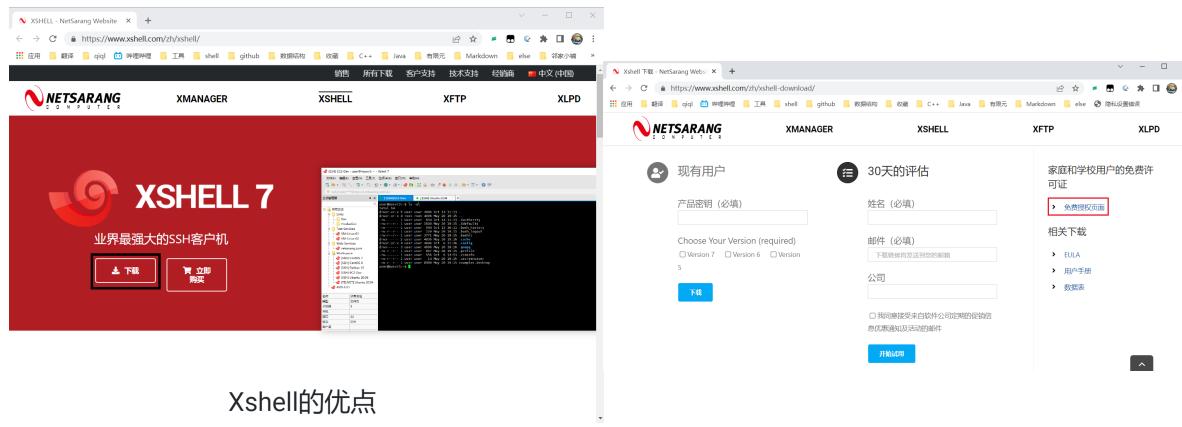
2.1 Windows系统下的集群登陆

2.1.1 集群登陆软件Xshell下载与安装

什么是 Xshell ?

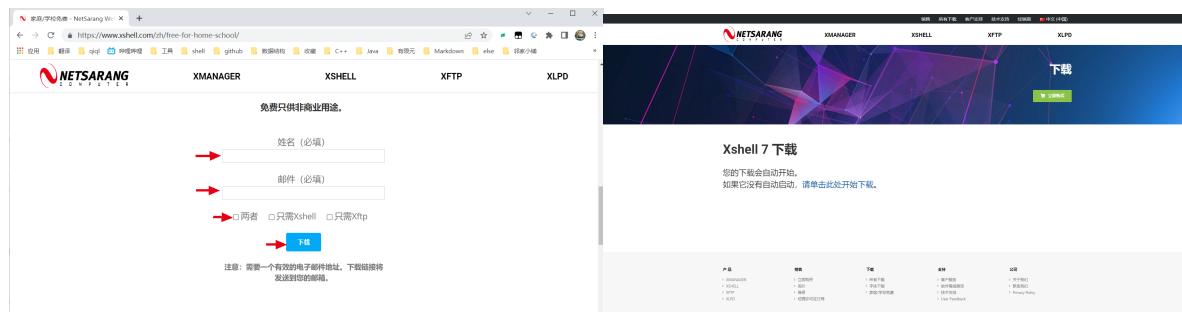
Xshell 是一个用来在 Windows 连接远程服务器的终端工具，Xshell 使用方便且免费。

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

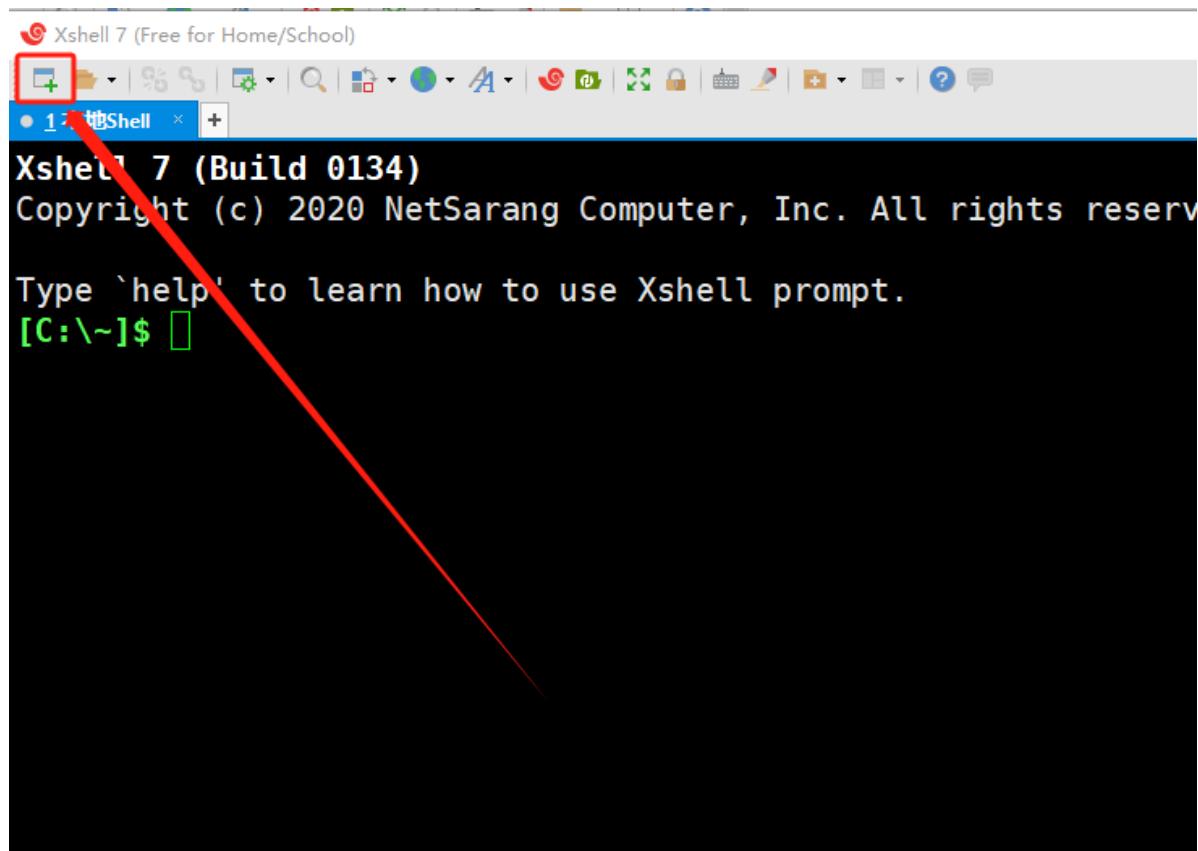


安装完成

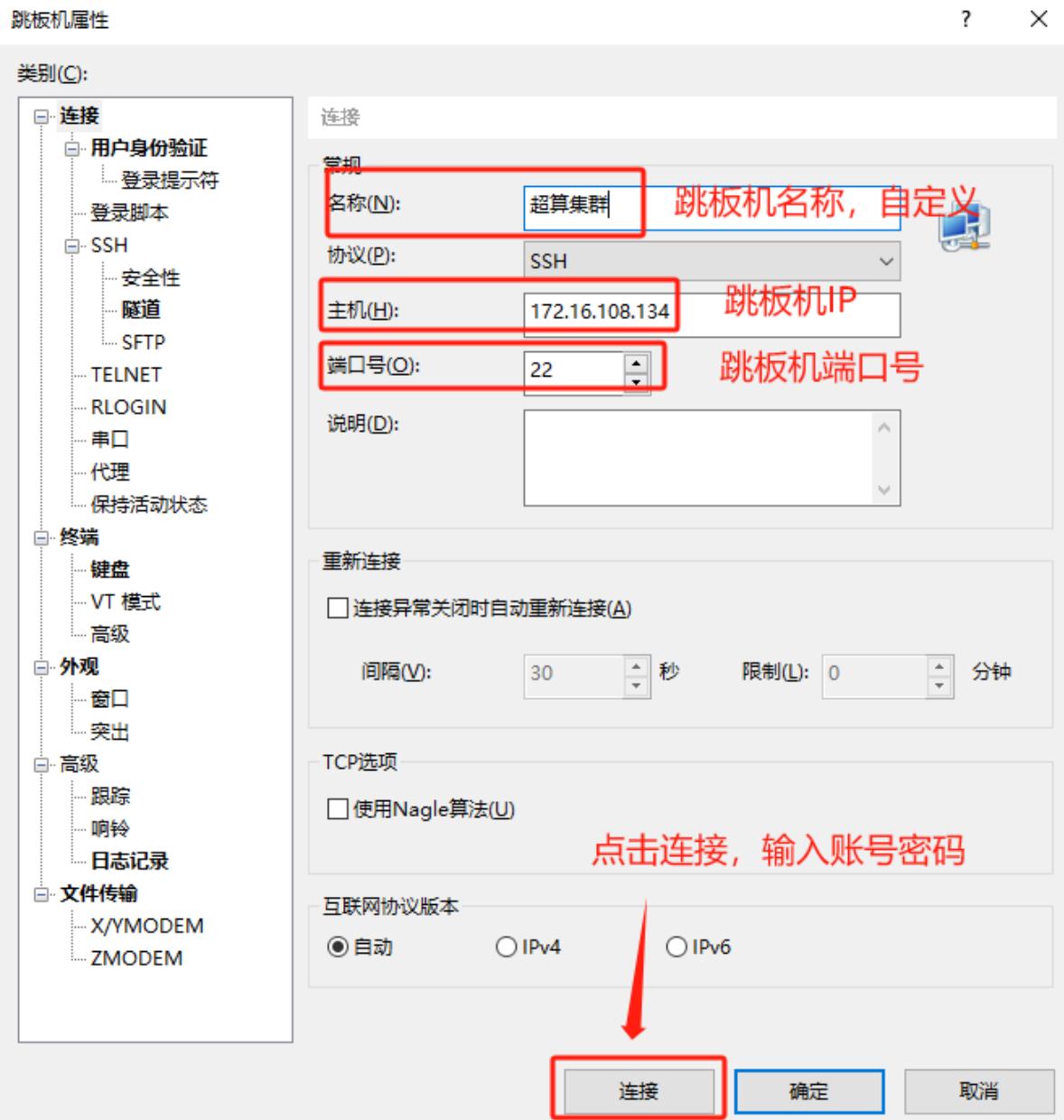


2.1.2 使用Xshell登陆集群

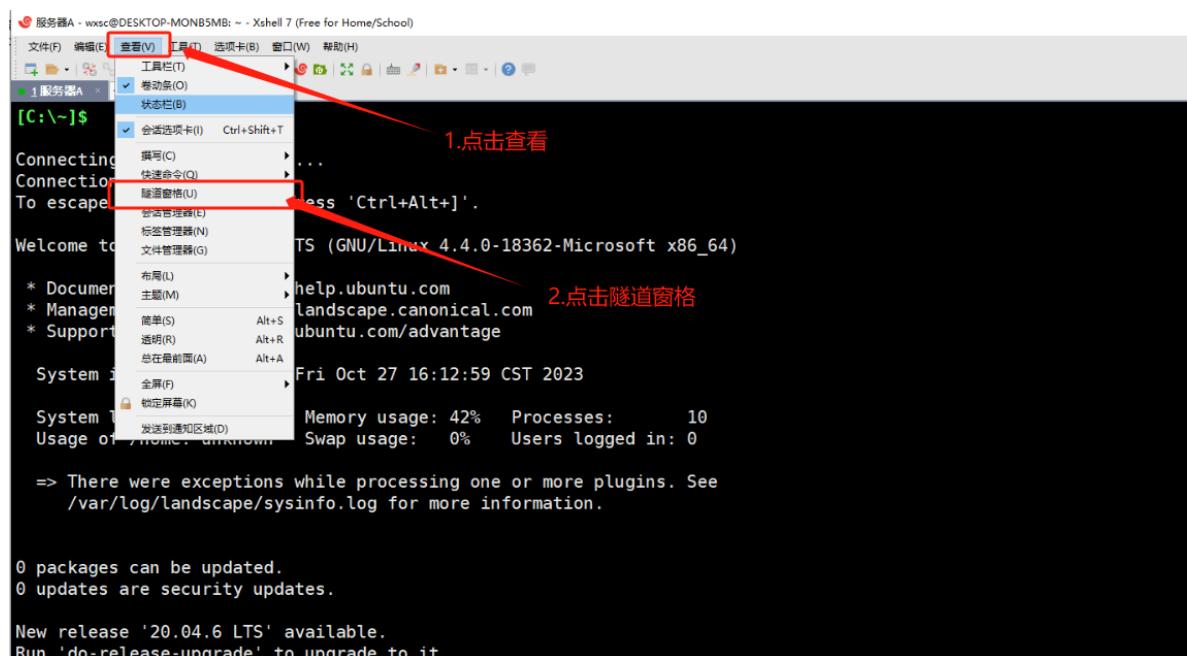
1. 打开xshell，点击左上角“新建”按钮



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”

Welcome to Ubuntu 18.04.2 LTS (GNU/Linux 4.4.0-18362-Microsoft x86_64)

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

System information as of Fri Oct 27 16:12:59 CST 2023

```
System load: 0.52      Memory usage: 42%    Processes: 10
Usage of /home: unknown   Swap usage: 0%     Users logged in: 0
```

=> There were exceptions while processing one or more plugins. See
/var/log/landscape/sysinfo.log for more information.

0 packages can be updated.
0 updates are security updates.

New release '20.04.6 LTS' available.
Run 'do-release-upgrade' to upgrade to it.

Last login: Fri Oct 27 16:12:59 from 192.168.167.13

wxsc@DESKTOP-MONB5MB:~\$

文件管理器 痕道列表 转移规则
源 目标

1.选择转移规则 2.右键空白区域 3.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

```
服务器A - wxsc@DESKTOP-MONB5MB: ~ - Xshell 7 (Free for Home/School)
文件(E) 编辑(E) 查看(V) 工具(I) 选项卡(O) 窗口(W) 帮助(H)
1 服务器A +
```

```
Welcome to Ubuntu 18.04.2 LTS (GNU/Linux 4.4.0-18362-Microsoft x86_64)

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

System information as of Fri Oct 27 16:12:59 CST 2023

System load: 0.52      Memory usage: 42%    Processes: 10
Usage of /home: unknown Swap usage: 0%     Users logged in: 0

=> There were exceptions while processing one or more plugins. See
/var/log/landscape/sysinfo.log for more information.

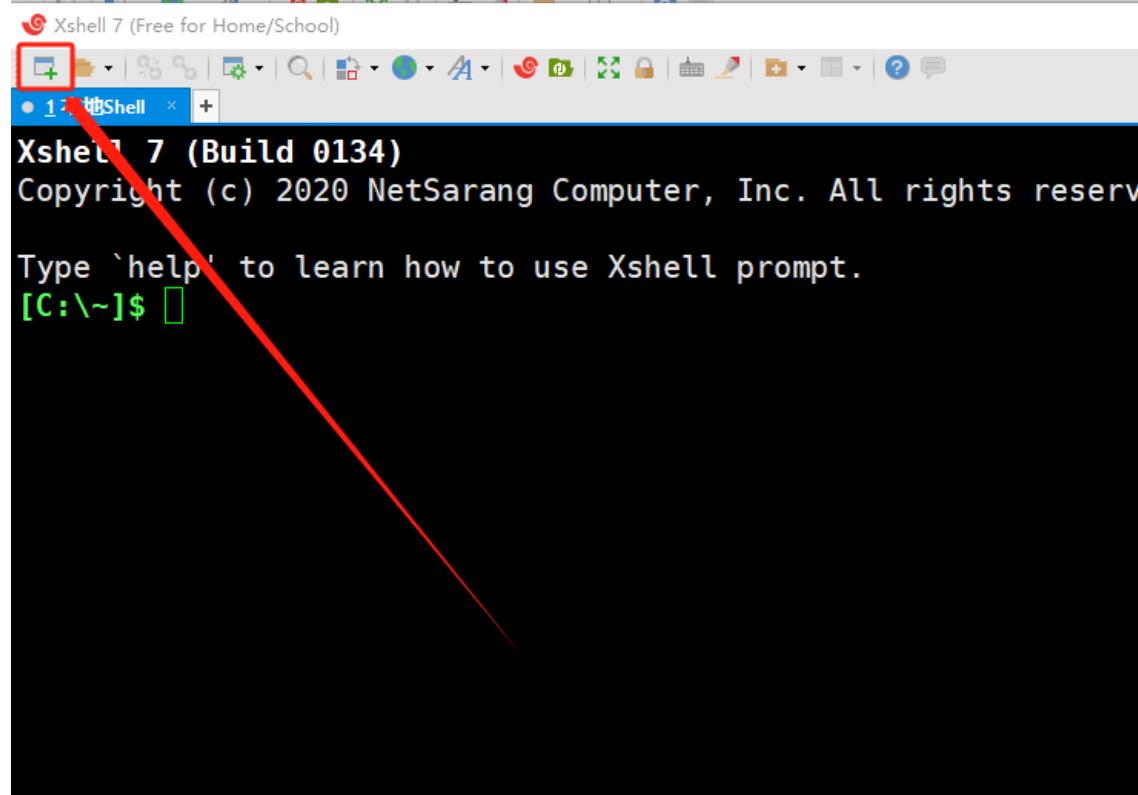
0 packages can be updated.
0 updates are security updates.

New release '20.04.6 LTS' available.
Run 'do-release-upgrade' to upgrade to it.

Last login: Fri Oct 27 15:48:47 2023 from 192.168.167.13
wxsc@DESKTOP-MONB5MB:~$
```

文件管理器	频道列表	转移规则		
源	目标	状态	方向	说明
local:1082	dynamic	打开	Dynamic	

4. 进行登陆节点的配置，进入Xshell首页，点击左上角“新建”按钮

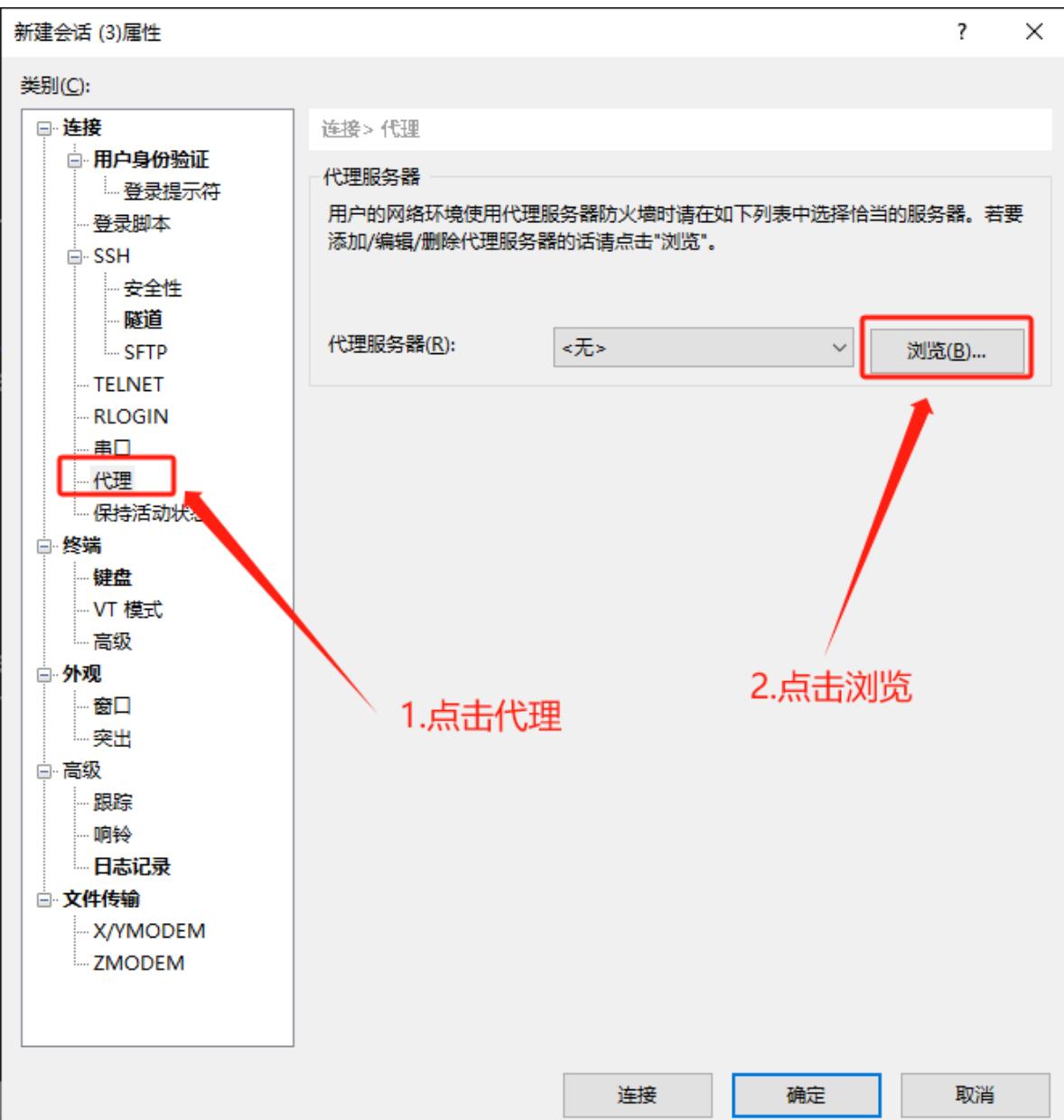


输入登陆节点的名称，IP: 192.168.10.15，端口: 22，名称可以任意

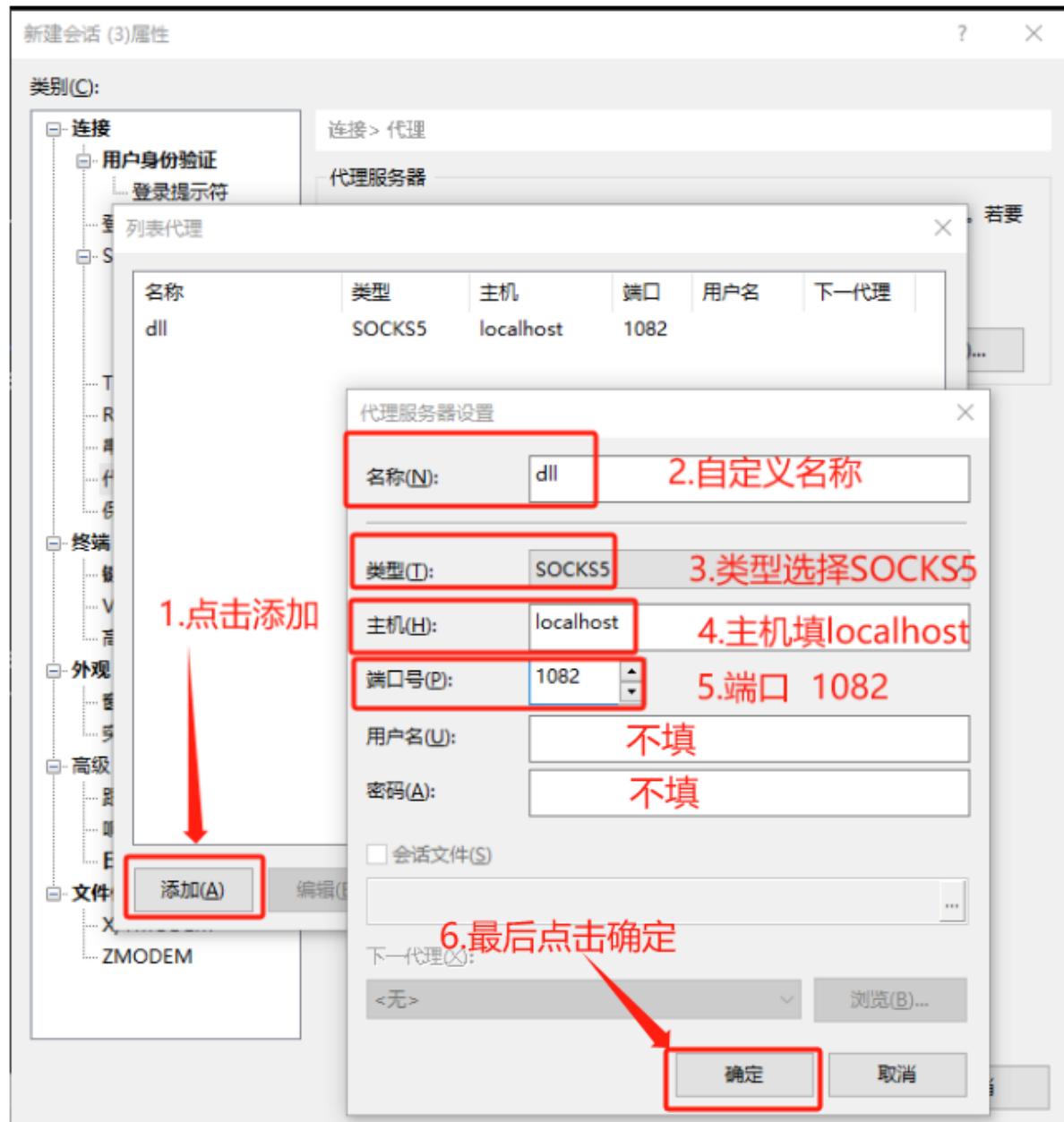
类别(C):



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

```

服务器A - wxsc@DESKTOP-MONB5MB: ~ - Xshell 7 (Free for Home/School)
[1] 服务器A + 

Type `help` to learn how to use Xshell prompt.
[C:\~]$ 

Connecting to 71.0.0.188:22...
Connection established.
To escape to local shell, press Ctrl+Alt+T.
Welcome to Ubuntu 20.04.6 LTS (GNU/Linux 5.4.0-102-generic x86_64)

 * Documentation:  https://ubuntu.com/doc/ubuntu/environme...
 * Management:    https://landscape.canonical.com/
 * Support:       https://ubuntu.com/support

System information as of Fri Oct 27 15:02:11 2023

System load:  Usage of /home/wxsc
              0.00% CPU usage by processes
              0 packages can be updated.
              0 updates are security updates.

New release '20.04.6 LTS' available.
Run 'do-release-upgrade' to upgrade to it.

Last login: Fri Oct 27 15:02:11 2023 from 192.168.167.13
wxsc@DESKTOP-MONB5MB:~$ 

```

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

```
Xshell 7 (Build 0134)
Copyright (c) 2020 NetSarang Computer, Inc. All rights reserved.

Type `help' to learn how to use Xshell prompt.

[~]$ Looking up proxy server 'localhost'...
Host 'localhost' resolved to ::1.
Connecting to ::1:1082...
Connection established.
To escape to local shell, press 'Ctrl+Alt+]'.

Last login: Fri Oct 27 14:35:48 2023 from [REDACTED]
[zhuangwt@psn002 ~]$
```

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

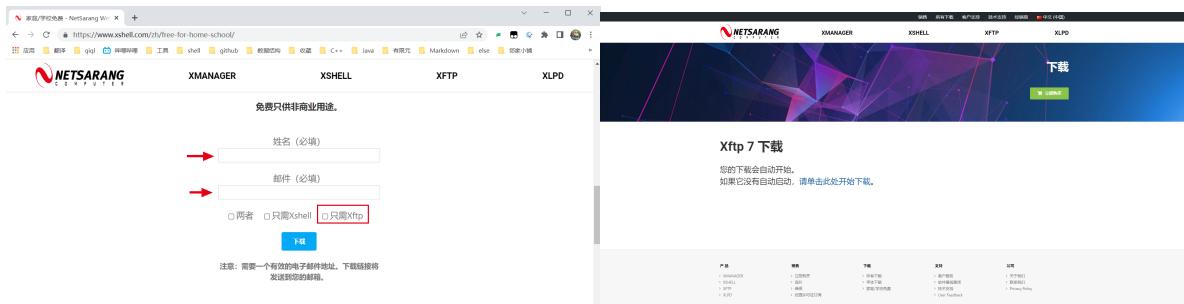
3.1.1 集群文件传输软件Xftp安装

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



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

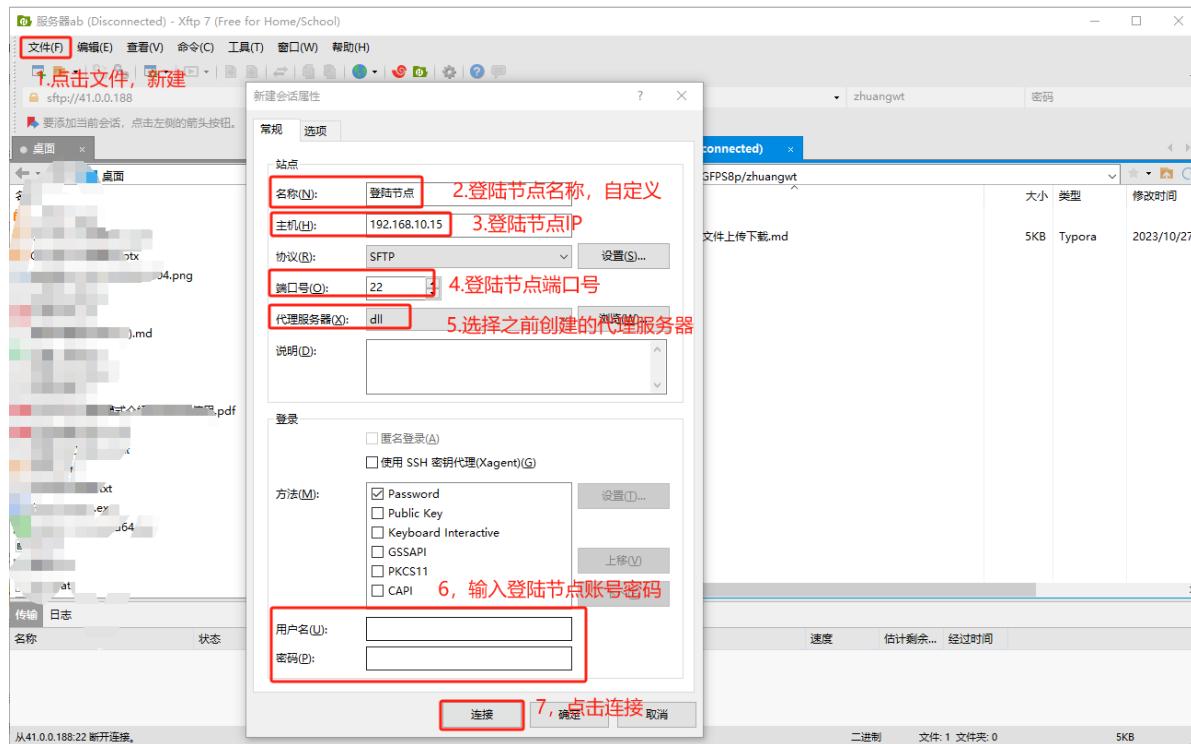


安装完成

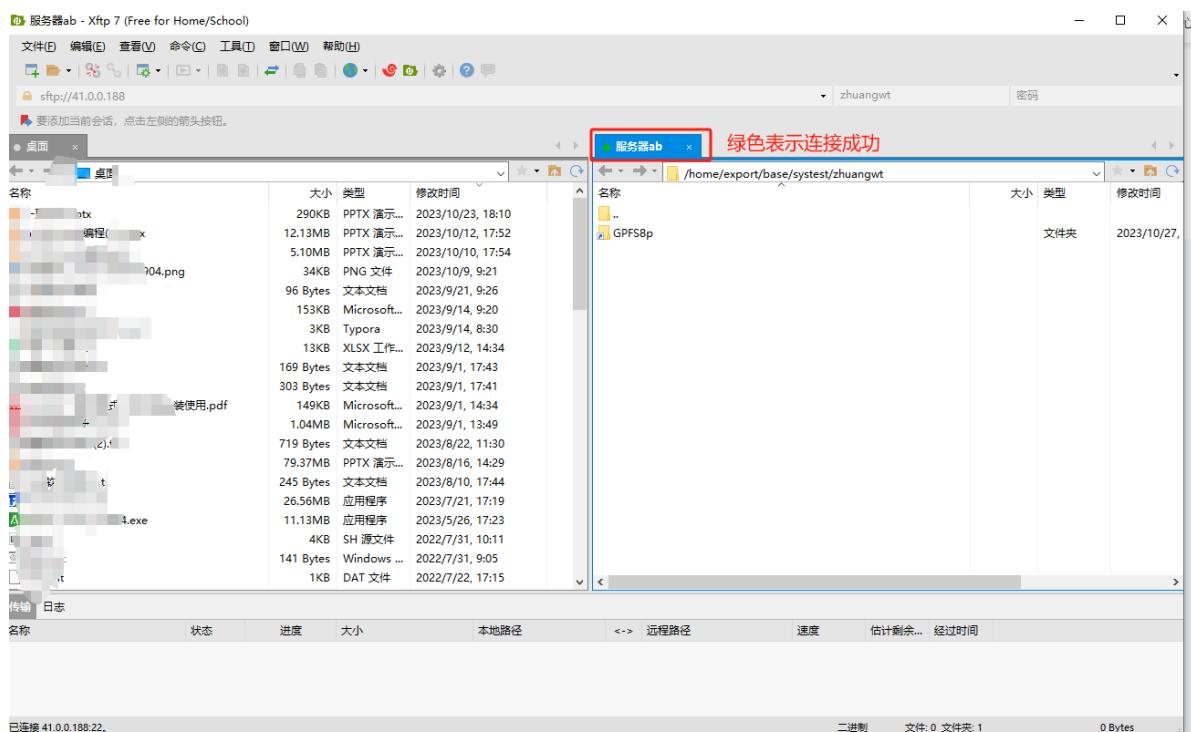


3.1.2 使用Xftp上传下载文件

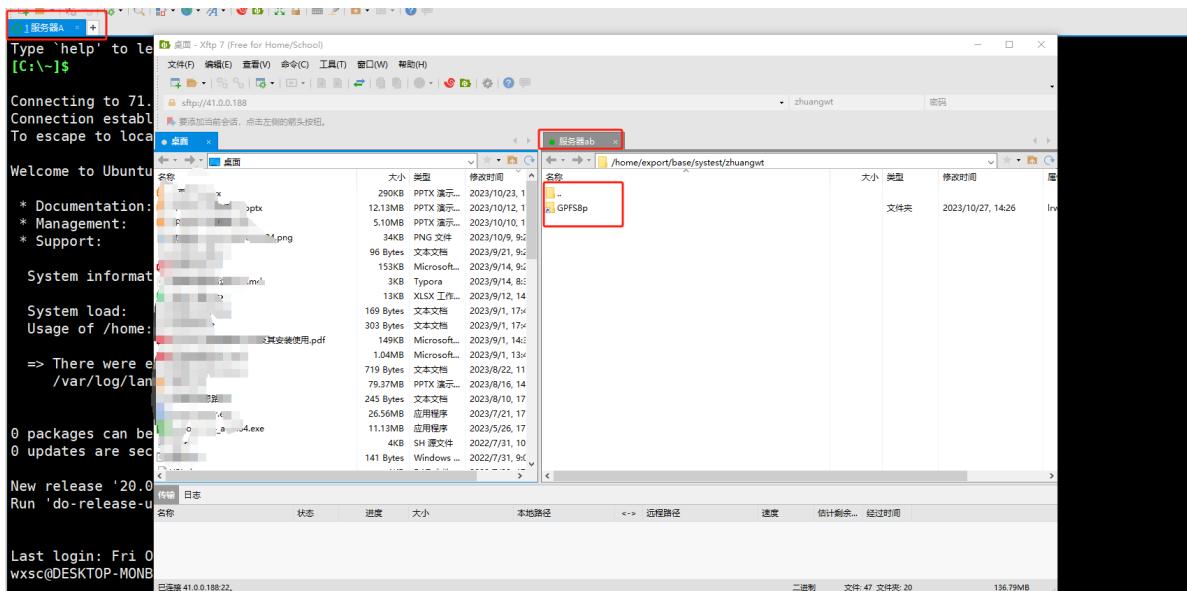
进入Xftp首页，点击左上角“文件”，点击“新建”，输入登陆节点的名称，IP：192.168.10.15，端口：22，名称可以任意，选择之前添加的代理服务器，输入登陆节点的“账号”和“密码”，点击“连接”，连接到登陆节点的文件系统



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
```

4.3 python程序运行教程

4.3.1 进入目录，上传文件

登陆到登陆节点后，进入到data目录：

```
cd ~/data
```

上传python文件：

使用 xftp 软件上传您需要运行的python文件到登陆节点

4.3.2 编写作业提交脚本

在python程序同级目录下，编写作业提交脚本：

```
vim run.sh
```

进入vim后，点击键盘上的字母 i 进入编辑模式，输入以下内容

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

module load Anaconda/miniconda3-23.1.0
module load cuda/12.1.0
source activate pytorch2.1.0_cuda12.1.0

python -u BipedalWalker2-sac.py
```

其中：

-p x86_64_GPU 表示将作业提交到 x86_64_GPU 队列

-n 1 表示申请一个核

-o %j.out 表示将作业的输出重定向到当前目录下的 %j.out 文件中，其中 %j 为作业提交之后的作业号，如作业号为1678，则输出文件即为 1678.out

-G 1 为作业申请一个 GPU

module load Anaconda/miniconda3-23.1.0 表示加载 miniconda3 模块

module load cuda/12.1.0 表示加载 cuda_12.1.0 模块

source activate pytorch2.1.0_cuda12.1.0 表示激活 conda 的虚拟环境，虚拟环境中的 pytorch 为2.1.0版本，cuda 为12.1.0版本，为作业运行做准备

python -u BipedalWalker2-sac.py 表示运行python程序，并将程序输出强制打印(不影响程序运行)

作业提交脚本编写完成后，操作保存并退出

4.3.3

作业提交脚本编写完成，使用如下进行作业提交操作

```
sbatch run.sh
```

作业提交后，终端会输出此次作业的作业号，

如：

```
Submitted batch job 2923
```

其中 2923 即为本次作业的作业号。

我们可以使用以下命令**查看作业运行情况**

```
tail -f 2923.out
```

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

The screenshot shows a web-based task billing system. At the top, it displays 'User Bill: dongrunmin'. Below this is a toolbar with buttons for 'User Bill' (selected), 'Message Center', and 'Export'. The main area has a dark header with tabs for different months from 2025-01 to 2024-08, followed by 'Custom Time' and 'Unbilled'. A date range selector shows '2024-01-10' to '2025-01-16'. Below the header are several search and filter fields: 'Job ID', 'User Name', 'Cluster', 'Cluster Account', 'Queue Name', 'Job Status', 'Billing Mode', and 'Billing Object'. There are also buttons for 'More Options' and 'Reset'. The bottom half of the screen is a table listing job details:

Job ID	User Name	Cluster	Cluster Account	Submission Time	Start Time	End Time	Run Time	Job Status	Queue	Billing Mode	Billing Object	CPU Core	CPU Runtime	GPU Card
30057	[redacted]	cluster	[redacted]	2024-06-11 21:13:44	2024-06-11 21:13:46	2024-06-11 21:13:58	12.00s	COMPLETED	gpu_ali	Hourly	GPU (Hour)	16	0.053	1
30056	[redacted]	cluster	[redacted]	2024-06-11 21:12:57	2024-06-11 21:12:58	2024-06-11 21:13:18	20.00s	COMPLETED	gpu_ali	Hourly	GPU (Hour)	16	0.089	1
27565	[redacted]	cluster	[redacted]	2024-05-16 18:54:18	2024-05-17 21:06:06	2024-05-17 21:09:45	1d13h13m39s	COMPLETED	gpu_ali	Hourly	GPU (Hour)	4	148.910	1
27564	[redacted]	cluster	[redacted]	2024-05-16 18:54:18	2024-05-17 21:09:06	2024-05-17 21:13:34	1d13h22m28s	COMPLETED	gpu_ali	Hourly	GPU (Hour)	4	149.498	1