
<版本 1.3>

中国科学院计算机网络信息中心

ScGrid 分中心所级中心资源使用指南

ScGrid

登录方式

请参考《中国科学院超级计算环境使用说明》，登录 <http://cscgrid.cas.cn/> “用户服务——培训/教程” 栏目即可下载。

使用其他超算服务器资源

需求说明

当用户常用的超算服务器资源比较紧张的时候,或者该超算服务器的类型不满足用户的计算需求时(比如需要使用 GPU 集群),用户需要使用额外的满足其需求的超算服务器资源。

用户使用指南

工作集群的选择

使用网络命令 `listnodes` 列出接入网络的所有集群资源信息。HPC 列为集群名字,如果该名字为红色,则说明该用户无权使用此集群资源,如果 UPDATE 一列为红色,则说明由于某些故障无法使用此集群资源。用户可以根据一些基本信息选择其可用的集群。

使用命令 `scelib -n softname` 可以查看哪些集群上安装有用户需要的编译器或者链接库,以及一些基本信息,比如 `scelib -n mkl`, 命令输出中 HOSTNAME 列是集群名字。用户如果有编程需要可以以此为依据选择其操作的集群。

使用命令 `listres software -a` 可以查看哪些集群上提供了给定名字的应用封装,以及可用队列等基本信息,比如 `listres gaussian -a`, 命令输出中 HPC 列是集群名字。用户如果需要访问已安装的商业/开源应用可以以此为依据选择操作的集群。

工作集群的设置

使用命令 `set HOST=hpcname` 设置工作集群。其中 `hpcname` 为选定的集群名字。

设定工作集群之后,所有的编译、网格文件操作命令、作业计算都将在设定的集群上执行,直至下一次变更工作集群设置。编译和作业提交/管理的方式请参考情景一和情景二,不同的是文件的操作和管理略有不同。

文件的传输和管理

在编译或提交计算任务之前,需要首先在登录的网格服务器上准备好需要的程序文件或者数据文件,然后将这些文件从网格服务器传输到工作集群上。上传使用的网格命令是 `sceput2`, 参数是需要传输的文件名字, 使用通配符*代表当前目录下所有文件(包含子目录), 传输的目的路径在工作集群上和当前工作路径相同(相对于用户主目录的路径)。由于不支持集群文件的编辑, 用户需要在登录的网格服务器上通过 `vi` 等 `linux` 命令对文件做必要的编辑, 修改之后使用命令 `sceput2` 上传。

工作集群上的文件原则上不需要用户显式的管理, 可以通过网格命令 `scels/scecat/scetail` 进行查看, 使用方式和 `ls/cat/tail` 等 `linux` 常用文件命令类似。当编译或者计算结束的时候, 用户往往需要查看结果文件, 可以通过 `scels` 查看产生的文件信息, 执行 `scecat filename` 或者 `scetail filename` 查看文件内容, 但是不支持集群文件的编辑; 这些网格文件命令在集群上的操作目录同当前工作路径相同(相对于用户主目录的路径)。

在计算结束之后, 用户可能需要将结果文件从工作集群上下载到登录的网格服务器上, 可以使用网格命令 `sceget2`, 参数为需要下载的文件名字, 下载的目的地址为当前目录。

如果计算的输入/输出数据量非常大, 甚至超过几百 GB, 不建议使用 `sceput2` 和 `sceget2` 命令, 请参考情景五。

实例流程

以计算化学软件 `Gaussian` 的使用为例, 说明如何在命令行环境中使用额外的超算服务器资源完成应用计算。

- 1、在主目录下创建目录 `projects/gaussian_test`。

```
[deepcomp7000@sce ~]$ cd projects/
[deepcomp7000@sce projects]$ mkdir gaussian_test
[deepcomp7000@sce projects]$ ls
F_InaFecI gaussian_test gromacs_test
```

- 2、通过 `scp` 协议客户端工具 `WinSCPPortable` 访问网格服务器, 将应用的数据文件 `methano.com` 上传至目录 `projects/gaussian_test`。

- 6、在项目的工作目录中，可以看到刚刚上传的输入文件，在执行计算之前需要把这些输入文件传输至工作集群上。传输使用网络命令 `sceput2`，该文件当前的工作目录是 `~/projects/gaussian_test`，传输的目的地址为工作集群服务器上的路径 `~/projects/gaussian_test`（与用户工作目录保持一致）。用户可以使用 `scels` 命令查看到传输的结果（该命令相当于在工作集群的 `~/projects/gaussian_test` 目录下执行 `ls`）。

```
[chemistry@sce gaussian_test]$ ls
methano.com
[chemistry@sce gaussian_test]$ sceput *
./methano.com                               100% 1055      1.0KB/s   00:00
File uploading, please wait.....
File transfer finished

[chemistry@sce gaussian_test]$ scels
Connecting, please wait.....(Press Ctrl+C to abort)
methano.com
```

- 7、准备好应用的输入文件之后，使用 `bsub` 提交作业，使用 `bjobs` 查看作业状态。

```
[chemistry@sce gaussian_test]$ bsub -W 10 -n 4 -o xn.out -e xn.err gaussian methano.com
scheduled res is: chemistry@default
gid is: 1276442909158216628, ujid is :236
Success!

[chemistry@sce sftp_test]$ bjobs
UJID   STAT   QUEUE          EXEC_HOST   JOB_NAME    SUBMIT      UPDATE
-----
236    DONE   default        chemistry   *sian1622   Jun 04 16:22 Jun 04 16:58
235    DONE   scgrid         deepcomp7000 *nacs1525   Jun 04 15:25 Jun 04 15:27
234    TERMINA* scgrid         deepcomp7000 *nacs1456   Jun 04 14:56 Jun 04 16:08
233    DONE   scgrid         deepcomp7000 *nacs1451   Jun 04 14:51 Jun 04 14:52
232    DONE   scgrid         deepcomp7000 *lmpi1407   Jun 04 14:07 Jun 04 14:09
231    FAILED scgrid_lo*     deepcomp7000 *eric1555   May 20 15:55 May 20 16:01
230    DONE   scgrid         deepcomp7000 *name1403   Apr 23 14:03 Apr 23 14:04
229    DONE   scgrid         deepcomp7000 *name1403   Apr 23 14:03 Apr 23 14:04
228    DONE   scgrid         deepcomp7000 *name1725   Apr 22 17:25 Apr 22 17:26
227    DONE   scgrid         deepcomp7000 *name1718   Apr 22 17:18 Apr 22 17:19
226    DONE   scgrid         deepcomp7000 *name1717   Apr 22 17:17 Apr 22 17:18
225    DONE   gput          GPU_secas   *eric1423   Apr 21 14:23 Apr 21 14:23
224    SUB_ERR* all           GPU_secas   *eric1421   Apr 21 14:21 Apr 21 14:21
223    DONE   scgrid         deepcomp7000 nyamber     Apr 07 14:57 Apr 07 14:58
222    DONE   scgrid         deepcomp7000 xx           Apr 07 14:41 Apr 07 14:43
221    DONE   scgrid         deepcomp7000 AMBER1556   Apr 06 15:56 Apr 06 15:57
220    FAILED scgrid         deepcomp7000 AMBER1541   Apr 06 15:41 Apr 06 15:44
219    FAILED scgrid         deepcomp7000 AMBER1538   Apr 06 15:38 Apr 06 15:39
218    DONE   default        chemistry   *name1606   Apr 01 16:06 Apr 01 16:07
217    DONE   default        chemistry   *name1606   Apr 01 16:06 Apr 06 14:55

Press any key to continue...
You have quit list.
```

- 8、使用 `scels` 查看工作集群上作业文件的输出情况。

```
[chemistry@sce gaussian_test]$ ls
methano.com
[chemistry@sce gaussian_test]$ scels
Connecting, please wait.....(Press Ctrl+C to abort)
methano.chk
methano.com
methano.log
xn.err
xn.out
```

- 9、使用 `scetail` 查看结果文件的部分内容。

```
[chemistry@sce gaussian_test]$ scetail methano.log
Connecting, please wait.....(Press Ctrl+C to abort)
025650,-0.00010471\\|@

KNOWLEDGE IS OF TWO KINDS: WE KNOW A SUBJECT OURSELVES OR WE KNOW
WHERE WE CAN FIND INFORMATION UPON IT.

-- SAMUEL JOHNSON
Job cpu time: 0 days 0 hours 1 minutes 9.1 seconds.
File lengths (Mbytes): RWF= 12 Int= 0 D2E= 0 Chk= 7 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 03 at Fri Jun 4 16:57:52 2010.
```

- 10、 使用命令 `sceget2` 将应用的结果文件 `methano.log` 传输到用户操作的网格服务器上。最后还需要使用 `scp` 协议客户端工具 `WinSCPPortable` 将文件从网格服务器下载到用户自己的工作机器上。

```
[chemistry@sce gaussian_test]$ sceget methano.log
File downloading, please wait.....

/SCGRID/sce/workspace/cn/xm/1275773166105624103/methano.log      100% 103KB 102.8KB/s  00:00
File transfer finished
[chemistry@sce gaussian_test]$ ls
methano.com  methano.log
```

ScGrid