
<版本 1.4>

中国科学院计算机网络信息中心

ScGrid 应用编写编译使用指南

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。

编写、编译和执行程序

需求说明

用户需要编写程序，或者安装/改造开源的程序；在编写或者修改程序之后，采用适当的编译器编译，并链接正确的程序库，形成可执行程序；最后以作业方式提交计算，并查看结算结果。

在超算服务器上，一般来讲，用户自编写的程序以并行程序为主。

用户使用指南

1、 创建工作目录，准备程序文件。

用户在主目录下创建程序的工作目录；如果事先有一个程序包，可以通过 scp 或者 sftp 协议传输到网络服务器的该工作目录下；用户可以通过 ls, cd, vi, head, tail 等 linux 常用的文件和目录操作命令处理程序文件。

2、 查看和设置编译环境（senv）

使用网络命令 scelib 可以查看到当前操作的超算服务器的编译环境信息。选项-h hpcname 查看给定目标集群的编译器和链接库安装信息，可用集群的名字（hpcname）可以通过网络命令 listnodes 查看，当前工作的集群名字可以通过命令 set HOST 查看。选项-n softname 查看指定编译器或者链接库的名字的基本信息。选项-L 查看安装路径。选项-l 查看具体的编译命令或者链接选项提示。

使用网络命令 senv 设置当前操作的超算服务器的环境变量。load 选项加载应用软件的环境变量到当前的环境设置，def 选项加载自定义环境变量到当前环境设置，echo/check 选项可以查看环境变量的定义，list 选项查看当前环境已经加载过的环境变量。senv 具体使用方式参考《SCE Client 用户手册》。

3、 上传文件至当前 HOST 设置的计算资源

用户可根据命令 listnodes 和 listres 选定所操作的计算资源，通过命令 set HOST=hpcname 设定在 HOST 环境中，设置成功之后该名字将出现在命令提示符中。在任何 HPC 文件操作之前需将文件上传至所操作的 HPC，使用命令 scephut2，参数是需要上传的文件名字，也支持*，

表示上传当前目录的所有文件。上传之后使用命令 `scels` 可以查看到 HPC 上的文件列表，使用命令 `sccat filename` 可以查看文件内容。

4、 编译程序

使用网格命令 `scemake` 在目标工作机上编译程序。

按照程序的编译步骤，直接使用 `scemake` 命令替换原来的 `make` 命令即可，`scemake` 参数与 Linux 原有 `make` 命令参数相同。如果程序编译有 `configure` 步骤，在 `scemake` 之前执行 `configure` 命令。

5、 提交计算任务

使用网格命令 `bsub` 提交作业，格式和 LSF 的 `bsub` 命令基本类似，不支持 `-a`（指定 `mpi` 类型）。如果是串行程序，在 `bsub` 的 `command` 参数前面加 `generic`，如果是并行程序，根据 MPI 类型的不同在 `bsub` 的 `command` 参数前面加 `mpijob.intelmpi` / `mpijob.openmpi` / `mpijob.mpich`，具体名字可以通过网格命令 `listres` 查看到。

指定队列的选项格式为 `-q hpcname@queueName`，`hpcname` 可以通过命令 `set HOST` 查看到。执行串行程序可用的队列名字可以通过命令 `listres generic` 查看到，执行并行程序的可用队列名字同样通过 `listres` 查看，只是参数根据 MPI 类型不同而不同，`mpijob.intelmpi` / `mpijob.openmpi` / `mpijob.mpich`。如果不指定 `-q` 选项，那么网格系统会自动选择一个该应用可用的队列提交计算任务。

如果不指定 `-W`，默认作业最大执行时间为 5 分钟，否则需要通过 `-W` 指定作业估计执行时间，支持 `-W 小时:分钟` 的格式，比如 `-W 1:00` 是指一个小时。

`bsub` 命令返回用户作业 ID 号，即 UJID。

6、 查看作业状态

使用网格命令 `bjobs` 可以查看作业的基本信息（包括作业状态）。作业状态为 `DONE` 的表示该作业正常执行结束。选项 `-l` 列出作业的详细信息。

终止作业使用网格命令 `bkill`，参数为 `bsub` 返回的作业号。

7、 下载结果文件

经过调试和计算之后，所有结果文件均产生于所操作的 HPC 集群上，使用 `scels` 命令可以查看文件列表，使用 `sccat` 或者 `scetail` 命令可以查看文件内容，如需下载处理，需使用 `sceget2` 命令下载到网格家目录中（参数是选定的文件名），然后如果用户需要将计算结果文件或者程序文件从网格服务器上下载，可以通过 `scp` 或者 `sftp` 协议传输。

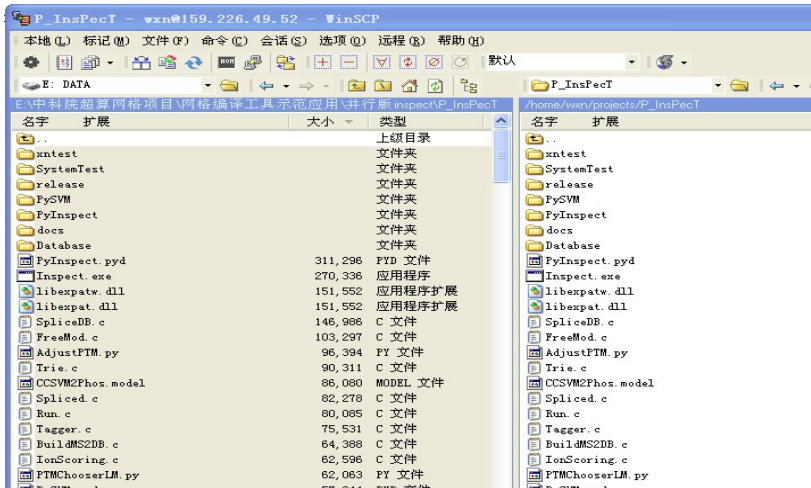
实例流程

以编译并行版的生物计算程序 `P_InsPecT` 为例，说明在网格命令行使用环境中如何编写、编译和执行程序。

- 1、在主目录下创建目录 projects/P_InsPect。

```
[deepcomp7000@sce ~]$ cd
[deepcomp7000@sce ~]$ cd projects/
[deepcomp7000@sce projects]$ mkdir P_InsPect
[deepcomp7000@sce projects]$ ls P_InsPect/
[deepcomp7000@sce projects]$ ls
P_InsPect
```

- 2、通过一个 scp 协议客户端工具 WinSCPPortable 访问网络服务器，将 P_InsPect 程序文件上传至目录 projects/P_InsPect。



- 3、如果需要，可以使用 ls/vi/cd/cat/tail/head 等常用 linux 文件操作命令查看或者修改目录 projects/P_InsPect 下的程序文件。
- 4、程序修改完毕需要编译之前，使用 scephut2 *命令上传当前目录所有文件至 HOST 设置的 HPC 中。
- 5、执行 set HOST 查看当前工作集群服务器的名字为 deepcomp7000， 执行 listres 查看当前已有的应用， mpi 相关应用有 mpijob.intelmpi、mpijob.mvapich2、mpijob.openmpi。执行 senv load mpijob.intelmpi， 加载 intelmpi 相关环境变量，使用 intelmpi 编译程序。

```
[deepcomp7000@sce P_InsPect]$ set HOST
HOST=era
[deepcomp7000@sce P_InsPect]$ listres
APPLICATION      VERSION
-----
ABACUS           1.0.0
Abinit           7.10.2
AMBER            14
mpijob.intelmpi  4.1.3.049
mpijob.mvapich2  1.9
mpijob.openmpi   1.6.5
```

- 6、该程序提供了 Makefile，因此执行 scemake 编译程序。执行 scemake clean 可以清除编译结果。

```
[deepcomp7000@sce P_InsPecT]$ ls Makefile
Makefile
[deepcomp7000@sce P_InsPecT]$ scemake
File uploading, please wait.....
File transfer finished

Compile on deepcomp7000 begin!
mpicc -g -DDEBUG -D_CONSOLE -O3 -funroll-loops -c base64.c
mpicc -g -DDEBUG -D_CONSOLE -O3 -funroll-loops -c BN.c
mpicc -g -DDEBUG -D_CONSOLE -O3 -funroll-loops -c BuildMS2DB.c
BuildMS2DB.c(1459): warning #181: argument is incompatible with corresponding format
      fprintf(File, "      <ExonSequence Length=\"%d\">%s</ExonSequence>\n", strlen
Exon->Sequence);
```

- 7、使用 scels、sccat 等文件操作命令查看编译结果的相关文件。

- 8、执行 bsub 命令提交作业。

```
[deepcomp7000@sce P_InsPecT]$ listres mpijob.intelmpi
APPNAME  GRID      HPC      QUEUE      WALLTIME  NJOBS  PEND  RUN
-----
mpijob.in* mainnode  deepcomp7000  scgrid      720      12    0    12
mpijob.in* mainnode  deepcomp7000  scgrid_long  8640    12    0    12
[deepcomp7000@sce P_InsPecT]$ bsub -q deepcomp7000@scgrid -n 4 -o xn.out -e xn.err mpijob.intelmpi ..
put.txt -o xntest/xnout
```

- 9、执行 bjobs 查看作业状态

```
[deepcomp7000@sce P_InsPecT]$ bjobs
UJID  STAT  QUEUE  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT  UPDATE
-----
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_sccas  *eric1423  Apr 21 14:23  Apr 21 14:23
224  SUB_ERR*  all     GPU_sccas  *eric1421  Apr 21 14:21  Apr 21 14:21
223  DONE  scgrid  deepcomp7000  myamber    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
216  DONE  default  chemistry  *name1606  Apr 01 16:06  Apr 01 16:07
```

- 10、使用 scels/cd/scevi/sccat/scetail 等网格文件操作命令可以查看作业结果 xntest/xnout，使用命令 sceget2 xntest/xnout 可将文件从 HPC 下载至网格家目录，如有进一步处理的需求，可使用 scp 协议客户端工具 WinSCPPortable 可以下载该结果文件至用户机器的本地磁盘。


```

[deepcomp7000@sce P_InsPecT]$ ls xntest/xnout
xntest/xnout
[deepcomp7000@sce P_InsPecT]$ tail xntest/xnout
xntest/TESTDATA_297.mzXML      297      K. AS+83R. C      sp|P02769|ALBU_BOVIN Serum albumin precu
.068 0.060 0.750 0.250 0.291 2.000 0.98396 0.93399 0.000 0.092 5 1407 5806
xntest/TESTDATA_297.mzXML      297      K. AA+99R. G      sp|P00489|PHS2_RABIT Glycogen phosphoryl
.068 0.060 0.750 0.250 0.291 2.000 0.98396 0.93399 0.000 0.092 9 3552 5806
xntest/TESTDATA_297.mzXML      297      K. AN+56R. E      ATBOG Bovine Gamma Actin. 1 -0.8
.750 0.250 0.291 2.000 0.98396 0.93399 0.000 0.092 11 4923 580605 415.036 -1.1
xntest/TESTDATA_297.mzXML      297      Q. ACDR-48. F      sp|P02769|ALBU_BOVIN Serum albumin precu
.402 1.443 0.800 0.200 0.296 1.000 1.00000 -1.44519 -0.092 -0.092 5 1325
4
xntest/TESTDATA_297.mzXML      297      N. AG+113R. Y     sp|P00722|BGAL_ECOLI Beta-galactosidase 1
.325 0.750 0.250 0.291 1.000 1.00000 -5.18760 -0.468 -0.376 10 4797 5806
xntest/TESTDATA_297.mzXML      297      Q. AP+73R. V      ATBOG Bovine Gamma Actin. 1 -1.2
.750 0.250 0.291 1.000 1.00000 -5.21376 -0.470 -0.378 11 4835 580605 415.
xntest/TESTDATA_297.mzXML      297      I. AH+33R. F      sp|P02769|ALBU_BOVIN Serum albumin precu
.187 0.060 0.750 0.250 0.291 1.000 1.00000 -6.09044 -0.538 -0.445 5 943

```

ScGrid