<版本 <u>1.4</u>>

中国科学院计算机网络信息中心

SCE PORTAL 用户手册

Scart

版权所有 2009-2018 年: 中国科学院计算机网络信息中心

SCE PORTAL 用户手册

注: 网站的超链接用蓝色字体表示。 欢迎大家提出各种建议和看法, email: caorq@sccas.cn

一、用户登录

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

二、应用列表

应用列表列给出了网站支持的所有应用,如图 1 所示。单击红圈标注的链接,打开作 业提交页面。随着 portal 的不断建设,会有越来越多的应用。

应用列表 历史作业 ?	
? 应用列表	
计算全融	
V1 7T	
B DHM DiscreteHedgingM provided by SCCAS 提交作业	
计算化学	
■ Gaussian Gaussian 3 by SCCAS 提交作业	
■ Cpmd CPMD provided by SCCAS 提交作业	
生物信息	
■ Siclone Siclone provided by SCCAS 提交作业	
■ MEME MEME provided by SCCAS 提交作业	
材料科学	
I VASP VASP provided by SCCAS 提交作业	
 E Fluent Fluent12 provided by SCCAS 提交作业 	

图 1 应用列表

三、提交作业

单击应用名称或"提交作业"的链接后,出现作业提交的页面。以"Gaussian"作业

	Gaussian03作业提交
11	
作	业名称: 1091216105104.job *
1	
标	准输出: stdout *
标	准错误: stderr *
I	作目录: 作业ID号或者不填
运	行时间: 0 天* 0 时* 5 分*
11	
CI	PU个数:*
	- 传文件
*	.com或者*.gjf文件: 刘览 *
	更多输入文件
-	
Γ	提交

为例,单击"Gaussian"或者右侧的"提交作业",弹出"Gaussian03 作业提交"页面,如图2所示。

图 2 作业提交页面

- 1. 作业名称、标准输出、标准错误已经存在默认值,可根据需要更改。
- 2. 工作目录,暂时不需要填写。
- 3. 填写运行时间和 CPU 个数之后,系统会根据这两个参数给出可用的计算队列,如 图 3 所示,注意选择合适的队列。
- 4. 上传文件名,填写需要上传的文件的路径,单击上传按钮后,portal 会给出文件 是否上传成功的提示。
- 提交作业,上传脚本文件后,"提交"按钮可用。单击该按钮时,portal 会对用户 填写的参数进行检查,如果存漏填现象,会给出相关提示;待用户修改后,方可 提交作业。作业提交后,portal 会给出作业提交成功的提示。

作业资	源					
CPU个	數: 2	*				
		ť	作业可用资源列表			
请选择名	合适的资源					
选择	节点名称	队列名称	最长运行时间	全部作业	挂起作业	运行作业
\odot	deepcomp7000	scgrid	720	0	0	0
0	chemistry	default	2880	0	0	0

图 3 作业可用的资源

四、历史作业

提供查询作业运行状态和下载运算结果的功能。如图4所示。

月户管理 计算						
阿表 历史作业						
				作业信息查询		
	作业作息	查询结果				
	作业序号	作业名称	应用程序	提交时间	状态:改变时间	操作
	655	091215164618.job	gaussian	2009-12-15 16:50	FINISHED:2009-12-15 16:52	(终止)
	654	091215163818.job	gaussian	2009-12-15 16:42	SUB_ERROR:2009-12-15 16:42	陵江
	653	hostname1502	hostname	2009-12-14 15:2	FINISHED:2009-12-14 15:4	终止
	652	hostname1502	hostname	2009-12-14 15:2	SUB_ERROR:2009-12-14 15:2	终止
	651	myname	hostname	2009-12-14 15:2	FINISHED:2009-12-14 15:2	终止
	650	hostname1502	hostname	2009-12-14 15:2	FINISHED:2009-12-14 15:2	终止
	649	hostname1502	hostname	2009-12-14 15:2	FINISHED:2009-12-14 15:2	终止
	648	hostname1502	hostname	2009-12-14 15:2	FINISHED:2009-12-14 15:2	终止
	647	hostname1502	hostname	2009-12-14 15:2	FINISHED:2009-12-14 15:2	终止
	646	hostname1502	hostname	2009-12-14 15.2	FINISHED:2009-12-14 15:2	终止

2009年12月16日

图 4 作业信息查询

- 1. 在打开页面时,系统会分页列出提交的作业,每页 10 个作业。作业状态使用大写 英语单词表示,SUBMITTED 表示作业已经提交到网格;RUNNING 表示作业已经到达 大机器并开始调度和运行;FINISHED 表示作业已经成功计算完毕;FAILED 表示作 业运行失败,请查看 info 或 stdout 类型的文件以获取具体原因。
- 2. 单击作业序号,可以查询详细的作业信息。请参看步骤 5。
- 3. 在"XXX. job 的输入输出文件"中,类型 input 表示输入的脚本文件; output 表示用户指定的输出文件; stdout 表示系统的标准输出; JSDL 表示提交作业时生成的 JSDL 描述文件; info 表示作业调度错误时的信息,该类型的文件可能在 failed 状态的作业中出现。
- 4. 如果有必要,单击作业右侧的"终止",可以终止一个正在运行或等待的作业。
- 5. 查看作业的详细信息。在这一步中,用户可以查看文件的内容,也可以下载结果 文件。如图 5 所示

0

【作	业名: 655】远程目录列表				
序号	文件	类型	长度	最后修改时间	操作
1	stderr	file	0	Dec 15 16:46	查看
2	stdout	file	32	Dec 15 16:47	查看
3	test.htm	file	484	Dec 15 16:46	查看
4	test.log	file	36K	Dec 15 16:47	查看
【作】	业名: 655】下载文件列表				
序号	文件	类型	长度	最后修改时间	操作
1	1261799295330283572.xml	file	1.3K	Dec 15 16:50	下载
2	Info.out	file	677	Dec 15 16:52	下载
3	job.sub	file	14	Dec 15 16:52	下载
4	stderr	file	0	Dec 15 16:52	下载
5	stdout	file	32	Dec 15 16:52	下载
6	test.htm	file	484	Dec 15 16:50	下载
7	test.log	file	36K	Dec 15 16:52	下载

图 5 作业的详细信息

5.1 查看文件的内容,如图6所示。

test.htm

#T UHF/6-311G**	<u>^</u>
example	
-2 1 H .000000 .000000 2.091575	
C .000000 .000000 1.000991 C -1.223016 .000000 .319391 C 1.223016 .000000 .319391	=
C -2.481434 .000000 1.044032 C -1.205753 .000000 -1.082635 C 1.205753 .000000 -1.082635	
C 2.481434 .000000 1.044032 C .000000 .000000 -1.772474 H 2 147747 .000000 -1 628849	
H 3.429332 .000000 .514983 H .000000 .000000 -2.861276	
H -2.147747 .000000 -1.629849 H 2.501274 .000000 2.129439	~
首页] [上一页] [下一页] [尾页] current: 1-100 rows][total: 22 rows]	
· 通指定行数内容	

图 6 查看文体文件的内容

5.2 下载结果文件,和标准的 web 下载文件模式一样,弹出一个下载文件的对话框, 不再详述。