

至强 V3 集群用户快速使用手册

一、集群环境

硬件配置:

每节点两颗 Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2690 v3 @ 2.60GHz, 内存 128G , 总可用存储空间 164T。

编译、优化和命令行提交作业使用方法(命令行):

用户通过登录应用服务器节点 (40.1.0.1) 进行程序开发、调试及作业脚本提交。在这台编译服务器上, 可以生成 X86 架构的可执行程序, 通过不同编译命令来区分。详细命令见文档后半部分。

CUI 界面提交作业使用方法(浏览器):

集群用户使用 IE10、Firefox、Chrome 浏览器登录 CUI 界面 (<https://10.1.0.1/>) 输入管理员分配的 SN 帐号进行访问。CUI 可以提供作业提交、文件上传下载等功能。

二、编译环境

● 串行编译命令:

- C 语言: icc
- C++语言: icpc
- Fortran 语言: ifort

● MPI 编译命令:

- C 语言: mpicc
- C++语言: mpiCC
- Fortran 语言: mpif90/mpif77

- 常用的编译优化选项:

- -O1、-O2、-O3, 不同优化级别, 一般情况下选项 -O2 比较合理
- -openmp, -parallel, 并行计算
- -ip, 单个文件过程间优化
- -xtarget , 针对 CPU 指令集优化, AVX, SSE4.2, SSE4.1, SSSE3, SSE3, SSE2

- 常用的编译调试选项:

- -Wall, 打开编译告警, 有助于发现代码不规范的地方和潜在错误
- -g, 用于产生调试信息, 供 gdb 等调试器使用, -g 会自动禁止部分编译优化
- -debug [keyword]

作业提交使用详解

1、bsub 命令

(1) bsub 命令—用于提交作业脚本

命令格式:

```
bsub <options> jobstart | <jobtype> <user command line> "
```

选项的详细解释如下:

- q: 指定队列
- node: 指定所使用的节点数, 一个节点为 24 核心
- np: 指定一个每个节点上使用的核心数
- app: 如果是个 CAE 的作业, 需要指定其应用名称
- smp: 只有 smp 作业需要指定, 指定其线程数。
- job: 指定作业类型, 如 CAE、intelmpi, openmpi 等, 这是作业命令之前的最后一个选项。

例:

```
#bsub -q batch -node 2 -np 24 -job impi mpi_prog \> progout
```

```
#bsub -q batch -node 1 -np 1 -o log -job any hostname
```

(2) bjobs 命令—用于查询作业状态信息 命令格式: bjobs [-f][-a][-i] [-n][-s] [-R]

[-Q][-q][-B][-u]

参数说明:

- f jobid 列出指定作业的信息
- a 列出系统所有作业
- i 列出不在运行的作业
- n 列出分配给此作业的结点
- s 列出队列管理员与 scheduler 所提供的建议
- R 列出磁盘预留信息
- Q 操作符是 destination id, 指明请求的是队列状态
- q 列出队列状态, 并以 alternative 形式显示

-au userid 列出指定用户的所有作业

-B 列出 PBS Server 信息

-r 列出所有正在运行的作业

-Qf queue 列出指定队列的信息

-u 若操作符为作业号，则列出其状态。若操作符为 destination id，则列出运行在其上的属于 user_list 中用户的作业状态。

例：# bjobs -f 211 查询作业号为 211 的作业的具体信息。

(3) bkill 命令—用于删除已提交的作业 命令格式：bkill [-W 间隔时间] 作业号

命令行参数：

例：# bkill -W 15 211 15 秒后删除作业号为 211 的作业