



国家超级计算郑州中心
National Supercomputing Center In Zhengzhou

国家超级计算郑州中心 用户手册

国家超级计算郑州中心

发布

前 言

使用说明

1. 本文档适用于国家超级计算郑州中心部署的相关平台。
2. 本文档中的数据、示例和图片仅作为平台使用说明或效果显示，不能视为与实际特性一致的声明。

修订记录

版本	修订日期	修订内容	编制
Ver_1.0	2022-08-29	将原 VPN、先进计算平台和工单用户手册合并成 1 个手册	高性能计算服务部
Ver_1.1	2022-11-22	配合 VPN 自助找回密码功能上线，补充 VPN 使用指南内容并优化原有结构	高性能计算服务部

目 录

1 VPN 使用指南.....	1
1.1 VPN 访问地址.....	1
1.2 VPN 访问方式.....	1
1.2.1 通过浏览器访问 VPN.....	1
1.2.2 通过客户端访问 VPN.....	2
1.3 VPN 登录步骤.....	5
1.3.1 浏览器登录 VPN.....	5
1.3.2 客户端登录 VPN.....	5
1.3.3 VPN 使用注意事项.....	6
1.4 VPN 修改密码.....	7
1.5 VPN 找回密码.....	8
1.6 VPN 常见问题处理.....	11
2 先进计算平台使用指南.....	15
2.1 先进计算平台登录.....	15
2.2 概览.....	16
2.2.1 我的服务.....	16
2.2.2 账户信息.....	16
2.2.3 资源信息.....	17
2.2.4 我的作业.....	17
2.3 作业.....	17
2.4 E-Shell.....	17
2.5 E-File.....	18
2.6 资源.....	18
2.6.1 计算资源.....	18
2.6.2 存储资源.....	19
2.7 账户.....	19
2.8 费用.....	20
2.8.1 总览.....	20
2.8.2 账单.....	20
2.8.3 详单.....	21
2.8.4 充值记录.....	22
2.8.5 调整记录.....	22
2.9 帮助.....	22
3 slurm 使用指南.....	23
3.1 系统简介.....	23
3.1.1 计算资源（节点配置）.....	23
3.1.2 存储资源（文件系统）.....	23
3.2 共享应用软件.....	23
3.2.1 软件情况.....	23
3.2.2 module 使用.....	23
3.3 slurm 作业管理系统.....	23



3.3.1	sinfo 查看系统资源.....	24
3.3.2	squeue 查看作业状态.....	25
3.3.3	srun 交互式提交作业.....	25
3.3.4	sbatch 后台提交作业.....	26
3.3.5	salloc 分配模式作业提交.....	27
3.3.6	scancel 取消已提交的作业.....	27
3.3.7	scontrol 查看正在运行的作业信息.....	27
3.3.8	sacct 查看历史作业信息.....	28
3.3.9	作业模板.....	28
4	工单系统操作指南.....	29
4.1	登录.....	29
4.1.1	公网地址登录.....	29
4.1.2	先进计算平台跳转登录.....	31
4.2	修改个人信息.....	32
4.3	资源申请.....	33
4.4	工单服务.....	40
4.4.1	提交工单.....	40
4.4.2	查询工单.....	43
4.5	帮助与服务.....	44
4.6	注意事项.....	44

国家超级计算郑州中心

1 VPN 使用指南

1.1 VPN 访问地址

★国家超级计算郑州中心的 VPN 入口采用多通道形式，用户可根据自身网络环境选择服务器地址。

<https://222.22.12.2:6443>（校园网地址）

<https://42.228.19.131:6443>（联通运营商地址）

★VPN 客户端支持 Windows、Linux、MAC 等操作系统。

1.2 VPN 访问方式

VPN 可以通过浏览器或客户端访问，推荐使用客户端方式，连接相对比较稳定。

1.2.1 通过浏览器访问 VPN

Step1: 保证网络连接正常，并打开浏览器访问 <https://222.22.12.2:6443>（以校园网地址为例，其他服务器地址操作相同）；

★浏览器建议使用 IE、谷歌、火狐；Edge 浏览器在部分操作系统版本下可使用。



图 1-1 浏览器访问界面

Step2: 点击【高级】→【继续前往】，跳转到 VPN 登录页面。

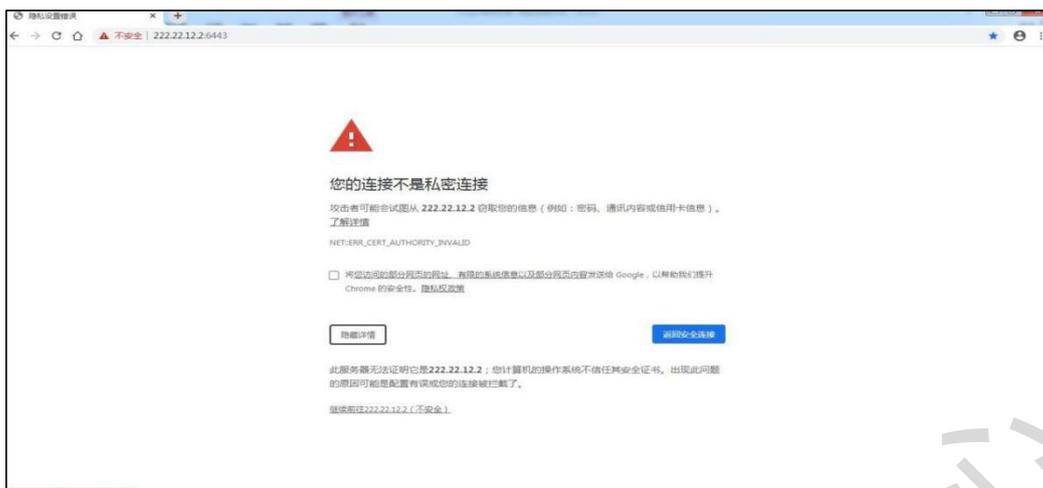


图 1-2 高级设置扩展界面



图 1-3 浏览器访问 VPN 登录页面

1.2.2 通过客户端访问 VPN

(1) Windows 系统客户端下载及安装方法

Step1-Step2: 步骤与 1.2.1 节“通过浏览器访问 VPN”中的 Step1-Step2 一致；

Step3: 点击网页上的【客户端】，即可下载 Windows 系统对应的 VPN 客户端安装包；

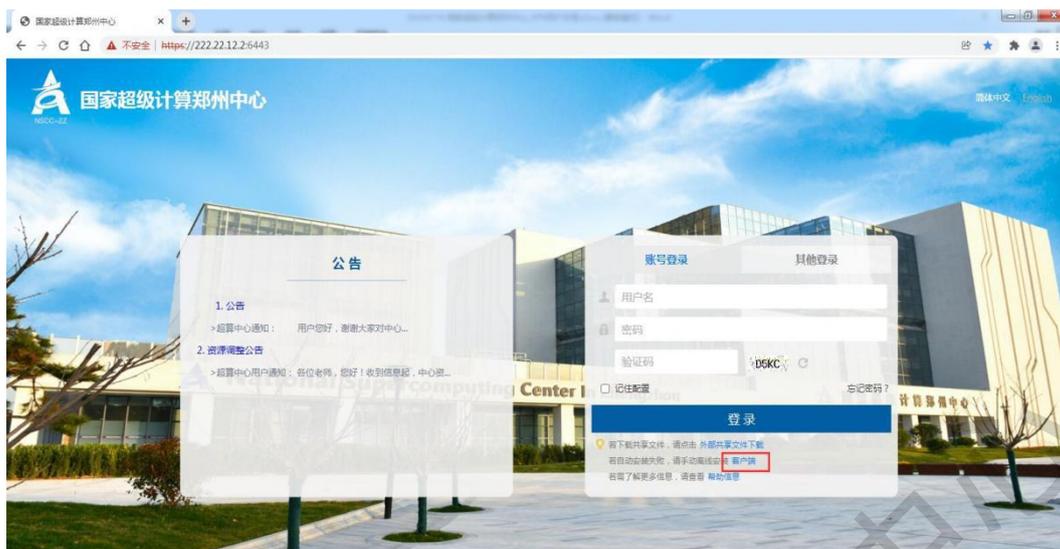
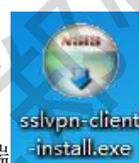


图 1-4 客户端选项位置



Step4: 客户端安装包下载完成，双击安装 VPN 客户端 `sslvpn-client-install.exe`。

Step5: 系统弹出对话框（如图 1-5 所示），点击【运行】，按照提示进行操作。



图 1-5 VPN 客户端安装时弹出页面



图 1-6 VPN 客户端安装完成时提示

★安装过程中如果遇到杀毒软件或者安全防护软件提示，请允许客户端安装，或者在安装过程暂时关闭杀毒软件或安全防护软件。

(2) Linux 及 MAC 系统的下载步骤

Step1-Step2: 步骤与 1.2.1 节“通过浏览器访问 VPN”中的 Step1-Step2 一致;

Step3: Linux 及 MAC 系统客户端下载，请点击 VPN 登录页面上的【外部共享文件下载】:

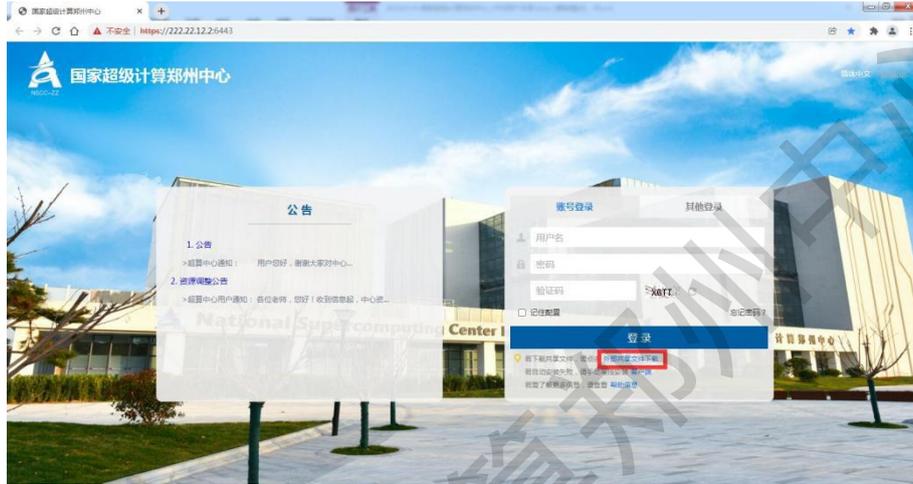


图 1-7 外部共享文件下载选项位置

Step4: 点击即可下载 Linux 和 MAC OS 系统的客户端安装包;



图 1-8 其他操作系统安装包下载界面

Step5: Linux 及 Mac 系统客户端的安装步骤详见 VPN 登录页面的【帮助信息】:



图 1-9 帮助信息选项位置

帮助中心

1. 说明
2. Windows客户端安装
3. Mac OS X客户端安装
4. Linux客户端安装
5. 常见问题

1. 说明

首次使用SSL VPN需要下载安装SSL VPN客户端组件

使用浏览器打开登录页面，点击“请点击这里”下载客户端，下载完成后运行安装程序



图 1-10 帮助中心页面内容

1.3 VPN 登录步骤

1.3.1 浏览器登录 VPN

Step1-Step2: 步骤与 1.2.1 节“通过浏览器访问 VPN”中的 Step1-Step2 一致；

Step3: 在页面右侧的框内输入 VPN 用户名和密码（用户名以国家超级计算郑州中心分配的为准，初始密码一般随开户通知邮件发送）；

Step4: 登录成功以后即可访问国家超级计算郑州中心资源。

1.3.2 客户端登录 VPN

首先按照 1.2.2 节下载并安装 VPN 客户端，然后按照以下步骤登录：



Step1: 安装完毕后打开客户端

Step2: 在“服务器地址”栏内输入 VPN 服务器地址 <https://222.22.12.2:6443>（以校园网地址为例，其他服务器地址操作相同），点击“连接”；



图 1-11 VPN 服务器地址设置

Step3: 输入 VPN 用户名和密码（用户名以国家超级计算郑州中心分配的为准，初始密码一般随开户通知邮件发送）。

Step4: 登录成功以后即可访问国家超级计算郑州中心资源

1.3.3 VPN 使用注意事项

★登录成功后会弹出资源列表页（如图 1-12 所示），在使用 VPN 期间建议不要关闭。如关闭后需要再次查看资源列表页，双击桌面右下角 VPN 客户端图标即可弹出。

★VPN 登录后超过 15 分钟无任何操作，VPN 会自动断开连接，需要重新登录。

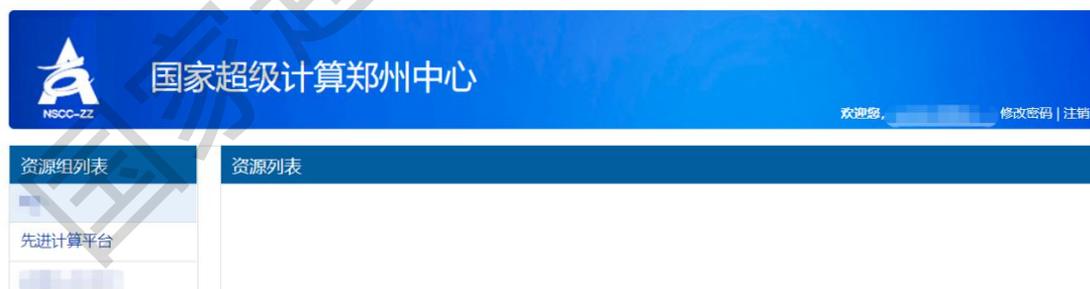


图 1-12 VPN 登录成功后显示资源列表界面

Step5: VPN 使用完毕后，建议先点击页面右上角的【注销】，再关闭网页。



图 1-13 VPN 注销按钮位置

1.4 VPN 修改密码

★VPN 的密码有效期一般默认为 30 天，在密码即将到期时，VPN 资源列表页面的右上角会出现相应的提醒，建议及时修改密码，否则会影响登录。



图 1-14 密码即将过期时的提醒信息

★如果 VPN 账号被锁定，请稍等片刻，五分钟后系统会自动解锁账号。

Step1: 点击【修改密码】。



图 1-15 点击修改密码

Step2: 按照提示进行密码修改，完成后点击【确定】，然后使用新密码登录 VPN。



图 1-16 修改密码

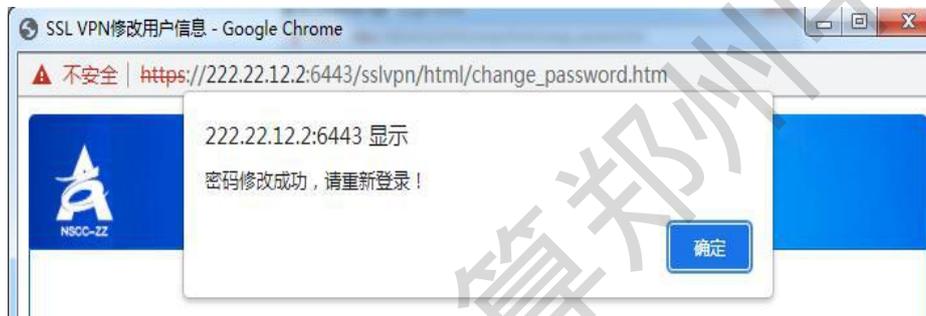


图 1-17 密码修改成功

1.5 VPN 找回密码

如果您忘记了原来的密码，可以进行密码重置，步骤如下：

Step1-Step2: 步骤与 1.2.1 节“通过浏览器访问 VPN”中的 Step1-Step2 一致；

Step3: 点击网页上的【忘记密码】，即可跳转到找回密码页面；



图 1-18 忘记密码选项位置

Step4: 输入用户名、手机号码、验证码、点击【下一步】，看到短信验证码发送成功的提示（如图 1-20 所示），点击【确定】按钮；

★如果页面上没有出现短信验证码发送成功的提示，请核对用户与手机号码是否填写正确，如果仍不能解决问题请联系超算中心工作人员修改或完善 VPN 用户信息。



图 1-19 短信找回密码



图 1-20 短信验证码发送成功提示

Step4: 输入手机上收到的短信验证码，点击【提交】:



图 1-21 短信验证码输入页面

Step5: 输入新密码，点击【确定】重置完成。



图 1-22 新密码输入页面

1.6 VPN 常见问题处理

(1) 打开客户端，页面提示“服务器连接失败”

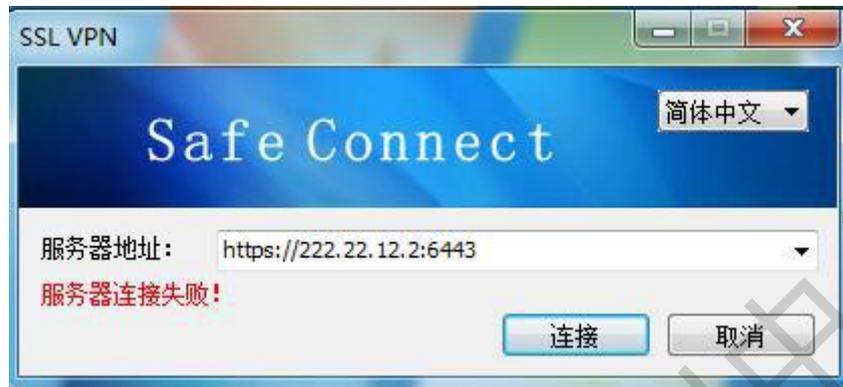


图 1-23 服务器连接失败提示

Step1: 首先检查本地网络连接互联网是否正常。如正常请查看第二步；

Step2: 可尝试输入超算中心其他 VPN 连接地址（<https://222.22.12.2:6443> 或者 <https://42.228.19.131:6443>）是否正常。

Step3: 将 VPN 的登录地址复制到浏览器，观察是否能打开 VPN 页面（见图 1-3），

如所有登录地址均无法打开，请再检查本地网络是否正常；

Step4: 如网页可以打开，并且输入用户名和密码后，可以正常登录（见图 1-12），此时应当检查本地网络连接的网卡或者本地浏览器的“Internet 选项”是否设置了自动代理脚本和代理服务器。

1、打开电脑任务栏右下角的【网络连接】（如图 1-19 所示）→【网络和 Internet 设置】→【代理】（常见于 win10 及以上系统），检查是否设置了“代理脚本”和“代理服务器”，如有请关闭（如图 1-20 所示）。



图 1-24 网络和 Internet 设置



图 1-25 Internet 代理

2、打开浏览器的【Internet 选项】→【连接】→【局域网设置】（常见于 win7 系统），查看是否设置“自动代理脚本”和“代理服务器”，如果设置过，需要关闭代理服务。

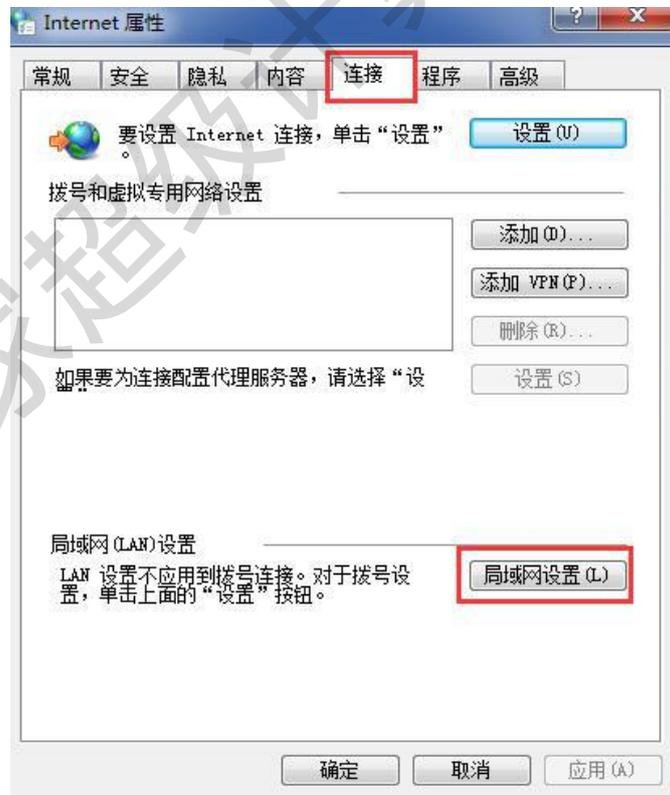


图 1-26 Internet 属性连接



图 1-27 局域网设置

Step5: 如关闭代理后问题仍然存在，请卸载客户端重新安装。

VPN 客户端默认安装路径为 (C:\Program Files (x86)\SafeConnect\SSLVPN Client)，请点击该安装路径下的“Uninstall.exe”执行卸载，卸载完成后可在 C:\Program Files (x86)\文件夹下手动删除“SafeConnect”文件夹，再参照本手册第 2 条“客户端下载及安装”重新安装 VPN 客户端。

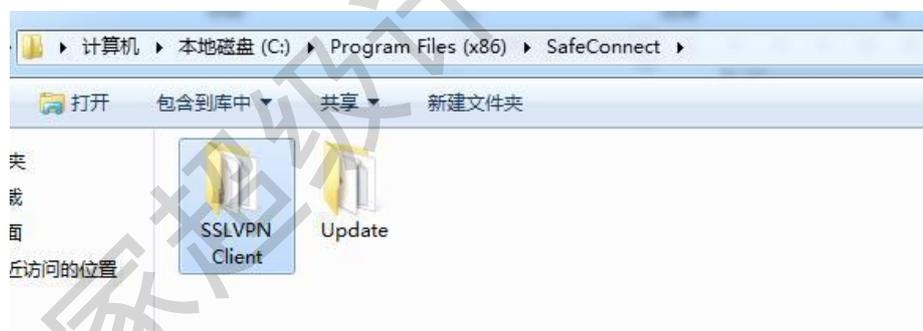


图 1-28 VPN 默认安装路径

Step6: 如使用以上方法仍未解决问题，请联系超算工作人员协助解决。

- (2) VPN 登录成功后，弹出的网页长时间显示“正在初始化资源”。则可通过以下方法逐一排查问题。



图 1-29 页面长时间显示“正在初始化资源”

Step1: 检查使用浏览器是否为本手册建议浏览器（见图 1-1 处上方），如果不是，可更换其他浏览器、或者将建议浏览器设置为默认浏览器，再进行登录尝试。

Step2: 尝试使用常见问题（1）解决方法的 Step4，检查 Internet 选项是否设置了自动代理脚本和代理服务。

Step3: 检查本地电脑是否安装了其他的 VPN 软件并正在使用，如果存在这种情况，需要关闭其他的 VPN 软件后再登录，因为两个 VPN 软件不能同时使用。

Step4: 检查本 VPN 软件的端口是否被占用，如果被其他程序占用，VPN 就无法运行。需要确保 VPN 的端口不被占用，才能正常使用 VPN。

VPN 使用端口为 **TCP: 6443; UDP: 442 和 1701**

Step5: 如以上方法仍无法解决问题，请联系超算工作人员协助解决。

2 先进计算平台使用指南

国家超级计算郑州中心位于河南郑州高新区长椿路与枫杨街交叉口东南角。郑州中心于2020年建成并投入运行，理论峰值计算能力达到100PFlops，存储裸容量100PB，网络系统带宽200Gb/s，网络延迟微秒级；同时配备国产安全可靠的云计算平台、高性能计算集群管理调度平台、人工智能平台以及专业的在线运维平台，提供类型多样的先进计算服务；采用绿色节能的浸没式相变液冷冷却技术，PUE值小于1.04。本文将详细介绍国家超级计算郑州中心先进计算平台使用方法，方便您正确使用国家超级计算郑州中心的相关资源。

2.1 先进计算平台登录

用户必须登录VPN之后，方可登录先进计算平台，可通过网页<https://172.99.2.2>登录，也可通过VPN登录之后点击先进计算平台链接进行登录。



图 2-1 VPN 资源界面

账号登录成功后，可以看到如下界面。

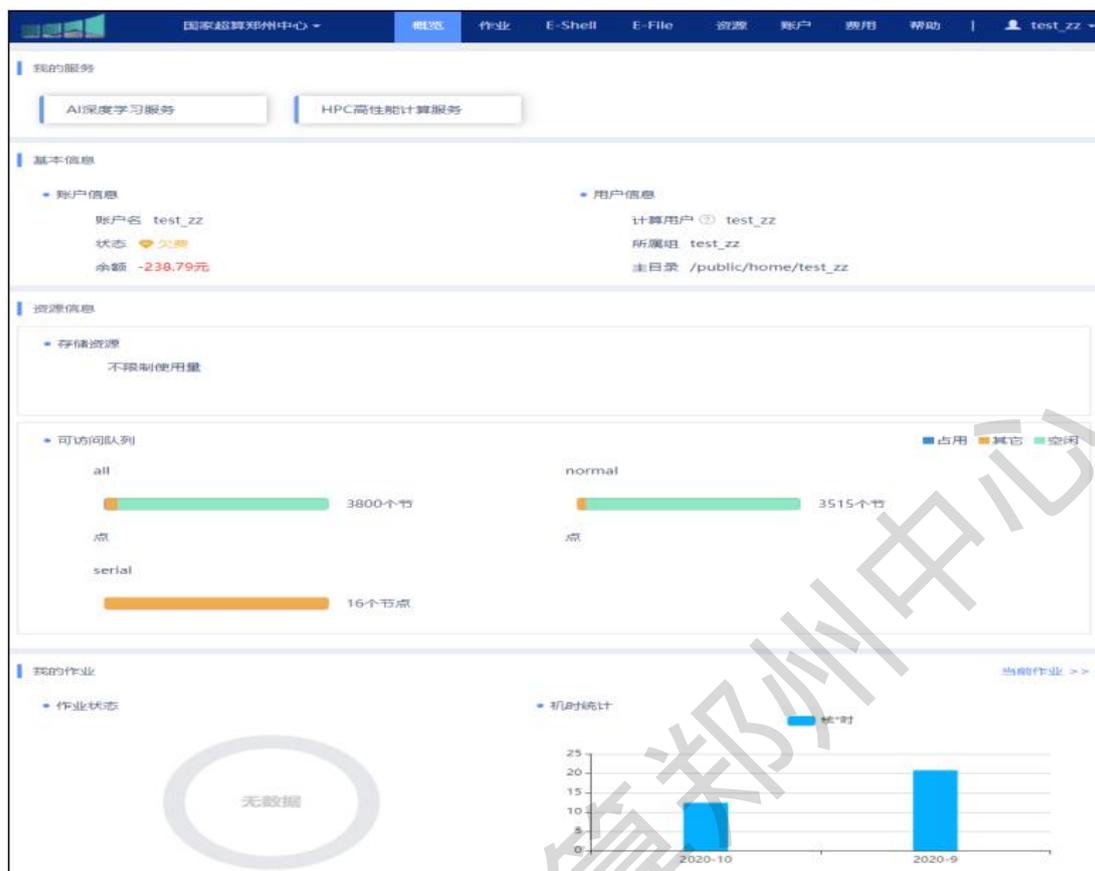


图 2-2 先进计算平台主界面

2.2 概览

2.2.1 我的服务

可以根据实际情况，点击使用平台提供的服务。

2.2.2 账户信息



图 2-3 账户信息

状态：您的账户状态，包括正常、停用、欠费、试用。

正常：指正式的未欠费的账户。

停用：停用账户相关的计算用户无法使用 E-Shell 等功能。

欠费：余额小于 0 的账户。

试用：试用账户。

余额：是账户的可支配资产，如余额为负值，请及时联系销售进行充值，以免影响使用。

2.2.3 资源信息

显示存储资源及可访问队列。



图 2-4 资源信息

2.2.4 我的作业

显示我的作业的机时信息。

2.3 作业

作业信息可在此处查看，分为当前作业和历史作业，提交后的作业，可通过我的作业查看。

2.4 E-Shell

使用 E-Shell 功能，可以在线提交作业。

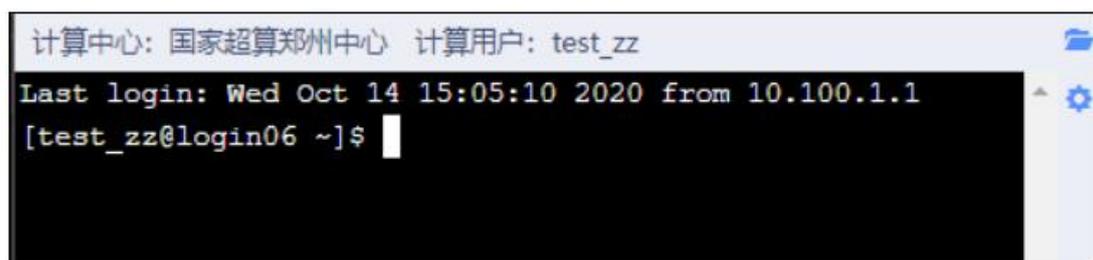


图 2-5 E-shell 界面



可以通过右侧设置按钮，修改 E-Shell 显示字号，背景色。



图 2-6 字体设置

2.5 E-File

可用来进行文件的上传下载。



图 2-7 E-File 界面

2.6 资源

2.6.1 计算资源

可以查看队列信息，如图 2-8 所示。

#	队列名	使用形式	CPU单价(元/(核*时))	使用时长
1	normal	共享	0.1	2020-09-17 - 2021-09-16

图 2-8 队列信息

进入队列后，可以查看队列详情，如图 2-9 所示。

分配信息	
使用形式	共享
CPU单价(元/(核*时))	0.1
使用时长	2020-09-17 - 2021-09-16
分配时间	2020-09-17 20:36:42
基本信息	
队列名	normal
启用状态	启用
节点个数	3515
用户最大运行数	-1
最大运行作业数	-1
优先级	9000
配置信息	CPU: 1*32cores2.5GHzx86; 实际物理内存: 128GB
可访问节点	a03r1n00,a03r1n01,a03r1n02,a03r1n03,a03r1n05,a03r1n06,a03r1n07,a03r1n08,a03r1n09,a03r1n10,a03r1n11,a03r1n12,a03r1n14,a03r1n15,a03r1n16,a03r1n17,a03r1n18,a03r2n00,a03r2n01,a03r2n02,a03r2n03,a03r2n04,a03r2n06,a03r2n07,a03r2n08,a03r2n09,a03r2n10,a03r2n11,a03r2n12,a03r2n13,a03r2n14,a03r2n15,a03r2n16,a03r2n17,a03r2n18,a03r

图 2-9 队列详情

2.6.2 存储资源

可以查看存储的使用情况。

2.7 账户

您在不同计算中心，会被管理员分配到不同账户下，列表为账户信息。

#	账户	计算中心	状态	余额(元)	创建时间	描述
1	test_zz	国家超算郑州中心	欠费	-238.79	2020-09-17 20:36:14	zz zz

图 2-10 账户信息

点击后，可查看账户信息详情。



图 2-11 账户信息详情

2.8 费用

2.8.1 总览

显示您关联的账户在对应计算中心的费用，按费用类型分类汇总，可切换年月，默认当月。



图 2-12 费用总览

2.8.2 账单

在“账单”中，可查看您关联的账户费用信息以及最近一年总费用及分类费用的历史趋势数据。

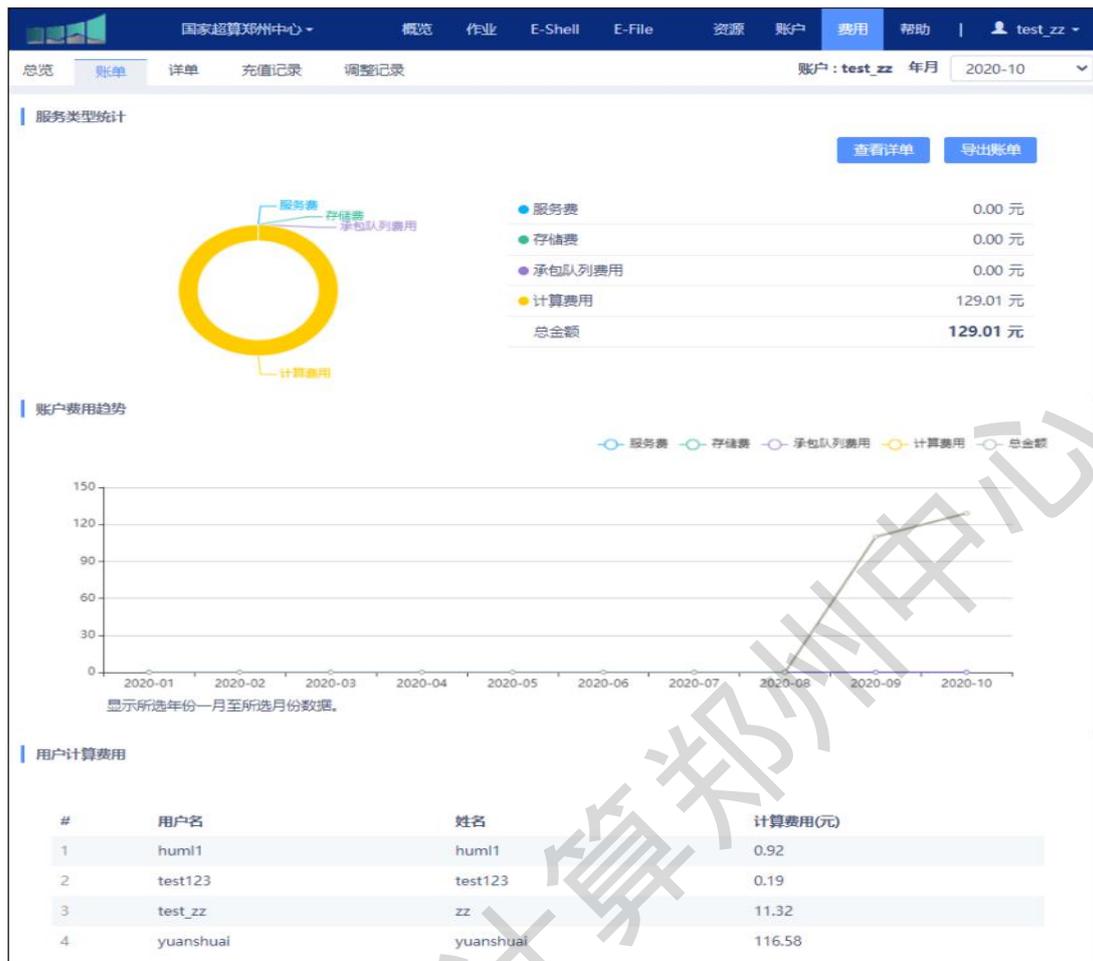


图 2-13 账单

“服务类型统计”指最近一月已出的月度账单；包括账单金额、各类别消费金额。

“账户费用趋势”指本年已出的月度账单趋势图。

“用户计算费用”指您关联的账户下的计算用户的消费金额。

2.8.3 详单

展示您关联的账户在当前计算中心的费用详单。分为作业费用详单和其他费用详单。

#	作业ID	作业名	用户名	队列名	计费模式	计费时间	运行时长	费用(元)
1	21921	Jupyter_2010...	yuanshuai	all	按需计费	2020-10-14 16:3...	45秒	0.03
2	21893	Course_2020...	yuanshuai	all	按需计费	2020-10-14 16:3...	26分13秒	0.49

图 8-3 费用详单

#	时间	扣费项	费用(元)	备注
1	2020-10-02 02:16:25	存储费	0	2020.10_0.0元/(GB*月)_0.0GB
2	2020-10-02 02:16:25	服务费	0	2020.10

图 2-14 其他费用

2.8.4 充值记录

展示管理员给指定您关联账户的充值记录。

2.8.5 调整记录

展示管理员给您关联账户的服务费和存储费的调整记录。

2.9 帮助

更多疑问，点击“帮助”查看知识库。

3 slurm 使用指南

3.1 系统简介

3.1.1 计算资源（节点配置）

通过 `sinfo` 可以查看到所有队列。

3.1.2 存储资源（文件系统）

文件系统有曙光并行文件系统挂载提供。

3.2 共享应用软件

3.2.1 软件情况

目前系统在 `/public/software/apps` 路径下安装了部分软件，用户可自行添加对应环境变量调用。也可使用 `module` 加载软件环境变量。

3.2.2 module 使用

可调用 `module [command]` 来查看或加载模块，主要指令如下：

```
module avail      #列出当前 module path 中所有可用的 module 文件
```

```
module load cmake-3.15.3  #加载模块，加载所使用的软件
```

```
module list      #显示已加载的模块
```

```
module unload cmake-3.15.3  #卸载模块
```

3.3 slurm 作业管理系统

系统使用 Slurm 作业管理系统，采用共享模式，为避免系统资源浪费，使用时请尽量保证满核提交（即为单节点核数的整数倍）。

表 3-1 作业管理系统常用命令

命令	功能介绍	常用命令示例
<code>sinfo</code>	显示系统资源使用情况	<code>sinfo</code>
<code>squeue</code>	显示作业状态	<code>squeue</code>
<code>srun</code>	用于交互式作业提交	<code>srun -N 2 -n 40 -p com A.exe</code>

sbatch	用于批处理作业提交	sbatch -N 2 -n 40 job.sh
salloc	用于分配模式作业提交	salloc -p com
scancel	用于取消已提交的作业	scancel JOBID
scontrol	用于查询节点信息或正在运行的作业信息	scontrol show job JOBID
sacct	用于查看历史作业信息	sacct -u deng -S 03/01/17 -E 03/31/17 --field=jobid,partition,jobname,user,nnodes,start,end,elapsed,state

3.3.1 sinfo 查看系统资源

sinfo 得到的结果是当前账号可使用的队列资源信息，如下所示：

```
[login09 ~]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
normal    up    infinite   112 drain* a03r2n00
```

其中，

第一列 PARTITION 是队列名。

第二列 AVAIL 是队列可用情况，如果显示 up 则是可用状态；如果是 inact 则是不可用状态。

第三列 TIMELIMIT 是作业运行时间限制，默认是 infinite 没有限制。

第四列 NODES 是节点数。

第五列 STATE 是节点状态，idle 是空闲节点，alloc 是已被占用节点，comp 是正在释放资源的节点，其他状态的节点都不可用。

第六列 NODELIST 是节点列表。

```
[login09 ~]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
normal    up    infinite   112 drain* a03r2n00
```

表 3-2 sinfo 的常用命令选项

命令示例	功能
sinfo -n comput1	指定显示节点 comput1 的使用情况
sinfo -p com	指定显示队列 com 情况

其他选项可以通过 sinfo --help 查询。

3.3.2 squeue 查看作业状态

squeue 得到的结果是当前账号的作业运行状态，如果 squeue 没有作业信息，说明作业已退出。

```
ogin09 ~]# squeue
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST (REASON)
55877 normal amber_te [redacted] R 23:49:36 5 b08r4n[11-15]
```

其中，

第一列 JOBID 是作业号，作业号是唯一的；

第二列 PARTITION 是作业运行使用的队列名；

第三列 NAME 是作业名；

第四列 USER 是账号名；

第五列 ST 是作业状态，R 表示正常运行，PD 表示在排队，CG 表示正在退出，S 是管理员暂时挂起；

第六列 TIME 是作业运行时间；

第七列 NODES 是作业使用的节点数；

第八列 NODELIST(REASON)对于运行作业（R 状态）显示作业使用的节点列表；对于排队作业（PD 状态），显示排队的原因。

表 3-3 squeue 常用命令选项

命令示例	功能
squeue -j 123456	查看作业号为 123456 的作业信息
squeue -u paratera	查看账号为 paratera 的作业信息
squeue -p com	查看提交到 com 队列的作业信息
squeue -w comput1	查看使用到 comput1 节点的作业信息

其他选项可通过 squeue --help 命令查看。

3.3.3 srun 交互式提交作业

srun [options] program 命令属于交互式提交作业，有屏幕输出，但容易受网络波动影响，断网或关闭窗口会导致作业中断。

srun 命令示例：

```
srun -p com -w comput[1-2] -N 2 -n 40 -t 20 A.exe
```

交互式提交 A.exe 程序。如果不关心节点和时间限制，可简写为 `srun -N 2 -n 40`

A.exe

其中，

- p com 指定提交作业到 com 队列；
- w comput[1-2] 指定使用节点 comput[1-2]；
- N 2 指定使用 2 个节点；
- n 40 指定进程数为 40；
- t 20 指定作业运行时间限制为 20 分钟。

表 3-4 srun 常用命令选项

参数选项	功能
-N 3	指定节点数为 3
-n 20	指定进程数为 20
-c 20	指定每个进程（任务）使用的 CPU 核为 20
-p com	指定提交作业到 com 队列
-w comput[1-2]	指定提交作业到 comput1、comput2 节点
-x comput[1-2]	排除 comput1、comput2 节点
-o out.log	指定标准输出到 out.log 文件
-e err.log	指定重定向错误输出到 err.log 文件
-J JOBNAME	指定作业名为 JOBNAME
-t 20	限制运行 20 分钟

srun 的其他选项可通过 `srun --help` 查看。

3.3.4 sbatch 后台提交作业

`sbatch` 一般情况下与 `srun` 一起提交作业到后台，需要将 `srun` 写到脚本中，再用 `sbatch` 提交脚本。这种方式不受本地网络波动影响，提交作业后可以关闭本地电脑。`sbatch` 命令没有屏幕输出，默认输出日志为提交目录下的 `slurm-xxx.out` 文件，可以使用 `tail -f slurm-xxx.out` 实时查看日志，其中 `xxx` 为作业号。

`sbatch` 命令示例 1（指定 2 个节点，4 个进程，每个进程 10 个 cpu 核提交 A.exe 程序，限制运行 60 分钟）：

编写脚本 `job1.sh`，内容如下：

```
#!/bin/bash
#SBATCH -N 2
#SBATCH -n 4
#SBATCH -c 10
#SBATCH -t 60
srun -n 4 A.exe
```

然后在命令行执行 `sbatch -p normal`（队列） `job1.sh` 就可以提交作业。其中 `#SBATCH` 注释行是 `slurm` 定义的作业执行方式说明，一些需要通过命令行指定的设置可以通过这些说明写在脚本里，避免了每次提交作业写很长的命令行。

3.3.5 salloc 分配模式作业提交

`salloc` 命令用于申请节点资源，一般用法如下：

- 1、执行 `salloc -p normal`；
- 2、执行 `squeue` 查看分配到的节点资源，比如分配到 `comput1`；
- 3、执行 `ssh comput1` 登录到所分配的节点；
- 4、登陆节点后可以执行需要的提交命令或程序；
- 5、作业结束后，执行 `scancel JOBID` 释放分配模式作业的节点资源。

3.3.6 scancel 取消已提交的作业

`scancel` 可以取消正在运行或排队的作业。

表 3-5 scancel 常用命令

命令示例	功能
<code>scancel 123456</code>	取消作业号为 123456 的作业
<code>scancel -n test</code>	取消作业名为 test 的作业
<code>scancel -p normal</code>	取消提交到 normal 队列的作业
<code>scancel -t PENDING</code>	取消正在排队的作业
<code>scancel -w comput1</code>	取消运行在 comput1 节点上的作业

`scancel` 的其他参数选项，可通过 `scancel --help` 查看

3.3.7 scontrol 查看正在运行的作业信息

`scontrol` 命令可以查看正在运行的作业详情，比如提交目录、提交脚本、使用核数情况等，对已退出的作业无效。

`scontrol` 的常用示例：

```
scontrol show job 123456
```

查看作业号为 123456 的作业详情。

scontrol 的其他参数选项，可通过 scontrol --help 查看。

3.3.8 sacct 查看历史作业信息

sacct 命令可以查看历史作业的起止时间、结束状态、作业号、作业名、使用的节点数、节点列表、运行时间等。

sacct 的常用命令示例：

```
sacct -u paratera -S 2018-07-01 -E now
--field=jobid,partition,jobname,user,nnodes,nodelist,start,end,elapsed,state
```

其中，

-u paratera 是指查看 paratera 账号的历史作业；

-S 是开始查询时间，-E 是截止查询时间，--format 定义了输出的格式；

jobid 是指作业号；

partition 是指提交队列；

user 是指账号名；

nnodes 是节点数；

nodelist 是节点列表；

start 是开始运行时间；

end 是作业退出时间；

elapsed 是运行时间；

state 是作业结束状态。

sacct --helpformat 可以查看支持的输出格式。

sacct 的其他参数选项可通过 sacct --help 查看。

3.3.9 作业模板

3.3.9.1 一般作业模板

#!/bin/bash	
#SBATCH -p fat	指定队列名称，根据账号所分配的实际队列填写
#SBATCH -J test	指定作业名称
#SBATCH -N 1	指定要提交的节点数量，可根据计算需求灵活配置
#SBATCH -n 4	指定要提交的进程数量，可根据计算需求灵活配置
#SBATCH -o test.o	指定标准输出文件名
#SBATCH -e test.e	指定错误输出文件名

```
srun -N 2 -n 8 -p com hostname    程序运行命令
```

附 3.3.9.2 使用 module 加载软件作业模板

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=VaspTest    指定作业名称
#SBATCH --nodes=1              指定节点数量，可根据计算需求灵活配置
#SBATCH --ntasks=4            指定要提交的进程数量，可根据计算需求灵活配置
#SBATCH --ntasks-per-node=4   指定每个节点所使用的进程数量，可根据计算需求灵活配置
#SBATCH --partition=fat       指定队列名称，根据账号所分配的实际队列填写

module purge

module load compiler/intel/2017.5.239    加载编译器模块
module load mpi/hpcx/2.7.4/intel-2017.5.239    加载并行处理工具
module load apps/vasp/5.4.4/hpcx-2.4.1-intel2017    加载 vasp 软件

mpirun vasp_std    执行命令
```

4 工单系统操作指南

目前有两种方式可以登录工单系统，一种是通过公网地址登录工单系统，另一种是通过先进计算平台跳转登录。对应的网址有两个：

1、用于新用户发起资源申请，公网地址，无需登录 VPN 账号。

工单系统地址：<http://nsc.zzu.edu.cn/workorder>

2、用于已开通资源用户发起工单服务，需登录 VPN 账号。

工单系统地址：<http://172.99.2.103/>

4.1 登录

4.1.1 公网地址登录

工单系统公网地址：<http://nsc.zzu.edu.cn/workorder>

4.1.1.1 新用户账号注册

浏览器内输入工单系统公网地址，进入登录页面点击【注册账号】按钮，输入用户邮箱、密码、真实姓名、手机号，点击“注册”可进行账号注册，如图 4-1 所示。

注意：

1. 邮箱地址必须真实可用，否则无法激活账号。
2. 用户后期登录工单系统使用的账号即为邮箱地址。



图 4-1 工单系统用户注册

注册成功后，系统将会发送激活邮件到用户注册时填写的邮箱中，请在 30 分钟内点击链接激活账号，激活完成后，账号会变为启用状态，即可正常使用。



图 4-2 激活邮件示例

4.1.1.2 新用户账号登录

输入工单系统公网地址，进入登录页面，输入 4.1.1.1 注册的账号名（即：邮箱地址）、密码和验证码，即可登录。



图 4-3 工单系统登录页面

4.1.2 先进计算平台跳转登录

如果您有先进计算平台账号，可以登录 VPN，进入先进计算平台，在先进平台页面点击右上角的【工单】选项，即可转入工单登录界面，用户名默认为先进计算平台账号，根据提示填写用户信息与密码，填写完成后点击【绑定】，即可登录工单系统，如图 4-4，图 4-5，图 4-6 所示。

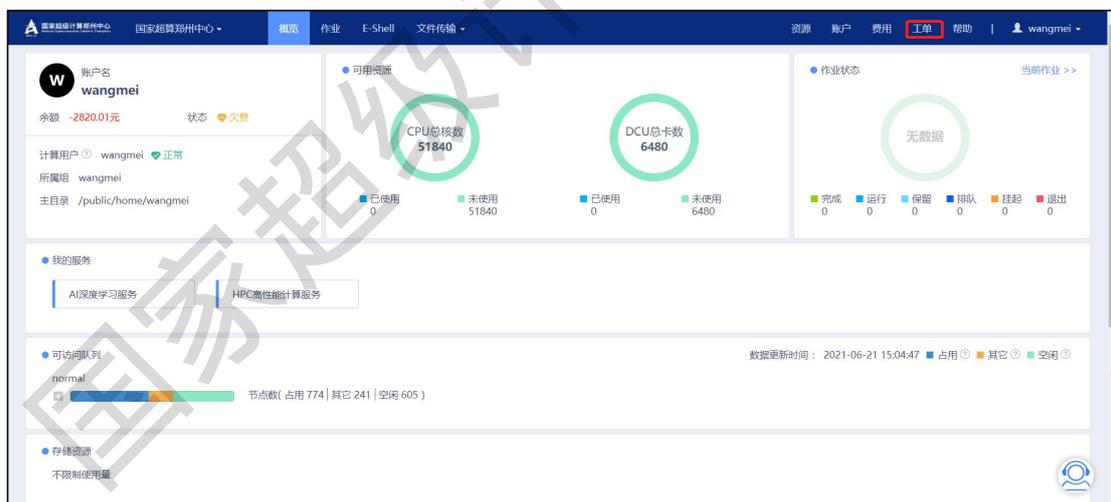


图 4-4 工单系统入口

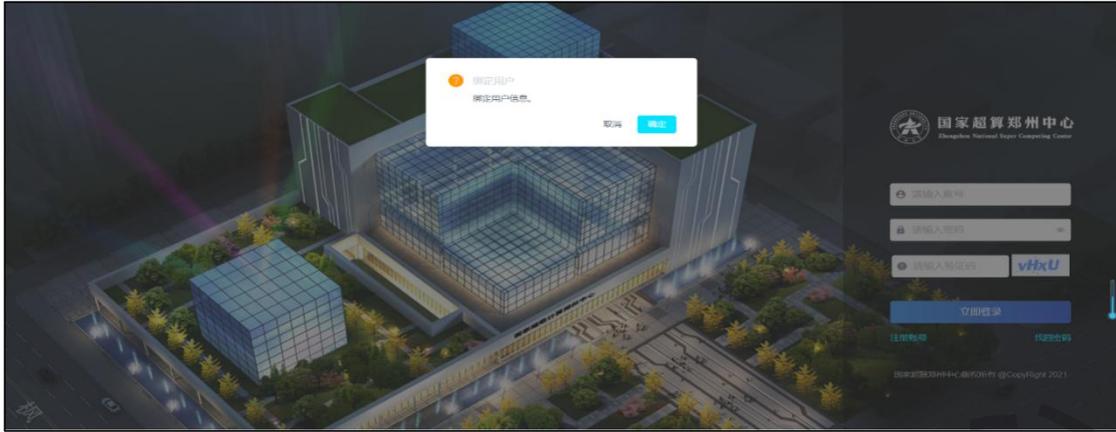


图 4-5 先进计算平台账号与工单系统账号绑定操作

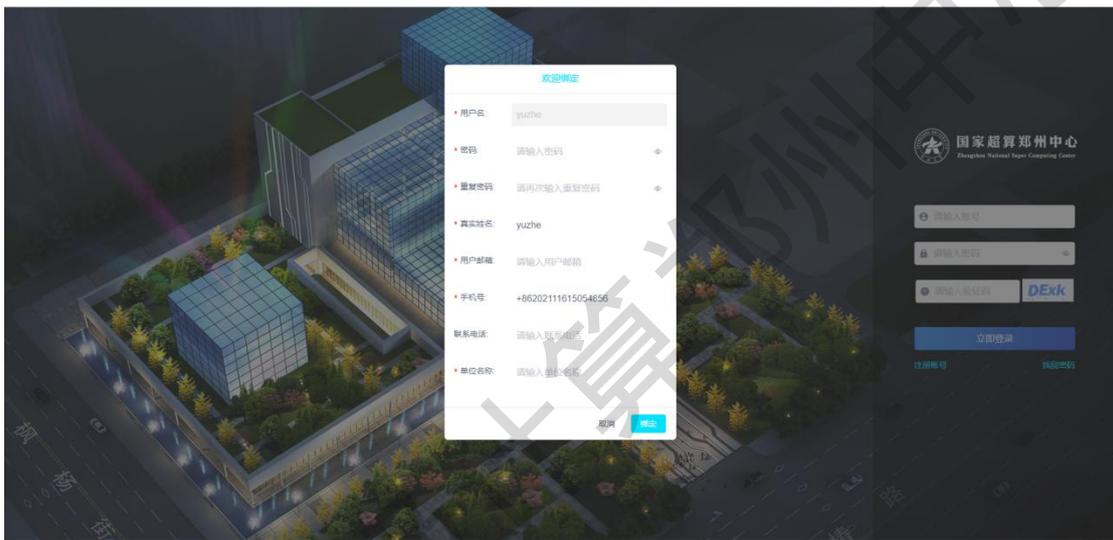


图 4-6 设置工单系统密码

4.2 修改个人信息

登录后点击右上角用户名下菜单【个人信息】，可修改用户个人信息和密码，如图 4-7 所示。

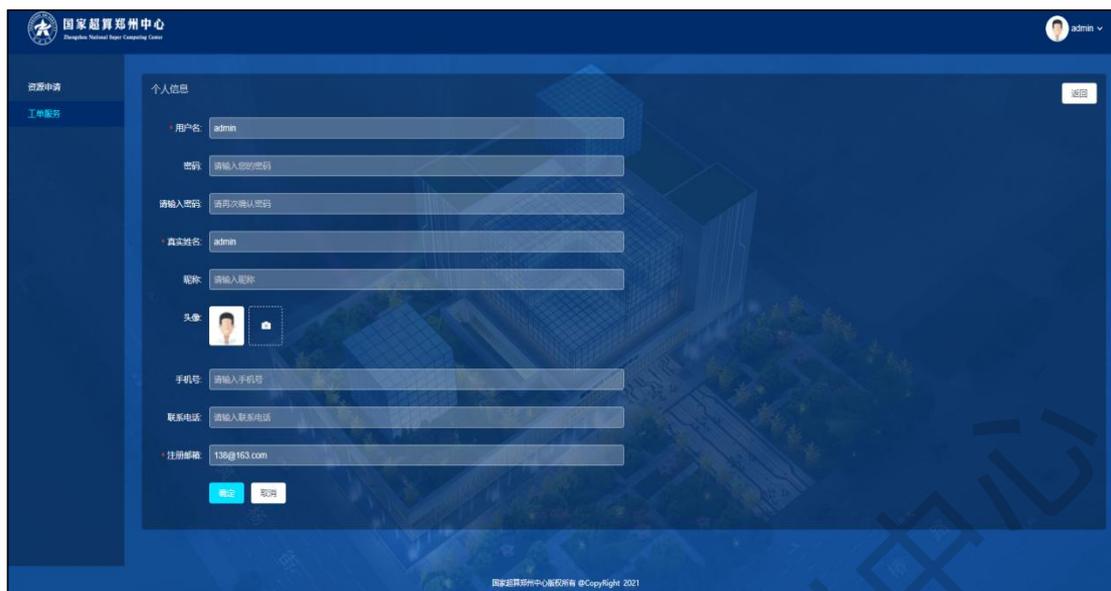


图 4-7 修改个人信息

4.3 资源申请

登录成功后，可以看到【我的资源】列表与【资源申请】入口，如图 4-8 所示。



图 4-8 资源申请首页

【我的资源】栏中包含【HPC】、【云计算】、【存储】、【业务映射】四种类型，可以点击标签查看不同类别的资源申请列表，如图 4-9 所示。

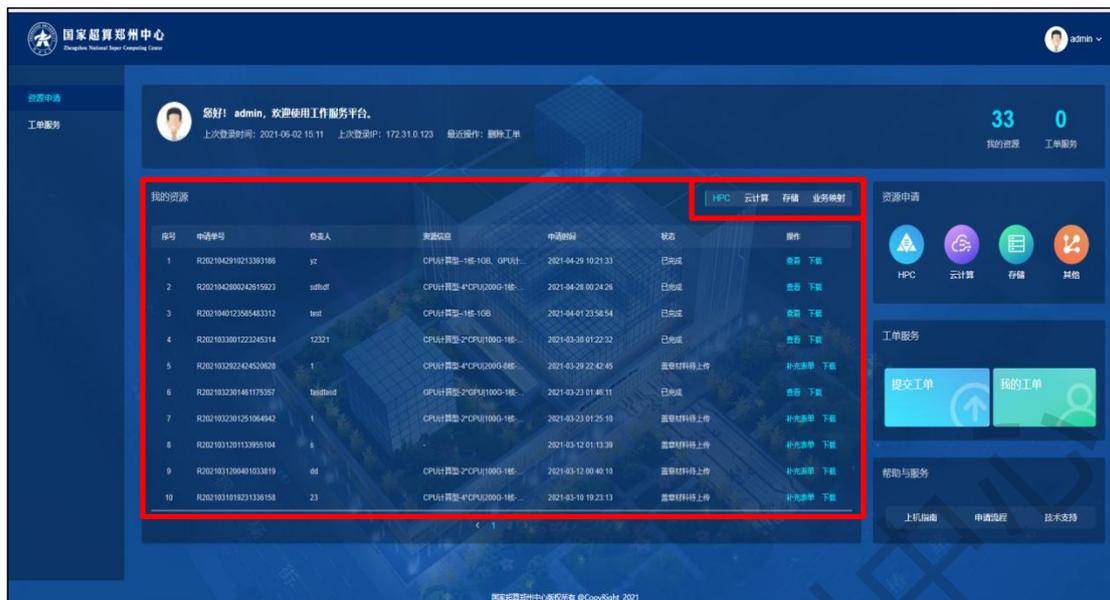
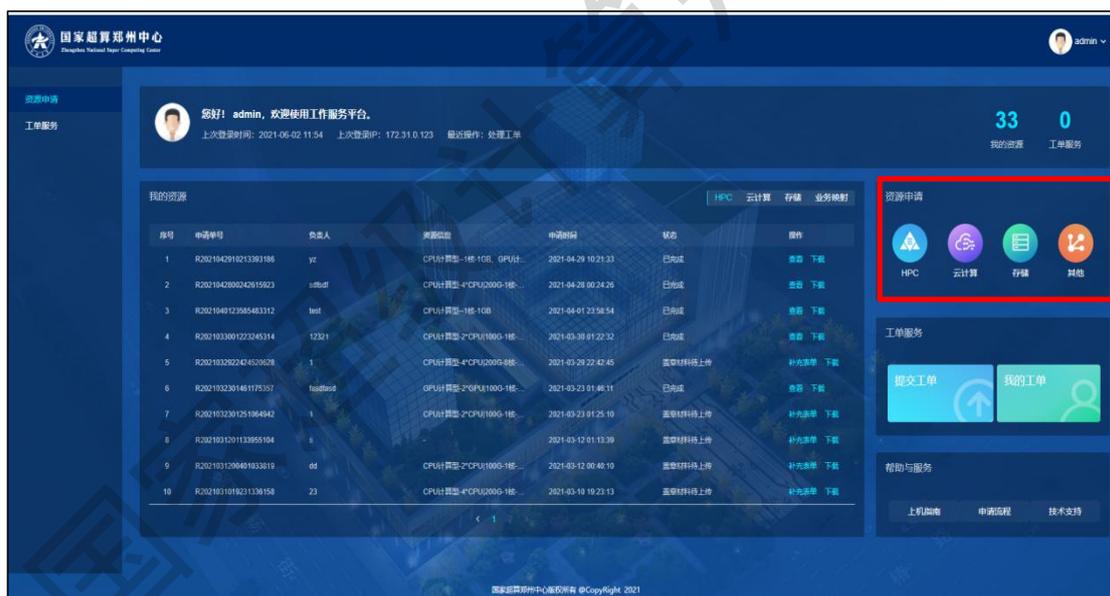


图 4-9 我的资源列表

【资源申请】栏中包含【HPC】、【云计算】、【存储】等，您可根据实际需求，申请不同类别的资源，如图 4-10 所示。



下面以申请 HPC 资源为例，对详细步骤作出说明。其他类型资源的申请流程与 HPC 资源申请基本一致。

点击资源申请-HPC，如下图 4-11 红框所示：



图 4-11 HPC 资源申请入口

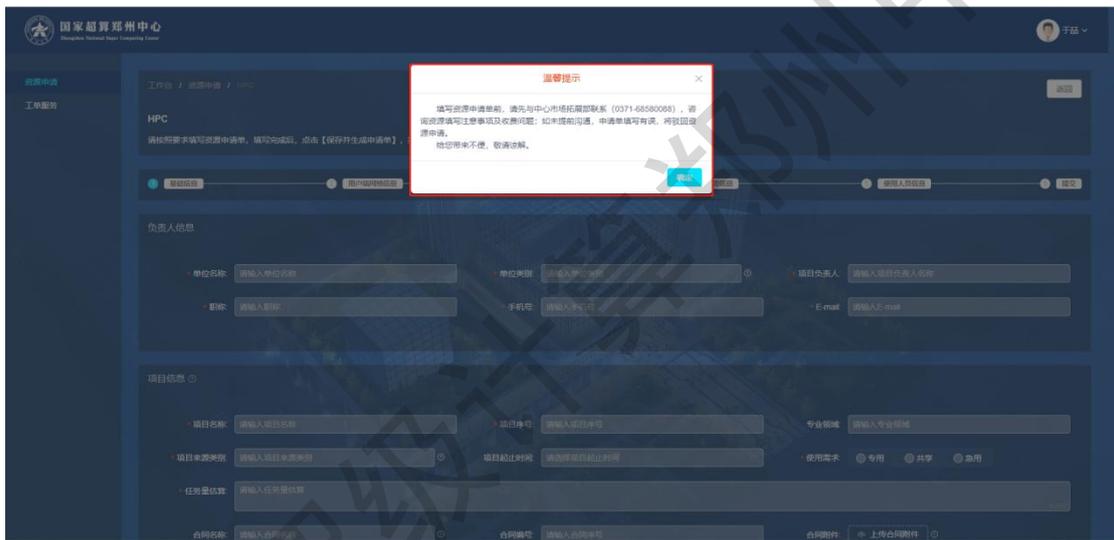


图 4-12 HPC 资源申请首页

根据图 4-13 到图 4-17 的提示，依次填写基本信息、用户端网络信息、预计使用情况、资源需求信息、账号使用人员信息等，最后【保存并生成申请单】。

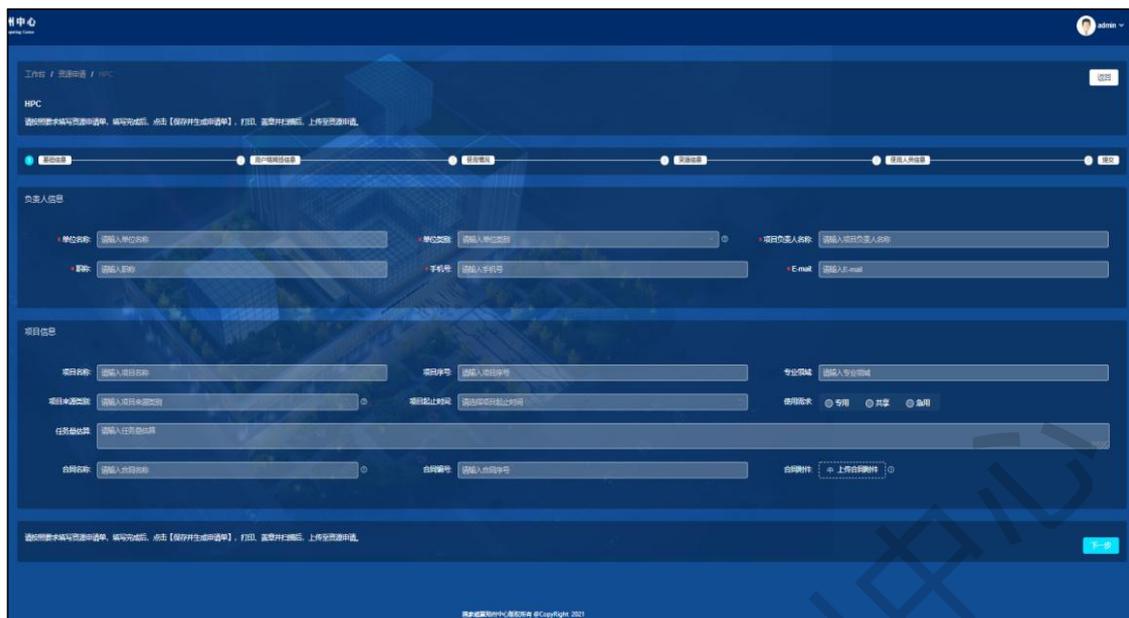


图 4-13 HPC 资源申请-填写负责人信息与项目信息

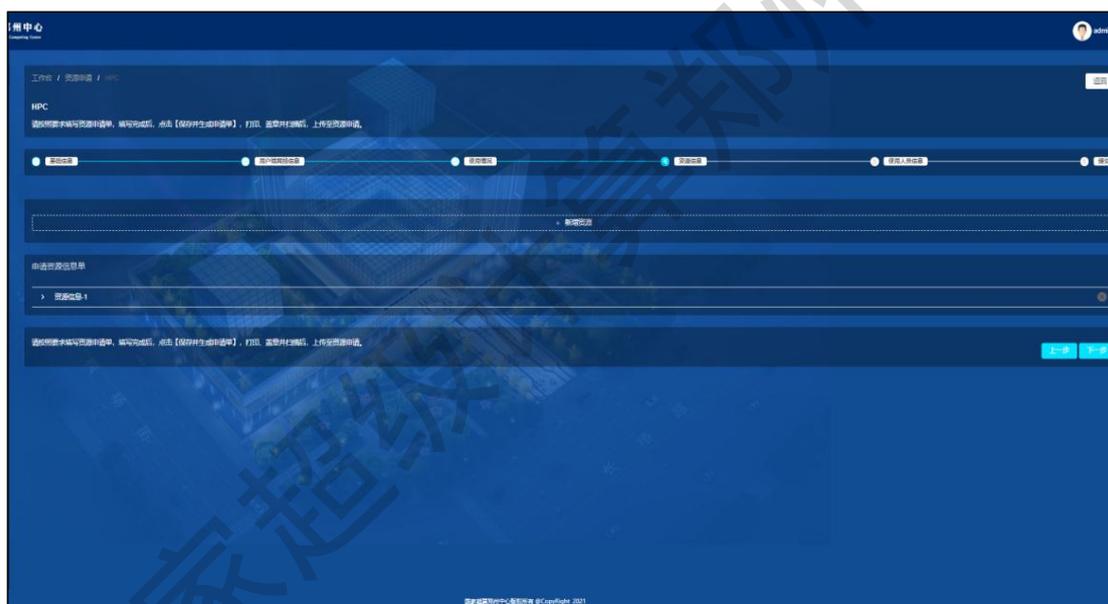


图 4-14 HPC 资源申请-填写客户端网络信息

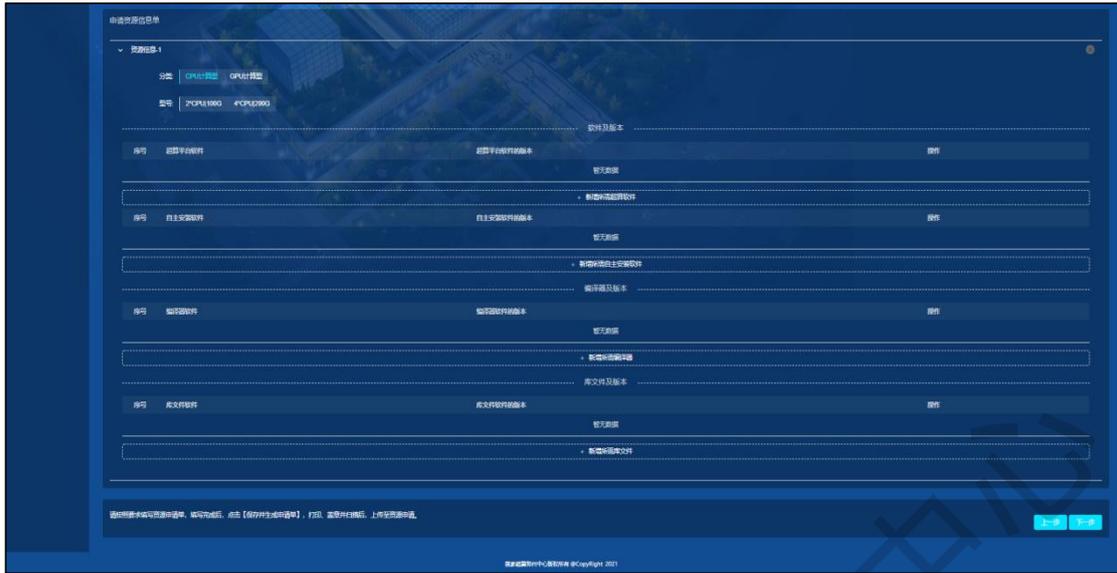


图 4-15 HPC 资源申请-填写详细资源需求

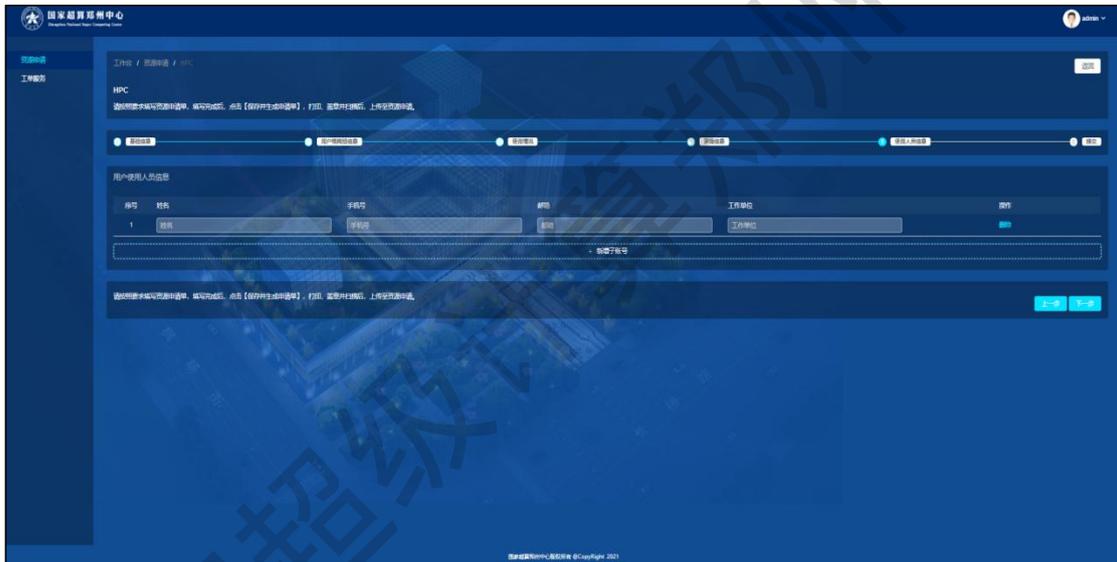


图 4-16 HPC 资源申请-账号使用人员信息

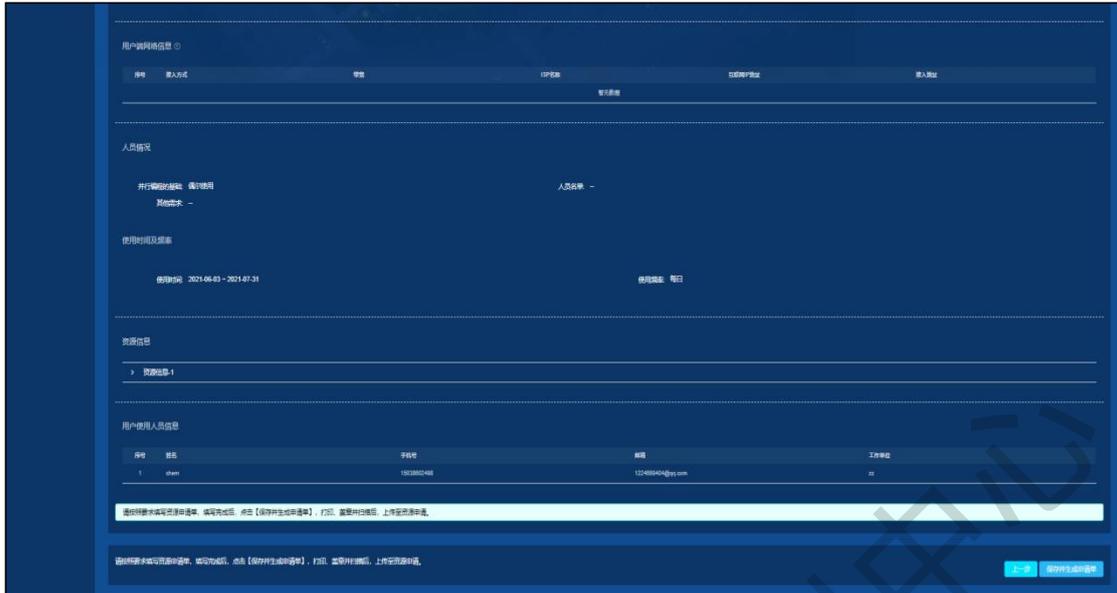


图 4-17 HPC 资源申请-保存并生成申请单

一定要注意：此时资源申请尚未结束，需补充提交签字、盖章后的电子资源申请单。

此时在【我的资源】列表【HPC】选项卡中可以看到本账号的资源申请记录，如图 4-18 所示。注意目前资源申请的状态为“盖章资料待上传”，由于您还没有完成整个资源申请流程，资源申请信息只有您本人可以查看，管理员目前无法看到。



图 4-18 用户 HPC 资源申请记录状态为“盖章材料待上传”

资源申请单下载完成之后，请与中心工作人员沟通，核对申请单信息。确认资源申请单内容无误后，可以打印、盖章并扫描。然后如图 4-92 至 4-20 所示，点击资源申请记录中的【补充表单】选项，进入资源申请详情页，点击【上传盖章材料】，将盖好章的资源申请单扫描件上传。最后点击【提交申请】，即完成资源申请，此时您的资源申请方可被工作人员看到并处理。



图 4-19 HPC 资源申请-补充表单



图 4-20 HPC 资源申请-上传盖章材料

注意：

- 1) 填写资源申请时，带*的为必填项，未带*的根据实际使用需求填写。
- 2) 点击【保存并生成申请单】，并不意味着您已经完成了资源申请的所有步骤！还需要在系统中上传已盖章的资源申请单，点击【提交申请】以后，工作人员才可以看到并处理您的申请。
- 3) 上传已盖章的资源申请单时，请将所有页面合并成 1 张图片，或 1 份 PDF 文档，不可分页上传。
- 4) 为了节省您的时间与精力，在提交资源申请之前，请与中心工作人员沟通，确认申请表格填写正确，内容完备，否则工作人员将做驳回处理。如果申请被驳回，您需要重新提交资源申请，从头填写所有内容。
- 5) 请实时关注资源申请进度，有问题及时向中心工作人员反馈。

4.4 工单服务

4.4.1 提交工单

通过点击主页左侧【工单服务】选项，或资源申请页面【工单服务】栏中的【提交工单】，可进入工单填写页面，如图 4-21 至图 4-22 所示。



图 4-21 提交工单-首页入口位置示意

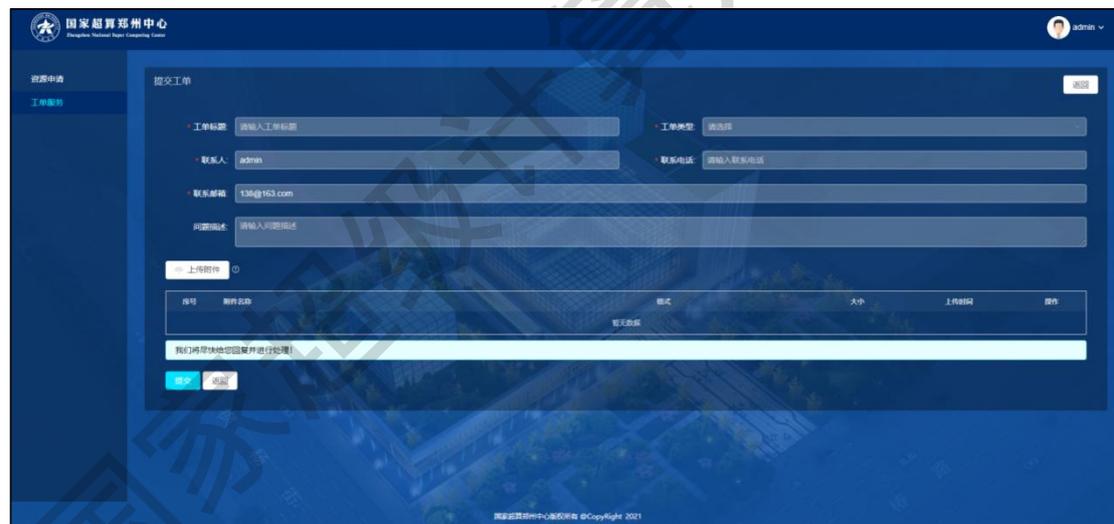


图 4-22 提交工单-工单填写页面

目前工单分为 VPN 账号问题、网络问题、软件移植与优化问题、先进计算平台账号问题、脚本问题及软件问题、系统账号问题、其他问题、AI 相关问题、账号到期续期问题，共 9 个类别。各类问题的具体范围，如表 4-1 所示。

表 4-1 工单问题分类

工单类型	问题范围	提交材料
VPN 账号问题	VPN 账号、密码以及 VPN 访问的授权和 VPN 登录故障等问题	故障信息描述、VPN 账户名、故障截图、授权截图
网络问题	网络故障（无法打开超算相关的系统及地址）	故障信息描述、故障截图
先进计算平台账户问题	账号密码故障 登录故障 平台故障 (eshell efile slurm 调度 快传 sothisai)	故障信息描述、故障截图、账户名
脚本问题及软件问题	脚本问题:slurm 脚本问题 软件调用问题 软件问题:协助软件安装 协助软件调试	故障信息描述、账户名、脚本或者程序路径、日志输出路径。上传脚本和报错文件
软件移植与优化问题	涉及 DCU 移植软件版本升级	需求信息描述、软件名称、版本号、是否属于开源软件和自研软件
系统账户问题	密码故障 登录故障 系统故障	故障信息描述、账户名、故障截图
其他	不知道归类的问题	故障信息描述，账号名等问题相关信息详细描述
AI 相关问题	Pytorch TensorFlow 等相关问题	故障信息描述、账户名、脚本或者程序路径、日志输出路径
账号到期续期问题	账号到期停用	<p>1. 已提交过纸质资源申请单的用户： 《国家级计算郑州中心账户延期人员信息统计表》 《国家级计算郑州中心用户使用情况调研表》</p> <p>2. 未提交过纸质申请单的用户： 《国家级计算郑州中心资源使用申请表》签字盖章版 《国家级计算郑州中心账户延期人员信息统计表》 《国家级计算郑州中心用户使用情况调研表》</p> <p>备注：工单系统界面可下载相关文档</p>

填写工单时，首先，如图 4-2 所示，填写联系方式，根据问题内容选择工单类型；然后，参照表 4-1、图 4-23、图 4-24，根据页面提示添加问题描述或上传相关附件，确认无误后，即可提交工单。

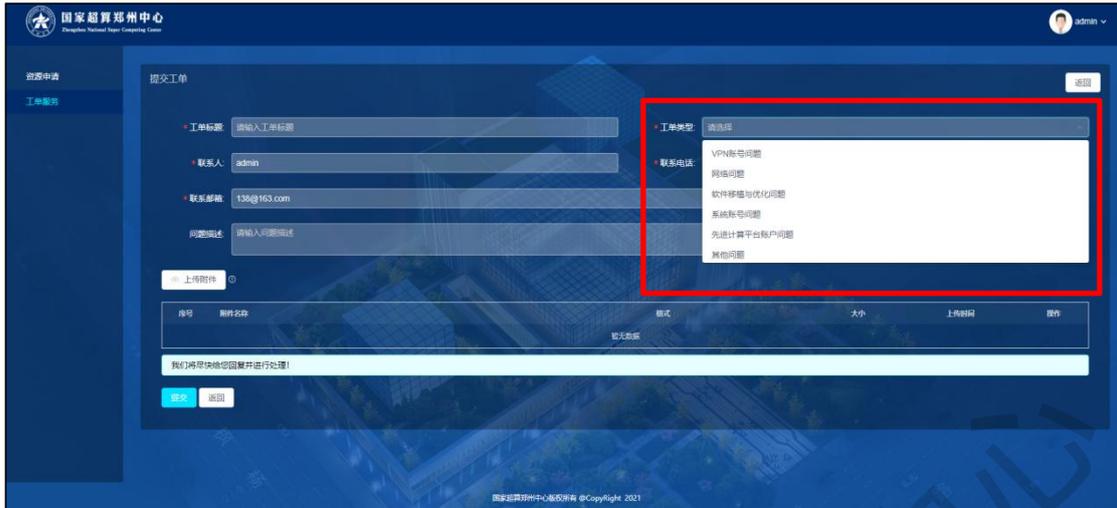


图 4-23 提交工单-工单问题分类



图 4-24 提交工单-问题描述与附件上传提示

其中，故障类工单若是脚本及软件问题中的作业故障问题，需上传附件，示例如下：

1) 已经产生作业号的问题

作业 ID:7274385

作业脚本路径: /public/home/lihua/testjob

问题描述: 运行作业报错，报错信息如下

error while loading shared libraries: libgromacs_mpi_d.so.6: cannot open shared object file:

No such file or directory

```
error while loading shared libraries: libgromacs_mpi_d.so.6: cannot open shared object file: No such file or d
error while loading shared libraries: libgromacs_mpi_d.so.6: cannot open shared object file: No such file or d
error while loading shared libraries: libgromacs_mpi_d.so.6: cannot open shared object file: No such file or d
```

其他信息：截图是报错的一部分信息，完整日志路径是：
/public/home/lihua/testjob/slurm-7274385.out

2) 未产生作业号的作业

作业 ID: 未产生作业号

同上格式填写

注意：用户需详细描述问题，并提供报错内容的截图，未提供者予以驳回。

4.4.2 查询工单

如图 4-25 至 4-26 所示，提交工单后，点击【工单服务】栏中的【我的工单】按钮，可以查看已经提交的工单及处理进度，如果工单状态为“待关闭”，进入工单进行评价后可结束工单。

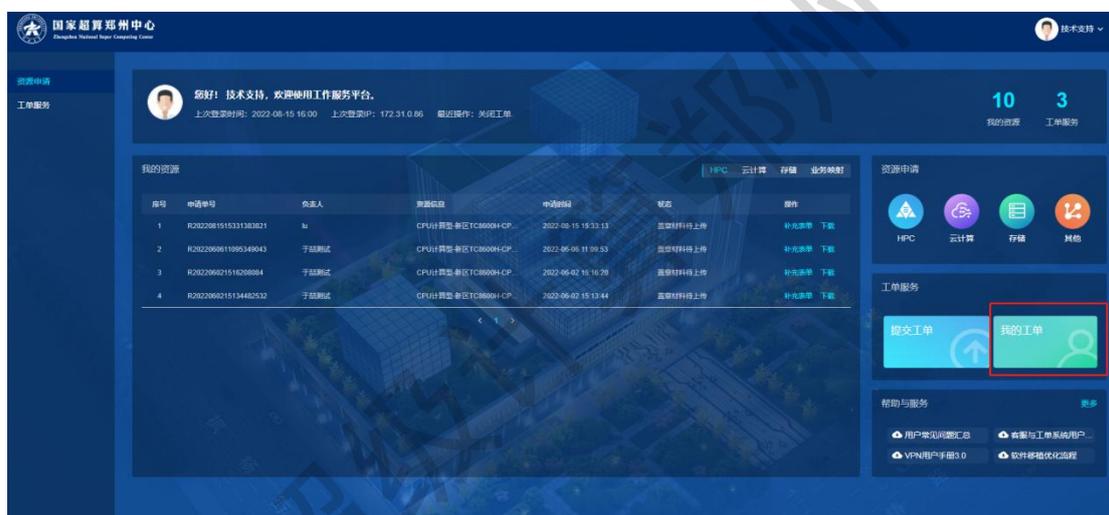


图 4-25 工单查询入口



图 4-26 工单列表

4.5 帮助与服务

如图 4-27 所示，查看工单系统首页右下角【帮助与服务栏】，下载相关用户手册。

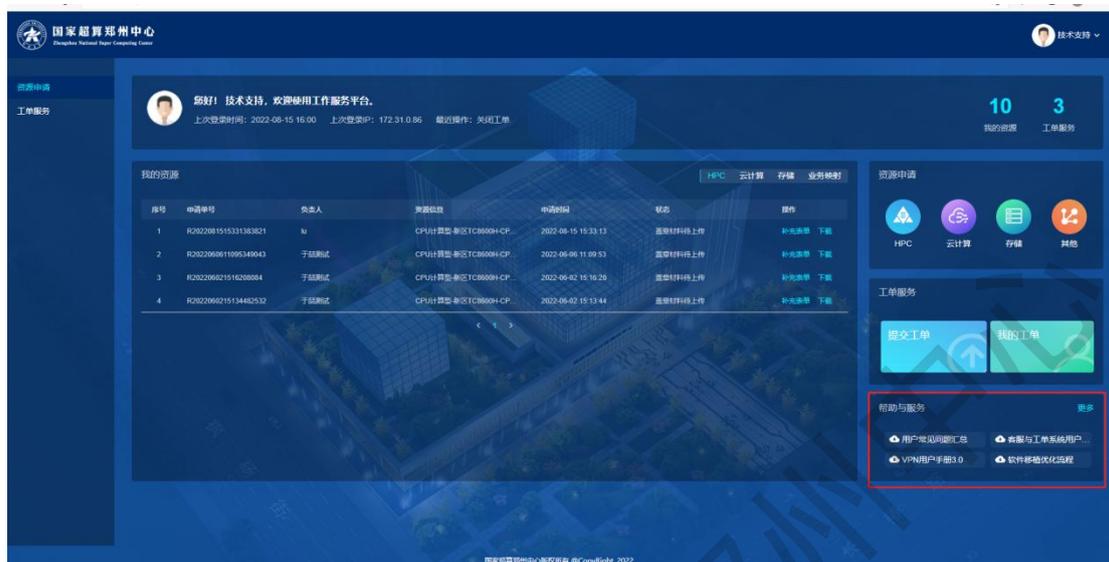


图 4-27 帮助与服务

4.6 注意事项

注意事项：

1) 在工单服务中，如果问题类型是脚本问题及软件问题、软件移植与优化问题，那么工单处理周期相对较长。如果用户提交的工单信息不足以判定和解决问题，工作人员将在两个工作日内联系用户，了解问题详情，并及时沟通问题处理动态和处理结果，请您保持通讯畅通，及时接听电话。

2) 工作时间

法定工作日：夏季 8:30-12:00 15:00-18:00

冬季 8:30-12:00 14:30-17:30

3) 如遇重大紧急问题可通过电话、微信等方式联系相关工作人员及时处理。

国家超级计算郑州中心

地址：中国河南郑州高新区长椿路 123 号

邮箱：nsczzz_support@zzu.edu.cn

官网：<http://nsc.zzu.edu.cn/>

电话：0371-68580066

