

一、用户登录

内网地址	VPN地址	VPN访问地址	SSH端口号
10.4.3.17	https://159.226.92.73	172.21.0.13	10190

数学院内登录：

1、Linux 系统登录

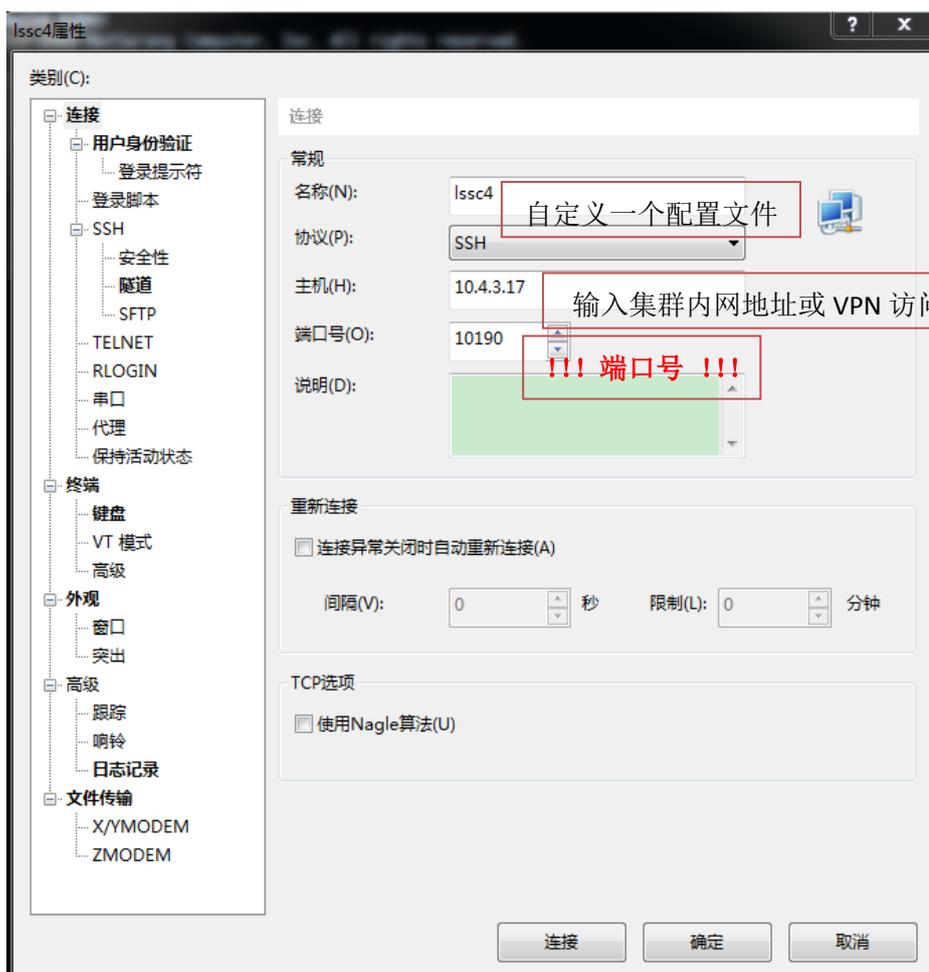
```
$ssh username@10.4.3.17 -p 10190 //username 为集群账号
```

输入密码后即可登录

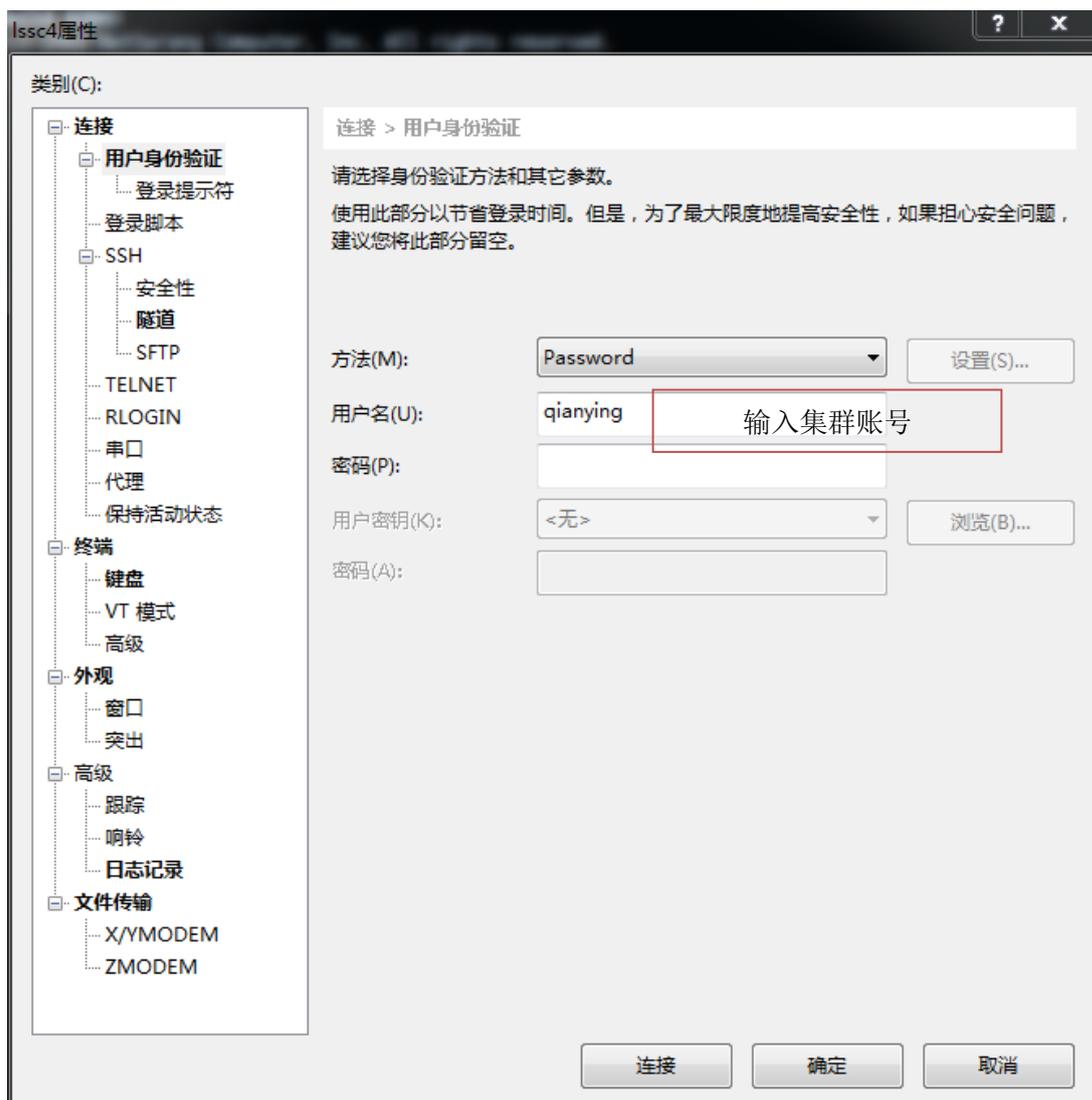
2、Windows 系统登录

以 Xshell 客户端举例说明：

Step 1. 点击 Xshell 左上角文件按钮，点击新建，输入 IP 地址和端口号；



Step 2. 点击用户身份验证，输入上机账号，点击“连接”按钮，输入密码即可登录。



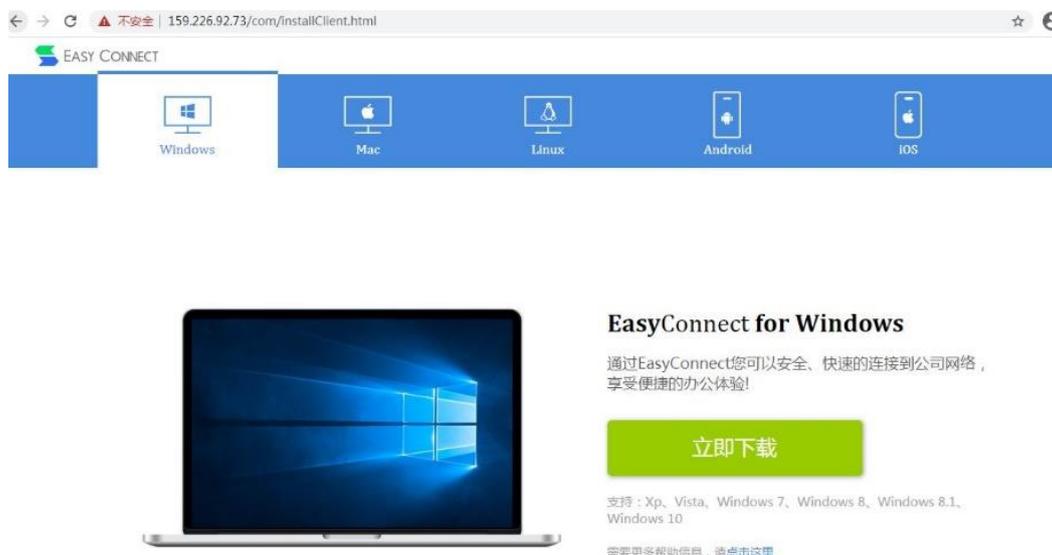
Step 3. 点击连接即可登录集群，下次登录时只需点击左上角文件打开该连接即可

外网登录:

Step 1 通过浏览器（以 IE 为例）访问 <https://159.226.92.73/>，遇到提示安全证书问题选择“继续浏览此网站”



Step 2 第一访问会进入深信服客户端软件下载页面。根据自己的操作系统选择相应客户端下载并安装。



Step 3 运行“Easy Connect”软件，输入用户名密码登录（同集群账号密码）



Step 4 VPN 登录后再通过 ssh 登录集群 vpn 访问地址即可。登录方法可参考上一节数学院内 ssh 登录，只是把服务器地址换成 172.21.0.13。

注意： Easy Connect 的 Linux 客户端存在一些兼容性问题。以 Ubuntu20.04 为例，需要安装低版本的 libpango libpangocairo libpangoft2 库，并手动启动 sslservice。具体可下载补丁包，并阅读包内 README.txt

<http://lsec.cc.ac.cn/~tcui/download/forUbuntu2004LTS.tar.gz>

二、用户密码管理

用户可使用 passwd 命令根据提示进行密码修改。

强烈要求用户不得使用简单密码，密码长度必须超过 8 位并且包括大写字母、小写字母和数字。

三、并行编译环境

Module 使用

- 1) 加载模块 `module load 模块名称`
- 2) 清除当前所有已加载模块: `module purge 模块名称`
- 3) 查看当前所有可用模块名称: `module avail 模块名称`
- 4) 查看当前已加载模块列表: `module list 模块名称`

编译环境

集群默认的编译环境是 GNU 4.8.5, 用户可以通过 `module` 加载需要的编译环境, 包括:

- 1) Intel Compiler 2017u4 (compilers/intel 或者 compilers/intel-2017u4)
- 2) GNU Compiler 10.2.0 (compilers/gcc-10.2.0)
- 3) Intel Oneapi Compiler 2021 (compilers/oneapi-2021.1.1)

注: () 内为模块名称

并行环境

目前配置的 MPI 并行环境包括: Intel MPI (缩写为 impi)、Intel oneapi MPI (缩写为 oneapimpi)、mvapich2、openmpi 和 mpich, 它们的模块名称的命名规则为:

`mpi/MPI 缩写名-版本号-编译器名-版本号`

例如:

- `module load mpi/impi-2017u3` 命令表明加载 Intel MPI 2017u3 版本, 编译器为默认的 GNU 编译器。
- `module load mpi/impi-2017u3-intel-2017u4` 命令表明为加载 Intel MPI 2017u3 版本, 编译器为 intel compiler 2017u4。

推荐使用模块: `mpi/oneapimpi-oneapi-2021`

对于一些不被经常使用的编译器和 MPI, 但是可能会被一些老旧的软件包使用的环境, 我们会将其模块名称变为 `obsoleted` 开头, 例如:

`obsoleted/mpi/openmpi-3.1.6-gcc-4.8.5`

。

四、常用软件

不同版本的软件, 也通过 `module` 进行加载相关环境设置。

数学库

目前系统提供两个版本的 Intel MKL，分别是：

- 1) 2017u4 版本，模块名称： apps/mkl-2017u4
- 2) Oneapi 2021.1.1 版，模块名称： apps/mkl-oneapi-2021

PHG

集群系统提供不同版本的 PHG 极其支撑库（包括相应版本 petsc, hypre, mumps, superlu, parpack, minres 等），并安装在目录 /soft/apps/phg/编译器/MPI 环境/，可以通过 module 加载相关编译和并行环境及 MKL 库模块，并设定 PHG_MAKEFILE_INC, PETSC_DIR, PATH, CPATH, LD_LIBRARY_PATH 等环境变量。其中 \$PHG_MAKEFILE_INC 是 PHG 的 Makefile.inc 文件路径，可以用于 PHG 应用程序 Makefile 文件编写，用户在自己的 Makefile 文件中添加下面一行（“include \$PHG_MAKEFILE_INC”）即可使用环境设定的 phg 库

下面举例说明 module 加载 phg 环境后对相关环境的设定，例如：

执行命令： module load phg/intel-2017u4/impi-2017u3/0.9.6

该命令将加载 mpi/impi-2017u3-intel-2017u4 模块，设定用 Intel 2017u4 编译器以及使用 Intel mpi 2017u3 编译的 phg-0.9.6 库及相关环境变量。（注：下面提到的环境变量不建议用户自行更改，否则容易出现各种编译运行错误）

- 其中环境变量 \$PHG_MAKEFILE_INC 将被赋值为
/soft/apps/phg/intel-2017u4/impi-2017u3/phg-0.9.6/share/phg/Makefile.inc
- 环境变量 \$PETSC_DIR 将被赋值为
/soft/apps/phg/intel-2017u4/impi-2017u3/petsc
- Hypre 库被安装在
/soft/apps/phg/intel-2017u4/impi-2017u3/hypre
- 其他支撑库的 .so 和 .h 文件分别安装在
/soft/apps/phg/intel-2017u4/impi-2017u3/lib
/soft/apps/phg/intel-2017u4/impi-2017u3/include

使用 module avail 查看更多 phg 相关模块，也可以下载 PHG 源码自行编译，用 /soft/apps/phg/phg-config.sh 配置即可。

推荐使用模块： module load phg/intel-2017u4/impi-2017u3/0.9.6

四、提交作业

作业脚本提交

LSF 作业模板详细解释

```
#BSUB -J job_name           //作业名
#BSUB -n 72                 //总体申请使用的核数，并行作业建议按照 36 的整数倍进行申请，示例中均以 72 进行操作
#BSUB -o %J.lsf.out        //标准输出文件名称，%J 表示作业 id 号，如 384.lsf.out
#BSUB -e %J.lsf.err        //错误输出文件名称，%J 表示作业 id 号，如 384.lsf.err
#BSUB -W 60                 //作业最长运行时间，以分钟为单位，超过自动杀作业
#BSUB -q batch              //使用队列的名字 batch
#BSUB -R "span[ptile=36]"   //每个节点使用 36 核

module purge                //清空 module
module load mpi/impi-2017u3-intel-2017u4 //加载需要的 module

cd $LS_SUBCWD
mpirun ./your_program
```

通用串行作业 lsf.sh 示例，提交方式 `bsub < lsf.sh`

```
#BSUB -J job_name
#BSUB -n 1
#BSUB -o %J.lsf.out
#BSUB -e %J.lsf.err
#BSUB -W 60
#BSUB -q batch
#BSUB -R "span[ptile=36]"

module purge
module load compilers/intel-2017u4

cd $LS_SUBCWD
```

```
./ABC.exe
```

通用并行纯 MPI 作业示例，提交方式 `bsub < lsf.sh`

```
#BSUB -J job_name
#BSUB -n 72
#BSUB -o %J.lsf.out
#BSUB -e %J.lsf.err
#BSUB -W 60
#BSUB -q batch
#BSUB -R "span[ptile=36]"

module purge
module load mpi/impi-2017u3-intel-2017u4

cd $LS_SUBCWD
mpirun ./ABC.exe
```