



系统概况

硬件信息

1. CPU 和 small 队列

处理器	2 x Intel Xeon Scalable Cascade Lake 6248 (2.5GHz, 20 cores)
节点数	656
节点内存	12 x Samsung 16GB DDR4 ECC REG 2666
总核数	26240

2. huge 队列

处理器	4 x Intel Xeon Scalable SkyLake 6148 (2.4GHz, 20 cores)
节点数	2
节点内存	48 x Hynix 64G DDR4 ECC REG 2666 (3TB)
总核数	160

3. dgx2 队列

处理器	2 x Intel Xeon Scalable Cascade Lake 8168 (2.7GHz, 24 cores)
节点数	8
节点内存	1.5 TB DDR4 ECC REG 2666
总 GPU	128 x NVIDIA Tesla V100

4. 存储

Lustre 系统	14 PB
-----------	-------

连接

使用浏览器访问 **Studio** 可视化计算平台

```
https://studio.hpc.sjtu.edu.cn/
```

或者 **SSH** 登陆

```
$ ssh user@login.hpc.sjtu.edu.cn
```

作业提交

Slurm 作业系统

1. CPU 队列 Slurm 脚本示例

```
#!/bin/bash

#SBATCH --job-name=test           # 作业名
#SBATCH --partition=cpu           # cpu 队列
#SBATCH -n 80                     # 总核数
#SBATCH --ntasks-per-node=40     # 每节点核数
#SBATCH --output=%j.out          #
#SBATCH --error=%j.err           #
```

2. small 队列 Slurm 脚本示例

```
#!/bin/bash

#SBATCH --job-name=test           # 作业名
#SBATCH --partition=small        # small 队列
#SBATCH -n 20                   # 总核数需 <=39
#SBATCH --ntasks-per-node=20    # 每节点核数
#SBATCH --output=%j.out          #
#SBATCH --error=%j.err           #
```

3. Slurm 命令

Slurm命令	功能
sinfo	集群状态
squeue	作业状态
sbatch	作业提交
scontrol	查看和修改作业参数
sacct	已完成作业报告
scancel	删除作业

4. 作业提交

```
$ sbatch slurm.test
```

5. 申请计算节点资源提交交互式任务

```
$ srun -p small -n 4 --pty /bin/bash
```

软件模块

module 软件模块

1. 查看 Pi 上已安装的模块

```
$ module av 软件名
```

2. 加载需要的模块 (lammps 为例)

```
$ module load lammps/2020-cpu
```

3. Slurm 脚本 (lammps 为例, 使用 2 个 cpu 节点计算)

```
#!/bin/bash

#SBATCH --job-name=test
#SBATCH --partition=cpu
#SBATCH -n 80
#SBATCH --ntasks-per-node=40
#SBATCH --output=%j.out
#SBATCH --error=%j.err

module load lammps/2020-cpu

ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited

srun --mpi=pmi2 lmp -i YOUR_INPUT_FILE
```

常用链接

HPC 网站

<https://hpc.sjtu.edu.cn>

用户文档

<https://docs.hpc.sjtu.edu.cn>

学习视频

<https://space.bilibili.com/483478550>

Pi 实时利用率

<https://account.hpc.sjtu.edu.cn/top/>

账户查询

<https://account.hpc.sjtu.edu.cn>

联系我们

hpc@sjtu.edu.cn

公众号: SJTU智算

