用户登录和作业提交规范流程

一、登录

通过 ssh 远程登录到超级计算中心 ln01 节点（219.231.162.66）

- 如果本地操作系统为 Linux 系统，可直接远程连接并输入用户名及密码登录：

```
$ ssh  用户名@219.231.162.66
```

- 其他操作系统请先**安装 ssh 登录软件**，如

Putty（http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/）

免费版 Xshell（http://www.netsarang.com/xshell_download.html）

Bitvise SSH

MobaXterm

DameWare SSH

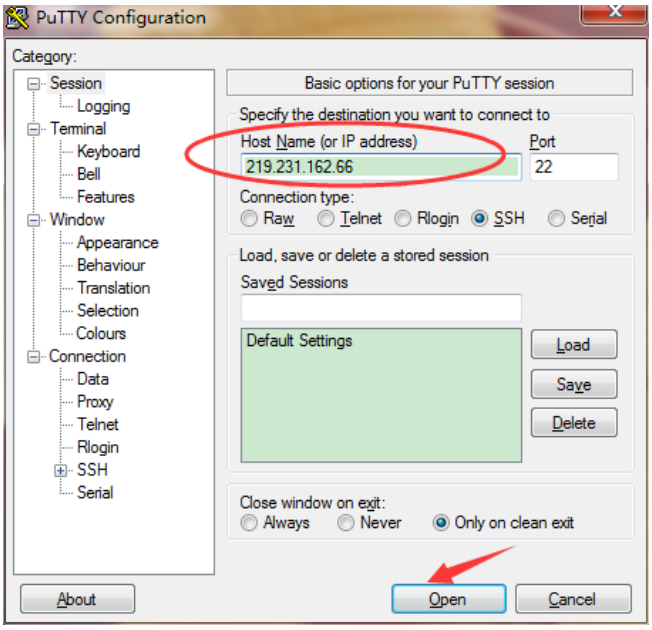
SmarTTY

Cygwin 等。

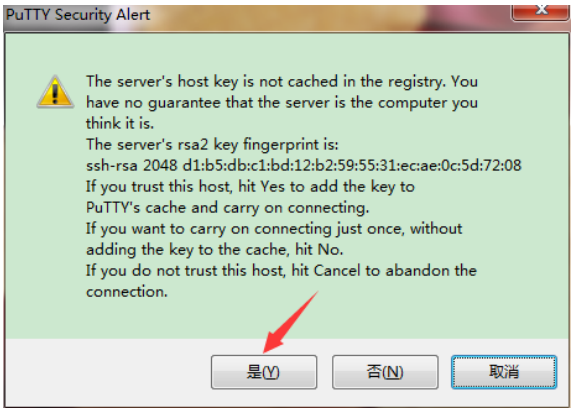
若需传输较多文件，建议使用免费版 Xshell。

示例 1：利用 PuTTY 登录 ln01 节点，步骤如下：

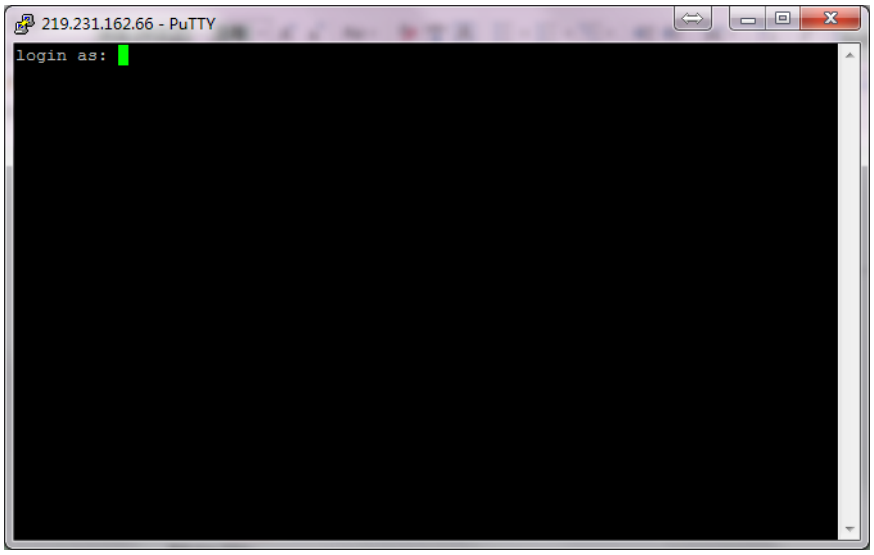
首先运行 PuTTY 程序，进行登录设置



点击 Open 按钮，第一次登录会弹出如下对话框，选择是



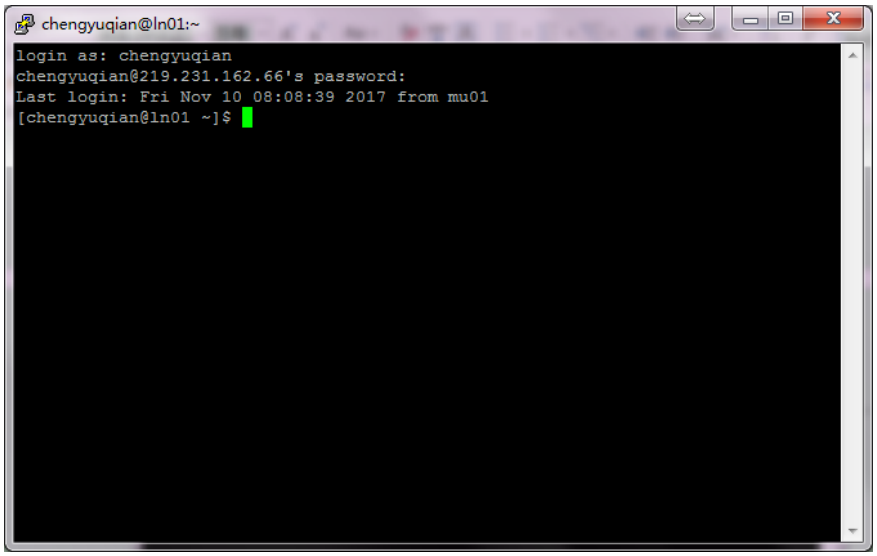
输入用户名后点击回车按钮



输入密码（注意此处敲入的密码自动隐藏，请正确输入密码后点击回车按钮）

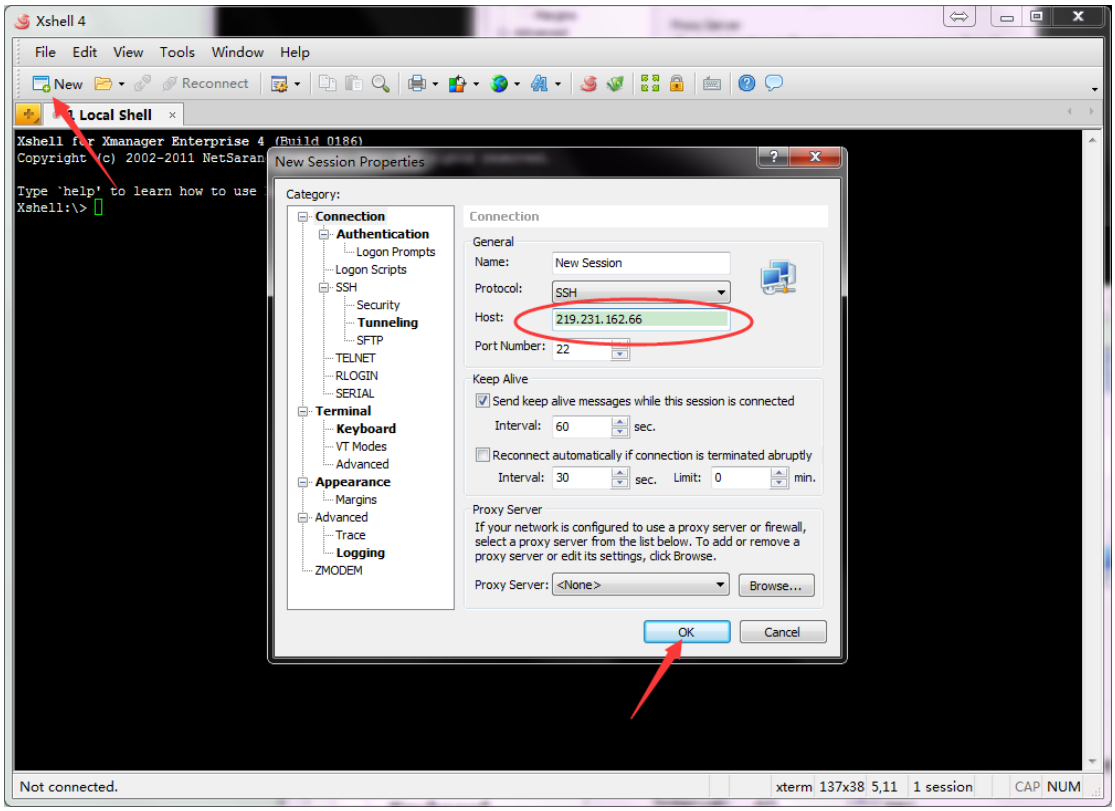


登录成功

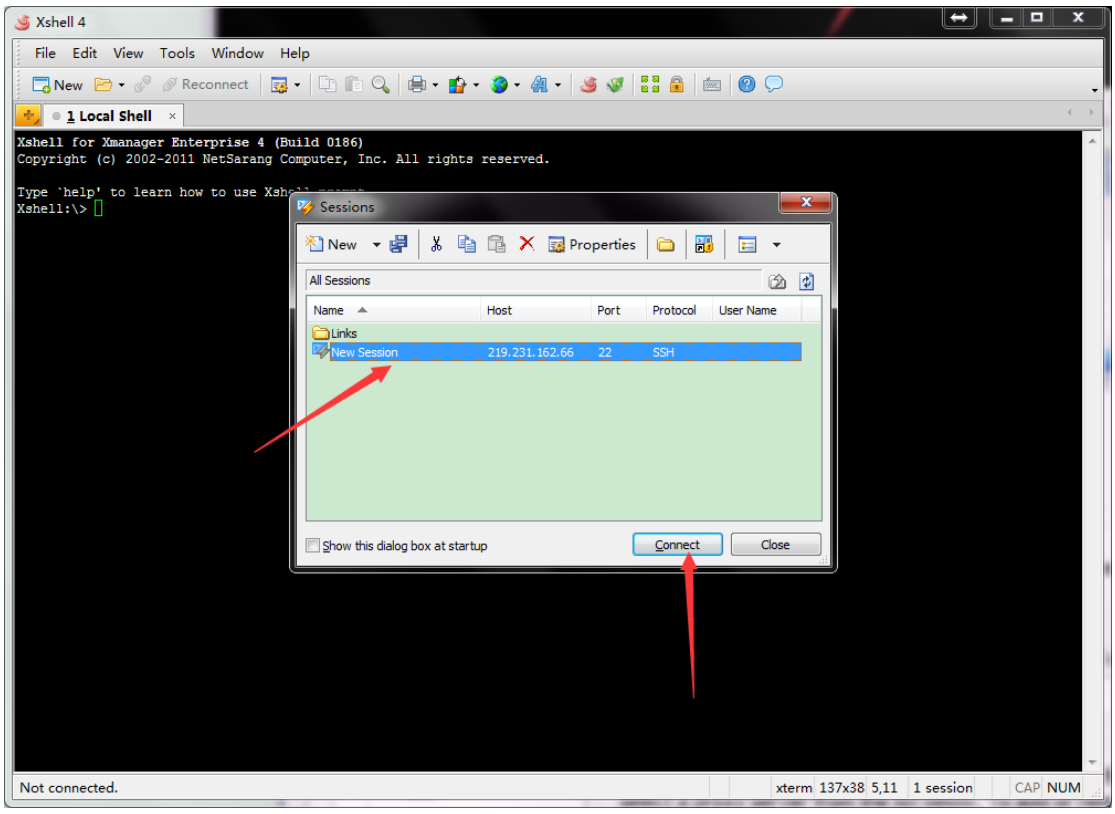


示例 2：利用 Xshell 登录 ln01 节点，步骤如下：

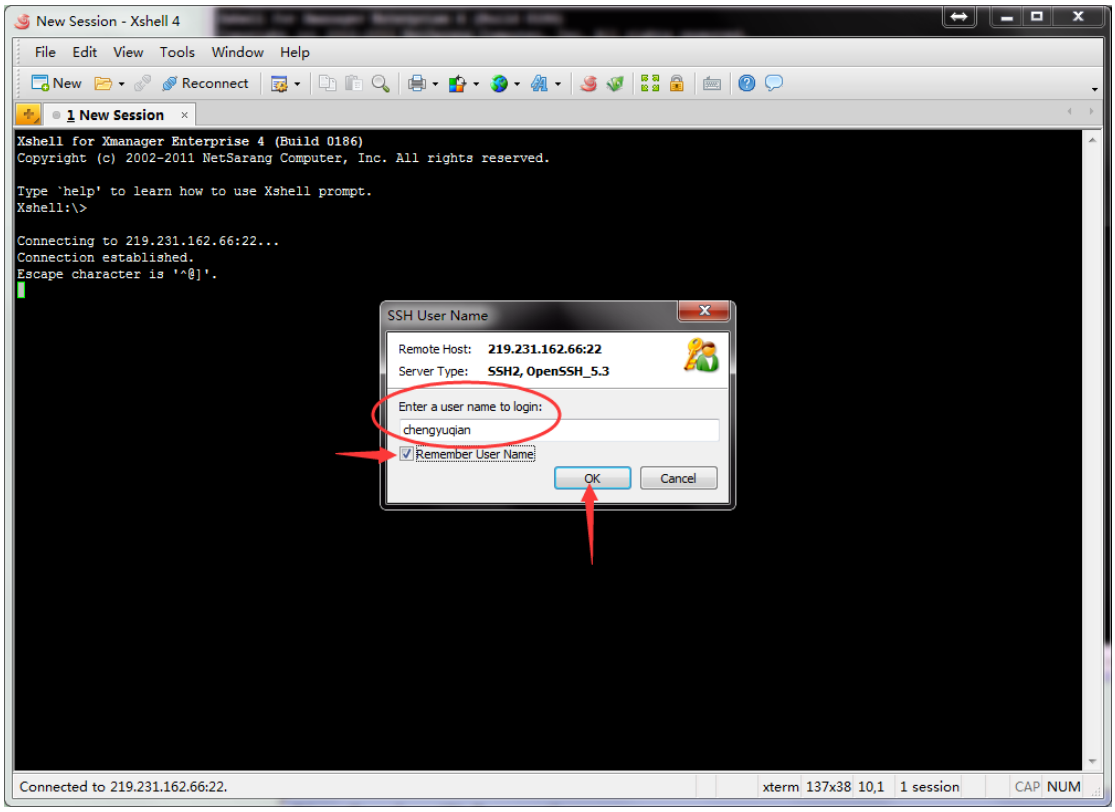
运行 Xshell 程序，点击 New 按钮新建会话，进行登录设置



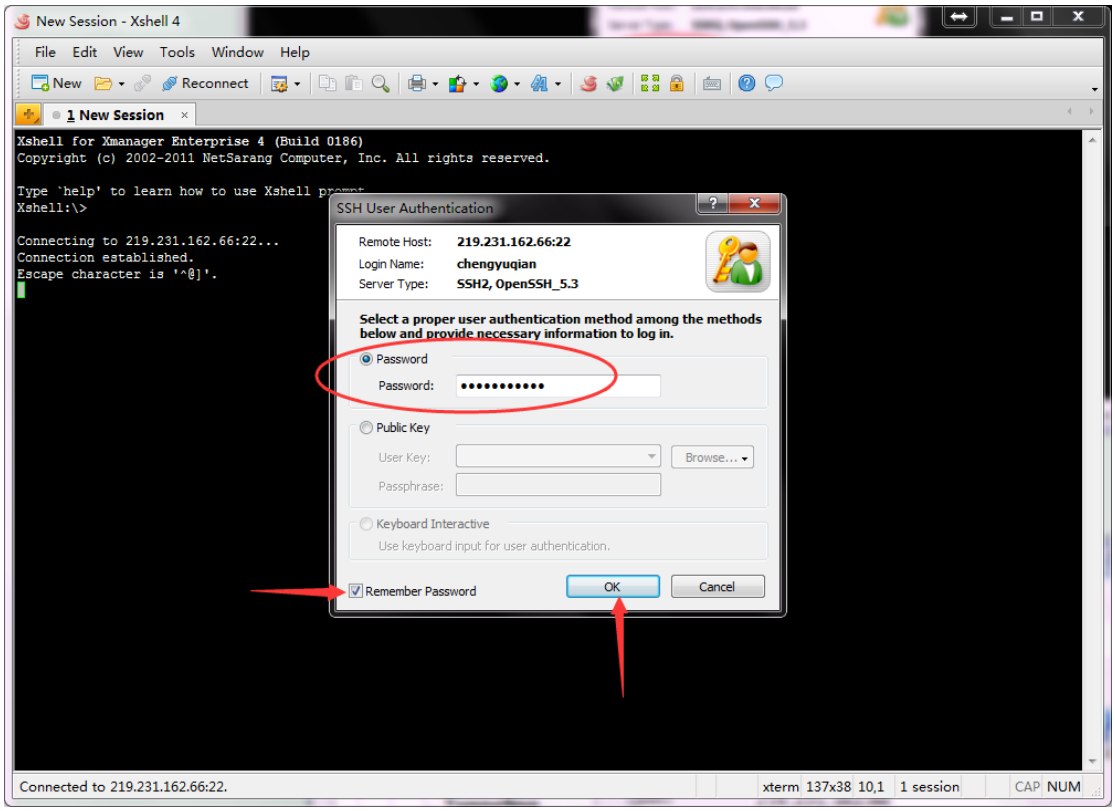
点击 OK 按钮后，新建会话成功；在会话列表点击对应会话，并连接



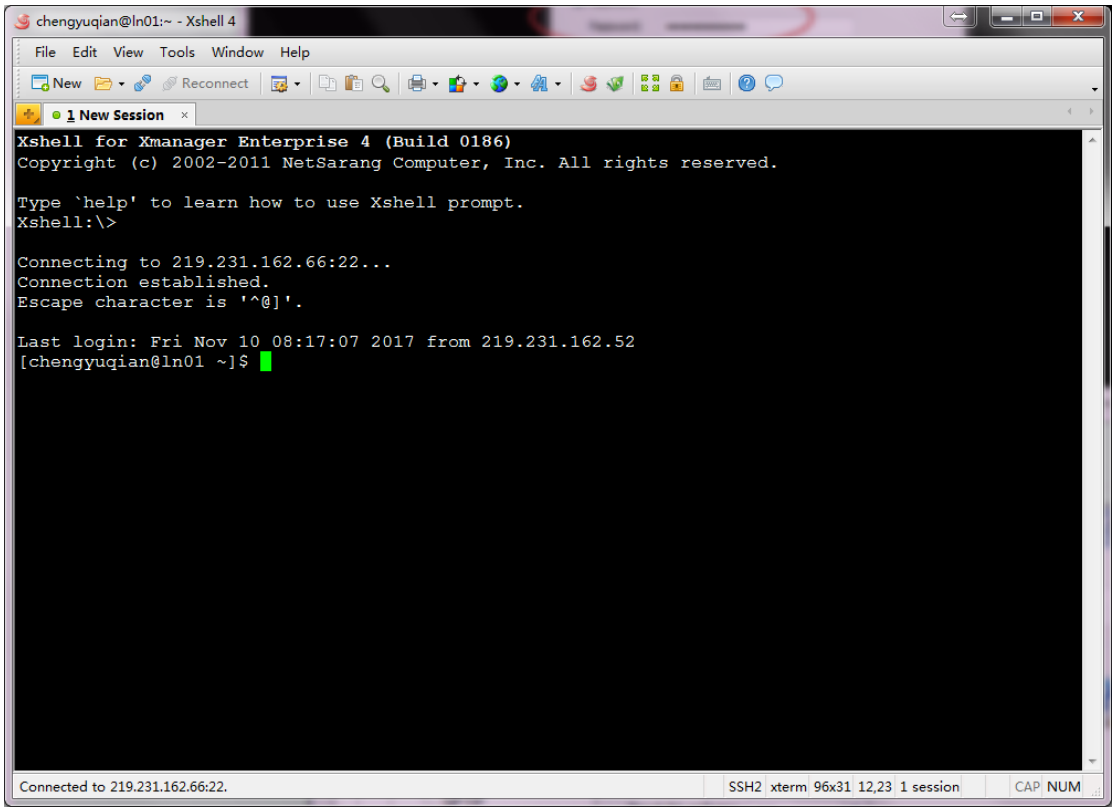
输入用户名，可根据需要选择是否记住用户名（需重复登录可勾选；公用电脑请勿勾选）



输入密码，可根据需要选择是否记住密码（需重复登录可勾选；公用电脑请勿勾选）



登录成功

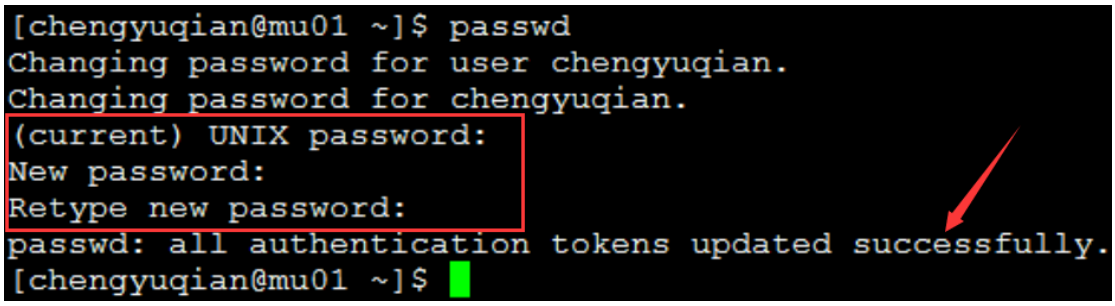

chengyuqian@ln01:~ - Xshell 4
File Edit View Tools Window Help
New Reconnect
1 New Session
Xshell for Xmanager Enterprise 4 (Build 0186)
Copyright (c) 2002-2011 NetSarang Computer, Inc. All rights reserved.
Type `help' to learn how to use Xshell prompt.
Xshell:\>
Connecting to 219.231.162.66:22...
Connection established.
Escape character is '^@]'.
Last login: Fri Nov 10 08:17:07 2017 from 219.231.162.52
[chengyuqian@ln01 ~]$
Connected to 219.231.162.66:22.
SSH2 xterm 96x31 12,23 1 session
CAP NUM

二、修改密码

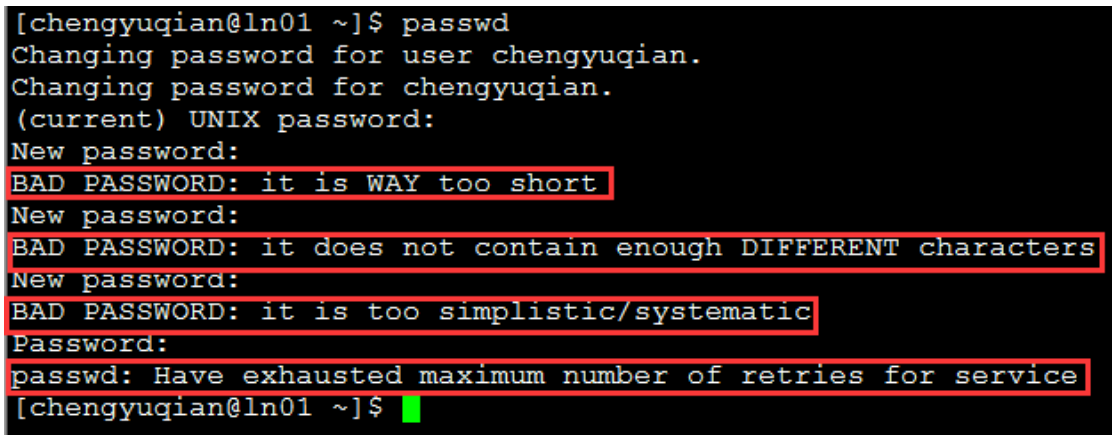
用户登录成功后，可使用 passwd 命令修改密码。建议用户修改初始密码，保证账号安全。注意：密码应具有一定复杂性，如同时包含数字、字母和特殊符号等，否则易造成密码修改失败。

```
$ passwd
```

修改密码需同时输入原密码和新密码并确认新密码；返回如下提示表示密码修改成功。



有如下提示，则表示密码修改失败



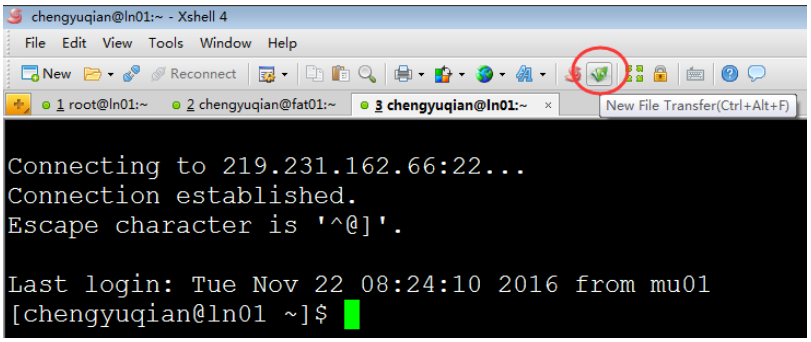
三、文件上传和下载

- Linux 系统中，将文件从本地复制到远程的命令如下

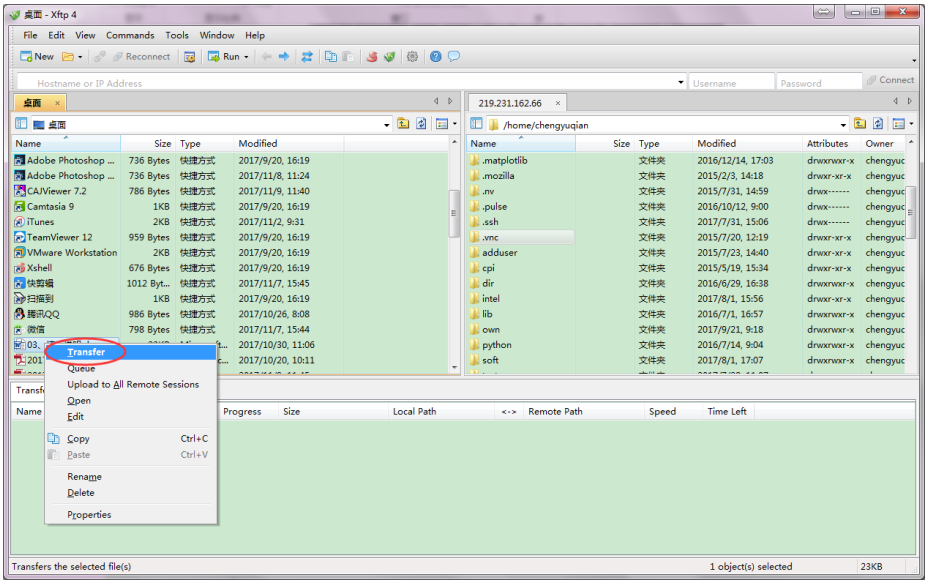
```
$ scp local_file remote_username@remote_ip:remote_folder
```

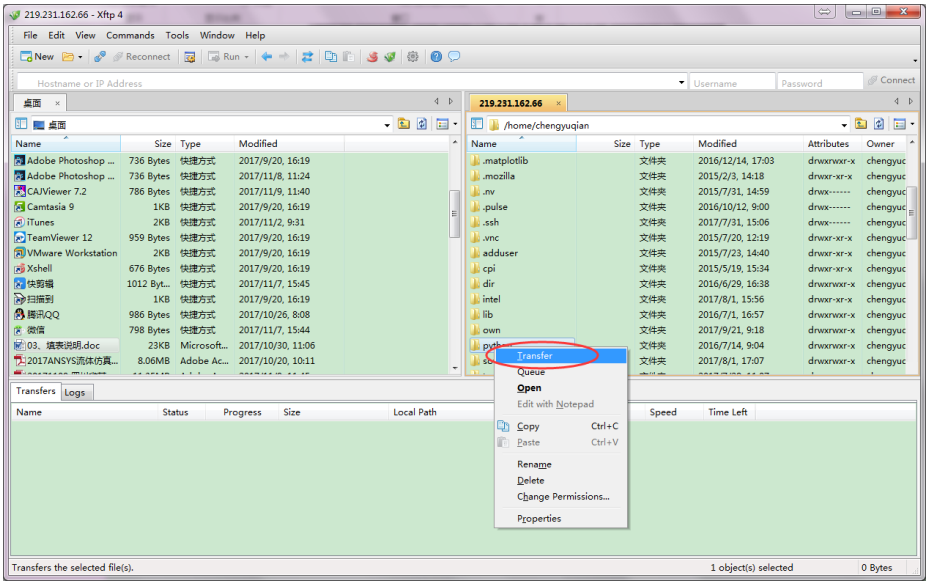
- 其他系统利用 Xftp 软件进行文件上传和下载

用 Xshell 连接登录后，点击 New File Transfer 按钮建立 Xftp 连接



在要进行传输的文件名处点击右键即可进行文件的上传或下载





四、作业提交流程

1、 **编写作业提交脚本文件**，详见集群作业调度软件使用培训。

示例：

###PBS 脚本声明部分：**——作业申请的计算资源**

#!/bin/bash　　*让 pbs 脚本识别 bash 命令*

#PBS -N test_vasp　　*设定提交作业的名称，方便区别不同的作业*

#PBS -l nodes=2:ppn=3　　*申请使用 2 个节点，每个节点 3 个核心*

#PBS -q cu　　*指明作业队列，集群作业队列为 cu、fat、mic、gpu*

###环境变量部分：**——作业需要使用到的包库等**

intel　　*intel 包环境变量生效，可根据需要填写*

source /opt/intel/composer_xe_2015/bin/compilervars.sh intel64

source /opt/intel/mkl/bin/intel64/mklvars_intel64.sh

source /opt/intel/impi/5.0.2.044/bin64/mpivars.sh

###可执行程序部分：——**作业具体要运行的命令、程序等，下面以 vasp 软件为例**

cd $PBS_O_WORKDIR　　*进入目标文件夹*

nprocs=`wc -l < $PBS_NODEFILE`　　*将并行的总核数赋值给 nprocs，方便下面命令使用*

exec=/opt/soft/vasp/vasp　　*定义可执行程序的路径*

mpirun -genv I_MPI_DEVICE rdma -machinefile $PBS_NODEFILE -np $nprocs $exec

2、 提交作业

$ qsub *脚本文件名*　　\\相应会返回一个*作业号*

```
[chengyuqian@mu01 cpu]$ qsub 1Add.sh
12955.mu01
[chengyuqian@mu01 cpu]$
```

3、 作业状态查看

$ qstat　　\\查看作业运行状态，R 为正在运行，Q 为排队，C 为已完成，E 为运算有问题。

```
[chengyuqian@mu01 cpu]$ qstat
Job id                    Name             User            Time Use S Queue
------------------------- ---------------- --------------- -------- - -----
12955.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian            0 R cu
```

4、 删除作业

$ qdel *作业号*

```
[chengyuqian@mu01 cpu]$ qstat
Job id                    Name             User            Time Use S Queue
------------------------- ---------------- --------------- -------- - -----
12961.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian            0 R cu
12962.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian            0 Q cu
12963.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian            0 Q cu
[chengyuqian@mu01 cpu]$ qdel 12962
[chengyuqian@mu01 cpu]$ qstat
Job id                    Name             User            Time Use S Queue
------------------------- ---------------- --------------- -------- - -----
12961.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian            0 R cu
12962.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian            0 C cu
12963.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian            0 Q cu
[chengyuqian@mu01 cpu]$ qstat
Job id                    Name             User            Time Use S Queue
------------------------- ---------------- --------------- -------- - -----
12961.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian     00:00:00 R cu
12963.mu01                 vectorAdd.c      chengyuqian            0 Q cu
[chengyuqian@mu01 cpu]$
```