

深腾 6800 用户上机指南

国家天文台信息与计算中心

2009 年 9 月

欢迎使用信息与计算中心新近重新组装的院网络中心无偿调拨的深腾6800超级计算机，您将在这里获得强大的计算资源完成您的工作。

您必须知道的是深腾6800使用的是Redhat Linux 5.1高级服务器版，如果您还不是很了解Linux下如何进行操作的话，建议您事先补充学习一下相关的内容或是准备一本Linux参考书以方便您的使用。在您自信能够顺利地在Linux下进行各种操作之后，您就可以开始一步步享受深腾6800带给您的高性能计算服务了。在深腾6800上，您可能会进行程序编写、编译、调试、管理等操作。

第 1 节 登录方式

首先，请确认您的计算机可以以SSH的方式远程登录Internet上的服务器。

提示：SSH即Secure Shell，是为了解决远程登录和口令安全性矛盾被开发出来的。它可以让用户像使用telnet一样连接远程服务器，但与telnet用明文传送一切内容（登录名、口令等）不同的是，SSH的连接过程是被100%加密的。

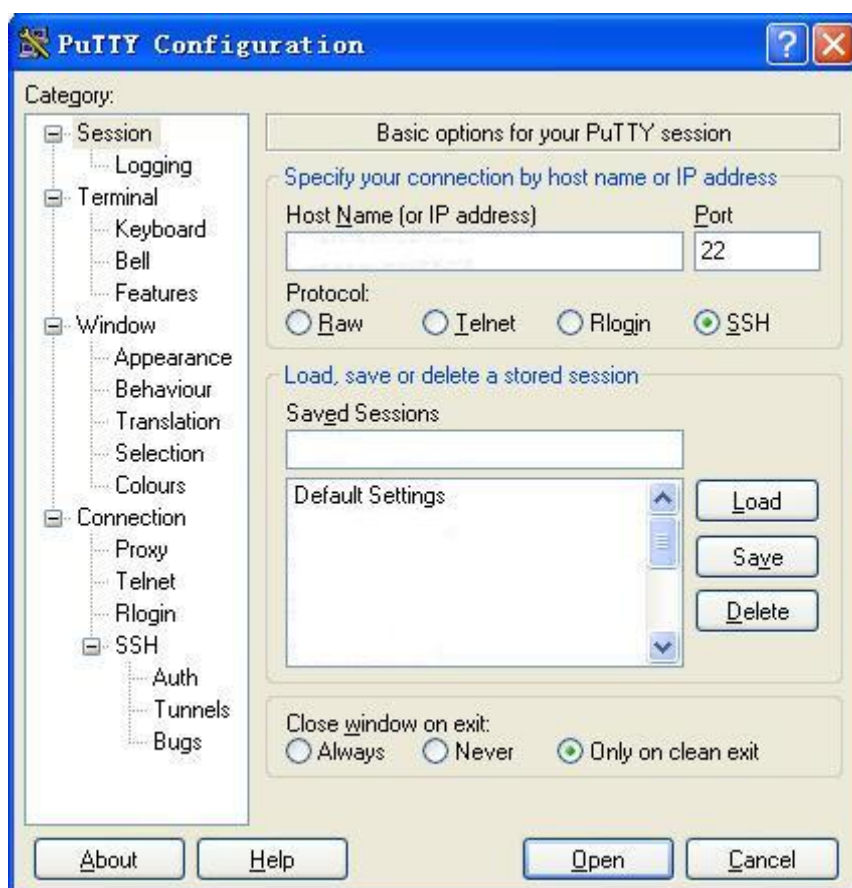
1、windows操作系统（以windows XP为例，其他windows系统依此类推）

推荐您使用Putty进行登录。

（1）、Putty快速登录

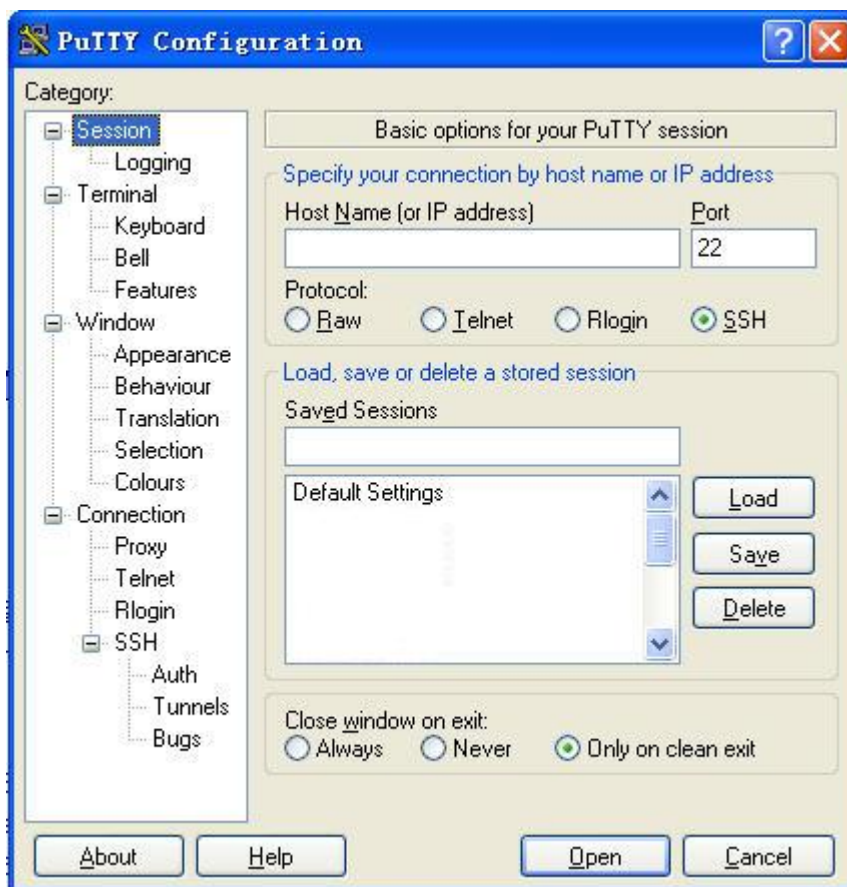
Putty是一款免费远程登录软件，它支持telnet、rlogin、ssh（SSH1和SSH2）等多种协议。使用Putty的步骤如下

① 启动putty，屏幕上将弹出下图所示窗口



- ② 在“Host Name (or IP address)”栏中填入“159.226.170.200”，点击右下角的“Open”即可。

- ③ 如果您启动后弹出的窗口与上图不一致，您可以点击该窗口左上角“Category”中的“Session”即可。



(2)、使用Putty保存地址信息

打开 Putty 的 Session 配置窗口中，在“Saved Sessions”栏中敲入您希望保存地址的名字，然后在“Host Name (or IP address)”栏中敲入您欲保存的真实地址或域名。点击“Save”后，即可将该地址保存在“Saved Sessions”下的列表中。您需要连接该地址时，只需双击它即可。

2、Linux操作系统（以Red Hat Linux 9.0为例，其他Unix类系统依此类推）

Red Hat Linux 9.0自帶了SSH的客户端软件，通常存放于/usr/bin/下。使用方法如下：

①在命令行提示符下使用命令“ssh username@159.226.170.200 ”，其中username是您在深腾6800集群上的用户名。您还可以使用“ssh -l username 159.226.170.200”命令完成连接。

②如果您是第一次使用SSH命令连接我们的超级计算机，您将会看到以下提示：

在这里请您务必输入“yes”，他表示您的联机的 Key 尚未被建立，需要接受 Server 传来的 Key ，并建立起联机。否则，您将不会连接到服务器端。您会看到提示如下：

③输入您的密码，完成SSH连接过程。

④当您第二次使用SSH命令连接我们的超级计算机时，您只会看到提示

```
username@console's password:
```

此时输入您的密码，完成SSH连接过程。

```
The authenticity of host 'console(159.226.170.200)' can't be established.
```

```
RSA key fingerprint is xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx:xx.
```

```
Are you sure you want to continue connecting (yes/no)?
```

```
Warning: Permanently added 'console,xxx.xxx.xxx.xx' (RSA) to the list of known hosts.
```

```
username@console's password:
```

第 2 节 数据传送方式

推荐您使用类似 cuteFTP 的 FTP 客户端软件进行下载。只要输入您的用户名和密码，您就可以直接连接到您的根目录上传或下载您的数据文件。

另外，为了您的数据安全，您还可以利用SSH服务来加密您传送的数据文件。

在linux下（以Red Hat Linux 9.0为例，其他Unix类系统依此类推），您可以使用其自带的图形化FTP工具“gftp”连接到深腾6800，也可以在在命令行下使用“sftp”命令来传送数据。或者您也可以使用linux自带的“/usr/bin/sftp”命令传送数据。

第 3 节 计算集群系统介绍

1 集群配置

深腾6800百万亿次高性能计算集群架构由Intel Itanium2 处理器的胖节点组成，**需要注意的是**，Intel Itanium2处理器程序与普通Intel Xeon 处理器程序二进制代码不兼容。

集群系统组成如下：

- ◇ 1 个登录及管理节点，35 个并行计算节点。
- ◇ 每个节点的配置为：4 颗 单核 Intel Itanium 1.3GHz CPU，256KB 二级缓存，3MB 三级缓存，8/16GB 内存，73GB SCSI 本地硬盘；
- ◇ 节点操作系统：Red Hat Enterprise Linux Server release 5.1 64 位版本 Itanium 架构。
- ◇ 千兆以太网卡。

2 软件系统配置

1) 全局共享文件系统

用户 \$HOME 目录：/export/home, 采用 NFS 文件系统；

2) 预装软件：

在计算节点中安装了Intel、GNU 系列开发工具、数学库，具体如下：

名称	版本	安装目录
----	----	------

Intel C/C++ Compiler	10.1.008	/opt/intel/cc/10.1.008
Intel Fortran Compiler	10.1.008	/opt/intel/fc/10.1.008
Gnu C/C++/Fortran		/usr
MPICH	1.2.7	/export/mpi
fftw 快速Fourier变换		/export/intel/fftw
gsl 科学数学库		/export/intel/gsl

其中：

目前，Intel C/C++/Fortran/icc、GNU C/C++/Fortran 编译器的环境变量已在系统中设为默认，用户可直接使用，建议用户使用Intel 编译器进行编译。用户若要使用其它工具软件，还需要自行设置环境变量。

3) 并行开发环境

深腾6800集群上安装的MPI 版本有MVAPICH2-1.2.7, MPI 作业可以直接使用 mpiicc、mpiifort 编译。

- ✧ 串行程序使用 icc/ifort 进行编译，如 `icc -o test test.c`;
- ✧ MPI 程序可以使用MPI 编译器编译，如 `mpicc -o cpi cpi.c`;
- ✧ Intel 编译器支持 OpenMP 并行，OpenMP 程序编译如：

```
icc -openmp -o hello hello.c
```

3 集群使用注意事项

- 1) 编译或者调试程序应当在登录节点下进行。
- 2) 各计算节点 /tmp目录，不允许用户长期存放大量临时文件。
- 3) 在深腾6800上，我们预装了Intel公司的C/C++/Fortran编译器以及GNU的gcc编译器。对应这两种不同的编译器分别安装了一套MPI并行编程环境及编译器，目录为/export/mpi/mpich-icc、/export/mpi/mpich-gnu。

4 集群文件系统说明

共享文件目录： /export

- 文件系统： NFS文件系统

- 目录容量: 73GB 空间
- 挂装节点: 全部节点
- 主要用途: 用户作业计算结果的输出与**短期**保存
- 管理方式: 禁止用户自行创建子目录, 并逐渐减少用户存放的数据量。