

北鲲云用户手册

Table of contents:

- [登录](#)
 - [一. 如何登录](#)
 - [二. 下载客户端](#)
- [基本概念](#)
 - [一. 计算区](#)
 - [二. SSH连接](#)
 - [三. 工作站](#)
 - [四. 模板提交作业](#)
 - [五. 镜像中心](#)
- [收费标准](#)
 - [一. 收费项目](#)
 - [二. 查看硬件资源价格](#)
- [功能介绍](#)
 - [一. 仪表盘](#)
 - [二. 应用中心](#)
 - [三. 作业管理](#)
 - [四. SSH连接](#)
 - [五. 图形界面](#)
 - [六. 文件传输](#)
 - [七. 数据集](#)
 - [八. 镜像中心](#)
- [提交作业](#)
 - [模板提交](#)
 - [命令行提交](#)
 - [图形界面提交](#)
- [作业监控和查看结果](#)
- [视频专区](#)
 - [一、文件传输](#)
 - [二、提交作业](#)
 - [三、作业监控和查看结果](#)
 - [四、镜像中心](#)
- [版本介绍](#)
 - [一. 版本差别](#)
 - [二. 功能介绍](#)
- [用户中心](#)

- 一. 个人中心
- 二. 费用中心
- 三. 代金券
- 四. 收费标准
 - 计费规则
- 五. 网络策略
- 安全管理
 - 一. 基础设置
 - 二. 密钥对管理
 - 三. 网络策略管理
 - 四. 操作审计
- 团队管理
 - 一. 用户管理
 - 二. 子用户管理
- 配额管理
 - 一. 配额管理
 - 二. 配额申请
- 存储目录介绍
 - 二. 其它隐藏目录（文件）介绍
- 文件传输
 - 一. Windows数据传输
 - 二. Linux数据传输
 - 三. 结果文件下载
 - 四. 文件同步
- 查询平台预装软件
 - 一. 使用命令行查询软件
 - 二. Python/Conda环境的查询
 - 三. 工作站软件的查询
 - 四. 未查询到所需软件
- 加载预装软件
 - 一. SSH命令行加载软件环境
 - 1. 使用module工具查询和加载软件
 - 2. 加载Python/Conda虚拟环境
 - 二. 工作站启动软件
- 自定义安装软件
 - 一. 安装须知
 - 如何选择安装方式？
 - 装前必看

- 二. SSH连接命令行安装软件
 - Linux编译安装软件
 - Python/Conda环境安装软件
- 三. Windows工作站安装软件
- 四. Linux工作站安装软件
- 五. 镜像中心安装软件
- 如何提交作业
- 模板提交
 - 一. 提交流程
 - 二. 操作步骤
 - 三. 提交后的监控
- 命令行提交
 - 一. 操作步骤
 - 二. 计算节点资源使用率监控
- 图形界面提交
 - 一. Windows工作站提交
 - 二. Linux工作站提交
- AlphaFold2
 - 一. 模板提交
 - 二. 命令行提交
 - 三. 结果文件介绍
 - 四. 使用PyMOL对结果进行图形化展示
- Amber
 - 一. 模板提交
 - 二. 命令行提交
 - CPU版 Amber 作业示例
 - GPU Amber 作业示例
- Ansys CFX
 - 一. 图形界面提交
 - 二. 模板提交
 - 三. 命令行提交
- Ansys Fluent
 - 一. 图形界面提交
 - 二. 模板提交
 - 三. 命令行提交
- Ansys LS-DYNA
 - 一. 图形界面提交
 - 二. 模板提交

- AutoDock-Vina
 - 一. 模板提交
 - 二. AutoDockTools
- COMSOL Multiphysics
 - 一. 图形界面提交
 - 二. 命令行提交
- CONVERGE
 - 一. 命令行提交
- CP2K
 - 一. 命令行提交步骤
- ColabFold
 - 一. 模板提交
 - 二. 命令行提交
- GROMACS
 - 一. 模板提交
 - 二. 命令行提交
 - GPU版GROMACS作业示例
 - CPU版GROMACS作业示例
- Gaussian
 - 一. 模板提交
 - 二. 命令行提交
 - 三. GaussView 6对结果进行图形化展示
- Jupyter Notebook
 - 一. 图形界面提交
- LAMMPS
 - 一. 模板提交
 - 二. 命令行提交
- LS-DYNA
 - 一. 图形界面提交
 - 二. 模板提交
 - 三. 命令行提交
- NAMD
 - 一. 模板提交
 - 二. 命令行提交
- ORCA
 - 一. 命令行提交
- PyTorch
 - 一. 命令行提交

- RoseTTAFold
 - 一. 模板提交
 - 二. 使用PyMOL对结果进行图形化展示
- STAR-CCM+
 - 一. 图形界面提交
 - 二. 模板提交
 - 三. 命令行提交
- TensorFlow
 - 一. 命令行提交
- TeraChem
 - 一. 命令行提交
- VASP
 - 一. 模板提交
 - 二. 命令行提交
- VirtualFlow
 - 一. 模板提交
 - 二. 后置处理失败
- 基本功能使用问题
 - 1. 我该如何提交作业？
 - 2. 我该如何上传文件到服务器？
 - 3. 你们平台 文件传输 上传下载速度是否有限制，大文件无法上传如何解决？
 - 4. 我在通用计算区配置的环境在其它计算区怎么使用不了？
 - 5. 我在账号下创建一个子用户，子用户的目录和主用户进入的目录一样吗？
 - 6. 你们平台的模板功能，主要用于哪些场景？
 - 7. 我在您们平台提交作业，多核机器速度和自己本地电脑算起来速度没有快多少，会是什么原因呢？
 - 8. 可以设置工作站计算完自动释放吗？
 - 9. 作业结束后会有通知吗？
 - 10. 能看到下载到本地的文件在哪个目录下么？
 - 11. 请问下现在我们的WebSSH终端大概闲置多久才会断开连接？
 - 12. 我在通知设置里设置了闲置工作站自动释放，为什么没有释放？
 - 13. 您们平台是否支持自定义安装Linux系统其它发行版本？
 - 16. 停机与释放有什么区别？
 - 17. 我的作业为什么会执行失败？
 - 18. 使用模板提交方式，作业执行失败，我该怎么处理？
 - 19. 平台总共有哪些类型的节点，它们各自代表什么含义？
- 应用软件使用问题
 - 1. 申请使用软件权限后多久通过？

- 2. 平台没有我要使用的软件怎么办?
- 3. 你们平台是否提供商业软件?
- 4. 普通用户没有权限安装软件, 能否获取root权限?
- 5. 每次登录都需要使用module add命令加载软件, 可不可以实现自动加载?
- 6. 使用slurm命令报错: "slurm_load_jobs error: Unable to contact slurm controller (connect failure)"如何解决?
- 7. 执行module命令报错"Lmod has detected the following error:", 如何解决?
- 8. 什么是队列?
- 9. 为什么有些硬件资源无法选择?
- 10. 使用Material Studio软件(Windows)时, CPU核数如何修改?
- 11. Jupyter Notebook 如何远程使用虚拟环境?
- 计费问题
 - 1. 平台是如何收费的?
 - 2. 如何充值?
 - 3. 如何查看消费记录?
 - 4. 工作站如何查看节点配置价格?
 - 5. 为什么我没有使用, 还在一直扣费?
 - 6. 工作站停机还会收费吗?
 - 7. 已经赠送免费核时, 但余额显示为零?
 - 8. 平台可以开发票吗?
 - 9. 节点选择经济型和标准型有什么区别?
- 其他问题
 - 1. 我测试为什么工作站与本地笔记本同等CPU配置没有本地笔记本算的快?
 - 2. 提交作业需要排队吗?
 - 3. 节点启动需要多久?
 - 4. 超算资源有时候跑着跑着就被强制回收了, 你们也会有这种情况吗?
 - 5. 为什么我的 CPU 使用率最高显示为 50%?
 - 6. 为什么我连接登录到Windows工作站没有看到H或者S盘, 请问如何找回呢?
 - 7. 没有我想要的数据集怎么办?
- 镜像中心使用问题
 - 1. 镜像中心有什么作用?
 - 2. 在哪里设置为默认镜像, 如何启动默认镜像?
 - 3. 制作镜像需要多久, 我已经制作了半个小时了还没结束?
 - 4. 我之前制作的镜像怎么不见了?
 - 5. 什么是容器镜像?
 - 6. 镜像中心磁盘大小设置方法
- Slurm作业管理系统
 - 一. 常用命令

- 1. 查看分区状态
- 2. 查看作业队列
- 3. 查看所有作业详细信息
- 4. 取消作业号为20的作业
- 二. 提交作业的方式
 - 1. 使用sbatch批处理模式提交作业
 - 2. 使用salloc分配模式提交作业
- Module的使用
 - 一. 常用命令
 - 二. 使用例子
- Conda的使用
 - 一. 使用北鲲云的Conda环境
 - 二. Conda管理环境
 - 三. Conda管理包
 - 四. Conda/Pip软件安装进阶操作
- Linux的常用命令
 - linux快捷键以及帮助手册
 - 快捷键
 - 帮助手册
 - 软件安装
 - yum
 - 用户和文件权限管理
 - 查看用户
 - 使用root
 - 查看文件权限
 - 变更文件所有者
 - 修改文件权限
 - 目录及文件操作
 - 基本目录操作
 - 基本文件操作
 - 搜索文件
 - which
 - whereis
 - locate
 - find
 - 文件解压缩
 - rar
 - zip

- tar
- 管道与一些文本命令
 - && 和 ||
 - 管道
- 文本处理
 - sort
 - col
 - tr
 - paste
- 重定向
 - 重定向
 - 文件描述符
 - 永久重定向以及“丢弃”输出
- 进程的基本操作
 - 前台/后台切换
 - 终止
- 进程管理
 - top
 - ps
- 提交作业
 - Body Attributes(Body属性)
 - Request(请求)
 - Response(响应) - 200
 - Response Body Attributes(响应Body属性)
- 取消作业
 - Body Attributes(Body属性)
 - Request(请求)
 - Response(响应) - 200
 - Response Body Attributes(响应Body属性)
- 查询作业状态
 - URL Parameters
 - Request(请求)
 - Response(响应) - 200
 - Response Body Attributes(响应Body属性)
- 获取文件服务器Token
 - Request(请求)
 - Response(响应) - 200
 - Response Body Attributes(响应Body属性)

- 查询集群配置
 - Body Attributes(Body属性)
 - Request(请求)
 - Response(响应) - 200
 - Response Body Attributes(响应Body属性)
- 修改集群配置
 - Body Attributes(Body属性)
 - Request(请求)
 - Response(响应) - 200
 - Response Body Attributes(响应Body属性)

登录

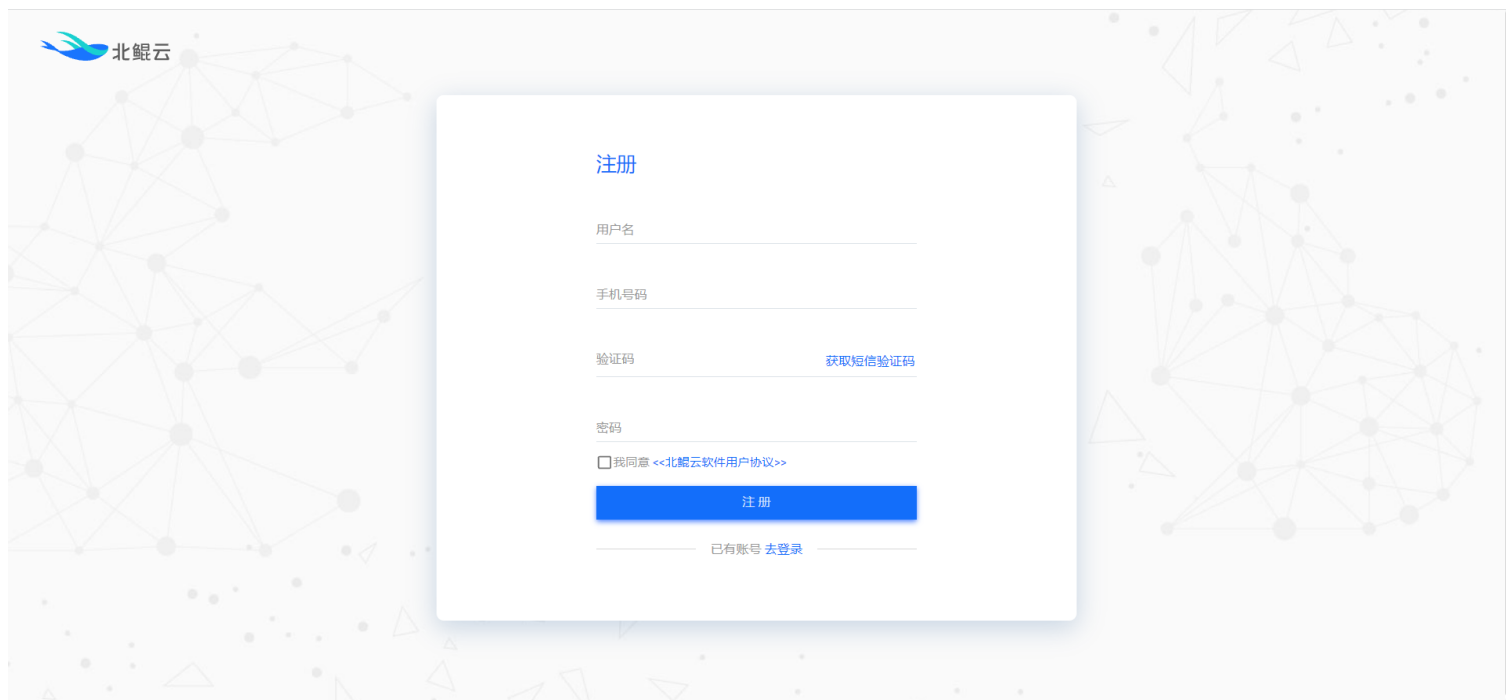
欢迎来到北鲲云一站式云超算平台！本文档提供了一些链接来帮助您登录。

一. 如何登录

已有账号，登录请访问 <https://www.bkunnyun.com/v2/pages/login-page>



未有账号，注册请访问 <https://www.bkunnyun.com/v2/pages/register-page>



二. 下载客户端

Windows版	https://download.bkunyun.com/cloudam-e_setup_latest.exe
Mac版	https://download.bkunyun.com/cloudam-e_os_setup_latest.dmg

基本概念

一. 计算区

基于公有云的超级计算集群，不同计算区硬件资源不同，数据不互通。

- **通用计算区**

本计算区有丰富的CPU资源，并提供部分GPU资源，可以满足大部分计算作业需求。

- **GPU计算区**

本计算区提供丰富且稳定的GPU资源，建议在此提交GPU相关作业。

- **网络增强计算区**

本计算区的计算资源使用增强网络进行低延时的内网通讯，能满足紧耦合的计算需求（由于增强网络的生效耗时较长，启动集群过程中请耐心等待）。

二. SSH连接

该功能适用于对超算平台、作业调度系统slurm命令有所了解人群，通过SSH连接集群提交作业到计算节点。

- **管理节点**

启动成功后，用于登录北鲲云超算集群提交作业和管理作业。

- **计算节点**

在管理节点提交作业后，启动的跑计算任务的节点。

- **计算队列**

不同规格的节点资源，使用 `sinfo` 命令查看当前队列。

```
[cloudam@master jobs]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
c-4-1*      up    infinite     1  alloc c-4-1-worker0001
c-4-2       up    infinite     0    n/a
c-4-4       up    infinite     0    n/a
c-4-8       up    infinite     0    n/a
c-8-1       up    infinite     0    n/a
c-8-2       up    infinite     0    n/a
c-8-2-h     up    infinite     0    n/a
c-8-4       up    infinite     0    n/a
c-8-8       up    infinite     0    n/a
c-16-1      up    infinite     0    n/a
c-16-2      up    infinite     0    n/a
c-16-2-h    up    infinite     0    n/a
c-16-4      up    infinite     0    n/a
c-16-8      up    infinite     0    n/a
c-24-1      up    infinite     0    n/a
c-24-2      up    infinite     0    n/a
c-24-2-h    up    infinite     0    n/a
c-24-4      up    infinite     0    n/a
c-24-8      up    infinite     0    n/a
c-32-1      up    infinite     0    n/a
c-32-2      up    infinite     0    n/a
c-32-2-h    up    infinite     0    n/a
c-32-4      up    infinite     0    n/a
```

队列例子：

c-4-1		g-v100-1	
c	表示规格为CPU节点	g	表示规格为GPU节点
4	表示该节点CPU核心数为4核	v100	表示显卡型号为v100
1	表示每核心有1G内存，即节点规格为4核4G	1	表示GPU卡数为一张卡
*	表示默认队列	h	表示高主频机器，3.3到3.8Hz，默认是2.5Hz主频

三. 工作站

工作站是带有图形化桌面的操作系统，只能实现单机并行计算，不能多节点并行，北鲲云一站式云超算平台同时拥有Windows和Linux工作站。

- **Windows工作站**

Windows server 2016 操作系统，支持安装软件和提交单节点并行的作业。

- **Linux工作站**

CentOS 7 操作系统，支持安装软件和提交单节点并行的作业。

- **工作站模板**

安装软件后 设为模板 可保存安装的软件和数据，下次使用时无需重新安装软件，模板支持分享给其它用户。

四. 模板提交作业

全程以Web形式操作，使用平台制作好的软件模板，只需上传输入文件和设置运行参数，对作业结果和运行日志可通过Web页面查看。

- **可视化模板**

可视化模板是后台制作好的软件提交脚本，使用时只需简单的上传计算文件、配置运行参数，即可进行计算。

- **案例模板**

案例模板是后台制作好软件提交脚本，并且提供了计算的案例文件，只需选择硬件配置即可直接提交作业，主要用于测试平台算力。

五. 镜像中心

- **什么是镜像？**

镜像包括操作系统和预装的软件。镜像可以仅包含基本的操作系统，也可以在此基础上整合具体的软件环境。

- **镜像中心的作用**

镜像中心方便您自行安装软件并制作自定义镜像，自定义的工作站镜像可以在图形界面查看。

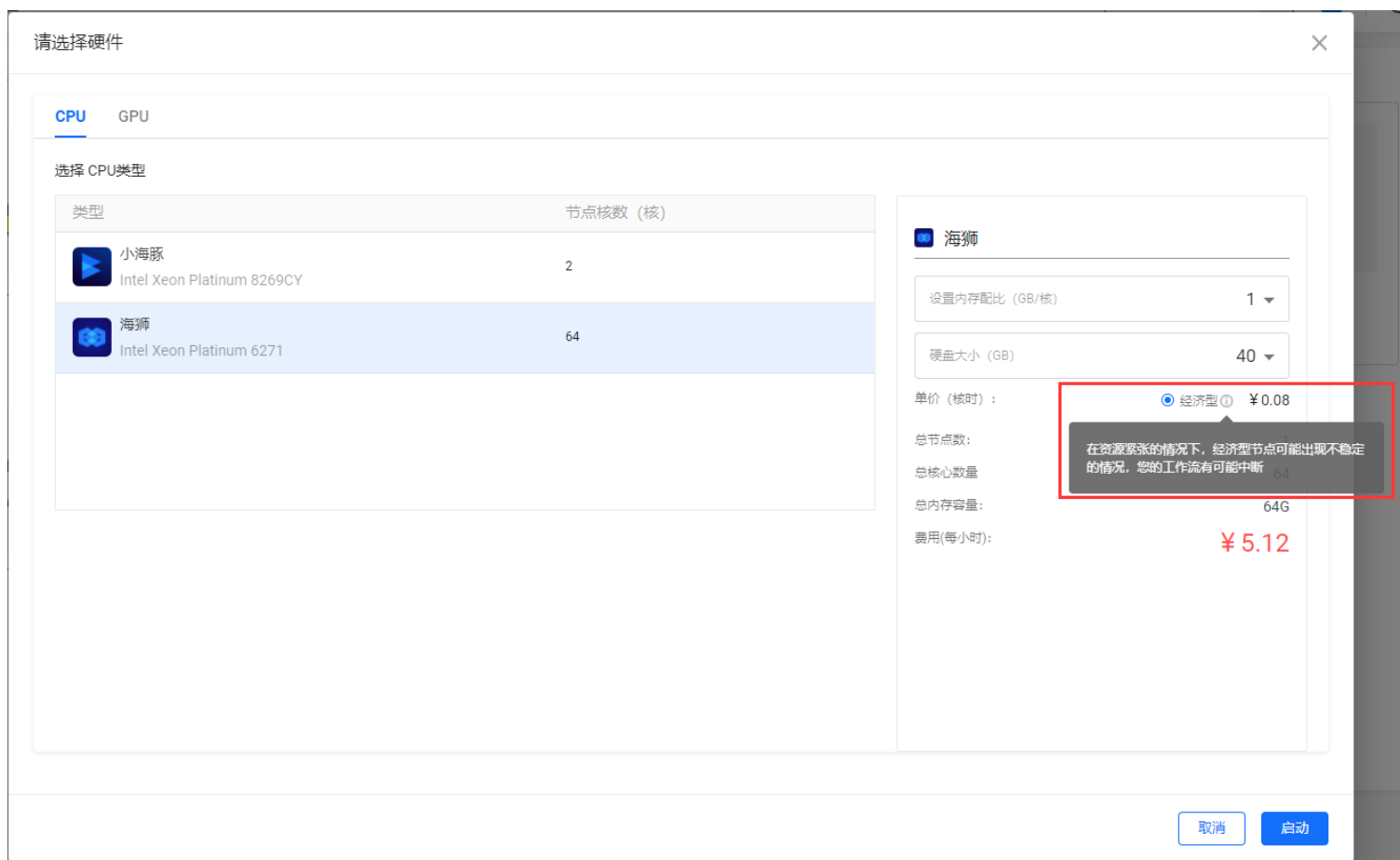
收费标准

一. 收费项目

收费项	价格
硬件资源	资源价格动态变化，以选择硬件配置时的价格为准
Windows工 作站停机后 的系统盘	1G每小时0.001元
镜像中心安 装软件和自 定义镜像	不同的计算区收费价格不一样，详情可在安装软件引导查看
硬盘存储	选择硬盘大小超过500G时，将收取数据盘费用，存储用量价格以1G为最小单元进行统计，以选择硬件配置时的价格为准，文件传输（集中存储）服务根据不同计算区价格不同详情可查询 收费标准 。
管理节点	0.2元/小时

注意事项：

- 平台计算资源的计费规则，是以申请成功的节点作为判断依据，申请的节点可在仪表盘或管理节点监控内查看，只有申请成功的节点会计费，命令行申请的节点CF状态不一定代表节点未申请成功，可能因为作业错误或者其他原因导致节点申请成功但集群创建失败，同样都会收取核时费用，精确到分钟。
- 镜像中心启动安装节点安装镜像会进行扣费，不同的计算区收费价格不一样，详情可在安装软件引导查看，避免造成不必要的费用，状态是 **安装中** 或者 **不可用** 的镜像，请及时在镜像中心中制作成镜像或者取消安装。
- 平台部分硬件队列新增经济型选项，经济型相比较标准型节点价格更优惠，但在资源紧张时可能被自动回收，回收会导致计算中断，其余相比较同等机型配置下计算速度、性能等不影响。



二. 查看硬件资源价格

在图形界面打开工作站节点，选择硬件类型，即可查看当前价格。

- 内存配比：设置计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

北鲲云

云组算平台

+ 提交作业

仪表盘

作业

应用中心

作业管理

SSH连接

图形界面

数据

文件传输

数据集

镜像中心

请选择硬件

CPUGPU

选择 CPU 类型

类型	节点核数 (核)
 宽吻海豚 Intel Xeon(Skylake) Platinum 8163/Intel Xeon Gold 6149	4
 鲸鲨 Intel Xeon(Skylake) Platinum 8163	8
 鲸鲨H Intel Xeon Platinum (Cooper Lake) 8369, 3.3/3.8 GHz	8
 海牛 特惠 Intel Xeon(Cascade Lake) Platinum 8269/8269CY	16
 海牛H Intel Xeon Platinum (Cooper Lake) 8369, 3.3/3.8 GHz	16
 垂头鲨 Intel Xeon(Cascade Lake) Platinum 8269/8269CY	24
 垂头鲨H Intel Xeon Platinum (Cooper Lake) 8369, 3.3/3.8 GHz	24

宽吻海豚

设置内存配比 (GB/核)1

硬盘大小 (GB)40

单价 (核时) : 标准型 ¥ 0.08

总节点数:1

总核心数量:4

总内存容量:4G

费用(每小时): ¥ 0.32 取消 确定

功能介绍

本节简单介绍云超算平台的主要功能，方便您快速上手。

一. 仪表盘

仪表盘是日志服务提供的实时数据分析大盘，方便您及时掌握账户、消息、作业和资源使用情况。

二. 应用中心

可以在此搜索您所需要的软件，待申请通过后点击提交作业，选择您习惯的作业提交方式。

三. 作业管理

使用模板提交作业的管理界面，可查看作业状态、连接运行中的计算节点、查看历史作业等信息。

四. SSH连接

该功能适用于对 [slurm命令](#) 有一定了解的用户使用，全程通过命令行提交作业，支持单/多节点并行计算。

五. 图形界面

带有图形化桌面操作的工作站，支持Windows与Linux两种操作系统，只能单节点并行计算。

六. 文件传输

提供输入文件和结果文件的上传下载，支持在线查看。

七. 数据集

数据集可以理解为机器学习场景下的标注数据，这里分为公共数据集和私有数据集，公共数据集将对所有企业用户可申请，私有数据集只对企业账号下的用户可见。

八. 镜像中心

镜像中心分为虚拟机镜像和容器镜像，虚拟机镜像方便您自行安装软件并制作自定义镜像，以在计算时调用；在容器镜像中您可以新建仓库、推送镜像，以在作业中运行容器化应用。

提交作业

北鲲云一站式云超算平台拥有三种作业提交方式，分为 [模板提交](#)、[命令行提交](#) 和 [图形界面提交](#)，您可以根据您的需求和使用习惯来选择作业提交方式。

模板提交

适用于零IT基础用户，作业提交流程、配置参数全可视化界面，在应用中心界面选择您所需要的软件，待申请通过后，选择模板提交，上传输入文件，然后选择硬件配置，即可提交作业。

操作步骤：

1. 在应用中心搜索软件，申请后请联系客服；
2. 刷新页面，查看已安装的软件版本，如果需要使用自定义版本，请点击安装软件按钮自行安装；
3. 点击提交作业，选择可视化模板提交，因为部分软件限制，如果仅有基础模板，则该软件不支持使用模板提交，案例模板是后台预上传的输入文件案例，仅供测试平台算力，不支持修改；
4. 上传输入文件，配置运行参数，可以设置提交的作业名，点击感叹号查看待上传输入文件的格式，软件运行参数的注意事项等；
5. 根据软件版本和使用需求，选择硬件配置；
6. 查看作业内容汇总，并提交作业；
7. 作业提交后可通过 [作业管理](#) 查看作业的输出和日志等内容，可通过ssh连接登录到各计算节点，查看节点详细信息，通过 [仪表盘](#) 查看正在运行的计算节点资源使用率等信息，在 [通知设置](#) 设置作业结束后通过邮件或公众号通知等功能。

命令行提交

在管理节点使用SSH命令行创建动态集群，可以同时调用多种相同或者不同规格的计算节点，通过slurm作业调度系统提交作业计算，全程只需命令行操作。

操作步骤：

1. 选择命令行提交，查看启动命令，点击连接；
2. 确定启动，连接，选择管理节点连接方式；
3. 创建作业目录并进入；
4. 在该文件夹下创建执行脚本；

5. 本平台使用slurm进行作业调度，提交作业前，可以通过 `sinfo` 查看可选的队列，每个队列对应一种硬件规格，如c-4-1表示4核、每核1G内存的cpu计算节点。g-v100-1表示v100单卡的gpu计算节点；
6. 提交作业时，通过-p参数来指定这个作业想使用哪个队列，系统将为您动态创建集群并执行作业；
7. 如视频案例中使用2个16核心节点启动16个并行任务 `sbatch -N 2 -p c-16-1 -n 32 -c 1 AnsysFluent.sh`；
8. 提交后可以通过squeue命令及时查看作业的执行状态，启动计算节点大概创建需要1分钟的时间就可以看到作业已经在运行状态中了，可以通过sacct命令来查看历史作业，也可以通过 [通知设置](#)，在作业结束或异常时自动接收通知。

图形界面提交

跟您本地电脑操作是一样的，支持Windows与Linux两种操作系统，在应用中心界面选择您所需要的软件，待申请通过后，点击图形界面提交，选择软件版本，启动并连接到工作站即可使用软件。

操作步骤：

1. 选择图形界面提交；
2. 启动Windows工作站，选择硬件配置；
3. 使用RDP连接；
4. 在桌面或者左下角的开始菜单栏中启动软件；
5. 注意选择C盘的输入文件进行计算，并把结果文件的存放目录设置保存到H盘。

作业监控和查看结果

北鲲云一站式云超算平台提供两个维度的监控，分为作业监控和节点监控，作业监控，监控作业的状态、日志流、文件输出等信息，节点监控，监控节点列表、节点性能等。

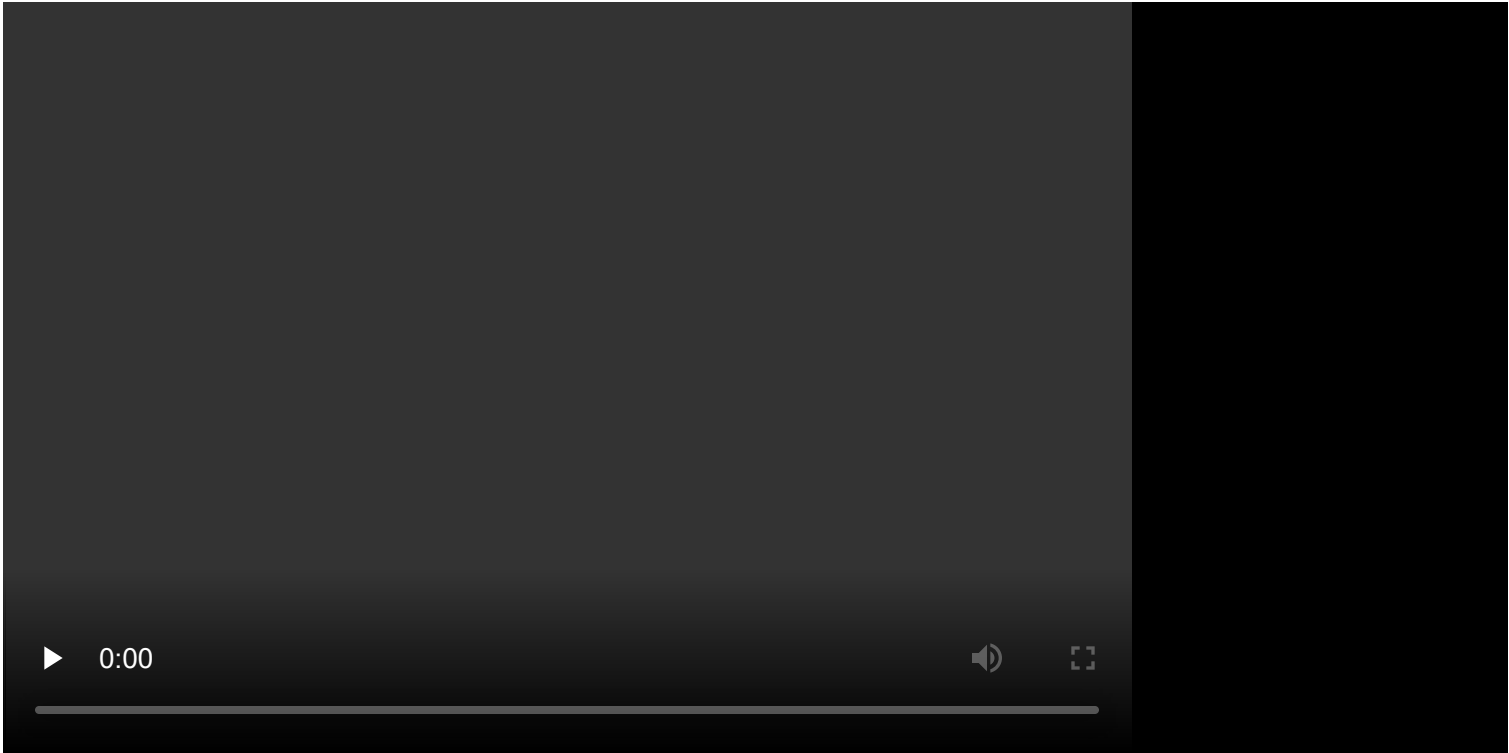
操作步骤：

1. 查看模板提交的作业监控，可以通过点击左侧作业管理模块 > 查看作业状态 > 点击LIVE按钮> 查看日志流 > 查看实时输出日志 > 查看节点信息 > 连接到计算节点 > 查看详细情况等
2. 查看命令行作业监控，可以通过点击左侧SSH连接模块 > 点击监控 > 查看节点性能 > 点击连接 > 执行squeue命令 > ssh连接到计算节点 > top命令查看节点性能等。

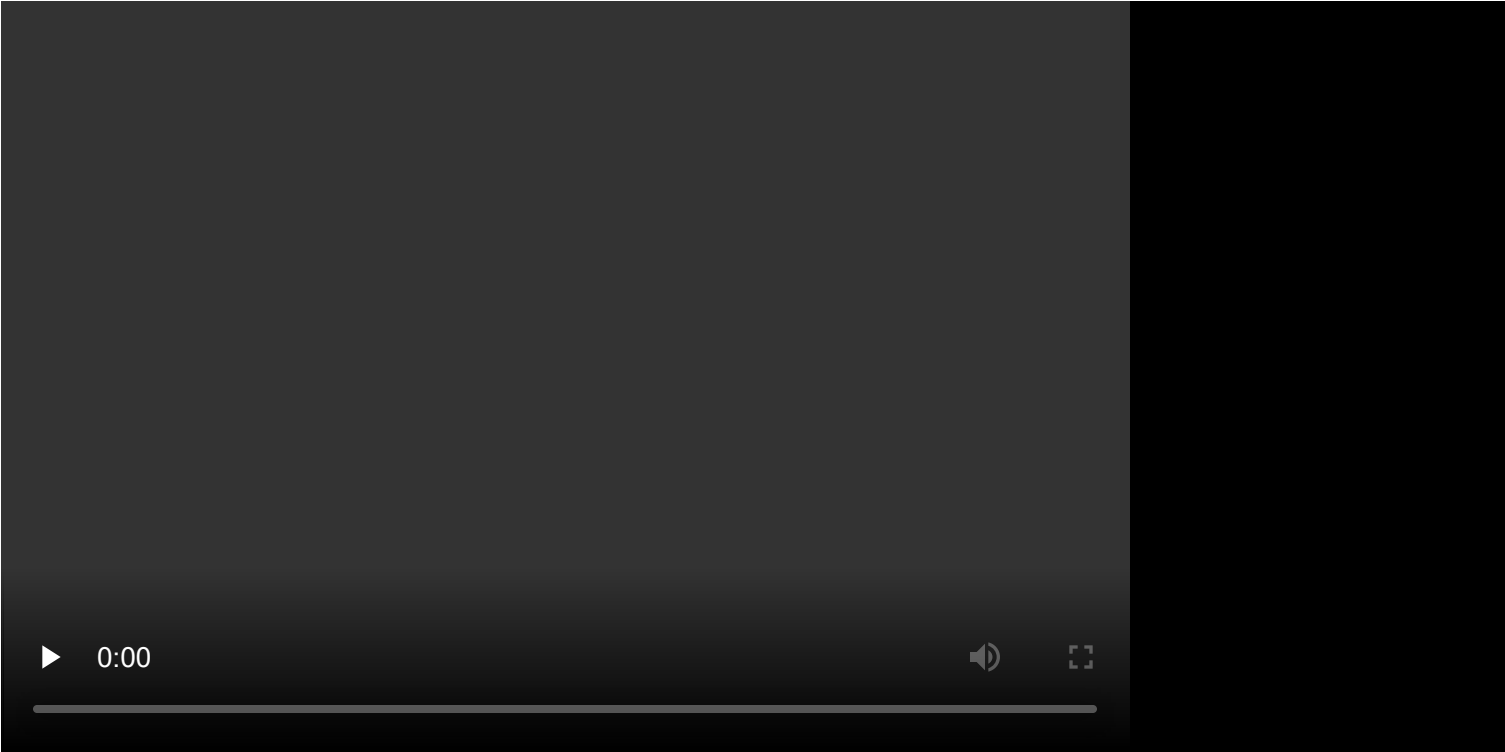
视频专区

北鲲云为广大用户提供了多种功能介绍的视频教程，为服务科学研究团队提供了专业的平台使用教程，以下是北鲲云一站式云超算平台相关的操作视频教程：

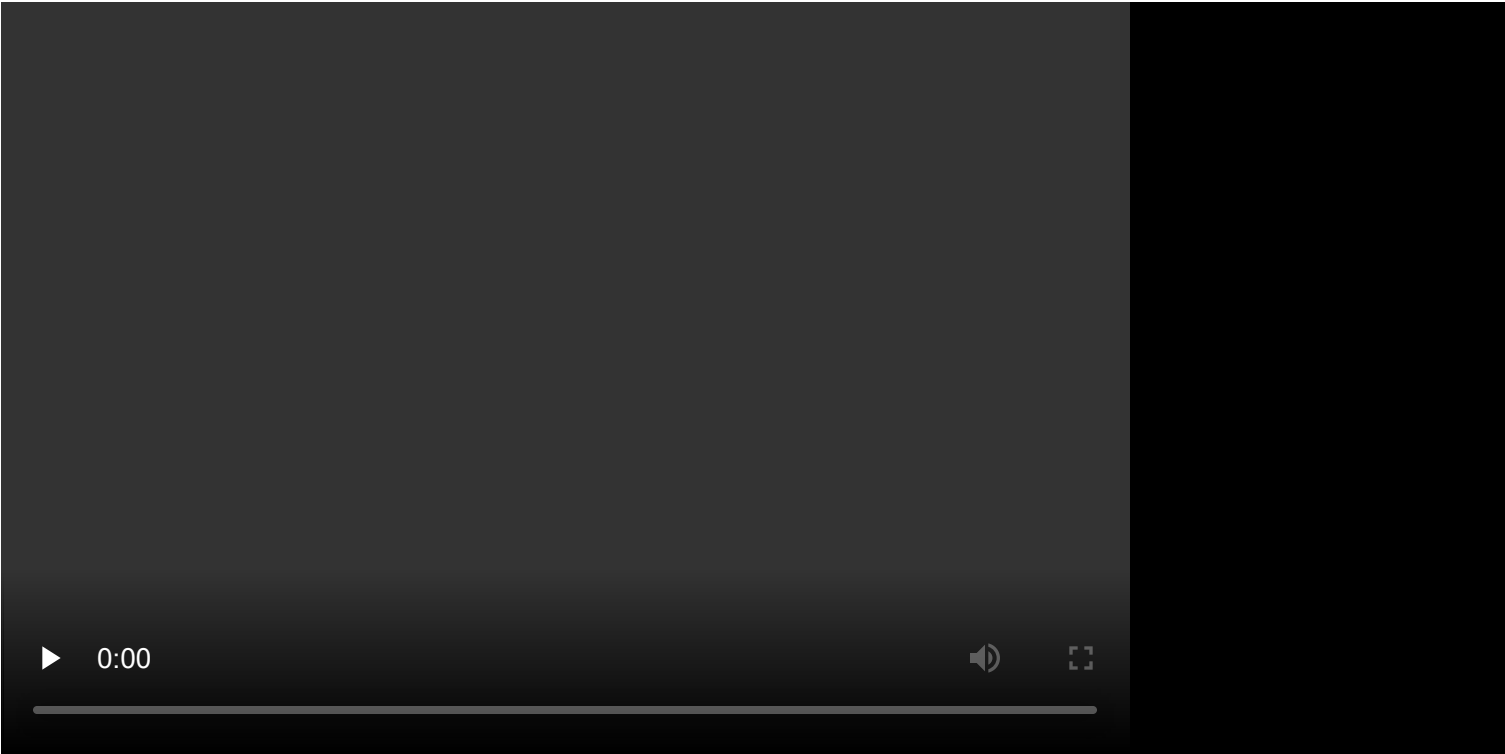
一、 文件传输



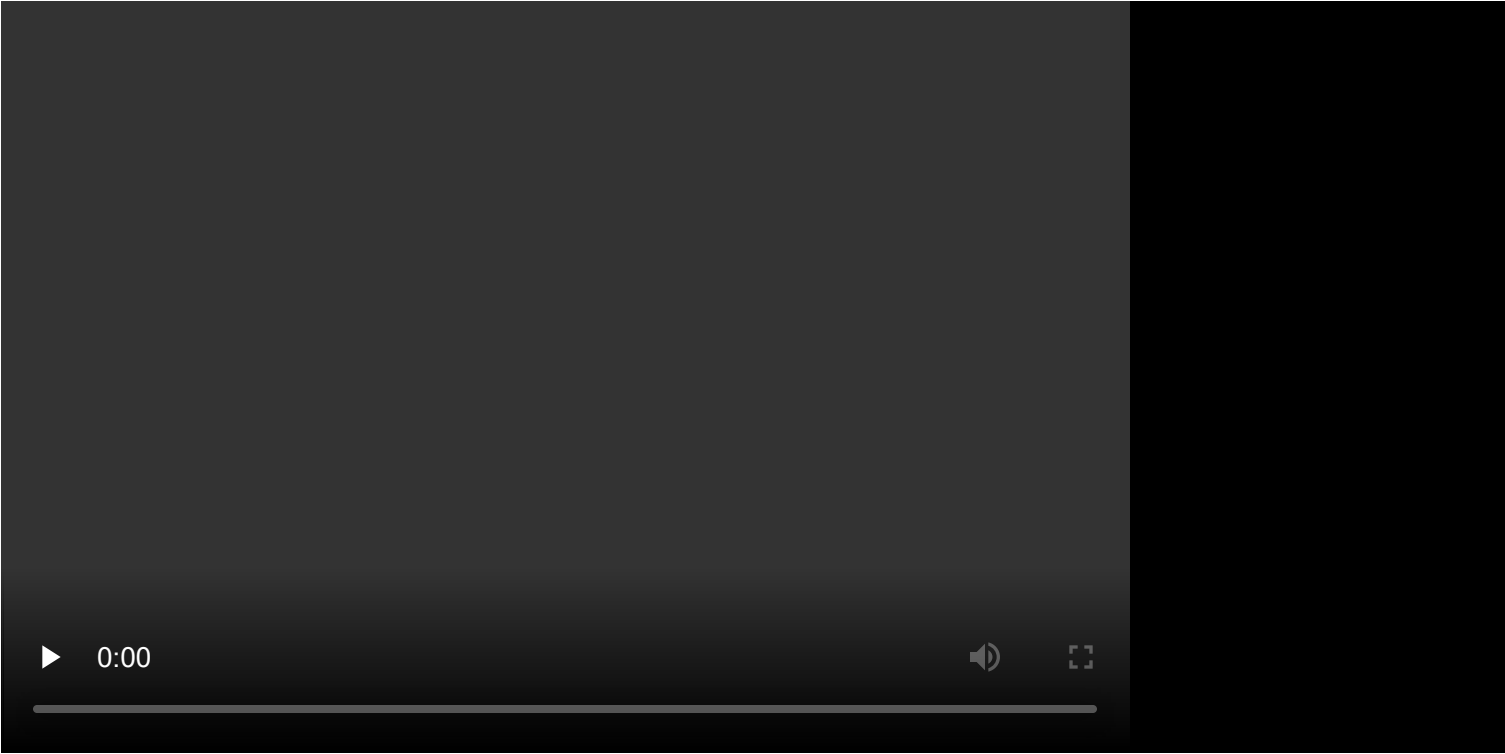
二、 提交作业



三、作业监控和查看结果



四、镜像中心



版本介绍

为满足不同用户的差异化需求，北鲲云一站式云超算平台向用户提供了**标准版 Standard**、**企业版 Enterprise**、**专享版 Dedicated**、**私有化版 Private** 四个版本，用户可根据自身需求联系销售经理开通。

一. 版本差别

- **标准版 Standard**：用于个人使用和计算资源使用量少、无需组织管理及无限算力资源，平台基本功能就能满足使用的用户。
- **企业版 Enterprise**：用于企业、团队组织、科研机构等，需要使用无限算力资源、团队管理功能、安全等级要求更高的用户。
- **专享版 Dedicated**：用于更高要求的企业用户，支持企业版所有功能、云上集群独立部署、支持专线通讯、所有资源单独使用的用户。
- **私有化版 Private**：用于需要独立运营、专属后台管理、私有化本地部署、企业版所有功能的用户。

二. 功能介绍

使用版本不同，支持的功能不同，具体如下：

标准版 Standard	企业版 Enterprise	专享版 Dedicated	私有化版 Private
丰富的软件库	标准版所有功能	企业版所有功能	企业版所有功能
有限算力资源	无限算力资源	云上独立部署	本地化私有部署
文件管理	支持多团队多用户	支持专线	支持专线
命令行和图形桌面支持	支持数据共享	专属技术专家支持	专属管理后台
支持虚拟机/容器镜像管理	支持计算区个性化配置		专属技术专家支持
API对接	高级安全功能		支持独立运营
基础技术支持	组织管理功能		

标准版 Standard	企业版 Enterprise	专享版 Dedicated	私有化版 Private
	预算控制		
	7X24技术支持		

使用不同版本享受到的服务会有不同，具体如下：

模块 Modules	功能 Functions	标准版 Standard	企业版 Enterprise	专享版 Dedicated	私有化版 Private
平台使用	多计算区	√	√	√	√
	仪表盘	√	√	√	√
	应用中心	√	√	√	√
	模板提交作业	√	√	√	√
	命令行提交作业	√	√	√	√
	图形界面提交作业	√	√	√	√
	文件存储	√	√	√	√
	镜像中心	√	√	√	√
	通知中心	√	√	√	√
	API	√	√	√	√
	独立计算区		√	√	√
账户管理	管理入口		√	√	√
	账单和费用明细	√	√	√	√

模块 Modules	功能 Functions	标准版 Standard	企业版 Enterprise	专享版 Dedicated	私有化版 Private
	预算控制		√	√	√
团队管理	多团队		√	√	√
	多用户		√	√	√
	管理授权		√	√	√
系统管理	软硬件管理		√	√	√
	数据生命周期管理		√	√	√
	配额管理		√	√	√
安全管理	SSH登录策略和秘钥对管理	√	√	√	√
	传输加密控制	√	√	√	√
	数据共享和访问控制		√	√	√
	网络策略		√	√	√
	操作审计		√	√	√
	单点登录(SSO)		√	√	√
	多因素验证(MFA)		√	√	√
	开放授权(OAuth2)		√	√	√
	专线			√	√

模块 Modules	功能 Functions	标准版 Standard	企业版 Enterprise	专享版 Dedicated	私有化版 Private
独立部署	云上独立部署			√	
	本地部署				√
	支持独立运营				√
支持服务	HPC专家支持			√	√
	微信群支持		√	√	√
	技术支持响应时效	<3天	<24小时	<24小时	<24小时
	自定义软件安装	0	5	30	30

用户中心

用户中心包括个人中心、费用中心、代金券、收费标准、网络策略等功能查看及启用，登录北鲲云 一站式云超算控制台 > 点击登录头像进入 > [用户中心](#)。

一. 个人中心

个人中心支持 个人信息修改、登录密码修改、API Token生成等功能设置。

二. 费用中心

用户可通过 [费用中心](#) 管理云超算平台费用，例如，对账户进行充值、使用账户金额来购买北鲲云计算资源等。

相关概念

- **账单总览：** 账单总览可以用来反映您每月在北鲲云消费情况以及对应的产品扣费详情。
- **账单明细：** 账单明细是实时的记录了用户资金消费的所有操作。
- **后付费：** 后付费，也称按量计费，即先按需申请资源使用，在结算时会按您的实际资源使用量收取费用，精确到秒，按量计费根据资源的结算周期进行结算。一般按量计费的结算周期有小时/日/月等，在达到结算周期时，生成账单，执行扣款，如果账户余额不足，账号将进入欠费状态，无法启动资源。
- **作业费用详情：** 作业费用详情估算了每个作业使用的所有计算节点的费用，不包含管理节点费用，如果多作业复用同一计算节点，该节点产生的费用将被统计到各个作业中，本平台基于节点而非作业进行计费，此页 **仅供参考**，您最多可以查看最近10天内的作业明细。
- **子用户账单：** 可以查询每个子用户每月花费的扣费详情。
- **充值记录：** 您可以使用微信、支付宝、网银支付等进行线上充值，充值的金额支持申请开具发票，发票类型支持个人、企业、增值税等。
- **发票管理：** 此页面仅展示已开具的发票记录，如果您需要开票，请前往【充值记录】页面申请。

三. 代金券

代金券是可抵扣费用的优惠券，您可以登录 北鲲云官网，在 [用户中心](#) > [代金券](#) 页面中可查看账户下的代金券情况。

相关概念

- 代金券只能用于云超算平台，计算作业产生的费用优先扣除代金券的余额
- 代金券不可提现，不可转赠，不可开票。

四. 收费标准

[收费标准](#) 页面可以查询相关资源的收费信息。

计费规则

启动资源精确到秒，每小时刷新扣费，即北京时间整点扣费并生成账单。出账单时间是当前计费周期结束后1小时内，具体扣费详情可在 [费用中心](#) > [账单明细](#) 中查看。

例如，10:00-11:00的账单会在12:00之前生成，具体以系统出账时间为准。

注意事项： 使用前需保证账户无欠款。

五. 网络策略

在 [网络策略](#) 页面，您可以根据需要启用管理用户或者安全管理员配置的自定义网络策略，启用后仅对自己的新启节点生效。

相关概念

- 出于安全考虑，网络策略只能通过管理账户或者安全管理员在 [安全管理](#) 中修改和配置，如有修改需求请联系账户管理员或者安全管理修改。
- 子用户在 [网络策略](#) 中启用管理用户或者安全管理员配置的自定义网络策略，只对子用户自己新启节点生效。

安全管理

北鲲云平台为企业用户出于安全管理考虑，开放了安全管理功能，在 [安全管理](#) 中设置是为账号全局安全设置，将对账号下所有用户生效。

注意事项： 安全管理功能只针对企业版及以上版本开放，标准版不支持安全管理功能。

一. 基础设置

基础设置可以设置账号的登录策略、共享目录数据读写权限、数据传输加密、节点出公网流量控制等，设置将对账号全局生效。

二. 密钥对管理

北鲲云密钥对管理，管理用户或者子用户通过SSH密钥对来进行连接管理节点，是一种安全便捷的登录认证方式，由公钥和私钥组成，仅支持Linux节点，SSH密钥对通过加密算法生成一对密钥，默认采用RSA 2048位的加密方式，要使用SSH密钥对登录Linux节点，您必须先创建或者上传一个密钥对，并在 [基础设置](#) 中将连接策略设为以密钥对创建SSH连接，以使密钥对配置生效。

相关概念

- 成功创建SSH密钥对后：
 - 北鲲云会保存SSH密钥对的公钥部分，在Linux管理节点中，公钥内容放在 `~/.ssh/authorized_keys` 文件内。
 - 平台不保存私钥信息，您需要下载并妥善保管私钥，私钥使用未加密的PEM（Privacy-Enhanced Mail）编码的 `PKCS#8` 格式。
 - 在密钥对管理中点应用可以设置为账号默认密钥对或者手动分配给指定用户使用。
- 安全性：SSH密钥对登录认证更为安全可靠。
 - 密钥对安全强度远高于常规用户口令，可以杜绝暴力破解威胁。
 - 不可能通过公钥推导出私钥。
- 便捷性：
 - 便于远程登录Linux管理节点，方便管理。如果您需要批量维护多台Linux管理节点，推荐使用这种方式登录。

注意事项:

1. 平台不保存私钥信息，请妥善保管您的私钥，然后使用私钥连接节点。
2. 密钥对名称最多可使用 30 个字符，（支持大小写字母，中文，数字,不支持空格）
3. 如果使用SSH密钥对登录Linux节点，将会禁用密码登录，以提高安全性。
4. 仅支持Linux管理节点或者Linux系统启动的图形应用，Windows管理节点不生效。
5. 通过控制台基础设置绑定密钥对时，是为账号全局安全设置，将对账号下所有用户新启动的Linux管理节点或者Linux系统启动的图形应用节点生效，已有节点不受影响，对命令行启动的计算节点不生效。

三. 网络策略管理

北鲲云平台为满足企业用户个性化需求，新增网络策略，网络策略是一种虚拟防火墙，具备有状态的数据包过滤功能，用于设置计算集群、计算节点的网络访问控制，控制节点级别的出入流量，是重要的网络安全隔离手段。

网络策略规则

网络策略规则包括如下组成部分：

- 授权对象：源数据（入站）或目标数据（出站）的 IP或者IP段。
- 协议类型和协议端口：协议类型如 TCP、UDP 等。

注意事项

1. 网络策略功能只针对企业版及以上版本开放，标准版不支持网络策略功能。
2. 网络策略默认规则，不支持更改、停用、删除、克隆等操作，除已启用的默认策略所指定的端口外，其他端口的出入流量均默认拒绝。
3. 网络策略只支持管理账户和安全管理员在用户中心-安全管理菜单栏中新增网络策略和修改自定义网络策略规则，启用的网络策略，修改规则可实时生效，命令行启动的计算节点和之前已经创建的管理节点不生效。
4. 网络策略名称只支持英文字母、数字和特殊字符（. _ -），不支持中文，每个计算区最多创建3个网络策略并启用，每个策略最多可创建25个规则。
5. 每个子用户可根据自身需求，在用户中心-网络策略菜单栏中启用管理用户或者安全管理员配置的自定义网络策略，并只对子用户自己新启节点生效，管理用户或者安全管理员在安全管理菜单栏中启用网络策略将对账号下所有用户新起节点生效。

四. 操作审计

北鲲云操作审计功能帮助企业用户记录子用户的敏感操作信息，供管理员查阅，然后进行行为分析、安全分析、资源变更行为追踪和行为合规性审计等操作。

功能特性

1. 开箱即用：无需配置，操作审计默认为您追踪并记录最近30天的事件，支持在线查阅事件。
2. 多维度查询：管理员进入“[操作审计](#)”页面可查看子用户过往敏感操作记录，管理员可根据时间、模块、操作人员、计算区进行过滤。

应用场景

安全分析：操作审计会对用户操作进行详细的记录，通过这些事件您可以判断您的账号是否存在安全问题。

团队管理

北鲲云平台为满足企业、学校、科研机构、团队组织等多租户场景，推出了 **团队管理** 功能，团队管理功能支持创建账户管理员和组织管理员及子用户管理，这些功能能够更好地满足企业的预算管理、安全性和合规性需求。

一. 用户管理

相关概念：

- **组织管理员：** 企业、学校、科研机构、团队组织的创建账号即为团队的组织管理账户，组织管理员可以在 **用户管理** 中，为组织和团队创建账户管理员以及指定其它账户管理员为组织管理员，一个团队仅有一个组织管理账户，指定其他账户管理员为组织管理员，自己将不再担任该角色。
- **账户管理员：** 账户管理员是由组织管理员创建的账户，具有管理费用、团队、安全和系统的相关权限，该用户不可自行删除，需要联系组织管理员进行删除。
- **角色：** 角色分为组织管理员和账户管理员。
- **角色权限：** 账户管理员拥有管理费用、团队、安全和系统的相关权限，组织管理员除了账户管理员所有权限之外，还具有管理组织下账户的权限。

注意事项：

1. 团队管理中用户管理功能只针对企业版组织管理员及以上版本开放，标准版及账户管理员不支持团队管理中用户管理功能，如需开通请联系销售经理。
2. 在用户管理中创建账户管理员用户，用户名需包含3-20个字符，仅限英文，数字和下划线，需要输入正确的手机号且没有被注册的、合法的邮箱地址且未被绑定的、密码长度为6-20个字符，可包含数字、大小字母、两次密码需要输入一致。
3. 组织管理员删除创建的账户管理员用户，该用户及其子用户将无法再登录控制台，该用户及其子用户在平台内所有正在运行的机器将会被释放，上传到平台的所有文件将会被删除。
4. 冻结创建的账户管理员用户，冻结后，该用户及其子用户正在运行中的节点将被立即释放， workflows 将被终止，冻结期间无法再启动节点和提交作业，其他资源不受影响，如文件数据、镜像等。

二. 子用户管理

子用户管理主要满足是学校机构、科研团队、课题组、团队组织内等多租户场景，推出了 **子用户管理** 功能，您可根据实际需求为子账号设置费用限定额度、管理策略、共享资源及网络策略等权限。

相关概念：

- **子用户：** 账户管理员在 [子用户管理](#) 中创建的其他用户称为子用户，在团队中，账户管理员可以创建子用户、从子用户管理中删除子用户、设置子用户为系统管理员或者安全管理员。
- **角色：** 角色分为系统管理员和安全管理员。
- **角色权限：** 安全管理员拥有安全管理和账号下子用户的相关权限，系统管理员拥有管理账号系统配置的相关权限。

注意事项：

1. 团队管理中子用户管理功能只针对企业版及以上版本开放，标准版不支持团队管理中子用户管理功能，如需开通请联系销售经理。
2. 子用户没有余额，也无需充值，直接使用父账号的余额，当子用户新启动资源时会校验当前父账号余额，判断是否高于所启动资源的每小时费用，否则将无法提交作业，当所剩额度低于设置限定额度0元时，作业将被强制停止，所用资源将自动释放。
3. 账户管理员删除子用户后，子用户将无法再登录控制台，该子用户在平台内所有正在运行的机器将会被释放，上传到平台的所有文件将会被删除。
4. 子用户按年、按月设置计费限定额度，不论什么时间创建，都是按照次年、次月1号重新计算限定额度。
5. 团队管理中不同的账户管理员创建的子用户完全隔离，子用户管理页面只展示当前账号下创建的子用户。

配额管理

为防止资源滥用，平台限定了各计算区的资源配额，对资源数量和容量做了配额限制，配额包括CPU核数，GPU卡数，镜像数，网络策略创建数，子用户创建数等，配额对平台所有用户生效，主账号下所有子用户的资源使用，共用同一个主账号配额，只需主账号或者系统管理员在系统管理中申请即可。

一. 配额管理

配额名称	描述	配额	作用范围
网络策略数	当前账户能创建的网络策略数	3个	计算区
GPU卡数	当前账户每个计算区可用的最大GPU卡数（包括集群GPU计算节点和GPU图形节点）	10卡	计算区
镜像数	当前账号能创建的自定义镜像数	5个	计算区
CPU核数	当前账户每个计算区可用的最大CPU核数（包括集群CPU计算节点和CPU图形节点）	400核	计算区
子用户数	当前账户能创建的最大子用户数	100个	全局
用户数	当前组织能创建的最大用户数	20个	全局

二. 配额申请

1. 登录北鲲云 一站式云超算控制台 > 点击登录头像 > 进入[系统管理](#) > 选择配额管理 > 选择需要提升配额的计算区 > 点击申请 > 填写申请数量，申请后联系客服处理。
2. 每次申请数量不能超过当前配额的10倍。

存储目录介绍

北鲲云超算平台拥有单地域高达10PB存储容量的NAS。

注意： 以下目录不可自行删除，否则导致相关功能无法正常使用。

目录	描述
/home/cloudam	cloudam用户的家目录，该目录是所有节点的共享存储，对于无需root权限的linux软件，可安装到该目录下，永久保存；对于需要使用root权限的软件，可通过镜像中心安装，定义成镜像
/home/cloudam/Windows	对应Windows工作站中的H盘，用于文件传输和保存结果文件
/share	对应Windows工作站中的S盘，适用于父用户和子用户之间共享文件，父用户可设置该目录权限为只读
/public	平台上预装软件的安装目录，您无权限在此目录下进行写操作

二. 其它隐藏目录（文件）介绍

如下列表是在/home/cloudam/目录下的隐藏目录或文件，是在使用平台期间，自动生成的，不可删除，否则导致相关功能无法正常使用。

目录（文件）	描述
Desktop	Linux工作站存放桌面数据
jobs	可视化作业相关文件
.bash_history	使用命令的历史记录
.bash_logout	用户登出时执行的命令
.bash_profile	用户登录时调用，该文件一般会显式调用.bashrc

目录 (文件)	描述
.bashrc	用户定义的别名和函数
.bashrc.bak	.bashrc 文件的备份
.beeond	
.cache	缓存
.certs	证书, 用于节点之间互联
.conda	依赖和环境管理工具, 适用于多种语言, 如: Python, R, Scala, Java, Javascript, C/C++, FORTRAN
.condarc	conda的配置文件
.config	linux内核配置文件
.lmod.d	基于Lua的环境模块系统
.local	存放应用程序数据
.ssh	记录密钥信息的文件夹
.viminfo	储存状态信息

文件传输

文件传输分为默认线路和测试线路，当默认线路上传拥堵时使用测试线路，大文件上传下载建议使用默认线路，效果最佳。

注意事项：

- 上传文件或文件夹时 **命名的长度不得超过127字节、不支持特殊符号、空格**；
- 在传输列表点击“上传文件”默认上传到 `/home/cloudam` 路径下，无法上传到自定义目录，上传到自定义目录，需进入目录绝对路径点击新建上传，上传的自定义文件夹需有cloudam用户写入权限，不可是root用户创建，否则无法上传。
- 文件传输过程中刷新页面会导致传输失败。

操作步骤：

一. Windows数据传输

在文件传输页面，进到Windows文件夹,点击“新建”上传文件夹，然后打开Windows工作站H盘复制文件到桌面即可。

注意事项：

- 不支持在 **H盘重命名文件或者文件夹**，可以在工作站桌面建好后复制到H盘。
- H盘读写速度比较慢，**结果文件可以保存在H盘，但 输入文件一定要放在C盘。**
- 从工作站C盘复制到H盘的文件名不能有 **中文**，会出现乱码。

操作步骤：

二. Linux数据传输

在文件传输页面，点击“新建”上传文件或文件夹，您也可以进入到自定义目录，点击“新建”上传到自定义目录。

操作步骤：

三. 结果文件下载

可视化模板提交的作业，执行成功或者失败的作业可以在左侧菜单栏作业管理中查看结果文件，日志文件，输入文件，临时文件，下载对应结果文件或者日志文件，点击“下载”按钮，系统会自动打包压缩，下载到本地。

注意事项：

- 点击“下载”，等待时间较长，可能是因为结果文件较大，或者下载的文件夹比较大，系统自动在压缩打包，请勿多次点击“下载”按钮。
- 每个计算区模板提交作业，文件传输数据不互通，请注意选择对应计算区的工作目录下载对应结果文件。

操作步骤：

1. 选择计算区，作业管理，点击查看；
2. 选择需要下载的文件或者文件夹，点击下载。

四. 文件同步

北鲲云平台为方便企业用户跨计算区文件传输，推出文件同步功能，文件同步功能支持跨计算区同步文件。

注意事项：

- 文件同步功能只针对企业版及以上版本用户开放，标准版不支持文件同步功能；
- 文件同步目标路径无法编辑根路径 `/home/cloudam` 和 `/share` 外其它路径可以编辑，如目标路径没有指定的路径，自动生成文件夹；
- 文件同步失败或者取消时：需要去目标计算区手动删除未同步完成的文件或者文件夹。

操作步骤：

1. 选择计算区 > 文件传输 > 选择需要同步的文件或者文件夹 > 点击更多 > 点击同步按钮 > 设置好需要同步的计算区 > 确认同步 > 然后点击同步列表，就可以看到正在同步的文件或者文件夹。

查询平台预装软件

北鲲云超算平台集成多款图形应用软件和命令行软件环境，已有软件无需重复安装，可直接加载使用。

一. 使用命令行查询软件

Module 是一款环境变量管理工具，北鲲云一站式超算平台安装了很多公共软件，并通过[module](#)进行环境变量的管理。

Step 1. 启动并连接ssh节点；

Step 2. 查询平台所有预装软件；

```
module avail
```

Step 3. 查询指定软件（如查询lammers）；

```
module spider lammers
```

二. Python/Conda环境的查询

Anaconda 是一个开源的软件包管理系统和环境管理系统，用于安装多个版本的软件包及其依赖关系，并在它们之间轻松切换。

Step 1. 加载Anaconda3

```
module add Anaconda3
```

Step 2. 列出平台预装的Conda虚拟环境

```
conda env list
```

Step 3. 执行 `source activate` 进入已经预装软件的虚拟环境

```
source activate xxxx
```

三. 工作站软件的查询

应用中心搜索软件名称，部分软件需要点击申请，已经通过的软件，选择即可看到平台安装的版本 选择 **图形界面提交** 启动工作站使用。

四. 未查询到所需软件

1. 平台支持自定义安装软件，可通过 **镜像中心** 安装和配置自定义的软件或环境，安装过程有问题可联系客服帮助。
2. 我们对常用开源软件进行评估，以便全局部署，欢迎反馈。
3. 平台已集成多数科研应用场景的常用开源软件，对于商业软件，可自行购买许可授权并自定义安装。

加载预装软件

平台预装的所有linux命令行软件和环境均可通过命令行直接加载，Linux/Windows桌面软件则可以通过启动模板来使用。

一. SSH命令行加载软件环境

1. 使用module工具查询和加载软件

```
module avail          #列出平台所有预装软件
module spider xxxx    #查询指定软件
module add xxxx/xxx   #加载指定版本的软件
```

2. 加载Python/Conda虚拟环境

```
module add Anaconda3  #加载Anaconda3
conda env list         #列出所有Conda虚拟环境
source activate xxxx  #加载指定虚拟环境
```

二. 工作站启动软件

Step 1. 进入应用中心搜索软件名称，查询软件安装的版本，选择 [图形界面提交](#)；

Step 2. 选择硬件配置并启动；

- CPU或者GPU：根据安装的软件版本及使用经验，选择计算资源是CPU还是GPU；
- 内存配比：设置工作站内存大小为核心数×内存配比；
- 硬盘大小：如果您所选的硬盘大小超过500G，系统将为您创建数据盘并自动挂载到/mnt/lscratch目录(Linux)或D盘(Windows)。

Step 3. 连接启动的工作站，Windows 工作站建议选择第二种连接方式，下载连接文件，点击查看密码并复制，打开下载的文件，输入复制的密码，点击确认；

Step 4. 启动软件；

- Windows工作站可桌面双击图标或通过“开始-菜单栏”找到对应软件鼠标左键双击软件打开使用。
- Linux工作站可使用鼠标右键单机桌面，打开terminal视图，进入软件安装目录启动。

自定义安装软件

一. 安装须知

如何选择安装方式？

- **Linux编译安装软件**

适用于安装 **多节点并行** 计算的软件程序，申请计算节点并将软件环境安装到 **/home/cloudam/Software** 目录，集群的所有节点均可使用。

- **Python/Conda环境安装软件**

Conda创建的环境和安装的软件默认保存在 **/home/cloudam/.conda** 目录下，集群节点和Linux工作站均可使用。

- **Linux工作站安装软件**

适用于安装 **单节点并行** 计算的软件程序，安装在非/home/cloudam目录的软件会随着节点的释放而消失，建议安装完成后定义成模板。

- **Windows工作站安装软件**

适用于安装 **单节点并行** 的Windows应用软件，安装完成后可定义成模板，后续可通过模板启动工作站直接使用安装好的软件。

- **镜像中心安装软件**

适用于安装 **需要root权限** 安装或运行的Linux应用软件，因为在所有集群节点或Linux工作站节点使用root权限安装的软件默认不会保存在/home/cloudam目录，会随着节点的释放而消失；而通过镜像中心安装并定义成镜像后永久保存，之后所启动的集群都将使用您所设置的镜像来启动对应的管理或计算节点。

装前必看

- 对于 **需要root权限** 才能安装或使用的软件程序，建议通过 **镜像中心** 安装并制作成自定义镜像，以防止软件在节点释放后消失。

- 在集群ssh管理节点直接安装的软件可能无法正常使用，因为软件总是在计算节点运行，为保证运行环境一致，安装需要在计算节点进行。
- Linux系统上的软件通常会依赖第三方库如mpi, fftw等，这些第三方库基本都已经在北鲲云一站式云超算平台上部署安装完毕，只需要使用`module avail`或`module spider xxxx`查询，然后通过`module add xxxx`激活即可使用，更多第三方依赖库的软件加载，请点击查看[加载预装软件](#)。

二. SSH连接命令行安装软件

Linux编译安装软件

Step 1. 点击ssh连接启动一个ssh管理节点，并ssh连接进入管理节点；

Step 2. 执行命令 `salloc -N 1 &` 启动一个工作节点，并ssh连接进入；

Step 3. 查看平台安装好的依赖库，然后加载软件的依赖库，更多第三方依赖库的软件加载，请点击查看[加载预装软件](#)；

```
module avail      #查看全部
module spider xxxx #快速查找
module add  xxxx  #加载
```

Step 4. 通过文件传输上传安装包；

Step 5. 开始编译安装源代码程序，常用命令；

为了在集群环境下有绝对的操作权限，需要指定安装路径安装到/home/cloudam子目录下。

如 `./configure --prefix=/home/cloudam/Software`

```
./configure #用来生成 Makefile
make        #开始进行源代码编译
```

```
make install #开始安装
```

Step 6. 安装完成，执行 `scancel JOBID` 释放工作节点，完成安装；

Step 7. 安装成功后会在目录下生成执行程序；

Python/Conda环境安装软件

```
#加载Anaconda环境
module add Anaconda3/2020.02

#创建环境，安装路径默认在/home/cloudam/.conda
conda create -n xxxx

#查看创建好的环境
conda env list

#加载创建的环境
source activate xxxx

#开始在创建好的环境安装软件
conda install xxx xxx
```

更多Conda常用命令请查看[Conda的使用](#)。

三. Windows工作站安装软件

Step 1. 启动一台Windows工作站，并连接进入；

Step 2. 通过文件传输上传安装包到 `/home/cloudam/Windows` 目录，对应工作站的H盘；

Step 3. 安装完成设为模板，下次可通过模板启动而无需重复安装；

Step 4. 制作模板完成，释放Windows工作站节点，结束计费；

四. Linux工作站安装软件

注意事项:

1. Linux 图形工作站 **VNC** 无法连接排查步骤

```
sudo systemctl restart vncserver@:1.server # 重新启动VNC 服务
```

2. Linux 图形工作站 **iOS** 镜像安装软件

```
mkdir -p /tmp/mount           #在/tmp路径下创建挂载目录。
chmod -R 755 XXXXXX.ios       #给IOS镜像文件添加权限。
mount -o loop XXXXXX.ios /tmp/mount #挂载镜像文件到指定目录。
export DISPLAY=:1             #定义图形桌面环境变量。
cd /tmp/mount                 #进入挂载目录执行安装程序，安装路径需指
定/home/cloudam路径，后续图形工作站释放可永久保存，再次使用进入指定目录启动即可。
```

Step 1. 启动一台Linux工作站，并连接进入；

Step 2. 查看平台安装好的依赖库，加载软件需要的依赖库，更多第三方依赖库的软件加载，请点击查看[加载预装软件](#)；

```
module avail                 #查看集群现有软件环境
module spider xxxx          #查找软件环境
module add xxxx              #加载软件环境
```

Step 3. 通过文件传输上传安装包；

Step 4. 开始编译安装源代码程序；

为了在集群环境下有绝对的操作权限，需要指定安装路径安装到/home/cloudam子目录下。

如 `./configure --prefix=/home/cloudam/Software`

```
./configure    #生成 Makefile
make           #开始进行源代码编译
make install   #开始安装
```

Step 5. 安装成功后会在目录下生成可执行程序；

Step 6. 安装完成，释放Linux工作站节点，结束计费；

五. 镜像中心安装软件

镜像中心方便您自行安装软件并制作自定义镜像，以在计算时调用。

- 自定义的集群镜像可以设置为 默认的集群管理/计算节点镜像，之后您提交的集群作业都将使用该镜像创建对应节点。
- 自定义的 工作站镜像 将展示在图形应用的启动选项中，您可以在启动的桌面上直接编辑和提交作业。
- 需要root权限时，输入以下命令以获取临时root权限：`sudo -i`。
- 本平台的操作系统为 CentOS 7 和 Windows Server 2016，请确认安装的软件版本与操作系统是否匹配。

如何提交作业

北鲲云一站式云超算平台针对用户的不同使用场景，拥有多种提交作业的方式，该如何选择呢？

使用需求	建议提交方式
对Linux命令不熟悉，对软件使用参数不熟悉	模板提交
需要用到多节点并行跑作业，但是对Linux命令不熟悉	模板提交
之前使用过超算中心，熟悉slurm作业系统	命令行提交
需要频繁的提交单节点运行的作业	命令行提交
只需要使用单台Linux主机跑作业	图形界面提交(Linux工作站)
凡是使用Windows系统运行的程序	图形界面提交(Windows工作站)
需要使用带有图形化桌面的操作系统	图形界面提交

模板提交

北鲲云HPC一站式云超算平台集成了大量行业应用软件并提供标准的公共作业模板，可以通过应用中心搜索软件快速提交作业。部分软件需要申请使用，申请后请联系客服处理，后台同意后即可免费使用。

一. 提交流程

1. 登录 [北鲲云HPC一站式云超算](#) 控制台；
2. 在应用中心搜索软件，选择软件，点击【提交作业】；
3. 选择模板提交，上传计算文件，设置模板参数，选择配置；
4. 提交后即可实时查看结果。

二. 操作步骤

Step 1. 应用中心选择软件，可查看到该软件的所有提交方式；

Step 2. 选择 [模板提交](#)；

- 因为部分软件限制，如果仅有基础模板，则该软件 [不支持使用模板提交](#)。
- 案例模板是后台预上传了输入文件示例，仅供参考，不支持修改。

Step 3. 上传输入文件，配置运行参数；

- 可以设置提交的作业名。
- 可 [点击感叹号](#) 查看待上传输入文件的格式、软件运行参数的注意事项等。

Step 4. 选择硬件配置；

- 根据软件版本和使用需求，选择CPU/GPU配置。
- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

三. 提交后的监控

1. 作业提交后可通过 [作业管理](#) 查看作业的输出和日志等内容。
2. 可通过ssh连接登录到各计算节点，查看节点详细信息。
3. 可通过 [仪表盘](#) 查看正在运行的计算节点资源使用率等信息。
4. 可在 [通知设置](#) 设置作业结束后邮件或公众号通知等功能。

命令行提交

命令行提交用的是slurm命令集群调度系统，通过脚本形式提交任务至一个或多个计算节点，进行并行计算，可使用mpi或openmp并行。如果您在其他超算平台使用过对应的脚本，需要提供给技术工程师修改为适用于北鲲云超算平台的脚本。

一. 操作步骤

Step 1. 通过SSH连接启动一个管理节点，并连接进入管理节点；

Step 2. 提供文件传输上传输入文件，如何上传文件请点击查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 查看SLURM集群所支持的partitions(分区)；

```
sinfo
```

Step 4. 查询和加载软件，更多软件的加载，请点击查看[加载预装软件](#)；

```
module avail      #查看全部
module spider xxxx #快速查找
module add  xxxx  #加载
```

Step 5. 创建提交脚本，参照gromacs运行脚本：`su.sh`

```
#!/bin/bash
module add GROMACS/2021-gromacs-cpu-new
mpiexec -v gmx_mpi mdrun -v -cpi tpr_file_name -deffnm tpr_file_name
```

Step 6. 使用sbatch提交到计算节点，参数详细介绍请查看[slurm命令](#)；

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 su.sh
```

Step 7. 查看SLURM集群正在运行的作业；

queue

Step 8. 连接计算节点执行top查看CPU使用情况;

```
ssh c-4-1-worker0001    #连接计算节点
top                      #查看任务管理器
exit                     #退出计算节点
```

Step 9. 查看运行作业详细信息;

```
scontrol show jobs
```

- /home/cloudam/examples/GROMACS 为作业执行路径。
- /home/cloudam/examples/GROMACS/slurm-47.out 文件为作业输出日志，可实时查看作业运行信息。

Step 10. 取消程序运行，释放分配的计算节点（作业执行成功或失败计算节点会自动释放）；

```
scancel JOBID
```

Step 11. 如何下载结果文件，请点击查看[Linux数据传输](#);

二. 计算节点资源使用率监控

1. 通过仪表盘查看CPU、内存等资源使用率。
2. 通过管理节点的监控按钮查看资源使用率，可登录到计算节点使用命令查看详细信息。

图形界面提交

提供图形用户界面(GUI)，支持Windows与Linux两种操作系统，以VNC、SSH、RDP、webRDP等协议远程连接到工作站。

一. Windows工作站提交

操作步骤：

Step 1. 在应用中心界面搜索您所需要的软件，待申请通过后，点击图形界面提交，选择软件版本，连接到工作站即可使用软件。如果没有您所需要的软件，您也可以自己安装软件，详情请看[Windows工作站安装软件](#)；

Step 2. 选择硬件配置，启动；

Step 3. 工作站节点启动需要一定时间，请等待一分钟状态变成运行中再连接；推荐使用第一种RDP连接方法，体验更佳；

Step 4. 注意查看工作站上的各项功能；

- 释放：当不需要使用工作站时，就可以释放工作站。
 - **注意事项：** 释放掉工作站C盘数据会被清空，需将结果文件保存到H盘。
- 设为模板：自定义安装软件或保存工作站的环境需要设为模板，相当于保存C盘内的所有数据。
 - **注意事项：**
 - i. 制作模板耗时从几分钟到数十分钟不等，节点磁盘越大，制作过程越长，制作过程中无法进行其他操作。
 - ii. 不同计算区制作的模板和数据不能互通。

操作步骤：

1. 点击【设为模板】
2. 填写模板信息、软件所属类型、软件版本，填写完毕后点击【创建按钮】
3. 显示如下界面，则表示模板正在制作中。
4. 使用制作完成的模板，可以在图像界面和镜像中心看到。
5. 分享模板给其他用户使用，点击【分享】输入对方的用户名，点击确认
6. 使用自定义模板，在图像界面点击模板，选择相关配置即可使用模板
7. **停机：** 相当于关机，C盘数据还保留，只收取系统盘存储费用1G每小时0.001元。
8. **设置：** 可以设置 **禁用超线程** 和 **通知作业结束** 等功能。
9. 运行时限：以小时为单位，默认设置为72小时，支持自定义修改，“0”表示无限制。
10. 禁用超线程：可以使用进程名，PID，也支持通配符。
11. 作业设置：可以根据相关需要设置，来通知作业结束
12. 性能指标：查看当前或历史作业的节点资源使用情况。

二. Linux工作站提交

操作步骤：

Step 1. 在应用中心界面搜索您所需要的软件，待申请通过后，点击图形界面提交，选择软件版本，连接到工作站即可使用软件。如果没有您所需要的软件，您也可以自己安装软件，详情请看[Linux工作站安装软件](#)；

Step 2. 选择硬件配置，启动；

Step 3. 点击VNC连接进去右键打开终端输入启动命令即可使用软件；

Step 4. 注意查看工作站上的各项功能;

- 释放：当不需要使用工作站时，就可以释放工作站,安装到 `/home/cloudam` 目录的软件释放后也会存在。
- 设为模板：安装到 `root` 目录下的软件需要设为模板。
- 设置：可以设置 `禁用超线程` 和 `通知作业结束` 等功能。
- 性能指标：查看当前或历史作业的节点资源使用情况。

AlphaFold2

AlphaFold2 基于深度神经网络预测蛋白质形态，能够快速生成高精确度的蛋白质 3D 模型。以往花费几周时间预测的蛋白质结构，AlphaFold2 在几小时内就能完成。

注意事项

- 运行AlphaFold 作业需要丰富的GPU资源，建议选择V100 单卡进行计算。
- 输入文件名不能有特殊符号和空格。
- 提交的文件第一行为标题，第二行为序列，序列为大写字母，序列之间不能有空格或换行符。
- 模板提交一次上传多个序列文件，会启动多个计算节点，每个计算节点对应一个序列文件。

单体结构输入文件示例：

```
>sequence_1
GSDNGFGSSKATSGSDFGGLAIFDGSSEHFGHSDTHGSFDGLFGVDFZILSQQ LKS
```

如果是多聚体结构，输入文件示例：

```
>sequence_1
FADGAFGSGSDFSGFHGFGGHSRADGGTGFDFGDFSNGLFNGFGVLTFSDERGESGFDGFFDSGSFQGKFDOFJOWFJODJOAISJFDO
>sequence_2
GSDNKDSKATSEREACGLAIFSKQHGFHSDFGSFFILQFDSAFQLKSKFDOASFJAPOFJDPAISFJPAFJKAPF
```

一. 模板提交

AlphaFold 使用模板提交，会根据上传的输入文件个数，启动对应数量的作业节点。如：上传5个输入文件，硬件配置选择节点数量为1提交作业，默认会启动5个作业节点同时计算，相应的以5个节点的价格进行计费；相比于串行提交，以相同的成本节约了计算的时间。

Step 1. 在应用中心搜索AlphaFold软件,点击提交作业-选择模板提交;

Step 2.选择可视化模板提交;

Step 3. 上传序列文件（.fasta格式），选择运行模式（单体选择monomer，多聚体选择multimer）；

Step 4. 选择GPU硬件配置虎鲸1卡（v100-1）；

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 执行成功或者失败还是执行中的作业，可以通过左侧菜单栏作业管理中点击查看或者取消作业；

二. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir alphafoldJob1
cd alphafoldJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件test.fasta，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本alphafold.sh：

```
#!/bin/bash
#赋予输出结果的目录读写权限
chmod -R 770 /home/cloudam/alphafoldJob1

#初始化程序运行环境
module add Anaconda3
PROGRAM=/public/software/.local/easybuild/software/alphafold
cd $PROGRAM/alphafold-2.2.0
docker load < alphafold.tar
```

```
pip install -r docker/requirements.txt
```

#假设该test.fasta里是多聚体

```
python docker/run_docker.py \  
--fasta_paths=/home/cloudam/alphafoldJob1/test.fasta \  
--max_template_date=2021-11-01 \  
--model_preset=multimer \  
--data_dir=$PROGRAM/data3 \  
--output_dir=/home/cloudam/alphafoldJob1
```

Step 4. 提交作业;

提交任务到带有一张V100卡的GPU节点运行。

```
sbatch -p g-v100-1 -c 8 alphafold.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

三. 结果文件介绍

正常的计算结果应包含有以下文件结构:

```
<target_name>/  
  features.pkl  
  ranked_{0,1,2,3,4}.pdb  
  ranking_debug.json  
  relaxed_model_{1,2,3,4,5}.pdb  
  result_model_{1,2,3,4,5}.pkl  
  timings.json  
  unrelaxed_model_{1,2,3,4,5}.pdb  
  msas/  
    bfd_uniclust_hits.a3m  
    mgnify_hits.sto  
    uniref90_hits.sto
```

其中ranked_0到4就是AlphaFold2预测出来的分数最高的五个模型，0是最好的，可信度依次往下，详细介绍请查看：

- AlphaFold GitHub: <https://github.com/deepmind/alphafold>
- AlphaFold Nature 论文: <https://www.nature.com/articles/s41586-021-03819-2>

四. 使用PyMOL对结果进行图形化展示

Step 1. 应用中心搜索PyMOL;

Step 2. 点击 提交作业, 选择 图形界面 提交;

Step 3. 启动PyMOL, 选择硬件配置并启动;

Step 4. 通过 VNC连接 启动的linux工作站, 使用软件;

Amber

Amber是著名的分子动力学软件，用于蛋白质、核酸、糖等生物大分子的计算模拟。Amber也指一种经验力场(empirical force fields)。

一. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索Amber软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择可视化模板提交；

Step 3. 点击输入文件列表上传文件；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

CPU版 Amber 作业示例

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir amberJob1
cd amberJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `amber.sh`：

```
#!/bin/bash
module add Anaconda3/2020.02
source /public/software/.local/easybuild/software/amber/amber20/amber.sh
ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited
pmemd.cuda -O -i sander.in7 -o sander.out7 -p prmtop -c mdrest6 -r mdrest7 -x
mdcrd7
```

Step 4. 提交作业；

2个4核心节点启动8个并行任务。

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 amber.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

GPU Amber 作业示例

根据官方建议是一个任务使用一个gpu, 一个节点如果有多个gpu的话, 可以跑多个任务, 一个任务使用多个gpu没有加速作用

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir amberJob1
cd amberJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `amber.sh`：

```
#!/bin/bash
module add Anaconda3/2020.02
source /public/software/.local/easybuild/software/amber/amber20/amber.sh
ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited
mpirun pmemd.cuda -O -i sander.in7 -o sander.out7 -p prmtop -c mdrest6 -r mdrest7 -x
mdcrd7
```

Step 4. 提交作业；

使用GPUv100一卡启动8个并行任务。

```
sbatch -N 1 -p g-v100-1 -c 8 --gres=gpu:1 amber.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

Ansys CFX

Ansys CFX 是业界领先的涡轮机械应用 CFD 软件。通过简化的工作流程、先进的物理建模功能和准确的结果缩短开发时间。

一. 图形界面提交

Step 1. 在应用中心搜索Ansys CFX软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 具体使用步骤请看[图形界面提交](#)；

二. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索Ansys CFX软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择可视化模板提交；

Step 3. 上传输入文件,支持def/mdef/mres三种格式；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

三. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir AnsysCFXJob1
cd AnsysCFXJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `AnsysCFX.sh`：

```
#!/bin/bash
export PATH=/public/software/.local/easybuild/software/ansys/18.0/v180/CFX/bin:$PATH
ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited
cfx5solve -def steadynew.def -batch -single -par -par-local -partition 16
```

Step 4. 使用sbatch提交作业：

1个4核心节点启动4个并行任务

```
sbatch -N 1 -p c-4-1 -n 4 -c 1 AnsysCFX.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)

点击下载以上作业样例：[AnsysCFX.zip](#)。

Ansys Fluent

Ansys Fluent软件是一个通用的计算流体动力学（CFD）软件包，其中包含为工业应用中的流动，湍流，传热和反应建模所需的广泛的物理建模功能。各种专用模型为该软件提供了对缸内燃烧，航空声学，涡轮机械和多相系统进行建模的能力，并已扩大了其实用性。

一. 图形界面提交

Step 1. 在应用中心搜索Ansys Fluent软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 具体使用步骤请看[图形界面提交](#)；

二. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索Ansys Fluent软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择可视化模板提交；

Step 3. 上传Journal、case、data等输入文件，必须至少包含一个 `jou` 文件；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

三. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir AnsysFluentJob1
cd AnsysFluentJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `AnsysFluent.sh`：

```
#!/bin/bash
export
PATH=/public/software/.local/easybuild/software/ansys/2021a/program/v211/fluent/bin:$PATH

ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited

MACHINEFILE="nodes.$SLURM_JOB_ID"
srun -l /bin/hostname | sort -n | awk '{print $2}' > $MACHINEFILE

fluent 3ddp -g -mpi=intel -cnf=$MACHINEFILE -t $SLURM_NTASKS -slurm -i settingori.jou

#网络增强计算区使用RDMA网络需要添加选项：-mpiopt
#例：fluent 3ddp -g -mpi=intel -cnf=$MACHINEFILE -t $SLURM_NTASKS -slurm -i
settingori.jou -mpiopt="-iface ens800f0 -genv I_MPI_DEBUG 4 -genv I_MPI_FABRICS shm:dapl
-genv DAT_OVERRIDE /etc/dat.conf -genv I_MPI_DAT_LIBRARY /usr/lib64/libdat2.so -genv
I_MPI_DAPL_PROVIDER ofa-v2-cma-roe-ens800f0 -genv I_MPI_FALLBACK 0 -genv
I_MPI_FALLBACK=0"
```

Step 4. 提交作业

2个16核心节点启动16个并行任务


```
sbatch -N 2 -p c-16-1 -n 32 -c 1 AnsysFluent.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例: [AnsysFluent.zip](#)。

Ansys LS-DYNA

Ansys LS-DYNA 是业界领先的显式仿真软件，用于跌落测试、冲击和穿透、撞击和碰撞、乘员安全等应用。

一. 图形界面提交

Step 1. 在应用中心搜索Ansys LS-DYNA软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 具体使用步骤请看[图形界面提交](#)；

二. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索Ansys LS-DYNA软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择可视化模板提交；

Step 3. 上传输入文件，后缀名必须包含.k；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业;

AutoDock-Vina

AutoDock-Vina 是用于分子对接和虚拟筛选的开源程序，由Scripps研究所分子图形实验室的Oleg Trott博士设计和实现，是目前使用最为广泛的分子对接软件之一。

注意事项

- 输入文件为 .pdb格式的蛋白文件。
- 其它文件（配体分子库）要求是由多个sdf文件打成的tar包，一个sdf文件只能包含一个分子。
- 最佳打分数量默认为3，可自定义设置。

一. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索 Autodock & AutoDock Vina 软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择可视化模板提交；

Step 3. 上传靶标文件，配体分子库文件；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. AutoDockTools

AutoDockTools 是为了能让用户更方便地使用 AutoDock 而开发的带图形用户界面的配套软件。使用AutoDockTools，可以免去输入 Linux 命令的麻烦，快速上手操作 AutoDock。

Step 1. 应用中心搜索AutoDockTools；

Step 2. 点击提交作业，选择图形界面提交；

Step 3. 启动AutoDockTools，选择硬件配置并启动；

Step 4. 通过VNC连接启动的linux工作站，使用软件；

COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics是一套跨平台的有限元素分析、求解器和多物理场模拟软体，各界一般简称COMSOL。

一. 图形界面提交

Step 1. 在应用中心搜索COMSOL Multiphysics软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 具体使用步骤请看[图形界面提交](#)；

二. 命令行提交

通过SSH连接创建并连接管理节点。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir comsolJob1
cd comsolJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `comsol.sh`：

```
#!/bin/bash
module load COMSOL/5.6.0
ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited
input="scattering_nanosphere.zh_CN.mph"
inputfile=/home/cloudam/comsolJob1/input/$input
outputfile=/home/cloudam/comsolJob1/output/$input
batchlog=/home/cloudam/comsolJob1/logs/$input.log
tmpdir=/home/cloudam/comsolJob1/tmpdir
comsol batch -nn 1 -np 4 -inputfile $inputfile -outputfile $outputfile -batchlog
$batchlog -tmpdir $tmpdir
```

Step 4. 提交作业； 提交1个16核心节点启动单机并行的任务

```
sbatch -p c-4-1 -n 1 -c 4 comsol.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[Slurm作业管理系统](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例：[COMSOL.zip](#)。

CONVERGE

CONVERGE 是美国Convergent Science Inc. (CSI) 开发的革新性的热流体分析软件，它解决了网格生成这一CFD模拟中一个重要障碍。高效求解器配合自动网格生成功能极大缩短了计算时间。

一. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir CONVERGEJob1
cd CONVERGEJob1
```

Step 2. 将运行CONVERGE需要的相关文件上传到该文件夹下，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `converge.sh`：

```
#!/bin/bash
module add converge/converge-2.4
mpirun converge-2.4.21-mpich
```

Step 4. 使用sbatch提交作业；

2个4核心节点启动8个并行任务。

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 converge.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[Slurm作业管理系统](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例：[CONVERGE.zip](#)。

CP2K

CP2K是一个量子化学和固态物理软件包，可以对固态，液态，分子，周期性，材料，晶体和生物系统进行原子模拟。CP2K为不同的建模方法提供了通用框架。支持的理论水平包括DFTB, LDA, GGA, MP2, RPA, 半经验方法 (AM1, PM3, PM6, RM1, MNDO等) 和经典力场 (AMBER, CHARMM等)。CP2K可以使用NEB或二聚体方法进行分子动力学，元动力学，蒙特卡洛，埃伦菲斯特动力学，振动分析，核心能谱，能量最小化和过渡态优化的模拟。

一. 命令行提交步骤

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir cp2kJob1
cd cp2kJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `cp2k.sh`：

```
#!/bin/bash
module add CP2K/cp2k-7.1.0
mpirun cp2k.popt -i Ac.inp -o test.out
```

Step 4. 提交作业；

2个4核心节点启动8个并行任务。

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 cp2k.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例：[CP2K.zip](#)

ColabFold

ColabFold 为 Sergey Ovchinnikov 等人开发的适用于 Google Colab 的 AlphaFold 版本，使用 MMseqs2 替代 Jackhmmer，且不使用模版。ColabFold 计算迅速，短序列五六分钟即可算完。

注意事项

- 运行 ColabFold 作业需要丰富的GPU资源，建议选择 V100 单卡进行计算。
- 输入文件名不能有特殊符号和空格。
- 模板提交一次上传多个序列文件，会启动多个计算节点，每个计算节点对应一个序列文件。
- 需要注意提交的序列文件格式，详情请看以下示例：

单体结构输入文件示例：

```
>sequence_1
GSDNGFGSSKATSGSDFGGLAIFDGSGSEHFGHSDTHGSFDGLFGVDFZILSQQLKs
```

如果是多聚体结构，序列之间用分号隔开，输入文件示例：

```
>sequence_1
FADGAFGSGSDFSGFHGFGGHSRADGGTGFDGDF:LQFDSAFQLKSKFDOASFJAPOFJDPAISFJPAFJKAPF
```

一. 模板提交

ColabFold 使用模板提交，会根据上传的输入文件个数，启动对应数量的作业节点。如：上传5个输入文件，硬件配置选择节点数量为1提交作业，默认会启动5个作业节点同时计算，相应的以5个节点的价格进行计费；相比于串行提交，以相同的成本节约了计算的时间。

Step 1. 在应用中心搜索ColabFold软件,点击提交作业-选择模板提交;

Step 2.选择可视化模板提交;

Step 3. 上传序列文件，选择运行模式（单体选择 `monomer`，多聚体选择 `multimer`）；

Step 4. 选择 GPU 硬件配置 虎鲸1卡（v100-1）；

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir colabfoldJob1
cd colabfoldJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件test.fasta，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `colabfold.sh`：

```
#!/bin/bash
module add CUDA/11.2.2
export
PATH=/public/software/.local/easybuild/software/colabfold/colabfold_batch/bin:$PATH

#如果是预测单体
colabfold_batch --amber --templates --num-recycle 3 test.fasta output

#如果是预测多聚体
#colabfold_batch --amber --templates --num-recycle 3 --model-type AlphaFold2-multimer-
v1 test.fasta output
```

Step 4. 提交作业;

提交任务到带有一张V100卡的GPU节点运行。

```
sbatch -p g-v100-1 -c 12 colabfold.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

GROMACS

GROMACS 是一种分子动力学应用程序，可以模拟具有数百至数百万个粒子的系统的牛顿运动方程。GROMACS旨在模拟具有许多复杂键合相互作用的生化分子，例如蛋白质，脂质和核酸。

注意事项

- 脚本命令里tpr_file_name需要替换为用户对应得tpr输入文件名称，如用户上传了md_100.tpr文件至/home/cloudam/test/目录，则上述tpr_file_name需要写为md_100。

一. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索gromacs软件，申请后请联系客服同意，部分软件无需申请即可提交作业；

Step 2.选择GROMACS可视化模板

Step 3. 点击输入文件列表，必须只能包含一个tpr文件，软件版本包含CPU及GPU版本，选择对应的版本；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. 命令行提交

Step 1. 通过SSH连接[创建并连接管理节点](#);

Step 2. 创建作业目录并进入;

```
mkdir gromacsJob1
cd gromacsJob1
```

Step 3. 将运行gromacs需要的相关文件上传到该文件夹下, 详情请查看[Linux数据传输](#);

GPU版GROMACS作业示例

Step 1. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `gromacs.sh`:

```
#!/bin/bash
module add GROMACS/2021-fosscuda-2019b #加载软件
export GMX_GPU_DD_COMMS=true
export GMX_GPU_PME_PP_COMMS=true
export GMX_FORCE_UPDATE_DEFAULT_GPU=true

#生成tpr格式输入文件, 如果已有tpr格式文件则不需要写
#gmx grompp -f pme.mdp -c conf.gro -p tpr_file.top -o tpr_file_name.tpr

gmx mdrun -v -pin on -nb gpu -bonded gpu -pme gpu -cpi tpr_file_name -deffnm
tpr_file_name
```

Step 2. 使用slurm命令提交到计算节点;

```
sbatch -N 1 -p g-v100-1 -c 12 gromacs.sh
```

CPU版GROMACS作业示例

Step 1. 创建执行脚本:

```
#!/bin/bash
module add GROMACS/2019.6-intel-2019b #加载软件
mpiexec -v gmx_mpi mdrun -v -cpi tpr_file_name -deffnm tpr_file_name
```

Step 2. 提交作业;

2个4核心节点启动8个并行任务。

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 gromacs.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请参考[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例: [GROMACS.zip](#)。

Gaussian

Gaussian是一个功能强大的量子化学综合软件包。其可执行程序可在不同型号的大型计算机，超级计算机，工作站和个人计算机上运行，并相应有不同的版本。

注意事项

- 检查本地gaussian待计算输入文件，输入文件为.com，.gjf等常见格式。
- 检查输入文件中是否包含cpu，内存等配置信息，如果有，则需要先删除对应的行。
- 检查输入文件中chk文件的路径是否正确，北鲲云平台为Linux集群，若chk文件路径为Windows路径需修改为相对路径。

如下面的输入文件input.com:

修改后如下图:

一. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索gaussian软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择可视化模板提交；

Step 3. 点击输入文件列表，可以批量上传多个输入文件同时计算，软件版本包含16A及09A版本，选择对应的版本；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。

- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir gaussianJob1
cd gaussianJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `gaussian.sh`：

```
#!/bin/bash
export PATH=/public/software/.local/easybuild/software/gaussian/Gaussian_16/g16:$PATH
export g16ROOT=/public/software/.local/easybuild/software/gaussian/Gaussian_16/g16
export PATH=$g16ROOT:$PATH
source $g16ROOT/bsd/g16.profile
export GAUSS_SCRDIR=/home/cloudam/gaussianJob1/tmp
export GAUSS_EXEDIR=$g16ROOT

mkdir -p /home/cloudam/gaussianJob1/tmp

srun g16 1.gjf
```

Step 4. 提交作业；

1个16核心节点启动16个单节点并行任务。

```
sbatch -N 1 -p c-16-1 -n 1 -c 16 gaussian.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例: [Gaussian.zip](#)

三. GaussView 6对结果进行图形化展示

Step 1. 应用中心搜索 [GaussView 6](#);

Step 2. 点击 [提交作业](#), 选择 [图形界面](#) 提交;

Step 3. 选择硬件配置并启动;

Step 4. 通过 [vnc连接](#) 启动的linux工作站, 使用软件;

Jupyter Notebook

Jupyter Notebook 的本质是一个 Web 应用程序，便于创建和共享文学化程序文档，支持实时代码，数学方程，可视化和 markdown。用途包括：数据清理和转换，数值模拟，统计建模，机器学习等等。

一. 图形界面提交

Step 1. 在应用中心搜索Jupyter Notebook软件，选择图形界面提交；

Step 2. 选择图形界面提交；

Step 3. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 4. 连接启动的工作站；

Step 5. 使用软件；

LAMMPS

LAMMPS 是大规模经典分子动力学代码，代表大规模原子/分子大规模并行模拟器。LAMMPS 具有用于软材料（生物分子、聚合物）、固态材料（金属、半导体）和粗粒度或细观系统的潜力。它可用于对原子进行建模，或者更一般地说，它可用作原子、中观或连续介质尺度上的平行粒子模拟器。

一. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索lammps软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择可视化模板；

Step 3. 点击输入文件列表上传文件，必须至少包含.in文件；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir lammpsJob1
cd lammpsJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 使用CPU提交：在该文件夹下创建如下执行脚本 `lammps.sh`：

```
#!/bin/bash
module add LAMMPS/3Mar2020-foss-2020a-Python-3.8.2-kokkos
ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited
mpirun lmp -in M-1.in
```

如何加载更多软件版本，请点击查看[加载预装软件](#)

Step 5. 提交作业；

2个4核心节点启动8个并行任务。

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 lammps.sh
```

Step 6. 使用GPU提交：在该文件夹下创建如下执行脚本 `lammps.sh`：

```
#!/bin/bash
module add LAMMPS/lammps-2021.9-fosscuda.2019
ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited
lmp -sf gpu -pk gpu 0 neigh no -in M-1.in #输入文件
```

如何加载更多软件版本，请点击查看[加载预装软件](#)

Step 7. 提交作业；

提交到单卡V100 GPU 节点。

```
sbatch -p g-v100-1 -c 8 lammps.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例：[LAMMPS.zip](#)。

LS-DYNA

LS-DYNA ®由Livermore Software Technology Corporation (LSTC) 开发，是一种多用途的显式和隐式有限元和多物理场程序，用于分析结构的非线性响应；其全自动接触分析和广泛的材料模型使全球用户能够解决复杂的现实问题。

一. 图形界面提交

Step 1. 在应用中心搜索LS-DYNA软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择图形界面提交；

Step 3. 具体使用步骤请看[图形界面提交](#)；

二. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索LS-DYNA软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择模板提交；

Step 3. 上传输入文件，后缀名必须包含.k；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

三. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir LS-DYNAJob1
cd LS-DYNAJob1
```

Step 2. 将运行LS-DYNA需要的相关文件上传到该文件夹下，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `LS-DYNA.sh`：

```
#!/bin/bash
module add LS-DYNA/r11.2.1
module add intel/2019b
export OMP_NUM_THREADS=16
/public/software/.local/easybuild/software/LS-DYNA/lsdyna_smp_r11.2.1/ls-
dyna_smp_d_R11_2_1_x64_centos610_ifort160 i=ImpactX_Negative.k memory=400M ncpu=4
```

Step 4. 使用sbatch提交作业：

1个8核心节点启动8个并行任务

```
sbatch -N 1 -p c-8-1 -n 8 -c 1 LS-DYNA.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例：[LS-DYNA.zip](#)。

NAMD

NAMD是并行分子动力学代码，旨在对大型生物分子系统进行高性能仿真。基于Charm ++并行对象，对于典型的仿真，NAMD可以扩展到数百个内核，对于最大的仿真，可以扩展到200,000个内核。

一. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索NAMD软件，申请后请联系客服同意,部分软件无需申请即可提交作业；

Step 2. 选择可视化模板提交；

Step 3. 点击输入文件列表上传文件，必须至少包含.namd文件；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir namdJob1
cd namdJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `namd.sh`：

```
#!/bin/bash
module add NAMD/2.13-intel-2018b-mpi
ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited
mpirun namd2 apoa1.namd
```

Step 3. 提交作业；

2个4核心节点启动8个并行任务。

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 namd.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例：[NAMD.zip](#)。

ORCA

ORCA 是一个专注于量子化学应用的计算化学程序，该程序旨在模拟电子结构以及分子的光谱特性。

一. 命令行提交

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir ORCAJob1  
cd ORCAJob1
```

Step 2. 将运行ORCA需要的相关文件上传到该文件夹下，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `orca.sh`：

```
#!/bin/bash  
module add ORCA/5.0-openmpi-4.1.1  
ulimit -s unlimited  
ulimit -l unlimited  
/public/software/.local/easybuild/software/ORCA/ORCA-5.0/orca_5_0_0_linux_x86-  
64_shared_openmpi411/orca test.inp > orca.out
```

Step 4. 使用sbatch提交作业：

1个4核心节点启动4个并行任务。

```
sbatch -N 1 -p c-4-1 -n 4 -c 1 orca.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[Slurm作业管理系统](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例：[ORCA.zip](#)。

PyTorch

PyTorch 是一个 Python 优先的深度学习框架，也是使用 GPU 和 CPU 优化的深度学习张量库，能够在强大的 GPU 加速基础上实现张量和动态神经网络。

一. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir pytorchJob1
cd pytorchJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传输入文件test.py，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `pytorch.sh`：

```
#!/bin/bash
module add Anaconda3/2020.02 #加载Anaconda3软件
source activate pytorch-1.5 #激活pytorch环境
python test.py > py.log #运行程序
```

Step 4. 使用sbatch命令提交作业；

提交任务到带有一张T4卡的GPU节点运行。

```
sbatch -p g-t4-1 -c 4 pytorch.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

RoseTTAFold

RoseTTAFold 由华盛顿大学 David Baker 团队开发，利用深度学习技术准确、快速地预测蛋白质结构。

注意事项

- 运行 RoseTTAFold 需要丰富的GPU资源，需要在GPU计算区使用。
- 输入文件是以 .fasta 格式结尾的序列文件。
- 输入文件名不能有特殊符号和空格。
- 提交的文件第一行为标题，第二行为序列，序列为大写字母，序列之间不能有空格或换行符。

输入文件示例：

```
>sequence_1
GSDNGFGSSKATSGSDFGGLAIFDGSSEHFGHSDTHGSFDGLFGVDFZILSQQ LKS
```

一. 模板提交

Step 1. 选择GPU计算区，在应用中心搜索RoseTTAFold软件，部分软件无需申请及可提交作业；

Step 2.选择可视化模板提交；

Step 3. 上传序列文件（.fasta格式），选择运行模式；

Step 4. 选择GPU硬件配置虎鲸1卡（v100-1）；

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业;

二. 使用PyMOL对结果进行图形化展示

Step 1. 应用中心搜索PyMOL;

Step 2. 点击 **提交作业** , 选择 **图形界面** 提交;

Step 3. 启动PyMOL, 选择硬件配置并启动;

Step 4. 通过 **VNC连接** 启动的linux工作站, 使用软件;

STAR-CCM+

Simcenter STAR-CCM+ 是一个完整的多物理场解决方案，可对真实条件下工作的产品 and 设计进行仿真。

一. 图形界面提交

Step 1. 在应用中心搜索STAR-CCM+软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 具体使用步骤请看[图形界面提交](#)；

二. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索STAR-CCM+软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择STAR-CCM+ 可视化模板提交；

Step 3. 上传.java、.sim等输入文件；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

三. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir STAR-CCM+Job1
cd STAR-CCM+Job1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `STAR-CCM+.sh`：

```
#!/bin/bash
module add star-ccm+/14.02.010-R8

ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited

MACHINEFILE="nodes.$SLURM_JOB_ID"
srun -l /bin/hostname | sort -n | awk '{print $2}' > $MACHINEFILE

starccm+ -batch -np $SLURM_NTASKS test.java -machinefile $MACHINEFILE -mpi intel -rsh
ssh test.sim

#网络增强计算区使用RDMA网络需要添加选项：-mpiflags
#例：starccm+ -batch -np $SLURM_NTASKS test.java -machinefile $MACHINEFILE -mpi intel
-rsh ssh test.sim -mpiflags "-iface ens800f0 -genv I_MPI_DEBUG 4 -genv I_MPI_FABRICS
shm:dapl -genv DAT_OVERRIDE /etc/dat.conf -genv I_MPI_DAT_LIBRARY
/usr/lib64/libdat2.so -genv I_MPI_DAPL_PROVIDER ofa-v2-cma-roe-ens800f0 -genv
I_MPI_FALLBACK 0 -genv I_MPI_FALLBACK=0"
```

Step 4. 提交作业

2个16核心节点启动32个并行任务

```
sbatch -N 2 -p c-16-1 -n 32 -c 1 STAR-CCM+.sh
```


查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

TensorFlow

TensorFlow 是一个端到端开源机器学习平台。它拥有一个包含各种工具、库和社区资源的全面灵活生态系统，可以让研究人员推动机器学习领域的先进技术的发展，并让开发者轻松地构建和部署由机器学习提供支持的应用。

一. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir tensorflowJob1
cd tensorflowJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传输入文件tf.py，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `tensorflow.sh`：

```
#!/bin/bash
module add Anaconda3/2020.02           #加载Anaconda
source activate tensorflow-gpu-2.2      #激活tensorflow环境
python tf.py > tf.log                  #运行程序
```

Step 4. 使用sbatch命令提交作业；

提交任务到带有一张T4卡的GPU节点运行。

```
sbatch -p g-t4-1 -c 4 tensorflow.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

TeraChem

TeraChem 是第一个完全从头开始受益于GPU等新型流处理器的计算化学软件。计算算法完全是为了充分利用Nvidia CUDA GPU的巨大重叠而设计的。

一. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir terachemJob1
cd terachemJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传输入文件start.sp、complex.xyz，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `terachem.sh`：

```
#!/bin/bash
source
/public/software/.local/easybuild/software/terachem/terachem1.9/TeraChem/SetTCVars.sh
/public/software/.local/easybuild/software/terachem/terachem1.9/TeraChem/bin/terachem
start.sp
```

Step 4. 使用sbatch命令提交作业；

提交任务到带有一张T4卡的GPU节点运行。

```
sbatch -p g-t4-1 -N 1 -n 1 terachem.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

VASP

VASP是维也纳大学Hafner小组开发的进行电子结构计算和量子力学-分子动力学模拟软件包。它是目前材料模拟和计算物质科学研究中最流行的商用软件之一。

一. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索VASP软件，申请后请联系客服同意,部分软件无需申请，可直接提交作业；

Step 2.选择可视化模板提交；

Step 3. 点击输入文件列表上传文件，必须至少包含INCAR文件；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. 命令行提交

通过SSH连接[创建并连接管理节点](#)。

Step 1. 创建作业目录并进入；

```
mkdir vaspJob1
cd vaspJob1
```

Step 2. 通过文件传输上传所需的输入文件，详情请查看[Linux数据传输](#)；

Step 3. 在该文件夹下创建如下执行脚本 `vasp.sh`：

```
#!/bin/bash
module add intel/2019b
export PATH=$PATH:/public/software/.local/easybuild/software/VASP/vasp/vasp.5.4.4/bin
ulimit -s unlimited
ulimit -l unlimited
mpirun vasp_std
```

Step 4. 提交作业；

2个4核心节点启动8个并行任务。

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 vasp.sh
```

查看作业运行情况及参数详细介绍请点击查看[slurm命令](#)。

结果文件下载请查看[Linux数据传输](#)。

点击下载以上作业样例：[VASP.zip](#)

VirtualFlow

VirtualFlow 是由哈佛大学医学院牵头研发的全新开源药物发现平台，旨在利用高性能计算能力并行筛选潜在的有机化合物结构，以寻找有希望的新药物分子。

注意事项

- 输入文件为 `.pdbqt` 格式的蛋白文件。
- Docking参数设置，可参考具体对接程序的文档。
- VirtualFlow额外运行控制参数设置，参考all.ctrl。

一. 模板提交

Step 1. 在应用中心搜索VirtualFlow软件，申请后请联系客服同意；

Step 2. 选择可视化模板提交；

Step 3. 上传靶标文件（Docking计算用的蛋白文件，pdbqt格式）；

Step 4. 选择硬件配置；

- 节点数量：设置启动多少个并行计算的计算节点。
- 内存配比：设置各个计算节点内存大小为单节点核心数×内存配比。

Step 5. 查看作业内容汇总，并提交作业；

Step 6. 通过作业管理查看运行中的作业；

二. 后置处理失败

模板提交后出现后置处理失败报错情况，可通过以下步骤解决。 Step 1. 查看控制台上运行的工作目录，通过输出文件，日志文件等皆可查看（如：/home/cloudam/jobs/vf-demo/vf-demo_1611973330533）；

Step 2. 通过SSH连接[创建并连接管理节点](#);

Step 3. 手动执行后置处理命令;

```
cd /home/cloudam/jobs/vf-demo/vf-demo_1611973330533
chmod 755 .postProcess.sh
rm -rf out/*
./postProcess.sh
```

基本功能使用问题

1. 我该如何提交作业？

答：平台提供多种作业提交方式，可以根据自身的[使用需求](#)，选择合适的作业方式。

2. 我该如何上传文件到服务器？

答：在控制台使用 [文件传输](#) 功能上传本地数据到服务器，详情请查看[数据传输](#)。

3. 你们平台 文件传输 上传下载速度是否有限制，大文件无法上传如何解决？

答：文件传输默认上下行200M对等带宽，大文件使用默认线路传输效果最佳；如果默认线路拥堵建议使用测试线路进行上传，测试线路具备同等速度。

4. 我在通用计算区配置的环境在其它计算区怎么使用不了？

答：目前各计算区之间数据不互通，建议在根据自己的需求选择适合的计算区或者联系销售经理开通企业版文件同步功能；

- **通用计算区** 本计算区支持WINDOWS和LINUX系统，有丰富的CPU资源，并提供部分GPU资源，可以满足大部分计算作业需求。
- **GPU计算区** 本计算区仅支持LINUX系统，提供丰富且稳定的GPU资源，建议在此提交GPU相关作业。
- **网络增强计算区** 本计算区仅支持LINUX系统，计算资源使用增强网络进行低延时的内网通讯，能满足紧耦合的计算需求（由于增强网络的生效耗时较长，启动集群过程中请耐心等待）。

5. 我在账号下创建一个子用户，子用户的目录和主用户进入的目录一样吗？

答：主用户和子用户的/home/cloudam目录是不互通的，父子用户可以通过/share目录共享数据。

6. 你们平台的模板功能，主要用于哪些场景？

答：模板相当于虚拟机的快照，主要用于保存用户自定义安装的应用软件和配置的系统环境；同时，模板也支持分享给其它用户。

7. 我在您们平台提交作业，多核机器速度和自己本地电脑算起来速度没有快多少，是什么原因呢？

答：需要用户熟悉软件的使用，设置软件多核计算，有些软件不支持调整最大核数并行计算。

8. 可以设置工作站计算完自动释放吗？

答：平台的Linux和Windows工作站均支持作业结束自动释放，需要在图形界面-工作站下方的 [设置](#) 页面指定作业进程PID号，当作业结束即可自动释放。

9. 作业结束后会有通知吗？

答：登录北鲲云网页控制台，点击我的消息，可在 [通知设置](#) 设置作业结束后邮件或微信公众号通知，以及其它通知功能。

10. 能看到下载到本地的文件在哪个目录下么？

答：可通过浏览器的 [设置](#) > [下载文件保存路径](#) 查看；如果没找到，可能是浏览器阻止了下载，可根据提示设置允许下载即可。

11. 请问下现在我们的WebSSH终端大概闲置多久才会断开连接？

答：关闭网页或闲置24小时会断开连接。

12. 我在通知设置里设置了闲置工作站自动释放，为什么没有释放？

答：工作站节点默认闲置12小时自动释放。

13. 您们平台是否支持自定义安装Linux系统其它发行版本？

答：平台目前Linux工作站和集群节点预装的是CentOS 7系统，暂不支持定制安装其它Linux系统版本。

16. 停机与释放有什么区别？

答：**释放**：当不需要使用工作站时，就可以释放工作站。（释放掉工作站C盘数据将清空，需将结果文件保存到H盘）**停机**：相当于关机，C盘数据还保留，关机后，保留实例的资源等并收取系统盘费用，私网IP将保留，公网IP将会被回收，停机后系统盘收费为1G每小时0.001元。

17. 我的作业为什么会执行失败？

答：作业失败有很多原因，具体的原因需要查询相关日志及检查输入文件格式是否正确及注意事项等。

18. 使用模板提交方式，作业执行失败，我该怎么处理？

答：使用模板提交的作业，可以控制台左侧作业管理菜单栏，可查看作业状态、作业日志、临时输出文件等信息。

19. 平台总共有哪些类型的节点，它们各自代表什么含义？

答：

1. 管理节点用于登录北鲲云超算集群提交作业和管理作业。
2. 计算节点是指在管理节点提交作业后，启动计算任务的节点。
3. 图形节点是指带有图形化桌面操作的工作站，支持Windows与Linux两种操作系统，只能单节点并行计算。
4. 安装节点适用于安装Windows应用或需要root权限运行的Linux应用，安装好后请及时制作镜像。

应用软件使用问题

1. 申请使用软件权限后多久通过？

答：申请后联系客服或技术支持，快速通过。

2. 平台没有我要使用的软件怎么办？

答：平台支持自定义安装软件，可通过[镜像中心](#)安装和配置自定义的软件或环境，安装过程有问题可联系客服帮助；我们也对常用开源软件进行评估，以便全局部署，欢迎反馈。

3. 你们平台是否提供商业软件？

答：目前暂不提供商业软件，不过您可以自行购买安装。

注意事项：

商业软件 License 通常需要使用专用的 License 服务器，在购买商业软件并尝试在北鲲云平台上部署 License 服务器前，请与我们以及软件厂商进行充分沟通。

- 请购买浮动授权，即计算程序可以在平台上的任意一个节点启动，通常需要安装特定的 License 服务器；
- 询问 License 服务器是否可以部署在虚拟机上，这样可以专门开一台管理节点运行您的 License 服务器；
- 与厂商充分沟通 License 服务器安装模式、授权数量、使用限制、更换MAC地址的费用以及厂商具备基本的技术支持能力。

4. 普通用户没有权限安装软件，能否获取root权限？

答：平台已为每个用户开通root权限，使用 `sudo -i` 命令可免密登录root用户，不过安装在非/home/clouam目录的软件会随着工作站或节点的释放而清除，释放前需定义成模板或建议通过[镜像中心](#)安装软件。

5. 每次登录都需要使用 `module add` 命令加载软件，可不可以实现自动加载？

答：可以将您加载软件的命令写入到 `/home/cloudam/.bashrc` 文件的最后一行，后续登录即可自动加载。

6. 使用slurm命令报错：“slurm_load_jobs error: Unable to contact slurm controller (connect failure)”如何解决？

答：出现该问题一般是slurmd进程停止导致，可释放该管理节点重新启动一台，或执行以下步骤重启slurmd进程：（1）使用 `sudo -i` 命令切换到root用户 （2）执行 `systemctl start slurmctld` 启动slurmd服务。

7. 执行module命令报错“Lmod has detected the following error:”，如何解决？

答：执行 `module use /public/software/.local/easybuild/modules/all`，再重新使用。

8. 什么是队列？

答：队列是指不同规格的节点资源，可以在命令行输入 `sinfo` 命令查看当前计算区的队列。

9. 为什么有些硬件资源无法选择？

答：部分硬件资源销量比较火爆，导致资源不足，暂时没有上线，敬请期待后续上线或者联系在线客服反馈。

10. 使用Material Studio软件(Windows)时，CPU核数如何修改？

答：

1. 首先打开软件，然后打开谷歌浏览器，进到 `http://localhost:18888` 这个网址，输入用户名进行编辑修改，用户名为 **gatekeeper**，结果如图所示：
2. 然后进到软件里面，点击tool,选择server gateway,双击更新，核数修改完成，结果如图所示：

11. Jupyter Notebook 如何远程使用虚拟环境？

答：

1. 启动工作站，在命令行加载conda环境，输入如下命令，启动Jupyter Notebook

```
module add Anaconda3
```

```
jupyter notebook --no-browser --port 7070 --ip='*' --NotebookApp.token='' --  
NotebookApp.password=''
```

2. 打开本地电脑web浏览器，输入工作站公网IP加7070端口号打开Notebook界面，并进入命令行。

```
http://localhost:7070
```

3. 在工作站命令行注入预装的环境

```
#加载Anaconda3  
module add Anaconda3  
  
#查看所有平台已经安装的环境  
conda env list  
  
#把指定环境注入jupyter  
#python -m ipykernel install --user --name 环境名称 --display-name “在jupyter上显示的环  
境名称”  
  
python -m ipykernel install --user --name pytorch-1.9 --display-name demo
```

注入完，即可在Jupyter Notebook 主界面刷新网页,看到对应注入的环境。

计费问题

1. 平台是如何收费的？

答：节点从启动到释放，按核时收费，精确到分钟，即：每核每小时的价格×核数；如选择单节点4核心4G内存的节点，每核时0.08元，则该节点使用一小时收费 $4 \times 0.08 = 0.32$ 元。其它收费项目请查看[收费标准](#)。

2. 如何充值？

答：登录北鲲云网页控制台，在仪表盘右上角点击充值。

3. 如何查看消费记录？

答：登录北鲲云网页控制台，点击右上角头像，在[费用中心](#)查看账单明细。

4. 工作站如何查看节点配置价格？

答：请点击[如何查看硬件资源价格](#)。

5. 为什么我没有使用，还在一直扣费？

答：打开仪表盘查看各计算区是否还有节点没有释放导致一直扣费；去对应计算区找到对应的节点释放即可。

6. 工作站停机还会收费吗？

答：停机相当于关机，关机后，保留实例的资源等并收取系统盘费用，私网IP将保留，公网IP将会被回收，停机后系统盘收费为1G每小时0.001元。

7. 已经赠送免费核时，但余额显示为零？

答：赠送的免费核时是以代金券的形式发放到账号，提交作业优先扣除代金券余额；登录北鲲云网页控制台，点击右上角头像，选择[代金券](#)查看代金券余额。

8. 平台可以开发票吗？

答：登录北鲲云网页控制台，点击右上角头像，选择[费用中心-充值记录-申请开票](#)。

9. 节点选择经济型和标准型有什么区别？

答： 目前平台部分硬件队列新增经济型选项，经济型与标准型享有同等配置，价格更优惠，但在资源紧张时会被自动回收并释放，从而导致计算中的作业中断；您可以根据作业的计算特点自行选择，如果计算作业支持续跑，可选择经济型节点。

其他问题

1. 我测试为什么工作站与本地笔记本同等CPU配置没有本地笔记本算的快？

答：首先查看软件设置是否跟本地一样，其次需要把计算文件拷贝到系统盘使用，另外工作站是虚拟核，可以尝试关闭超线程(图形界面-工作站下方设置按钮)使用。

2. 提交作业需要排队吗？

答：北鲲云一站式云超算平台拥有海量的云资源，正常使用无需排队。

3. 节点启动需要多久？

答：除了网络增强计算区的机器（裸金属服务器），其它计算区节点启动时间大约十几秒；如果是多节点并行计算，根据计算规模的大小需要若干分钟的等待时间。

4. 超算资源有时候跑着跑着就被强制回收了，你们也会有这种情况吗？

答：我们提供的是独占资源，在余额充足的情况下不会释放或被他人使用。

5. 为什么我的 CPU 使用率最高显示为 50%？

答：CPU使用率是根据逻辑核总数进行计算的，如果软件运行仅使用物理核，则只显示50%的利用率。某些软件能够有效的利用逻辑核，提升两倍的运行速度，某些软件使用逻辑核可能会减慢计算速度。

6. 为什么我连接登录到Windows工作站没有看到H或者S盘，请问如何找回呢？

答：H盘或者S盘找回步骤：登录北鲲云控制台 > 点击左侧图形界面菜单栏 > 找到对应无法看到H盘或者S盘的Windows工作站 > 点击连接 > 登录到Windows工作站 > 点击我的电脑 > 点击查看 > 勾选隐藏的项目 > 进入对应目录 > 找到 C:\ProgramData\windowsWorkstationStartup20220212T104005Z.ps1 脚本 > 右键使用 PowerShell 运行

7. 没有我想要的数据集怎么办？

答：登录北鲲云控制台，进入左侧数据集菜单栏，点击右上角申请新数据集，并请提供数据集的相关下载链接等信息并留下您的联系方式，我们将在3个工作日内对您的申请进行审核。

镜像中心使用问题

1. 镜像中心有什么作用？

答：镜像中心方便您自行安装软件并制作自定义镜像，以在计算时调用。

2. 在哪里设置为默认镜像，如何启动默认镜像？

答：只有集群镜像才支持默认，自定义的 **集群镜像** 可以设置为默认的 **集群管理/计算节点** 镜像，之后您提交的集群作业都将使用该镜像创建对应节点。自定义的 **工作站镜像** 将展示在图形应用的启动选项中，您可以在启动的桌面上直接编辑和提交作业。

3. 制作镜像需要多久，我已经制作了半个小时了还没结束？

答：镜像制作耗时从几分钟到数十分钟不等，节点磁盘越大，制作过程越长。制作过程中无法进行其他操作，请耐心等待。如果成功，镜像将变为可用状态，安装节点自动释放。如果失败，镜像将变为不可用状态，鼠标悬浮在状态列可以看到失败原因。制作失败的安装节点将保留，您可以重新连接、安装和制作镜像。

4. 我之前制作的镜像怎么不见了？

答：不同计算区的镜像不能互通，请安装前确认所属计算区。

5. 什么是容器镜像？

答：在容器镜像中您可以新建镜像仓库、推送容器镜像，以在作业中运行容器化应用

6. 镜像中心磁盘大小设置方法

Step 1. 选择计算区-点击镜像中心-集群计算节点GPU(默认)-点击安装按钮

Step 2. 启动安装节点-点击下一步-选择磁盘大小-启动安装镜像-需要耐心等待磁盘安装完成

Step 3. 状态变成可安装-点击安装按钮-耐心等待制作完成

Step 4. 等制作完成-状态变成可用，点击设置为默认，这样就配置好啦

Slurm作业管理系统

Slurm (Simple Linux Utility for Resource Management , <http://slurm.schedmd.com/>) 是开源的、具有容错性和高度可扩展大型和小型 Linux集群资源管理和作业调度系统。超级计算系统可利用 Slurm 进行资源和作业管理, 以避免相互干扰, 提高运行效率。所有需运行的作业无论是用于程序调试还是业务计算均必须通过交互式并行 `srun`、批处理式 `sbatch` 或分配式 `salloc` 等命令提交, 提交后可以利用相关命令查询作业状态等。

一. 常用命令

<code>sinfo</code>	#查看分区状态
<code>squeue</code>	#查看队列中的作业
<code>scontrol</code>	#查看作业详细信息
<code>scancel</code>	#取消已经提交的作业
<code>sbatch</code>	#批处理式提交作业
<code>salloc</code>	#分配式运行作业

1. 查看分区状态

```
sinfo
```

- CPU分区命名规则为 `c-核心数-每核心内存大小`, 如 `c-8-4`: 表示单节点规格为8核, 每核心有4G内存, 即节点规格为8核32G。
- GPU分区命名规则为 `g-卡号-每节点卡数`, 如 `g-v100-2`: 表示有两张显卡型号为tesla v100的gpu节点。

```
[cloudam@master jobs]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
c-4-1*      up    infinite     1  alloc c-4-1-worker0001
c-4-2       up    infinite     0    n/a
c-4-4       up    infinite     0    n/a
c-4-8       up    infinite     0    n/a
c-8-1       up    infinite     0    n/a
c-8-2       up    infinite     0    n/a
c-8-2-h     up    infinite     0    n/a
c-8-4       up    infinite     0    n/a
c-8-8       up    infinite     0    n/a
c-16-1      up    infinite     0    n/a
c-16-2      up    infinite     0    n/a
c-16-2-h    up    infinite     0    n/a
c-16-4      up    infinite     0    n/a
c-16-8      up    infinite     0    n/a
c-24-1      up    infinite     0    n/a
c-24-2      up    infinite     0    n/a
c-24-2-h    up    infinite     0    n/a
c-24-4      up    infinite     0    n/a
c-24-8      up    infinite     0    n/a
c-32-1      up    infinite     0    n/a
c-32-2      up    infinite     0    n/a
c-32-2-h    up    infinite     0    n/a
c-32-4      up    infinite     0    n/a
```

2. 查看作业队列

```
squeue
```

- **JOBID**：作业号。
- **ST**：状态（**R**：运行中；**CF**：配置中；**PD**：排队中）。

3. 查看所有作业详细信息

```
scontrol show jobs
```

4. 取消作业号为20的作业

```
scancel 20
```

二. 提交作业的方式

1. 使用 sbatch 批处理模式提交作业

| sbatch命令可以提交任务至一个或多个计算节点，实现并行计算。

sbatch命令的一些常用选项：

参数	功能
-N	申请的节点数量
-p	指定计算节点规格，使用sinfo查看所支持的规格
-n	指定任务数，即并行程序运行多少个进程
-c	每进程使用的cpu核心数

参考运行程序：demo.sh

```
#!/bin/bash
sleep 6000
```

提交示例：

- 使用2个4核心节点启动8个并行任务。

```
sbatch -N 2 -p c-4-1 -n 8 -c 1 demo.sh
```

- 1个4核心节点启动4个并行任务。

```
sbatch -N 1 -p c-4-1 -n 4 -c 1 demo.sh
```

- 1个4核心节点启动4个并行任务。

```
sbatch -p c-4-1 -n 4 demo.sh
```

- 1个4核心节点启动1个并行任务, 该任务使用4个cpu核心。

```
sbatch -p c-4-1 -n 1 -c 4 dome.sh
```

- 2个4核心节点启动2个并行任务, 每个任务使用4个cpu核心。

```
sbatch -p c-4-1 -n 2 -c 4 dome.sh
```

2. 使用 `salloc` 分配模式提交作业

`salloc`命令可以用来分配节点, 用户可以在获取分配的计算节点后, `ssh`进入直接运行相关计算程序, 主要用来调式程序执行。

使用步骤 (案例) :

Step1. `salloc`申请计算节点;

```
salloc -N 1 -p c-8-2 &
```

Step2. `ssh`登录到分配的计算节点;

```
ssh c-8-2-worker0001
```

Step3. 调试或运行程序;

```
./demo.sh
```

Step4. 结束程序运行后释放分配的节点;

```
scancel 17
```


Module的使用

Module是一款环境变量管理工具，北鲲云超算平台安装了许多公共软件，用户只需加载模块即可使用平台的软件或依赖库，如果没有找到所需的软件可以联系客服安装。

一. 常用命令

<code>module avail</code> 或 <code>module av</code>	#查看系统中可用的软件
<code>module spider</code> 或 <code>module sp</code>	#查询所有可能的模块
<code>module add</code> 或 <code>module load</code>	#加载模块
<code>module rm</code> 或 <code>unload</code>	#卸载模块
<code>module list</code> 或 <code>module li</code>	#显示已加载模块
<code>module purge</code>	#卸载所有模块
<code>module show</code>	#显示模块配置文件
<code>module swap</code> 或 <code>module switch</code>	#将模块1替换为模块2
<code>module help</code>	#显示帮助信息

注:建议不要同时 `module add` 多个软件，因为不同软件间可能是有冲突的。比较好的方式是 `module add` 一个或一组相互依赖的软件，软件运行完后运行 `module purge` 清除导入的环境，然后再导入另外一个或一组相互依赖的软件。

二. 使用例子

查看集群现有软件环境

```
module avail
```

查看gromacs软件环境

```
module avail gromacs
```

加载GROMACS/2021-gromacs软件环境

```
module add GROMACS/2021-gromacs
```

显示所有已加载的环境

```
module list
```

清除已加载的环境

```
module purge
```

Conda的使用

Conda 是一个开源的软件包管理系统和环境管理系统，用于安装多个版本的软件包及其依赖关系，并在它们之间轻松切换，Conda支持Python、R、Ruby、Lua、Scala、Java、JavaScript、C/C++、FORTRAN等多种语言。

一. 使用北鲲云的Conda环境

```
#加载Anaconda3
module add Anaconda3

#查看Conda环境列表
conda env list

#加载指定虚拟环境
source activate xxxx

#退出当前环境：
conda deactivate
```

二. Conda管理环境

```
#创建环境：
conda create -n xxxx

#示例：创建一个名为demo的虚拟环境，环境默认保存在/home/cloudam/.conda/envs
conda create -n demo python=3.7

#删除环境：
conda env remove -n xxxx
```

三. Conda管理包

```
#查看一个包是否可用conda安装
conda search numpy
```

#安装包

```
conda install numpy
```

#安装指定版本包

```
conda install numpy=1.14
```

#查看当前环境已安装的包

```
conda list
```

#包更新

```
conda update numpy
```

#删除包

```
conda remove -n demo numpy
```

四. Conda/Pip软件安装进阶操作

#列出保存目标软件的所有镜像

```
anaconda search <software>
```

#指定anaconda的镜像安装cudatoolkit10.0的版本

```
conda install -c anaconda cudatoolkit=10.0
```

#pip安装指定版本的包

```
pip install some-package==1.0.4
```

#pip安装最新版本的包

```
pip install some-package
```

#临时性修改下载源为清华源（只对本次下载有效）

```
pip install -i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple some-package
```

#pip升级包

```
pip install --upgrade some-package
```

#pip卸载包

```
pip uninstall some-package
```

Linux的常用命令

linux快捷键以及帮助手册

在我们正式学习linux命令之前，我们应该了解一些基本的快捷键，以及查看帮助手册。

快捷键

按键	功能
Tab	命令补全，当你忘记某个命令的全称时可以只输入它的开头的一部分，然后按下Tab 键就可以得到提示或者帮助完成。
Ctrl + c	强行终止当前程序。
Ctrl + d	键盘输入结束或退出终端。
Ctrl + s	暂停当前程序，暂停后按下任意键恢复运行。
Ctrl + z	将当前程序放到后台运行，恢复到前台为命令fg。
Ctrl + a	将光标移至输入行头，相当于Home键。
Ctrl + e	将光标移至输入行末，相当于End键。
Ctrl + k	删除从光标所在位置到行末。
Alt + Backspace	向前删除一个单词。
Shift + PgUp	将终端显示向上滚动。
Shift + PgDn	将终端显示向下滚动。

帮助手册

在 Linux 环境中，如果你对某个命令感到疑惑，可以使用 `man` 命令来获取帮助，它是 Manual pages 的缩写。用户可以通过执行 `man` 命令调用手册页。

你可以使用如下方式来获得某个命令的说明和使用方式的详细介绍：

```
man <command_name>
```

软件安装

相比Windows，方便的在线安装是linux的优势之一。以往在windows，我们安装软件一般需要在网上下载对应的安装包到本地，然后再设置运行才能完成安装，而在linux下，这只需要一个命令即可。不同的linux版本会有不同的安装命令，由于我们的开发环境是基于CentOS的，所以我们以此为例学习相关的软件安装。

yum

yum（Yellow dog Updater, Modified）是一个在CentOS 和 RedHat 以及 SUSE 中的 Shell 前端软件包管理器。它可以自动下载，配置，安装软件包，因此简化了管理软件的过程。

基于 RPM 包管理，能够从指定的服务器自动下载 RPM 包并且安装，可以自动处理依赖性关系，并且一次安装所有依赖的软件包，无须繁琐地一次次下载、安装。

yum 提供了查找、安装、删除某一个、一组甚至全部软件包的命令，而且命令简洁而又好记。

1) 搜索：

如果想在安装前确认是否软件库有这个软件：

```
sudo yum search <keyword>
```

结果就会显示软件的相关信息。

2) 安装：

安装只需要执行这样的命令即可：

```
sudo yum install <package_name>
```

当然它还有许多参数，例如在软件被破坏时重新安装：

```
sudo yum reinstall <package_name>
```

3) 更新：

软件版本也会不断的更迭，我们在安装前往往需要进行更新，例如：

更新所有软件：

```
sudo yum update
```

更新指定的软件：

```
sudo yum update <package_name>
```

需要注意的是依赖关系。

4) 卸载：

卸载一个软件也很简单：

```
sudo yum remove <package_name>
```

用户和文件权限管理

Linux 是一个多用户的操作系统，所有用户共享一些主机的资源，但他们也分别有自己的用户空间，用于存放各自的文件。由于Linux的用户管理和权限机制，不同用户不可以轻易地查看、修改彼此的文件。

查看用户

输出当前伪终端的用户名：

```
whoami
```

使用root

无需密码即可切换到root用户：

```
sudo -i
```

无需密码以root权限运行 cmd 命令：

```
sudo <cmd>
```

查看文件权限

ls 命令不仅可以列出并显示当前目录的文件，还可以用来查看文件的权限。

```
ls -l
```

输出： 文件类型和权限 链接数 所有者 所属用户组 文件大小 最后修改时间 文件名

这里特别解释一下文件类型和权限： 第一位是指文件类型，例如 ‘d’ 表示目录， ‘-’ 表示普通文件，等等。 后面的九位可以分成三组，每组三位分别表示读权限/写权限/执行权限，三组分别对应的是拥有者权限/所属用户组权限/其他用户权限。

我们可以用 touch 命令创建一个新的文件，然后再进行以下测试。

变更文件所有者

```
sudo chown <new_owner> <file>
```

sudo命令在之前提到过，是权限命令。

修改文件权限

有两种方式对文件权限进行修改：

第一种方式：二进制数字表示。每个文件的三组权限对应一个“rwx”，每一位可以用 0 或 1 表示是否有权限，例如只有读和写权限的话就是“rw-” - “110”，所以“rwx”对应的二进制“111”就是十进制的7。

所以将 file 文件权限改为“rwx-----”的命令是：

```
chmod 700 <file>
```

第二种方式：加减赋值表示。假设一开始 file 文件的权限是“rwxr-r--”完成上述同样的效果，还可以：

```
chmod go-r file
```

g、o 还有 u 分别表示 group、others 和 user，+ 和 - 分别表示增加和去掉相应的权限。

目录及文件操作

在linux系统中最常见的行为就是切换目录以及对文件进行操作。

基本目录操作

在linux中，我们使用 cd 命令来切换目录，使用 `.` 表示当前目录，`...` 表示上一级目录，`-` 表示上一次所在目录，`~` 通常表示当前用户的 home 目录。使用 `pwd` 命令可以获取当前所在路径（绝对路径）。

例如，进入上一级目录：

```
cd ..
```

搭配之前提及的快捷键 Tab 可以大大提高效率。

基本文件操作

创建

文件：在这里，我们可以先简单地使用 touch 命令来创建一个新的空白文件。

例如：

```
touch myfile
```

目录：使用 mkdir 命令可以创建一个新的目录。

创建名为“ mydir ”的空目录：

```
mkdir mydir
```

复制

文件：使用 cp（copy）命令复制一个文件到指定目录。

例如：

```
cp myfile ../../mydir
```

目录：在复制文件的基础上加上 -r 参数即可。

例如：

```
cp -r dir mydir
```

删除

文件：使用 rm（remove files or directories）命令删除一个文件：

```
rm myfile
```

目录：同样，删除目录也是需要加上 -r 参数。

移动及重命名

移动文件和对文件重命名都使用 mv 命令。

mv 源目录文件 目的目录：

```
mv myfile mydir
```

注意，这里mv命令是剪切文件。

mv 旧的文件名 新的文件名：

```
mv myfile myfile1
```

编辑文件

Linux系统存在许多编辑器，例如vim，emacs，nano等等，在这里我们使用vim编辑器来打开文件：

```
vim myfile
```

vim编辑器功能非常强大，但随之而来的是它的学习难度并不简单，然而编辑器的使用又是必不可少的一部分，所以在这里建议您先去学习一门编辑器的基本使用方法。

搜索文件

相信每个用户在使用操作系统时都会用到搜索这个功能，linux提供了许多与搜索相关的命令给用户使用。

which

which只从环境变量指定的路径中去搜索文件，所以我们常常使用which来判断是否安装了某个软件。

例如：

```
which vim
```

whereis

一个比较简单的搜索命令，它直接从数据库而不是硬盘查询，而且只能搜索特定的文件。所以，它的搜索很快。

```
whereis vim
```

locate

在这里要先介绍 "/var/lib/mlocate/mlocate.db" 数据库，因为 locate 命令就是通过这个数据库查找的。这个数据库由系统每天定时维护更新，所以有时候需要手动执行 updatedb 命令来更新数据库。

例如，查找 /usr 及其子目录下所有以 a 开头的文件：

```
locate /usr/a
```

find

find命令是一个功能非常强大的命令，它可以根据文件的各个属性来搜索，在此只介绍其简单的搜索。其基本命令格式为：`find [path] [option] [action]`

例如，在 /usr/ 目录下搜索名字为 myfile 的文件或目录：

```
sudo find /usr/ -name myfile
```

文件解压缩

本节介绍linux上常用的解压缩工具，包括zip、rar以及tar。

rar

rar是一种在windows常见的文件压缩格式，但是在linux下必须先安装才能使用。由于在linux中rar命令参数非常多，在此只介绍一些基本操作。

1) 创建压缩文件：

```
rar a cloudam.rar ./Desktop/
```

这是将Desktop目录打包成cloudam.rar

2) 使用 a 参数添加文件进压缩包:

```
rar a cloudam.rar a.o
```

3) 使用 d 参数删除文件:

```
rar d cloudam.rar a.o
```

4) 使用 l 参数查看文件:

```
rar l cloudam.rar
```

5) 解压分为两种, 一种是 x 参数解压, 这样会保持压缩文件的目录结构; 另一种是 e 参数解压, 将所有文件解压到当前目录:

```
unrar x cloudam.rar  
unrar e cloudam.rar
```

zip

zip也是在windows和linux使用率比较高的文件压缩格式。

1) 创建压缩包:

```
zip -r -o cloudam.zip ./Desktop
```

其中, `-r` 参数表示递归, 所以上面命令是打包Desktop目录进压缩包; `-o` 参数表示输出到cloudam.zip压缩文件。

2) 使用 -e 参数进行加密:

```
zip -r -e -o cloudam.zip ./Desktop
```

需要注意的是，由于编码问题linux下和windows下的文本文件可能会不同，如果希望在linux压缩的文件在windows下正常解压，可以加上`-l`参数。

3) 查看与解压 解压很简单：

```
unzip cloudam.zip
```

查看只需加上`-l`参数：

```
unzip -l cloudam.zip
```

tar

实际上，在linux中用得更多的是tar工具。tar 原本只是一个打包工具，没有压缩功能，需要配合其他具有压缩功能而没有打包功能的工具进行打包压缩。

1) 创建一个 tar 包：

```
tar -cf cloudam.tar ./Desktop
```

其中，`-c` 参数表示创建，`-f` 参数表示指定文件名，必须跟在文件名之前。

可以发现这个tar包和原大小相同。

2) 查看一个 tar 包：

```
tar -tf cloudam.tar
```

3) 解包一个 tar 包到指定目录：

```
tar -xf cloudam.tar -C cloudamdir
```

上面我们说了tar需要配合其他工具进行压缩，其实一般只需要加一个参数就可以了。这里以gzip为例：

```
tar -czf cloudam.tar.gz ./
```

解压缩：

```
tar -xzf cloudam.tar.gz
```

tar 命令参数还有很多，在此仅作简单介绍。可以通过man手册查看更多帮助。

管道与一些文本命令

管道是一种通信机制，它可以将前一个进程的输出作为下一个进程的输入。所以它常常用来进行进程间（也包括socket进行网络通信）的通信。不过，在这里我们首先介绍一些linux终端执行命令的知识。

&& 和 ||

当我们希望同时输入多条命令时，可能还希望对某几个命令的结果进行判断。例如，如果存在某个文件，就把它删除，如果不存在则什么也不做。而 && 和 || 就提供了这种判断的功能。

&& 表示如果前一个命令返回的状态为0（这些状态码有一套默认的规定），则执行后一个命令，否则不执行。而 || 则与之相反。

例如我们常常使用 which 命令来判断是否安装了某个命令：

```
which rar>/dev/null && echo "Installed."
```

当然也可以结合使用：

```
which rar>/dev/null && echo "Installed." || echo "Not installed"
```

管道

通常我们在命令行中使用匿名管道，由分隔符 | 表示，而命名管道更常出现在源代码中。

例如：

```
ls -a | grep mysql
```

这个命令就是先执行 `ls -a` 命令，然后将输出结果作为输入执行 `grep mysql` 命令在其中查找包含 `mysql` 的文件。

下面介绍几个常用的命令，配合管道使用可以提高效率。

1) `grep`：一个很常用的命令。使用者可以通过其与正则表达式配合实现很高效的查找，不过在这里先简单介绍一下。

在上面我们已经有一个使用 `grep` 命令的例子了，实际上我们还可以直接使用：

```
grep -r "cloudam" ~
```

搜索 ~ 目录下所有包含 "cloudam" 的文件。

2) `wc`：统计并输出一个文件中行、字节等数据的数目。其中，`-l` 参数表示行数，`-c` 参数表示字节数。

结合管道使用，统计文件的个数：

```
ls -a | wc -l
```

3) `uniq`：在上面的统计中，我们可能会想要除去一些重复行以免影响结果，这时候我们可以使用 `uniq` 命令：

```
cat words | uniq
```

值得注意的是，`uniq` 只除去连续重复的行，如果希望全文达到同样的效果我们往往会先使用 `sort` 命令进行排序，即：

```
cat words | sort | uniq
```

当然，这些命令实际上是很复杂的，我们可以通过这些命令完成很多复杂但是有用的功能，这也是其魅力所在。在此仅作简单的介绍。

文本处理

在上一节中我们学习了一些管道相关的命令，现在我们继续学习一些简单的文本处理命令。

sort

在之前出现过很多次的命令，顾名思义它的功能是排序。当然，它可以根据不同的标准来排序，例如：

默认为字典排序：

```
ls -a | sort
```

反转排序：

```
ls -a | sort -r
```

col

相信许多程序员在实际中都会遇到类似于将程序代码中的tab转空格的需要，而linux提供了tab和空格相互转换的命令 col。

在这里，`-x` 参数表示将 tab 转换成空格，而 `-h` 参数则相反。

例如：

```
cat myFile | col -x | cat -A
```

tr

替换操作（删除操作也可以视为一种替换操作）也是文本处理常用的操作之一。

如果是要删除，可以使用 `-d` 参数：

```
echo "Hello world!" | tr -d "el"
```

这样会删除"Hello world!"中所有的“e”和“l”。

再例如将小写转换成大写：

```
echo "Hello world!" | tr 'a-z' '[A-Z]'
```

paste

这个命令可以简单地合并文件。

例如将数据以 ‘;’ 为分隔符合并（默认的分隔符为Tab）：

```
paste -d ';' data1 data2 data3
```

也可以这么做：

```
cat words | sort | uniq &> output
```

重定向

在之前管道的知识点中，学习者很容易有这种想法：命令的输出太复杂或者太多了，希望可以将其保存到文件中查看或者长久保存。而将标准输出、标准错误等信息输出到指定文件中，就是重定向。

重定向

重定向是通过 ‘>’ 和 ‘>>’ 等操作符完成的，（当然也有 ‘<’ 和 ‘<<’，前者是导向，后者是追加），其实将标准输出看作一个文件的话，将命令输出导向到另一个文件自然也是没问题的。

例如：

```
echo "Hello world!" > output
```

结合管道：

```
cat words | sort | uniq >> output
```

文件描述符

除了标准输出，我们还经常需要重定向标准错误，在此就必须提到标准输入、标准输出和标准错误的文件描述符。在linux中，它们的文件描述符分别是0、1、2，我们可以通过这几个描述符来完成我们想要的操作。

我们可以这样来将标准输出和标准错误重定向到同一个文件：

```
cat words | sort | uniq > output 2>&1
```

其中，&表示后面的是标准输出而不是一个文件名为1的文件，而这里的重定向顺序也是不能改变的。

也可以这么做：

```
cat words | sort | uniq &> output
```

永久重定向以及“丢弃”输出

我们很容易想到如果我们想不断将标准输出重定向到某个文件，难道需要在每一个命令后面加上重定向命令？当然是不需要的，linux提供了永久重定向的方法。当然，这里的永久也并不是那么永久。

我们可以这样做：

```
exec 1> output
```

其中 exec 命令的作用是用新的进程去替换旧的进程，或者指定重定向。

有时候我们仅仅希望执行命令而不想要其输出，这时候我们可以将输出重定向到空设备 /dev/null：

```
cat words | sort | uniq 1>/dev/null 2>&1
```

这样输出结果就没有啦。

进程的基本操作

在日常工作中我们常常需要对进程进行操作，这就要求我们掌握一些基本的进程操作指令。

前台/后台切换

我们在之前的学习中已经知道终止一个在前台运行的进程的快捷键是 `ctrl + c`。同样，我们在之前也已经知道将我们当前进程停止并转到后台的快捷键是 `ctrl + z`。那么，如何让我们的进程在前台与后台之间切换呢？

我们可以通过 `&` 这个符号，让我们的命令在后台中运行。

例如：

```
ls &
```

这样命令就会在后台自己运行了。

那么当我们如何查看在后台的工作呢？

可以使用：

```
jobs
```

这时我们可以看到每行是这样的格式： `[1] + suspended ... (command)`

其中，第一列的数字表示job编号，也就是转到后台的工作的编号，第二列如果是 `‘+’` 表示的是这是最后一个被转入后台的工作，`‘-’` 的话则是倒数第二个，其他的话在这列没有符号。第三列表示状态，而后面则是命令本身。

那么我们突然想要把工作从后台拿回前台怎么办呢？

可以使用：

```
fg %jobid
```

例如，

```
fg %1
```

如果只是希望其在后台运行的话，可以：

```
bg %jobid
```

终止

终止命令比较简单，但是在参数上我们可以通过选择信号值来决定以何种方式终止程序，信号值可以这样查看：

```
kill -l
```

所以可以这样终止程序：

```
kill -signal pid
```

或者

```
kill -signal %jobid
```

进程管理

在这节我们进一步学习对进程的查看与控制。

top

top 命令是我们常常使用查看工具，它可以实时查看系统的一些关键信息的变化。

top 命令的输出比较多，下面逐一介绍：

第一行： 当前程序名称 当前系统时间 机器启动时间 系统用户数量 1分钟内、5分钟内和15分钟内cpu平均负载

第二行： 进程总数 正在运行的进程数 休眠的进程数 停止的进程数 僵尸进程数

第三行：

- 用户空间占用CPU百分比

- 内核空间占用CPU百分比
- 用户空间优先级变化的进程占用CPU百分比
- 空闲CPU百分比
- 等待IO的CPU时间百分比
- 硬中断占用CPU的百分比
- 软中断占用CPU的百分比
- 虚拟 CPU 等待物理 CPU 的时间的百分比

第四行：

- 物理内存总量
- 使用物理内存总量
- 空闲内存总量
- 缓存内存总量

第五行：

- 交换区总量
- 使用交换区总量
- 空闲交换区总量
- 缓冲交换区总量

然后就是许多行进程的信息了，以下按顺序分别对应：

- PID：进程id
- USER：进程所属用户
- PR：进程动态优先级值
- NI：进程静态优先级值
- VIRT：进程使用虚拟内存总数
- RES：进程使用物理内存数
- SHR：进程共享内存大小
- S：进程状态
- %CPU：CPU利用率
- %MEM：内存利用率
- TIME+：进程活跃总时间

- COMMAND: 进程运行名

我们甚至可以与这个程序交互，例如输入k的话系统会提示进一步输入信号值以及pid号以杀死一个进程，更多的信息可以查看帮助手册。

ps

你一定经常看见 `ps aux` 这个命令将会列出所有的进程信息。

我们还往往配合 `grep` 和正则表达式使用。

例如：

```
ps aux | grep slurm
```

那么，打印出来的都是什么信息呢？

- F: 进程的标志 (process flags) , 当 flags 值为 1 则表示此子程序只是 fork 但没有执行 exec, 为 4 表示此程序使用 root 权限
- USER: 进程拥有者
- PID: 进程ID
- PPID: 父进程的PID
- SID: session 的ID
- TPGID: 前台进程组的ID
- %CPU: 进程占用的CPU百分比
- %MEM: 占用内存的百分比
- NI: 进程的 NICE 值
- VSZ: 进程使用虚拟内存大小
- RSS: 驻留内存中页的大小
- TTY: 终端ID
- S or STAT: 进程状态
- WCHAN: 正在等待的进程资源
- START: 启动进程的时间
- TIME: 进程消耗CPU的时间
- COMMAND: 命令的名称和参数

我们还可以用这样的命令去查看进程树：

```
pstree
```


提交作业

请求方式：POST

<https://www.bkunyun.com/c3ce/cloud-bursting/job>

Body Attributes(Body属性)

Parameter	Required	Type	Description
envs	否	object	自定义环境变量
jobName	否	String	作业名称
masterId	是	String	主节点id
requestId	否	String	请求Id可以被用来查询提交作业结果。若请求Id为空,则本次请求会提交新的作业。
slurmCommand	是	String	经过Base64编码后的提交作业命令
pre-hook.script	否	String	预处理脚本路径
pre-hook.args	否	array	预处理脚本参数
lifecycle-hook.script	否	String	作业lifecycle脚本路径
lifecycle-hook.args	否	String	作业lifecycle脚本参数

Parameter	Required	Type	Description
lifecycle-hook.condition	否	array	作业lifecycle脚本执行条件,默认为ONCOMPLETE。可选值: ALWAYS-总是执行 ONRUNNING-作业开始执行 ONCANCELLED-作业取消 ONCOMPLETED-作业完成 ONFAILED-作业执行失败
post-hook.script	否	String	后置处理脚本脚本路径
post-hook.args	否	String	后置处理脚本参数
post-hook.condition	否	array	后置处理脚本执行条件,默认为ONCOMPLETE。可选值: ALWAYS-总是执行 ONCANCELLED-作业取消 ONCOMPLETED-作业完成 ONFAILED-作业执行失败

Request(请求)

Headers(HTTP头) 注：请首先联系Cloudam获取API Token， token相当于密码，请妥善保管。

```
{
  "Authorization": "Bearer ${token}",
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Body(请求体JSON)

```
{
  "envs": {
    "workDir": "/home/cloudam/yinfo/jobs/123",
    "inputDir": "oss://path/to/input",
    "outputDir": "oss://path/to/output"
  },
  "jobName": "myJob",
  "masterId": "123",
  "requestId": "1234abc",
  "slurmCommand": "g09 input.com",
}
```

```
"pre-hook": {
  "script": "/home/cloudam/yinfo/download-input-files.sh",
  "args": ["arg1", "arg2"]
},
"lifecycle-hook": {
  "script": "/home/cloudam/job-status-change.sh",
  "args": ["arg1", "arg2"],
  "condition": ["ONRUNNING"]
},
"post-hook": {
  "script": "/home/cloudam/post-execution.sh",
  "args": ["arg1", "arg2"],
  "condition": ["ALWAYS"]
}
}
```

Response(响应) - 200

Headers(响应头)

```
{
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Body(响应体JSON) -- 正确响应

```
{
  "errorCode": "0",
  "status": "DONE",
  "message": "Success",
  "jobId": "22",
  "requestId": "123"
}
```

Response Body Attributes(响应Body属性)

Attribute	Type	Description
-----------	------	-------------

Attribute	Type	Description
status	String	作业提交请求状态, DONE 已完成;RUNNING 执行中
errorCode	String	错误代码, 0表示成功
jobId	String	当status的值为DONE且成功提交作业时返回作业id,否则返回空字符串
requestId	String	本次请求id
message	String	错误信息描述

取消作业

请求方式：DELETE

https://www.bkunyun.com/c3ce/cloud-bursting/job

Body Attributes(Body属性)

Parameter	Type	Description
requestId	String	请求Id可以被用来查询取消作业请求的结果。若请求Id为空,则本次请求会再次取消作业。
masterId	String	Slurm集群管理节点Id
jobId	String	作业id

Request(请求)

Headers(HTTP头) 注：请首先联系Cloudam获取API Token， token相当于密码，请妥善保管。

```
{
  "Authorization": "Bearer ${token}",
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Response(响应) - 200

Headers(响应头)

```
{
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Body(响应体JSON) -- 正确响应

```
{
  "errorCode": "0",
  "status": "DONE",
  "message": "Success",
  "jobId": "22"
}
```

Response Body Attributes(响应Body属性)

Attribute	Type	Description
status	String	作业取消请求状态，DONE 已完成;RUNNING 执行中
errorCode	String	错误代码，0表示成功
jobId	String	被取消作业id
message	String	错误信息描述

查询作业状态

请求方式：GET

https://www.bkunyun.com/c3ce/cloud-bursting/job

URL Parameters

Parameter	Type	Description
masterId	String	Slurm集群管理节点Id
jobId	String	作业id

Request(请求)

Headers(HTTP头) 注：请首先联系Cloudam获取API Token，token相当于密码，请妥善保管。

```
{
  "Authorization": "Bearer ${token}",
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Response(响应) - 200

Headers(响应头)

```
{
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Body(响应体JSON) -- 正确响应

```
{
  "errorCode": "0",
  "status": "DONE",
  "message": "Success",
  "jobStatus": "RUNNING"
}
```

Response Body Attributes(响应Body属性)

Attribute	Type	Description
status	String	作业取消请求状态, DONE 已完成;RUNNING 执行中
errorCode	String	错误代码, 0表示成功
jobStatus	String	Slurm作业状态
message	String	错误信息描述

获取文件服务器Token

请求方式: GET

```
https://www.bkunyun.com/c3ce/cloud-bursting/filetoken
```

Request(请求)

Headers(HTTP头) 注: 请首先联系Cloudam获取API Token, token相当于密码, 请妥善保管。

```
{
  "Authorization": "Bearer ${token}",
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Response(响应) - 200

Headers(响应头)

```
{
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Body(响应体JSON) -- 正确响应

```
{
  "errorCode": "0",
  "message": "",
  "code": "p0D11GaTWk59gF3CUAPWn8pt3131",
  "fileToken": "ii/A0hBYxnNc4kPFPTm0qvVCrAdadaU="
}
```

Response Body Attributes(响应Body属性)

Attribute	Type	Description
code	String	授权码
errorCode	String	错误代码，0表示成功
fileToken	String	文件服务器token
message	String	错误信息描述

查询集群配置

请求方式: GET

https://www.bkunyun.com/c3ce/desktop/preferences

Body Attributes(Body属性)

Parameter	Type	Description
masterId	String	Slurm集群管理节点Id

Request(请求)

Headers(HTTP头) 注: 请首先联系Cloudam获取API Token, token相当于密码, 请妥善保管。

```
{
  "Authorization": "Bearer ${token}",
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Response(响应) - 200

Headers(响应头)

```
{
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Body(响应体JSON) -- 正确响应

```
{
  "masterId": "602ce21cf5c8360001815ac5",
}
```

```

"fileSystem": {
  "enabled": false,
  "fileSystemType": "extreme",
  "capacity": 100,
  "bandwidth": 5,
  "storageType": "standard"
},
"computeNode": {
  "systemDiskSize": 50,
  "systemDiskCategory": "CLOUD_SSD"
}
}

```

Response Body Attributes(响应Body属性)

Attribute	Type	Description
masterId	String	Slurm集群管理节点Id
fileSystem.enabled	boolean	是否启用文件系统
fileSystem.fileSystemType	String	extreme（极速型），cpfs（并行文件系统）
fileSystem.capacity	Long	文件系统容量。单位：GB，当 FileSystemType=extreme或cpfs时必填且有效。
fileSystem.bandwidth	Long	文件系统吞吐上限。单位：MB/s，仅当 FileSystemType=cpfs时必填且有效。
fileSystem.storageType	String	存储类型。极速型：standard（标准型）or advance（高级型），CPFS： advance_100（100 MB/s/TiB基线）or advance_200（200 MB/s/TiB基线）。
computeNode.systemDiskSize	Long	计算节点系统磁盘大小。单位：GB, 默认20GB

Attribute	Type	Description
computeNode.systemDiskCategory	String	计算节点系统磁盘类型。可选值:1.CLOUD_SSD SSD云盘 2.CLOUD_EFFICIENCY 高效云盘 3.CLOUD_ESSD ESSD云盘。默认为 CLOUD_EFFICIENCY

修改集群配置

请求方式：PUT

```
https://www.bkunyun.com/c3ce/desktop/preferences
```

修改集群配置

- 修改计算节点系统盘大小和类型
- 挂载/卸载CPFS(挂载点为/mnt/nas)

Body Attributes(Body属性)

Parameter	Required	Type	Description
masterId	是	String	Slurm集群管理节点Id
fileSystem.enabled	否	boolean	是否启用文件系统(仅通用计算区可以使用)
fileSystem.fileSystemType	否	String	并行文件系统规格:cpfs-g (HDD) , cpfs-e (SSD)
fileSystem.storageType	否	String	存储磁盘大小(以实际为准):c1 c2 c3
computeNode.systemDiskSize	否	Long	计算节点系统磁盘大小。单位：GB, 默认20GB
computeNode.systemDiskCategory	否	String	计算节点系统磁盘类型。可选值:1.CLOUD_SSD SSD云盘 2.CLOUD_EFFICIENCY 高效云盘 3.CLOUD_ESSD ESSD云盘(仅通用计算区可以使用)。默认为CLOUD_EFFICIENCY

Request(请求)

Headers(HTTP头) 注：请首先联系Cloudam获取API Token， token相当于密码，请妥善保管。

```
{
  "Authorization": "Bearer ${token}",
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Body(请求体JSON)

```
{
  "masterId": "602ce21cf5c8360001815ac5",
  "fileSystem": {
    "enabled": false,
    "fileSystemType": "cpfs-g",
    "storageType": "c1"
  },
  "computeNode": {
    "systemDiskSize": 50,
    "systemDiskCategory": "CLOUD_SSD"
  }
}
```

Response(响应) - 200

Headers(响应头)

```
{
  "Content-Type": "application/json"
}
```

Body(响应体JSON) -- 正确响应

```
{
  "errorCode": "0",
  "message": ""
}
```

Response Body Attributes(响应Body属性)

Attribute	Type	Description
errorCode	String	错误代码，0表示成功
message	String	错误信息描述