

超算

1、 基本原理

超算集群是提供高性能计算的计算机平台，安装计算软件后，可在原子分子层面，介观层面和宏观层面进行模拟仿真，集群有一个登陆节点，5个双路节点，2个四路节点。集群系统所有登录节点和计算节点的操作系统，统一部署为 64 位 CentOS6.6，提供标准的 64 位 Linux 操作环境。集群安装了 Gaussian、Gromacs、Lammps、ORCA、COMSOL 等专业计算软件。

二、 操作规程

- 1、接通总电源后，从上到下依次按开关键开启各节点。
- 2、用 `ssh node2` 等命令登录到各计算节点后用命令...挂载。
- 3、用 `pbs` 脚本提交作业。
- 4、集群一般不关机，若遇停电检修需关机，从下到上依次按开关键关闭各节点即可。

三、 注意事项

- 1、提交作业要用 `pbs` 脚本，不可直接在登陆节点提交
- 2、集群房间的空调保持常开
- 3、须确保关机后才可切断总电源

四、 日常维护

- 1、集群房间空调常开，保持温度小于 30 摄氏度
- 2、定时检查任务作业，若明显异常（占用 CPU、内存情况或进度）则应结束任务，查找原因后重新提交。

五、 异常情况应对

- 1、若无法登陆到集群，在登录节点的 `root` 下输入 `service network restart` 重启网络，若还不

行，则检查路由器等硬件连接是否正常。

2、若任务无法正常提交，应先检查计算节点是否正常挂载，再检查 pbs 脚本是否书写正确。

3、若计算遇到报错，应仔细检查报错内容，查阅程序手册或询问管理员。

六、仪器故障实例

暂无

七、维修维护

暂无

八、联系方式

华海明-15751861272

九、附录