

用户手册 v2.1

目录

一、集群环境:	2
二、登录.....	2
三、修改密码.....	3
四、加载软件模块	4
五、LSF 队列常用命令说明	4
六、提交任务到集群.....	5

一、集群环境：

目前集群环境包括以下节点：

管理节点	mn01、mn02
计算节点	c001-c100、c101-c112
胖节点	s001、s002
存储节点	DSS-G100、DSS-G260

注意：禁止在管理节点（mn01,mn02）上运行计算任务。所有计算任务需要提交到 LSF 队列运行。

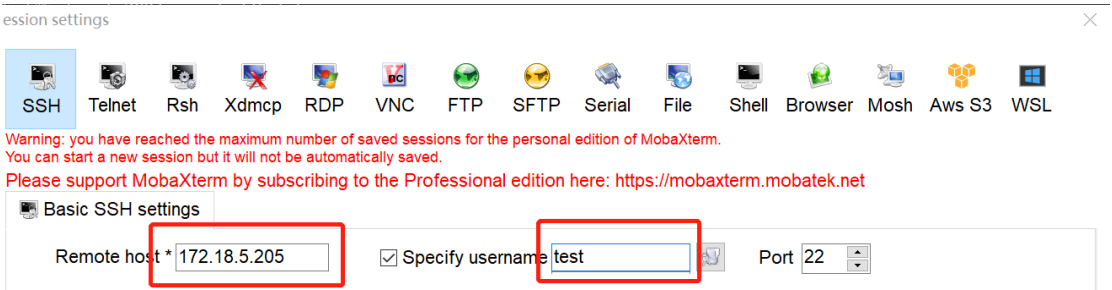
二、登录

集群有两个登录节点，其中管理节点 mn02 为登录节点。其 IP 地址为 172.18.5.205。

Linux 系统可使用如下命令登录：

```
$ ssh -X myname@172.18.5.205
```

Windows 系统可以使用 MobaXterm\Xshell 等工具登录。



MacOS X 用户安装 Xquartz 以启用 X11 转发功能。登录命令如下：

```
$ ssh -Y myname@172.18.5.205
```

命令中的-X 参数是启用 GUI 图形的，如果需要打开 Relion 之类的图形应用，可以加上该参数。

三、修改密码

新用户会被分配一个默认密码，第一次登录后需要修改自己的密码。

命令：passwd

上传/下载文件

注意:以下方法仅适用于少量数据(<1GB)的上传和下载。大量实验数据的下载请自备移动硬盘并联系管理员。

Linux/MacOS 用户：

scp

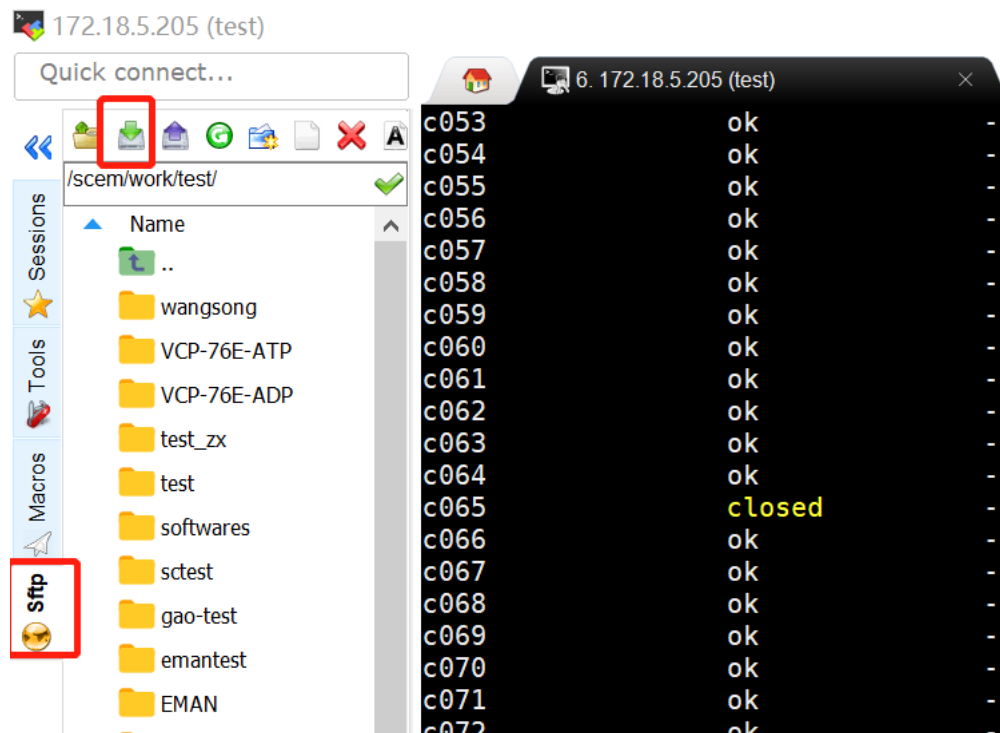
示例 1,将本地的 test.txt 上传到集群 test 账户的 home 目录:

scp test.txt test@172.18.5.205:~

Windows 用户：

sftp。mobaxterm 和 xshell 都自带 sftp 客户端，可以很方便的上传和下载。

Mobaxterm 示例：



四、加载软件模块

集群使用 module 的方式来管理软件及版本，以避免冲突和不必要的问题出现。

以 relion 为例，我们需要使用时，执行以下命令添加 relion 的相关变量：

```
module load relion/3.0.6-gpu-cuda8.0-gcc455-mpi314
```

当我们需要切换到 eman2 时，执行：

```
module purge    #清空加载的模块列表
```

```
module load eman2/2.3
```

常用的 module 命令如下：

卸载软件模块： `module unload MODULE`

查看可用软件模块： `module avail`

查看当前环境已加载的软件模块： `module list`

更多 module 知识及相关命令，请查阅 <https://modules.readthedocs.io/en/latest/>

五、LSF 队列常用命令说明

提交作业后，您可能需要检查其进度或取消它。通过调用 `bjobs -l <jobID>` 可以看到大多数作业的特征。

提交作业后，您可能需要查看作业的屏幕打印输出，通过调用 `bpeek -f <jobID>` 可以看到程序运行过程中的屏幕输出。

LSF 捕获并报告作业脚本的退出代码（bsub 作业）以及在信号导致作业终止时导致作业终止的信号。

完成后，作业记录将保留在 LSF 的内存中 5 分钟。对于完成超过 5 分钟前的作业，`bjobs -l <jobID>` 将返回“找不到作业<jobID>”。此时，必须调用 `bhist` 命令从 LSF 数据库中检索作业的记录。

如果用户的作业处于等待调度的挂起状态，则用户可以通过调用 `bstop <jobID>` 命令将作业置于 PSUSP 状态来阻止调度作业。处于保持状态的作业不会根据队列等待时间累积任何作业优先级。一旦用户准备好让作业再次成为调度的候选者，他们就可以使用 `brresume <jobID>` 命令释放作业。

可以使用 `bkill` 命令（`bkill <jobID>`）取消挂起的作业（从队列中撤消）。

`bkill` 命令也可用于终止正在运行的作业。默认行为是将作业发出 SIGTERM，等待 30 秒，如果作业中的进程继续运行，则发出 SIGKILL 命令。

`bkill` 命令的 `-s` 选项（`bkill -s <signal> <jobID>`）允许用户向正在运行的作业发出任何信号。

LSF 作业的基本工作状态是：

- PEND - 作业在队列中，等待安排

- PSUSP - 作业已提交，但已处于暂停状态（不符合运行条件）
- RUN - 已授予作业分配。如果是批处理作业，则批处理脚本已运行
- DONE - 作业已成功完成

经常用到的 lsf 命令

查看任务：

`bjobs` :查看自己已经提交的任务

`bjobs -l JOBID`：查看任务的详细信息

查看任务输出：

`bpeek JOBID`

查看集群队列状态：

`bqueues`

查看集群节点状态：

`bhosts`

六、提交任务到集群

Relion

提交到 LSF 队列的 relion Running 参数和单机版不同，具体不同点说明如下：

“Number of MPI procs”：将要申请的节点数*36，单个任务限制节点数 ≤ 4

“Submit to queue”： Yes

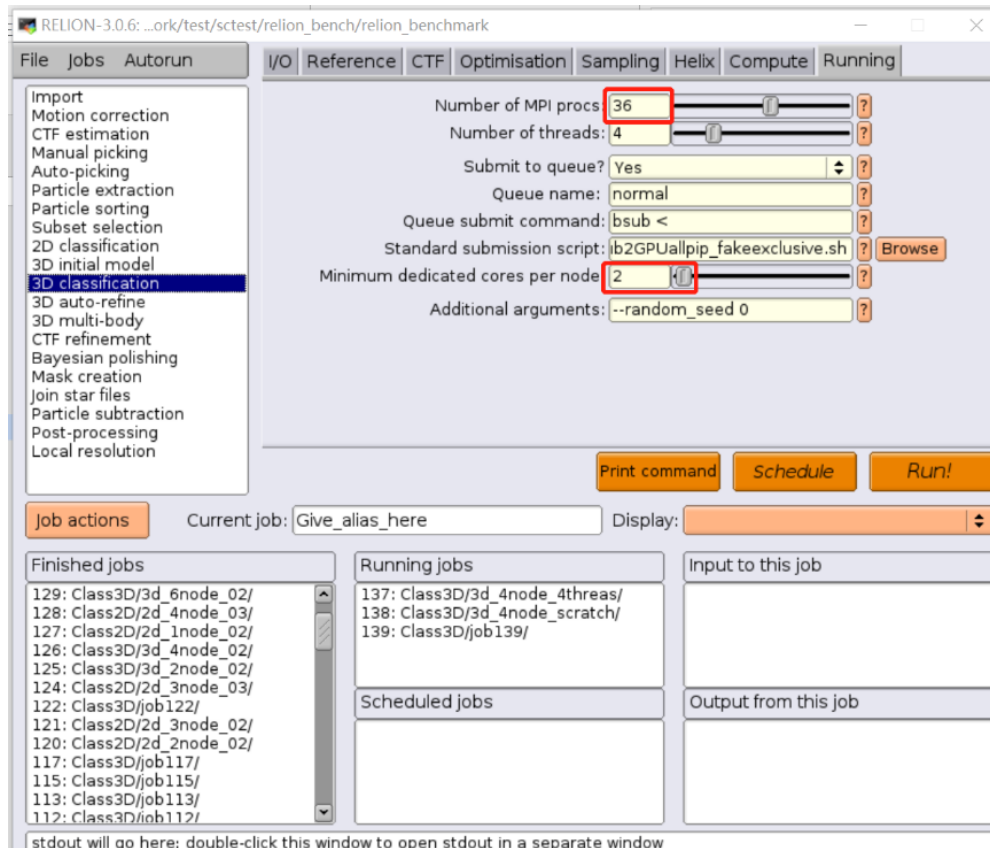
“Queue name”： normal

“Queue submit command”： `bsub <`

“Standard submission script”：

`/share/apps/relion/3.0.6-gpu-cuda8-gcc485-ompi314/bin/bsub2GPU_fakeexclusive.sh`

“Minimum dedicated cores per node”：每个节点分配的 MPI 数量，一般等同于显卡数量



其他程序

其他程序提交到 LSF 队列，有以下两种方法：

- 1、按照下列模板的内容修改后，使用“bsub < daemonlsfscript.sh”提交到队列。模板文件保存在“/share/apps/daemonlsfscript.sh”，用户需自行复制到自己家目录。

```
#!/bin/bash
#BSUB -J MyFirstJob    #任务名称
#BSUB -q normal        #队列名称
#BSUB -o %J.stdout     #输出文件
#BSUB -e %J.err        #错误输出文件
#BSUB -n 36            #申请 36cores，即一个节点
#BSUB -R "span[ptile=36]" #按照每个节点 36 核心来分配

module load cryoemsimpletools/2019    #加载 cryoem 的小工具包，包含 ctffind、
Gautomatch、Gctf、MotionCor2

Gautomatch xxx 参数 xxx                #运行 Gautomatch

mpirun -n 2 Gautomatch xxx 参数 xxx    #并行运行两个 Gautomatch 进程
```

- 2、脚本如果修改的不对或者需要调试程序的运行参数，为了方便，可以按照下列步骤进行测试。

a) 提交下面的脚本，会申请一个节点 24 小时

```
[test@mn02 ~]$ bsub < /share/apps/sleep24hr.sh
Job <4523> is submitted to queue <normal>.
```

b) 使用 bjobs 查看申请的节点名称。如图中红框出，这次申请到的是 c007 节点。

```
[test@mn02 ~]$ bjobs
JOBID  USER  STAT  QUEUE      FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
4522   test   RUN    normal     mn02       36*c086    *D/job144/ Jul 22 12:57
         36*c037
         36*c057
         36*c066
4523   test   RUN    normal     mn02       36*c007    Sleep24hr  Jul 22 13:46
```

c) ssh 登录节点，加载环境变量，即可像单机一样进行测试

```
[test@mn02 ~]$ ssh -X c007
Last login: Mon Jul 22 13:52:32 2019 from mn02
[test@c007 ~]$
[test@c007 ~]$ module purge
[test@c007 ~]$ module load cryoemsimpletools/2019
[test@c007 ~]$ Gautomatch --help
```

d) 测试完成后，退出节点，结束掉这个任务。

```
[test@c007 ~]$ exit
logout
Connection to c007 closed.
[test@mn02 ~]$
[test@mn02 ~]$ bjobs
JOBID  USER  STAT  QUEUE      FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
4522   test   RUN    normal     mn02       36*c086    *D/job144/ Jul 22 12:57
         36*c037
         36*c057
         36*c066
4523   test   RUN    normal     mn02       36*c007    Sleep24hr  Jul 22 13:46
[test@mn02 ~]$ bkill 4523
Job <4523> is being terminated
```

部分软件升级说明:

一、集群 relion/3.0.8-gpu-cuda10.1-gcc485-ompi402 使用说明

`module load relion/3.0.8-gpu-cuda10.1-gcc485-ompi402`

脚本用 `/share/apps/relion/3.0.8-gpu-cuda10.1-gcc485-ompi402/bin/bsub2GPU_200110.sh` 即可,

此脚本仅适用 ompi 4.0.2 编译的 relion 上。如果使用其他版本还是用原脚本文件。