用户手册 v2.1

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,其中管理接地那 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。

ession sett	tings														\times
			N days are	N					5		ø	X	*		
SSH	leinet	Rsn	хатср	RDP	VINC	FIP	SELF	Serial	File	Snell	Browser	wosn	Aws S3	WSL	
Warning: y	ou have re	ached the	e maximum n	number of	saved ses	sions for th	ie personal	edition of N	NobaXterr	n.					
You can st	art a new s	ession bu	it it will not b	e automa	itically save	d.									
Please s	upport M	obaXter	m by subs	scribing	to the Pro	ofessiona	al edition	here: http	s://moba	axterm.n	nobatek.ne	et			
🕒 Bas	ic SSH se	ettings													
Re	mote hos	t * 172.	.18.5.205		⊡ Spe	ecify use	rname te	st	Ŕ	P	ort 22	•			

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:

¥ 172.18.5.205 (test)

Q	uick connect	_	🖳 6. 172.18.5.205 (test)	×
««		c053 c054	ok ok	
sions	▲ Name ▲	c055 c056	ok ok	-
Ses	t	c057 c058	ok ok	-
ير م	wangsong	c059	ok	-
Tool	VCP-76E-ADP	c061	ok	-
s S	test_zx	c062	ok	-
Macro	test	с064 с065	ok closed	
4	sortwares	c066 c067	ok ok	-
Sft	gao-test	c068	ok	-
9	emantest	c070	ok	-
	EMAN	c072	ok	-

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-ompi314
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 avai 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 -I <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 bresume <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 -I 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 "Queus 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

	RELION-3	.0.6:ork/test/scte	st/relior		n_bench	nmark				_		\times
File	e Jobs	Autorun	I/O	Reference	CTF	Optimisation	Sampling	Helix	Compute	Running		
Import Motion correction CTF estimation Manual picking Auto-picking Particle extraction Particle extraction Particle extraction 3D initial model 3D classification 3D initial model 3D classification 3D auto-refine 3D multi-body CTF refinement Bayesian polishing Mask creation Join star files Particle subtraction Post-processing Local resolution				s Minimum	Queu itandar dedica Ad	umber of MPI pr Number of thre Submit to que Queue na e submit comm d submission so ted cores per n Iditional argume	rocs 36 ads: 4 eue? Yes me: norma and: bsub < rript: b2GPL ode 2 ents:rando	I Jallpip_f	akeexclusive d 0	? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ?	owse)	
J	ob action	ns Curren	t job: [Give_alias_l	nere		Displa	y:				\$
Fi	nished j	obs		Rur	ining ja	bs		Inpu	It to this job)		
	29: Class 28: Class 27: Class 26: Class 25: Class 24: Class	3D/3d_6node_02 2D/2d_4node_03 2D/2d_1node_02 3D/3d_4node_02 3D/3d_2node_02 3D/3d_2node_02	2/ 3/ 2/ 2/ 2/	137 138 139	Class3 Class3 Class3	3D/3d_4node_4t 3D/3d_4node_so 3D/job139/	hreas/ :ratch/					
	24: Class 22: Class 21: Class 20: Class 17: Class 15: Class 13: Class 12: Class	3D/job122/ 2D/2d_3node_02 2D/2d_2node_02 3D/job117/ 3D/job115/ 3D/job113/ 3D/iob112/	2/ 2/ 2/	Sch	edulec	l jobs		Out	out from th	is job		

stdout will go here; double-click this window to open stdout in a separate window

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=3	36]" #按照每个 ⁼	节点 36 核心来分配	
module load cryoemsin	npletools/2019	#加载 cryoem 的小工具包,	包含 ctffind、
Gautomatch、Gctf、M	otionCor2		
Gautomatch xxx 参数 x	xx	#运行 Gautomatch	
mpirun -n 2 Gautomate	ch xxx 参数 xxx	#并行运行两个 Gautomate	h 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	面的脚本,	会申请一个节	5点 24 小时		
[test@	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	~]\$ <mark>b</mark>	sub < /s	nare/apps/	sleep24hr.	sh	
JOD <4	h)	使田 bic	bs 杏舌中	Lo queue < 语的节占夕秋	normat>. 、 如图由红柄		井占
	0)		///3 브伯ㅜ			品,这次中请到的定 0007	• <i>m</i> •
[test@m JOBID 4522	n02 ~] USER test	\$ bjobs STAT RUN	QUEUE normal	FROM_HOST mn02	EXEC_HOST 36*c086 36*c037 36*c057	JOB_NAME SUBMIT_TIME *D/job144/ Jul 22 12:57	
4523	test	_RUN	normal	mn02	36*c005 36*c007	Sleep24hr Jul 22 13:46	
	C)	ssh 登录	:节点,加载	战环境变量,	即可像单机-	-样进行测试	_
[test@ Last l [test@	mn02 oain c007	~]\$ ss : Mon J ~]\$	sh -X c00 Jul 22 13	07 3:52:32 202	19 from mn	02	
[test([test([test(c007 c007 c007	∼]\$ mo ∼]\$ mo ∼]\$ Ga	odule pur odule loa automatch	rge ad cryoems: 1help	impletools	/2019	
	d)	测试完成	戊后,退出	节点,结束掉	掉这个任务。		
[test@c logout Connect [test@m [test@m	007 ~ ion to n02 ~ n02 ~]\$ exit o c007 c]\$]\$ biobs	Losed.				

iii102 ~]φ						
nn02 ~]\$	bjobs					
USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_H0ST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
test	RUN	normal	mn02	36*c086	*D/job144/	Jul 22 12:57
				36*c037		
				36*c057		
				36*c066		
test	RUN	normal	mn02	36*c007	Sleep24hr	Jul 22 13:46
nn02 ~]\$	bkill	4523				
523> is b	being t	erminated				
	nnO2 ~]\$ USER test test nnO2 ~]\$ 523> is k	nnO2 ~]\$ bjobs USER STAT test RUN test RUN nnO2 ~]\$ bkill 523> is being t	nn02 ~]\$ bjobs USER STAT QUEUE test RUN normal test RUN normal nn02 ~]\$ bkill 4523 523> is being terminated	mn02 ~]\$ bjobs USER STAT QUEUE FROM_HOST test RUN normal mn02 test RUN normal mn02 mn02 ~]\$ bkill 4523 523> is being terminated	mn02 ~]\$ bjobs USER STAT QUEUE FROM_HOST EXEC_HOST test RUN normal mn02 36*c086 36*c037 36*c057 36*c066 test RUN normal mn02 36*c007 mn02 ~]\$ bkill 4523 523> is being terminated	mn02 ~]\$ bjobs USER STAT QUEUE FROM_HOST EXEC_HOST JOB_NAME test RUN normal mn02 36*c086 *D/job144/ 36*c037 36*c066 test RUN normal mn02 36*c007 Sleep24hr mn02 ~]\$ bkill 4523 523> 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。