Linux基础&服务器介绍

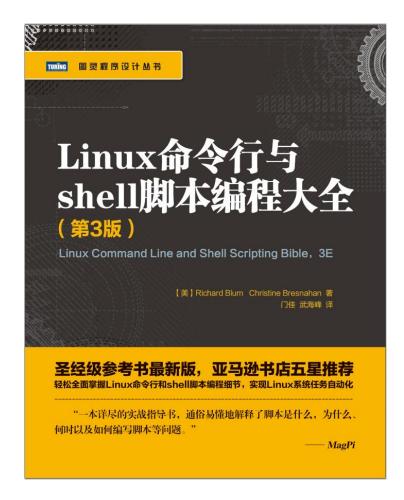
培训人:陈傲

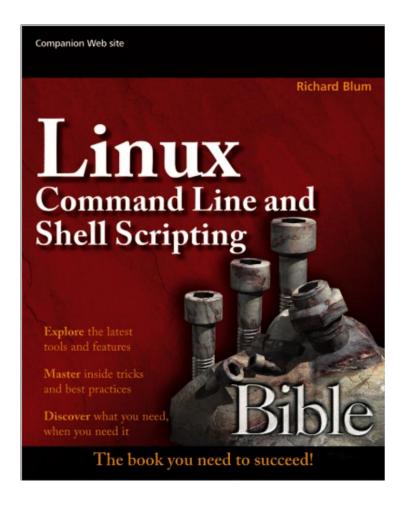
导 师: 程俊

2020-8-31

参考书籍

1. QQ群有PDF文件





2. 鸟哥的Linux私房菜 http://cn.linux.vbird.org/linux_basic/linux_basic.php

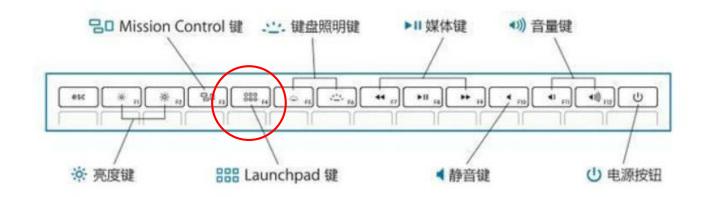
Part1 后台/终端打开

* 大家先自行安装好(便于培训),关于终端后面会有介绍

对 MacOS 系统:

- 1、command+空格 → 输入Terminal
- 2、单击Launchpad键 → Other → Terminal







对 Windows 系统:

通过 Git 或者 Ubuntu 进入后台

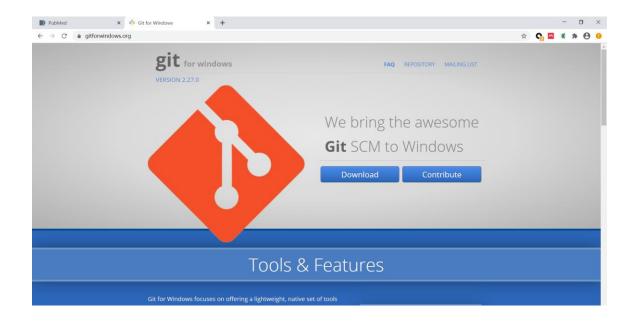
1、下载安装Git

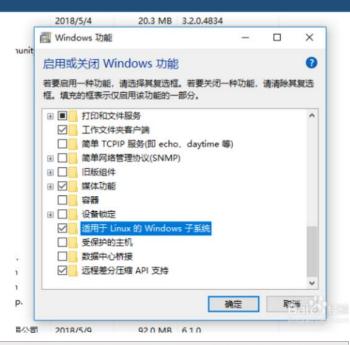
下载网页 https://gitforwindows.org

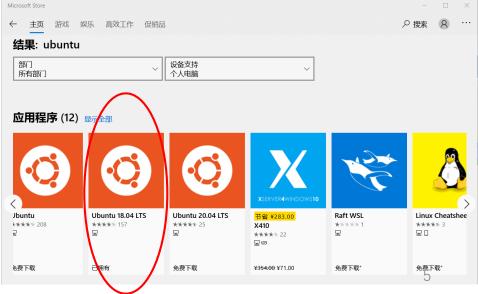
- 2、安装Ubuntu(推荐)
 - ① 先打开 Windows sublinux (WSL) 功能 (一定要打开这个)

https://jingyan.baidu.com/article/e2284b2b99a327e2e6118d38.html

② 在 Microsoft store 搜索安装Ubuntu18.04







显示:

- 1, terminal
- 2、Git:右键Git Bash Here
- 3. Ubuntu

```
● ● ↑ chenao — chenao@chenaos-MacBook-Pro — ~ — -zsh — 80×24
Last login: Tue Jul 14 19:39:19 on ttys000
(base)
# chenao @ chenaos-MacBook-Pro in ~ [20:44:05]
```

显示:

- 1, terminal
- 2、Git:右键Git Bash Here
- 3. Ubuntu





显示:

- 1 terminal
- 2、Git:右键Git Bash Here
- 3. Ubuntu



第一次登录,根据提示输入用户名和密码 *输入密码时,窗口并不会显示内容,但是实际内容已经键入

Part2 Linux基础

- Linux终端就是控制台, 是用户与内核交互的平台, 通过输入指令来控制内核完成任务操作。
- 外形是一个方框, 有光标在闪烁。
- 终端现在对于普通Linux来说,一般说的就是字符(或者模拟字符)的命令交互界面,通过终端命令实现对计算机的控制。

1. 启动shell

shell是Linux命令集的概称,是属于命令行的人机界面。

bash是borne again shell缩写,是shell一种,Linux默认采用bash,常用的还有zsh。

2. shell提示符

默认bash shell提示符是美元符号(\$),该符号表明shell在等待用户输入。

```
windows@DESKTOP-LOOF8NB MINGW64 ~/Desktop
$
# chenao @ chenaos-MacBook-Pro in ~ [9:54:55]
$
```

提示符还能提供其他辅助信息,如上图中:用户ID@系统名。shell提示符并非一成不变,可以根据需要修改。

3. bash手册

大多数Linux发行版自带用以查找shell命令及其他GNU工具信息的在线手册。 man命令用来访问存储在Linux系统上的手册页面。

Example: man xterm

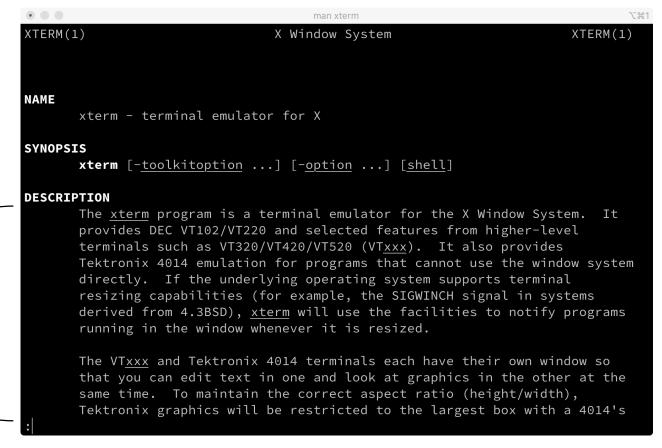
读完手册页按q键退出。

*手册用来快速参考,不是按部就班学习指南 *手册页不是唯一参考资料,还有一种info页面 信息,大家通过info info命令了解。

*大多数命令可以接受-help或—help选项,例如hostname -help

学习技术行话

Question: man man



4. 浏览文件系统

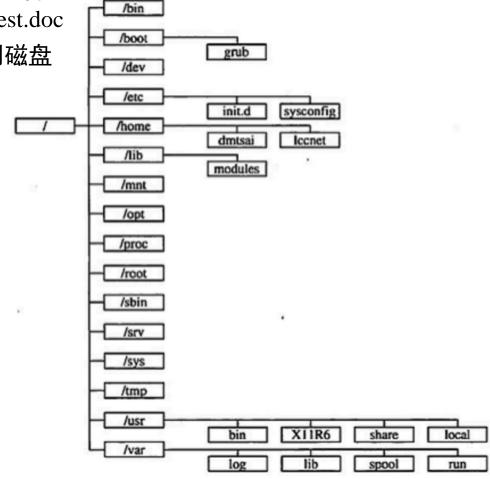
Linux不使用驱动器盘符,文件存储在单个目录结构中,只包含一个根目录(/)作为基础目录,常见路径:/home/Rich/Documents/test.doc

Windows的文件路径: C:\Users\Rich\Documents\test.doc表明磁盘

分区,若保存在闪存J上: J:\test.doc

表3-3 常见Linux目录名称

目 录	用 途		
/	虚拟目录的根目录。通常不会在这里存储文件		
/bin	二进制目录,存放许多用户级的GNU工具		
/boot	启动目录,存放启动文件		
/dev	设备目录,Linux在这里创建设备节点		
/etc	系统配置文件目录		
/home	主目录,Linux在这里创建用户目录		
/lib	库目录,存放系统和应用程序的库文件		
/media	媒体目录,可移动媒体设备的常用挂载点		
/mnt	挂载目录,另一个可移动媒体设备的常用挂载点		
/opt	可选目录,常用于存放第三方软件包和数据文件		
/proc	进程目录,存放现有硬件及当前进程的相关信息		
/root	root用户的主目录		
/sbin	系统二进制目录,存放许多GNU管理员级工具		
/run	运行目录,存放系统运作时的运行时数据		
/srv	服务目录,存放本地服务的相关文件		
/sys	系统目录,存放系统硬件信息的相关文件		
/tmp	临时目录,可以在该目录中创建和删除临时工作文件		
/usr	用户二进制目录,大量用户级的GNU工具和数据文件都存储在这里		
/var	可变目录,用以存放经常变化的文件,比如日志文件		



4.1. 遍历目录

切换目录命令cd将shell会话切换到另一个目录: cd destination

*可以是绝对路径,也可以是相对路径。

```
# chenao @ chenaos-MacBook-Pro in ~ [11:19:22]
$ ssh aochen51
Last login: Wed Jul 15 11:00:04 2020 from 10.24.3.158
-bash: warning: setlocale: LC_CTYPE: cannot change locale (UTF-8): No such file or directory
[aochen@mgt ~]$ cd /data/aochen/
[aochen@mgt aochen]$ cd ./pt-co/
[aochen@mgt pt-co]$ pwd/data/aochen/pt-co
[aochen@mgt aochen]$ pwd/data/aochen
[aochen@mgt aochen]$ pwd/data/aochen
[aochen@mgt aochen]$ |

提示符中 "~" 信息被修改
```

* cd /data/test #切换到目录/data/test

* cd./path或cd path #切换到当前目录下的path目录中,"."表示当前目录

* cd ../path #切换到上层目录中的path目录中,".."表示当前目录的父目录

pwd 该命令以<u>绝对路径</u>的方式显示当前目录

4.2. 文件和目录列表

可以使用列表命令ls,这是一个非常有用的查看文件与目录的命令, list之意。

```
[aochen@mgt aochen]$ pwd
                                                              ls-R:连同子目录的内容一
/data/aochen
[aochen@mgt aochen]$ ls
                                                              起列出(递归列出), 等于
Ru02-Pt dingtalk_in_51.py langli nohup.out pt-co
                                                              该目录下的所有文件都会
[aochen@mgt aochen]$ cd pt-co/
                                                              显示出来(输出可能会很长)
[aochen@mgt pt-co]$ ls
1Rb 1Rb-Cl c2h5 ch3 pzc
                                                               ls-a:列出全部的文件,
[aochen@mgt pt-co]$ cd ../
                                                          连同隐藏文件(开头为.的
[aochen@mgt aochen]$ ls -a
  .. RuO2-Pt dingtalk_in_51.py langli nohup.out pt-co
                                                              文件)一起列出来(常用)
[aochen@mgt aochen]$ ls -l
total 40
drwxrwxr-x 3 aochen aochen 4096 Jun 18 16:01 Ru02-Pt
-rw-r--r-- 1 aochen aochen 1691 Jun 2 11:28 dingtalk_in_51.py
                                                              ls -l:列出长数据串, 包含
drwxrwxr-x 3 aochen aochen 4096 Jun 9 14:54 langli
                                                             文件的属性与权限数据等。
-rw---- 1 aochen aochen 16608 Jul 10 00:33 nohup.out
drwxrwxr-x 7 aochen aochen 4096 Apr 26 14:45 pt-co
[aochen@mgt aochen]$
```

Question: ls -al

长列表格式

```
[aochen@mgt aochen]$ ls -l
total 40
drwxrwxr-x 3 aochen aochen 4096 Jun 18 16:01 Ru02-Pt
-rw-r--r- 1 aochen aochen 1691 Jun 2 11:28 dingtalk_in_51.py
drwxrwxr-x 3 aochen aochen 4096 Jun 9 14:54 langli
-rw---- 1 aochen aochen 16608 Jul 10 00:33 nohup.out
drwxrwxr-x 7 aochen aochen 4096 Apr 26 14:45 pt-co
[aochen@mgt aochen]$
```

每一行包含文件(或目录)的下述信息:

文件的权限:三个一组,分别代表文件主、组用户和其他用户权限,r可读、w可写、x可执行

文件的硬链接总数

文件属主的用户名

文件属组的组名

文件的大小(以字节为单位)

文件的上次修改时间

文件名或目录名

过滤输出列表

```
[aochen@mgt aochen]$ ls -l nohup.out
-rw----- 1 aochen aochen 16608 Jul 10 00:33 nohup.out
[aochen@mgt aochen]$ ls -l noh?p.out
-rw----- 1 aochen aochen 16608 Jul 10 00:33 nohup.out
[aochen@mgt aochen]$ ls -l no*
-rw----- 1 aochen aochen 16608 Jul 10 00:33 nohup.out
[aochen@mgt aochen]$ ls -l no*t
-rw----- 1 aochen aochen 16608 Jul 10 00:33 nohup.out
[aochen@mgt aochen]$ |
```

```
[aochen@mgt run]$ ls
BASIS_MOLOPT Pt-1.restart.bak-1 Pt-frc-1.xyz ch3.xyz
                                                           input.inp
GTH_POTENTIALS Pt-1.restart.bak-2 Pt-pos-1.xyz coord.xyz output.out
Pt-1.ener
               Pt-1.restart.bak-3 Pt-vel-1.xyz cube
                                                           pre-opt.wfn
                                  calculation dftd3.dat script
Pt-1.restart
               Pt-1.tregion
[aochen@mgt run]$ ls -l Pt-*
-rw-r--r-- 1 aochen aochen
                           4586441 Jan 8 2020 Pt-1.ener
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen
                            244098 Jan
                                           2020 Pt-1.restart
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen
                            244098 Jan
                                           2020 Pt-1.restart.bak-1
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen
                            244098 Jan
                                           2020 Pt-1.restart.bak-2
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen
                            244098 Jan 8
                                           2020 Pt-1.restart.bak-3
-rw-r--r-- 1 aochen aochen
                           3185984 Jan 8 2020 Pt-1.tregion
-rw-r--r-- 1 aochen aochen 894505500 Jan 8 2020 Pt-frc-1.xyz
-rw-r--r-- 1 aochen aochen 894505500 Jan 8
                                           2020 Pt-pos-1.xyz
-rw-r--r-- 1 aochen aochen 894505500 Jan 8 2020 Pt-vel-1.xvz
[aochen@mgt run]$
```

- ▶ 问号 (?) 代表一个字符
- ▶ 星号 (*) 代表零个或多个字符

可以有选择地选中需要的文件或目录

5. 处理文件

5.1. 创建文件

\$touch test_one

5.2. 复制文件

cp source destination
\$cp test_one test_two

创建新文件———

复制文件,可以用绝对路径或相对路径

-i 强制shell询问是否需要覆盖已有 文件,不回答v,文件复制不会进行 Tip: 看看 man cp 有哪些参数

*-r:递归持续复制,用于文件夹的复制行为,即命令为

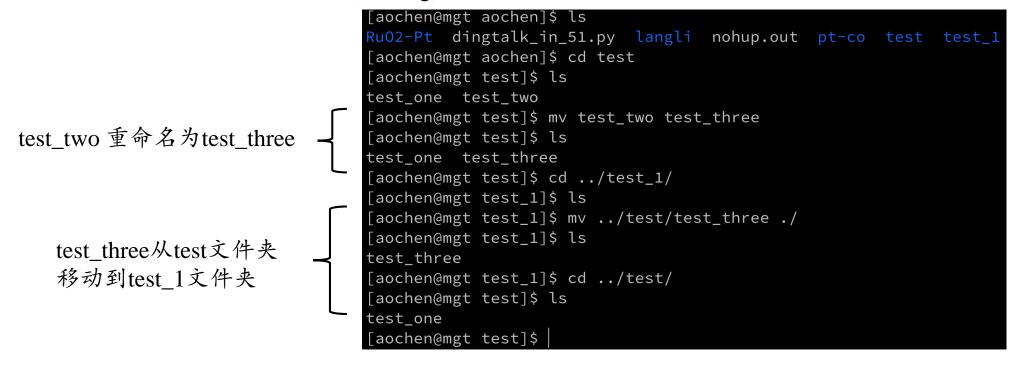
cp -r /data/test/dir1 /data/test/dir2

*制表键自动补全,避免长目录名或文件名输错。

```
[aochen@mgt aochen]$ cd test/
[aochen@mgt test]$ ls
[aochen@mgt test]$ touch test_one
[aochen@mgt test]$ ls -l test_one
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen 0 Jul 15 15:53 test_one
[aochen@mgt test]$ cp test_one test_two
[aochen@mgt test]$ ls -l test_*
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen 0 Jul 15 15:53 test_one
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen 0 Jul 15 15:54 test_two
[aochen@mgt test]$ cp -i test_one test_two
cp: overwrite 'test_two'? n
[aochen@mgt test]$
```

5.3. 重命名文件

Linux中重命名文件称为移动(moving), mv命令可以将文件和目录移动到另一个位置或重命名。



mv file1 file2 file3 dir #把文件file1、file2、file3移动到目录dir中 mv file1 file2 #在file2不存在的情况下,把文件file1重命名为file2

- -f:force强制的意思,如果目标文件已经存在,不会询问而直接覆盖。
- -i:若目标文件已经存在, 就会询问是否覆盖
- *该命令可以把一个文件或多个文件一次移动一个文件夹中,但是最后一个目标文件一定要是"目录"

5.4. 删除文件

Linux中删除文件称为移除(removing), bash shell中删除文件命令是rm。

```
rm-i file #删除文件file, 在删除之前会询问是否进行该操作(推荐使用)
rm-fr dir #强制删除目录dir中的所有文件(慎用)
```

- -f:就是force的意思, 忽略不存在的文件, 不会出现警告消息
- -i:互动模式, 在删除前会询问用户是否操作
- -r:递归删除, 最常用于目录删除, 它是一个非常危险的参数

```
[aochen@mgt aochen]$ ls

Ru02-Pt dingtalk_in_51.py langli nohup.out pt-co test test_1
[aochen@mgt aochen]$ rm test_1/
rm: cannot remove 'test_1/': Is a directory
[aochen@mgt aochen]$ rm -r test_1/
[aochen@mgt aochen]$ ls

Ru02-Pt dingtalk_in_51.py langli nohup.out pt-co test
[aochen@mgt aochen]$
```

6. 处理目录

6.1. 创建目录

\$mkdir New_dir

6.2. 删除目录

\$rmdir New_dir #只能删除空目录 \$rm -ri My_dir #删除大量目录文件, -ri 依次提醒非常琐碎, -rf 强制删除但很危险

```
[aochen@mgt aochen]$ rm -ri test/
rm: descend into directory 'test/'? y
rm: remove regular empty file 'test/test_one'? y
rm: remove directory 'test/'? y
[aochen@mgt aochen]$ ls
Ru02-Pt dingtalk_in_51.py langli nohup.out pt-co
[aochen@mgt aochen]$
```

7. 编辑器 vi / vim

Ubuntu中安装基础vim包: sudo apt-get install vim (一般不用装, 自带)

该命令主要用于文本编辑,它接一个或多个文件名作为参数,如果文件存在就打开,如果文件不存在就以该文件名创建一个文件用vi命令(vim filename)打开文档之后,按i(insert之意)进行文档编辑,当编辑完成之后,按ESC退出,退出的命令有如下几个

:q 退出

:q! 强制退出

:wq 保存并退出

/fermi 在文档中查找fermi, 按n跳到下一个, shift+n上一个

一些常用到的操作: Ctrl+u:向文件首翻半屏;

Ctrl+d:向文件尾翻半屏;

Ctrl+f:向文件尾翻一屏;

Ctrl+b:向文件首翻一屏;

:行号:光标跳转到指定行的行首;

:\$:光标跳转到最后一行的行首;

D:删除从当前光标到光标所在行尾的全部字符;

dd:删除光标行正行内容;

ndd:删除当前行及其后n-1行;

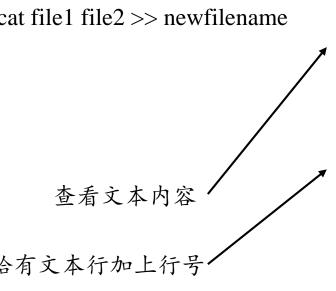
8. 查看文件内容

Linux中几个命令可以查看文件内容,而不需要调用其他文本编辑器。

8.1. 查看整个文件: cat命令

cat命令的一些功能:

- 查看全部内容 cat filename
- 创建一个文件 cat > filename
- 几个文件合并 cat file1 file2 >> newfilename



```
[aochen@mgt test]$ pwd
/data/aochen/test
[aochen@mgt test]$ ls -al
total 12
drwxrwxr-x 2 aochen aochen 4096 Jul 15 16:47 .
drwx----- 6 aochen aochen 4096 Jul 15 16:46 ...
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen 38 Jul 15 16:47 test_one
[aochen@mgt test]$ cat test_one
hello
this is a test file
have a try
[aochen@mgt test]$ cat -b test_one
    1 hello
    2 this is a test file
     3 have a try
[aochen@mgt test]$
```

8.2. 查看部分内容: tail命令和head命令

tail默认显示后十行 head默认显示前十行

tail [参数] [filename]

tail –n 2 filename #只显示文件的最后两行 head –n 5 filename #只显示文件最前五行

该两个命令允许破折号后面输入想显示行数 tail –2 filename head –5 filename

head -n 5 filename > newfile 将文档中的前5行输出到新文件newfile中

```
[aochen@mgt test]$ cat test_one
hello
this is a test file
have a try
line4
line5
16
i'm fine
line11
thanks
pardon
line13
114
please
116
[aochen@mgt test]$ tail test_one
i'm fine
line11
thanks
pardon
line13
114
please
116
[aochen@mgt test]$
```

9. 搜索数据

从大文件中找一行数据,且该数据藏在文件中间,并不需要手动翻看,借助grep命令帮助查找。\$grep sth filename #在filename文件中搜索 'sth' \$grep -n sth filename #显示匹配行所在行号 *常与管道符 '|' 连用

10. 查找属于账号的文件

find [PATH] [option] [action]

find ./ -name passwd #查找文件名为passwd的文件

```
[aochen@mgt test]$ ls -al
total 20
drwxrwxr-x 2 aochen aochen 4096 Jul 15 17:18 .
drwx----- 6 aochen aochen 4096 Jul 15 16:46 ..
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen 3 Jul 15 17:12 test_2
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen 9 Jul 15 17:12 test_3
-rw-rw-r-- 1 aochen aochen 113 Jul 15 16:55 test_one
[aochen@mgt test]$ ls -al | grep 'dr'
drwxrwxr-x 2 aochen aochen 4096 Jul 15 17:18 .
drwx----- 6 aochen aochen 4096 Jul 15 16:46 ..
[aochen@mgt test]$ |
```

```
[aochen@mgt test]$ pwd
/data/aochen/test
[aochen@mgt test]$ ls
test_2 test_3 test_one
[aochen@mgt test]$ grep 'line' test_one
line4
line5
line11
line13
[aochen@mgt test]$ grep -n 'line' test_one
4:line4
5:line5
11:line11
14:line13
[aochen@mgt test]$ find /data/aochen/ -name nohup.out
/data/aochen/nohup.out
[aochen@mgt test]$
```

11. 文本处理常用命令

11.1. awk命令

awk是一个强大的文本分析工具, 一般awk是把文件进行逐行的读入, 以空格为默认分隔符将每行切片,切开的部分再进行各种分析处理。

使用方法: awk '{pattern + action}' {filenames}

其中pattern表示awk在数据中查找的内容,而action是在找到匹配内容时所执行的一系列命令。花括号({})不需要在程序中始终出现,但它们用于根据特定的模式对一系列指令进行分组。pattern就是要表示的正则表达式,用斜杠括起来。

使用实例:对某个文本文件第5列的数字输出并做平均之后覆盖到data.txt文本文件中awk' $\{i++;s=s+(\$5);print(\$5)$ " "s/i $\}$ ' filename > data.txt awk' $\{i++;s=s+(\$5);printf$ "%8f %8f\n", i, s/i $\}$ ' filename > data.txt

11.2. sed命令

sed编辑器是一种流编辑器,可以根据命令来处理数据流中的数据,这些命令可以从命令行中输入也可以存储在一个命令文本文件中来使用,sed常用的命令参数有:

p==print

d: delate

-n: 取消默认的完整输出, 只要需要的

-e: 是编辑命令, 用于多个编辑任务

-i: 修改文件内容

使用实例(pd-n-e-i):

sed -n '3p' /data/test/filename #查看文件filename的第3行

sed -n '3,9p' /data/test/filename #查看文件filename的第3-9行

sed -i -e 'li a' -e '\$b' /data/test/filename #在文件filename的第1行添加 'a', 在文件末尾添加 'b'

sed -i '1,3i c' /data/test/filename #在文件filename的第1行和第3行的每行下面添加 'c'

sed -i '1,3d' /data/test/filename #删除文件filename的第1行到第3行

11.3. if判断语句 最基本的结构化命令是if-then, 有如下格式: if command then commands fi if语句之后对象是一个等式,求值结果为TURE或FALSE。 使用示例: #!/bin/bash SYSTEM=`uname -s`#获取操作系统类型 if [\$SYSTEM = "Linux"]; then # 如果是linux话输出linux字符串 echo "Linux" elif [\$SYSTEM = "FreeBSD"]; then # 如果是FreeBSD话输出FreeBSD字符串 echo "FreeBSD" else echo"What?"#如果两者都不是就输出What字符串 fi#判断结束, 以fi结尾

```
11.4. for循环
```

重复执行一系列命令,可做批量处理。bash shell中for命令基本格式;

for var in list

do

commands

done

在list参数中,需要提供迭代中使用到的一系列值。

使用示例: #!/bin/bash

for dir in \$(seq 10 10 100) #对名为10到100的文件夹, 每隔10步取一个文件夹 do #进行下述操作

cd \$dir #分别进入文件

tail -n +3 filename > tmp.pdos #分别进入文件之后对文件里的文本文件进行需要的操作cd..#上述操作结束后返回到上层目录

done #结束for循环

所有涉及到的命令:

cd	ls	pwd	
touch	ср	mv	rm
mkdir	rmdir		
vi/vim			
cat	tail	head	
grep	find		
awk	sed	if	for

Part3 服务器介绍

高性能计算集群(HPC)是一个计算机集群系统,它通过各种互联技术将多个计算机系统连接在一起,利用所有被连接系统的综合计算能力来处理大型计算问题,所以又通常被称为高性能计算集群,在某种意义上,又可以被看作是一台计算机。高性能计算方法的基本原理就是将问题分为若干部分,而相连的每台计算机(称为节点)均可同时参与问题的解决,从而显著缩短了解决整个问题所需的计算时间。

目前课题组服务器共有两套,IP分别为121.192.191.51, 121.192.191.52

访问集群统, 需要用户登录任意登录节点或管理节点

集群访问分为密码登录和密钥登录, 目前<mark>课题组服务器采用密钥登录, 国重采用密码登录</mark>, 下面为不同系统 登录服务器的具体介绍

SSH使用入门: https://chenggroup.github.io/wiki/ssh_note

课题组集群账号申请:

ssh-keygen #生成密钥

根据终端提示操作(实际可能只要不停按enter键),默认情况在~/.ssh 目录中得到 id_rsa 和 id_rsa.pub 文件,它们分别是私钥和公钥。创建好后,将公钥文件发给服务器管理员。请务必保存好私钥,防止电脑被入侵。

1. 登陆系统

ssh常用命令:-i, -p, -X(或-Y)

- ▶ -i为密钥登录
- ▶ -p为指定端口, 一般服务器端口为22, 此时可省略, 当端口不是22时, 需加-p, 我们的服务器端口是 6666, 则输入ssh -p 6666 test@121.192.191.51
- ➤ 若需开启X11转发功能,则输入ssh –X test@121.192.191.51,或ssh –Y test@121.192.191.51
- ▶ 注意:这些命令可同时使用

例如:ssh -p 6666 -X test@121.192.191.51

Linux & MacOS ——密码登录

在Linux & MacOS 系统下, 用户可以使用任何支持ssh2的客户端工具,

用ssh命令访问集群系统,命令为\$ ssh username@ip。

打开终端, 假设该用户用户名为test, 服务器ip为121.192.191.51,

则输入ssh test@121.192.191.51, 根据提示输入密码即可登录

Linux & MacOS ——密钥登录

密钥登录与密码登录类似, 打开终端, 输入ssh -i /Users/test/.ssh/id_rsa test@121.192.191.51即可登录,

其中/Users/test/.ssh为私钥所在路径, id_rsa为私钥名, test为用户名。

当私钥路径和名称分别为/Users/test/.ssh和id_rsa时可省略, 即上述情况也可以用ssh test@121.192.191.52 替代

例: ssh -p 6666 —i /Users/test/.ssh/id_rsa test@121.192.191.52

或者ssh -p 6666 –i /Users/test/.ssh/id_rsa –Y test@121.192.191.52

2. 课题组服务器介绍

➤ \$HOME目录

每个账户登陆后,都存在一个\$HOME目录,如果在创建用户时未特别指定用户的\$HOME目录,则默认在/home/username。默认的,用户在使用ssh客户端登陆时,会自动切换到用户的\$HOME,即/home/username,用户对此目录拥有完全权限

▶ 工作目录

在当前集群系统中,每个账户会被分配一个数据目录/data/username,用户对此目录拥有完全权限,可以在此目录进行:创建、修改、删除、运行等操作。用户可以在此目录运行程序,安装私有程序。用户使用ssh客户端登陆集群系统后,请执行如下命令切换到工作目录:cd /data/username可用pwd命令查看当前所在目录

3. 作业提交管理

目前使用的服务器采用的都是lsf作业管理系统, 用户登录集群管理节点或者是登陆节点后可进行作业提交和修改作业提交

登录服务器后可进入工作目录下进行作业提交。课题组服务器工作目录为/data/username, 登录服务器后执行命令cd /data/username进入工作目录在lsf系统中, 用户使用bsub命令提交用户作业

例如:bsub < cp2k.lsf, 其中cp2k.lsf为调用cp2k软件的作业提交脚本, 其他软件脚本存放在服务器/share/base/scripts目录下

提交作业的脚本介绍

```
#!/bin/bash (声明shell)
#
#BSUB -q medium (说明队列, 具体队列可参考课题组服务器介绍)
#BSUB -W 12:00 (运行时间, 可修改, 12:00表示12小时)
#BSUB -J name (作业名字)
#BSUB -o cp2k.%J.stdout (作业标准输出, %J为作业ID)
#BSUB -e cp2k.%J.stderr (作业标准错误, %J为作业ID)
#BSUB -n 28 (申请的CPU核心数)
#BSUB -R "span[ptile=28]" (要求每个节点申请24核心, 可修改, 对51服
务器不应超过24,52服务器不应超过28,否则作业无法运行。)
# add modulefiles (此处需要加载的程序)
module load intel/15.0.6 mpi/intel/5.0.3.049
module load cp2k/5.0
mpiexec.hydra cp2k.popt input.inp >& output (运行程序)
```

▶ 作业状态查询

提交作业后,可以通过bjobs命令查看所交作业的状态及相关信息,作业状态包括RUN(正在运行)和PEND(排队中)

bjobs 查看用户正在运行的作业

bjobs -a 查看作业(包括短时间内完成的)

bjobs -u all 查看所有作业

bjobs -p 查看作业等待原因

bacct 查看使用资源情况

▶ 删除作业

提交作业后,如果发现作业错误可通过bkill+作业号来删除作业 先用bjobs 命令查看自己的作业号,再用bkill+作业号来删除作业

> 查询队列信息

在管理节点或登录节点上执行bqueues命令,可查询当前系统的队列

bqueues 查看队列信息

bqueues -1 查看队列详细信息

▶ 查询队列负载

用bhosts命令查询各节点的作业情况。 节点状态说明:

- •1.closed:所有CPU资源已被占用
- 2.ok:CPU空闲

- 4. scp文件传输
- > 从本地复制到远程
- 复制文件

```
scp local_file remote_username@remote_ip:remote_folder
scp local_file remote_username@remote_ip:remote_file
scp local_file remote_ip:remote_folder
scp local_file remote_ip:remote_file
```

第1,2个指定了用户名,命令执行后需要再输入密码,第1个仅指定了远程的目录,文件名字不变,第2个指定了文件名;

第3,4个没有指定用户名,命令执行后需要输入用户名和密码,第3个仅指定了远程的目录,文件名字不变,第4个指定了文件名

• 复制目录

scp -r local_folder remote_username@remote_ip:remote_folder scp -r local_folder remote_ip:remote_folder

第1个指定了用户名,命令执行后需要再输入密码;第2个没有指定用户名,命令执行后需要输入用户名和密码

- 4. scp文件传输
- > 从本地复制到远程
- > 从远程复制到本地

从远程复制到本地, 只要将从本地复制到远程的命令的后2个参数调换顺序即可 scp test@121.192.191.51:/data/test/file /home scp -r test@121.192.191.51:/data/test/dir /home

- ▶ 运用实例
- □ 从本地复制到远程(从桌面复制文件到服务器) 命令格式: scp -r -i .ssh/id_rsa -P 6666 /Users/username/Desktop/test username@121.192.191.52:/data/test
- □ 从远程复制到本地(从服务器复制文件到桌面) 命令格式: scp -r -i .ssh/id_rsa -P 6666 username@121.192.191.52:/data/test ~/Desktop/

Thank you for your attention!