

感谢吕梁超算中心的支持，以后VASP的学习系列练习，都将在天河二号上面进行展示操作。一方面帮助大家继续学习VASP知识，另一方面也帮助大家快速掌握使用超算中心计算的技巧，进而避免一些焦头烂额的琐事。今天我们先讲解一下怎么在Ubuntu系统上，1) 安装VPN, 2) 连接天河二号超算中心，3) 以及将超算中心挂载到本地电脑上，进行文件互传。

如果你是Windows用户，管理员在发送账号的时候，已经将使用说明一起发给你了。相信大家都可以顺利链接。那么请跳过本节内容。

但是Linux系统在计算具有的独特优势是Windows所不能比的，建议Windows用户继续看下去，对以后使用Linux系统做计算会有帮助。下一节，我们介绍如何使用脚本运行VASP软件，由于本人还在摸索，需要和管理沟通学习，大家再耐心等待一天。如果你想要试用或者申请超算中心的机时，请加QQ群：国防科大吕梁超算中心（204521798）了解更多的信息。

## 1 下载Linux版的VPN软件：

链接：<https://www.hillstonenet.com/our-products/next-gen-firewalls-e-series/>

直接跳到网页最底部，右侧点击 Linux OS 下载。**注意：**这个VPN不支持Ubuntu17 和 18的版本。

The screenshot displays the Hillstone Networks website's VPN Client Download section. It features three main download options: Windows OS, Mac OS, and Linux OS. A pink arrow points to the Linux OS link. Below these, there are QR codes for Android and iOS mobile clients. At the bottom of the page, there is a blue bar with 'Hillstone Networks News & Press' and 'Events'. A modal window is open in the foreground, titled 'Opening SCVPN\_LINUX\_1.0.0', showing details about the file and asking if the user wants to save it.

**VPN Client Download**

Windows OS      Mac OS      **Linux OS**

**VPN Mobile Client Download**

Android Client      iOS Client

Android Client QR Code      iOS Client QR Code

Hillstone Networks News & Press      Events

CloudView      Wireless

**VPN Client**

Windows OS      Mac OS      Linux OS

**Opening SCVPN\_LINUX\_1.0.0**

You have chosen to open:

**SCVPN\_LINUX\_1.0.0**

which is: BIN file (44.4 MB)

from: <http://swupdate.hillstonenet.com:1337>

Would you like to save this file?

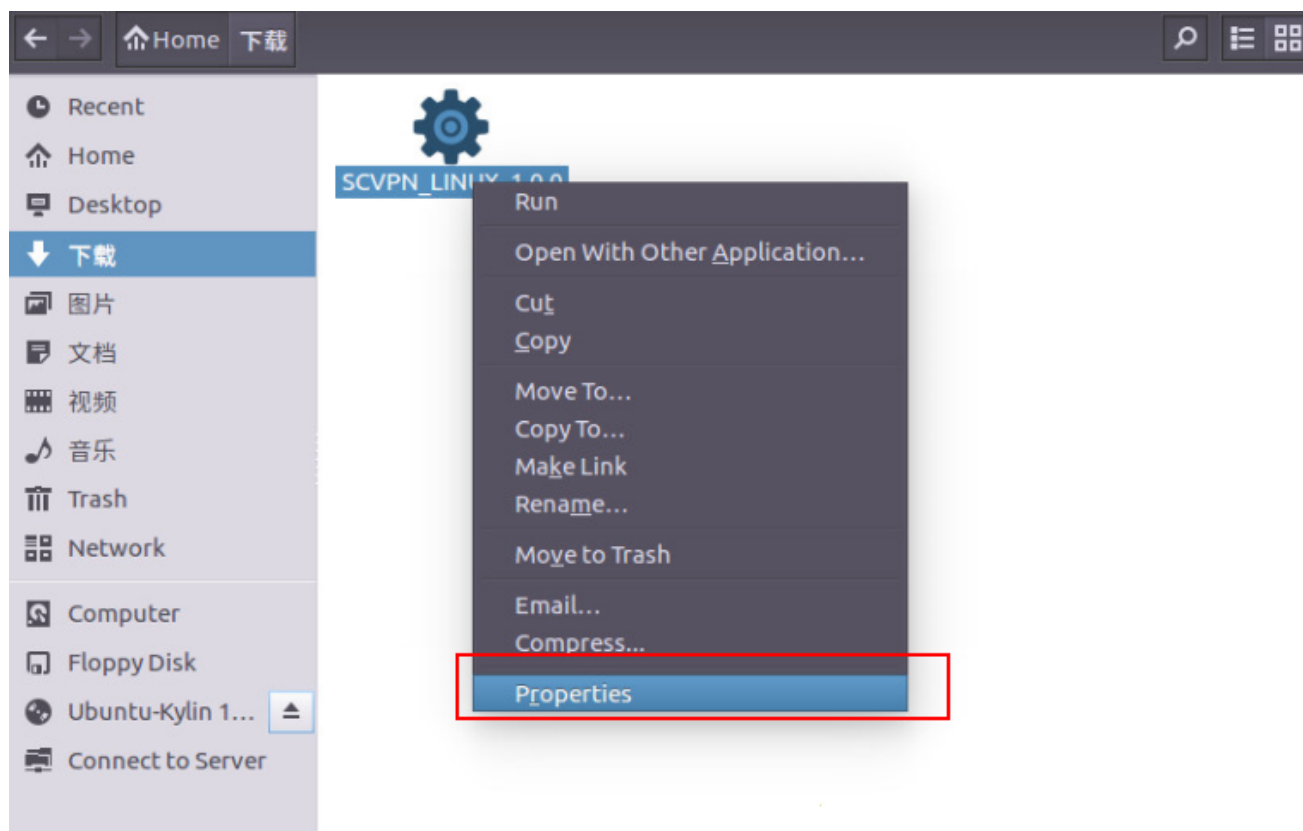
Cancel      Save File

## 2 安装Linux 版VPN

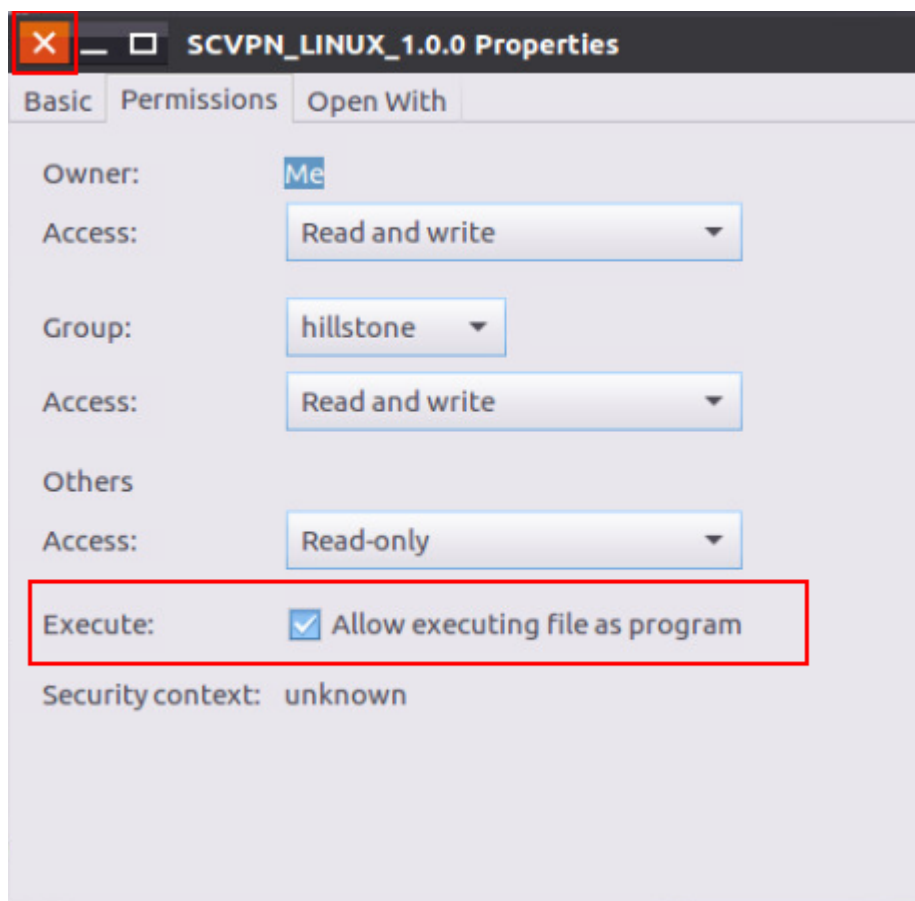
Hillstone 官网已经给出了详细的安装说明， 链接如下：

[http://docs.hillstonenet.com/en/Content/7\\_VPN/SSL\\_VPN\\_Client\\_L.htm#Starting](http://docs.hillstonenet.com/en/Content/7_VPN/SSL_VPN_Client_L.htm#Starting)

大家可以参考链接，也可以根据下面的步骤进行。本人直接将官网的照片复制过来了。



找到刚才下载的vpn软件： 右击 --> 点击最底部的Properties

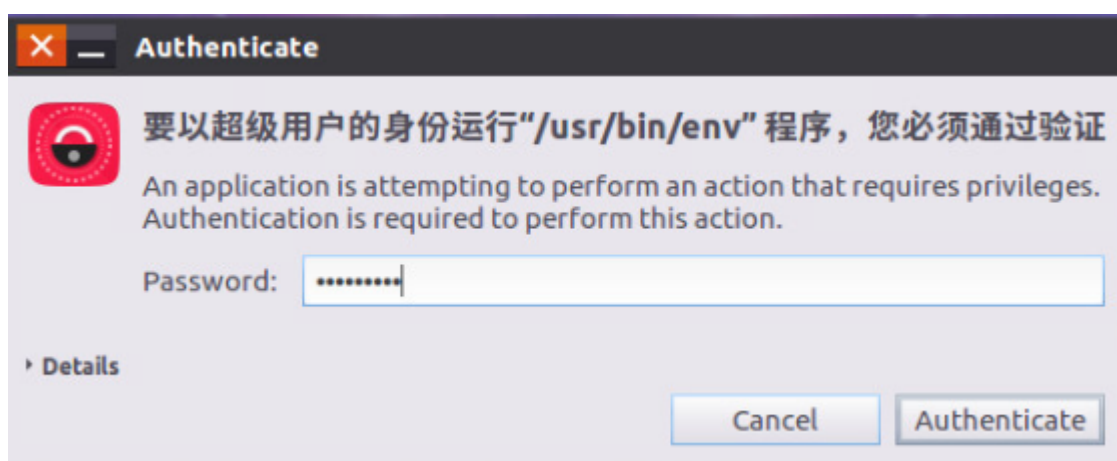


在弹出的窗口中，将Execute的那个框选中，然后点击左上角的叉号直接关闭。

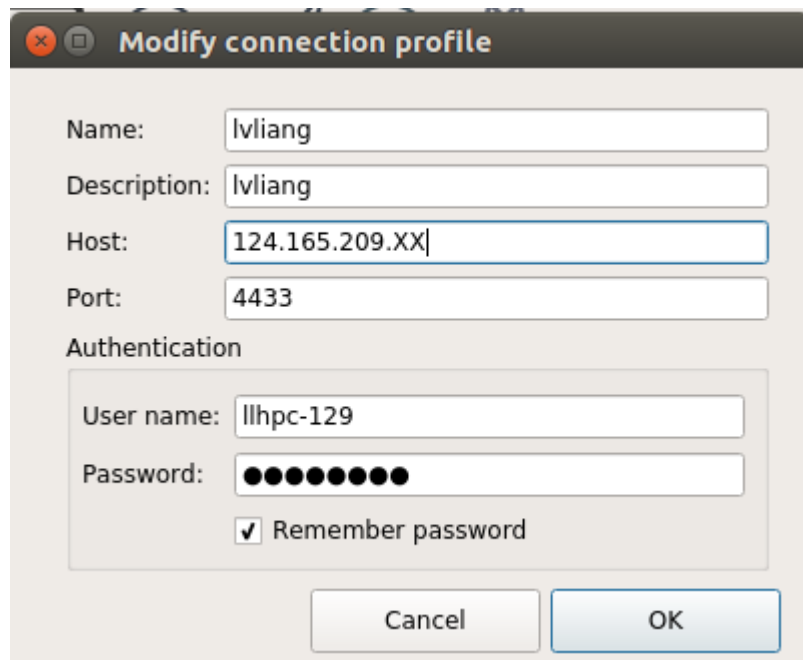
双击这个软件的图标，一步一步点下去，这样就完成安装啦，同时桌面上会生成VPN的快捷方式图标。

### 3 连接VPN

1) 打开VPN：双击桌面的VPN图标，会弹出让你输入电脑密码的对话框，输入密码，点击Authenticate按钮。



2) 点击下图中的New 对应的加号，会弹出对话框，让你输入IP，账号密码



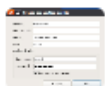
注意：

- Name, Description 这两项随便填。
- Host的IP超算中心给了三个，大家根据自己的网进行选择，如果一个不行，换另一个试试即可。
- Port 就是 4433
- User name和Password是VPN的账号和密码！！
- 一定要选中Remember Password. 因为管理员给的密码实在是太安全了，Linux的VPN不能修改密码。如果嫌密码麻烦，可以在Windows连接成功后，修改VPN的密码。

4) 点击OK就开始连接了

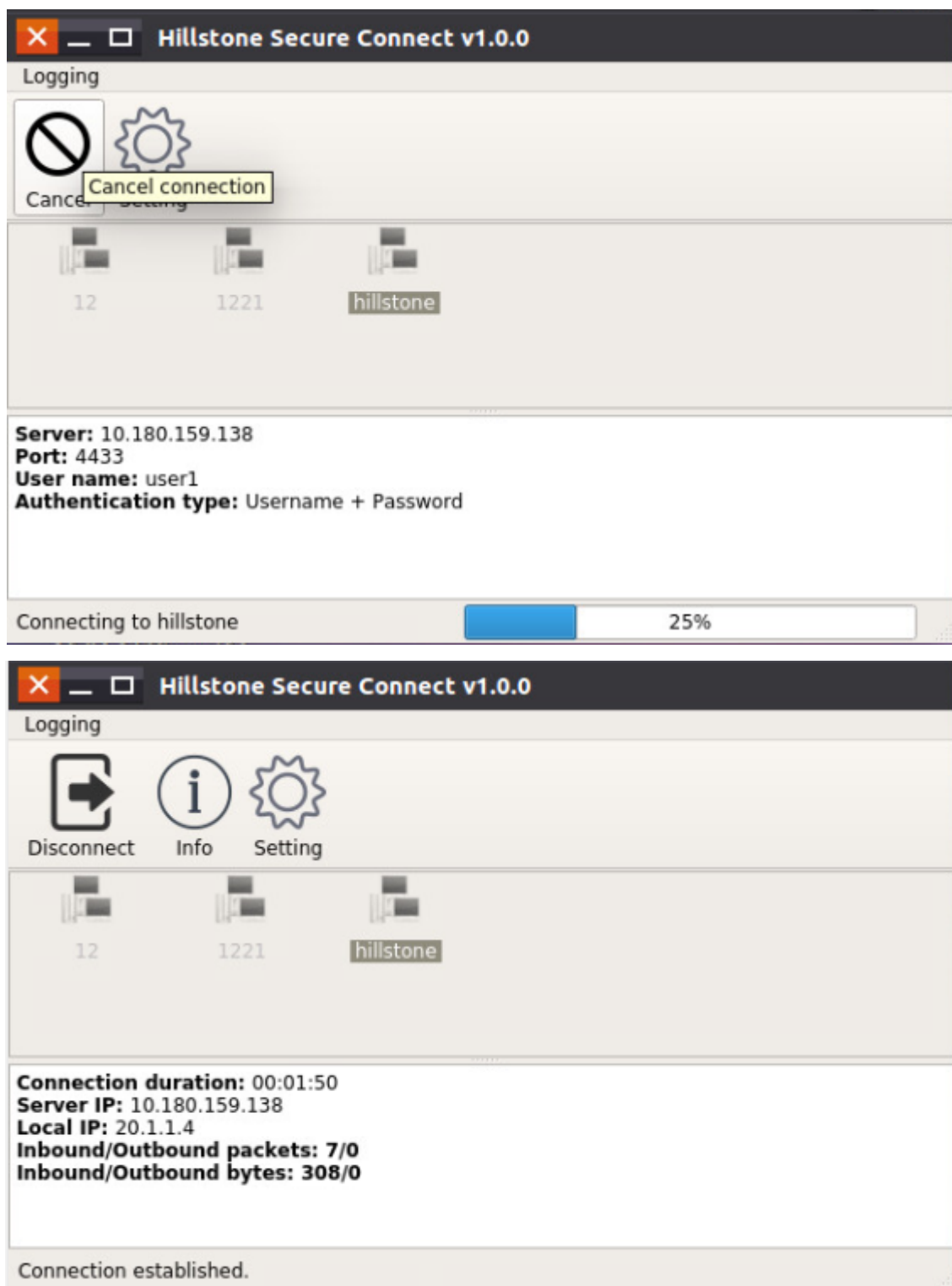
5) vpn的官网的填写说明，大家把网页中的第三条展开就可以看到了

3.  Provide the following information and then click **OK**.



- » **Name:** Specify a name for this VPN connection.
- » **Description:** Specify the description for this VPN connection.
- » **Server:** Enter the IP address or the server name of the device that acts as the VPN server.
- » **Port:** Enter the HTTPs port number of the device.
- » **User name:** Enter the login name. For detailed information, refer to [User](#).
- » **Password:** Enter the corresponding password.
- » **Remember password :** Select this check box to remember the password.

6) 连接过程以及成功是这个样子：



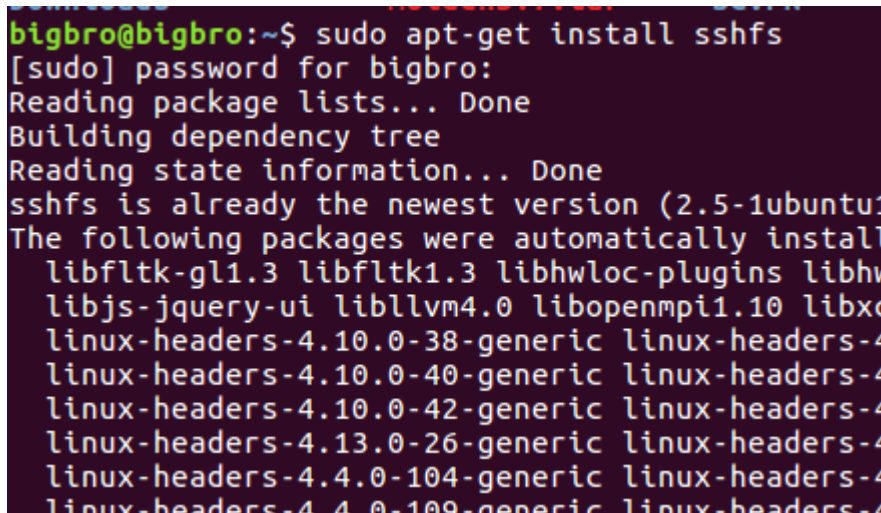
## 4 通过ssh连接超算中心服务器：

VPN登录成功后，后面我们就可以通过Terminal连接超算中心了。为了方便，提高效率，强烈建议大家按照下面的步骤进行：

### 1) 安装sshfs

这个用于把超算中心挂载到你的本地电脑上，后面再细说，先安装好。可以命令行一键搞定。

```
sudo apt-get install sshfs
```



```
bigbro@bigbro:~$ sudo apt-get install sshfs
[sudo] password for bigbro:
Reading package lists... Done
Building dependency tree
Reading state information... Done
sshfs is already the newest version (2.5-1ubuntu2)
The following packages were automatically installed:
libfltk-gli1.3 libfltk1.3 libhwloc-plugins libjs-jquery-ui libllvm4.0 libopenmpi1.10 libx
linux-headers-4.10.0-38-generic linux-headers-4.10.0-40-generic linux-headers-4.10.0-42-generic
linux-headers-4.13.0-26-generic linux-headers-4.4.0-104-generic linux-headers-4.4.0-109-generic
```

2) 在home目录下建一个文件夹, 名字为: lvliang

```
mkdir ~/lvliang
```

3) 将下面的内容加入到 .bashrc 文件中, 将下面代码中的 172.16.20.xx 换成超算管理员发给你的IP地址。

```
####lvliang###
alias lvliang='ssh iciq-lq@172.16.20.xx'
alias mlvliang='sshfs iciq-lq@172.16.20.xx: ~/lvliang/'
alias ulvliang="sudo umount ~/lvliang -l"
```

- lvliang 这个命令用来连接超算中心, 提交任务, 运行命令处理任务等
- mlvliang 用来挂载超算中心到你的电脑上, 相当于把超算中心看作成一个移动硬盘
- ulvliang 用来卸载超算中心。

4) 保存后, 更新下 .bashrc 文件, 然后直接敲命令: lvliang 即可连接超算中心。

第一次连接, 可能会出来一堆提示东西, 输入Yes, 回车即可。

输入自己的超算中心账号密码, 就可以登录啦。

```
qli@bigbro:~$ . .bashrc
qli@bigbro:~$ lvliang
iciq-lq@172.16.20.10's password:
Last login: Tue Dec 4 18:22:59 2018 from 172.16.31.135
```

5) 新用户刚开始的时候主目录下什么都没有, 强烈建议大家建一个 bin 文件夹, 用来存放脚本。直接 `mkdir ~/bin` 即可。

---

## 5 上传或者下载数据 (sshfs的使用)

---

1) 挂载超算中心到自己的本地电脑。

打开一个新的终端,

- 输入前面我们写进.bashrc文件中的命令: mlvliang (m是mount的缩写)。
- 输入超算中心的密码:

```
qli@bigbro:~$ mlvliang
iciq-lq@172.16.20.10's password:
qli@bigbro:~$ cd lvliang/
qli@bigbro:~/lvliang$ ls
bin  LVASPTHW  POTCAR  test_jobs
qli@bigbro:~/lvliang$
```

现在超算中心就成功被挂载到我们电脑上了, 我们可以随时进入并访问超算中的文件夹, 通过 `cp`、`mv`、`rsync` 等命令往里面传数据, 或者下载数据到本地的电脑。

## 2) 例子1:

挂载超算中心登录后, 我们将Ex01的文件下载 (通过 `cp` 命令) 到本地电脑桌面上。

```
qli@bigbro:~/lvliang$ ls
bin  LVASPTHW  POTCAR  test_jobs
qli@bigbro:~/lvliang$ cd LVASPTHW/
qli@bigbro:~/lvliang/LVASPTHW$ ls
ex01  ex02  ex03  ex04  ex05  ex06  ex07  ex08  ex09  ex10  ex11  ex12  ex13  ex14
ex15  ex74  ex77  ex78  potcar
qli@bigbro:~/lvliang/LVASPTHW$ cp ex01 ~/Desktop/
qli@bigbro:~/lvliang/LVASPTHW$ ls ~/Desktop/ex01/
INCAR  KPOINTS  POSCAR  POTCAR
```

## 3) 例子2:

我们将电脑桌面的ex16文件夹上传 (通过 `cp` 命令) 到超算中。

```
qli@bigbro:~/lvliang/LVASPTHW$ ls
ex01  ex02  ex03  ex04  ex05  ex06  ex07  ex08  ex09  ex10  ex11  ex12  ex13  ex14
ex15  ex74  ex77  ex78  potcar
qli@bigbro:~/lvliang/LVASPTHW$ cp ~/Desktop/ex16 .
qli@bigbro:~/lvliang/LVASPTHW$ ls
ex01  ex02  ex03  ex04  ex05  ex06  ex07  ex08  ex09  ex10  ex11  ex12  ex13  ex14
ex15  ex16  ex74  ex77  ex78  potcar
qli@bigbro:~/lvliang/LVASPTHW$
```

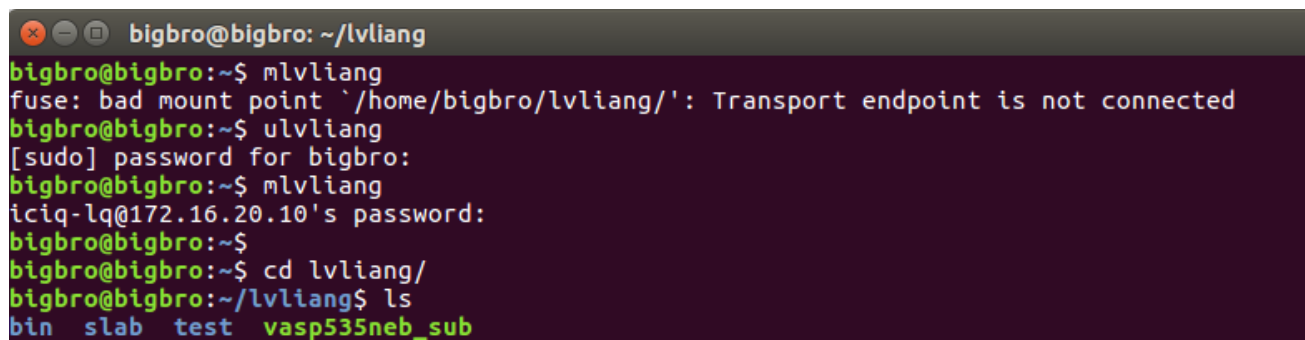
## 4) 注意事项:

- 1) 必须通过mlvliang这个命令将超算中心挂载到本地电脑上之后, 我们才可以互传文件。
- 2) 如果还没有挂载, 就将电脑的内容复制到lvliang这个文件夹中, 那么挂载之后, 服务器中不会显示刚刚复制的内容
- 3) 不要用鼠标点击电脑里面的文件夹查看文件, 这样会很慢, 只能使用命令!!! 切记!!!

- 4) 卸载的时候, 使用mlvliang 这个命令, 然后输入自己的电脑密码 (不是超算中心的了。)
- 5) 我们这样做, 相当于把超算中心当做一个移动硬盘来使用, 非常方便。

## 6 异常问题的处理

- 1) 挂载超算中心到本地电脑上的时候, 有时候因为网络连接, 会出现下图中的错误。这时候我们先使用 `ulvliang` 命令把超算中心卸载掉, 然后再重新挂载就可以了。



```
bigbro@bigbro: ~/lvliang
bigbro@bigbro:~$ mlvliang
fuse: bad mount point '/home/bigbro/lvliang/': Transport endpoint is not connected
bigbro@bigbro:~$ ulvliang
[sudo] password for bigbro:
bigbro@bigbro:~$ mlvliang
iciq-lq@172.16.20.10's password:
bigbro@bigbro:~$
bigbro@bigbro:~$ cd lvliang/
bigbro@bigbro:~/lvliang$ ls
bin  slab  test  vasp535neb_sub
```

- 2) 如果上面还解决不了的话, 可以尝试着先关机, 出去溜达一会儿, 然后回来再弄。或者找超算管理员解决。他们一般都很上心, 服务响应很快。

## 小结

本节就先介绍到这里, 大家可以通过这样的方式, 安装VPN, 连接以及挂载超算中心, 并将自己的文件上传到超算中心 (比如VASP的那一堆POTCAR文件, 自己的脚本, 任务文件等等)。先把准备工作做好, 下一节我们就可以提交任务进行计算了。