

# 超算服务器的使用

邹斌

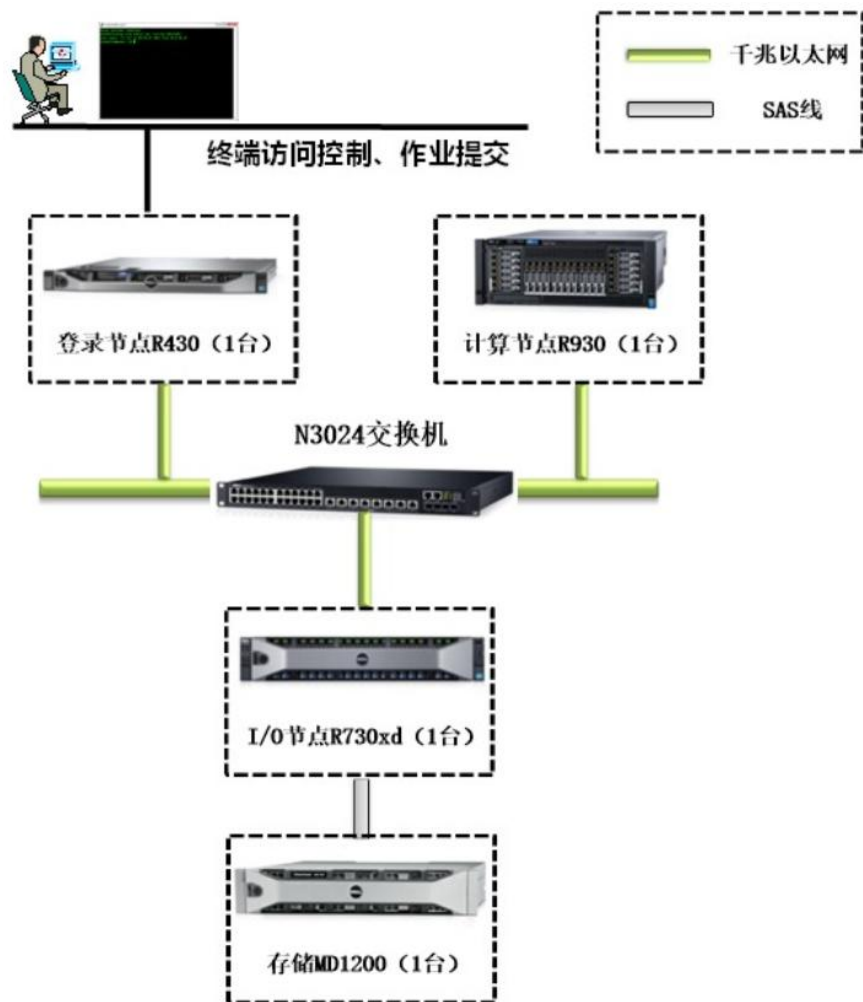


## 个人简介

2016级中山大学中山眼科中心分子医学方向博士研究生，导师魏来教授。本硕为兰州大学口腔医学。

近五年以第一或共一在Cell Discovery、Cancer Cell等杂志发表文章3篇，在PNAS、Cell等SCI期刊参与发表文章18篇。

主要研究方向为通过转录组、宏基因组、宏转录组、单细胞转录组、表观遗传组等生物信息学方法解决相关生物学问题。



注：c2,c3节点未标注，连接同计算节点。

节点	配置	内存	其他
login	E5-2630*2	64GB	
c0	E7-4802*4, 40 Cores	1TB	
c1	E5-2630*2, 20 Cores	128GB	GPU K40M
c2	E5-2660*2, 28 Cores	128GB	
c3	E5-2660*2, 28 Cores	128GB	
c4	E5-2650*2, 24 Cores	128GB	
c5	E5-2650*2, 24 Cores	128GB	
c6	E5-2650*2, 24 Cores	128GB	
c7	E5-2680*2, 28 Cores	256GB	GPU P40 * 2
c8	E5-2680*2, 28 Cores	256GB	GPU P40 * 2
c9	E5-2680*2, 28 Cores	256GB	GPU P40 * 2

## 服务器账号的创建与登陆

如有使用服务器的需求，联系中心平台管理员 陈江娜老师 申请账号，安装相关软件并加入平台服务器微信群。

账户按照课题组进行分配：

平台对每个课题组进行Group和账号ID创建，需添加公共平台陈江娜微信（13560251941）建立账户和密码。

组名统一为：楼层+PI名（大写首字母）

例如3楼魏来课题组设为3F\_WL

用户名统一为：楼层+PI名+个人名（小写首字母）

如：3楼魏来课题组邹斌3F\_WL\_zb

# 服务器登陆方法

## 1.常用软件：

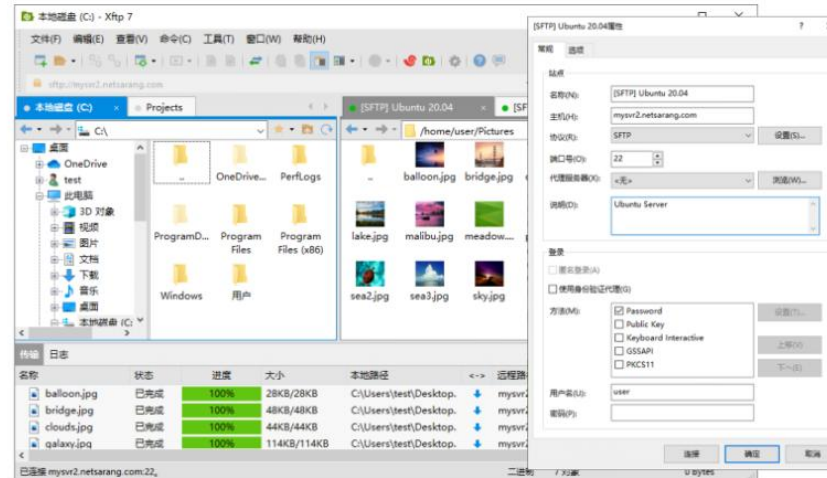
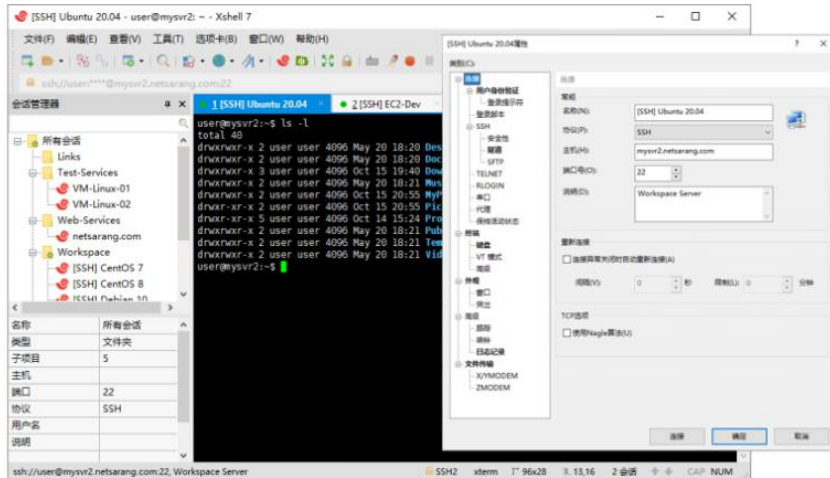
XSHELL XFTP



业界最强大的SSH客户机



轻松地通过网络传输文件

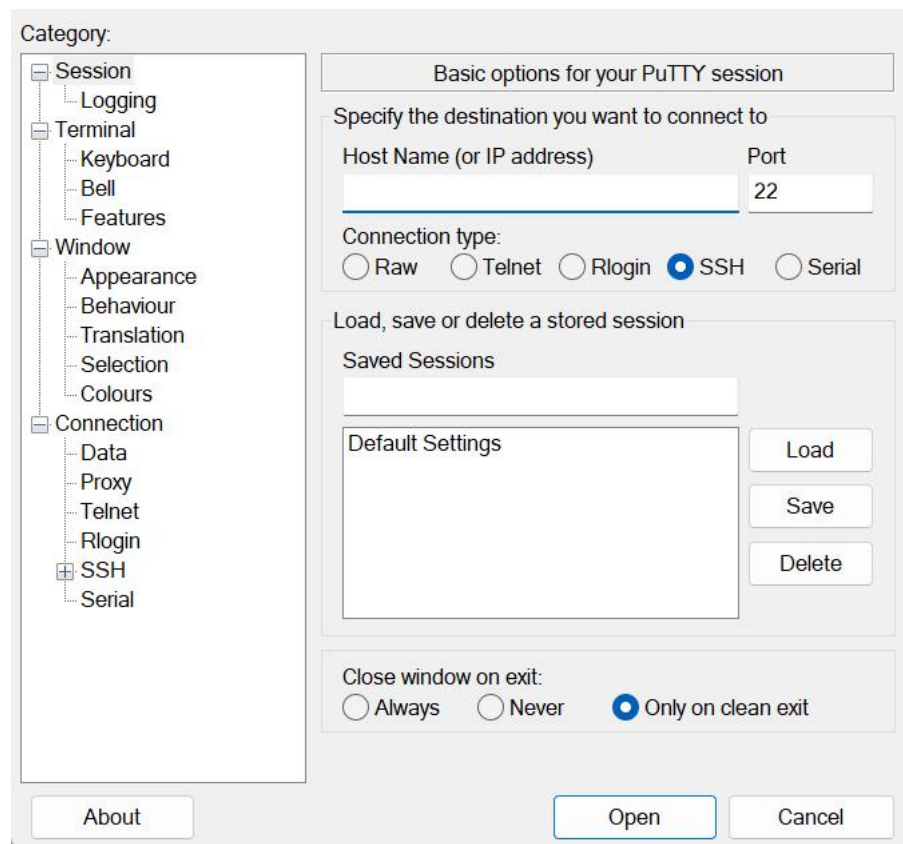


下载地址：<https://www.xshell.com/zh/free-for-home-school/>

# 服务器登陆方法

## 1.常用软件：

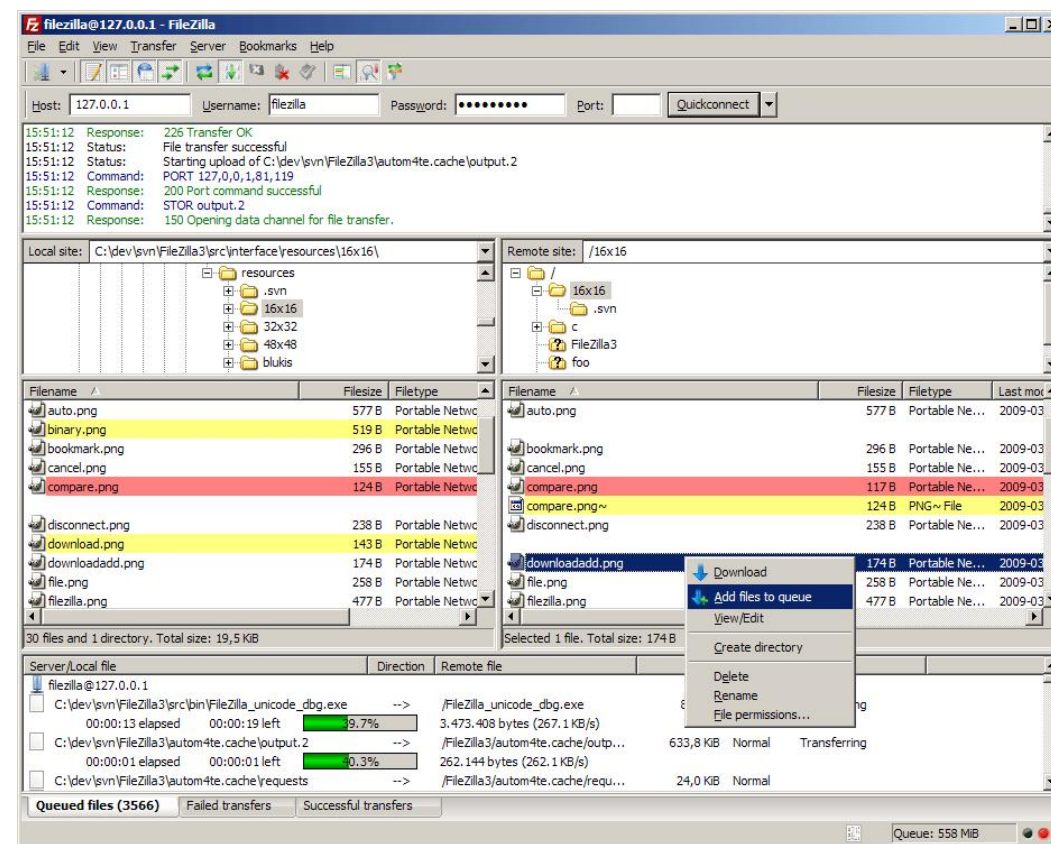
### Putty



<https://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/latest.html>

### FileZilla

The free FTP solution



<https://filezilla-project.org/download.php?type=client>



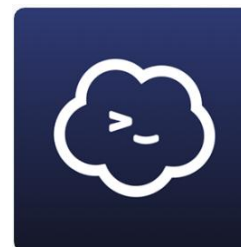
## 服务器登陆方法

1.常用软件：

其他推荐：

SSH类 Mobaxterm

SFTP类 WinSCP、CuteFTP



Termius - Modern PuTTY | SSH | SFTP  
| Telnet

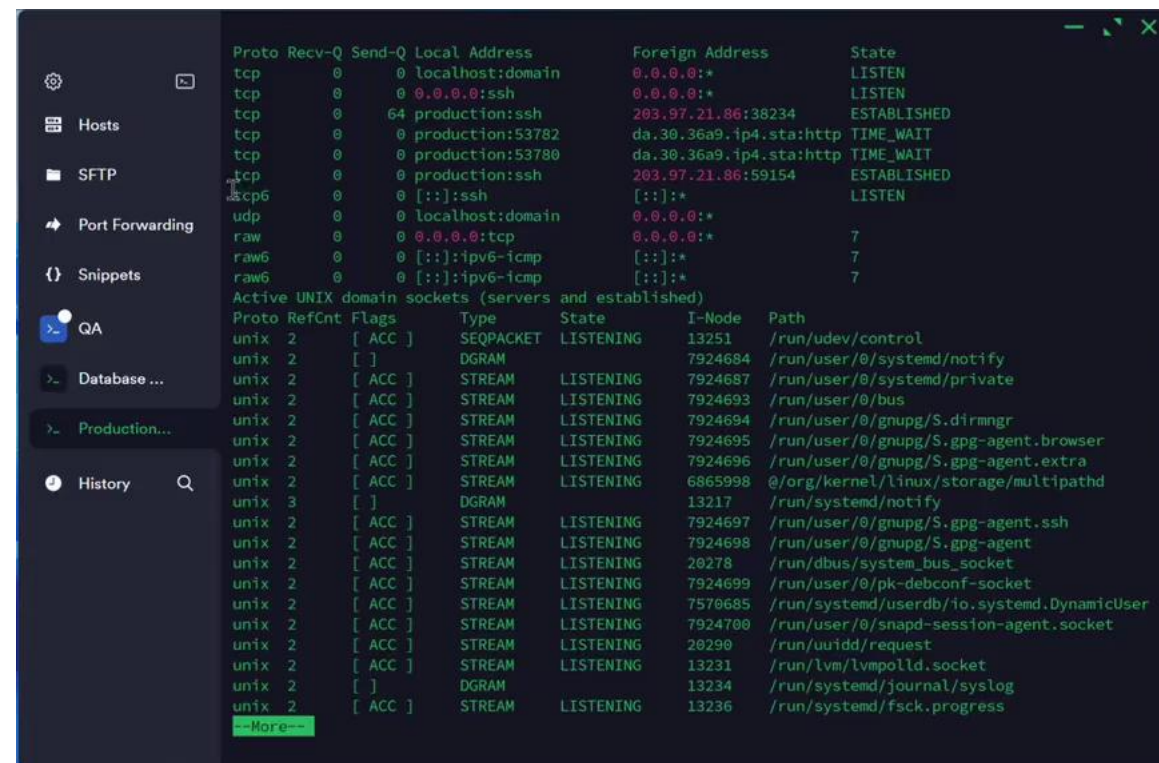
Termius Corporation

4.8 ★

平均

254

评论数



## 代码编辑器 Visual Studio Code

The image shows the Visual Studio Code website on the left and a screenshot of the Visual Studio Code application running on the right.

**Visual Studio Code Website:**

- Header: Visual Studio Code, Docs, Updates, Blog, API, Extensions, FAQ, Learn, Search Docs, Download.
- Message: Version 1.75 is now available! Read about the new features and fixes from January.
- Section: Code editing. Redefined.
- Text: Free. Built on open source. Runs everywhere.
- Buttons: Download for Windows (Stable Build), Web, Insiders edition, or other platforms.
- Text: By using VS Code, you agree to its license and privacy statement.

**Visual Studio Code Application Screenshot:**

- File Explorer: Extensions: Marketplace, @sortinstalls.
- Search Bar: @sortinstalls.
- Extension List:
  - Python 2019.6.24221 54.9M ★ 4.5 (Install)
  - GitLens — Git sup... 9.8.5 23.1M ★ 5 (Install)
  - C/C++ 0.24.0 23M ★ 3.5 (Install)
  - ESLint 1.9.0 21.9M ★ 4.5 (Install)
  - Debugger for Ch... 4.11.6 20.6M ★ 4 (Install)
  - Language Supp... 0.47.0 18.7M ★ 4.5 (Install)
  - vscode-icons 8.8.0 17.2M ★ 5 (Install)
  - Vetur 0.21.1 17M ★ 4.5 (Install)
  - C# 1.21.0 15.6M ★ 4 (Install)
- Code Editor: JS serviceWorker.js, src > JS serviceWorker.js > register > window.addEventListener('load') callback.
- Terminal: 1: node. You can now view create-react-app in the browser. Local: http://localhost:3000/. On Your Network: http://10.211.55.3:3000/. Note that the development build is not optimized.
- Status Bar: master, 0 errors, 0 warnings, 0 info, Ln 43, Col 19, Spaces: 2, UTF-8, LF, JavaScript.



# 服务器登陆方法

2.登陆方法：Xshell为例  
中心平台服务器IP地址为 10.100.100.1

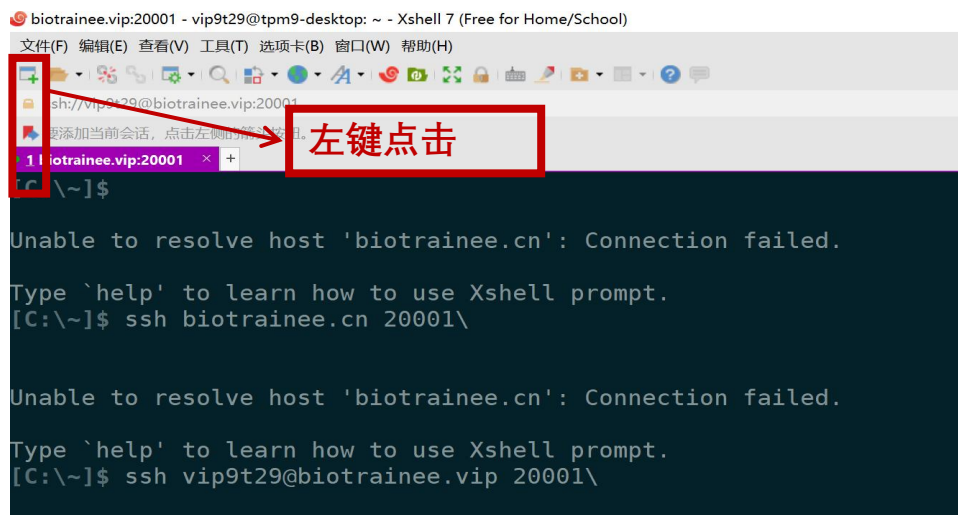
## 登入服务器条件



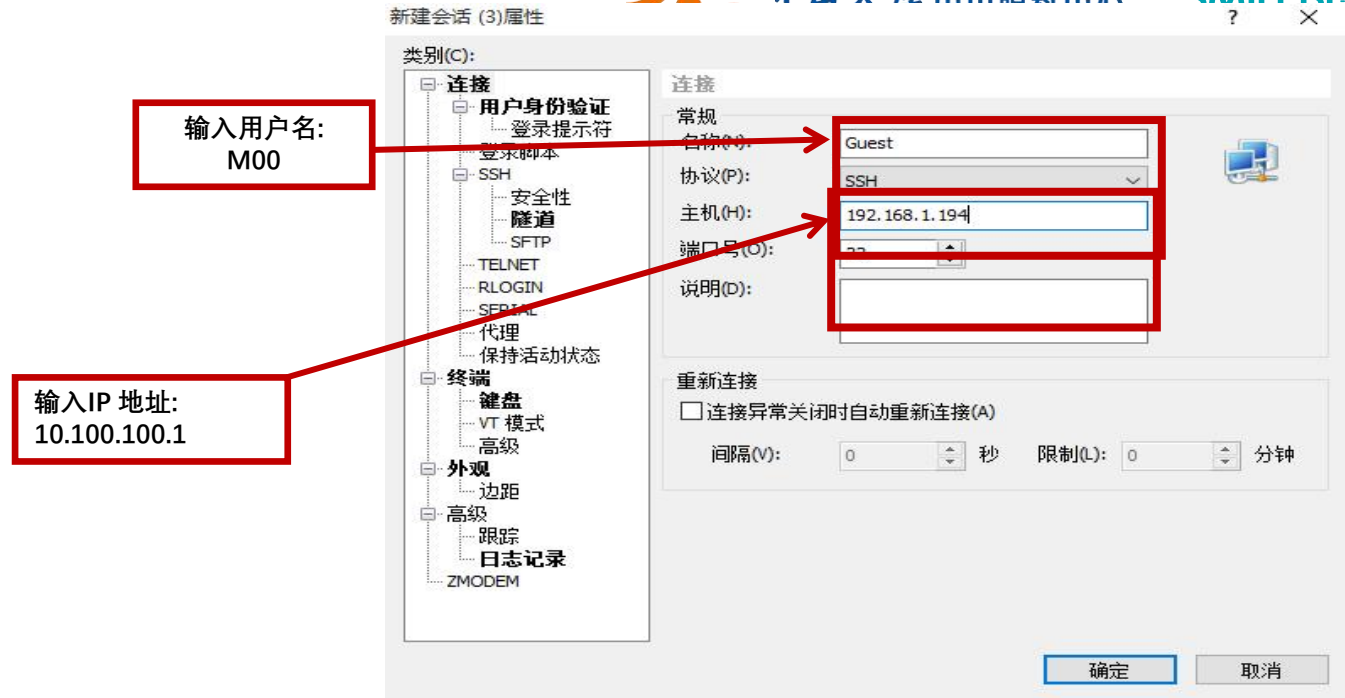
## 打开terminal



## 新建登录窗口



## □ 输入服务器的IP地址和用户名



## □ 输入用户名和密码



## 服务器登陆方法

### Putty

Category:

- Session
  - Logging
- Terminal
  - Keyboard
  - Bell
  - Features
- Window
  - Appearance
  - Behaviour
  - Translation
  - Selection
  - Colours
- Connection
  - Data
  - Proxy
  - Telnet
  - Rlogin
  - SSH
  - Serial

Basic options for your PuTTY session

Specify the destination you want to connect to

Host Name (or IP address)	Port
10.100.100.1	22

Connection type:

☐ Raw ☐ Telnet ☐ Rlogin ☒ SSH ☐ Serial

Load, save or delete a stored session

Saved Sessions

眼科中心
Default Settings
眼科中心

Load Save Delete

Close window on exit:

☐ Always ☐ Never ☒ Only on clean exit

About Open Cancel

Category:

- Session
  - Logging
- Terminal
  - Keyboard
  - Bell
  - Features
- Window
  - Appearance
  - Behaviour
  - Translation
  - Selection
  - Colours
- Connection
  - Data
  - Proxy
  - Telnet
  - Rlogin
  - SSH
  - Serial

Options controlling the connection

Sending of null packets to keep session active

Seconds between keepalives (0 to turn off) 0

Low-level TCP connection options

☒ Disable Nagle's algorithm (TCP\_NODELAY option)

☐ Enable TCP keepalives (SO\_KEEPALIVE option)

Internet protocol version

☒ Auto ☐ IPv4 ☐ IPv6

Logical name of remote host

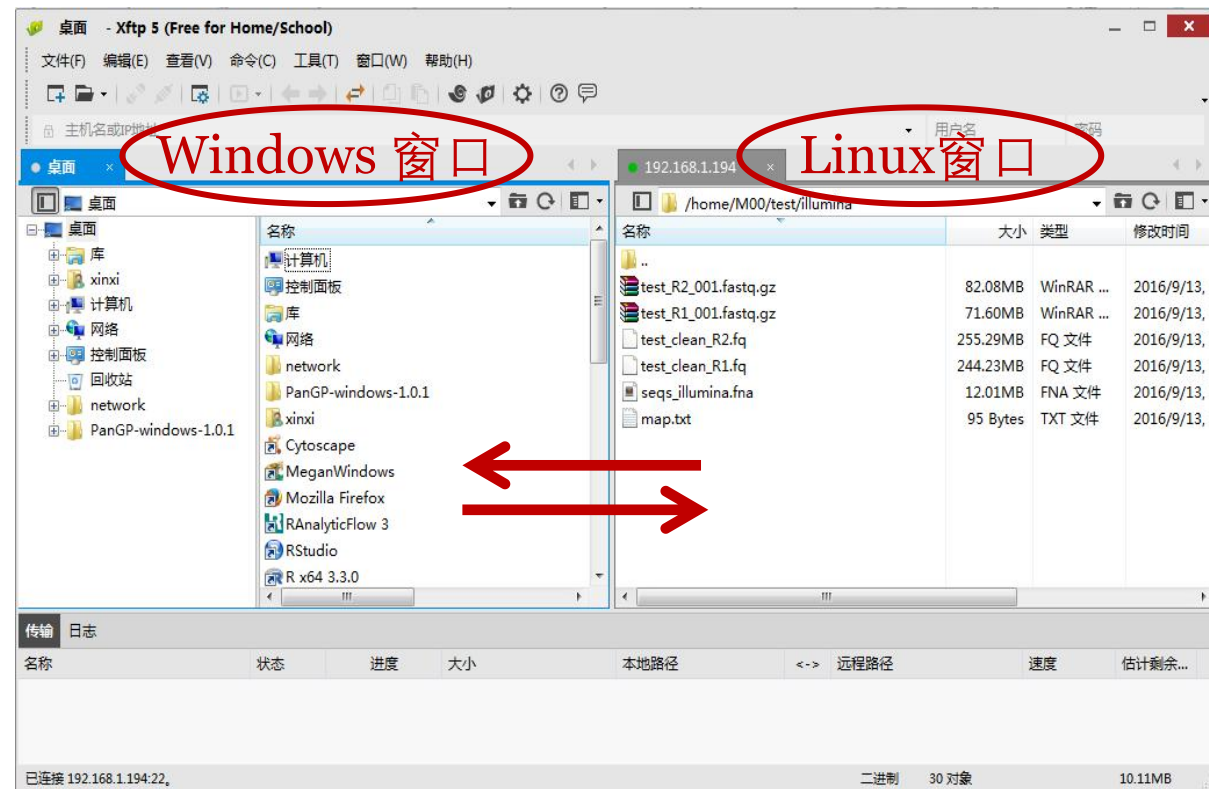
Logical name of remote host (e.g. for SSH key lookup):

About Open Cancel

# Linux服务器数据传输

## 文件传输

```
GongpeiW - GongpeiW@login:~ - Xshell 7 (Free for Home/School)
文件(F) 编辑(E) 查看(V) 工具(T) 选项卡(B) 窗口(W) 帮助(H)
ssh://GongpeiW@10.100.100.1:22
要添加当前会话，点击左侧的箭头按钮。
1 biotraine.vip:20001 2 GongpeiW x +
Xshell 7 (Build 0090)
Copyright (c) 2020 NetSarang Computer, Inc. All rights reserved.
Type `help` to learn how to use Xshell prompt.
[C:\~]$
Connecting to 10.100.100.1:22...
Connection established.
To escape to local shell, press Ctrl+Alt+].
Last login: Tue Jul 26 18:48:43 2022 from 10.101.14.115
(base) [GongpeiW@login ~]$
```



## Termius内置了SFTP功能

The screenshot displays the Termius application interface. On the left sidebar, the 'SFTP' option is highlighted with an orange box. The main area shows two file explorer windows. The left window is titled 'Local' and displays the contents of the C: drive. The right window is titled '南沙服务器' (Nansha Server) and displays the contents of the server, including folders like '收藏夹' (Favorites) and 'Default'.

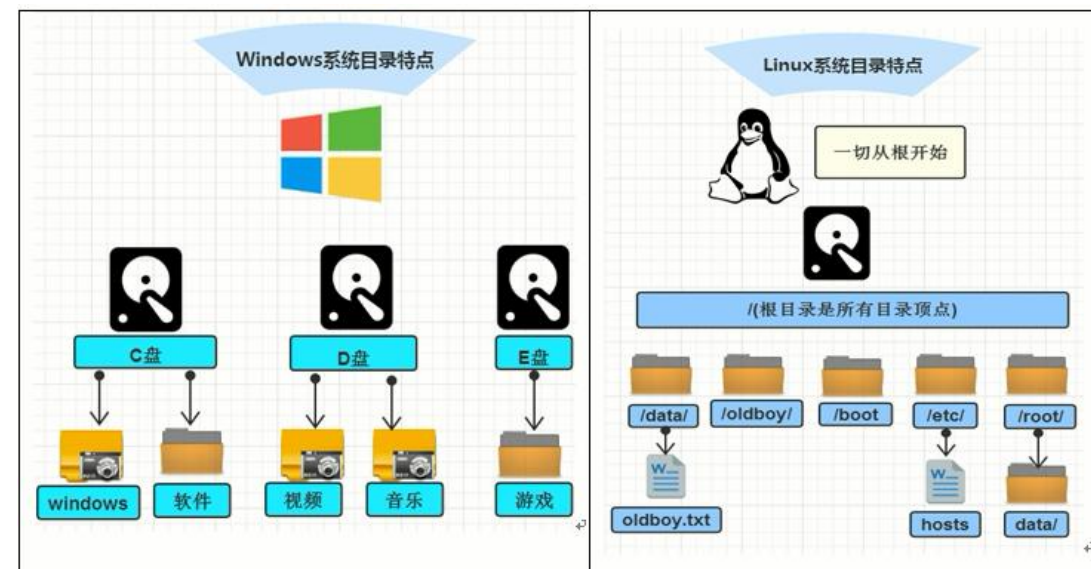
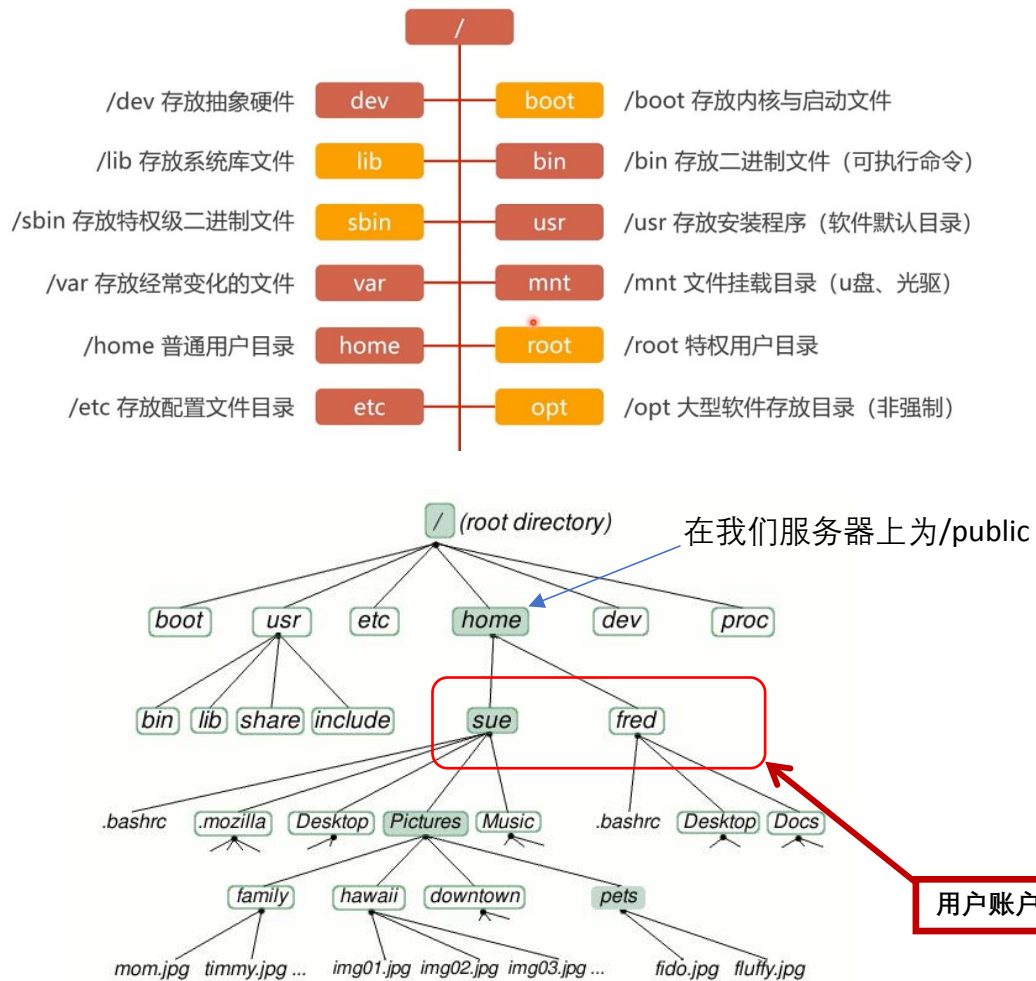
Name	Date Modified	Size	Kind
..			
\$Recycle.Bin	10/22/2021, 5:36 ...	--	folder
\$WINDOWS.-BT	11/19/2022, 2:51 PM	--	folder
\$Windows.-WS	11/19/2022, 2:51 PM	--	folder
\$WinREAgent	1/11/2023, 7:21 AM	--	folder
AMD	9/15/2021, 6:13 AM	--	folder
Autodesk	12/10/2021, 2:55 ...	--	folder
ESD	11/19/2022, 4:57 ...	--	folder
GstarSoft	12/30/2021, 2:08 ...	--	folder
OneDriveTemp	10/23/2021, 11:51 ...	--	folder
Program Files	2/22/2023, 11:17 ...	--	folder
Program Files (x86)	1/28/2023, 3:23 PM	--	folder
ProgramData	1/6/2023, 2:57 PM	--	folder
rtools40	10/26/2021, 4:18 ...	--	folder
UserGuidePDF	8/2/2021, 4:54 PM	--	folder
Users	9/25/2022, 7:35 ...	--	folder

Name	Date Modified	Size	Kind
收藏夹 dr--r--r--	2/22/2023, 2:05 ...	--	folder
Default dr--r--r--	2/22/2023, 2:05 ...	--	folder



# Linux服务器系统结构

## Linux目录结构



Windows账户：C:\Users\ WANG Gongpei

## 邹斌， JumpServer 开源堡垒机

- 1) 输入 部分IP, 主机名, 备注 进行搜索登录(如果唯一)。
- 2) 输入 / + IP, 主机名, 备注 进行搜索, 如: /192.168.
- 3) 输入 p 进行显示您有权限的主机。
- 4) 输入 g 进行显示您有权限的节点。
- 5) 输入 d 进行显示您有权限的数据库。
- 6) 输入 k 进行显示您有权限的Kubernetes。
- 7) 输入 r 进行刷新最新的机器和节点信息。
- 8) 输入 s 进行中英日语言切换。
- 9) 输入 h 进行显示帮助。
- 10) 输入 q 进行退出。

Opt> login

复用SSH连接 (岐微超算\_邹斌@172.23.14.200) [连接数量: 2]

Last login: Wed Feb 22 11:36:43 2023 from 172.23.14.100

[bin.zou@Manage 11:45] ~ \$



用户名



节点名



工作目录



Hosts



SFTP



Port Forwarding



Snippets



南沙服务器



History



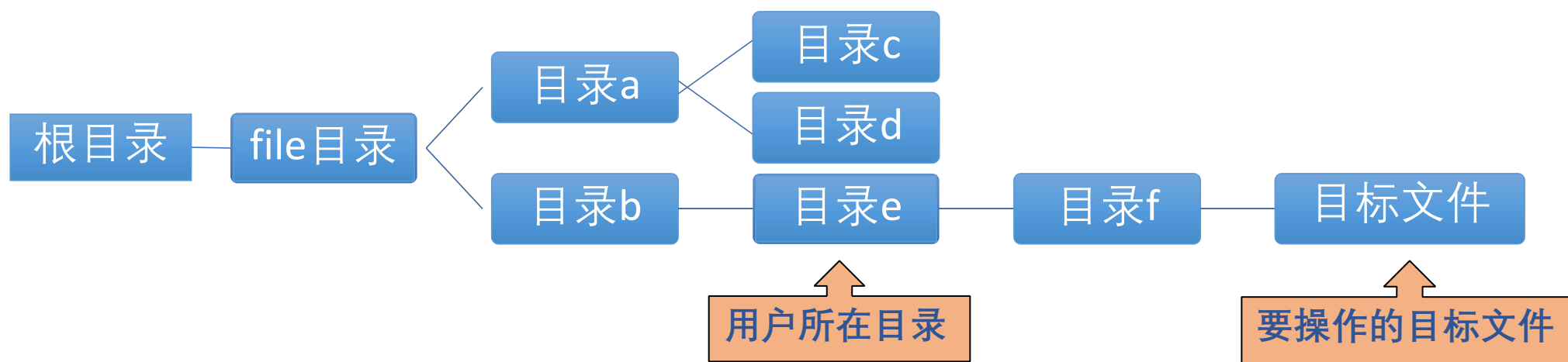
南沙服务器

## 基本概念一：路径

□ 路径：对文件或目录位置的描述

绝对路径：从根目录开始的对文件或目录所在路径的完整描述。如：/根目录/file目录/目录b/目录e/目录f/目标文件

相对路径：对于用户自己，从当前目录开始的目标文件的位置描述。如：目录e/目录f/目标文件



访问目录d下的文件：

绝对路径：/file目录/目录a/目录d/文件 相对路径：../a目录/d目录/文件

# Shell基础命令

目录相关操作	命令	文件相关操作	命令	管理命令	命令
新建目录	mkdir	创建/修改文件	nano	更改权限	chmod
删除目录	rmdir	查看文件内容	cat、less、 more、tail	显示系统信息	uname
查看所在绝对 路径	pwd	重命名/移动文 件	mv	显示系统进行 信息	top
进出（切换） 目录	cd	拷贝	cp	终止命令	kill
查看目录内容	ls、ll	删除	rm	后台挂载	nohup &
文本处理	split、cut	压缩/解压缩	gzip/tar	查看后台任务	jobs
显示磁盘/文件 大小	df/du	查找/检索	find/grep	前后台进程的 切换与控制	fg

## 基本命令一：创建与删除目录

### □ 创建目录----mkdir

mkdir (make directory) 在当前目录下创建一个新目录

**使用说明：** mkdir [参数] 目录名称

eg：mkdir text                   表示创建了一个名为text的目录

mkdir -p text/tmp               一次可建多层目录

mkdir tmp1 tmp2 tmp3   表示在当前目录下创建了tmp1,tmp2,tmp3三个子目录

### □ 删除目录----rmdir

rmdir 用来删除一个空目录，非空目录则删除失败

**使用说明：** rmdir [参数] 目录名称

eg: rmdir tmp1   表示删除目录tmp1

强制删除：rm -f



## 基本命令二：切换目录

### ▣ 目录切换命令-----cd

cd 是 change directory 的简称，其功能将当前目录转换至所指定的目录，若没有指定directory，则回到用户的主目录。

eg : cd ..          表示切换到上一层目录  
     cd /            表示切换到根目录  
     cd ~            表示切换到用户的主目录  
     cd ~/xxx/       表示切换到主目录下的xxx目录

备注：输入目录或文件开头部分，然后按Tab键进行名称补全，Linux就会根据输入的字母自动查找以这些字母开头的目录或文件。

## 基本命令三：路径查看

### ▣ 查看绝对路径命令----pwd

说明：pwd是Print Working Directory，显示当前目录下的绝对路径

一般格式：pwd

eg：/home/Guest/xxxtext/tmp3

## 基本命令四：查看目录中的内容

### ▣ 列出文件目录----ls

说明：ls 是list，其功能是列出指定目录的内容

一般格式：ls [参数][目录或文件]

ls:不接对象，表示列出当前目录下的目录或文件名称

ls -l:参数l，表示列出当前目录下的目录或文件详细信息（同 ll）

ls -a 列出该目录下的所有内容，包括以“.”开头的隐藏文件。

## 基本命令五：文件的创建与编辑

### ▣ 创建文件----touch

touch file 新建文件名为file的文件

### ▣ 编辑文件----nano

nano file

若文件名不存在，则创建文件并编辑文件内容

若文件名存在，则可对文件进行修改

复制：Ctrl + 6， 剪切：Ctrl + k， 黏贴：Ctrl + u

退出：Ctrl+X, 询问是否要保存文件，选择y保存，n 不保存，c 取消

## 基本命令六：文件复制

### ▣ 复制文件----cp

cp是copy简写，复制文件，把一个文件从一个文件路径下复制到另一个路径下

**使用说明：**cp <要拷贝的文件> <目标路径>

eg:

cp /home/Guest/tmpfile/text.txt . #表示将test.txt复制到当前目录

cp -r /home/Guest/tmpfile . #-r表示将目录tmpfile下的所有文件及子目录都复制到当前目录下

cp /home/Guest/tmpfile/\* ../tmp2/ # \*表示任意内容

## 基本命令七：移动或重命名文件

### ▣ 移动或重命名文件----mv

mv 命令对文件或目录重新命名，或将文件从一个目录移到另一个目录下

**一般格式**：mv 源文件或目录 目标文件或目录

eg:

```
mv text.txt tmp3/ #将文件text.txt移动到文件夹tmp3中
```

```
mv text1.txt text2.txt #将文件text1.txt名称修改为text2.txt
```



## 基本命令八：查看文件

▣ 查看文件----more、less、cat

more命令：more [参数] 文件

more file.txt #在终端屏幕显示file.txt的内容。

less命令：less [参数] 文件

less -N -S file.txt #同more命令一样，q键退出。

cat命令：cat [参数] 文件

cat file.txt #显示文件内容。

cat -n file.txt #文件内容每行前显示行号

cat 命令还有其他功能：

cat file1 >> file2 #将file1文件的内容添加到file2文件中

head命令：head [参数] 文件

显示指定文件的前若干行，默认值为10

head -4 file.txt 显示file.txt中的前4行

tail命令：tail [参数] 文件

输出文件内容后面的部分，默认值为10

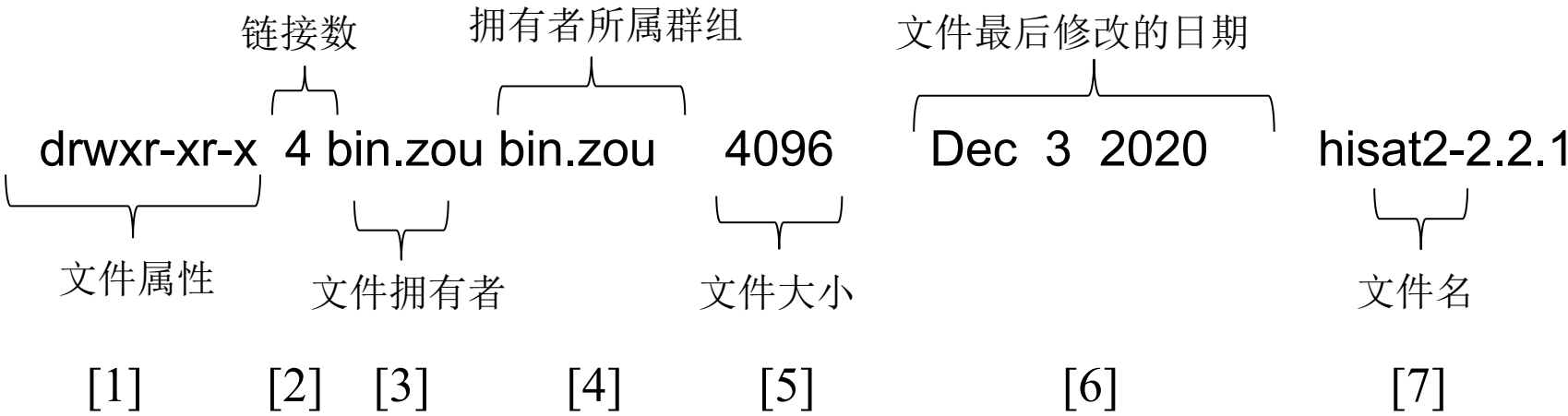
tail -4 file.txt 显示文件file.txt中的最后4行

# 基本命令十一：文件权限的概念及修改

## 修改文件权限----chmod

```
[bin.zou@Manage 13:58] Software $ ll
total 34240
drwxrwxr-x 28 bin.zou bin.zou      4096 Aug 19  2022 anaconda3
drwxr-xr-x  4 bin.zou bin.zou      4096 Dec  3  2020 hisat2-2.2.1
-rw-rw-r--  1 bin.zou bin.zou 35050467 Aug 23  2022 hisat2-2.2.1-Linux.zip
```

文件类型	属主权限			属组权限			其他用户权限		
0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
d	rwx			r-x			r-x		
目录文件	读	写	执行	读	写	执行	读	写	执行



## □ 修改文件权限----chmod

文件或目录的访问权限分为只读、只写和可执行三种。

有三种不同类型的用户可对文件或目录进行访问：文件所有者，同组用户、其他用户。

每一文件或目录的访问权限都有三组，每组用三位表示，分别为文件所有者的读、写和执行权限；与文件所有者同组的用户的读、写和执行权限；系统中其他用户的读、写和执行权限。

r：读权限， 4

-drwxr--r-- (744)

w: 写权限， 2

X: 执行权限， 1

文件所有者属性    同组用户属性    其他用户属性

文件 类型	属主 权限			属组 权限			其他用户 权限		
0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
<b>d</b>	<b>rwX</b>			<b>r-X</b>			<b>r-X</b>		
目录 文件	读	写	执行	读	写	执行	读	写	执行

修改访问权限格式：chmod 777 myfile

## 服务器软件的调用

目前服务器软件有三类：

### 1. module系统

需root权限或常用软件调用使用 `module` 系统，具体可调用的软件列表使用 '`module avail`' 命令查看，然后使用 '`module load`' 软件名/版本号 加载至环境变量中使用。`module unload` 命令可取消加载。`module list` 可查看已加载的软件名。

### 2. conda系统

部分软件和系统软件版本冲突或较难安装软件需使用conda环境调用  
具体使用：首先需将 conda 加载至环境变量  
`export PATH="/public/biodata/software/anaconda3/bin:$PATH"`

### 3. 个人软件（无需安装权限的）

安装在服务器 `/public/biodata/software` 或个人目录下  
可自行使用 `export PATH` 加载至个人环境变量使用

## 服务器任务管理系统及使用方法

目前服务器使用PBS任务管理系统，所有计算任务均需使用任务管理系统提交至计算节点运行，**严禁在登陆节点直接处理数据**，如在登陆节点运行任务将kill相关进程。

PBS 是开源代码的作业管理系统，在此环境下运行，用户不需要指定程序在哪些节点上运行，程序所需的硬件资源由PBS 管理和分配

常用命令：

**qsub 命令**—用于提交作业脚本

**qstat 命令**—用于查询作业状态信息

**qdel 命令**—用于删除已提交的作业



## PBS 脚本文件的编写

PBS 脚本文件由脚本选项和运行脚本两部分组成的文本文件。

脚本选项：

1. `#!/bin/bash`
2. `#PBS -N twins-01-26-RNA` 任务名称
3. `#PBS -e $PBS_JOBNAME.$PBS_JOBID.e` 标准输出和错误输出
4. `#PBS -o $PBS_JOBNAME.$PBS_JOBID.o`
5. `#PBS -m ae` 通知的内容
6. `#PBS -M zoub6@mail2.sysu.edu.cn` 通知的邮箱地址
7. `#PBS -l nodes=c3:ppn=8,mem=30GB,walltime=200:00:00` 资源调度选项

```
1  #!/bin/bash
2  #PBS -N twins-01-26-RNA
3  #PBS -e $PBS_JOBNAME.$PBS_JOBID.e
4  #PBS -o $PBS_JOBNAME.$PBS_JOBID.o
5  #PBS -m ae
6  #PBS -M zoub6@mail2.sysu.edu.cn
7  #PBS -l nodes=c3:ppn=8,mem=30GB,walltime=200:00:00
8  #PBS -V
9  source activate zoubin-py36
10 rawdata_dir=/public/users/zoubin/twins/matched_conjunctiva_samples/RNA
11 cleandata_dir=/public/users/zoubin/Project_twins/clean_data/RNA
12 cd /public/users/zoubin/Project_twins/clean_data/RNA
13 for file in $(cat name_list)
14 do
15 #QC
16 cutadapt -a AGATCGGAAGAGC -A AGATCGGAAGAGC \
17 -j 8 -q 30,30 -m 32 --trim-n -O 5 --max-n=3 \
18 -o ${cleandata_dir}/${file}.R1.trimmed.fastq.gz -p ${cleandata_dir}/${file}.R2.trimmed.fastq.gz \
19 ${rawdata_dir}/${file}.R1.fastq.gz ${rawdata_dir}/${file}.R2.fastq.gz
20 done
```

保存为一个文本文件(例如aaa.pbs)，并上传服务器。

## 提交作业示例

切换到任务文件所在目录，输入命令行：`qsub aaa.pbs`

提交任务后，可以使用`qstat` 命令查看任务运行情况，如运行时间等。  
使用`pbstop`命令可以直观的看到服务器所有节点任务运行情况。

如遇到任务异常，可使用`qdel`命令加任务编号删除运行中的任务。

## 使用服务器提交R语言程序

```
#!/bin/bash

#PBS -N Seurat
#PBS -e $PBS_JOBNAME.$PBS_JOBID.e
#PBS -o $PBS_JOBNAME.$PBS_JOBID.o
#PBS -m ae
#PBS -M zoubin@gzzoc.com
#PBS -l nodes=c9:ppn=24,mem=210GB,walltime=500:00:00
#PBS -q gpu

source activate sc_env

cd /public/users/zoubin/10X/Prof_Ding/Seurat_results/Second_round

Rscript seurat_pipeline.R
```

谢谢大家！