单细胞中心
高性能计算平台用户指南
CSCOmics-HPC User Guide

单细胞中心生物信息学平台
逐码科技 SimpleHPC

目录
Contents

一、集群概况

Part 1. Cluster overview

集群概况
Cluster overview

- 目前集群由11台Dell服务器组成 (11 Dell servers in total)

  - 管理节点1台 （CentOS 7.6）(1 Management node)

    主要作用：运行集群用户认证、作业调度、存储挂载等服务，并向用户提供登录及提交作业的功能。(Function: login, submit SLURM jobs)

  - 计算节点8台 （CentOS 7.6）(8 Compute nodes)

    主要作用：运行用户提交的作业，进行计算任务。(Function: run jobs)

  - 存储节点2台 （CentOS 7.6）(2 storage nodes)

    主要作用：存储数据，向其他节点提供存储挂载的服务。(Function: mount directories, store amounts of data)

集群概况
Cluster overview

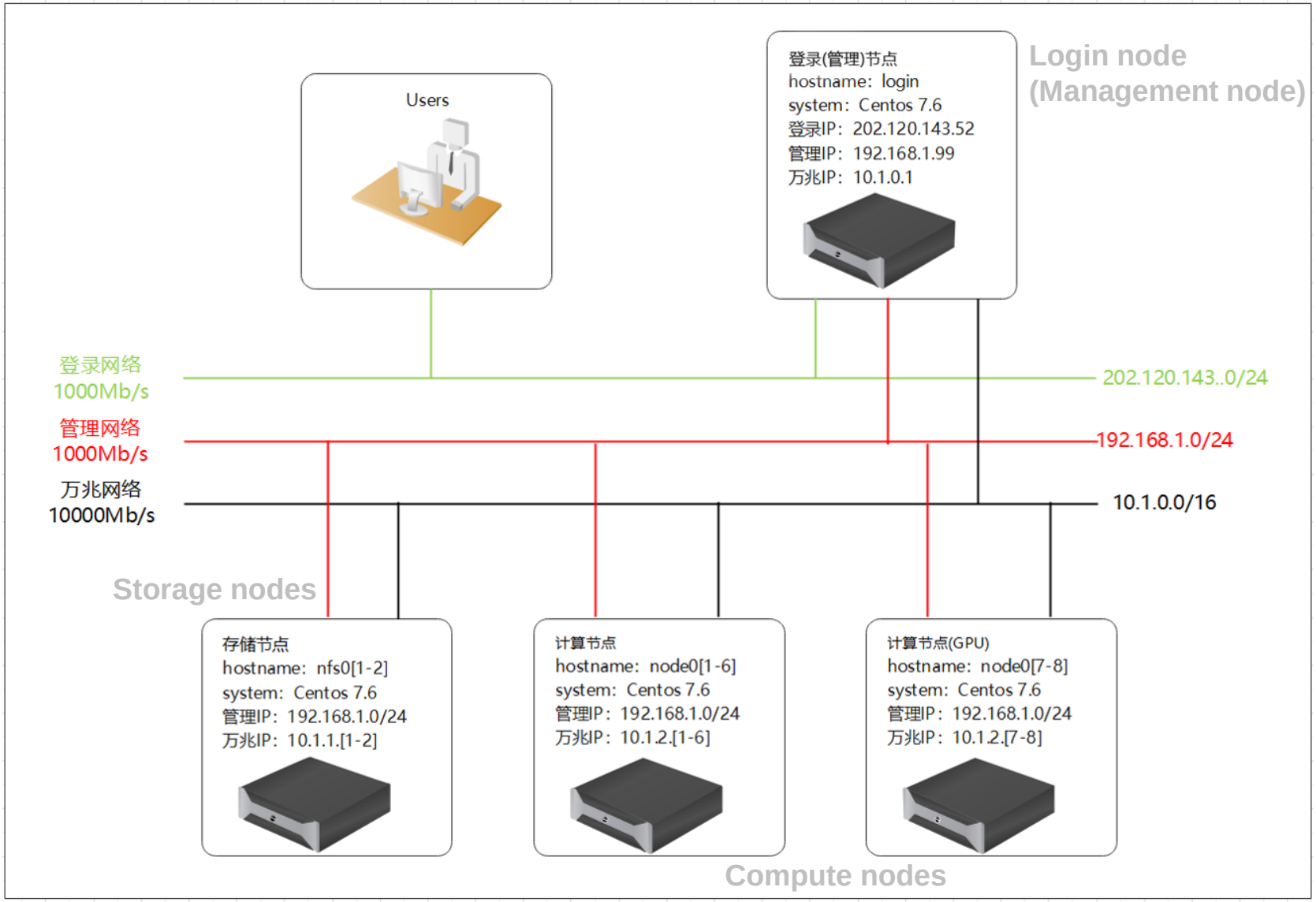
节点 Node	功能分类 Function	型号 Type	数量 Number	CPUs	Memory	GPU
管理节点 Management node	服务+登录节点	PowerEdge R740xd	1	6	64G	/
计算节点 Compute node	cpu节点	PowerEdge MX740c	6	80	512G	/
	gpu节点	PowerEdge R740	2	80	1T	NVIDIA Corporation Tesla V100 * 2 16GB
存储节点 Storage node	存储节点	使用beegfs向集群提供1.5P存储挂载空间				

集群概况

Cluster overview

网络架构

Network Topology



相关存储路径
Cluster directories

- 集群统一存储 (Master directory)
  /cluster

- 软件存储 (Software directory)
  /cluster/apps

- 用户家目录 (Home directory)

  /cluster/home

二、服务器登录

Part 2. Server login

登录方式

Login (in campus)

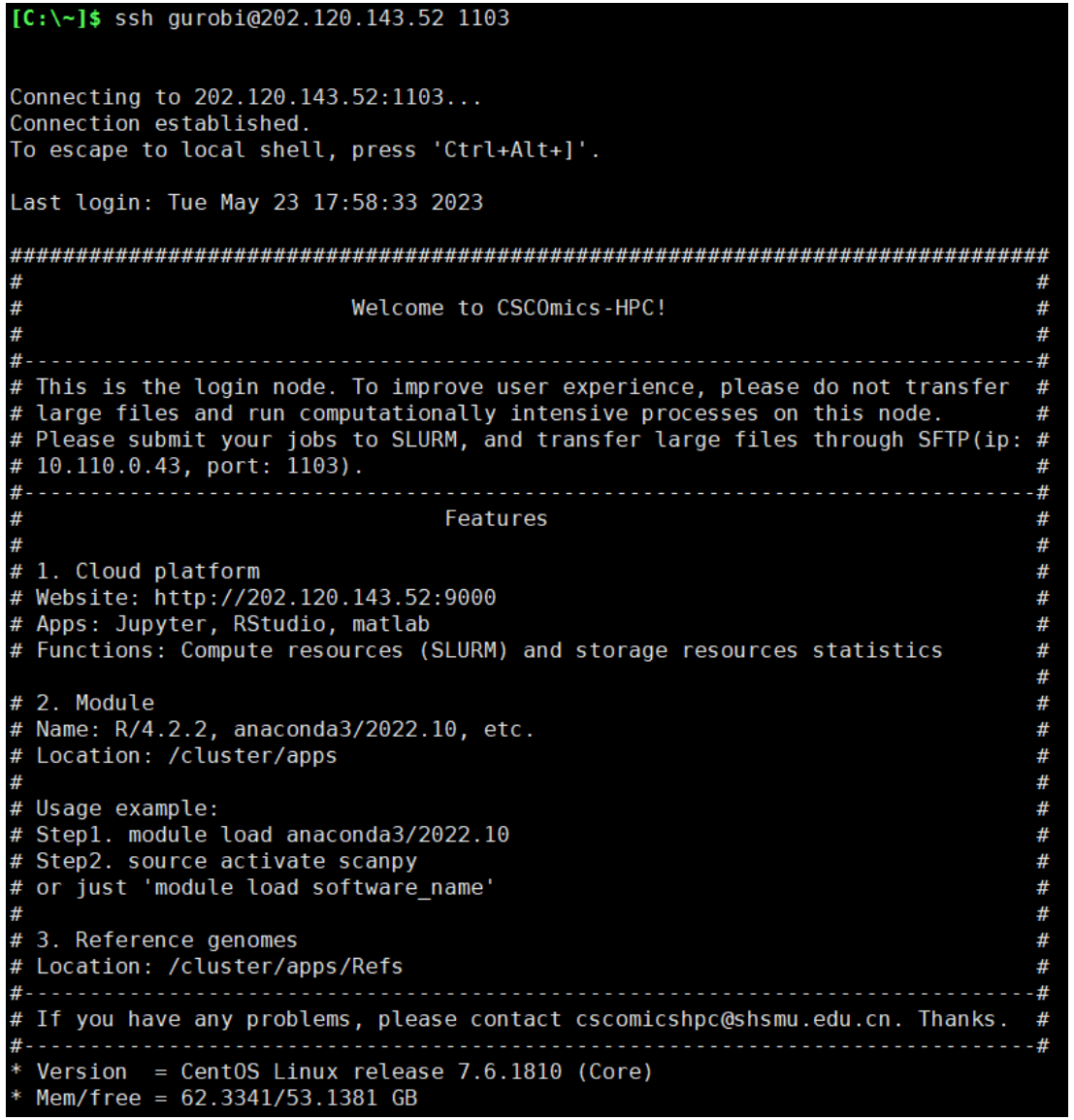
- Windows (Xshell)

  使用终端软件，SSH登录，输入IP、端口号（port）和密码。

- Mac (iterm2)

  方法同上。端口号前面加参数“-p”。

*医学院师生在校外需要先连接VPN才能访问服务器。



登录方式

Login (for users from other institutions)

- 连接vpn后，登录堡垒机，在主机运维里ssh连接登录节点

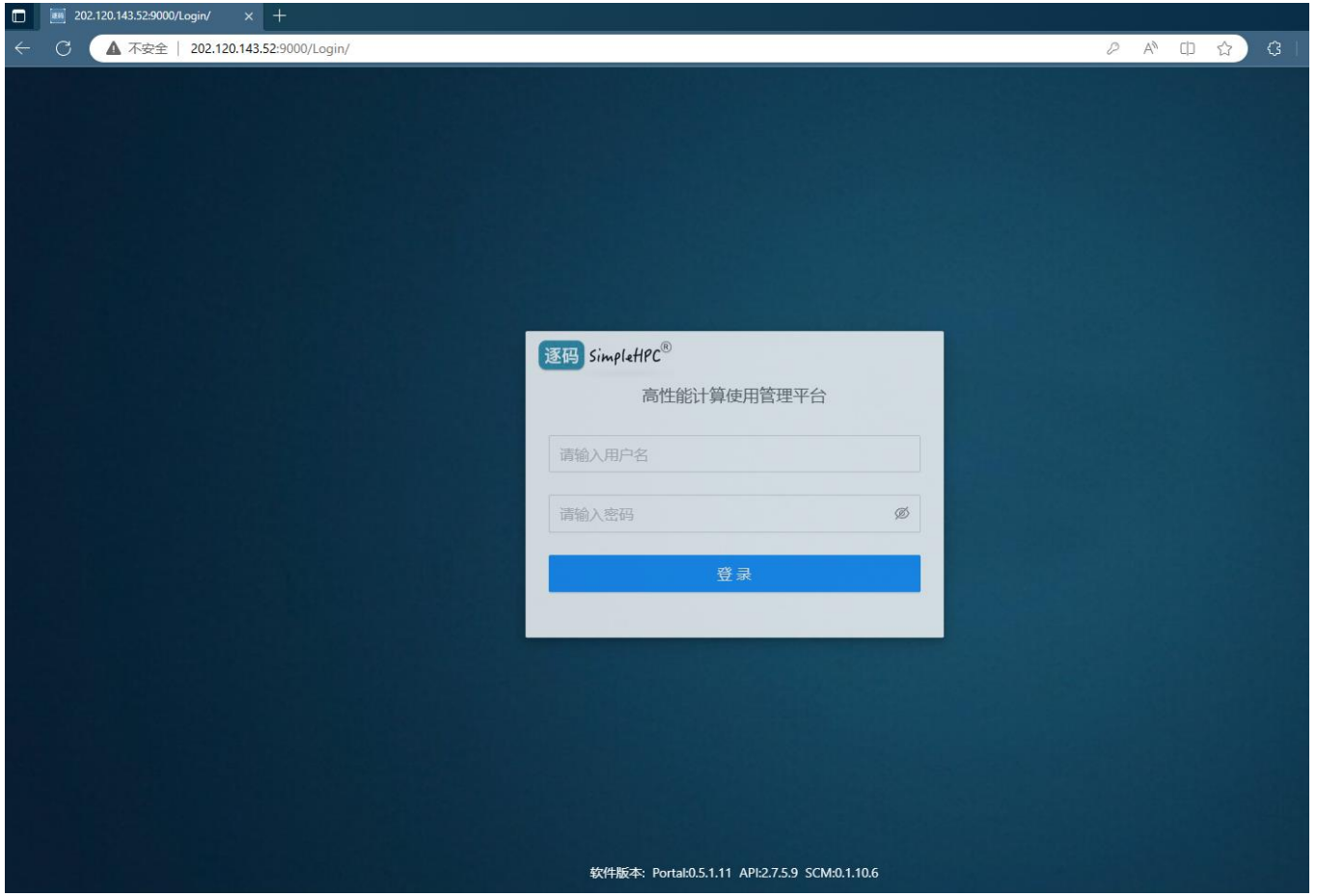
First, connect to vpn, then log in to the bastion host, choose “host” and click computer icon (will start a local client) or earth icon (will open a webpage).

名称	地址	类型	访问方式
SFTP传输文件专用节点	10.110.0.43	Linux	[SFTP] [EMPTY]
单细胞中心服务器登录节点	202.120.143.52	Linux	[SSH] [EMPTY]

登录方式

Login (to cloud platform, for all users)

- 也可以连接云平台 (http://202.120.143.52:9000)



三、软件环境管理

Part 3. Software environment management

Module版本控制

Environment Modules

- module 是 linux 下的一个用来管理不同环境的软件，每个用户所需要的环境不同，并且需要在软件的不同版本之间切换，module就可以方便的管理当前用户所处的环境。
- module is a user interface to the Modules package. The Modules package provides for the dynamic modification of the user's environment via modulefiles.

Module版本控制

Environment Modules

- 查看当前可用公共软件 (list available modules)

  module av

```
[root@login ~]# module av

------------------------------------------------------------------ /cluster/apps/modulefiles -------------------------
10XGenomics/cellranger/7.1.0      demuxlet/2017                java/19.0.2                  R/4.2.2
10XGenomics/cellranger-arc/2.0.2  fastp/0.21.0                 jupyter                      samtools/1.17
10XGenomics/cellranger-atac/2.1.0 FastQC/0.11.9                libpng/1.6.39                sratoolkit/3.0.2
10XGenomics/spaceranger/2.0.1     gatk/4.3.0                   nfcore/rnaseq/3.0            star/2.7.10a
anaconda3/2022.10                 gcc/12.2.0                   nfcore/sarek/2.7             subread/2.0.0
bcftools/1.17                     hdf5/1.14.0                  openssl/3.0.8                tabix/0.2.5
bcl2fastq/2.20                    hisat2/2.2.1                 parallel/20230222            vcftools/0.1.16
bedtools/2.29.2                   htslib/1.10.2                perl/5.36.0                  vep/release-109
bowtie2/2.5.1                     htslib/1.17                  plink/1.9
bwa/0.7.17                        Instructions                 plink/2.0
cmake/3.25                        java/17.0.6                  Python/3.11.0
```

Module版本控制

Environment Modules

- 加载要使用的软件 (load a module)
  module load gcc/12.2.0

- 卸载已加载的软件 (unload a module)
  module unload gcc/12.2.0

```
[root@login ~]# module load gcc/12.2.0
[root@login ~]# which gcc
/cluster/apps/gcc/12.2.0/bin/gcc
[root@login ~]# module unload gcc/12.2.0
[root@login ~]# which gcc
/usr/bin/gcc
```

Module版本控制

Environment Modules

- 查看当前已经加载了哪些软件 (list loaded modules)

  module li

```
[root@login ~]# module load anaconda3/2022.10
[root@login ~]# module load gcc/12.2.0
[root@login ~]# module li
Currently Loaded Modulefiles:
  1) anaconda3/2022.10   2) gcc/12.2.0
```

Anaconda

- Anaconda 是一个python的数据科学平台，anaconda 的特点是拥有大量的科学包和一些依赖项，相对于python不用自行下载相关的包，anaconda支持创建虚拟环境，可以让不同用户在自己的环境下安装和管理包。

Anaconda is a free and open-source distribution of the programming languages Python and R. The distribution comes with the Python interpreter and various packages related to machine learning and data science.

Anaconda

- 加载anaconda (load anaconda)

  module load anaconda3/2022.10

- 查看anaconda下的环境 (list environments)

  conda env list

  一般公有环境位于：/cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/

  私有环境位于：/cluster/home/USERNAME/.conda/envs/

Anaconda

- 创建私有环境 (create env)

  conda create -n ENV_NAME

*建议先srun到计算节点再操作conda环境。

srun --pty /bin/bash

```
[pm@head1 ~]$ conda create -n test
Collecting package metadata (current_repodata.json): done
Solving environment: done


==> WARNING: A newer version of conda exists. <==
  current version: 4.12.0
  latest version: 23.1.0

Please update conda by running

    $ conda update -n base -c defaults conda



## Package Plan ##

  environment location: /cluster/home/pm/.conda/envs/test



Proceed ([y]/n)? y

Preparing transaction: done
Verifying transaction: done
Executing transaction: done
#
# To activate this environment, use
#
#     $ conda activate test
#
# To deactivate an active environment, use
#
#     $ conda deactivate
```

Anaconda

- 激活私有环境 (activate env)
  source activate ENV_NAME

- 在环境中安装相关python包 (install package)
  conda install PACKAGE_NAME

- 查看当前环境已安装的包 (list installed packages)
  conda list

Anaconda

- 退出conda环境 (exit env)
  source deactivate

- 删除指定的环境 (delete env)
  conda remove -n ENV_NAME --all

四、SLURM调度系统

Part 4. SLURM scheduling system

SLURM

- SLURM是当前成熟、功能强大的作业调度系统，被广泛的应用于大规模的高性能计算平台。

SLURM is an open source, fault-tolerant, and highly scalable cluster management and job scheduling system for large and small Linux clusters.

SLURM

- 查看集群节点状态 (check status of nodes)

```
[root@login ~]# sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
debug        up 30-00:00:0      1   idle node01
normal*      up 7-00:00:00      5    mix node[02-06]
gpu          up 7-00:00:00      2    mix node[07-08]
Jupyter      up 7-00:00:00      5    mix node[02-06]
App          up 7-00:00:00      5    mix node[02-06]
```

normal为队列名，*号代表该队列为默认队列
状态：
idle 空闲
mix 有作业在运行但还有空闲资源
alloc 有作业运行并且无空闲资源

SLURM

- 查看节点负载情况 (check load of nodes)

  lsload

```
[root@login ~]# lsload
HOSTNAMES     STATE    CPUS CPU_LOAD  S:C:T    CPUS(A/I/O/T)   MEMORY   GRES     PARTITION          AVAIL_FEATURES
node01        idle     80   0.01      2:20:2   0/80/0/80       515237   (null)   debug              (null)
node02        mix      80   351.61    2:20:2   40/40/0/80      515216   (null)   normal*            (null)
node03        mix      80   4.96      2:20:2   52/28/0/80      515216   (null)   normal*            (null)
node04        mix      80   1.00      2:20:2   40/40/0/80      515216   (null)   normal*            (null)
node05        mix      80   11.18     2:20:2   40/40/0/80      515237   (null)   normal*            (null)
node06        mix      80   4.90      2:20:2   34/46/0/80      515216   (null)   normal*            (null)
node07        mix      80   0.02      2:20:2   12/68/0/80      1031448  gpu:v100 gpu                (null)
node08        mix      80   1.14      2:20:2   16/64/0/80      1031448  gpu:v100 gpu                (null)
```

  CPUS(A/I/O/T)

  A：alloc 已分配　　I：idle 空闲

  O：other 其他　　T：total 全部

SLURM

- 查看作业信息 (check status of jobs)

  sq

```
[root@login ~]# srun sleep 30 &
[1] 203499
[root@login ~]# sq | grep root
1494     sleep               N/A      R    root       normal     root       normal     4294900329 1     0:05          2          node06
[root@login ~]#
```

  可看到作业相关信息:
  作业id、作业名、用户、队列、使用cpu数、使用节点名
  作业状态:
  R 运行中
  PD 等待中
  CG 完成中

SLURM

- 交互式作业 (submit an interactive job)

  srun --pty /bin/bash

```
[root@login ~]# srun --pty /bin/bash
[root@node06 ~]# hostname
node06
```

  注：通过srun --help查看命令帮助。

SLURM

- 脚本式作业 (edit a script)

  编辑slurm脚本　vim run.sh

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J jobname
#SBATCH -p partition
#SBATCH -N 1              # 1 node
#SBATCH -n 1              # 1 task
#SBATCH -c 1              # 1 cpu
#SBATCH -o jobname.%j.out
#SBATCH -e jobname.%j.err

module load anaconda3/2022.10
source activate test
python /path/train.py
```

SLURM

- 脚本式作业 (submit a background job)

  递交slurm脚本

  sbatch run.sh

  sbatch的参数也可以像srun那样写在命令行中，但我们一般会写在脚本中。

  可通过sbatch --help查看具体的帮助信息。

SLURM

- 取消作业 (cancel jobs)
  scancel JOB_ID

附加材料

Additional materials

用户应用程序

Software

目前在/cluster/apps下已安装如下应用程序：

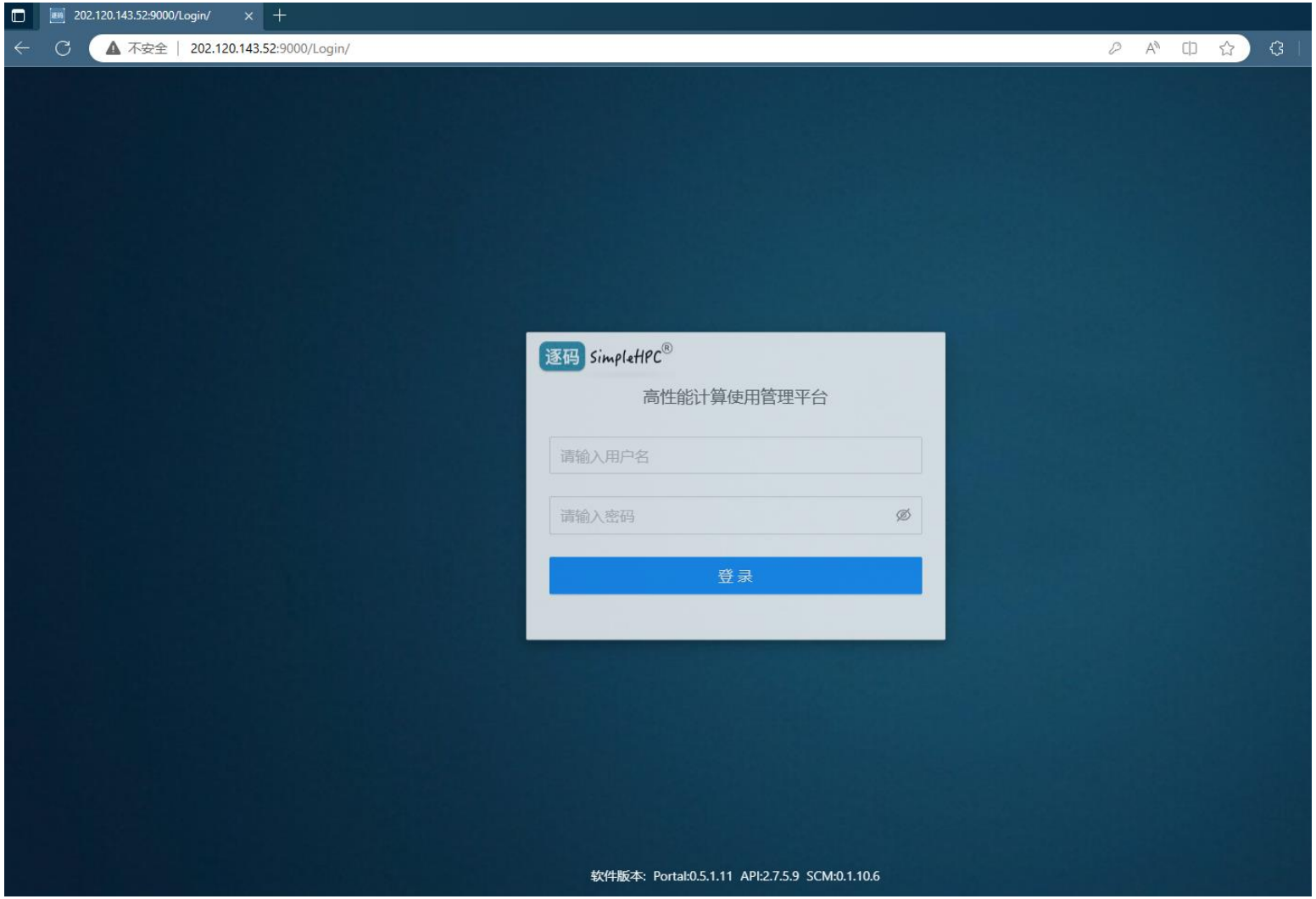
```
[root@login ~]# ls /cluster/apps/
anaconda3  bwa        gmp         mpc       picard     SCcaller    tabix
annovar    cmake      hdf5        mpfr      pipelines  snpEff      TenXGenomics
backup     demuxlet   hisat2      nf_core   plink      sratoolkit  Utility
bcftools   fastp      htslib      old       Python     STAR        varscan
bcl2fastq  FastQC     java        openssl   R          stor        vcftools
bedtools   gatk       libpng      parallel  Refs       stor4       vep
bowtie2    gcc        modulefiles perl      samtools   subread     VS_Code
```

用户应用程序
Software

公共conda环境

- base /cluster/apps/anaconda3/2022.10
- HTSeq /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/HTSeq
- Multicore-TSNE /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/Multicore-TSNE
- R-4.2.2 /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/R-4.2.2
- gcc /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/gcc
- kallisto /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/kallisto
- mono /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/mono
- pyscenic /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/pyscenic
- python-3.11.0 /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/python-3.11.0
- pytorch-1.12 /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/pytorch-1.12
- salmon /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/salmon
- scanpy /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/scanpy
- tools-v1 /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/tools-v1
- trim-galore /cluster/apps/anaconda3/2022.10/envs/trim-galore

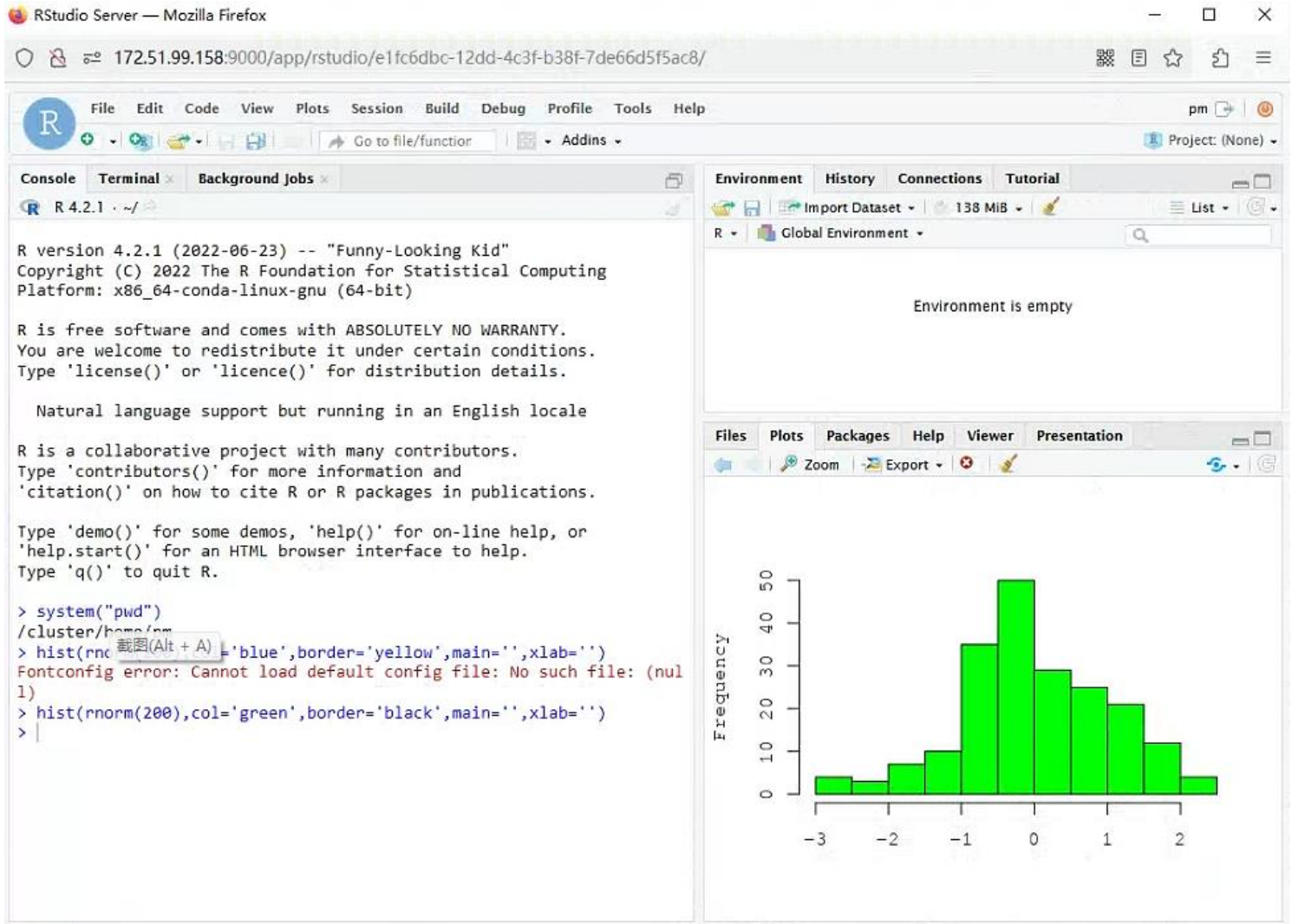
云平台
Cloud platform



云平台
Cloud platform

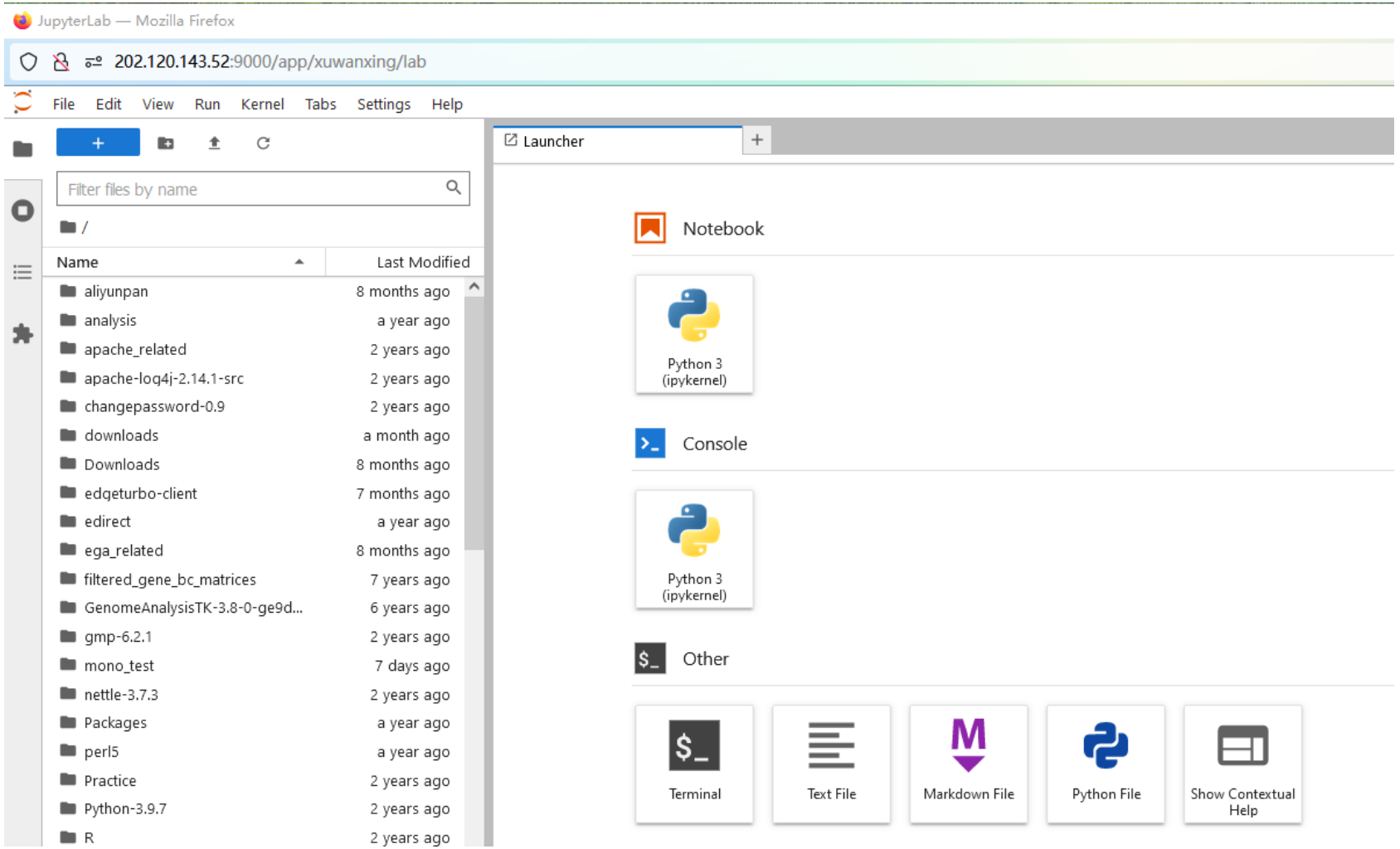
云平台-RStudio

Cloud platform (RStudio)



云平台-Jupyter

Cloud platform (Jupyter)



云平台-调度系统

Cloud platform (SLURM)