

<版本 1.3 >

中国科学院计算机网络信息中心

CNGrid 应用使用指南

CNGrid

版权所有 2010-2022 年: 中国科学院计算机网络信息中心

登录方式

请参考《中国国家网络使用说明》，登录 <http://www.cngrid.org> “用户服务——培训/教程”栏目即可下载。

访问已安装的商业/开源应用

需求说明

生物、化学、工业制造等一些应用领域中的用户往往需要使用成熟的应用软件完成自己的实验或者设计。并且有些应用本身提供多个命令，并且需要依次执行多个命令才能完成一个计算任务，交互性较强。比如生物信息学软件 EMBOSS，提供了多个命令；分子动力学软件 Gromacs，需要执行多个命令完成计算的前处理。

用户使用指南

1、 创建工作目录，准备数据文件。

用户在主目录下创建程序的工作目录，并通过 scp 或者 sftp 协议将计算所需的数据文件传输到网格服务器的该工作目录下；用户可以通过 ls, cd, vi, head, tail 等 linux 常用的文件和目录操作命令管理这些数据文件。

2、 将计算所需文件上传至 HPC

用户可根据命令 listnodes 选定所操作的计算资源，通过命令 set HOST=hpcname 设定在 HOST 环境中，设置成功之后该名字将出现在命令提示符中。在任何 HPC 文件操作之前需将文件上传至所操作的 HPC，使用命令 scephut2，参数是需要上传的文件名字，也支持*，表示上传当前目录的所有文件。上传之后使用命令 scels 可以查看到 HPC 上的文件列表，使用命令 sccat filename 可以查看文件内容。

3、 应用执行所需的前处理（可选）

有些应用提供了一些交互式命令帮助用户完成计算的前后处理，产生计算所需的文件，或者处理计算结果文件提取关注的信息。使用网格命令 sceapp 可以执行这些交互式操作，该命令的第一个参数是应用的名字，通过 listres 命令可以查看到，后面的参数是需要执行的命令和所需的各种参数选项。

执行 sceapp <app> -v 查看应用的版本号。执行 sceapp <app> -e 查看应用的环境设置。

4、 查看可用的应用和队列

使用网格命令 `listres` 可以列出目标集群上可用的应用封装。运行 `listres softname` 可以查看在使用应用提交计算任务的时候可用的队列名称。

5、 提交计算任务

使用网格命令 `bsub` 提交作业，格式和 LSF 的 `bsub` 命令基本呢类似。`bsub` 的 `command` 参数要求是执行应用的名字，该名字可以通过网格命令 `listres` 查看到。

指定队列的选项格式为 `-q hpcname@queueName`，`hpcname` 可以通过命令 `set HOST` 查看到。`queueName` 通过 `listres softname` 查看。如果不指定 `-q` 选项，那么网格系统会自动选择一个该应用可用的队列提交计算任务。

如果不指定 `-W`，默认作业最大执行时间为 5 分钟，否则需要通过 `-W` 指定作业估计执行时间，支持 `-W 小时:分钟` 的格式，比如 `-W 1:00` 是指一个小时。

`bsub` 命令返回用户作业 ID 号，即 UJID。

6、 查看作业状态

使用网格命令 `bjobs` 可以查看作业的基本信息（包括作业状态）。作业状态为 `DONE` 的表示该作业正常执行结束。选项 `-l` 列出作业的详细信息。

终止作业使用网格命令 `bkill`，参数为 `bsub` 返回的作业号。

7、 下载结果文件

计算之后，结果文件均产生于所操作的 HPC 集群上，使用 `scels` 命令可以查看文件列表，使用 `scecat` 或者 `scetail` 命令可以查看文件内容，如需下载处理，需使用 `sceget2` 命令下载到网
格家目录中（参数是选定的文件名），然后通过 `scp` 或者 `sftp` 协议传输到办公用机的磁盘。

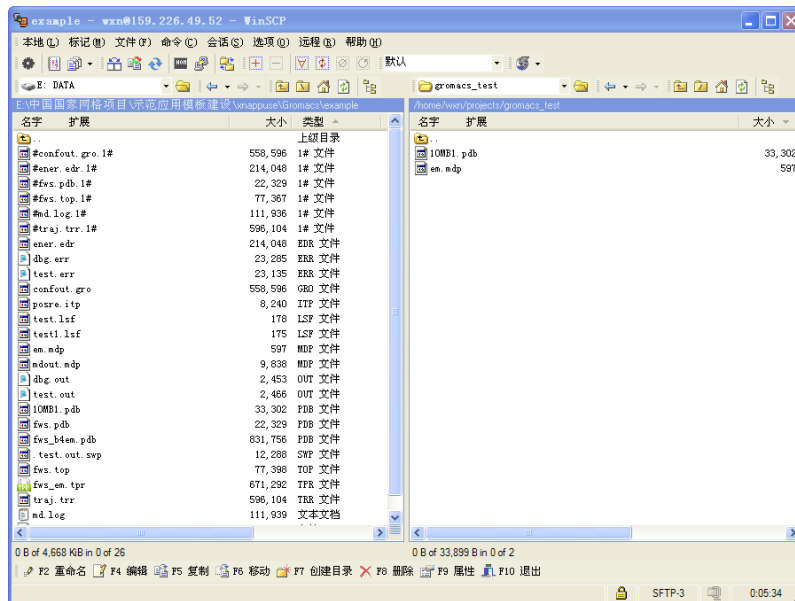
实例流程

以分子动力学软件 `Gromacs` 的使用为例，说明如何在命令行环境中提交应用计算任务，尤其带有交互式较强的前后处理程序的应用。

- 1、在主目录下创建目录 `projects/gromacs_test`。

```
[deepcomp7000@sce ~]$ cd projects/  
[deepcomp7000@sce projects]$ mkdir gromacs_test  
[deepcomp7000@sce projects]$ ls gromacs_test
```

- 2、通过 `scp` 协议客户端工具 `WinSCPPortable` 访问网格服务器，将应用的数据文件 `1OMB1.pdb` 和 `em.mdp` 上传至目录 `projects/gromacs_test`。



3、通过命令 sceput2 上传文件至 hpc

```
[deepcomp7000@sce ~] cd projects/gromacs_test
```

```
[deepcomp7000@sce gromacs_test] sceput2 *
```

```
[deepcomp7000@sce gromacs_test] scels
```

```
10MB1.pdf em.mdp
```

4、使用 sceapp Gromacs -v 查看应用程序的版本号

```
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ listres Gromacs
APPNAME  GRID      HPC      QUEUE      WALLTIME  NJOBS  PEND  RUN
-----
Gromacs  mainnode  deepcomp7000  scgrid     720      208   80   128
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ sceapp Gromacs -v
gromacs-4.0.4-double
```

5、执行应用的前处理部分，在本例中需要通过四个步骤产生计算所需的 tpr 文件。

```
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ sceapp Gromacs pdb2gmx_d -ignh -ff G43a1 -f 10MB1.pdb -o fws.pdb -p fws.top
WARNING: masses will be determined based on residue and atom names,
        this can deviate from the real mass of the atom type
Entries in atommass.dat: 178
WARNING: vdwradii will be determined based on residue and atom names,
        this can deviate from the real mass of the atom type
Entries in vdwradii.dat: 28
Entries in dgsolv.dat: 7
Entries in electroneg.dat: 71
Entries in elements.dat: 218
Reading 10MB1.pdb...
Read 'FWS TOYIN' 257 atoms
.....
```

```
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ sceaapp Gromacs editconf_d -bt cubic -f fws.pdb -o fws.pdb -c -d 0.9
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ sceaapp Gromacs genbox_d -cp fws.pdb -cs spc216.gro -o fws_b4em.pdb -p
fws.top
WARNING: masses will be determined based on residue and atom names,
        this can deviate from the real mass of the atom type
Entries in atommass.dat: 178
WARNING: vdwradii will be determined based on residue and atom names,
        this can deviate from the real mass of the atom type
Entries in vdwradii.dat: 28
Entries in dgsolv.dat: 7
Entries in electroneg.dat: 71
Entries in elements.dat: 218
Neighborsearching with a cut-off of 0.48

.....
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ sceaapp Gromacs grompp_d -f em.mdp -c fws_b4em.pdb -p fws.top -o fws_em
.tpr
                :-) G R O M A C S (-:

                Gromacs Runs One Microsecond At Cannonball Speeds

                :-) VERSION 4.0.4 (-:

Written by David van der Spoel, Erik Lindahl, Berk Hess, and others.
Copyright (c) 1991-2000, University of Groningen, The Netherlands.
Copyright (c) 2001-2008, The GROMACS development team,
check out http://www.gromacs.org for more information.

This program is free software; you can redistribute it and/or
modify it under the terms of the GNU General Public License
```

- 6、执行 `listres` 查看 `deepcomp7000` 上的应用安装情况，执行 `listres Gromacs` 查看 `Gromacs` 应用的安装，可以使用队列 `scgrid`。

```
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ listres Gromacs
APPNAME  GRID      HPC      QUEUE      WALLTIME  NJOBS  PEND  RUN
-----
Gromacs  mainnode  deepcomp7000  scgrid      720      12    0    12
```

- 7、执行 `bsub` 提交作业，`-W` 指明了作业估计执行时间为 10 分钟，没有指定 `-q` 采用系统默认分配的队列。

```
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ bsub -W 10 -n 4 -o xn.out -e xn.err Gromacs -s fws_em.tpr -v
scheduled res is: deepcomp7000@scgrid
gid is: 1276099279659754320, ujid is :235
Success!
```

- 8、执行 `bjobs` 查看作业执行状态为 `DONE`。

```

[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ listres Gromacs
APPNAME  GRID      HPC      QUEUE      WALLTIME  NJOBS  PEND  RUN
-----
Gromacs  mainnode  deepcomp7000  scgrid      720      12     0     12
[deepcomp7000@sce gromacs_test]$ bjobs
UJID  STAT  QUEUE      EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT      UPDATE
-----
235   DONE  scgrid      deepcomp7000  *macs1525  Jun 04 15:25  Jun 04 15:27
234   TERMINA*  scgrid      deepcomp7000  *macs1456  Jun 04 14:56  Jun 04 15:08
233   DONE  scgrid      deepcomp7000  *macs1451  Jun 04 14:51  Jun 04 14:52
232   DONE  scgrid      deepcomp7000  *lmpi1407  Jun 04 14:07  Jun 04 14:09
231   FAILED  scgrid_lo*  deepcomp7000  *eric1555  May 20 15:55  May 20 16:01
230   DONE  scgrid      deepcomp7000  *name1403  Apr 23 14:03  Apr 23 14:04
229   DONE  scgrid      deepcomp7000  *name1403  Apr 23 14:03  Apr 23 14:04
228   DONE  scgrid      deepcomp7000  *name1725  Apr 22 17:25  Apr 22 17:26
227   DONE  scgrid      deepcomp7000  *name1718  Apr 22 17:18  Apr 22 17:19
226   DONE  scgrid      deepcomp7000  *name1717  Apr 22 17:17  Apr 22 17:18
225   DONE  gput       GPU_sccas   *eric1423  Apr 21 14:23  Apr 21 14:23
224   SUB_ERR*  all        GPU_sccas   *eric1421  Apr 21 14:21  Apr 21 14:21
223   DONE  scgrid      deepcomp7000  myamber    Apr 07 14:57  Apr 07 14:58
222   DONE  scgrid      deepcomp7000  xx         Apr 07 14:41  Apr 07 14:43
221   DONE  scgrid      deepcomp7000  AMBER1556  Apr 06 15:56  Apr 06 15:57
220   FAILED  scgrid      deepcomp7000  AMBER1541  Apr 06 15:41  Apr 06 15:44
219   FAILED  scgrid      deepcomp7000  AMBER1538  Apr 06 15:38  Apr 06 15:39
218   DONE  default    chemistry   *name1606  Apr 01 16:06  Apr 01 16:07
217   DONE  default    chemistry   *name1606  Apr 01 16:06  Apr 06 14:55
216   DONE  default    chemistry   *name1606  Apr 01 16:06  Apr 01 16:07
Press any key to continue...
You have quit list.

```

9、查看作业结果文件，并可以使用 scp 协议客户端工具 WinSCPPortable 下载需要的结果文件。

```

[deepcomp7000@sce gromacs_test] scels
#fws.pbd.1# 10MB1.pdb em.mdp fws.pdb fws_b4em.pdb md.log posre.itp traj.trr
xn.out #fws.top.1# confout.gro ener.edr fws.top fws_em.tpr mdout.mdp pre_process
xn.err
[deepcomp7000@sce gromacs_test] sccat xn.out
[deepcomp7000@sce gromacs_test] scetail traj.trr
[deepcomp7000@sce gromacs_test] sceget2 traj.trr

```