



生物信息高性能计算平台管理服务实践

汇报人：刘浩

华中农业大学作物遗传改良全国重点实验室

2024年6月29日

目录

一、生物信息与算力需求

二、实验室计算平台介绍

三、计算平台管理服务实践



一、生物信息与算力需求



生物信息学

- 生物信息学 (bioinformatics) 利用应用数学、信息学、统计学和计算机科学的方法研究生物学的问题。基因测序、结构生物学、表型组学
- 农作物育种、产前诊断、临床医疗、药物设计、公共卫生等领域广泛应用
- 生物学研究的基础工具



什么是无创产前基因检测

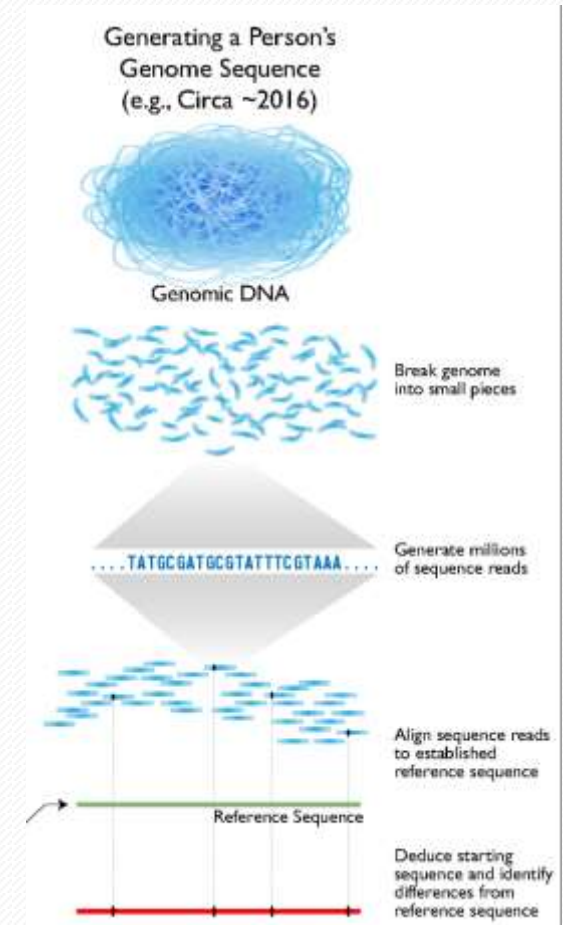
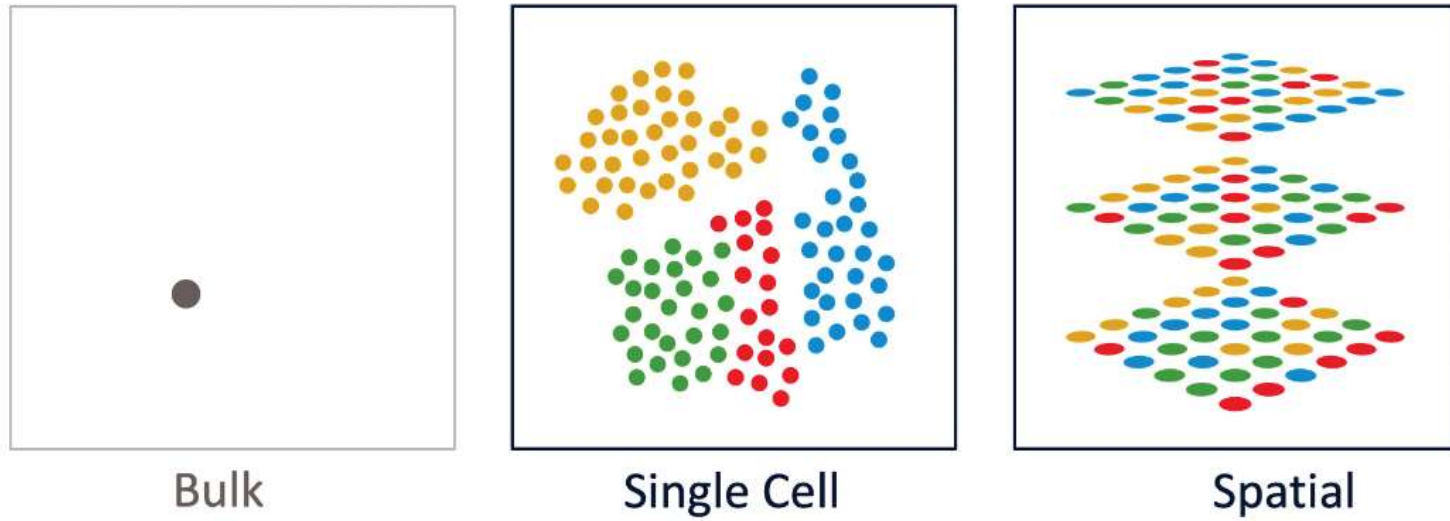
(NIPT, Non-invasive Prenatal Testing)

通过采集5ml孕妇外周血，提取胎儿游离DNA，采用新一代高通量测序技术，结合生物信息分析，得出胎儿患染色体异常的风险。可用于检测常见的21 三体、18 三体、13 三体。



多组学测序

- DNA/RNA碱基序列(ATCG)、DNA/RNA化学修饰(表观遗传学)
- WGS、WES、RNA-Seq、WGBS、RRBS、ChIP-Seq、RIP-Seq、ATAC-Seq、MeRIP-Seq、CUT&Tag、HiC、ChiA-PET ...
- bulk sequencing、single cell sequencing、spatial omics



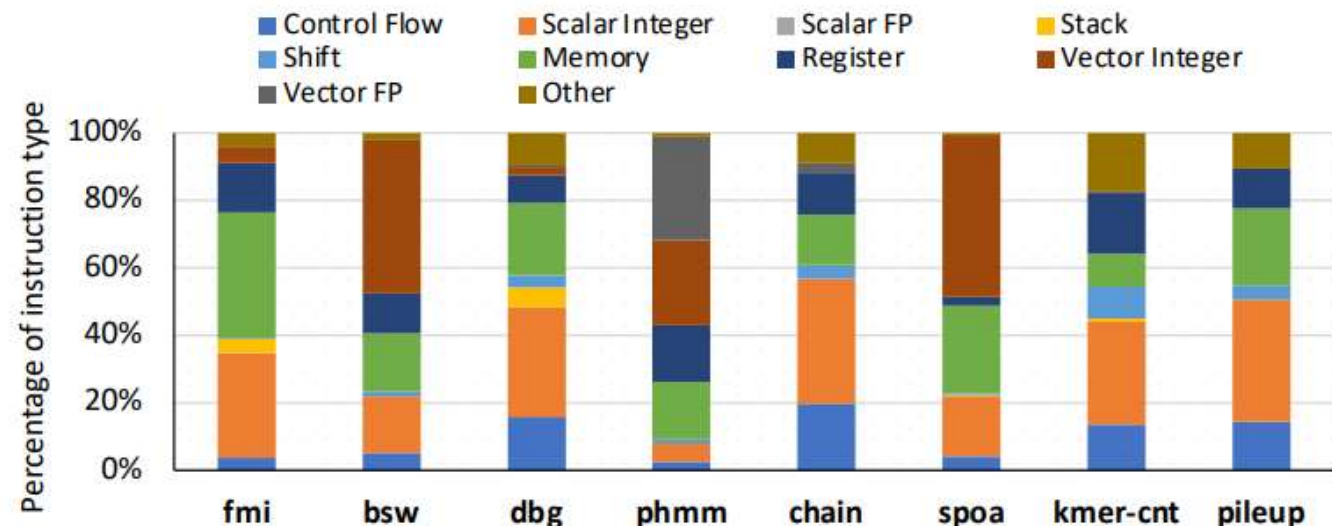
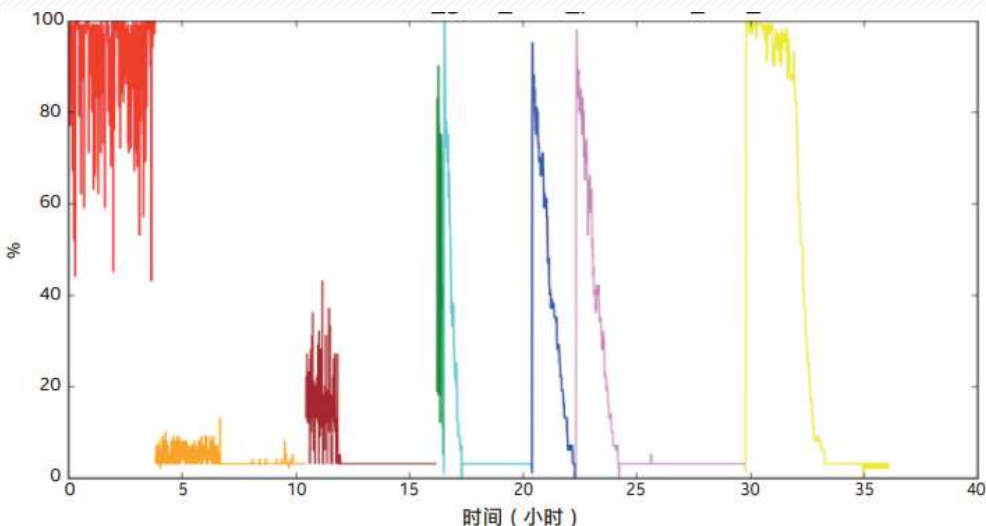
A dimensional comparison of bulk, single-cell, and spatial analyses. [10x Genomics]

实验方法、测序技术和软件算法的发展，催生海量的存储和计算需求

生物信息计算特征

- 软件繁杂, bioconda 9000个, galaxyproject 11000个;
- 软件并行度差, 异构硬件加速较少, 整型为主、少量单精;
- 部分软件CPU利用率低、内存消耗大;
- 资源消耗与物种基因组大小正相关(e.g. 小麦 16G);
- 数据多、IO带宽需求高, 10年间 0.1 PB =>10 PB;
- 作业量较大 (2500万/年) ;

84987338	██████████	RUN	smp	20*s005	*Colon-1	20	20	1.2 Tbytes	Jun 2 09:31	Jun 2 09:31	60332 second(s)	307827 second(s)
84987341	██████████	RUN	smp	20*s005	*omach-1	20	20	1.1 Tbytes	Jun 2 09:31	Jun 2 11:03	54780 second(s)	295383 second(s)



二、实验室计算平台介绍



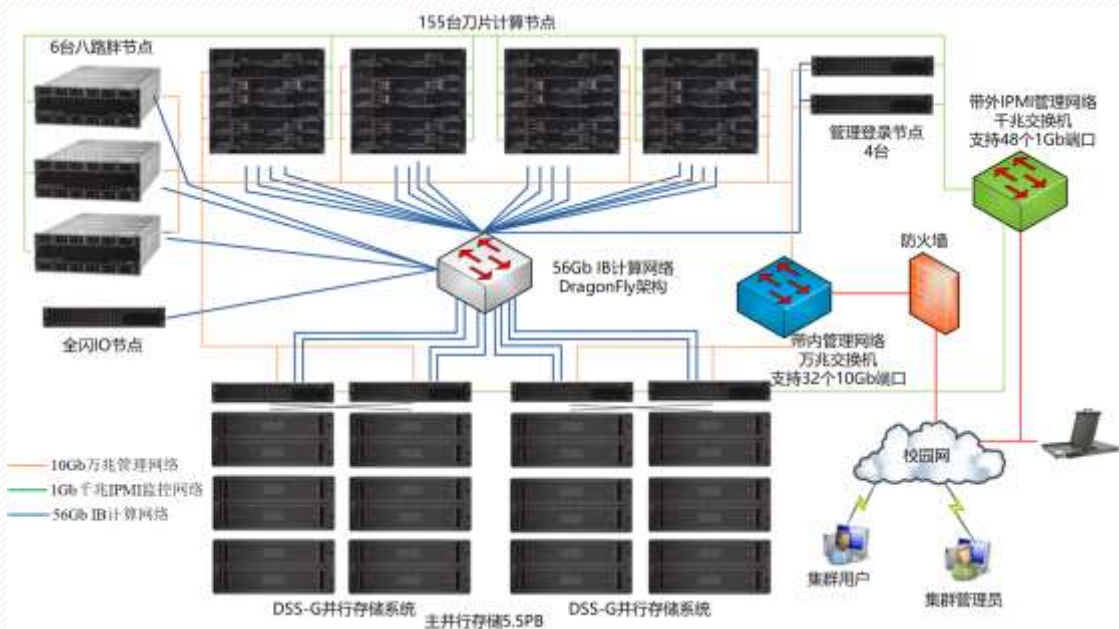
作物遗传改良全国重点实验室

- 实验室定位于应用基础研究，开展主要农作物遗传改良关键技术研发，创制作物优异新种质并培育重大新品种，回答关键技术和种质创新背后的重大科学问题
- **研究对象：水稻、油菜、玉米、棉花、小麦、大豆等主要农作物**
- 人才队伍：研究人员124人，两院院士3人，国家级人才43人(33%)
- 实验室荣誉：92年成立以来历年国重评估全优，20个首批重组的标杆国重室之一



计算平台介绍

- 生物信息高性能计算平台为作重室七大公共技术平台之一
- **平台始建于2014(500万), 2018年二期建设(1100万)**
- 各类设备200余台, 计算能力约375TFlops(约5500 CPU核), 存储约9PB, 总值约1800万
- 立足本室, 面向全校师生开放使用
- 遍布全校9个学院、180余个课题组、约900个用户, 每日在线使用200人以上
- 管理员 1 人

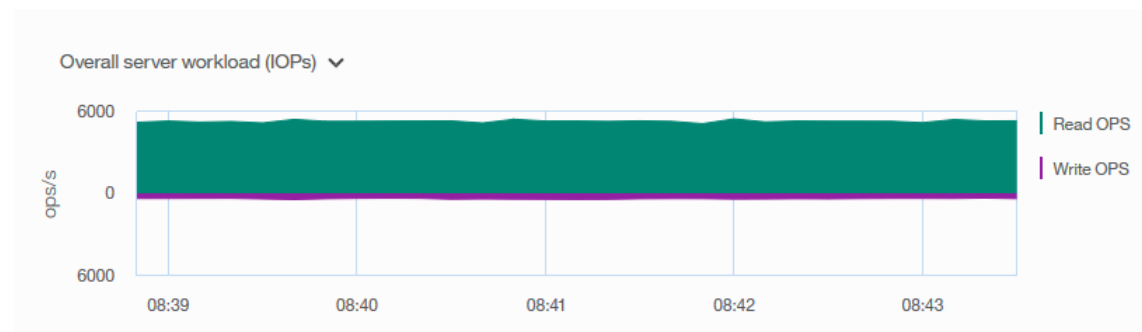
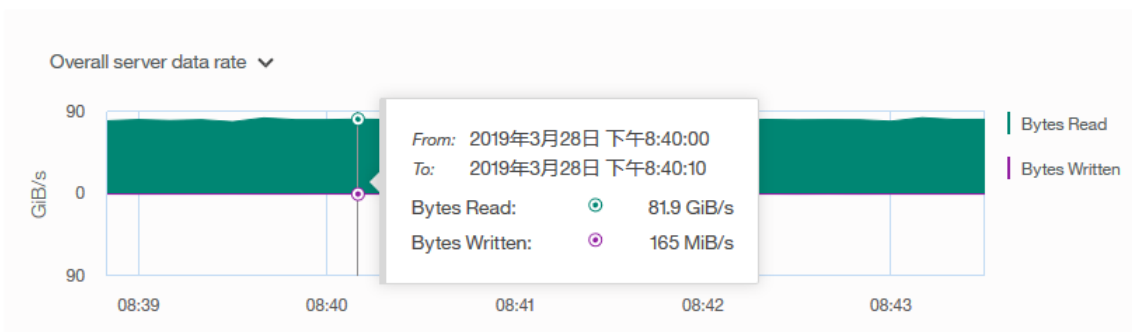


- 联想 DSS-G 解决存储性能瓶颈，加速大规模基因组学分析任务，缓解卡顿现象

– Nodes

[Details of the displayed metrics](#) Last 5 Minutes

109



All Nodes | **NSD Server Nodes** | Protocol Nodes

View Details

Actions

Data interval 下午8:40 - 下午8:45

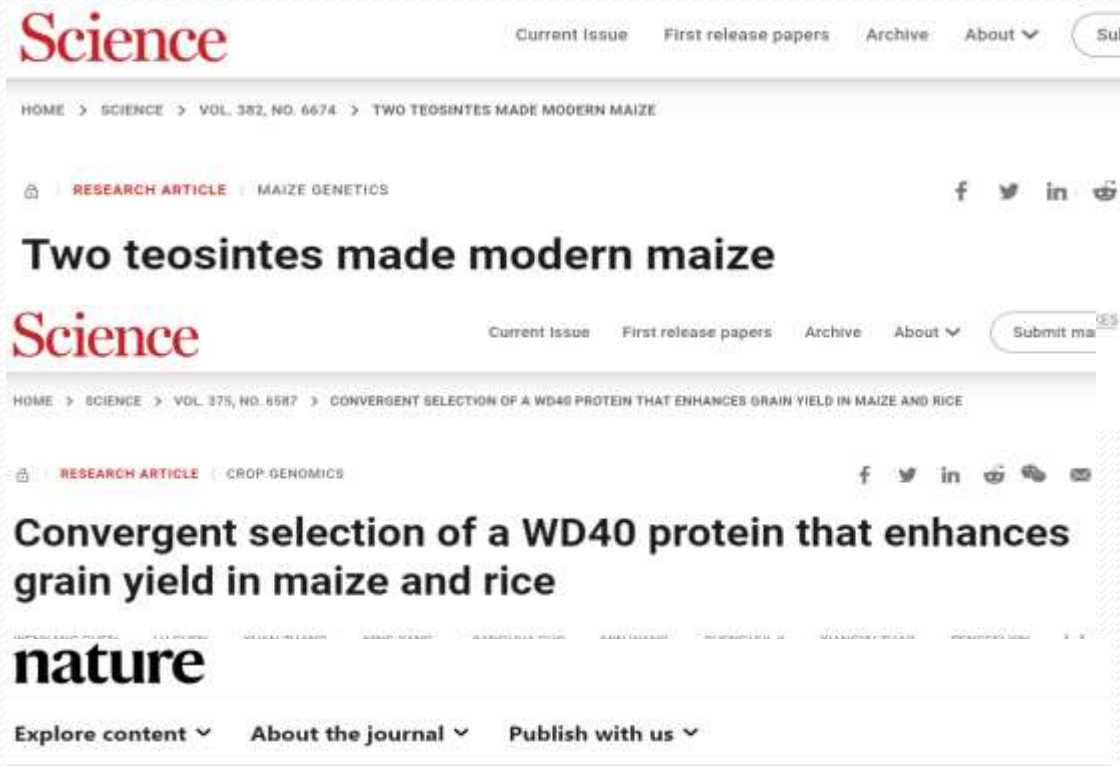
Export

Search

Name	↑ State	NSD Count	Read OPS	Write OPS	Bytes Read	Bytes Written	Average Disk Wait (...)	Average Disk Wait (...)
dss01	Healthy	4	1323 ops/s	89.8 ops/s	20.2 GiB/s	41.8 MiB/s	0.001 s	0.004 s
dss02	Healthy	4	1324 ops/s	94.5 ops/s	20.3 GiB/s	41.1 MiB/s	0.001 s	0.004 s
dss03	Healthy	4	1338 ops/s	87.2 ops/s	20.4 GiB/s	40.2 MiB/s	0.001 s	0.004 s
dss04	Healthy	4	1331 ops/s	79.4 ops/s	20.4 GiB/s	40.4 MiB/s	0.001 s	0.004 s

平台支撑校内高水平科学研究

- 近2年平台支撑了 Nature、Science 3篇、NG/NBT 等大子刊文章6篇
- 支撑了实验室近年来大部分B刊及以上文章，优青人才项目8个



nature biotechnology

Explore content ▾ About the journal ▾ Publish with us ▾

[nature](#) > [nature biotechnology](#) > [articles](#) > article

Article | Published: 13 October 2022

The role of transposon inverted repeats in balancing drought tolerance and yield-related traits in maize

[Xiaopeng Sun](#), [Yanli Xiang](#), [Nannan Dou](#), [Hui Zhang](#), [Surui Pei](#), [Arcadio Valdes Franco](#), [Mitra Menon](#), [Brandon Monier](#), [Taylor Ferebee](#), [Tao Liu](#), [Sanyang Liu](#), [Yuchi Gao](#), [Jubin Wang](#), [William Terzaghi](#), [Jianbing Yan](#), [Sarah Hearne](#), [Lin Li](#) ✉, [Feng Li](#) ✉ & [Mingqiu Dai](#) ✉

Nature Biotechnology 41, 120–127 (2023) | [Cite this article](#)

华中农业大学博士研究生于志超、中国农业大学博士后陈永明和阿卜杜拉国王科技大学博士后周勇为论文共同第一作者。华中农业大学张建伟教授、中国农业大学郭伟龙副教授和阿卜杜拉国王科技大学Rod A. Wing教授为论文通讯作者。国际水稻研究所、冷泉港实验室、亚利桑那大学等单位参与该项研究工作。该研究受到华中农业大学启动费、自主科技创新基金项目(2662020SKPY010)和湖北洪山实验室(2022HSZD031)等资助，并受华中农业大学作物遗传改良全国重点实验室生物信息计算平台的支持。

华中农大信息学院博士研究生刘东旭和新加坡国立大学Ramesh Rajaby博士为该论文共同第一作者，信息学院杨庆勇副教授和新加坡国立大学宋永健教授为该论文通讯作者。该研究数据分析工作得到华中农业大学作物遗传改良国家重点实验室生物信息计算平台支持和帮助，得到国家重点研发计划(2017YFE0104800)，国家自然科学基金(32070559)等项目资助。

二、计算平台管理服务实践



平台管理服务理念：为更多用户提供安全便捷高效的算力服务

放心

- 网络安全
- 数据安全

便捷

- 培训考核
- 技术交流
- 软件服务
- 文档建设

高效

- 引入新工具
- 优化分析流程

服务更多用户

- 规范数据使用
- 资源整合
- 优化资源调度

1. 让用户会用——培训/课程/考核/技术交流

- 新用户培训；生信分析培训；研究生实验课
- 完整的培训文档、视频及练习文档
- 账号申请考核
- 搭建技术交流平台、公众号技术分享



作物遗传改良全国重点实验室 中国工程院 工作部
National Key Laboratory of Crop Genetic Improvement 技术分享 第7期

Snakemake一种实现可重现的数据分析框架

Snakemake是一个基于Python开发的流程管理工具。在生物信息学、数据分析和科学研究领域中得到广泛应用，特别是在处理大规模数据分析和复杂的计算流程时。Snakemake允许用户定义工作流的规则和依赖关系，并自动执行这些规则以生成最终的结果。它提供了一种可重复、可维护且易于扩展的方式来管理复杂的计算工作流。Snakemake中还包含一些实用的功能，例如并行执行、集群支持、日志记录和错误处理。这些都大大简化了数据分析的流程。

主讲人：刘振平 2021级博士生

导师：张斌龙 教授

时间：12月15号(周五) 15:00

地点：二楼C102会议室

考试内容

服务器考试范围大致分为三块：

- Linux基本使用
- LSF作业提交系统的使用
- 集群使用规章制度和注意事项

Linux基本使用

- 文件目录操作，要求掌握文件所属的用户和用户组、文件权限的概念（可读、可写、可执行），理解不同的文件类型，如普通文件、目录、块设备、链接文件等，要求掌握的命令 `ls`、`pwd`、`cd`、`mv`、`rm`、`mkdir`、`ln`、`cp`、`chmod`、`alias`；
- 文本操作，需要掌握至少一种文本编辑器（推荐vim），理解管道、重定向，要求掌握基本的文本处理命令 `cat`、`more`、`less`、`head`、`tail`、`wc`、`nl`、`cut`、`sort`、`uniq`、`grep`、`sed`、`awk`、`file`；

刘浩-生信平台

上传的文件为上周五的集群考核成绩，80分通过。通过了且需要申请重点实验室集群账号的同学请在群文件中下载申请表电子版，填写好相关信息后打印出来，给导师签字及本人签字，然后将纸质版申请表拍照连同word电子版分别以附件形式发到我的邮箱 1228735128@qq.com，照片和word文档文件名格式为“华中农业大学作物遗传改良全国重点实验室服务器使用申请表_姓名_导师”。纸质版申请表不用交到我这里。

刘浩-生信平台

分数-202405.xlsx
9.44KB

2. 让用户方便使用——软件服务

- 领域快速发展，催生大量的分析软件
- bioconda 9000个软件
- 安装维护复杂，花费大量时间，重复工作



- 预装1400余款软件，一键调用
- 软件安装兜底
- 编写通用软件安装文档并培训
- 配置Rstudio-server，提升用户体验

软件安装

说明

- 各种脚本、jar包、编译好的二进制可执行包, e.g. NCBI直接下载编译好的blast
- 采用C/C++等编写, 只有源码, 按文档要求编译, e.g. 下载R源码, 自己编译安装
- 系统自带的包管理器 (需root权限)
- bioconda, 生信软件包管理器
- docker, singularity容器镜像
- Python, perl, R等的模块或包

环境变量

PATH, 自动搜索安装的可执行文件

LD_LIBRARY_PATH, 动态链接库搜索位置

PERL5LIB, perl模块位置

PYTHONPATH, python模块位置

目录

说明

环境变量

脚本软件

jar包

二进制可执行包

源码编译

常用编译器

源代码后缀规范

c语言编译

Makefile

configure

cmake

系统包管理器

conda

配置

管理软件包

管理环境

直接使用bioconda内的软件

docker

singularity

R包安装



- 复杂软件运行测试并编写使用文档
- 软件特殊处理、文档记录
- 软件运行错误处理、文档记录

分染色体运行

部分基因组较大或深度较深的数据，运行 `pbrun haplotypcaller` 时可能会出现显存不够的报错 `Out of memory`，此时可以分染色体来跑，最后再合并。以人的样本为例：

```
1 # 制作bed文件
2 $ cat hg38.fa.fai |awk '{print $1"\t0\t"$2}' > hg38_all.bed
3 # 将大染色体分别分到单独的bed文件中，零碎的contig分到一个bed文件中
4 $ for i in {1..22};do cat hg38_all.bed |grep -w chr${i} > hg38_chr${i}.bed ;done
5 $ cat hg38_all.bed |grep -e _ -e chrX -e chrY > hg38_other.bed
```

12. 计算节点未联网导致部分软件无法运行

- [busco离线运行](#)
- [interproscan离线运行](#)
- [FunGAP离线运行](#)
- 部分WDL流程会在运行过程中下载singularity镜像，计算节点未联网会导致流程运行失败。解决办法为，在登录节点下载好镜像，然后替换WDL脚本中的镜像URL。如 `atac-seq-pipeline` 的WDL脚本中有2个地方用到了 `https://encode-pipeline-singularity-image.s3.us-west-2.amazonaws.com/atac-seq-pipeline_v2.2.2.sif`，首先下载这个镜像，然后将这个URL替换成 `DIR/atac-seq-pipeline_v2.2.2.sif` 即可。

集群模式提交时，可能会出现资源设置不合理导致大量作业挂起甚至将节点卡死的情况，结合本集群的情况，探索了一些canu的资源设置选项如下：在ovs中，会提交大量的单核心、每个作业需要的内存较大的作业，容易出现多个作业聚集在一个节点上，过程中节点内存很快耗尽导致作业被挂起或节点卡死，因此可以使用`rusage`设置LSF的内存预留情况，避免多个作业挤在一个节点。具体设置如下：

```
1 gridEngineResourceOption="-n THREADS " (1.8及以上)
```

也可以在Linux-amd64/lib/site_perl/canu/Grid_LSF.pm中修改代码实现，

将

```
1 setGlobalIfUndef("gridEngineResourceOption", "-n THREADS -M MEMORY");
```

更改为

```
1 setGlobalIfUndef("gridEngineResourceOption", " -n THREADS ");
```

集群module中 `v1.7.1 v1.8 v1.9 2.0 2.2` 的代码都做了相应的修改，可以不用上述选项，如果使用自己安装的canu可根据自己的需要添加选项或修改代码。

bat过程消耗内存较大，可以放到high队列，如下：

```
1 gridOptionsBAT="-q high"
```

glibc

Linux系统上基本所有程序运行都依赖glibc库，不同Linux发行版或同一发行版的不同版本glibc库的版本都可能不大一样，一般原则是Linux发行版更新越快，其glibc的版本越新，如Ubuntu大版本更新很快，其glibc库的版本比较新；同一Linux发行版，系统版本越新，glibc的版本也越新，如CentOS6.x的glibc版本为2.12，CentOS7.x的glibc版本为2.17，CentOS8.x为2.28。

在低版本glibc的Linux系统上编译的软件，可以在高版本glibc的Linux系统上运行，反之则报错，如在CentOS7.x上编译的软件无法在CentOS6.x上运行。

许多软件的作者经常会在glibc版本非常高的Linux系统上编译软件然后在github上发布，用户下载之后由于系统的glibc版本较低而无法运行，报类似如下的报错：

集群目前的系统版本为CentOS7.x，glibc版本为2.17，10年前的版本，非常古老了，未来会有越来越多的软件出现glibc版本不够的报错。

解决办法有以下几种：

目录

更换系统

源码编译

安装高版本glibc

使用singularity容器安装

使用singularity容器调用

错误处理

- [GLnexus] [error] Failed to bulk load into DB: Failure: One or more gVCF inputs failed validation or database loading; check log for details. Failed to read from merge_glnexus.bcf: unknown file type

每次失败重新运行时，需要删除之前运行产生的中间文件 GLnexus.DB，如果没有删除，则会出现上述报错。

- [GLnexus] [error] ../gvcf/AL077.g.vcf.gz Exists: sample already exists; each input gVCF should have a unique sample name (header column #10) (AL077_SM AL077 (../gvcf/AL077.g.vcf.gz))

经检查是有2个gvcf文件使用的同一个样本导致的报错

```

1 $ zcat AL075.g.vcf.gz |grep CHRO
2 #CHROM POS ID REF ALT QUAL FILTER INFO FORMAT AL077_SM
3
4 $ zcat AL077.g.vcf.gz |grep CHRO
5 #CHROM POS ID REF ALT QUAL FILTER INFO FORMAT AL077_SM

```

10. 常用库缺失解决

在安装或运行软件过程中经常出现类似 xxxx.so.1.0: cannot open shared object file: No such file or directory 的库缺失报错，一般加载或安装对应的库文件即可。

缺失库	需要加载的库
libbz2.so.1.0	module load bzip2/1.0.6
libgsl.so.23	module load GSL/2.4
liblzma.so.0	module load XZ/5.2.4
libgeos_c.so.1	module load GEOS/3.7.1

错误处理

maker运行过程中会出现FAILED的情况，如下所示。这种情况作业不会停下，但软件处于空跑状态，没有结果更新。

因此在跑maker的过程中需要及时关注 prefix_round1_master_datastore_index.log 运行日志的输出，以免因程序运行出错导致浪费太多资源和时间。

出现FAILED的情况时，对于小基因组，建议杀掉作业直接重跑，或者调整参数再重跑；对于大基因组，建议将出错的染色体单独重跑，然后再合并结果。

文档建设

- 在线文档覆盖集群使用技能/FAQ
- 应用软件教程及注意事项
- 超170篇用户技术文档
- 通过培训、考核等方式培养用户遇到问题首先翻阅搜索文档的习惯

hpc.ncpgr.cn

作物遗传改良全国重点实验室生物信息计算平台

作物计算平台用户手册

介绍

集群相关

- 常见问题(FAQ)
- 集群硬件资源
- 用户资源限制
- 集群使用
- LSF基本使用
- 集群帐号申请
- 帐号使用须知
- 作业队列划分
- 新出存储使用
- 用户注册
- 集群考试内容
- 集群收费标准
- 论文发表
- 数据使用规范
- 数据共享
- GPU节点使用
- 文件归档
- 文件性能优化
- 使用本地存储
- 数据下载
- 应用软件
- Index

平台介绍

生物信息高性能计算平台为华中农业大学作物遗传改良全国重点实验室公共技术平台, 专注于实验室及全校用户提供高通量测序数据的存储和计算服务。

平台由155个刀片计算节点, 2个GPU节点, 6个八路大内存节点, 多套并行存储组成, 总体计算能力理论峰值为380万亿次, CPU核心数为5600核, 存储硬件12.7PB(可用容量8.8PB), 主存储读写带宽超过45GB/s, 平台预装了1000余款各类生物信息分析软件及相关使用文档, 各类常用生物信息数据库, 用户可使用本平台进行转录组测序, 单细胞测序, 三代基因组测序, 表观组测序, 基因组组装注释等各类常见组学数据分析, 可加速大规模测序数据分析, 复杂大基因组组装注释等更消耗大量资源的分析项目。

集群使用指南

1. 在满足本实验室正常使用的前提下, 面向全校师生开放使用, 每学期4次集中考核, 申请, 见 [账号申请](#) [考核范围](#); 收费标准见 [集群收费标准](#)
2. 修改密码见 [修改密码](#), 密码遗忘先用默认密码登录, 如若不行则向管理员申请修改密码。
3. 禁止在登录节点运行作业, 登录节点运行的程序使用CPU或内存超标会被监控系统杀掉, 所有作业应由LSF作业调度系统调度至计算节点运行, LSF使用文档见 [作业调度系统LSF使用](#)。
4. 集群有多种不同硬件配置, 根据硬件配置差异和不同功能需求, 集群计算节点划分为多个队

2024/1/13 10:43:10

交互节点有时间限制, 如果需要运行长时间联网的程序, 有其他解决办法吗

什么软件?

nextflow 需要一边运行一边下载安装运行环境

2024/1/13 10:52:06

FAQ里看一下, 这个我有写

好的, 我看下

文档成为用户解决集群使用问题的主要方式



常见问题(FAQ)

1. 常用命令无法使用

用户编辑 `~/bashrc` 时, `PATH` 环境变量相关的部分填写错误, 会导致出现下面这种常用命令无法使用的情况。

```
1 $ cat test.txt
2 bash: cat: command not found...
```

解决方法: 使用vim的绝对路径来编辑 `~/bashrc`, 将写错的部分改正, 重新开个登录窗口即可。

```
1 $ /bin/vim ~/bashrc
```

2. module av显示的软件很少

使用系统module之前, 需要先设置相关环境变量, 否则会出现 `module av` 显示的软件很少, 或 `module load` 无法载入某个软件的情况, module环境配置见 [Module使用](#)

目录

1. 常用命令无法使用
2. module av显示的软件很少
3. 节点/tmp空间不够
4. 存储经过整理
5. github 下载慢
6. 登录节点使用conda安装软件等待时间过长
7. 新版conda命令提示符异常
8. GLIBC_x.x.x not found
9. GLIBCXX_x.x.x not found
10. 常用库缺失解决
11. core dumped
12. too many open files
12. 计算节点断网导致部分软件无法运行
13. C++17 standard requested but CXX17 is not defined
14. address 0x20, cause memory not mapped

3. 让用户用得好——提高计算效率

- 引导引入新工具，Open-omics-alphafold、parabricks、glnexus、genozip 等
- 存储使用策略，cellranger、SqueezeMeta、paragraph等
- 对软件进行集群化适配，canu、necat、nextdenovo、hic-pro、cactus 等
- 引导流程化分析，Isf、snakemake、nextflow等

经测试，第六步运行速度变得非常快，2分钟跑了之前2天的数据量。

软件	硬件	运行时间(s)	最大内存(MB)	加速倍数
alphafold2	CPU(intel 6150)	232305	15024	1
open-omics-alphafold	CPU(intel 6150)	4996	21668	46

软件	时间(h)	最大内存(GB)	加速倍数
bwa+GATK	32	124	1
parabricks haplotypcaller	2.9	93G	11



4. 让用户放心用——平台安全保障

- 硬件冗余，勤巡查，故障及时处理
- 合理的数据权限控制
- 多种方式保障集群网络安全/开放直接校外访问
- 为校内其它单位提供安全技术支持

组内数据共享

本课题组账号之间需要共享数据时，可以开放组权限；

开放本账号home目录的读取权限给本组用户。注意除非有特殊情况，不建议将写权限开放给其它用户，容易引发数据安全问题以及ssh密钥访问配置不成功。

```
1 $ chmod 750 ~
```

开放权限后，本组其它用户可以访问、拷贝本账号内的数据。

组间数据共享

由于经常有跨课题组的合作，相互之间有数据共享的需求，即跨用户组之间有数据读写的需求。此时部分同学会开放整个home目录的权限为777，鉴于目前集群用户超过500人，此方式共享数据极度不安全；或者直接使用scp将对方账号的数据传过来，造成数据冗余，产生不必要的存储费用开支。

鉴于此，可以使用Linux的ACL权限来满足此需求。

2023/12/6 16:43:59

刚刚处理被黑的服务器时发现校内有以下这几台服务器因为简单密码被黑了已经，有认识的跟他们说一下让他们处理。

```
you@018.189.68.183 -p 22 #
andrye@018.69.143.136 -p 22 #
qm@0132.205.65.255 -p 22 #
ast@0123.205.75.218 -p 22 #
andrye@123.205.69.178 -p 22 #
chen@0132.205.64.15 -p 22 #
chen@018.69.143.154 -p 22 #
chen@0132.205.68.58 -p 22 #
we@018.189.68.217 -p 22 #
```

? <http://hpc.ncpgr.cn/linux/087-linux-security/> 大家手上有服务器的一定要设置禁止用户使用简单密码，非常容易被黑

Summary

校园内的服务器，强制使用更复杂的密码，自动启用登录失败保护，自动封禁异常访问IP，我可以防范绝大多数入侵行为；

如面向公网开放，建议使用双因素认证；

切勿私自服务器上使用内网渗透工具；

目录

安全设置

账号相关设置

账号清理

强制复杂密码

ssh服务设置

限制用户su

锁定恶意访问账户

屏蔽恶意访问IP

tcpwrapper

DenyHosts

Fail2Ban

双因素认证登录

内网穿透

杀毒软件

防火墙

系统安全漏洞修复

禁止联网

入侵后处理

定位入侵源

病毒清理

busybox

定时任务

病毒位置

进程隐藏

篡改命令

Hook系统调用

挂载覆盖

检测隐藏进程

异常网络服务

异常文件检测

最近修改文件

rpm校验

ssh服务替换处理

系统安全漏洞检查修复

案例2

问题处理

```
1 # 系统top无法看到异常进程，busybox top 可以看到有异常进程 spirit
2 $ ./busybox top
3 Mem: 96158900K used, 1276140K free, 90256K shrd, 217156K buff, 88609700K cact
4 CPU:  3% usr  0% sys  0% nic 95% idle  0% io  0% irq  0% sirq
5 Load average: 1.00 1.02 1.02 3/560 945
6  PID PPID USER  STAT  VSZ %VSZ CPU %CPU COMMAND
7  2471 2036 mysql  S    389m  0% 14  0% /opt/mysql-5.5.37-linux2.6-x86_
8  2440  1 root   S    110m  0%  9  0% /opt/gridview//pbs/dispatcher/
9  1219  1 root   S   21928  0% 13  0% /usr/sbin/irqbalance --foregrou
10 988703  2 root   SW      0  0%  2  0% [kworker/u449:1]
11  3958 3900 gdm    S   1857m  2%  8  0% /usr/bin/gnome-shell
12 640647640482 root   T   1222m  1%  6  0% ./spirit -t 80s B -j 300
13  4073 3900 gdm    S   1169m  1% 18  0% /usr/libexec/gnome-settings-da
14  4007  1 gdm    S<   1131m  1% 23  0% /usr/bin/pulseaudio --start --
15  2079  1 root   S    801m  1% 19  0% /usr/sbin/pkesi
16  1985  1 root   S    730m  1%  9  0% /bin/tunnel -L=tcp://:443/45.7
17 $ ./busybox ps aux|grep spirit
18 640647root    0:36 ./spirit -t 80s B -j 300
19
20 # /proc下午也无法查看进程
21 $ ls /proc/640647/
22 ls: cannot access /proc/640647/: No such file or directory
23
24 #系统kill命令无法杀掉，只能使用busybox kill
25 $ kill 640647
26 -bash: kill: (640647) - No such process
27 $ ./busybox kill -e 0 640647
```

<http://hpc.ncpgr.cn/linux/087-linux-security/>

1. 系统安全漏洞检查修复

挂载覆盖

检测隐藏进程

异常网络服务

异常文件检测

最近修改文件

rpm校验

ssh服务替换处理

系统安全漏洞检查修复

常用命令检查

关键文件权限

特殊权限账号

空密码账号

sudo异常

账号处理

日志检查

实际案例处理

案例1

问题定位

问题处理与小结

案例2

问题处理

案例3

5. 让更多人用——规范数据使用

- 生信数据量大、管理复杂
- 0.5PB(14年)->9PB(22年)
- 存储容量成为扩大用户群瓶颈



- 优化分析流程，减少非必要数据
- 推广使用高效压缩软件
- 用户存储配额
- 合理共享数据，减少重复
- 下载公共数据



- 缓解存储瓶颈
- 更多人同时使用
- 大项目可以跑

数据使用规范

- 常用比对软件及fq文件处理工具 **seqkit** 等均已支持直接使用fq.gz压缩文件，原始fq.gz文件如无必要，不要解压；
- 下载完sra文件之后，直接转成fq.gz文件，然后删掉sra文件，如无必要切勿直接转成fq文件；
- 比对过程中不要直接输出sam文件，可以利用管道组合其他工具(samtools等)或软件自带参数输出 **bam** 文件。相比sam，bam可节省约60%的存储空间。部分软件 (gatk、sentieon等) 后续流程支持cram，因此bam可以继续转成 **cram** 格式，可节省约30%-50%的存储空间；相应的文档可参考 [短序列比对输出bam](#)；
- 文章发表后原始fq已经上传ncbi等数据，如无必要可直接将原始数据删除，后面需要使用时下载比较方便；
- 需要长期存放且有参考基因组的fq文件，可以使用 **gtx.zip** 压缩，相比gzip，可以节省至少50%以上的存储空间，使用参考 [GTX.Zip](#)；该软件目前免费版解压文件有大小限制，不再建议使用；
- 大量的 **vcf** 建议使用 **bgzip** 压缩后再使用，同时也可以tabix建索引，方便操作非常大的vcf文件，具体见 [tabix操作VCF文件](#)；
- 数据处理过程中如生成较大的文本文件，建议压缩成gz格式，linux命令和各编程语言均支持直接处理gz文件，参考 [gzip文件读写](#)；
- 一般文本文件压缩除使用gzip外，也可以使用 **pigz(支持多线程)** 来加速文件压缩解压；

Genozip

Genozip是一种专为基因组数据设计的高效压缩工具。它采用了一系列先进的压缩算法和技术，能够将原始的基因组数据文件（如FASTA、VCF和BAM格式）压缩成更小的文件，同时保持数据的完整性和可访问性。

以下是Genozip的一些主要特点和优势：

- 高压缩率：Genozip能够以很高的压缩率压缩基因组数据，通常能够将数据体积减小到原始大小的10%至20%。
- 快速压缩和解压缩速度：Genozip使用多线程处理和并行压缩算法，能够实现快速的数据压缩和解压缩过程。

fq+bam

物种	原始大小(R1.fq.gz+R2.fq.gz+bam)	genozip
棉花	35G + 37G + 52G	18G
水稻	4.6G + 4.8G + 7.0G	2.5G
玉米	9.4G + 11G + 20G	7.4G
油菜	4.6G + 6.0G + 28G	12G
大豆	6.3G + 6.5G + 12G	5.5G
小麦	14G + 15G + 35G	15G

- **先压缩清理、再增加配额**

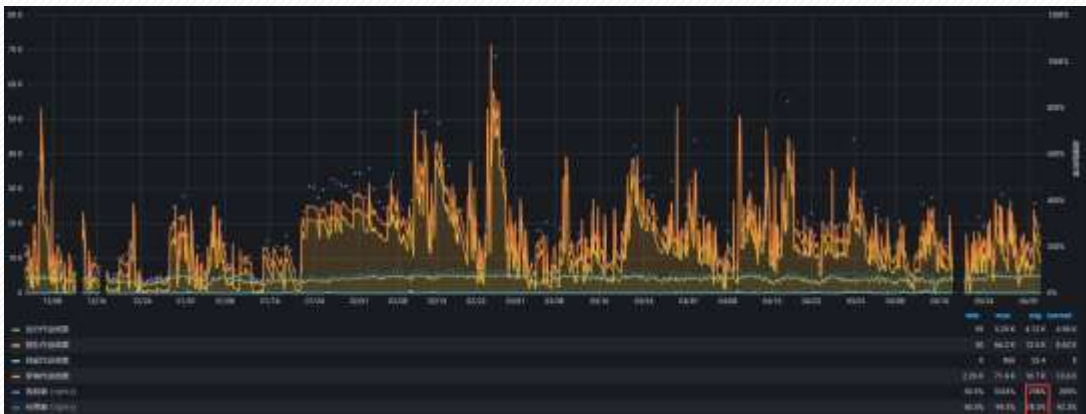
申请增加配额

如果因有较大项目需要大量存储时，可向管理员申请增加存储配额。在向管理员申请增加配额之前，需要先做以下几步：

- 先扫描账号下所有 **大于100M的文本文件**，将其中的fastq、fasta、sam、vcf、hmp、txt、csv等需要保留的文件进行压缩，将其它不需要的中间文件、日志文件等删除；然后再**扫描大于100M的所有文件**，时间较长的原始数据、程序运行的中间文件、冗余的bam文件等都可以删除，冗余数据的压缩清理见 [数据使用规范](#)。这2步清理完成之后再**扫描大于100M的所有文件**，扫描的结果发给管理员。扫描方式参考 [文件扫描](#)；
- 所有暂时不用的大批量fastq、bam、vcf等文件，需使用 [genozip](#) 压缩；
- 测试运行一个样本，并告知管理员中间数据和结果数据的路径，以及总的原始数据的大小、样本数量和运行脚本，以便管理员评估所需存储空间；

资源整合优化

- 将2期建设的硬件合并，减少资源浪费
- 存储需求大的课题组单独购买存储(160万)整合到集群中
- 优化资源调度，保障集群被公平高效使用



刘浩 2021/3/31 10:12:38

最近有课题组准备采购存储挂到集群上，供课题组单独使用，
有需要的课题组可以联系一下我。

Filesystem	Size	Used	Avail	Use%	Mounted on
public	5.5P	5.1P	407T	93%	/public
fs03	513T	499T	15T	98%	/data
fs06	685T	664T	21T	97%	/cotton
fs04	685T	648T	37T	95%	/jbyan
fs07	685T	586T	99T	86%	/nyang
fs05	685T	679T	5.5T	100%	/lguo

队列	节点	使用限制	功能说明
normal	c01n01-c07n11	作业平均每核内存不超过5G，否则会被系统杀掉；作业需要较多的内存，则需要申请更多核，如预计作业会用到20G内存，则至少申请4核	集群默认队列
high	c01n01-c04n03	作业平均每核内存不超过10G，否则会被系统杀掉；作业需要较多的内存，则需要申请更多核，如预计作业会用到50G内存，则至少申请5核	每节点内存384GB
interactive	sg57-sg60	2核/用户，24h	交互作业队列，用于调试代码或画图
parallel	c01n01-c07n11	100核/用户，使用需向管理员申请	并行作业队列，运行MPI作业，srmaker
tmp	s001-s006	50核/节点/用户	临时节点队列，节点内存2T-4T，建议作业内存200G，使用此队列
gpu	gpu01-02	使用需向管理员申请	GPU作业可申请使用，见GPU节点使用
q2680v2	sg01-sg60	100核/用户	老集群队列，速度相对较慢

- -o 定制输出格式，如为了方便实时查看作业使用的最大内存，添加 max_mem 选项，宽度为 14。

```
1 $ bjobs -o "jobid:10 user:6 stat:6 queue:6 exec_host:10 job_name:10 max_m
2 JOBID USER STAT QUEUE EXEC_HOST JOB_NAME MAX_MEM SUBMI
3 46477783 username RUN high c01n09 AS_TWAS 30.3 Gbytes De
4 46477983 username RUN high c01n09 AS_TWAS 22.6 Gbytes De
5 46477766 username RUN high c01n09 AS_TWAS 20.3 Gbytes De
6 46477725 username RUN high c01n05 AS_TWAS 26.5 Gbytes De
7 46477726 username RUN high c01n05 AS_TWAS 22.7 Gbytes De
8 46477727 username RUN high c01n05 AS_TWAS 19.2 Gbytes De
9 46477804 username RUN high c01n05 AS_TWAS 26.6 Gbytes De
10 46477885 username RUN high c01n05 AS_TWAS 20.3 Gbytes De
11 46477836 username RUN high c01n04 AS_TWAS 25.2 Gbytes De
```

使用 alias 简写该命令

```
1 $ vim ~/.bashrc
2 alias bbjobs="bjobs -o "jobid:10 user:6 stat:6 queue:6 exec_host:10 job_n
```

6. 在线计算服务

- CRISPR-P 等系列植物sgRNA设计工具，年访问40万次、论文年引用近100次
- <http://crispr.hzau.edu.cn/>

CRISPR-P 2.0

Home Submit Design Help News Contact CRISPR-P 1.0 CRISPR-Local CRISPR-Cereal

CRISPR-P 2.0: an improved CRISPR/Cas9 tool for genome editing in plants

if you have any problems or want any plant genome to be added to CRISPR-P 2.0, please visit this github repository(CRISPR-P 2.0) and n

CRISPR (Clustered Regularly Interspaced Short Palindromic Repeats) is an acronym for DNA loci that contain multiple, short, direct repeat base pairs followed by the same or a similar series in reverse and then by 30 or so base pairs known as "spacer DNA". CRISPRs are found in about 90% of sequenced archaea. CRISPRs are often associated with cas genes which code for proteins that perform various functions in the prokaryotic immune system, in that it confers resistance to exogenous genetic elements such as plasmids and phages and provides a defense against exogenous genetic elements in a manner analogous to RNAi in eukaryotic organisms.

采集

gRNA

Cas9

Target DNA

PAM

NHEJ repair

HR repair

敬请大家批评指正!