

# 材料研究平台 常见问题



腾讯云

## 【 版权声明 】

©2013–2024 腾讯云版权所有

本文档（含所有文字、数据、图片等内容）完整的著作权归腾讯云计算（北京）有限责任公司单独所有，未经腾讯云事先明确书面许可，任何主体不得以任何形式复制、修改、使用、抄袭、传播本文档全部或部分内容。前述行为构成对腾讯云著作权的侵犯，腾讯云将依法采取措施追究法律责任。

## 【 商标声明 】



及其它腾讯云服务相关的商标均为腾讯云计算（北京）有限责任公司及其关联公司所有。本文档涉及的第三方主体的商标，依法由权利人所有。未经腾讯云及有关权利人书面许可，任何主体不得以任何方式对前述商标进行使用、复制、修改、传播、抄录等行为，否则将构成对腾讯云及有关权利人商标权的侵犯，腾讯云将依法采取措施追究法律责任。

## 【 服务声明 】

本文档意在向您介绍腾讯云全部或部分产品、服务的当时的相关概况，部分产品、服务的内容可能不时有所调整。您所购买的腾讯云产品、服务的种类、服务标准等应由您与腾讯云之间的商业合同约定，除非双方另有约定，否则，腾讯云对本文档内容不做任何明示或默示的承诺或保证。

## 【 联系我们 】

我们致力于为您提供个性化的售前购买咨询服务，及相应的技术售后服务，任何问题请联系 4009100100或 95716。

# 文档目录

## 常见问题

项目相关问题

实验计算相关问题

Cloud Shell 相关问题

数据呈现相关问题

计费相关问题

# 常见问题

## 项目相关问题

最近更新时间：2024-10-11 17:35:11

### 创建项目需要什么权限？

MRP 创建项目需要主账号完成。

### 子账号如何加入项目？

当主账号创建项目完成后，子账号进入 MRP 控制台 [项目列表](#) 页。页面会显示主账号创建的所有项目，用户单击[申请加入](#)并且填写申请信息后即可完成申请。主账号进入 [项目列表](#) 页，单击页面右上方[新增成员](#)，即可在弹出的弹窗中审核用户是否可进入项目。若主账号审核通过，则该子用户成功加入项目。

项目列表

项目名称	创建时间	操作		
项目1	2019-05-01	<a href="#">进入项目</a>	<a href="#">新增成员</a>	<a href="#">查看成员</a>
项目2	2019-05-01	<a href="#">进入项目</a>	<a href="#">新增成员</a>	<a href="#">查看成员</a>
项目3	2019-05-01	<a href="#">申请加入</a>		
项目4	2019-05-02	<a href="#">申请加入</a>		

### 创建项目是否必须开通 Cloud Shell 功能？

不必要。Cloud Shell 是 MRP 提供的一种计算实验的操作方法，若用户只需利用前端页面功能计算实验，则不需要开通 Shell 功能。同时开通 Shell 功能需要租用一个云服务器部署容器服务，额外会收取一定的费用。请用户按照需求判断是否需要开通 Shell 服务。

### Cloud Shell 功能和项目是什么关系？

- Shell 功能开通后，所有项目均开通 Shell 功能。
- 用户在某一项目中使用 Shell 功能，在 Shell 中提交的实验会在该项目的实验列表中展示。

# 实验计算相关问题

最近更新时间：2024-12-04 15:28:01

## 如何查看实验计算的详细运行状态？

在实验运行过程中，单击 [实验列表](#) 页中的“实验名称”，可以查看迭代的晶体结构和体系能量演化情况。若需要更加详细的运行状态数据，用户可以通过实验列表页中实验所在行右侧的“查看日志”功能，查看计算日志。

## MRP 中的父子实验是什么？用途是什么？

父子实验用于记录不同实验之间的关系（例如：逻辑关系或存储关系），类似于操作系统中父子目录。用户可以通过父子实验来管理实验之间的关系。

## MRP 中提供的 VASP 版本是什么？

MRP 提供 VASP 5.4.4 的 CPU 版本和 VASP 6.1.0 的 GPU 版本。

## 实验运行时，MRP 提供有哪些类型的云服务器？

CPU 服务器和 GPU 服务器均有。SA2 和 SA3 是 AMD 芯片的服务器；S5 和 M5 是 Intel 芯片的服务器，GN10X 和 GN10XP 是 GPU V100 类型的服务器。详情配置请参见 [云服务器机器列表](#)。

## 填写实验运行时，并行机器数量指什么？

并行机器数量指用于运行单个实验的腾讯云服务器数量。对于非单 gamma 点计算的 VASP 实验，推荐 INCAR 中设置 KPAR 参数，其值设为运行该实验时指定的腾讯云服务器数量，以提高并行效率。其它计算情形，推荐单个实验的并行机器数量设置为1。

# Cloud Shell 相关问题

最近更新时间：2024-12-04 15:28:01

## MRP 中 Cloud Shell 与普通 Linux 系统提供的 Shell 有什么不同？

与普通 Linux 的 Shell 相比，Cloud Shell 登录不需要密码。Cloud Shell 中还封装了一套与 MRP 的可视化操作相适应的 mrp 命令，能够更方便、高效地处理 MRP 中的实验，如编辑、导入、提交、取消和删除等操作。

## Cloud Shell 中找不到实验列表页中显示的实验，如何解决？

请在 Cloud Shell 中执行 mrp sync 命令。

## Cloud Shell 中 tefs 相关命令不能正常使用，如何解决？

请使用 mrp upgrade --force 进行强制升级。

# 数据呈现相关问题

最近更新时间：2024-10-11 17:35:11

## 数据呈现的数据来源是什么？

VASP 实验的数据呈现的数据来自于 VASP 计算输出文件 `vasprun.xml` 和 `KPOINTS`，其中 `KPOINTS` 仅用于标注能带结构的高对称路径标签；LAMMPS 实验的数据呈现数据来源于 `log.lammps` 和用户指定的结构输出文件。

## 用户计算的实验数据存储在哪里？

实验计算的输入和输出数据存储在与 MRP 项目关联的腾讯云对象存储桶和云服务器之中。

# 计费相关问题

最近更新时间：2024-12-04 15:28:01

## MRP 平台是如何收费的？

MRP 目前是免费 SaaS 服务平台，仅对计算资源、存储资源和网络资源进行收费，其中计算资源收费分为两个部分：

- 运行实验后，根据用户选择的参数调用云服务器收费。
- 用户开通 Shell 功能后，需要租用云服务器部署容器服务，该云服务器会在服务存续期间收费，具体收费方式请参见 [云服务器计费模式](#)。

## 部署容器服务的云服务器将要到期或欠费时，是否会有提示？应该如何处理？

在该云服务器欠费前七天，MRP 项目页面会提示即将欠费信息，并且腾讯云也会给用户发送手机短信，请您注意留意。续费的详细操作与您创建该云服务器选择的续费方式相关。若您选择的是自动续费，则不需要任何操作；若您选择的是手动续费，您需要在腾讯云个人中心的 [续费管理](#) 页面中手动续费。

## 实验计算调用的云服务器有哪些收费方式？

支持按量计费和竞价实例两种收费方式。

## 按量计费和竞价实例有何区别？

- 竞价实例的服务器价格约为同类型按量计费服务器价格的10% – 20%，但竞价实例的服务器存在实验还在继续但服务器已被腾讯云资源池回收的风险。
- 按量计费的服务器则不存在此风险，具体收费方式详情请参见 [云服务器计费模式](#)。

## 终止实验后云服务器是否继续收费？

实验终止后，云服务器不再收费。