

可视化科学计算系统部署工具

hpc4you toolkit v2026.x

HPC via Web(单机/集群通用版)

用户手册

零基础、零配置, 为单机工作站或多机部署Web可视化计算环境

ask@hpc4you.top

2026年06月26日

目录

1	格式约定	5
2	v2026.x 更新说明	6
3	可视化界面示例	6
4	基于本地镜像的部署方案	6
4.1	底层Linux版本	8
4.2	优选Linux版本	8
5	支持的集群架构	9
5.1	硬件与网络拓扑	9
5.2	用户数据与应用程序	11
6	安装Linux系统	11
6.1	网络规划	11
6.1.1	自动配置方案	11
6.1.2	手动配置方案	11
6.2	下载镜像	12
6.3	系统安装指南	12
6.3.1	镜像选择要求	12
6.3.2	注意事项	12
6.3.3	密码验证与IP地址获取	13
6.3.4	视频教程	13
6.3.5	寻求帮助	13
6.4	上传镜像	13

7	开始部署	14
7.1	准备工作	15
7.1.1	在微软上操作(非必需)	15
7.1.2	在master操作获取授权许可	15
7.1.3	无效授权处置	16
7.1.4	上传hpc4you toolkit压缩包	16
7.1.5	继续在master机器操作	17
7.1.6	主机名与IP地址配置规范	17
7.2	开始安装	18
7.2.1	运行逻辑	18
7.2.2	自助模式	18
7.2.3	技术协助模式	19
7.3	安装完毕	19
8	责任与义务	21
9	工具套件安装演示	22
10	管理集群: 仅限管理员操作	22
10.1	修改root密码	23
10.2	root密钥	24
10.3	变更Web地址	24
10.4	添加用户(组)	25
10.4.1	技术规范	25
10.4.2	管制逻辑	25
10.4.3	添加用户/组	26
10.4.4	删除用户/组	26
10.4.5	视频教程	26
10.5	资源分配管理	26
10.5.1	技术规范	26
10.5.2	资源与记账账户管理说明	27
10.5.3	登记集群信息	28
10.5.4	赋予用户PI管理权限	28
10.5.5	视频教程	29
10.6	资源限定QoS	29
10.6.1	技术规范	30
10.6.2	常用限定条目	30
10.6.3	创建QoS示例	31
10.6.4	给项目赋予QoS	31

10.6.5	QoS高阶功能	31
11	申请成为PI: 管理员与用户均可操作	31
11.1	管制逻辑	32
11.2	课题组长/PI权限	32
11.3	视频教程	32
12	登录和使用集群: 用户层面	32
12.1	登录集群	32
12.1.1	账户初始化	34
12.1.2	账户初始化视频教程	34
12.1.3	菜单功能	34
12.1.4	提交计算	34
12.1.5	操作演示	34
13	性能监测	35
13.1	Ganglia负载监测	35
13.2	Netdata集群性能实时监测	35
13.3	关于系统监控的“生存指南”	35
14	很少用的功能	38
14.1	集群开/关机/重启	38
14.2	添加新机器	38
14.3	移除节点	38
15	Web界面安全设定	39
16	故障排除	39
16.1	Single SSH Session Only	39
16.2	重启失败	40
16.3	软件源超时	40
16.4	主控机器无法登录节点	40
16.5	UserControl失效	40
16.6	502 Bad Gateway	40
16.7	意外停电	40
16.8	某段时间后,部分节点无法工作	41
17	SLURM技能自我修养	41
17.1	选一个浏览一下	41
17.2	快速制作slurm脚本	41
17.3	SLURM调度器内置参数	42
17.4	更多脚本模版	42
18	自定义	44

- 18.1 声明与警告 44
 - 18.1.1 配置文件说明 44
 - 18.1.2 配置文件修改 44
 - 18.1.3 责任声明 44
- 18.2 用户信息LDAP 45
- 18.3 LDAP Web前端 45
- 18.4 Resource Portal 45
- 18.5 HPC User Portal 46
- 18.6 MySQL数据库 46
- 18.7 nginx 46
- 18.8 集群名称 46
- 18.9 NFS共享 46
- 19 图片目录 48

1 格式约定

为了便于查看, 主要排版约定如下:

- 文件名或路径: `/path/file`
- 变量名: `MKLROOT`
- 命令: `command parameters`
- 需按顺序逐行执行的指令:

```
export OPENMPI=/opt/openmpi/1.8.2_intel-compiler-2015.1.133
export PATH=$OPENMPI/bin:$PATH
export MANPATH=$MANPATH:$OPENMPI/share/man
```

- 命令输出或者文件内容:

QUEUE_NAME	PRI	STATUS	MAX	JL/U	JL/P	JL/H	NJOBS	PEND	RUN	SUSP
serial	50	Open:Active	-	16	-	-	0	0	0	0
long	40	Open:Active	-	-	-	-	0	0	0	0
normal	30	Open:Active	-	-	-	-	0	0	0	0

特别强调:

1. 指令, 是逐行执行. 也就是敲完一行或者复制粘贴一行内容, 就按Enter. 不是粘贴所有指令一起贴到命令行终端.
2. 指令严格区分大小写.
3. 所谓脚本文件, 就是把按顺序逐行依次执行的指令, 写在一个文档中.
4. 除非特别强调, 所有的操作, 均是采用 root 用户来完成; 并非 sudo
5. 所有的操作指令, 字符以及标点符号, 都是关闭输入法, 在纯英文状态下输入的.
6. 一个常识, `#开头的内容`, 都是注释. 无论#出现在指令的任何地方, 包括`#在内及其右侧所有内容`, 都是注释.
7. “在master机器操作”, 必须通过网络ssh远程登录目标机器进行操作; 否则看不到提示信息.

2 v2026.x 更新说明

从2026年6月起, 慧计算集群工具套件版本变更为v2026.x, 主要更新如下:

1. 底层Linux系统, 支持Rocky 9.7, Rocky/Alma 10.1, Debian 13.5.
2. 可视Linux桌面, Rocky/Alma支持GNOME; Debian 13.5支持Xfce.
3. 更新Slurm25.11.1.
4. 简化准备流程. 系统安装完毕后, 仅需记录IP地址即可, 无需设定机器名称. 选择其中一台做master, 在master机器上按照既定格式录入各机器的IP地址和预期名称即可.
5. 集群系统构建完毕后, 包含测试用户tom, 密码为111111(六个数字1).
6. 安装环节添加必要的中文提示信息.
7. 资源分配(Resource Allocation Portal)支持录入中文, 但不建议使用中文作为Slurm account name.
8. 新增handOver.sh模块, 可创建名为admhpc的本地运维账户. 该账户具有受限sudo权限(可执行apt/dnf操作), 具有Slurm管理权限, 但无法修改root密码或切换为root用户. 用户admhpc的所有操作均受系统审计系统管制和监控. 该模块适用于需要提供技术服务的场景.
9. 集群用户界面(My HPC)新增Open Composer模块, 支持在Web UI界面, 可视化点击鼠标构建slurm脚本并提交计算任务. 支持任务列表和历史任务信息查询.
10. 资源分配后端升级到v1.1.8版本.
11. 集群用户(HPC User Portal)后端升级到v4.2.4版本.
12. 工具套件支持自动检测单机或集群环境, 既可用于单台工作站, 也可适配多机集群. 后续添置新机器时, 执行addNewComputeNode.sh模块即可将单机扩展为集群, 或对现有集群平滑扩容.

3 可视化界面示例

慧计算集群工具套件(hpc4you toolkit v2026.x, 以下简称工具套件)所构建的集群系统, 其管理和用户操作均通过Web界面实现, 支持可视化鼠标点击操作. 具体操作界面示例请看图1和图2所示.

工具套件具体版本信息, 可以使用指令`cat /root/hpc4you_toolkit-web*/VERSION`查阅.

Linux Desktop受Slurm调度器管制, 运行在计算节点上. 适用于任何需要图形界面交互的应用程序.

在用户使用层面, 同时支持Web UI交互模式, 以及传统的SSH指令模式.

4 基于本地镜像的部署方案

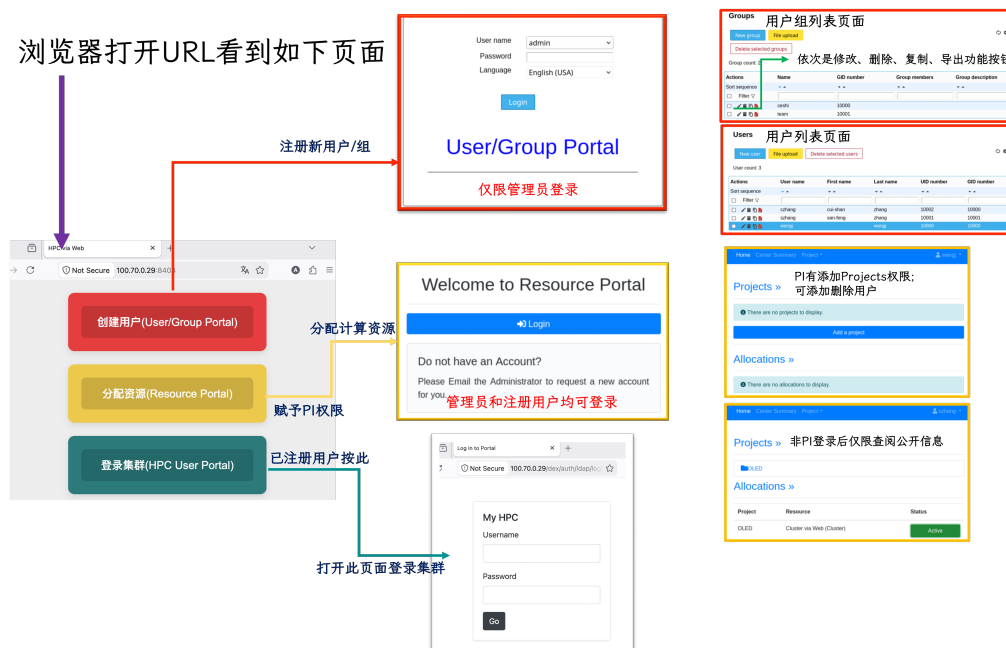


图 1: 具有Web可视化操作界面的集群系统(HPC via Web)操作界面, 示例一

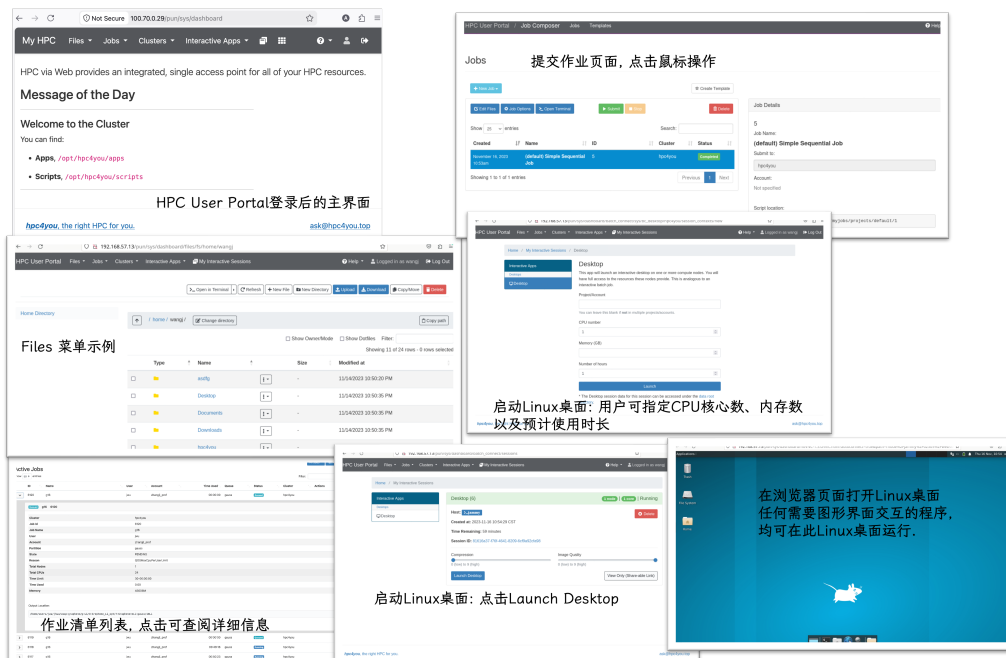


图 2: 具有Web可视化操作界面的集群系统之用户操作界面, 示例二

4.1 底层Linux版本

本离线版本, 基于可公开获取的特定版本的DVD镜像获取各软件安装包. **部署过程中所有机器无需连接互联网**. 安装完毕后, 集群系统支持GPU与CPU混合调度.¹ 具体模块请看表 1.

本工具套件由计算化学、计算材料领域的科研工作者(非专业计算机背景)结合实际需求开发, 充分理解科学计算任务的核心诉求:

任务需求 : 明确HPC计算任务的目标

资源管理 : 合理分配计算资源

优化利用 : 最大化硬件性能

使用本工具套件, 可彻底规避科研人员在搭建高性能计算集群时常见的Linux配置难题. 操作流程极其简单:

1. 复制粘贴指令, 按Enter执行; 约7行指令.
2. 等待系统重启, 重新登录.
3. 集群即可使用, 无需额外配置

支持的Linux发行版:

1. CentOS 7.9
2. Anolis OS 7.9
3. Anolis OS 8.8
4. RockyLinux 8.8, 8.10
5. RockyLinux 9.5, 9.7
6. Debian/Bookworm 12.11, 12.12

4.2 优选Linux版本

截至2026年6月, 慧计算推荐优先采用如下Linux发行版做为底层操作系统, 其他发行版不再支持.

1. RockyLinux 9.7
2. RockyLinux 10.1
3. AlmaLinux 10.1
4. Debian 13.5.0

Ubuntu由于更新频率较高, 容易引入不必要的变更, 因此不建议在生产环境中使用. 若您坚持希望使用Ubuntu, 可考虑直接选用Debian 13.5.0, 其稳定性更适合长期部署. 如需进一步了解Ubuntu与Debian的关系, 可咨询AI或查阅相关文档.

¹根据官方手册描述, SLURM自动识别并配置GPU依赖于CUDA或ROCm等驱动是否正常工作. 如果相关驱动不完备, SLURM无法自动识别GPU硬件, 则需手动调试配置. 配置完成后, 用户仅需向SLURM声明需要几个GPU, 即可自动调度GPU参与计算.

表 1: hpc4you toolkit / HPC via Web for Cluster功能

功能模块		备注
CPU调度	yes	默认支持
GPU调度 ¹	yes	默认支持
记账功能	yes	默认支持
用户管控 ²	yes	默认支持
Web界面	yes	默认支持
图形桌面 ³	yes	默认支持
性能监测 ⁴	yes	默认支持
添加节点	yes	自动, 需要新机root密码和IP地址
定价	7500元起	电邮联系ask@hpc4you.top

¹ slurm天生支持GPU调度. 如果GPU相关驱动配置不当, slurm自动识别GPU可能无法工作, 则需手动调试.

² 用户管控, 如无计算任务, 拒绝访问任何计算节点; 限定用户仅可使用已经申请到的计算资源. 更多资讯, 请查阅https://slurm.schedmd.com/pam_slurm_adapt.html.

³ 在浏览器中使用Linux图形桌面, 可以运行任何需要交互式的图形界面程序. Linux桌面由slurm管制的计算节点负载, 而非登录/管理节点负载.

⁴ 监控基于Ganglia和Netdata.

5 支持的集群架构

5.1 硬件与网络拓扑

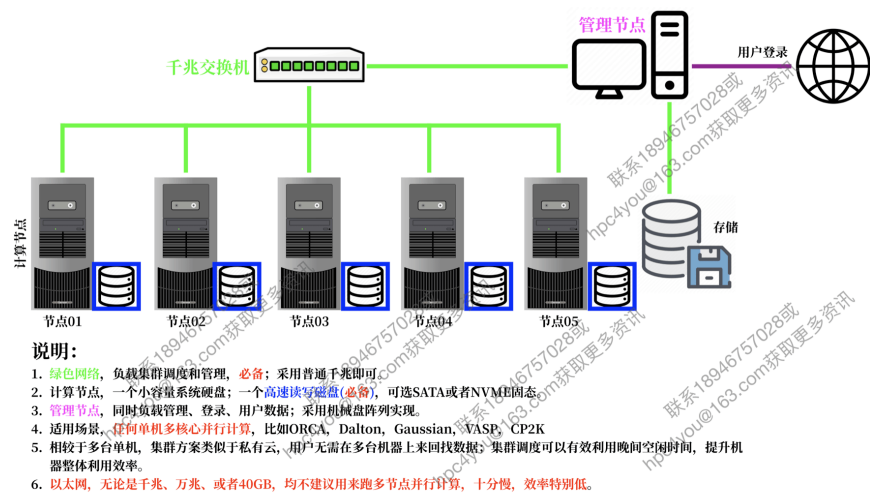
集群硬件架构方案可以查看 图 3和图 4. 各应用场景和注意事项, 请看图片上的文字, 或者查询页面<https://hpc4you.github.io/>. SLURM调度器轻松管理上万个处理器核心和各种加速卡. 实际支持的机器数量, 取决于交换机的实际容量.² 本工具套件, 并限定计算节点数量.

特别留意:

1. 为保证机器网络安全, 管理节点必需具备至少两个网卡, 用以隔离用户登录网络(图例中的紫色线路)和集群运算/管理网络(图例中的绿色线路).
2. 如果管理节点仅仅负责存储空间和调度管理, 且计算节点不超过10台, 则管理节点可以使用具有两个网卡的普通PC机器或者低配置的服务器来承担. 建议CPU指令集和计算节点处理器保持一致.
3. 不必要求所有机器处理器、内存规格一样, 只要求所有机器运行相同的操作系统版本.
4. 调度器本身支持CPU、GPU以及各类加速卡的混合调用管控.

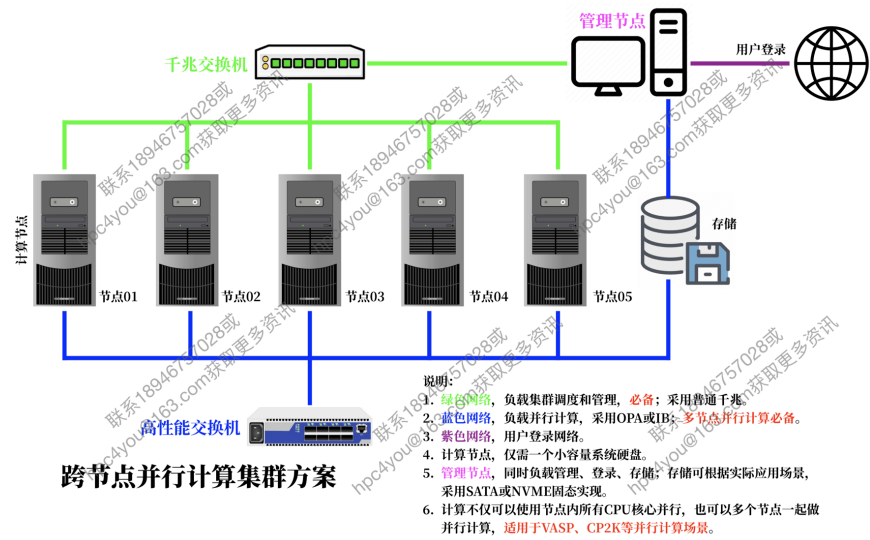
温馨提示, 合理升级网络规格, 使用单独的服务器分别承担管理、登录; 使用商用存储服务或者存储集群负责所有读写操作, 上文描述的**跨节点并行集群架构方案**, 即可适用于大规模集群. 高性能存储(或者并行文件系统)需要硬件支持, 不是耗费两三百元使用四五个硬盘就可以实现的.

²具有8个接口的交换机, 最多连接8台机器; 同理, 具有16个接口交换机, 最多连接16台机器, 这就是交换机容量.



节点内并行计算集群方案

图 3: 节点内多核心并行集群. 管理节点, 连接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 连接绿色网络的IP地址, 称之为master IP. 仅当紫色线路和绿色线路在同一个交换机/局域网时, Login IP 和 mater IP是同一个.



跨节点并行计算集群方案

图 4: 跨节点并行集群. 管理节点, 连接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 连接绿色网络的IP地址, 称之为master IP. 仅当紫色线路和绿色线路在同一个交换机/局域网时, Login IP 和 mater IP是同一个.

5.2 用户数据与应用程序

当前集群方案, 所有机器共享/home和/opt目录. 任何后续安装的软件以及各种MPI程序, 必需安装到/opt目录, 否则无法工作.³

在实际应用中, 可以将大容量数据存储盘或者阵列挂载到/home路径; 软件安装到/opt路径即可. 如计划适配单任务多节点多核心/多GPU卡并行计算, 请升级网络和存储设备.

应用软件(如有)采用singularity/apptainer单一镜像文件(Single-Image-File, SIF)提供, 直接放在/opt, 即可通过调度器直接使用. 无需考虑任何其他MPI并行环境.

使用专业存储设备. 本集群系统当然支持专业存储设备. 请先使用本工具套件完成集群系统安装. 而后查询您的存储设备手册, 将存储空间挂载到每台机器的/home即可. 根据存储手册说明, 如有必要, 请编辑每台机器的/etc/fstab文件, 将master:/home开头的内容, 变更为#master:/home, 保存变更, 重启计算节点机器.

6 安装Linux系统

本方案构建的并行计算集群基于Linux操作系统和SLURM调度器, 采用Beowulf架构(与主流超算平台架构一致).

6.1 网络规划

所有计算节点必须接入同一局域网. 网络配置提供两种方案, 用户可根据实际情况选择:

自动配置 推荐无网络基础的用户使用

手动配置 需具备网络管理能力

温馨提示: 若您熟悉DNS/DHCP服务器配置, 或使用可管理交换机, 可直接跳过本节内容.

6.1.1 自动配置方案

适用场景 快速部署, 无需手动设置IP地址

操作步骤 第一步 准备一台普通WiFi路由器, 断开其WAN口连接(确保不接入外网); 第二步 通过LAN口网线连接至交换机(参考图 3或者图 4中绿色标注的交换机接口); 第三步 系统安装时选择自动网络模式, 保持网卡为启用(ON/Active)状态即可. 第四步 去WiFi路由器管理界面, 点击鼠标, 设定MAC地址与IP绑定, 具体看WiFi路由器说明书.

部署结果 所有节点通过路由器DHCP自动分配IP(可通过路由器管理页面查看); 集群处于纯内网环境(无互联网接入).

6.1.2 手动配置方案

适用场景 无路由器时的专业部署

配置方法 (任选其一): 方法1 系统安装时在NETWORK & HOST NAME界面手动配置; 方法2 安装系统后通过nmtui或ip命令配置.

³如有其他路径要添加, 请在集群配置完毕后, 首先在master修改/etc/exports文件; 然后再修改所有nodeXX上的/etc/fstab文件. 也许setup_hpc --sync_do XXX能帮到您. 但是您需要具备一定的NFS以及fstab修改经验哦, 否则机器可能无法启动. 或者联系 ask@hpc4you.top 获取帮助.

关键要求 所有节点必须使用同一私有网段(如192.168.X.Y); 推荐使用192.168.251.X以避免网段冲突。

可以参考如下教学视频:

- <https://www.bilibili.com/video/BV11Z4y1M7xZ>
- <https://www.bilibili.com/video/BV1Bt4y1C7CB>
- <https://www.bilibili.com/video/BV1iJ411v7FG/>

6.2 下载镜像

请根据所选的底层Linux发行版名称, 选择对应的镜像。

RockyLinux 9.7	https://mirrors.nju.edu.cn/rocky-vault/9.7/isos/x86_64/Rocky-9.7-x86_64-dvd.iso
RockyLinux 10.1	https://mirrors.nju.edu.cn/rocky/10.1/isos/x86_64/Rocky-10.1-x86_64-dvd1.iso
AlmaLinux 10.1	https://mirrors.nju.edu.cn/almalinux-vault/10.1/isos/x86_64/AlmaLinux-10.1-x86_64-dvd.iso
Debian/Trixie 13.5	https://cdimage.debian.org/cdimage/release/13.5.0/amd64/jigdo-16G/

Debian13.5, 基于

debian-13.5.0-amd64-STICK16GB-1.iso
sha256_3e02353a9e68ce0df45f0ef2227b492b4e781add0e9aeae90d72d2604d77b3c6

您可自行下载, 或联系慧计算通过EMS快递获取。

注意: 本小节提到的镜像, 必须下载后放置在master机器的/root目录下。显然, 这些镜像也可用于安装系统, 前提是你的U盘容量足够大。

6.3 系统安装指南

6.3.1 镜像选择要求

推荐镜像 Rocky/Alma, 必须使用前文指定的系统镜像。

Debian 13.5用户 可以使用[debian-13.5.0-amd64-DVD-1.iso](#)安装

6.3.2 注意事项

磁盘分区配置 在INSTALLATION DESTINATION选择系统硬盘, 并指定分区方式。如有多个硬盘, 建议选择其中一个作为系统镜像, 并采用自动分区方式。其他硬盘不要勾选。

网络配置 进入NETWORK & HOST NAME界面, 选择网卡, 将右侧滑块切换至ON状态, 点击Configure, 进入高级设定, 在General选项卡勾选Auto Connect选项。默认采用DHCP自动获取网络, 您无需其他设定。

账户设置 必须设定root密码, 请勿创建任何用户。禁止创建普通用户(特殊情况可创建admin-local账户供本地维护使用)。

未提及的配置项 一律保持系统默认。

安装模式选择 请根据自己喜欢, 选择最小安装或者其他模式, 包括但不限于Server with GUI, Workstation等。如果Linux经验不足, 推荐采用最小安装。

语言选择 慧计算推荐将系统语言设置为英文(English), 以确保软件兼容性、最佳文档支持和潜在问题排查的便利性。除非您有特殊专业需求(如必须在中文核心期刊发表中文论文方可毕业), 否则建议优先选择英文作为系统语言。感谢您的理解与配合。

如果您不晓得任何自动批量安装系统的技术, 请重复以上的安装过程, root密码保持一致, hostname设定为nodeXXX, 比如, node1, node2, node03之类。有且只能有一个机器的名字是master。

如果您使用的底层系统是Rocky 9.7, Rocky/Alma 10.1, Debian 13.5, 并且是在2026年6月之后获取的工具套件, 也可以不必手动配置机器的名称, 只需记录IP地址并确保root密码一样即可。

6.3.3 密码验证与IP地址获取

系统登录验证

首次登录检查 使用安装时设置的root密码登录系统; 验证密码有效性(确保能正常登录); 确保/etc/ssh/sshd_conf存在PermitRootLogin yes(如无, 请修改; 具体查询AI协助)。

IP地址查询 执行指令: `hostname -I`, 输出结果即为当前节点的IP地址。

自动网络配置用户

查看设备列表 登录WiFi路由器管理界面; 在DHCP客户端列表中可查看, 各节点的hostname, 对应的IP地址分配情况。

注意事项 若未显示设备信息, 请检查: 网络连接是否正常; 路由器WAN口是否已断开; 节点hostname是否重复。

6.3.4 视频教程

视频教程, 可以参考<https://www.bilibili.com/video/BV1nC411W7Xv> 和 <https://www.bilibili.com/video/BV1iy421875y>。无论是CentOS7.9, Anolis OS 7.9, Anolis OS 8.8, Rocky 8.8, 还是Rocky9.5/9.7, 或者Rocky/Alma 10.x, 系统安装流程雷同。

请选择Minimal Install/最小安装, 可以缩短系统安装等待时间。

Debian安装: 请使用该镜像安装系统, <https://cdimage.debian.org/mirror/cdimage/archive/12.12.0/amd64/iso-dvd/> 镜像名称是debian-12.12.0-amd64-DVD-1.iso, 可参考视频教程; <https://www.bilibili.com/video/BV1sTh3zKEk9>。Debian12.x, 13.x, 安装流程雷同。

6.3.5 寻求帮助

如果您对本节内容(系统安装与网络配置)存在疑问或操作困难, 建议寻求具备系统安装及网络配置能力的技术人员协助完成。

6.4 上传镜像

特别留意: 请在系统安装完毕后, 请将上一步下载好的指定版本镜像文件, 上传到master机器, 放在master机器的/root目录下。

请勿连接互联网, 请勿运行dnf update或apt update或apt-get update。

表 2: 网络地址规范(推荐)

网络地址	机器名/hostname
192.168.251.254	master
192.168.251.1	node1
192.168.251.2	node2
192.168.251.3	node3
...	...

XX取50仅仅是一个示例。实际中, 要确保选用的IP地址和办公室/实验室现有IP地址不重复。

此文件是两列多行, 请勿使用其他格式。

温馨提示,

请根据您的操作系统版本, 上传对应的镜像文件即可。下载后, 不可修改镜像文件名称。

失败警告: 不兼容任何其他版本的镜像文件。

温馨提示: 在整个安装过程中, 仅系统初始安装阶段需要您直接操作物理机器。集群系统的后续安装与配置, 您只需通过SSH远程连接至主控节点(master)即可完成所有操作, 无需单独登录任何计算节点。

注意事项

1. 系统重启时可能需要现场确认各节点状态, 比如是否重启成功
2. 集群部署完成后, 所有计算节点的管理权限将统一由主控节点接管
3. 集群部署完成后, 所有机器需修改为 `PermitRootLogin prohibit-password`
4. 日常运维操作均可通过主控节点集中管理
5. 2026年6月后续版本, 提供handOver.sh模块, 运行后, 可以创建本地管理员admhpc, 该用户无法远程登录master机器; 该用户具有受限sudo权限(不能修改root密码, 不能变成root; 其他dnf/apt install均可); 该管理员可以在master无密码SSH到任何计算节点; 该用户具有slurm管理权限, 可以处置任何用户的slurm计算任务; 该用户的所有sudo行为, 受Linux内置审计系统监控。

7 开始部署

重要注意事项:

文件操作规范 请勿在Windows系统上直接解压hpc4you_toolkit*.zip压缩包(容易导致文件权限或符号链接损坏); 所有操作均需通过SSH以root用户身份远程登录指定的master节点来完成。不支持直接在master节点机房或本地登录机器后打开终端进行操作。本工具套件必须使用以下命令启动: `unzip -qo hpc4you*.zip ; source code`

硬件准备要求 确保所有硬件设备(包括附加存储设备)已完成物理安装; 必须完成硬件安装后再进行集群系统调试; 必须保持与制作hardwareXXX.dat文件时硬件完全一致。

驱动安装警告 若使用指定镜像安装系统后出现存储设备无法识别的情况, 禁止安装任何第三方驱动, 待集群系统完成安装调试后, 再处理驱动安装事宜。系统镜像未包含的驱动均视为第三方驱动, 包括但不限于IB驱动、NVIDIA显示驱动、AMD显示驱动。

	A	B
1	192.168.251.254	master
2	192.168.251.1	node01
3	192.168.251.2	node02
4	192.168.251.3	node03
5	192.168.251.4	node04
6		

图 5: 电子表格内容示例

7.1 准备工作

7.1.1 在微软上操作(非必需)

如果晓得在Linux中如何使用vi编辑器, 可以跳过所有在微软上的操作.

在微软新建一个记事本, 文件名是net-info.txt. 如果是参考表 2做的网络设定, 那么该文件的内容应该如下:

```
192.168.251.254 master
192.168.251.1 node01
192.168.251.2 node02
192.168.251.3 node03
192.168.251.4 node04
```

其中, 数字末尾和英文之间, 可以采用一个或者多个空格, 或者使用一个或者多个Tab键. 当前示例, 采用两个Tab键. 注意, 每一行, 都只有两列.

以下是一个错误的示例:

```
192.168.251.254 master my-login
192.168.251.1 node01 server01
192.168.251.2 node02 compute02
192.168.251.3 node03 host03
```

或者, 打开微软电子表格(Excel), 录入IP地址和机器名信息, 样式参考图 5, 而后复制电子表格中的内容, 粘贴到记事本, 并保存为文件名net-info.txt.

7.1.2 在master操作获取授权许可

请在您的可以上网的微软/苹果/Linux机器上, 访问地址

- <http://tophpc.top:1080/getInfo.sh>, 或者
- <https://doc.labitc.top/getInfo.sh>

下载并保存文件getInfo.sh.

远程登录master机器, 上传之前下载并保存的文件getInfo.sh到/root目录. 在终端中, 执行指令,⁴

⁴如果质疑脚本的安全性, 请点击末尾的彩色文字, 即可在浏览器打开脚本内容. <http://tophpc.top:1080/getInfo.sh>

```
To protect your rights and ensure your eligibility for the paid hpc4you toolkit,
please send the following blue text via WeChat/WeiXin or email.
版权软件付费提供。
为验证您的付费资格并保护您的权益,请通过微信或者电邮发送以下两行蓝色内容。
Please be sure to provide the file: hardware2937.dat
that was just created in the /root directory.
请务必提供/root目录下的文件: hardware2937.dat.

94ae643487ecaa745d92ffd9a2de9d2e hardware2937.dat
SN: offline

- WeChat/Weixin/微信请联系: hpc4you
- Email/电邮,请发送至: ask@hpc4you.top

Good Luck.
```

图 6: 运行**bash getInfo.sh**指令后, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同). 离线版本, 请务必下载hardwareXXX.dat文件, 并同时拷贝屏幕输出内容, 发送给慧计算。

```
cd /root
bash getInfo.sh
```

您会看到类似图 6 的输出信息。注意: 运行上述指令时, 必须移除master机器上所有的移动硬盘、U盘等所有外置硬盘。

请将/root目录生成的hardwareXXXX.dat文件, 下载到本地, 发送给慧计算。同时拷贝屏幕输出信息, 发送给慧计算。电邮ask@hpc4you.top, 微信hpc4you均可。

慧计算基于您提供的hardwareXXXX.dat文件来制作安装包。授权许可基于上述指令抓取的硬件信息生成。⁵

安装包将通过百度网盘或者特快专递方式提供。

7.1.3 无效授权处置

如果没有授权许可, 运行任何模块, 都会看到警告信息, 详细查阅图 7。

授权失效将会诱发如下事项:

1. 您无法使用本工具套件部署集群;
2. 如果集群已经安装完成, 变更硬件会导致授权失效, 您将无法使用任何_hpc结尾的指令, 无法重启/关闭集群(除非手动), 在Resource Portal中的任何修改无法生效(意味着任何新添加的用户, 均无法使用集群), 也无法再次使用本工具套件的任何模块;
3. 已经添加的用户仍可继续使用集群, 集群系统会继续正常运行。

重装系统会导致现有许可失效。 请自行重置machineID条目即可恢复许可。或者同时提供新旧dat文件, 电邮联系重新获取工具。更多信息, 请查阅<https://gitee.com/hpc4you/hpc/blob/master/FAQ.md>以及 <https://gitee.com/hpc4you/hpc/blob/master/TOS.md>。

7.1.4 上传hpc4you toolkit压缩包

为避免不必要的麻烦, 请使用root账户操作文件上传。

⁵具体细节, 可以查阅getInfo.sh脚本。


```
Sorry.  
You are NOT licensed to run this app.  
Please contact ask@hpc4you.top via email to request a valid license file.  
License files are only available upon payment.  
Contact ask@hpc4you.top for details.  
Bye.
```

图 7: 无效授权许可会看到的提示信息(背景颜色可能不同).

上传压缩包到master机器/**root**目录.

上传**net-info.txt**文件到master机器/**root**目录(如直接在Linux中使用vi编辑器, 可以忽略**net-info.txt**文件相关操作).

根据教程B站视频号BV1GY411w7ZV操作, 文件会自动出现在master机器/**root**目录.

7.1.5 继续在master机器操作

请采用root用户通过ssh登录到master机器, 继续操作.

修改网络信息, 请依次执行指令(仅适用于在微软系统上创建了**net-info.txt**文件的情形):

```
cp /etc/hosts /etc/hosts.original
```

```
dos2unix /root/net-info.txt
```

```
cat /root/net-info.txt >> /etc/hosts
```

录入网络信息操作完毕. 请根据实际情况, 替换**net-info.txt**为实际的文件名.

如果你晓得使用vi, 请直接修改master机器上的/**etc/hosts**文件, 额外添加如下的内容并保存:

```
192.168.251.254 master  
192.168.251.1 node01  
192.168.251.2 node02  
192.168.251.3 node03
```

7.1.6 主机名与IP地址配置规范

对于2026年6月之后的工具套件版本, 可以不必手动设定机器名称, 仅需在master机器/**etc/hosts**文件中, 录入各机器的IP地址和预期名称即可; 管理机器必须是master; 所有计算节点必须是node前缀, 后缀是数字, 比如node01, node11, node2之类, 只能是前缀node与后缀数字组合, 不接受任何其他字符.

命名规则

禁止使用的名称 不得使用**localhost**或**null**作为主机名.

标准命名格式 必须采用node+数字的命名方式(如node123); 非标准命名将导致部分集群功能不可用.

地址映射规则

别名配置 允许单个IP地址对应多个主机名(私有别名); 私有别名可与**hostname**命令返回值不同; 所有别名必须指向同一物理节点

配置文件管理 新增记录将追加至**/etc/hosts**文件末尾; 无需修改现有文件内容; 必须确保所有主机名唯一不重复

严格限制

禁止单个主机名/别名对应多个物理节点.

7.2 开始安装

必须采用root用户直接远程登录主控机器完成以下各操作, **sudo**操作肯定失败.

请勿在您自己的电脑上解压**hpc4you_toolkit*.zip**压缩包.

7.2.1 运行逻辑

无论您自己使用微软、苹果或者Linux系统笔记本或者台式机, 都要求您通过任何一个SSH客户端, 远程登录到目标服务器上进行操作. **直接链接键盘鼠标显示器, 在服务器上操作, 将看不到终端的提示信息, 进而无法复制粘贴.**

Step0 上传必要的rpm/deb安装包到master机器/**root**路径. 此类文件, 由慧计算提供, 您也可以去rpm站点下载. 仅有采用**最小安装模式**, 才需要此rpm文件. 请访问百度共享获取: 链接: <https://pan.baidu.com/s/10XS1rZhFgZHmKCUTeZJpUg?pwd=h43a> 提取码: h43a . 或者查询快递U盘获取.

Step1 上传镜像文件到master机器/**root**路径. **必须使用上文指定的特定DVD镜像, 并且不可修改镜像文件名称.**

Step2 上传软件包**hpc4you_toolkit*.zip**到master机器上, 放在/**root**路径. **不可修改压缩包名称.**

Step3 SSH远程登录master机器, 输入指令(红色内容全是指令, 最小安装缺少unzip, tar等指令, 故此安装之; 只有最小安装模式, 需要执行此步)**rpm -i *rpm 或 dpkg -i *deb**

Step4 登录master机器, 输入指令(红色内容全是指令)**unzip -qo hpc4you*zip ; source code**, 程序启动, 耐心等待, 按照屏幕提示操作. 操作选项要么是: 请复制屏幕提示的**绿色文字**, 而后再次登录, 粘贴复制的绿色文字, 按回车键; 或者是, 请复制屏幕提示的**绿色文字**, 请确认所有机器重启完毕后, 再次登录, 粘贴复制的绿色文字, 按回车键.

其中类似**Step4**的操作, 需要重复几次.

7.2.2 自助模式

第一步 确认已经完成**小节 7.1**描述的准备工作.

第二步 确认所有机器均已开启root登录, 并且密码相同.

第三步 解压**hpc4you_toolkit*.zip**, 请输入指令(全英文输入, 中间那个是键盘上的分号):

```
unzip hpc4you*zip ; source code
```

后续所有的操作指令, 都会自动在屏幕上以**绿色**显示, 直接复制粘贴按回车键即可完成集群组建.

```
The cluster system installation is now complete.

The whole cluster is going to reboot in 15 seconds.
Please log in as root again after the restart
to view the administrator password and access links.

Attention Administrators/Managers,
    Please find the administrator password and links to each portal
    by running the following cmd on the master node(root only):
        cat /root/.hpc4you/login_credentials.txt

!!! Alert !!!
The client/user cannot log in the HPC User Portal
    unless the Administrators/Managers,
        - first, create users via User/Group Portal
        - second, allocate resources via Resource Portal.

    For detailed instructions, please consult the manual.

Countdown to reboot: 3 ...
```

图 8: 安装完毕, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同).

温馨提示:

自助服务模式

技术支持政策, 选用自助模式时, 所有安装过程及使用问题, 技术支持回复仅限: “请查阅手册并参考视频教程”. 学习资源, 必须仔细阅读本操作手册; 需观看B站官方视频教程; 严格按手册步骤操作可确保安装成功.

付费服务选项 增值服务 如不愿查阅手册和视频; 可选择付费技术服务; 专业集群运维托管服务

重要说明: 历史数据表明, 所有需要技术支持的情况, 均源于未认真阅读文档和观看教程, 并秉持“我以为...”的自主创新.

7.2.3 技术协助模式

第一步 确认已经完成**小节 7.1**描述的准备工作. **提供有偿技术协助.**

第二步 确认所有机器均已开启root登录, 并且密码相同.

第三步 联系慧计算, 可以根据实际需要, 采用在线视频、文字、电话技术支持.

7.3 安装完毕

按照屏幕提示, 运行完毕最后一个模块后, 会在屏幕看到提示信息, 请参考**图 8**.

密码信息, 管理员知晓即可, 无需分享给用户. 同时密码信息也会以文本形式, 存放在登录节点, 文件名称是/root/.hpc4you/login_credentials.txt, 只有root账户可以查看. 示例样式请参考**图 9**.

至此, 可视化科学计算系统部署完毕.

特别重要: 集群系统配置完毕后, 用户不可变更或者修改或者移动master机器/root目录下的hpc4you_toolkit-web-offline*文件夹, 否则部分功能/模块无法工作.

```
# BOF

The Linux root user is not allowed to login any Web Interface.

User/Group Portal:
    The login name is:      admin
    The password is:       liQWWvbpBqJc

Resource Portal:
    The login name is:      admin-FJGX
    The password is:       aUSaFConNvYJ

Choose a browser (Firefox, Edge, or Safari) to open the following URL
to access the HPC via Web.

    URL:      https://192.168.56.156:8404

Performance Monitoring: Real-Time Dynamics
    URL      http://192.168.56.156:19999/v2

Performance Monitoring: Historical
    URL      http://192.168.56.156:7080/hpc4you
# EOF
```

图 9: 文件login_credentials.txt内容示例(背景颜色以及链接地址可能不同).

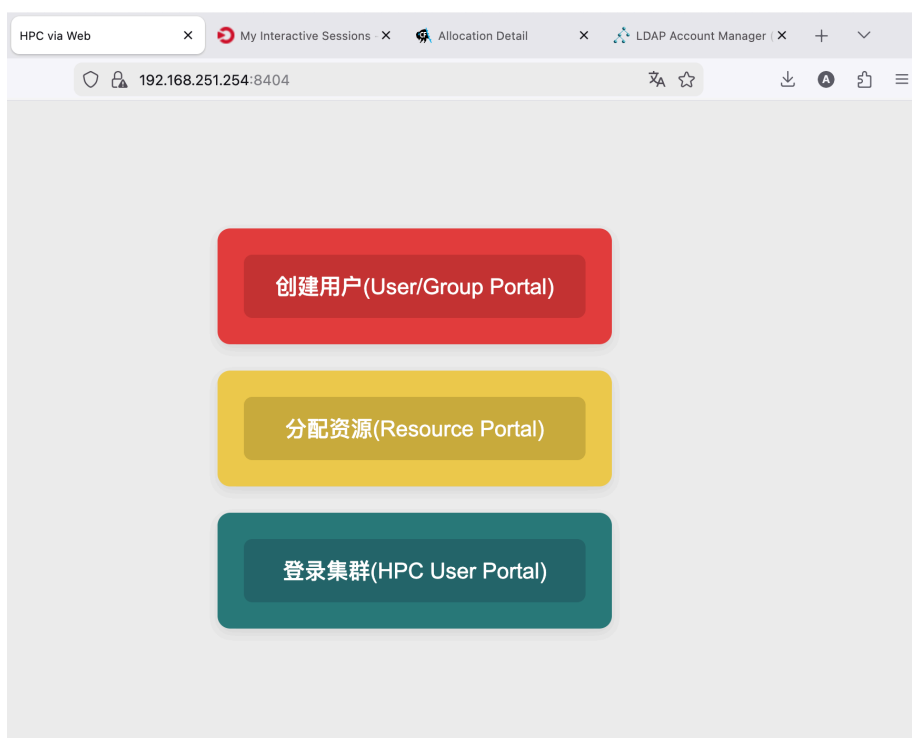


图 10: Firefox浏览器页面示例(文字样式可能不同).

8 责任与义务

系统配置说明

1. 本集群系统所有配置文件均以明文形式存放于默认位置
2. 除以下特殊二进制文件外, 系统仍属自由软件范畴:

- `/usr/sbin/reboot_hpc`
- `/usr/sbin/poweroff_hpc`
- `/usr/sbin/loveYou_hpc`
- `/usr/sbin/setup_hpc`

用户修改权限

1. 用户有权修改系统配置文件, 但需注意:
 - 所有配置修改行为及后果由用户自行承担
 - 修改需确保参数符合实际情况并遵循配置文件格式规范
 - 合理修改(如调整slurm.conf、设定分区/队列、增删节点等)不会影响系统正常运行

技术支持范围

1. 慧计算提供的技术支持服务包括:
 - 告知各Web Portal配置文件所在目录
 - 提供相关参考手册信息
2. 慧计算不提供的服务包括
 - 配置文件编辑指导
 - 配置文件内容解读
 - 参考手册内容解读
 - 判定/回复配置文件是否合理

免责声明

1. 以下情况慧计算不承担责任
 - 因用户修改配置文件导致的系统异常
 - 硬件故障(包括但不限于机器不稳定、散热异常、交换机故障等)导致的系统问题
2. 若系统部署完成后未做任何修改即出现以下异常, 慧计算将提供技术支持:
 - Web Portal无法正常工作(部分特殊硬件会遭遇此情况)
 - 调度器异常
 - 队列异常

9 工具套件安装演示

以上文字版描述, 也可以查阅如下原始操作录屏, 无旁白.

无论是单机工作站还是多机器集群模式, 流程雷同.

操作录屏 <https://www.bilibili.com/video/BV1We41117Ph>, 约25分钟.

录屏剪辑版 <https://www.bilibili.com/video/BV1ca4y1y7Jj> 2分20秒, 有文字注释.

10 管理集群: 仅限管理员操作

系统管理特性

1. 本集群系统采用免维护设计, 日常工作仅限于:

- 用户账户的添加/删除
- 通过可视化界面分配队列资源
- 所有操作均可通过浏览器完成, 无需root权限登录

基础管理模式

1. 单一课题组使用建议:

- 为所有成员创建用户账户
- 统一指定相同的记账账户
- 系统将自动保持用户优先级一致

高级配置说明

1. 如需实现以下功能: 配置多队列系统; 设置差异化用户优先级. 则需要:

- 参考SLURM官方文档进行参数配置, 包括但不限于QoS
- 或购买专业技术支持服务

重要注意事项

1. 硬件维护责任:

- 硬件故障不属于系统运维范畴
- 出现硬件问题请直接联系设备供应商走售后流程

2. 管理权限说明:

- root账户无法通过Web界面登录
- 所有管理操作均需通过专用管理界面完成
- root账户仅用户底层Linux系统维护以及应用软件安装配置

温馨提示: 本系统设计初衷是降低使用门槛, 如管理员需要对既有设定作出变更或者调整, 建议管理员掌握基本的Linux系统管理以及Slurm管理知识, 以便更好地理解系统运行机制. 对于计算用户而言, 使用体验和现有任何超算保持一致, 无任何学习成本.

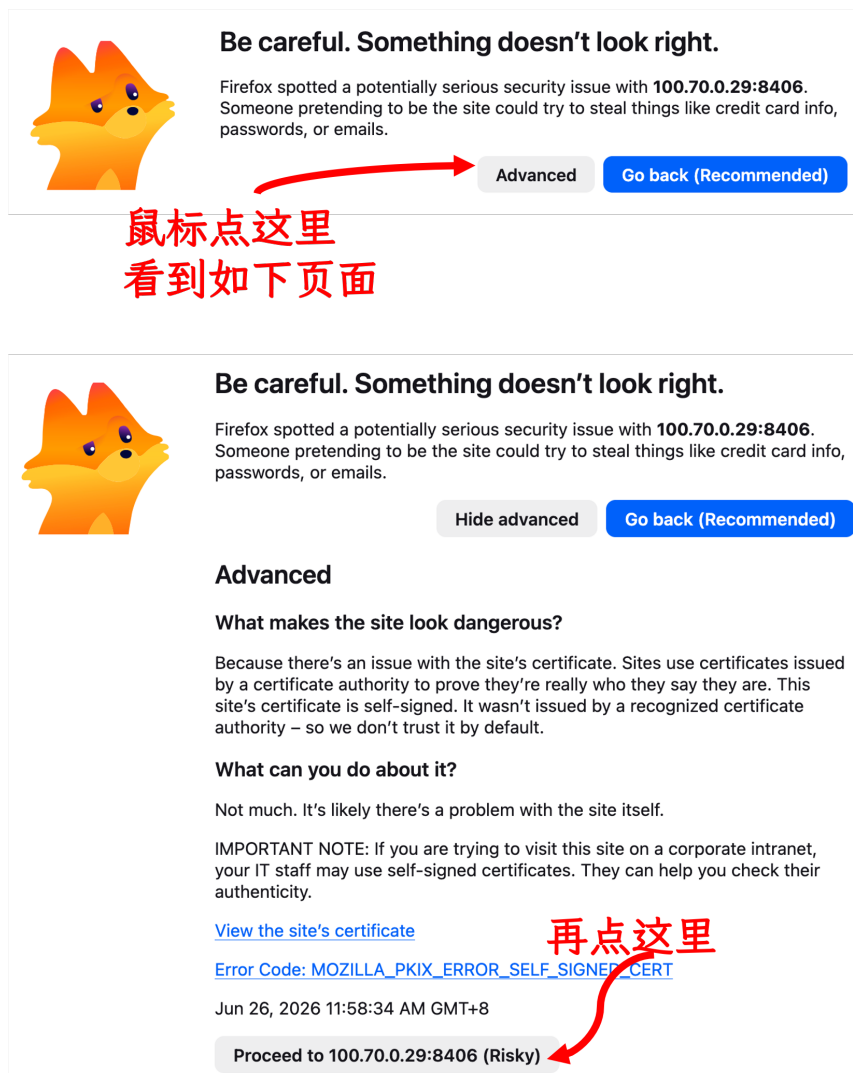


图 11: 浏览器安全证书警告, 请点击鼠标, 添加例外.

10.1 修改root密码

集群组建完毕后, 可以直接在master机器, 修改root密码, 直接输入:

```
passwd  
setup_hpc --sync_user
```

按照屏幕提示操作输入新密码即可. 第一条指令, 设定新的root密码. 第二条指令, 同步新的root密码到所有机器.

所有Web端的操作, 均和系统root用户无关.

最简单的安全设定是, 集群配置完毕后, 仅仅允许特定地址登录root用户. 其他高级的安全设定, 请查阅Linux SSH安全设定.

首次点击User/Group Portal或者Resource Portal会看到证书警告页面, 参见图 11处理.

10.2 root密钥

采用系统默认位置, 存储root用户SSH密钥: `/root/.ssh/authorized_keys`. 示例如下:

```
ssh-ed25519 AAAAC3NzaC1lZDI1NTE5AAAAIIJ/UA4AFQS7qKWS/BKG/yt3f7hBVS10K2KfE2KjQnJZ loginKeybyHPC4YOU
ssh-ed25519 AAAAC3NzaC1lZDI1NTE5AAAAIAChnKhYxrRJAjExsOE6M3fVnvcUjm5zqq3QSFfcfxaS cluster.Internal.Key
```

其中,

loginKeybyHPC4YOU root用户访问所有机器的SSH密钥.

cluster.Internal.Key 是集群系统, 为每一位用户创建的密钥. 显然, 集群系统部署完毕后, root用户登录时候, 系统也会给root创建密钥.

根据需要, root密钥中可能会包含如下密钥. 如有, 会和下面的每一个字符都一样.

```
ssh-ed25519 AAAAC3NzaC1lZDI1NTE5AAAAINei+DFvqTAWA5E2/vT/DKiqmFusUaA7XkSIY3eQb2g3 hpc4you-remote-net
```

为保障集群初期部署、调试及技术支持的顺利进行, 本集群预置了一把专用的技术支持SSH密钥, 标注为. 请用户完全无需担忧, 该密钥由慧计算工具统一生成和管理, 仅用于授权的技术人员在必要时提供远程协助, 具有严格的权限控制和审计机制, 在正常使用环境下并无安全危害. 为进一步提升系统安全性, 建议在集群完成部署、调试并正式验收后, 若不再需要技术支持, 可自行删除该预置密钥(位于[/root/.ssh/authorized_keys](#)文件中对应条目). 删除后不会影响用户的正常计算任务和日常登录.

通过SSH密钥登录集群机器时, 需同时满足以下两个基本条件:

网络可达 登录设备与目标节点之间网络连通;

密钥有效 所持私钥与服务器端授权公钥匹配且未被撤销.

计算集群部署于安全的私有局域网中, 外部人员无法满足网络可达条件, 因此即使预留该技术支持密钥, 也无法被外界利用. 请用户放心使用, 并在日常运维中根据实际需要妥善管理密钥.

为提升用户在使用集群时的便利性, 同时确保系统安全, 本集群内部机器之间支持基于SSH密钥的无密码登录方式: 用户可通过预先配置的SSH密钥, 无需输入密码直接登录到计算节点. 但此无密码登录仅限于用户在该节点上有正在运行的计算任务时有效; 若用户在目标节点上无任何计算任务, 则SSH登录将被系统自动拒绝, 以防止计算资源被盗用, 同时有效避免计算节点过载. root用户作为默认的运维管理员账号, 不受上述任务限制约束. root用户可在任何时间直接SSH登录到集群内的任意节点. 若root用户无法登录计算节点, 通常原因是节点资源过载(负载过高)或网络连接故障.

上述无密码登录功能所依赖的SSH密钥, 统一存放于用户家目录下的默认`.ssh`目录中. 请用户妥善保管私钥文件, 切勿泄露或不当权限设置.

10.3 变更Web地址

操作前, 需要所有用户退出各Web Portal.

需root用户在master机器执行指令(请关闭中文输入法):

```
./updateWebAddress.sh
```

按照提示, 输入y按Enter; 如果认为猜测得到的IP地址与实际不符, 请输入n按Enter, 再输入实际的IP地址, 再按一次Enter.

必须按照屏幕提示, 重启机器.

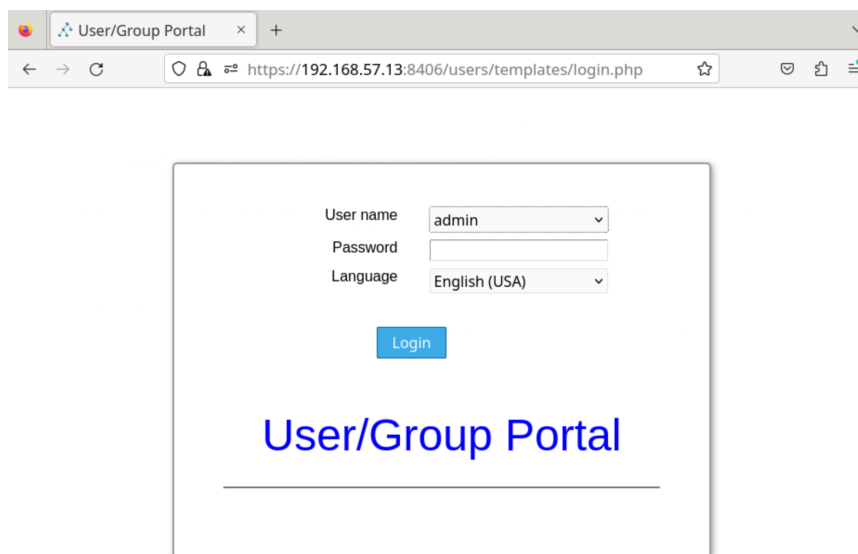


图 12: 注册用户(User/Group Portal)登录界面示例。

10.4 添加用户(组)

对于2026年6月之后的工具套件版本, 集群系统部署完毕后, 默认自带一个测试用户。用户名是tom, 密码是111111 (六个数字1)。

10.4.1 技术规范

注册用户(User/Group Portal)

请点击图 10 示例页面对应文字, 将会看到图 12 示例页面。

特别重要: 所有输入框, 仅限英文或者拼音。详细要求, 请鼠标点击输入框后面的问号查阅。

在Linux系统中, 登录名(login name), 也称作用户名(username), 是用户登录时使用的字符串标识。用户名有严格的规则限制:

1. 请勿超过32个字符
2. 允许字符: 小写字母, 数字, 下划线(_), 短横线(-)
3. 限制: 必须字母开头; 请勿下划线或短横线开头; 不能以美元符号(\$)结尾; 不能包含大写字母; 禁止使用空格, 冒号, 逗号, 斜杠, 反斜杠, @, *, ?, %, &等特殊符号, 以及控制字符; 不能是纯数字; 不能包含Unicode或者非ASCII字符。

温馨提示: 基于上述技术规范, 不再讨论或解释用户名为何不支持中文相关问题。同时, 请避免使用为什么不支持中文、系统怎么这样等质疑性表述。感谢您的理解与配合, 这些规范旨在保障生产环境的稳定性、兼容性和安全性。

10.4.2 管制逻辑

基于Linux系统用户组/用户模式进行权限管理。

必须先有一个用户组/Group, 再把用户归属到用户组/Group。

一个用户, 可以隶属于一个或者多个用户组。添加用户过程中, 浏览器页面会提示用户选择所属用户组。



图 13: 自定义用户信息模版操作示例(IP地址可能不同).

任何使用集群系统的用户, 均需在此页面进行注册登记.

10.4.3 添加用户/组

添加用户组/Add Group 请点击Accounts -> Groups -> New Group

添加新用户/Add User 请点击Accounts -> Users -> New user

特别注意: Email address和Gecos条目必须填写.

默认的用户模板条目很多, 您可以自定义用户信息模版, 操作流程请参考图 13.

特别重要:所有的集群用户/组, 必须通过此User/Group Portal来创建. 使用Linux系统指令useradd添加的用户, 无法使用集群系统.

10.4.4 删除用户/组

请打开浏览器, 访问User/Group Portal, 点击打开Users列表页面, 点击删除按钮即可.

如果某用户组包含有用户, 则应该先删除所有该用户组里面的用户, 再删除此用户组.

10.4.5 视频教程

文字说明配合如下视频教程, 可能帮您迅速掌握操作流程.

- 注册用户 <https://www.bilibili.com/video/BV1eN411T7jJ>
- 简化信息模版 <https://www.bilibili.com/video/BV1uC4y1P7YA/>

10.5 资源分配管理

10.5.1 技术规范

[Resource Portal](#)

点击图 10页面中对应的文字, 即可访问.

Resources Portal基于ColdFront. 感谢ColdFront团队的贡献. 如有闲工夫, 可以查阅ColdFront站点, <https://coldfront.readthedocs.io/en/latest/>, 获取更多原汁原味操作说明.

温馨提示: 以上Resources Portal Web端的操作, 后台会自动调用**sacctmgr**指令进行操作. 默认在master机器的计划任务中每隔三分钟执行一次. 在master机器输入**crontab -l**会看到:

```
*/3 * * * * /sbin/loveYou_hpc 2>/dev/null
```

请勿删除此计划任务. 故此, 任何在Resources Portal的操作, 5分钟内必生效.

依旧支持完整的**sacctmgr**指令模式. 您依旧可以使用**sacctmgr**指令, 进行**slurm accounting**, **QoS**等方面的操作. 请无视或者忽略Resources Portal即可. 指令模式的**sacctmgr**如何使用, 不在本手册讨论范围内.

特别重要: 所有输入框, 仅限英文或者拼音.

10.5.2 资源与记账账户管理说明

本文所述记账账户特指Slurm调度系统原生支持的资源计量功能(Native Accounting), 其核心特征包括: 精确到用户/项目的资源消耗统计; 包含CPU时、GPU时、内存占用等核心指标; 支持walltime/实际使用时间比对. 所有第三方计费系统均依赖Slurm生成的原始使用记录进行二次加工. 虽然记账账户本身不直接处理金融结算, 但为计费系统提供: 不可篡改的资源使用证据链; 可追溯的历史记录(保留周期可配置); 多维度统计报表生成基础. Slurm调度器中, 任何涉及优先级限定、资源限定(作业数目等)都依赖于Slurm数据库来实施. 详情, 参考<https://slurm.schedmd.com/accounting.html>.

用户权限与访问控制:

1. 资源门户(Resource Portal)访问权限:

- 所有集群用户均可登录访问
- 未登录用户仅可查看资源分配信息(只读权限)

2. 管理员专属权限

- 资源申请的审批操作(批准/拒绝)
- 记账账户的分配与管理
- 赋予用户PI权限

项目管理机制:

1. 项目创建权限: 仅限课题负责人(PI)

2. 成员管理

- PI可添加/移除项目成员
- PI可指定项目管理员(Manager)
- 项目管理员拥有成员管理权限(添加/删除用户)

特别留意: 所有用户必须已在User/Group Portal完成注册.



图 14: 计算中心—PI—项目管理模式

一个简单可行的项目管理可参考图 14. 显然一套集群(或一个超算中心)可以拥有多个PI(课题总负责人), 一个PI, 可以有一个或者多个项目.

记账账户管理规范:

1. 账户分配原则

- 资源申请时由管理员为PI分配Slurm记账账户(**slurm_account_name**)
- 支持灵活配置
 - 多项目共用同一账户
 - 各项目独立账户
 - 各用户独立账户
 - **推荐, 一个项目一个账户**

2. 用户多账户说明

- 单个用户可参与多个项目
- 默认使用主账户
- 可指定使用其他项目账户

更多技术讨论, 请参阅Slurm官方, <https://slurm.schedmd.com/accounting.html>.

10.5.3 登记集群信息

本离线版本, 会自动录入slurm数据库信息, 无需手动登记.

10.5.4 赋予用户PI管理权限

任何PI/课题组长可以在此系统登记Project信息, 并添加用户到自己的Project以及户头/记账账户(slurm account).

注意, PI/课题组长具有部分用户管理权限, 所以添加PI到系统, 需管理员单独确认.

以用户tom为例, 演示如何将其提升为课题负责人(PI).

第一步 使用tom登录分配资源(Resource Portal), 成功登录后, 然后点击右上角Logout.

第二步 使用管理员登录分配资源(Resource Portal), 依次点击Admin -> ColdFront Administration -> (左侧最下方) User profiles -> 点击tom -> 勾选 Is PI -> SAVE; 至此, 已经向Resources Portal系统声明, tom用户是PI/课题组长.

tom可以再次登录分配资源(Resource Portal), 创建项目, 添加用户, 申请资源; 或者将用户从某Project中移除(比如学生毕业了). 当然, PI只能添加已经被管理员添加到User/Group Portal系统的集群用户.

演示视频: [BV1PM411C7Cs](#) (请点击彩色文字或者复制彩色文字去B站搜索).

可以看出, Resources Portal的核心逻辑就是, 和PI直接打交道. 至于添加哪些用户到哪些项目, 是PI自己根据实际需求来操作的. 管理员, 只需审核一下(看一下记账账户是否正确), 然后点击鼠标通过即可(Approve).

10.5.5 视频教程

赋予PI权限 <https://www.bilibili.com/video/BV1xN411T7XN>

审核资源申请 <https://www.bilibili.com/video/BV1ka4y1U7eX>

10.6 资源限定QoS

限定博士跑多少个作业, 硕士跑多少作业; 限定张老师跑多少节点, 限定李老师最多跑多少作业, 提交多少作业.... 等等

如有任何此类想法, 那么您需要SLURM的QoS功能.

使用本手册描述的工具套件, 配置完毕的集群系统, 默认支持QoS; 默认有且只有一个QoS, 名称是normal. 您需要根据实际需求, 创建实际的QoS条目.

某用户可以同时运行多少个作业? 这需要结合实际使用情况进行具体分析. 以仅使用CPU核心的场景为例, 通常受以下条件限制:

- 该用户同时可运行的任务数量上限(MaxJobsPerUser);
- 该用户总共可使用的CPU核心总数(MaxCPUsPerUser).

只要达到上述任一条件的限制, 系统即会对该用户进行任务调度约束.

举例来说, 假设用户tom最多可使用120个CPU核心, 同时最多允许运行10个任务.

- 若每个任务使用60个核心, 则tom最多同时运行2个任务, 超出部分将进入排队等待状态.
- 若每个任务使用2个核心, 则tom最多同时运行10个任务, 第11个及后续任务将排队等待.
- 若每个任务使用16个核心, 则tom最多同时运行7个16核心任务, 第8个及后续16核心任务将排队等待.

温馨提示: 如果系统满负荷, 亦即没有空闲的CPU资源, 即使用户tom未运行任何作业, 新提交的任务也会排队等待, 原因是机器满负荷, 无空闲资源.

10.6.1 技术规范

sacctmgr, 是个啥? 谁在用? 简单说, sacctmgr是SLURM集群的后台管理工具, 就像公司的人力资源系统或财务系统后台。

谁能用? 只有系统管理员(默认root用户)能用它来增删改设置。普通用户只能用它来看看自己的信息, 不能改。

用来干嘛? 管人: 管理员用它来开通/管理用户账号。没在这个系统里开通账号, 你就没法在集群上跑计算任务。要么手动执行此功能, 要么通过分配资源(Resource Portal), 将用户添加到Project, 并通过审核即可完成。

管资源 管理员用它来设置各种规则: 比如:

- 服务质量/QoS, 可以理解成任务优先级套餐或资源使用套餐
- 可追踪资源/TRES, 就是可以精确统计和限制的资源类型, 比如CPU、GPU、内存、许可证等。

特别强调: 在SLURM手册术语中, account并非您用来登录系统的用户名或者登录ID。为了简化叙事, 如果在分配资源(Resource Portal)中, 一个项目/Project仅仅对应一个slurm account name, 任何一个用户, 仅仅隶属于一个项目/Project, 此时, SLURM中的account, 就对应slurm account name, 也叫做记账账户, 或者会记账户。此时, 多个用户共享一个记账账户, 显然, slurm依旧可以统计每一个用户的实际使用信息(包括但不限于CPU核时, GPU卡时)。

QoS可以简单理解为某种套餐, 比如某某手机套餐。显然, 这个套餐, 可以针对单个用户, 也可以针对一个公司或者企业, 比如集团号这种套餐。为了简化叙事, 简化管理操作, 推荐, 一个Project/项目, 配置一个QoS。

10.6.2 常用限定条目

针对课题组科研使用场景, QoS可以使用如下的限定指标:

MaxJobsPerUser The maximum number of jobs that can be running for a user at any given time. 最多跑几个任务。

MaxCPUsPerUser The maximum number of cpu cores that can be assigned for a user at any given time. 用户可以使用的CPU核心数量上限。

MaxSubmitJobsPerUser The maximum number of jobs that a user can submit at once (not necessarily running). 最多能提交多少任务。

MaxJobsPerAccount The maximum number of jobs that can be running for a specific account at any given time. 如果按照上文描述的简单叙事方案, 就是某Project/项目可以跑多少个任务。

MaxSubmitJobsPerAccount The maximum number of jobs that can be submitted by a particular account. 如果按照上文描述的简单叙事方案, 就是某Project/项目可以提交多少个任务。

当用户隶属于多个项目并对应多个QoS时, 其机制类似于: 您的智能手机可以安装多张SIM卡, 每张卡对应不同的资费套餐。具体如何计费、能够访问哪些资源或服务, 取决于您当前使用的是哪张SIM卡以及对应的套餐。

类似地, 如果账户与QoS匹配错误, 系统将提示Invalid association/account or account/partition combination等相关错误信息。

Allocation Attributes		+ Add Allocation Attribute	- Delete Allocation Attributes
Attribute	Value		
slurm_account_name	acc_teacher		
slurm_specs	Fairshare=100		
slurm_specs	QOS+=teacher		
slurm_user_specs	Fairshare=parent		

图 15: 在分配资源(Resource Portal)页面, 给项目赋予QoS.

10.6.3 创建QoS示例

请超级管理员, 操作:

```
sacctmgr -i add qos teacher
sacctmgr -i modify qos teacher set MaxJobsPerUser=4
sacctmgr -i modify qos teacher set MaxCPUsPerUser=256
sacctmgr -i modify qos teacher set MaxSubmitJobsPerUser=100
sacctmgr -i modify qos teacher set priority=1000

sacctmgr -i add qos student
sacctmgr -i modify qos student set MaxJobsPerUser=2
sacctmgr -i modify qos student set MaxCPUsPerUser=64
sacctmgr -i modify qos student set MaxSubmitJobsPerUser=10
sacctmgr -i modify qos student set priority=0
```

如上, 创建了两个QoS, 名称分别是, teacher, student. 限定规则, 就是字面意思.

简单一点, 一个QoS可以限定到整个项目, 会对当前项目中的所有用户生效. 选择Allocation attribute type, **slurm_specs**, 填入**QOS+=teacher**. 操作效果, 参考图 15.

其他复杂的设定, 请自学SLURM手册.

10.6.4 给项目赋予QoS

登录分配资源(Resource Portal), 按照图 15示意菜单操作:

温馨提示: 如果您完全胜任sacctmgr指令操作技能, 可以无视分配资源(Resource Portal)管理系统.

10.6.5 QoS高阶功能

更多QoS使用技巧, 请参考:

1. <https://slurm.schedmd.com/qos.html>
2. <https://slurm.schedmd.com/accounting.html>

11 申请成为PI: 管理员与用户均可操作

11.1 管制逻辑

任何一位已经在User/Group Portal登记注册的用户, 都可以向管理员申请, 成为课题组长/PI.

或者管理员, 根据实际工作经验, 结合如下两种模式, 可以自行确认哪位用户ID具有PI权限.

模式1 集群仅有你们一个课题组使用, 建议管理员自己作为PI, 创建一个项目, 把所有用户添加到项目即可. 无需记录slurm_account_name信息.

模式2 有多位老师使用集群. 一般而言, 每个老师下面可能会有多位学生. 此种情形, 建议给每一位老师创建一个PI权限的账户. 虽然, 这些PI权限的账户未必会直接登录做计算, 但是管理起来很方便. 管理员仅需以PI的账户登录Resource Portal, 添加对应的学生到项目即可. 管理起来十分清晰明了. 否则, 您可能需要查阅slurm手册, 十分精通slurm account数据库相关的操作.

11.2 课题组长/PI权限

在HPC使用层面, 课题组长/PI和普通用户没有差异.

仅仅在Resource Portal系统中, 课题组长/PI具有如下权限:

- 创建或者移除项目/Project
- 申请计算资源
- 添加用户到自己的项目/Project, 或者从自己的项目/Project移除用户.
- 指定某一位用户为Manager(项目管理员), 该管理员可以从Project添加用户、删除用户.

11.3 视频教程

仅有课题组长/PI可以创建项目和申请资源, 视频教程在此 <https://www.bilibili.com/video/BV15C4y177Q9>.

显然, 课题组长/PI在Resource Portal所有操作, 管理员都可以代劳.

12 登录和使用集群: 用户层面

12.1 登录集群

传统SSH指令模式和Web界面并存.

SSH访问模式, 不再赘述.

温馨提示: 用户信息已经交由User/Group Portal管控, Linux系统自身的useradd, groupadd, userdel, passwd等添加的用户和用户组, 无法使用Web界面.

[HPC User Portal](#)

点击图 10页面中对应的文字, 即可访问.

 **HPC Account Initialization**

首次登录系统，请按顺序完成以下两步操作。

This is your first login. Please complete the following two steps in order.

Step 1 · 第一步

👉 点击打开终端开始初始化 · Click Here

在弹出的终端窗口中，按顺序执行以下操作：

In the terminal window, perform the following steps in order:

1. 输入 `yes` 并按 `回车键`

Type `yes` and press `Enter`

2. 输入登录密码（屏幕无任何显示）后按 `回车键`

Enter your password (nothing will appear on screen) and press `Enter`

3. 等待出现 "**Account initialization completed**" 提示后，关闭终端窗口

Wait until you see "**Account initialization completed**", then close the terminal window

⚠️ 请确保输入法为英文状态。输入密码时屏幕无回显，属于正常现象。

⚠️ Make sure your input method is set to English. It is normal that nothing appears on screen while typing the password.

Step 2 · 第二步

👉 点击此处完成初始化 · Click Here

点击后系统将自动跳转至仪表盘，初始化全部完成。

After clicking, you will be redirected to the dashboard. Initialization is now complete.

图 16: Web界面用户首次登录提示信息.

微信: hpc4you

第33页, 共48页

电子邮件: ask@hpc4you.top

12.1.1 账户初始化

用户首次登录[HPC User Portal](#), 需要完成账户初始化操作. 提示信息参见图 16.

请根据页面文字指引, 点击鼠标, 并输入yes, 然后按Enter键, 而后输入密码(输入密码过程中屏幕不做任何反应), 再次按要求点击鼠标.

操作过程中, 请关闭中文输入法.

12.1.2 账户初始化视频教程

请查阅链接 <https://www.bilibili.com/video/BV1sW4y1p7Eh>.

12.1.3 菜单功能

登录[HPC User Portal](#)之后, 你可以:

- 点击Files菜单, 进行文件相关的操作, 包括但不限于查看、编辑, 上传、下载文件.
- 点击Jobs菜单, 查看或者提交新计算
- 点击Clusters菜单, 通过浏览器进入Shell指令模式
- 点击Interactive App -> Desktop, 开启Linux桌面(仅专业版本提供).

可开启Linux桌面, 意味着, 可以使用任何需要在图形界面下才可以使用的专业软件.

12.1.4 提交计算

其中Job composer, 用来新建计算任务, 点击鼠标通过调度器自动运行. 其业务逻辑/work flow是,

1. 选择从之前的作业创建新任务. 那么会自动拷贝既有作业目录下的所有东西, 到一个新目录, 并提示用户修改输入文件等等, 然后点击Submit提交任务. 这里涉及的目录创建、跳转是自动的, 无需用户关心. 该业务逻辑/业务流程适用于, 已经完成了部分计算, 然后在输出结果基础之上, 稍作修改, 做新的计算.
2. 或者提示用户输入脚本路径, 会自动拷贝该路径下的脚本到一个新目录, 提示用户点击鼠标上传输入文件到此目录; 如有必要, 点击鼠标修改模版脚本, 然后点击提交. 这里涉及的目录创建、跳转是自动的, 无需用户关心. 如果无需修改CPU和内存数目, 直接提交即可.

12.1.5 操作演示

演示视频: [BV1PM411C7Cs](#) 1:02开始 (请点击彩色文字或者复制彩色文字去B站搜索).

Job composer演示部分, 涉及两种类型的计算软件:

1. VASP类, 无需指定输入文件名称, 仅需修改脚本指定核心和内存;
2. Gaussian/ORCA类, 需要修改脚本指定输入文件名; 同时在脚本和输入文件设定核心和内存, 并且确保输入文件和脚本申请的资源一致.

显然, 软件和脚本需要做针对性调试.

HPC User Portal基于Ohio State Univ的开源项目Open OnDemand实现, 有改动, 并非100%自主知识产权产品.

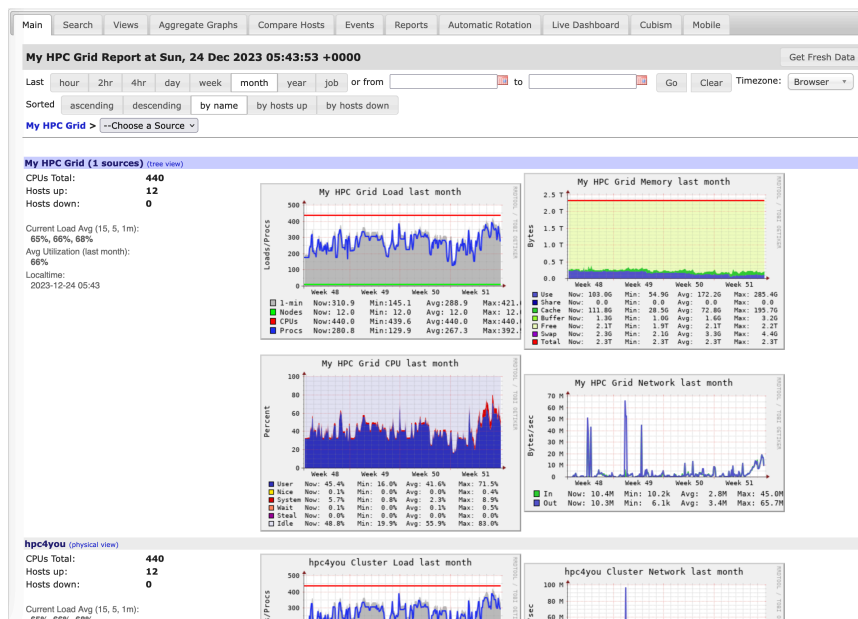


图 17: Ganglia集群性能监测示例。

13 性能监测

历史监控 <http://A.B.C.D:7080/hpc4you>, powered by Ganglia.

实时监控 <http://A.B.C.D:19999>或<http://A.B.C.D:19999/v2>, powered by Netdata.

实际访问链接, 请查阅master机器上文档: /root/hpc4you/login_credentials.txt.

13.1 Ganglia负载监测

如果计算节点不在同一个局域网, 可能导致ganglia运行失败.

This section describes installing and testing Ganglia, a system for monitoring and capturing metrics from services and components of the cluster.

所用使用的监控组件/安装包, 均来自对应Linux发行版官方软件源. Debian 13.5, 不支持ganglia监控.

13.2 Netdata集群性能实时监测

该模块是专业版本附赠模块, 不保证可用性.

采用Netdata采集实时监控数据, 默认仅仅存储1小时历史数据. 自动汇集所有计算节点监控数据到登录节点或者管理节点, 实时显示.

使用示例, 请看图 18和图 19.

13.3 关于系统监控的“生存指南”

观众类型学分析

- 技术大佬型

- 典型问题: “网络架构是IB还是以太网? 存储用Lustre还是GPFS?”

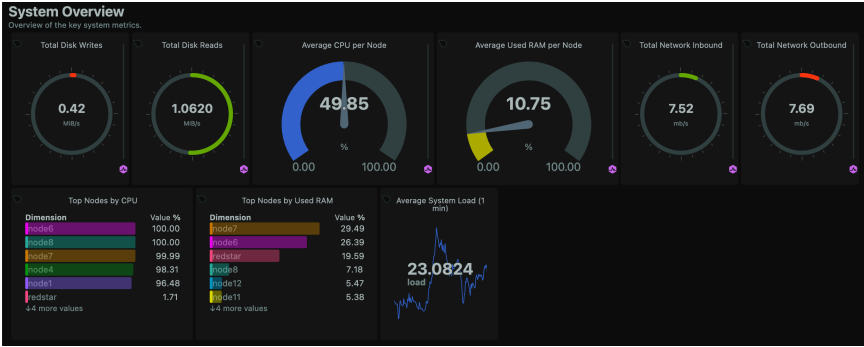


图 18: Netdata实时性能监测信息之系统综合负载动态图(默认每秒刷新, 实际上是动图).



图 19: Netdata展示的各节点监控信息示例.

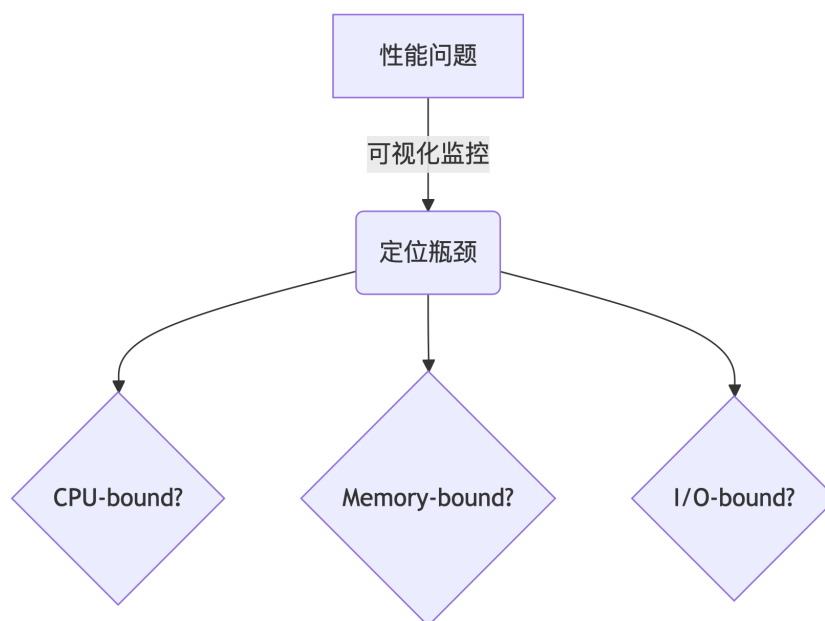


图 20: 性能瓶颈可视化分析.

- 关注指标: 网络带宽峰值、I/O吞吐量、延迟分布
- 实用主义型
 - 灵魂拷问: “内核版本? 最大内存支持? 调度器配置?”
 - 必问项目: 文件系统选型、作业排队算法、故障转移方案
- 观光打卡型 (俗称 “小菜”)
 - 经典三连: “机箱灯光好酷! 页面主题哪下载的?好落后还用黑老粗的铜缆, 光纤不香吗?”
 - 迷惑行为: 试图触摸服务器散热孔判断温度

监控数据的正确打开方式

当用户遇到 “我的作业跑得比蜗牛还慢” 时, 可以可视化溯源, 如图 20.

权限哲学

- 命令行派: 需要root权限的**perf btop**才是真爱
- 图形界面派: Web端聚合数据更香(零权限要求)
- 真相: 两者结合使用效果最佳

领导视察时建议全屏展示温度云图, 视觉效果最佳(手动狗头).

如果您对于本节描述的各项内容, 没有任何兴趣或者也不晓得在讲什么事情, 那么您用不到性能监测模块.

14 很少用的功能

14.1 集群开/关机/重启

无论何种情形, **开机**, 是先开启交换机电源, 开存储设备电源(如有), 再开启主控/管理节点. 待管理节点启动完毕后, 再开启其他计算节点.

关机, 通过IPMI方式, 或者在master机器终端执行:

```
poweroff_hpc
```

重启, 通过IPMI方式, 或者在master机器终端执行:

```
reboot_hpc
```

如果机器具有IPMI功能, 请联系硬件供货商, 配置IPMI, 并查询手册, 学习如何使用IPMI. 如果不想使用指令, 那么去现场按电源吧.

14.2 添加新机器

执行**addNewComputeNode.sh**, 自动配置, 无需拆卸硬盘. 不影响既有集群和正在运行、排队的任务.

在master机器执行**./addNewComputeNode.sh**, 按照屏幕提示, 输入:

1. 新机器的IP地址, 按回车键
2. 输入新节点的名字, default node name, 比如是node8, 按回车键. 显然不能和已有机器同名. 必须是nodeXX
3. 自定义节点名称, charming node name of the new node, 比如是amd01, 按回车键. 显然不能和已有机器同名.

然后等待. 等待时间与网络带宽、硬盘读写快慢有关, 大约30分钟起步.

只要新机器的IP地址和root密码. 新机器原来叫什么名字, 没有任何关系

需要事先给新机器安装好Linux系统, 并配置完毕集群私有网络, 无需互联网.

14.3 移除节点

从现有集群系统移除计算节点. 需编辑修改如下文件移除相应条目:

1. **/etc/pdsh/machines**
2. **/etc/slurm/slurm.conf**
3. **/etc/hosts**

可能需要使用**chattr -i**解除权限锁定. 配置文件都是明文明码, 请自行编辑操作. 慧计算不负责解读.

修改后, 请全集群重启调度器, 参考指令如下:

```
systemctl restart slurmctld
setup_hpc --sync_do 'systemctl restart slurmd'
```

```
THIS MAY TAKE A WHILE, PLEASE BE PATIENT!!!
[███] OK!
!!! Error !!!

!!! Single SSH Session Only !!!
Make sure your SSH client is connected to the target server with only one window open.
Bye.
```

图 21: Web模块安装失败, Single SSH session warning.

15 Web界面安全设定

HPC User Portal已经采用SSL加密, 符合安全规范.

建议在用户和登录服务器之间, 采用虚拟专用网络来提升安全性. 或者购买合法域名、申请互联网IP、域名备案、购买合法TLS/SSL证书, 开启企业级SSL加密提升安全性.

相比较而言, 采用虚拟专用网络是最为便捷的方案. 数据不跨境, 合法合规使用. 以上仅仅是可行方案, 并不代表是最佳解决方案.

不过实际场景, 很多课题组, 都是在物理隔离的安全内网, 使用计算集群. 登录节点, 也就是HPC User Portal所在的服务器, 是处于安全的网络环境下, 各位同学之间, 也不会无聊到通过网络技术嗅探他人密码. 可能存在个别同学在内网练习网络技术, 那就家法吧.

特别注意: 为保障集群系统的账户安全, 管理员和用户需共同履行以下安全义务: 管理员有责任通过系统策略强制执行密码复杂度要求, 包括但不限于设置密码最小长度不少于8位字符, 并可根据需要进一步限定密码必须包含大小写字母、数字和特殊字符等要素, 以提升密码强度. 用户有义务妥善保管自己的账户密码, 严禁与任何人共享或泄露密码. 同时, 用户应主动避免使用过于简单的密码(如常见字典词、重复字符或易猜序列), 选择复杂度较高的密码, 以降低被破解的风险.

本集群系统采用Linux操作系统内置的密码验证机制, 服务端使用OpenSSH结合LDAP服务器进行集中式身份认证, 该方案符合业界主流安全标准和最佳实践, 能够有效保障账户认证的安全性.

16 故障排除

以下可能存在的故障, 很少发生.

16.1 Single SSH Session Only

如果在安装过程中, 看到图 21 警告信息, 请勿惊慌. 请按照提示, 退出所有的SSH登录, 保证仅有一个窗口以root身份等到服务器即可.

如果您还是不明白如何操作, 请告诉所有用户, 请勿登录, 然后重启机器, 并以root用户登录, 继续操作相应模块即可. 显然如果您找不到路径的话, 最好复制屏幕之前提示的路径信息.

多次遇到捣鬼高手, 这边终端1正安到一半, 人家转头又开个终端2, 溜进去把配置锁的锁、删的删. 得, 安装直接挂掉. 然后大师傅就晃过来“敲打”我了: “你这东西不行啊, 赶紧给解决解决!”.

实在没辙, 本人在各模块加了点限制: 只认root用户, 同时只准一个ssh会话进来, 否则直接不运行(root user and single ssh session only, or abort.).

唉, 防不胜防啊.

16.2 重启失败

本集群系统, 在安装过程中, 需要通过重启操作, 来确认某些特定组件模块, 在机器重启之后能正常工作. 如果机器重启失败, 或者在3分钟内未完成重启, 安装进程会标注为某某机器安装失败, 导致对应节点不能顺利添加到集群系统中.

一般来说, 对于真实的服务器, 几乎不会出现重启失败的问题. 如果机器重启耗时超过三分钟, 请登录主控节点, 编辑文件 `/root/hpc4you/status`, 将里面的数字“3”修改为“5”, 即代表, 重启等候时间是5分钟.

如果在执行某模块的时候, 出现机器重启失败, 请手动重启机器, 并尝试多次重启该机器, 确认机器可以顺利重启完成. 然后, 重新运行对应模块即可. 注意, 带有数字尾标的模块, 如需重新运行, 需要从尾号为1的子模块开始运行. 比如运行 `./step3.sh` 的时候, 机器重启失败, 那么确认机器重启正常后, 需要从 `./step1.sh` 重新开始操作.

16.3 软件源超时

离线模式, 不需要互联网, 无此问题.

16.4 主控机器无法登录节点

发生频率, 罕见. 但是也有发生过, 在Rocky9系统的机器上遇到过. 故障发生在运行 `./step1.sh` 之后. 如有发生, 请手动重启计算节点, 即可恢复正常.

注意, 这个如有发生, 是发生在集群系统安装过程中.

如果集群调试完毕, 运行了一段时间再出现这个问题, 那么建议排查安全风险: 比如你的root密码是否有泄漏, 计算节点的root权限是否被他人修改等等.

16.5 UserControl失效

如果多次运行 `./enable_Web-Interface.sh`, 可能导致之前设定的用户行为管理失效. 请再次运行 `./enable_UserControl.sh` 即可.

在运行 `./addNewComputeNode.sh` 之后, 也请再次运行 `./enable_UserControl.sh` 模块.

16.6 502 Bad Gateway

集群系统部署完毕, 如果首次访问 [Resource Portal](#), 看到如下提示信息:

```
502 Bad Gateway
nginx/1.20.1
```

请确保在运行 `./enable_Web-Interface.sh` 按照屏幕提示重启master节点.

如果集群系统在正常运行一段时间后, 访问 [Resource Portal](#) 看到502 Bad Gateway, 请检查您的root权限, 以及podman/docker相关容器是否被关停?

不当终止用户进程(比如使用 `kill -9 -u userName`), 在添加新节点后, 用户登录 [HPC User Portal](#), 也会遭遇类似问题. 如有发生, 请重启master节点或者整个集群.

16.7 意外停电

如果没有UPS/EPS等设备, 突发停电之后, 集群可能无法工作. 请按照如下顺序操作:

1. 按照手册要求, 对整个集群, 先关机, 而后开机.

2. 执行 `setup_hpc --sync_hosts`
3. 执行 `setup_hpc --sync_time`
4. 执行 `reboot_hpc`

如果以上四个步骤操作完毕后, 还未修复, 请电邮联系 ask@hpc4you.top 获得技术支持.

16.8 某段时间后,部分节点无法工作

集群运行正常, 过了一段时间后, 某个节点或者部分节点无法加载计算任务, 重启节点也无效. 这种故障很罕见, 多数发生在老旧机器上.

原因是, 老旧机器BIOS电池故障/缺陷, 导致机器硬件时间和主控节点偏差太大, 集群鉴权无法工作.

先同步时间`setup_hpc --sync_time`, 而后重启故障节点即可恢复正常工作状态.

某些新机器, 由于主板缺陷, 也会发生系统时间故障, 处理方法同上.

17 SLURM技能自我修养

集群构建方案由hpc4you开发. 使用的调度器slurm为标准开源版本. 在使用层面, 和官方描述的使用策略无任何差别.

17.1 选一个浏览一下

1. <https://slurm.schedmd.com/>
原版英文手册最佳
2. <https://docs.slurm.cn/users/>
中文资料
3. <http://hml.i.ustc.edu.cn/doc/userguide/slurm-userguide.pdf>
中国科大超级计算中心出品
4. <https://bicmr.pku.edu.cn/~wenzw/pages/slurm.html>
北京大学某研究组出品
5. <https://www.cloudam.cn/help/docs/cloudE10>
查看slurm作业管理系统部分北鲲云编写
6. <https://leo.leung.xyz/wiki/Slurm>
centOS8 PAM Slurm Adopt Modulem | Very nice wiki.

17.2 快速制作slurm脚本

参考这个站点

<https://www.hpc.iastate.edu/guides/classroom-hpc-cluster/slurm-job-script-generator>.

一个简单的slurm脚本设定, 只需在这个页面上填写:

Number of compute nodes 1 数字1代表使用一个节点.

Number of processor cores per node 16 数字16表示一个节点上使用16个CPU核心.

Walltime 18 数字18代表18个小时. 如果计算没有在18小时内完成, 会被调度器杀掉.

Max memory per compute node 12 数字12表示, 需要这个节点给12GB内存.

其他项目可以不填写. 会得到一个类似的内容:

```
#!/bin/bash

# Copy/paste this job script into a text file and submit with the command:
# sbatch thefilename

#SBATCH --time=18:00:00 # walltime limit (HH:MM:SS)
#SBATCH --nodes=1 # number of nodes
#SBATCH --ntasks-per-node=16 # 16 processor core(s) per node
#SBATCH --mem=12G # maximum memory per node
#SBATCH --job-name="test"

# LOAD MODULES, INSERT CODE, AND RUN YOUR PROGRAMS HERE
```

如果, 没有调度器的时候, 作业运行指令是:

```
module load vasp_mpi
mpirun -np 16 vasp_std
```

那么, 创建一个文件, 比如`job01.pbs`, 内容如下:

```
#!/bin/bash

# Copy/paste this job script into a text file and submit with the command:
# sbatch thefilename

#SBATCH --time=18:00:00 # walltime limit (HH:MM:SS)
#SBATCH --nodes=1 # number of nodes
#SBATCH --ntasks-per-node=16 # 16 processor core(s) per node
#SBATCH --mem=12G # maximum memory per node
#SBATCH --job-name="test"

# LOAD MODULES, INSERT CODE, AND RUN YOUR PROGRAMS HERE

module load vasp_mpi
mpirun -np $SLURM_NTASKS vasp_std
```

一句话, 就是把之前的运行指令, 附在脚本的最后面; 把原来的`-np XX`中的XX修改为`$SLURM_NTASKS`, 仅此而已.

如何提交:

```
qsub job01.pbs
或者
sbatch job01.pbs
```

17.3 SLURM调度器内置参数

slurm调度器中更多控制参数, 请看图 22.

17.4 更多脚本模版

慧计算提供的Slurm脚本模版在此, 可参考.

https://gitee.com/hpc4you/hpc/tree/master/slurm_scripts

SLURM Variables	Torque/MOAB	Description
SLURM_ARRAY_TASK_COUNT		Total number of tasks in a job array
SLURM_ARRAY_TASK_ID	PBS_ARRAYID	Job array ID (index) number
SLURM_ARRAY_TASK_MAX		Job array's maximum ID (index) number
SLURM_ARRAY_TASK_MIN		Job array's minimum ID (index) number
SLURM_ARRAY_TASK_STEP		Job array's index step size
SLURM_ARRAY_JOB_ID	PBS_JOBID	Job array's master job ID number
SLURM_CLUSTER_NAME		Name of the cluster on which the job is executing
SLURM_CPUS_ON_NODE		Number of CPUs on the allocated node
SLURM_CPUS_PER_TASK	PBS_VNODENUM	Number of cpus requested per task. Only set if the --cpus-per-task option is specified.
SLURM_JOB_ACCOUNT		Account name associated of the job allocation
SLURM_JOBID SLURM_JOB_ID	PBS_JOBID	The ID of the job allocation
SLURM_JOB_CPUS_PER_NODE	PBS_NUM_PPN	Count of processors available to the job on this node.
SLURM_JOB_DEPENDENCY		Set to value of the --dependency option
SLURM_JOB_NAME	PBS_JOBNAME	Name of the job
SLURM_NODELIST SLURM_JOB_NODELIST	PBS_NODEFILE	List of nodes allocated to the job
SLURM_NNODES SLURM_JOB_NUM_NODES		Total number of different nodes in the job's resource allocation
SLURM_MEM_PER_NODE		Same as --mem
SLURM_MEM_PER_CPU		Same as --mem-per-cpu
SLURM_NTASKS SLURM_NPROCS	PBS_NUM_NODES	Same as -n , --ntasks
SLURM_NTASKS_PER_NODE		Number of tasks requested per node. Only set if the --ntasks-per-node option is specified.
SLURM_NTASKS_PER_SOCKET		Number of tasks requested per socket. Only set if the --ntasks-per-socket option is specified.
SLURM_SUBMIT_DIR	PBS_O_WORKDIR	The directory from which sbatch was invoked
SLURM_SUBMIT_HOST	PBS_O_HOST	The hostname of the computer from which sbatch was invoked
SLURM_TASK_PID		The process ID of the task being started
SLURMD_NODENAME		Name of the node running the job script
SLURM_JOB_GPUS		GPU IDs allocated to the job (if any).

图 22: Slurm内置变量.

18 自定义

本工具套件在安装过程中, 必须严格按照此手册描述之流程操作, 不可变更.

安装完毕后, 默认创建一个队列, `workq`, 所有的节点都在该队列, 如果用户不通过脚本主动申明, 那么默认一个`cpu_core`搭配512MB或者1024MB内存.

安装完毕后, 各Web端, 默认占用: 80, 5666, 8404, 8405, 8406, 19999端口.

集群系统部署完毕后, 整个Linux系统依旧属于自由软件范畴, 如果您拥有root权限, 您可以自由变更任何配置文件, 但需承担所有责任.

重要提示

文件权限说明

1. 系统关键配置文件已通过`chattr`命令设置为只读属性
2. 如需修改, 请先使用相应命令解除只读限制

技术支持政策

1. 用户自行修改配置文件后
2. 慧计算将不再提供免费技术支持服务
3. 如需专业支持, 可选择付费技术服务

18.1 声明与警告

请仔细阅读以下内容, 并在进行任何操作之前充分理解.

18.1.1 配置文件说明

1. 本集群系统的所有相关组件均依照各Linux发行版要求进行配置.
2. 相关配置文件均位于默认路径; 源码编译组件(如有)在`/opt/hpc4you`路径下.
3. 所有配置文件均采用明文存放.

18.1.2 配置文件修改

1. Linux系统是开源自由的, 您可以根据自己的喜好修改任何现有配置.
2. 必要的配置文件已采用 `chattr` 设置了只读权限, 请自行解锁.

18.1.3 责任声明

1. 不正确修改配置文件可能导致集群工作异常或无法工作.
2. 对于因修改配置文件而导致的任何问题, 用户需自行承担全部责任.
3. 变更/修改配置文件后, 慧计算不再提供质保和免费技术支持.

再次提醒: 请仔细阅读以上内容, 并在进行任何操作之前充分理解.

18.2 用户信息LDAP

用户信息采用OpenLDAP控制。

在master机器运行LDAP服务端; 在master机器和所有计算节点运行LDAP客户端。

LDAP服务端采用apt/yum/dnf安装Linux发行版提供的默认版本, 配置文件均在默认路径。各Linux发行版配置文件路径有差异, 具体请查阅各系统管理员手册。

必要信息如下:

```
host: hpc4you.login
bindDN: cn=admin,dc=hpc4you,dc=login
```

其中hpc4you.login通过/etc/hosts指向master IP。

集群部署后, 自动配置的LDAP密码信息, 可以查阅

- [/etc/ood/config/ood_portal.yml](#)
- [/etc/coldfront/coldfront.env](#)
- [/root/.hpc4you/login_credentials.txt](#)

LDAP用户信息鉴权, 均依照各Linux发行版系统管理员手册要求配置。如需更改/变更, 请参考相应的手册。

如需变更替换为自己的LDAP服务器, 请务必满足Open OnDemand、ColdFront对于LDAP服务器的要求。

18.3 LDAP Web前端

User/Group Portal, 采用LAM/Docker提供。来自LAM项目的官方Docker镜像。通过docker/podman来运行。

LAM页面可以自定义, 默认登录管理密码是lam。如需修改服务端的配置, 需要先执行chmod go+rw /opt/lam-config/ -R。修改完毕后, 记得更新执行chmod go+rw /opt/lam-config/ -R。

更多关于LAM的设定, 请查阅LAM官方, <https://github.com/LDAPAccountManager>。

您完全可以根据自己喜欢, 将LAM更换为任何你喜欢的OpenLDAP Server的Web前端, 具体如何操作, 取决于您自己。

18.4 Resource Portal

前文已经讨论, 该Web前端来自于ColdFront项目, <https://coldfront.readthedocs.io/en/latest/>。严格依照官方说明安装部署, 相关信息如下:

- [/etc/coldfront/](#)
- [/srv/coldfront](#)
- 创建用户coldfront
- master机器上root用户的计划任务*/3 * * * * /usr/sbin/loveYou_hpc 2>/dev/null。

该Portal的主要作用是, 通过点击鼠标实现sacctmgr管理slurm accounting, slurm QoS等工作。

关于ColdFront Web界面的更多用法, 请查阅 <https://coldfront.readthedocs.io/en/latest/>.

所有配置都明文存放, 你可以根据实际需要, 变更/修改.

当然, 您仍旧可以手动操作**sacctmgr**管理slurm accounting, slurm QoS等等, 忽略Resource Portal即可.

18.5 HPC User Portal

使用Open OnDemand实现, 官方<https://openondemand.org/>. 主要涉及如下目录:

- [/etc/ood](#)
- [/opt/ood](#)

任何修改变更, 请查阅<https://osc.github.io/ood-documentation>.

当前的集群系统中, LDAP服务端向HPC User Portal提供用户登录鉴权.

18.6 MySQL数据库

安装版本, 均来自apt/yum/dnf推荐版本. 默认root密码是**hpc4you**.

ColdFront/Resource Portal, 使用的数据库名称是**coldfront_db**, 其他密码信息等, 查阅[/etc/coldfront/coldfront.env](#).

Slurm调度器, 以用户**slurm**访问数据库**slurm_acct_db**, 其他信息, 查阅[/etc/slurm/slurmdbd.conf](#).

18.7 nginx

ColdFront/Resource Portal, Open OnDemand/HPC User Portal, 均有使用到nginx代理. 具体查阅:

- [/etc/nginx/conf.d/coldfront.conf](#)
- [/etc/ood/config/nginx_stage.yml](#)

18.8 集群名称

默认集群名称是**hpc4you**, 写在文件[/etc/slurm/slurm.conf](#). 如需修改, 请修改如下必要配置:

- [/etc/slurm/slurm.conf](#)
- 执行指令**sacctmgr**修改集群名称, 具体查阅slurm手册.
- 修改Resource Portal, 登记录入集群名称, 具体查阅ColdFront手册.
- 修改Open OnDemand相关配置, 涉及多个配置文件, 具体查阅Open OnDemand手册.

18.9 NFS共享

默认, 本集群方案, 通过NFS共享[/home](#)和[/opt](#). 采用各Linux发行版中提供的NFS进行配置.

您可以新增挂载点, 但是不可以移除[/opt](#)目录的NFS共享.

所有计算节点, NFS挂载通过/etc/fstab控制.

集群部署完毕后, 你可以增加专业存储, 请确保将您的专业存储挂载给所有的机器. 请查阅你的存储手册, 进行操作.

19 图片目录

List of Figures

1	具有Web可视化操作界面的集群系统(HPC via Web)操作界面, 示例一	7
2	具有Web可视化操作界面的集群系统之用户操作界面, 示例二	7
3	节点内多核心并行集群. 管理节点, 连接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 连接绿色网络的IP地址, 称之为master IP. 仅当紫色线路和绿色线路在同一个交换机/局域网时, Login IP 和 mater IP是同一个.	10
4	跨节点并行集群. 管理节点, 连接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 连接绿色网络的IP地址, 称之为master IP. 仅当紫色线路和绿色线路在同一个交换机/局域网时, Login IP 和 mater IP是同一个.	10
5	电子表格内容示例	15
6	运行 bash getInfo.sh 指令后, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同). 离线版本, 请务必下载hardwareXXX.dat文件, 并同时拷贝屏幕输出内容, 发送给慧计算.	16
7	无效授权许可会看到的提示信息(背景颜色可能不同).	17
8	安装完毕, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同).	19
9	文件login_credentials.txt内容示例(背景颜色以及链接地址可能不同).	20
10	Firefox浏览器页面示例(文字样式可能不同).	20
11	浏览器安全证书警告, 请点击鼠标, 添加例外.	23
12	注册用户(User/Group Portal)登录界面示例.	25
13	自定义用户信息模版操作示例(IP地址可能不同).	26
14	计算中心—PI—项目管理模式	28
15	在分配资源(Resource Portal)页面, 给项目赋予QoS.	31
16	Web界面用户首次登录提示信息.	33
17	Ganglia集群性能监测示例.	35
18	Netdata实时性能监测信息之系统综合负载动态图(默认每秒刷新, 实际上是动图).	36
19	Netdata展示的各节点监控信息示例.	36
20	性能瓶颈可视化分析.	37
21	Web模块安装失败, Single SSH session warning.	39
22	Slurm内置变量.	43