

# 可视化集群系统安装部署工具

## hpc4you toolkit Web v3.1

### 离线版用户手册

零基础、零配置组建具有Web可视化操作界面的并行计算集群

ask@hpc4you.top

2025年5月6日

## 目录

1	格式约定	4
2	可视化界面示例	5
3	离线版	5
4	支持的集群架构	6
4.1	硬件与网络拓扑	6
4.2	用户数据与应用程序	8
5	安装Linux系统	8
5.1	网络规划	8
5.1.1	自动	9
5.1.2	手动	9
5.2	下载镜像	9
5.3	安装系统	9
5.4	上传镜像	10
6	组建集群	10
6.1	准备工作	11
6.1.1	在微软上操作(非必需)	11
6.1.2	在master操作获取授权许可	11
6.1.3	无效授权处置	12
6.1.4	上传hpc4you toolkit压缩包	13
6.1.5	继续在master机器操作	13
6.1.6	机器名和IP信息录入注意事项	13
6.2	安装集群系统	14

6.2.1	运行逻辑	14
6.2.2	自助模式	14
6.2.3	技术协助模式	15
6.3	集群就绪	15
7	责任与义务	15
8	集群系统套件安装演示	17
9	管理集群: 仅限管理员操作	17
9.1	修改root密码	17
9.2	变更Web地址	19
9.3	添加用户(组)	20
9.3.1	技术规范	20
9.3.2	管制逻辑	20
9.3.3	添加用户/组	20
9.3.4	删除用户/组	21
9.3.5	视频教程	21
9.4	资源分配管理	21
9.4.1	技术规范	21
9.4.2	资源与记账账户管理说明	22
9.4.3	登记集群信息	23
9.4.4	赋予用户PI管理权限	23
9.4.5	视频教程	23
10	申请成为PI: 管理员与用户均可操作	24
10.1	管制逻辑	24
10.2	课题组长/PI权限	24
10.3	视频教程	24
11	登录和使用集群: 用户层面	24
11.1	登录集群	24
11.1.1	账户初始化	25
11.1.2	账户初始化视频教程	25
11.1.3	菜单功能	25
11.1.4	提交计算	25
11.1.5	操作演示	25
12	性能监测	26
12.1	Ganglia负载监测	26
12.2	Netdata集群性能实时监测	26
12.3	关于系统监控的“生存指南”	26

13	很少用的功能	29
13.1	集群开/关机/重启	29
13.2	添加新机器	29
14	Web界面安全设定	29
15	故障排除	29
15.1	Web模块无法安装	30
15.2	重启失败	30
15.3	软件源超时	30
15.4	主控机器无法登录节点	30
15.5	UserControl失效	30
15.6	502 Bad Gateway	31
15.7	意外停电	31
15.8	某段时间后,部分节点无法工作	31
16	SLURM技能自我修养	31
16.1	选一个浏览一下	31
16.2	快速制作slurm脚本	32
16.3	SLURM调度器内置参数	33
16.4	更多脚本模版	33
17	自定义	33
17.1	声明与警告	33
17.1.1	配置文件说明	34
17.1.2	配置文件修改	34
17.1.3	责任声明	34
17.2	用户信息LDAP	34
17.3	LDAP Web前端	35
17.4	Resource Portal	35
17.5	HPC User Portal	35
17.6	MySQL数据库	35
17.7	nginx	36
17.8	集群名称	36
17.9	NFS共享	36
18	图片目录	37

## 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	PRIO	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.
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.

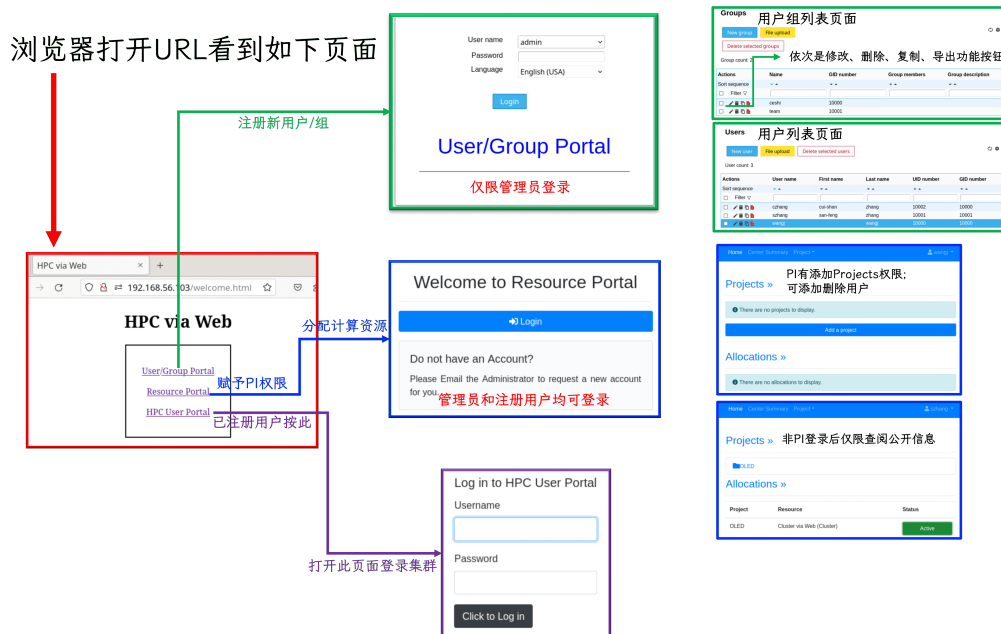


图 1: 具有Web可视化操作界面的集群系统(HPC via Web)操作界面, 示例一

## 2 可视化界面示例

使用慧计算集群工具套件(hpc4you toolkit Web v3.1, 以下简称工具套件)组建完毕的集群系统, 无论是管理还是用户使用, 都是在Web界面呈现, 通过点击鼠标进行操作. 可视化操作界面示例请看图 1和图 2.

## 3 离线版

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. 目标服务器无需具有互联网连接. 安装完毕后, 集群系统支持GPU与CPU混合调度.<sup>1</sup> 具体模块请看表 1.

本工具套件, 由从事计算化学、计算材料专业的“计算机专业外行”结合工作实际开发制作, 充分理解需要HPC来实施的科学计算任务要做什么、需要什么资源、以及如何充分利用资源.

本工具套件, 将轻松规避科技工作者在组建高性能计算集群方面遇到的Linux相关的所有痛点和难点. 你所需要做的仅仅是, 复制粘贴指令, 按Enter键; 等待重启完成, 重新登录, 除此之外, 无他.

离线版本, 仅仅支持如下Linux发行版:

1. CentOS 7.9
2. Anolis OS 7.9
3. Anolis OS 8.8
4. RockyLinux 8.8

<sup>1</sup>根据官方手册描述, SLURM自动识别并配置GPU依赖于CUDA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.

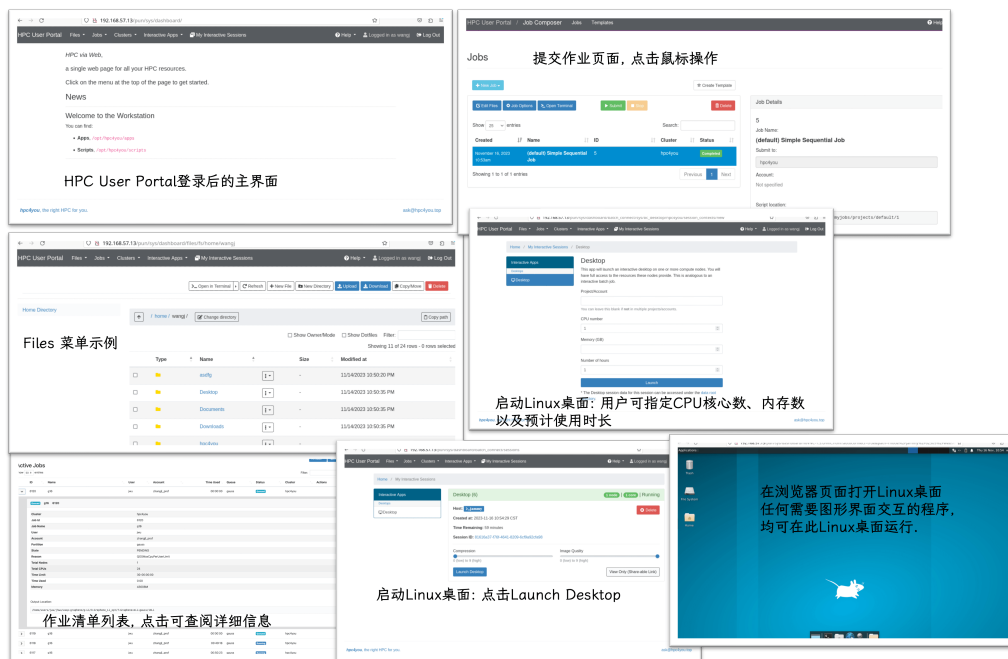


图 2: 具有Web可视化操作界面的集群系统之用户操作界面, 示例二

## 5. RockyLinux 9.5

# 4 支持的集群架构

## 4.1 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.<sup>2</sup>

### 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.

<sup>2</sup>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.

表 1: HPC via Web v3.1离线版功能

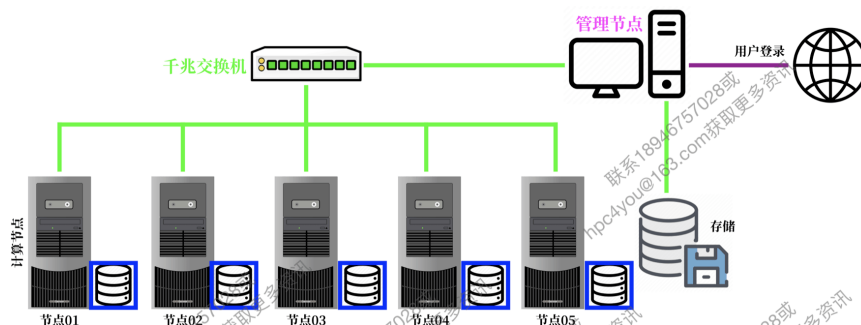
功能模块	离线版	备注
CPU调度	yes	默认支持
GPU调度 <sup>1</sup>	yes	默认支持
记账功能	yes	默认支持
用户管控 <sup>2</sup>	yes	默认支持
Web界面	yes	默认支持
图形桌面 <sup>3</sup>	yes	默认支持
性能监测 <sup>4</sup>	yes	默认支持
添加节点	yes	自动, 需要root密码和IP地址
定价	7500元起	电邮联系ask@hpc4you.top

<sup>1</sup> 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.

<sup>2</sup> 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](https://slurm.schedmd.com/pam_slurm_adapt.html).

<sup>3</sup> 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.

<sup>4</sup> 监控基于Ganglia和Netdata.



#### 说明:

1. 绿色网络, 负责集群调度和管理, 必备: 采用普通千兆即可.
2. 计算节点, 一个小容量系统硬盘; 一个高速读写磁盘(必备), 可选SATA或者NVME固态.
3. 管理节点, 同时负责管理、登录、用户数据; 采用机械磁盘阵列实现.
4. 适用场景, 任何单机多核心并行计算, 比如ORCA, Dalton, Gaussian, VASP, CP2K.
5. 相较于多台单机, 集群方案类似于私有云, 用户无需在多台机器上来回找数据; 集群调度可以有效利用空闲时间, 提升机器整体利用效率.
6. 以太网, 无论是千兆、万兆、或者40GB, 均不建议用来跑多节点并行计算, 十分慢, 效率特别低.

#### 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, 链接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 链接绿色网络的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.

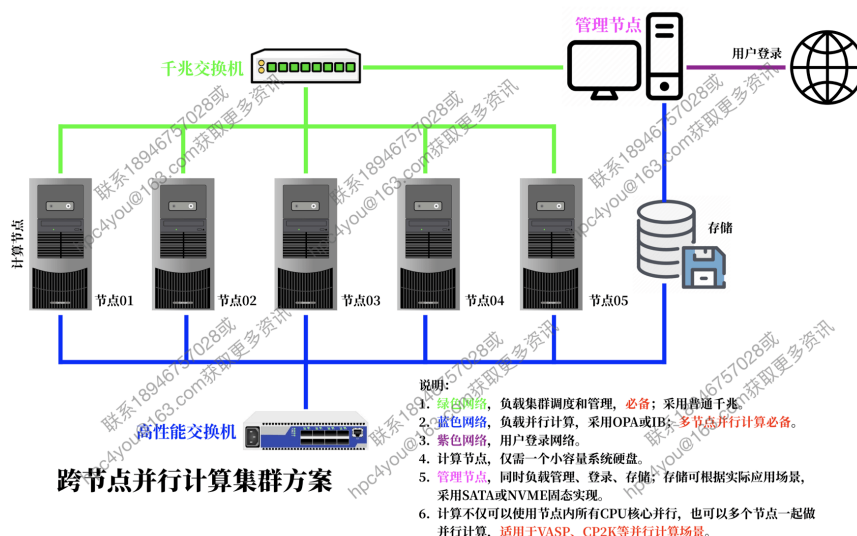


图 4: 跨节点并行集群. 管理节点, 链接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 链接绿色网络的IP地址, 称之为master IP. 仅当紫色线路和绿色线路在同一个交换机/局域网时, Login IP 和 mater IP是同一个.

## 4.2 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.<sup>3</sup>

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. 如需多节点并行计算, 请升级网络和存储设备.

应用软件采用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, 将存储空间挂在到每台机器的/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.

## 5 安装Linux系统

这里讨论的并行计算集群, 是基于Linux操作系统和SLURM调度器调试而成的贝奥武夫架构的并行计算集群. 该集群架构方案, 也是各大超算平台采用的架构方案.

### 5.1 网络规划

所有的机器必须连接在同一个局域网. 配置网络, 分为自动和手动两种方案, 任选一种. 如果您不具备任何网络技能和常识, 推荐采用自动方案.

如果您晓得如何摆弄DNS/DHCP服务器, 或者您的交换机具有管理功能, 请跳过这里的网络配置方案.

<sup>3</sup>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; 而后再修改所有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.



### 5.1.1 自动

为了避免手动配置网络的麻烦, 请准备一台WiFi路由器, 拔掉WAN接口的线缆. LAN接口用网线, 连接到图 3或者图 4图例中的绿色文字标注的交换机中. 通用的WiFi路由器, 默认采用DHCP自动分配地址, 您无需其他设定.

系统安装过程中, 默认采用自动模式. 您只需点击鼠标, 让网卡处于ON状态即可.

如此安装完毕系统后, 仅有一个root用户, 没有图形界面, 网络是自动获取的. 您可以登录WiFi路由器管理页面, 查看到每台机器的IP地址. 显然这些机器都是在同一个局域网的, 由于WiFi路由器的WAN 口未接线缆, 所以这些机器都是离线状态, 是没有互联网的.

### 5.1.2 手动

如果没有WiFi路由器, 您必须知晓如何手动配置IP地址.

你可以在NETWORK & HOST NAME菜单手动配置; 或者系统安装完毕后, 采用nmtui手动配置, 但是必须确保, 所有机器在同一个局域网中, 必须使用192.168.X.Y这种私有网络. 建议采用192.168.251.X, 以免和其他网段冲突.

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/>

## 5.2 下载镜像

请根据所选的Linux发行版名称, 选择对应的镜像.

---

CentOS 7.9	<a href="https://mirrors.nju.edu.cn/centos-vault/7.9.2009/isos/x86_64/CentOS-7-x86_64-Everything-2207-02.iso">https://mirrors.nju.edu.cn/centos-vault/7.9.2009/isos/x86_64/CentOS-7-x86_64-Everything-2207-02.iso</a>
Anolis OS 7.9	<a href="https://mirrors.nju.edu.cn/anolis/7.9/isos/GA/x86_64/AnolisOS-7.9-GA-x86_64-dvd.iso">https://mirrors.nju.edu.cn/anolis/7.9/isos/GA/x86_64/AnolisOS-7.9-GA-x86_64-dvd.iso</a>
Anolis OS 8.8	<a href="https://mirrors.nju.edu.cn/anolis/8.8/isos/GA/x86_64/AnolisOS-8.8-x86_64-dvd.iso">https://mirrors.nju.edu.cn/anolis/8.8/isos/GA/x86_64/AnolisOS-8.8-x86_64-dvd.iso</a>
RockyLinux 8.8	<a href="https://mirrors.nju.edu.cn/rocky-vault/8.8/isos/x86_64/Rocky-8.8-x86_64-dvd1.iso">https://mirrors.nju.edu.cn/rocky-vault/8.8/isos/x86_64/Rocky-8.8-x86_64-dvd1.iso</a>
RockyLinux 9.5	<a href="https://mirrors.nju.edu.cn/rocky-vault/9.5/isos/x86_64/Rocky-9.5-x86_64-dvd.iso">https://mirrors.nju.edu.cn/rocky-vault/9.5/isos/x86_64/Rocky-9.5-x86_64-dvd.iso</a>

---

## 5.3 安装系统

所有机器, 必须使用上文提及的系统镜像安装系统. 安装系统过程中, 您可以:

1. 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.
2. 在NETWORK & HOST NAME, 点击进入子菜单, 点击网卡, 点击右侧滑块直到出现ON, 再点击Configure, 进入另一个菜单, 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.
3. 仅设定root密码, 请勿创建任何用户.
4. 其他任何未提及的项目, 均采用系统默认.
5. 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.
6. 请务必给所有机器, 对时. 确保各个机器, 系统时间误差小于5秒钟.

表 2: 网络地址规范(推荐)

网络地址	机器名/hostname
192.168.50.254	master
192.168.50.1	node1
192.168.50.2	node2
192.168.50.3	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。

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, 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.

**特别警告:** Anolis OS 7.9, 如果采用最小安装. 必须采用此镜像[https://mirrors.nju.edu.cn/anolis/7.9/isos/GA/x86\\_64/AnolisOS-7.9-Minimal-x86\\_64-dvd.iso](https://mirrors.nju.edu.cn/anolis/7.9/isos/GA/x86_64/AnolisOS-7.9-Minimal-x86_64-dvd.iso).

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.

系统安装完毕后, 您至少登录一次, 首先检查您设定的root密码是否有效, 其次使用**hostname -I**指令获取当前机器的IP地址.

如果您使用自动方案处理网络, 而且每台机器都设定了不重复的hostname, 那么您登录WiFi路由器的管理界面, 就应该能看到机器的名字和对应的IP地址.

## 5.4 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**yum update**.

**温馨提示,**  
使用CentOS 7.9安装系统, 那么镜像文件就是CentOS-7-x86\_64-Everything-2207-02.iso. 其他同理. 请根据您选择的操作系统版本, 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:** 只有安装系统环节, 您需要直接登录机器. 后续安装集群系统的过程, 您仅需通过SSH远程登录master机器进行操作, 期间不需要您操作任何一台计算节点. 也许您需要现场确认, 这些机器是否正常重启. 集群系统安装完毕后, 所有机器的管制权限都会通过master机器处理.

## 6 组建集群

请不要在微软系统中解压名为hpc4you\_toolkit\*.zip的压缩包.

所有的文件操作, 必须使用root用户, 通过SSH远程登录选定的登录节点, 完成操作.

	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

请务必确认, 所有硬件都已经安装完毕, (包括所有的硬盘, 存储), 而后再进行集群系统调试. **警告:** 如果使用上述指定镜像安装系统后, 如有其他磁盘/硬盘以及存储无法识别, 请勿安装任何第三方驱动. 等待集群系统安装调试完毕后, 再处理其他驱动文件的安装. 系统镜像中未提供的驱动, 均是第三方驱动.

## 6.1 准备工作

### 6.1.1 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.

### 6.1.2 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.

```
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, 发送给慧计算。

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,<sup>4</sup>

```
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**hardwareXXXXX.dat**文件, 下载到本地, 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**hardwareXXXXX.dat**文件来制作离线安装包。授权许可基于上述指令抓取到的硬件信息生成。<sup>5</sup>

离线安装包将通过百度网盘或者特快专递方式提供。

### 6.1.3 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>。

<sup>4</sup>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>

<sup>5</sup>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).

#### 6.1.4 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.

上传压缩包hpc4you\_toolkit-\*.zip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.

#### 6.1.5 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
```

#### 6.1.6 机器名和IP信息录入注意事项

1. 机器名不可以是localhost, null.
2. 机器名必须采用node+数字组合, 比如 node123. 否则部分功能无法使用.
3. 同一个IP地址, 可以对应多个机器名, 和hostname指令查询值不同的, 均可以称作私有别名, 但是这些别名和机器名, 必须指向同一台机器.
4. 新录入的机器名和IP信息, 是附在/etc/hosts文件后面, 不用理会已经存在的文件内容. 但是需保证, 机器名不重复.
5. 任何一个机器名/别名, 均不能对应多台机器.
6. 使用hostname查询机器名; 使用ip a查询IP地址; 使用nmtui修改机器名.

## 6.2 安装集群系统

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.

### 6.2.1 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, 会看不到终端的提示信息的.

**Step0** 上传必要的rpm安装包到master机器/root路径. 此rpm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 .

**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** 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`

**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.

### 6.2.2 自助模式

**第一步** 确认已经完成小节 6.1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.

**温馨提示:** 选用自助模式, 安装过程中的任何疑问, 以及安装之后使用上的任何问题, 慧计算的回答只有“看手册, 看视频”. 也就是, 您需要仔细阅读本文档, 以及在B站查阅hpc4you的视频讲解, 自己动手处理. 按照本手册的文字描述操作, 是不会有问题的. 安装之后的管理员操作, 也在本手册文字描述中. 从以往的经验来看, 任何需要技术协助的, 都是不看文字手册, 也不看视频教程的. 您如果不乐意看手册, 也不想看视频教程, 那就付费, 慧计算一对一给您讲解并演示; 慧计算也提供集群运维管理服务.



```
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).

### 6.2.3 技术协助模式

**第一步** 确认已经完成小节 6.1 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.

## 6.3 集群就绪

对于Rocky9离线版, 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, 集群系统组建完毕.

**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.

## 7 责任与义务

部署完毕的集群系统, 所有配置文件都是默认位置以明文存放. 除/usr/sbin/reboot\_hpc, /usr/sbin/poweroff\_hpc, /usr/sbin/loveYou\_hpc, /usr/sbin/setup\_hpc这四个特殊的二进制文件之外, 整个系统依旧属于“自由软件(free software)”范畴, 意味着您可以修改/变更配置文件.

慧计算并不反对客户对自由软件进行“定制”, 客户需要对修改配置文件所出现的任何结果, 承担全部责任, 慧计算免责. 慧计算可依据客户需求, 告知Web Portal各配置文件所在目录, 但慧计算并无义务, 向客户教学如何编辑修改配置文件, 慧计算无义务解读配置文件内容. 慧计算有义务告知各Web Portal所参考的说明手册, 慧计算无义务解读各手册内容.

```
# 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).

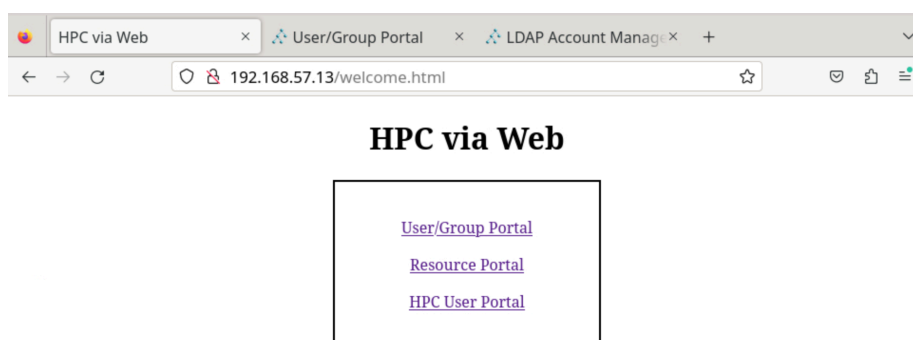


图 10: Firefox浏览器页面示例(文字样式可能不同).



合理修改各配置文件, 并不影响集群系统正常工作. 合理修改`slurm.conf`, 设定分区/队列, 增删节点信息, 并不影响集群系统正常工作. 合理修改特指, 录入的参数需要符合实际情况, 同时必须遵循各配置文件的格式和语法.

硬件故障, 包括但不限于机器不稳定, 散热异常, 交换机卡顿, 导致集群系统工作异常, 慧计算免责.

如果集群系统部署完毕后, 用户未做任何配置文件修改, 发现集群系统不工作, 包括但不限于, 各Web Portal无法工作, 调度器异常, 队列异常, 慧计算负责全权处理. 如果您未按照本手册要求操作, 出现不可用, 慧计算不承担任何责任.

## 8 集群系统套件安装演示

以上文字版描述, 也可以查阅如下原始操作录屏, 无旁白.

**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.

## 9 管理集群: 仅限管理员操作

集群系统免维护, 免管理.

所需的管理工作是添加/删除用户信息, 点击鼠标分配队列资源. 按照这里的文字描述操作, 无需其他技能. 如果想知道为什么需要这样做, 请自行学习Linux管理员手册.

**显然, 所有的管理操作, 是通过浏览器进行; 系统root用户无法登录和使用任何一个Web界面.**

如果集群就你们课题组用, 大家都同样的优先级. 那就直接添加用户即可. 都指定为同一个记账用户即可.

如果需要多个队列信息、控制用户队列优先级等, 建议拜读slurm手册. 也是粘贴相应参数即可. 不过, 你还是需要了解一下各个参数的含义, 或者寻求技术支持代劳.

机器硬件故障, 不属于运维管理范畴. 硬件坏了, 找商家走售后流程.

### 9.1 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.

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.

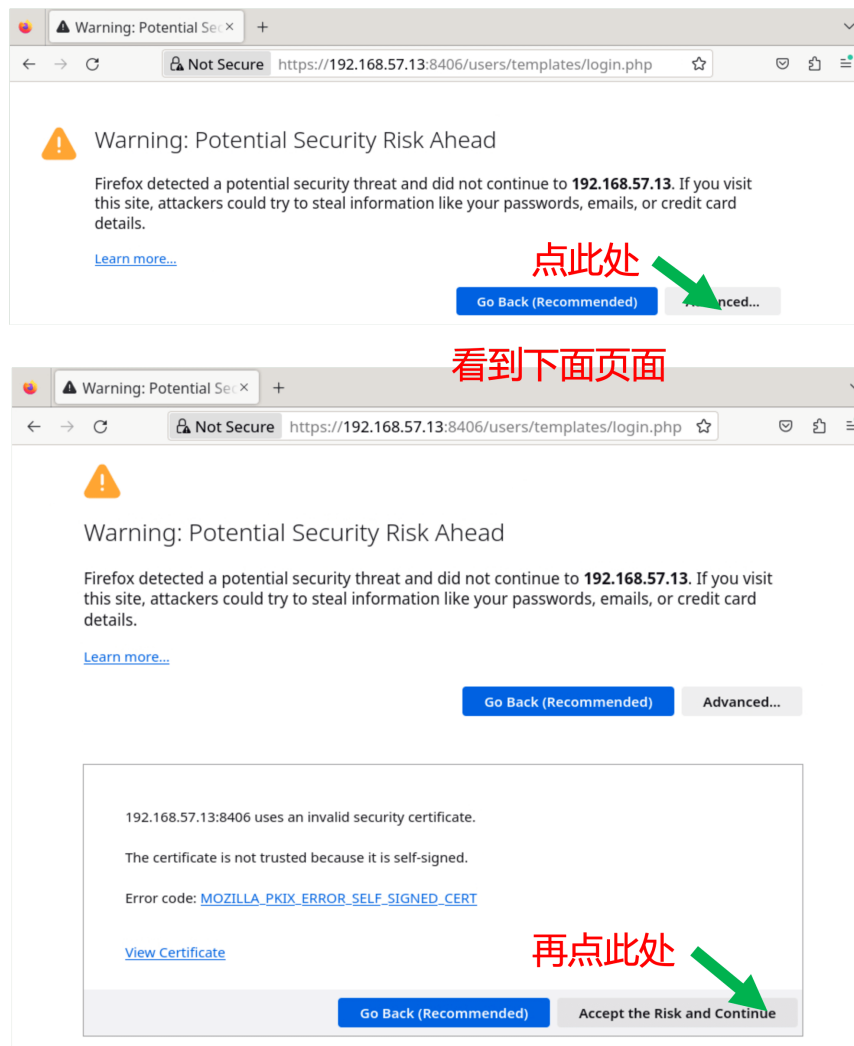


图 11: 浏览器安全证书警告, 请点击鼠标, 添加例外.

## 9.2 变更Web地址

需要root在master操作. 请关闭中文输入法.

第一步: 比如实际场景, master节点对外IP地址是192.168.14.254, 称之为loginIP.

修改文件/usr/share/nginx/html/index.html, 替换原IP地址为新的loginIP.

示例, 如果原loginIP是100.70.0.7, 您应该会看到:

```
<p><a href="https://100.70.0.7:8406/users"> 注册用户(User/Group Portal)</a></p>
<p><a href="https://100.70.0.7:8405"> 分配资源(Resource Portal)</a></p>
<p><a href="https://100.70.0.7.254"> 登录集群(HPC User Portal)</a></p>
```

变更网络环境后, loginIP变更为, 192.168.14.254, 那么修改完毕/usr/share/nginx/html/index.html, 相应的内容应该变更为:

```
<p><a href="https://192.168.14.254:8406/users"> 注册用户(User/Group Portal)</a></p>
<p><a href="https://192.168.14.254:8405"> 分配资源(Resource Portal)</a></p>
<p><a href="https://192.168.14.254"> 登录集群(HPC User Portal)</a></p>
```

其他内容无需修改.

第二步: 修改/etc/ood/config/ood\_portal.yml, 变更第6行IP地址为新的loginIP.

第三步: 执行如下指令:

```
chattr -i /etc/ood/dex/config.yaml
chattr -i /etc/ood/config/nginx_stage.yml
chattr -i /etc/ood/config/ood_portal.yml
chattr -i /etc/nginx/nginx.conf
/opt/ood/ood-portal-generator/sbin/update_ood_portal
systemctl restart ondemand-dex
systemctl restart httpd # RHEL用户
systemctl restart apache2 # Debian/Ubuntu用户
```

第四步: 用户清理浏览器缓存, 访问新地址https://loginIP:8404.

**温馨提示:** 管理员可以通过手动输入 https://loginIP:8406/users 以及 https://loginIP:8405 来访问管理端. 但是, 如果未实施如上四步操作, 任何人均无法使用浏览器访问https://loginIP. 请把loginIP变更为实际的IP地址, 例如 192.168.14.254.

访问前, 请先确认网络是否畅通. 示例指令如下:

```
ping loginIP
telnet loginIP 8405
telnet loginIP 8406
telnet loginIP 80
telnet loginIP 443
```

其中,

- 8405畅通, 可以使用https://loginIP:8405;
- 8406畅通, 可以使用https://loginIP:8406/users;
- 80和443畅通, 可以使用https://loginIP; 也就是HPC User Portal

telnet输出结果, 请自行结合各种AI辅助工具解读.

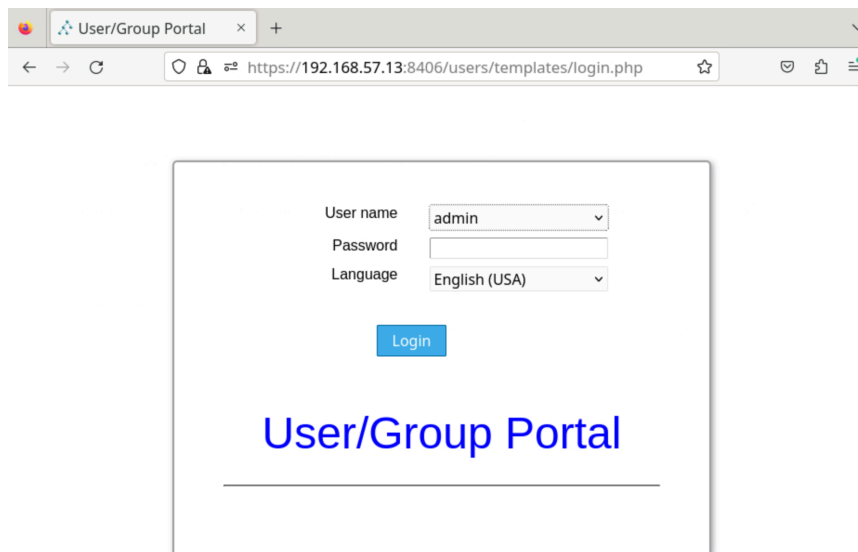


图 12: 注册用户(User/Group Portal)登录界面示例。

## 9.3 添加用户(组)

### 9.3.1 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。

### 9.3.2 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。

**任何使用集群系统的用户, 均需在此页面进行注册登记。**

### 9.3.3 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

**特别留意:** 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。



图 13: 自定义用户信息模版操作示例.

### 9.3.4 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.

### 9.3.5 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/>

## 9.4 资源分配管理

### 9.4.1 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.

### 9.4.2 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)

**特别注意:** 所有用户必须已在User/Group Portal完成注册.

一个简单可行的项目管理可参考图 14.

#### 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>.



图 14: 计算中心—PI—项目管理模式

### 9.4.3 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.

### 9.4.4 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](https://www.bilibili.com/video/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).

### 9.4.5 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 申请成为PI: 管理员与用户均可操作

### 10.1 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.

### 10.2 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.

### 10.3 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.

## 11 登录和使用集群: 用户层面

### 11.1 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.



### 11.1.1 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.

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.

### 11.1.2 账户初始化视频教程

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

### 11.1.3 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.

### 11.1.4 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.

### 11.1.5 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.

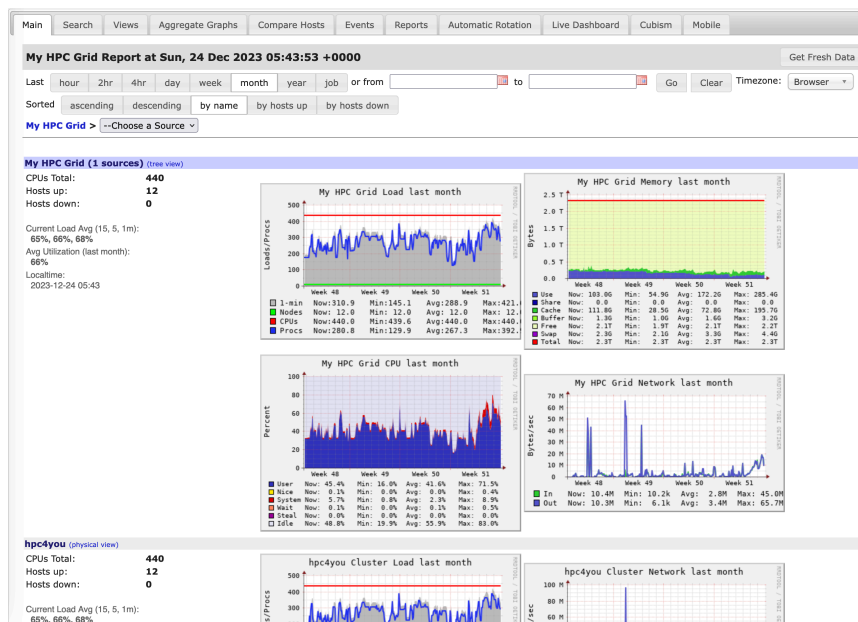


图 15: Ganglia集群性能监测示例。

## 12 性能监测

本离线版本, 提供:

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

**实时监控** <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](/root/hpc4you/login_credentials.txt).

### 12.1 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.

需要在所有节点上通过yum/dnf/apt安装ganglia和相关依赖, 需要互联网畅通. 配置完毕后, 无需互联网.

### 12.2 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 16和图 17.

### 12.3 关于系统监控的“生存指南”

#### 观众类型学分析

- 技术大佬型

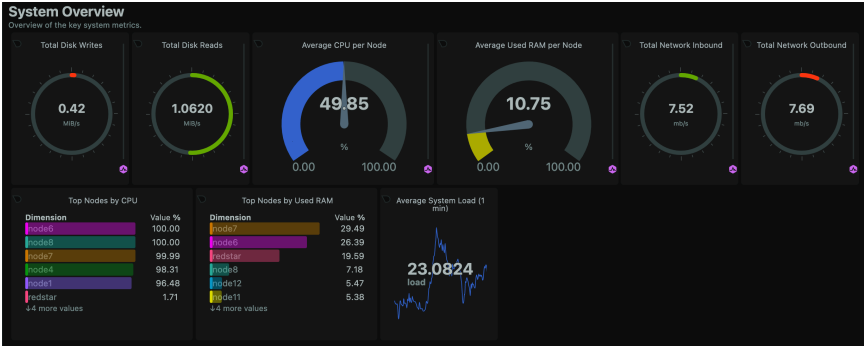


图 16: Netdata实时性能监测信息之系统综合负载动态图(默认每秒刷新, 实际上是动图).



图 17: Netdata展示的各节点监控信息示例.

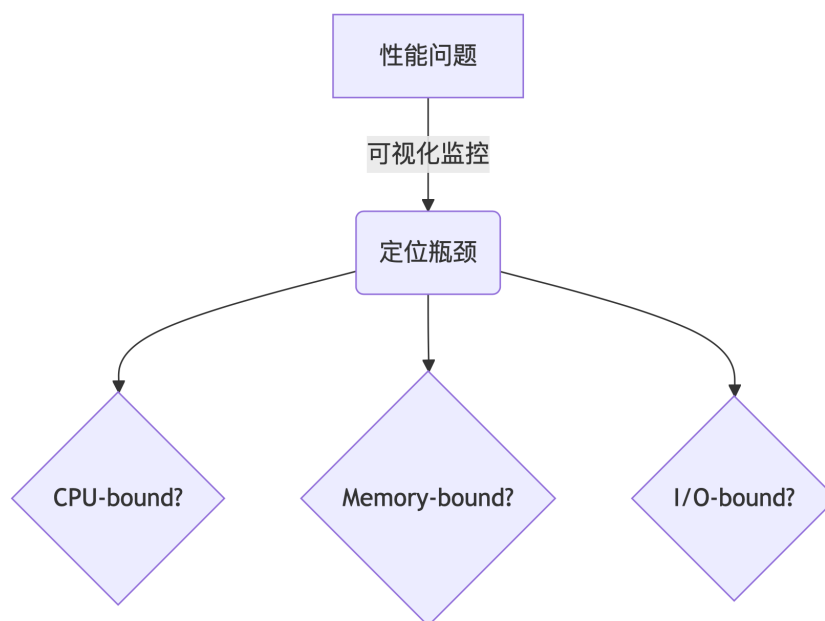


图 18: 性能瓶颈可视化分析.

- 典型问题: “网络架构是IB还是以太网? 存储用Lustre还是GPFS?”
- 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 18.

## 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.

## 13 很少用的功能

### 13.1 集群开/关机/重启

无论何种情形, **开机**, 是先开启交换机电源, 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.

### 13.2 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 Web界面安全设定

由于HPC User Portal未采用SSL加密, 可能泄漏用户密码. 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.

## 15 故障排除

以下可能存在的故障, 很少发生.

```
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 19: Web模块安装失败, Single SSH session warning.

## 15.1 Web模块无法安装

如果在安装过程中,看到图 19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, 继续操作运行`./enable_Web-Interface.sh`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.

## 15.2 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.

## 15.3 软件源超时

离线模式, 不需要互联网, 无此问题.

## 15.4 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.

## 15.5 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.

## 15.6 502 Bad Gateway

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.

## 15.7 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](mailto:ask@hpc4you.top) 获得技术支持.

## 15.8 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.

## 16 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.

### 16.1 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 Module | Very nice wiki.

## 16.2 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
```



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 <code>--cpus-per-task</code> option is specified.
SLURM_JOB_ACCOUNT		Account name associated of the job allocation
SLURM_JOBID	PBS_JOBID	The ID of the job allocation
SLURM_JOB_ID		
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 <code>--dependency</code> option
SLURM_JOB_NAME	PBS_JOBNAME	Name of the job
SLURM_NODELIST	PBS_NODEFILE	List of nodes allocated to the job
SLURM_JOB_NODELIST		
SLURM_NNODES		Total number of different nodes in the job's resource allocation
SLURM_JOB_NUM_NODES		
SLURM_MEM_PER_NODE		Same as <code>--mem</code>
SLURM_MEM_PER_CPU		Same as <code>--mem-per-cpu</code>
SLURM_NTASKS	PBS_NUM_NODES	Same as <code>-n</code> , <code>--ntasks</code>
SLURM_NPROCS		
SLURM_NTASKS_PER_NODE		Number of tasks requested per node. Only set if the <code>--ntasks-per-node</code> option is specified.
SLURM_NTASKS_PER_SOCKET		Number of tasks requested per socket. Only set if the <code>--ntasks-per-socket</code> option is specified.
SLURM_SUBMIT_DIR	PBS_O_WORKDIR	The directory from which <code>sbatch</code> was invoked
SLURM_SUBMIT_HOST	PBS_O_HOST	The hostname of the computer from which <code>sbatch</code> 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 20: slurm内置变量.

## 16.3 SLURM调度器内置参数

slurm调度器中更多控制参数, 请看图 20.

## 16.4 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](https://gitee.com/hpc4you/hpc/tree/master/slurm_scripts)

## 17 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.

### 17.1 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.

### 17.1.1 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。

### 17.1.2 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。

### 17.1.3 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。

## 17.2 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。

## 17.3 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的喜欢, 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.

## 17.4 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 `*/*/*/* /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.

## 17.5 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/release-3.0/index.html>.

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

## 17.6 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](#).

## 17.7 nginx

ColdFront/Resource Portal, ood/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](#)

## 17.8 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.

## 17.9 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.

## 18 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 . . . . .	5
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 . . . . .	6
3	节点内多核心并行集群. 管理节点, 链接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 链接绿色网络的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. . . . .	7
4	跨节点并行集群. 管理节点, 链接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 链接绿色网络的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. . . . .	8
5	电子表格内容示例 . . . . .	11
6	运行 <b>bash getInfo.sh</b> 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, 发送给慧计算. . . . .	12
7	无效授权许可会看到的提示信息(背景颜色可能不同). . . . .	13
8	安装完毕, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同). . . . .	15
9	文件login_credentials.txt内容示例(背景颜色以及链接地址可能不同). . . . .	16
10	Firefox浏览器页面示例(文字样式可能不同). . . . .	16
11	浏览器安全证书警告, 请点击鼠标, 添加例外. . . . .	18
12	注册用户(User/Group Portal)登录界面示例. . . . .	20
13	自定义用户信息模版操作示例. . . . .	21
14	计算中心—PI—项目管理模式 . . . . .	23
15	Ganglia集群性能监测示例. . . . .	26
16	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). . . . .	27
17	Netdata展示的各节点监控信息示例. . . . .	27
18	性能瓶颈可视化分析. . . . .	28
19	Web模块安装失败, Single SSH session warning. . . . .	30
20	slurm内置变量. . . . .	33