

可视化科学计算系统部署工具

hpc4you toolkit v3

HPC via Web for Workstation/单机版

用户手册

零基础、零配置构建具有Web可视化操作界和Slurm调度器的工作站

ask@hpc4you.top

二〇二五年八月十九日

目录

1	格式约定	2
2	重要变更	3
3	工具简介	3
3.1	支持的Linux系统	3
3.2	网络要求说明	4
3.3	操作简单	4
3.4	功能模块	5
3.5	授权说明	5
4	如何使用	5
4.1	自助模式	5
4.2	实况视频	6
5	配置完毕	6
6	配置之后	7
6.1	修改root密码	7
6.2	访问方式	8

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	PRIQ	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”, 即可以是通过网络ssh远程登录目标机器进行操作; 也可以是通过键盘、显示器, 直接操作master机器.

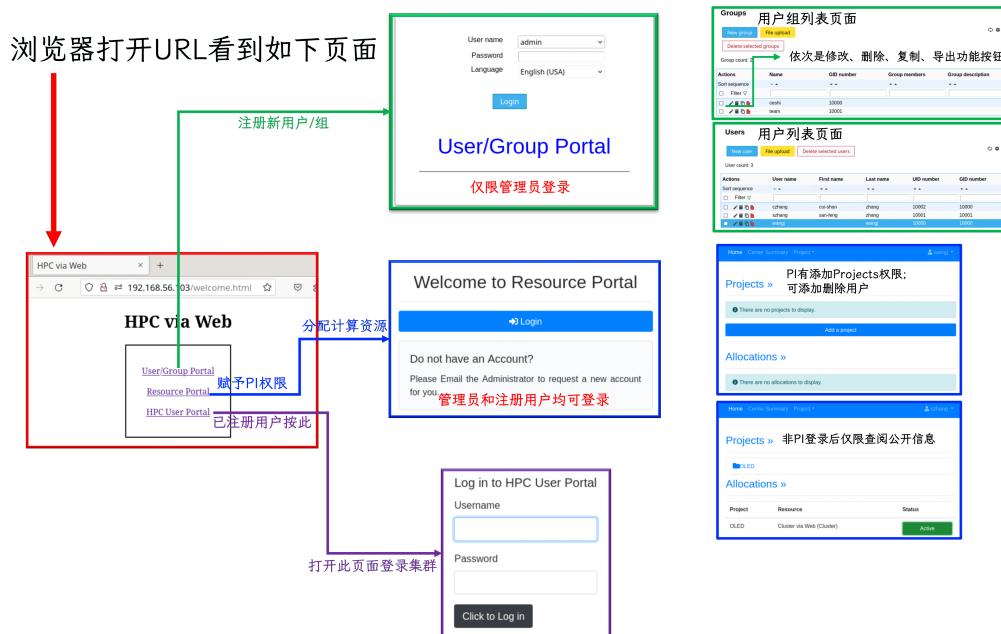


图 1: 具有Web可视化操作界面的工作站之管理员操作界面示例

2 重要变更

鉴于中国大陆网络环境的特殊性:

1. 仅提供基于Rocky Linux 9.5定制的离线安装版本, 包含所有功能模块.
2. 该版本无需互联网连接即可完成安装部署
3. 下载并使用[Rocky-9.5-x86_64-dvd.iso](#)安装系统
4. 镜像地址 https://mirrors.nju.edu.cn/rocky-vault/9.5/isos/x86_64/Rocky-9.5-x86_64-dvd.iso

3 工具简介

[hpc4you toolkit v3](#), [HPC via Web for Workstation](#), 用于科学计算服务器/工作站“傻瓜式”自动部署SLURM调度器+Web操作界面, 简化科学计算任务管理.

使用慧计算/hpc4you方案组建完毕的集群系统(多机器)或工作站(单机), 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.

3.1 支持的Linux系统

RHEL系列 RHEL 7.x, 8.x, 9.x及其兼容Linux发行版, 比如CentOS 7.x, CentOS 9 Stream, Rocky Linux 8.x, AlmaLinux 8.x, AlmaLinux 9.x; **不支持CentOS 8.x系列**

Ubuntu系列 Ubuntu 20.04 Focal; 22.04 Jammy

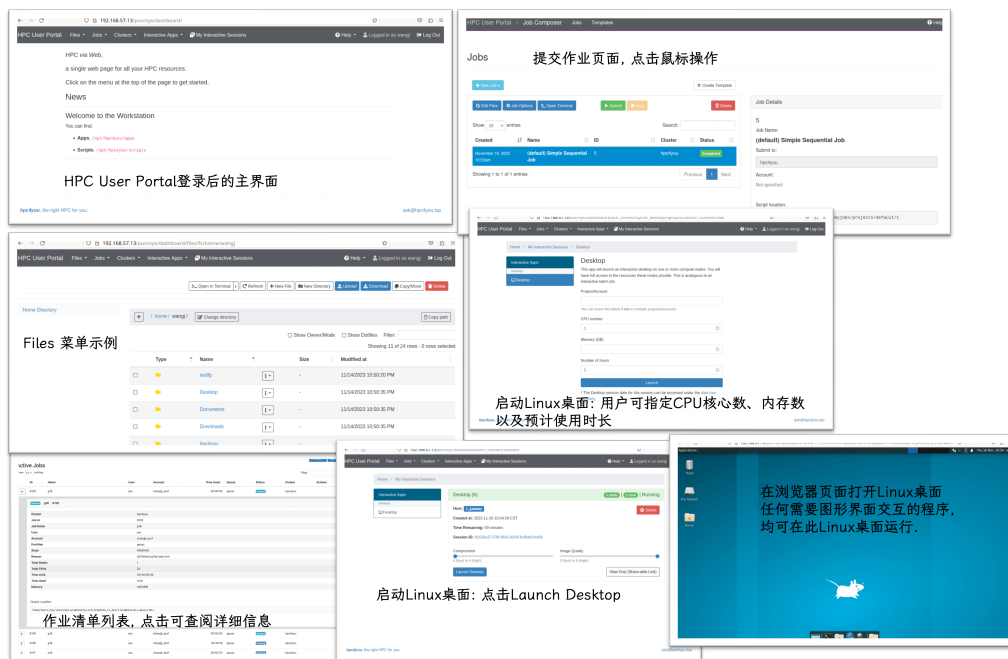


图 2: 具有Web可视化操作界面的工作站之用户操作界面示例

3.2 网络要求说明

标准安装模式下需满足以下网络条件:

1. 需确保Linux官方软件源(yum/dnf/apt)可用
2. 需能正常访问以下外部资源:
 - (a) Python包索引(PyPI)
 - (b) GitHub代码仓库
 - (c) 您未被osc.edu屏蔽¹
 - (d) Docker Hub镜像仓库
 - (e) Node.js资源站点

3.3 操作简单

无需任何Linux操作技能, 无需在命令行编辑任何配置文件. 操作仅需两步:

第一步 上传到服务器;

第二步 运行指令(红色内容全是) `unzip hpc4you*zip; source code`, 而后耐心等待.

能在Linux机器上跑计算的小伙伴, 应该可以搞定如何上传文件, 以及找到文件在哪里吧? 如有疑问, 请查阅教学视频 [BV1fj411n7uV](#).

¹More info <https://discourse.openondemand.org/t/yum-osc-edu-blocking-some-chinese-ips/2248>

3.4 功能模块

CPU调度+内存管理+GPU调度+作业日志+Web界面+图形桌面, 与hpc4you toolkit v3, HPC via Web for Cluster功能一致, 只是后者管理和调度多台机器.

工具套件中包含如下文件:

```
solo.sh
enable_slurmLog-step1.sh
enable_slurmLog-step2.sh
enable_Web-Interface.sh
getFileFingerPrint.sh
```

3.5 授权说明

1. 该工具套件和硬件信息绑定, 仅在指定机器可以使用.
2. 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>
 - <https://gitee.com/hpc4you/hpc/blob/master/TOS.md>
3. 本工具, 安装的是原版SLURM, 关于SLURM使用及相关信息, 请查阅官网<https://slurm.schedmd.com/>.

4 如何使用

请不要在微软系统中解压名为hpc4you_toolkit*.zip的压缩包.

请不要在Linux图形界面下本地登录Linux机器并操作本工具套件, 因为您将无法看到屏幕提示信息.

所有的文件操作, 必须使用root用户, 通过SSH远程操作服务器完成.

两种模式, 任选其一.

如果你的系统是最小安装, 请优先运行如下指令:

```
yum -y install unzip zip tar wget curl # RHEL 7及其兼容系统
dnf -y install unzip zip tar wget curl # RHEL 8, 9及其兼容系统
apt update && apt -y install unzip zip tar wget curl # Ubuntu 及其兼容系统
```

4.1 自助模式

第一步 获取软件, 在即将配置SLURM调度器的机器上运行下述指令,²屏幕输出信息类似如图3.

```
bash <(curl https://gitee.com/hpc4you/hpc/raw/master/getInfo.sh)
或者
curl http://tophpc.top:1080/getInfo.sh | bash
```

按照屏幕提示, 发送电邮. 如有疑问, 请查阅B站视频BV1NY4y1C7ya.

²或者运行`bash <(curl -k -Ss https://gitee.com/hpc4you/hpc/raw/master/getInfo.sh)`, 两者效果一样.

```
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。

586357bdbbc3aeb8e3b03c486ef75ba3 hardware379821.dat
SN: VL4i6MWU

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

Good Luck.
```

图 3: 运行curl指令后, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同).

第二步 查询电子邮件. 下载附件获取压缩包.

第三步 上传服务器/root目录. 上传Rocky-9.5-x86_64-dvd.iso到服务器/root目录.

第四步 登录服务器, 输入指令:

```
cd /root
unzip -qo hpc4you*.zip; source code
```

所有输入环节, 请关闭中文输入法.

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工作站组建.

期间, 请仔细阅读和理解屏幕提示信息. 如果网速能达到20MB/s, 基础版仅需不到5分钟就能完成调度器配置.

如果上传文件有疑问, 请查阅如下教学视频: 从微软上传文件到服务器, 教学视频BV1fJ411n7uV; 或者查阅视频BV1GY411w7ZV, 2分41秒开始的片段.

4.2 实况视频

本工具套件, 历经充分测试, 可以在RHEL7, RHEL8, RHEL9, Ubuntu及其兼容系统上傻瓜式配置Web操作界面+SLURM调度器, 包括但不限于CentOS7.x, CentOS Stream8/9, Rocky 8.x/9.x, AlmaLinux 8.x/9.x等RHEL兼容系统, 以及Ubuntu Focal 和 Jammy.

实况操作视频请查阅B站相关视频合集, 或者访问阿里云盘共享链接, <https://www.aliyundrive.com/s/c9GpKok2BTw>.

基于Rocky Linux 9.5的离线版本, 安装更加迅速; 操作流程与上述实况视频基本一致.

5 配置完毕

运行完毕./enable_Web-Interface.sh之后, 会看到类似如下的信息, 在按y重启机器之前, 请务必拷贝这些内容另存到其他地方; 这些信息管理员知晓即可, 无需分享给用户. 输出截图示例请看图 4.

看到图 4输出信息, 意味着, Web操作界面+SLURM调度管理已经安装配置完毕.

```
Please copy and save the following content (enclosed by the green lines).
-----green line-----
!!! Caution !!!
The Linux root user is not allowed to login any Web Interface.
User/Group Portal
    The login name is:      admin
    The password is:       mnhNgDHgFwTgp

Resource Portal
    The login name is:      admin-WSQK
    The password is:       FSLCwuSiFMWb
-----green line-----

!!! Caution !!!
Be sure to write down the above login credentials, then press y to reboot the server.

After the login/master node is back online,
you can use a browser (Firefox, Edge, or Safari) to open the following URL
to access the HPC via Web.

URL:      http://192.168.57.13/welcome.html

I have saved the above login credentials to my note.
Now I am going to press y to reboot the server.

Press y to reboot: █
```

图 4: Web-Interface模块运行完毕后, 看到的提示信息(文字样式可能稍有差异).

6 配置之后

配置完毕后, Web界面和调度器, 免维护, 免管理.

唯一的管理工作是添加/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. 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.

无论是单机工作站/服务器, 还是科学计算集群, 使用此Web界面后, 管理和使用流程都是一样的. 视频教程, 总计7分钟, 在此, <https://space.bilibili.com/470332016/channel/collectiondetail?sid=1896763>.

如果工作站, 所有用户均使用同一队列, 仅靠先后顺序调用资源, 在Resource Portal/Allocation Requests直接点击Approve即可, 无需考虑其他选项.

6.1 修改root密码

单机版, 修改root密码环节和集群版有差异.

修改root密码, 直接输入:

passwd

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, 工作站配置完毕后, 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.

6.2 访问方式

传统SSH指令模式和Web访问并存.

用户信息已经交由LDAP管理(User/Group Admin Portal), 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, 显然也无法使用调度器.