

hpc4you toolkit v3.1 Web

Rocky 9.3 离线版

安装操作手册(图文版)

2024 年 04 月 02 日

目录

使用流程.....	- 2 -
准备工作.....	- 2 -
安装操作系统.....	- 2 -
系统安装后.....	- 2 -
获取集群系统软包.....	- 3 -
上传软包到管理节点.....	- 4 -
上传镜像到管理节点.....	- 4 -
安装集群系统.....	- 5 -
第一个环节.....	- 5 -
第二个环节.....	- 5 -
第三个环节.....	- 6 -
第四个环节.....	- 6 -
集群系统 Web 界面展示.....	- 7 -
用户管理 Web 界面.....	- 8 -
资源管理 Web 界面.....	- 9 -
集群用户 Web 界面.....	- 11 -
集群系统 Web 视频教程.....	- 15 -

使用流程

按照如下顺序进行：

1. 安装 Rocky9.3
2. 设定机器名和 IP 地址
3. 在 master 机器/etc/hosts 录入机器名和 IP 地址信息
4. 上传 hpc4you_toolkit*.zip 到 master 机器
5. 在 master 机器输入 `unzip hpc4you*.zip; source code` 开始安装集群系统（安装过程，会让您输入一次 root 密码并按回车键；机器会重启几次；安装过程至少持续 30 分钟或者更久）

准备工作

安装操作系统

必须做到如下事项：

1. 使用 Rocky-9.3-x86_64-minimal.iso 镜像安装系统
2. 允许 root 用户使用密码登录
3. 所有机器 root 密码相同
4. 所有机器都连接在同一个局域网

系统安装视频教程：

1. <https://www.bilibili.com/video/BV1nC411W7Xv>
2. <https://www.bilibili.com/video/BV1iy421875y>

请务必选择 Minimal Install/最小安装。

系统安装后

机器名和网络地址不可重复，务必按照以下要求操作：

定义机器名：机器名可以是字母数字组合，不能含有空格和特殊字符。本程序要求机器名采用“node+数字”的组合方式，比如 node01、node99 之类。其中主控节点，也就是登录/管理节点，名称必须是 master。

定义网络地址：为了保证维护简单配置方便，建议采用静态 IP 地址配置。

登记机器名和网络地址：/etc/hosts 文件是一个本地主机名解析文件，用于将主机名映射到其对应的 IP 地址。它可以作为 DNS 服务器的替代，实现本地主机名解析的功能。编辑 /etc/hosts 文件：在 /etc/hosts 文件中，每行由一个 IP 地址和一个主机名组成。每行以 # 开头的是注释行。示例如下：

```
1. # This is a comment line
2. 192.168.1.254 master
3. 192.168.1.1 node01
4. 192.168.1.2 node02
5. 192.168.1.99 node99
```

在 /etc/hosts 文件更新完成后，可以使用 ping 命令测试主机名解析是否正确。例如在登录节点的终端执行：

```
1. ping master
2. ping node99
3. ping node01
4. ping node02
```

下面是一个网络正常的 ping 测试结果：

```
1. $ ping baidu.com
2. PING www.example.com (192.0.2.1): 56 data bytes
3. 64 bytes from 192.0.2.1: icmp_seq=0 ttl=64 time=0.020 ms
4. 64 bytes from 192.0.2.1: icmp_seq=1 ttl=64 time=0.040 ms
5. 64 bytes from 192.0.2.1: icmp_seq=2 ttl=64 time=0.059 ms
```

上面的结果显示，说明网络一切正常。

机器名和网络地址设定视频教程：使用 nmtui 指令。

<https://www.bilibili.com/video/BV1gP4y1u7Aw>

获取集群系统软包

请访问 <http://tophpc.top:8080> 或者电邮 ask@hpc4you.top 。本集群系统软件通过快递或者百度网盘提供。请首先在您自己的电脑上操作：

1. 确保您自己的电脑连接到互联网
2. 下载该文件 <http://tophpc.top:1080/getInfo.sh>

3. 以 root 用户身份, 上传下载得到的文件, 到服务器的/root 目录
4. 在服务器运行指令

1. `bash 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.

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.
```

5. 请拷贝屏幕上提示的蓝色内容(看上图示例), 通过电邮或者微信发送。
6. 电邮联系 ask@hpc4you.top, 或者微信联系 hpc4you。
7. 确认软件包获取方式: 百度网盘或者邮政/顺丰快递。
8. 在下载过程完成后, 找到软件包的保存位置, 并确认软件包已下载成功。请勿在 Windows 系统上对软件包进行解压, 确保它保持原始的压缩状态。

上传软包到管理节点

如何从微软机器上传文件到 Linux 服务器, 视频教学:

<https://www.bilibili.com/video/BV1FN4y1T7r7>

为了保证软件的正常使用, 请您务必先上传程序包到 Linux 服务器, 然后使用 `unzip` 命令进行解压操作。

对于当前场景而言, 解压指令一定是 `unzip -qo hpc4you_toolkit-web*.zip`, 请勿使用其他任何指令。

上传镜像到管理节点

下载镜像 `Rocky-9.3-x86_64-dvd.iso`, 上传到服务器/root 目录下。仅仅放在 master 机器的 /root 目录下即可。上传 `tar-1.34-6.el9.x86_64.rpm` 和 `unzip-6.0-56.el9.x86_64.rpm` 到 master 机器的/root 目录。镜像和 rpm 安装包, 在慧计算提供的下载链接或者在您收到的 U 盘里面。

安装集群系统

依据重新登录或者机器重启为分割点，分为如下四个环节，请按照顺序依次操作。

第一个环节

登录主控节点，在终端先粘贴第 1 行文字内容，按 Enter；执行完毕后，按粘贴第 2 行内容，按 Enter。（您需要复制的内容，不包含绿色竖线旁边的数字）

1. rpm -i unzip*rpm tar*rpm
2. unzip -qo hpc4you_toolkit*zip; source code

等待一会儿后，看到下面的提示，必须按照屏幕提示，输入 root 密码，然后按回车键。

```
Please follow the instructions on the screen carefully.

Now set up the SSH for User:root
5.. 4.. 3.. 2.. 1..

Default root password for all slave nodes:
```

输入密码后，按回车键。

如果您输入了错误的 root 密码，请重新安装操作系统，重新开始。

看到如下信息后，第一个环节运行结束。

```
After login, run,
  cd /root/hpc4you_toolkit-web-offline-el9-Rocky9.3-Offline
  ./step2.sh

Please follow the instructions on the screen carefully.
Please copy and paste all the green characters above,
then press Enter.
```

此时请复制屏幕上提示的绿色内容，重新登录集群控制节点。

第二个环节

登录成功后，请粘贴刚刚复制的内容，然后按回车键。耗时多一些，请务必耐心等待。

运行完毕后，看到的提示信息：

```
The master node is going to reboot in 3 seconds, please login again.
After login, ensure that all compute nodes have been successfully restarted.
You'd better wait upto 3 minutes...or even longer if your server boots slowly...

After all compute nodes are successfully restarted, execute the following command.
  cd /root/hpc4you_toolkit-web-offline-el9-Rocky9.3-Offline
  ./step4.sh

Please follow the instructions on the screen carefully.
Please copy and paste all the green characters above,
then press Enter.
```

第三个环节

按照屏幕提示，复制绿色的内容，**等待所有机器重启完毕后**，再次登录主控节点。粘贴以上复制的东西，按回车键。依次看到屏幕提示信息如下：

```
I am going to run ./enable_slurmLog-step1.sh module in 5 seconds ...
Countdown to run ./enable_slurmLog-step1.sh module: 1 ...

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

The cluster is going to reboot in 5 seconds.
Please wait up to 3 minutes, then run,
    cd /root/hpc4you_toolkit-web-offline-el9-Rocky9.3-Offline
    ./enable_slurmLog-step2.sh

I am going to reboot the whole HPC in 5 seconds.
```

注意，绿色的路径信息会更具实际场景自动生成。所以您实际看到的和这里的稍有不同。

第四个环节

请复制上图红色圈里面所有绿色内容，**等待所有机器重启完毕后**，再次登录主控节点，粘贴刚才复制的内容，按回车键，耐心等待，会看到：

```
THIS MAY TAKE A WHILE, PLEASE BE PATIENT!!!
[██████] OK!
The IP address of the master/login node is: 192.168.56.156
You will be using this IP address to access the cluster.

If correct press y, if incorrect press n : y
```

根据提示，您需要确认 Login IP 地址。按字母 y 即可。耐心等待，最后看到：

```
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 the whole cluster: 9 ...
```

注意，本步骤运行完毕后，所有机器都会重启。所有机器重启完毕后，请登录主控机器，粘贴上面示例的绿色指令，获取管理密码和访问链接。具有 Web 前端界面的集群系统就安装完毕了。

集群系统 Web 界面展示

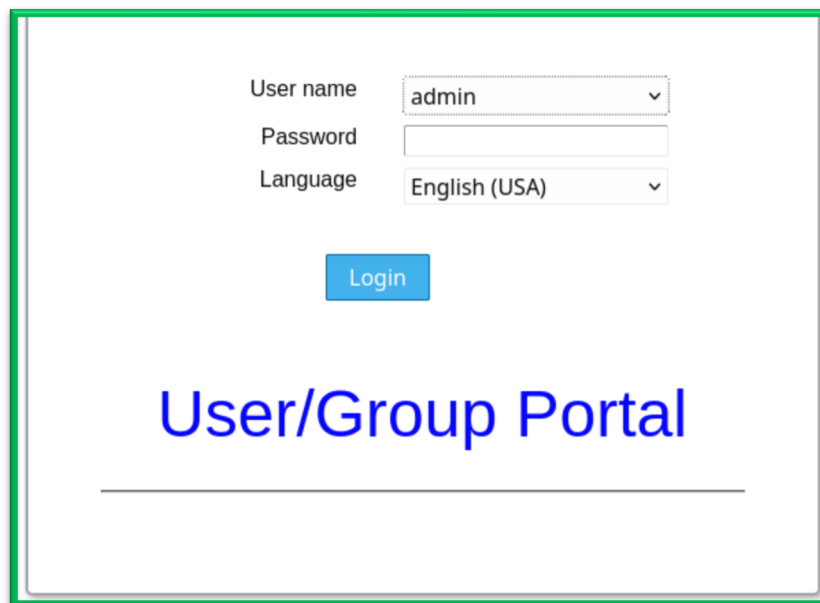
历经充分测试，以下提及的 Web 界面，能够在多种平台上运行，包括 Windows, Mac, Linux 等操作系统，并且能够在 Chrome, Edge, Firefox, Safari 等多种浏览器上正常工作。这种跨平台特性为用户提供了更多的选择和使用便利，可以更好地满足不同用户的需求。同时，这也有助于提高项目的兼容性和稳定性，为用户提供更好的体验。

建议管理员在使用前，查阅如下总计 7 分钟的教学视频：

<https://space.bilibili.com/470332016/channel/collectiondetail?sid=1896763>

用户管理 Web 界面

User/Group Portal, 后台采用 Open LDAP, 源码公开, 无版权问题。前端显示采用 LAM 实现。



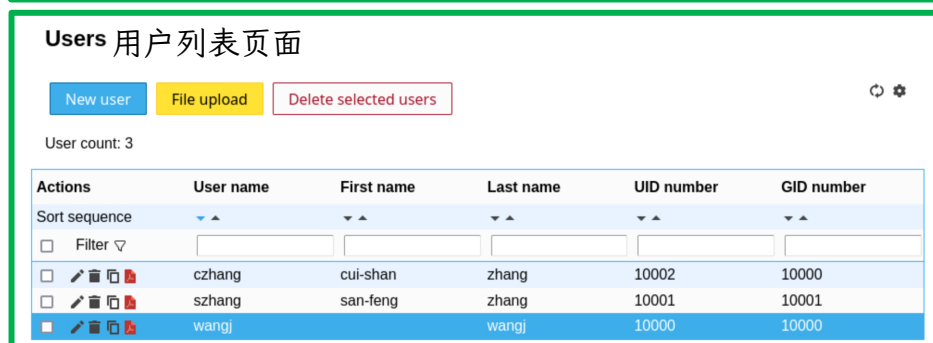
The image shows a login interface for the User/Group Portal. It features a form with three fields: 'User name' with a dropdown menu showing 'admin', 'Password' with a text input field, and 'Language' with a dropdown menu showing 'English (USA)'. Below the form is a blue 'Login' button. The title 'User/Group Portal' is displayed in large blue text below the login form.

添加用户之后的 Web 界面示例:



The image shows the 'Groups' user group list page. It has a title 'Groups 用户组列表页面'. Below the title are buttons for 'New group', 'File upload', and 'Delete selected groups'. A 'Group count: 2' is displayed. A table lists the groups with columns: 'Actions', 'Name', 'GID number', 'Group members', and 'Group description'. The table contains two rows: 'ceshi' with GID number 10000 and 'team' with GID number 10001. A green arrow points to the 'Actions' column, with a note: '依次是修改、删除、复制、导出功能按钮'.

Actions	Name	GID number	Group members	Group description
☐	ceshi	10000		
☐	team	10001		



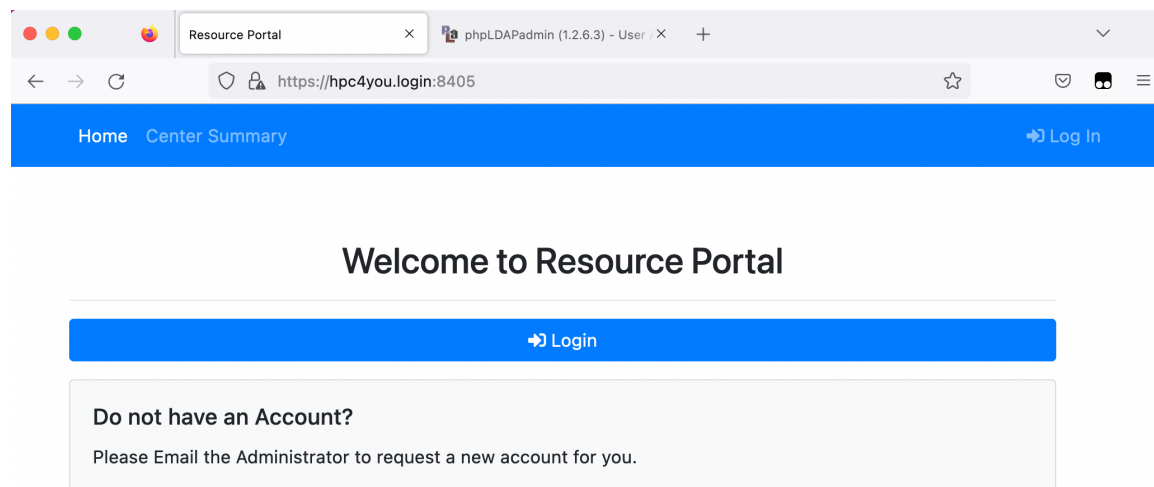
The image shows the 'Users' user list page. It has a title 'Users 用户列表页面'. Below the title are buttons for 'New user', 'File upload', and 'Delete selected users'. A 'User count: 3' is displayed. A table lists the users with columns: 'Actions', 'User name', 'First name', 'Last name', 'UID number', and 'GID number'. The table contains three rows: 'czhang' with first name 'cui-shan' and last name 'zhang', 'szhang' with first name 'san-feng' and last name 'zhang', and 'wangj' with first name 'wangj' and last name 'wangj'. The 'wangj' row is highlighted in blue.

Actions	User name	First name	Last name	UID number	GID number
☐	czhang	cui-shan	zhang	10002	10000
☐	szhang	san-feng	zhang	10001	10001
☒	wangj	wangj	wangj	10000	10000

资源管理 Web 界面

Resources Portal，这里控制资源分配，自动控制 Slurm 后台。所有操作管理均在浏览器中登录后， 点击鼠标实现。无需任何指令技能。

登录界面如下：



登录信息，来自安装环节，提示保存的绿色线条之间的内容。

Resources Portal 基于开源的 ColdFront 开发，是一个基于 Web 前端的资源管理系统，用于管理分布式计算集群。

管理员在 Resources Portal 所能做的事情包括：

- 审计和查验课题组长身份
- 审计课题组长的资源申请
- 为新项目申请，提供/指定记账账号
- 本系统自动终止过期账号授权

课题组长/PI 在 Resources Portal 所能做的事情包括：

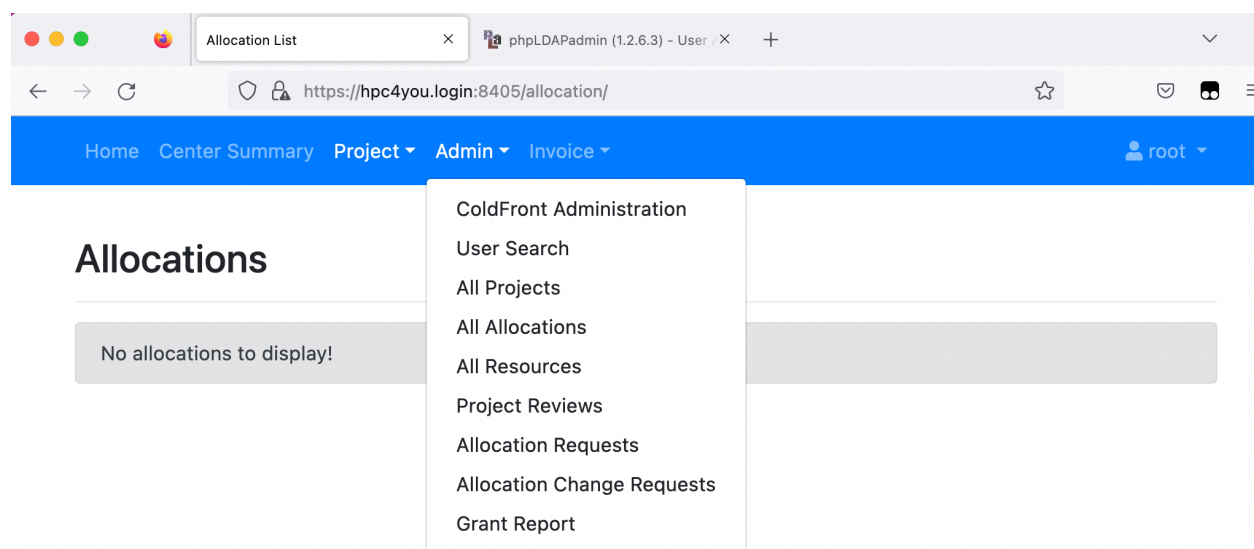
- 创建新的项目
- 给新项目指定管理员/Project manager
- 给项目添加用户，添加学生到项目
- 提出资源申请
- 从现有项目中移除毕业生

资源分配和管理将围绕“项目”展开，由课题组长或者项目管理员根据实际需要，进行自我管理。具体操作演示和讲解，请看视频

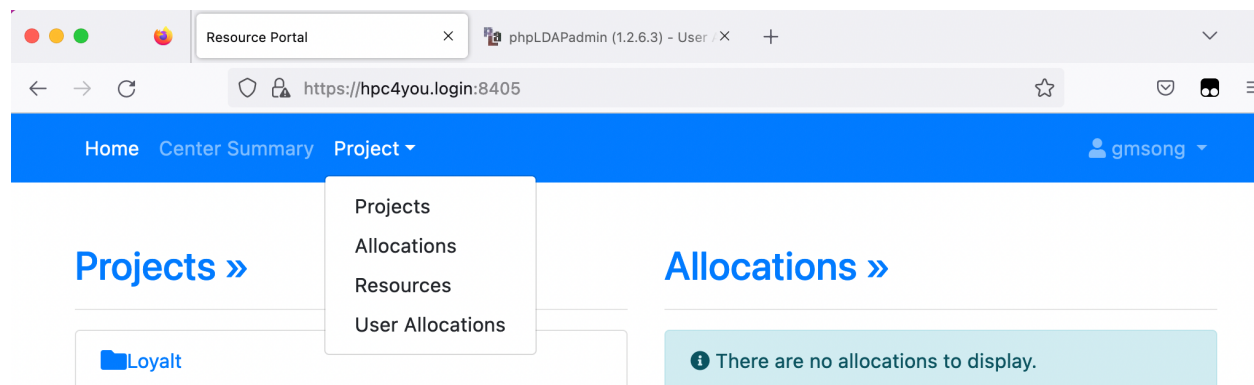
<https://www.bilibili.com/video/BV19e411N7CD>。

未登录情形下，所有用户均可以通过 Center Summary 菜单，查看集群资源的分配概况，亦即有多少用户，多少个课题组长/PI，多少个项目，多少账户过期了等信息，实现资源分配公开透明。

管理员登录后，可以进行更多的操作，示例菜单如下：



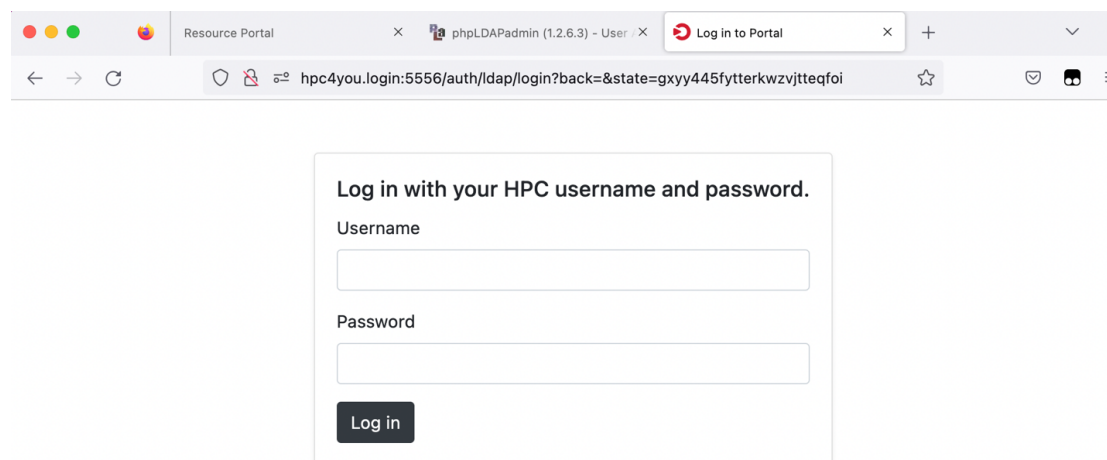
课题组长登录后的操作菜单示例如下：



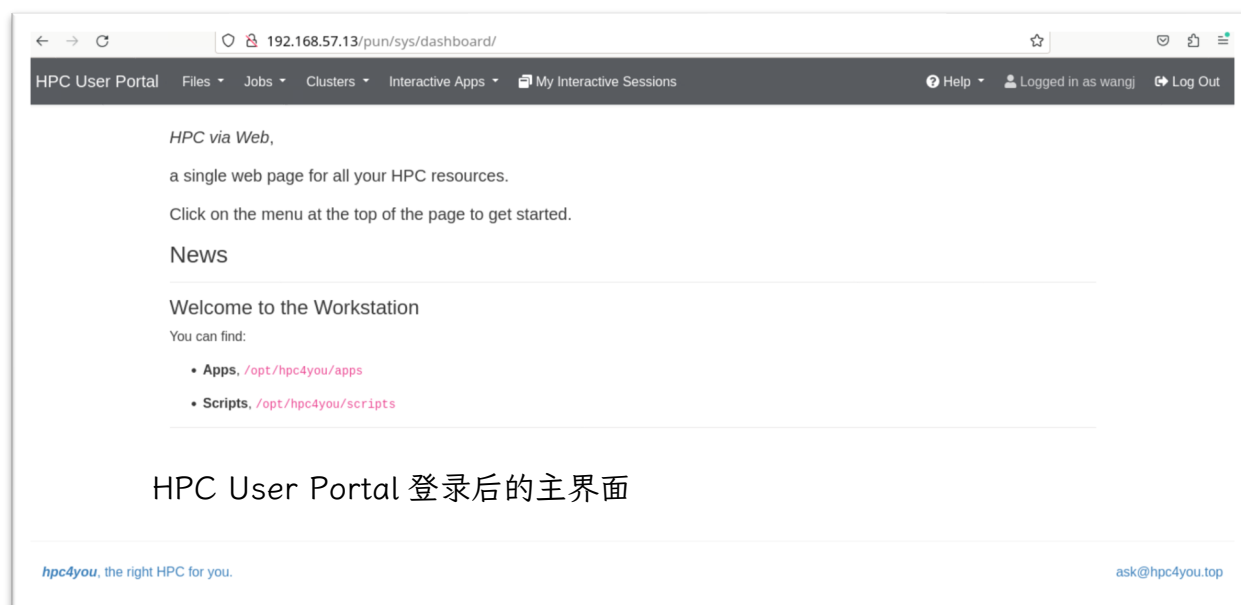
集群用户 Web 界面

HPC User Portal, 亦即集群用户 Web 前端, 基于 Open OnDemand 开发, 可工作在 Firefox, Edge, Chrome 等浏览器。跨平台, 和操作系统无关。该 Web 端, 提供给集群用户使用。无需任何其他工具, 用户只需打开浏览器, 既可以访问计算资源, 十分便捷。也可以在浏览器中直接使用 Linux 桌面, 进而运行各种需要在图形界面下进行交互的专业程序, 比如 Matlab, Mathematica, GaussView, Molden 等。

集群用户 Web 前端登录截图如下:



登录后操作菜单如下:



HPC User Portal 登录后的主界面

在 Jobs 子菜单 Active Jobs 查询作业状态。可以查看作业详细信息， 通过点击鼠标进入作业目录、点击鼠标删除作业等。

HPG User Portal Files ▾ Jobs ▾ Clusters ▾ Interactive Apps ▾ ? ▾ User Icon Logout

Active Jobs

Show 50 ▾ entries Filter:

ID ▾	Name ▾	User ▾	Account ▾	Time Used ▾	Queue ▾	Status ▾	Cluster ▾	Actions ▾
>	124 hpc4you/sys/dashboard /sys/bc_desktop/hpc4you	gmsong	liangshan	00:00:11	workq	Running	hpc4you	
>	125 hpc4you/sys/dashboard /sys/bc_desktop/hpc4you	gmsong	liangshan	00:00:07	workq	Running	hpc4you	
>	126 hpc4you/sys/dashboard /sys/bc_desktop/hpc4you	gmsong	liangshan	00:00:04	workq	Running	hpc4you	
>	127 hpc4you/sys/dashboard /sys/bc_desktop/hpc4you	gmsong	liangshan	00:00:01	workq	Running	hpc4you	

Showing 1 to 4 of 4 entries Previous 1 Next

点击 Files 菜单进行文件操作，截图如下：

Resource Portal × phpLDAPAdmin (1.2.6.3) - User × Dashboard - HPC User Portal ×

hpc4you.login/pun/sys/dashboard/files/fs/home/users/gmsong

HPCC User Portal Files Jobs Clusters Interactive Apps

Open in Terminal New File New Directory Upload Download Copy/Move Delete

Home Directory

/ home / users / gmsong / Change directory Copy path

Show Owner/Mode Show Dotfiles Filter:

Showing 9 of 25 rows - 0 rows selected

Type	Name	Size	Modified at
☐	Desktop	-	11/22/2022 4:20:52 PM
☐	Documents	-	11/22/2022 4:20:52 PM
☐	Downloads	-	11/22/2022 4:20:52 PM
☐	hpc4you	-	11/22/2022 4:17:51 PM
☐	Music	-	11/22/2022 4:20:52 PM
☐	Pictures	-	11/22/2022 4:20:52 PM
☐	Public	-	11/22/2022 4:20:52 PM
☐	Templates	-	11/22/2022 4:20:52 PM
☐	Videos	-	11/22/2022 4:20:52 PM

可以在此 Web 前端界面，直接进行文件操作，比如查看文件，编辑、修改文件，重命名文件，上传、下载文件等。显然也可以通过点击鼠标变换路径、点击鼠标复制或者移动文件。

通过 Jobs 子菜单 Job Composer 点击鼠标，创建需要通过脚本提交到调度器的并行计算任务。比如运行 ORCA、Gaussian、VASP 等专业程序。

The screenshot displays the HPC User Portal interface. At the top, a green notification bar states "Job was successfully created." Below this, the "Jobs" section is active. On the left, a job list table shows one entry: a job created on December 6, 2022, at 4:27pm, named "(default) Simple Sequential Job", submitted to the "hpc4you" cluster, and currently in a "Not Submitted" state. Above the table are buttons for "Edit Files", "Job Options", and "Open Terminal", along with a search bar and a "Show 25 entries" dropdown. On the right, the "Job Details" panel provides information for the selected job: Job Name is "(default) Simple Sequential Job", Submit to is "hpc4you", Account is "Not specified", Script location is "/home/users/gmsong/hpc4you/data/sys/myjobs/pr", and Script name is "main_job.sh".

HPG User Portal / Job Composer Jobs Templates Help

Job was successfully created.

Jobs

+ New Job ☆

Edit Files Job Options Open Terminal

Show 25 entries Search:

Created	Name	ID	Cluster	Status
December 6, 2022 4:27pm	(default) Simple Sequential Job		hpc4you	Not Submitted

Showing 1 to 1 of 1 entries Previous 1 Next

Job Details

Job Name:
(default) Simple Sequential Job

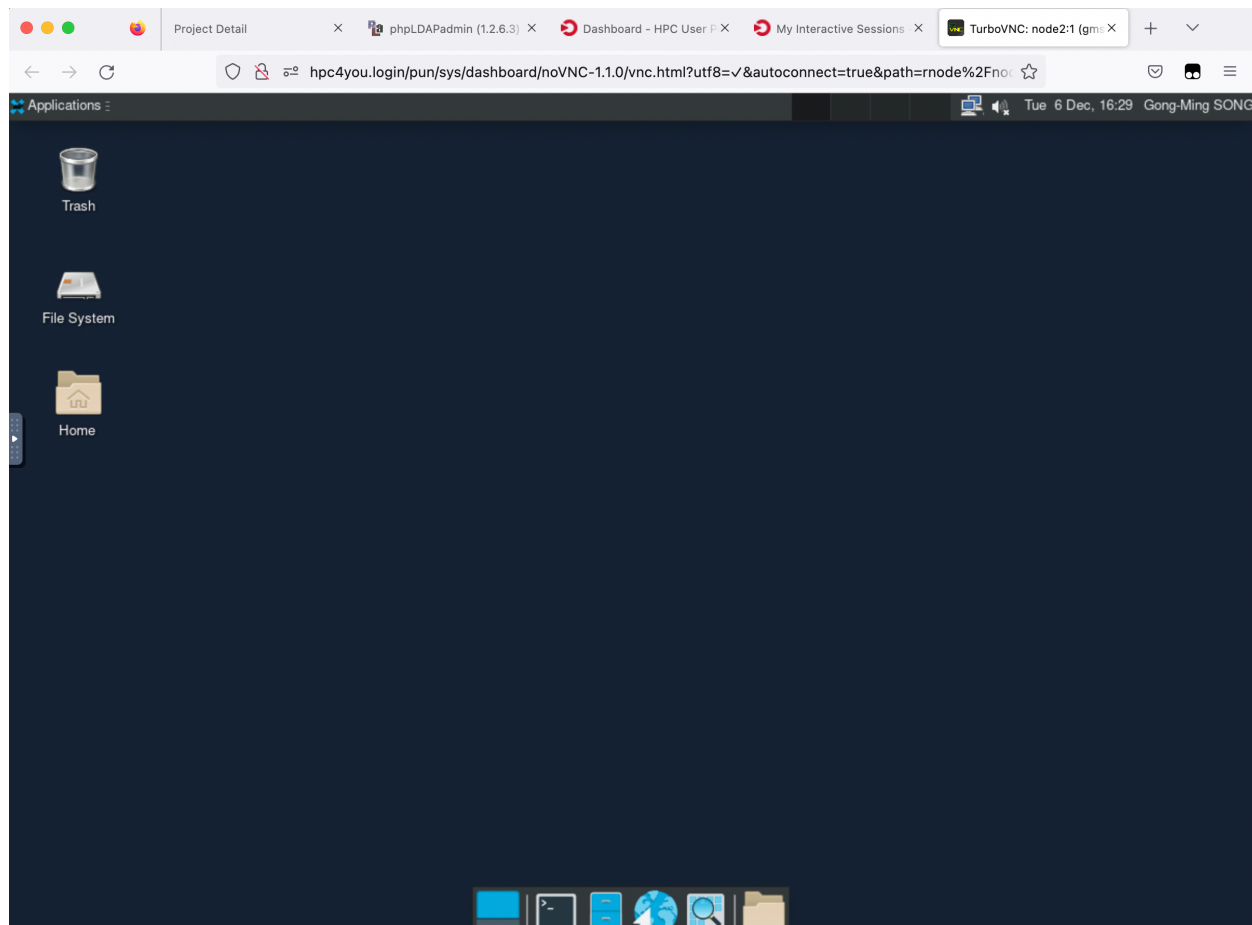
Submit to:
hpc4you

Account:
Not specified

Script location:
/home/users/gmsong/hpc4you/data/sys/myjobs/pr

Script name:
main_job.sh

通过 Interactive App/Desktop 菜单，直接在浏览器开启 Linux 桌面系统。能运行桌面系统，那么任何需要在图形界面交互运行的程序，都可以顺利运行。示例如下。



在浏览器界面，启用 Linux 桌面，直接通过点击鼠标运行图形界面程序。演示视频：
<https://www.bilibili.com/video/BV1PM411C7Cs> 请直接快进到 04:39 查看。

集群系统 Web 视频教程

以上各 Web 前端界面，操作演示， 请看如下视频合集。

<https://www.bilibili.com/video/BV1PM411C7Cs>

<https://www.bilibili.com/video/BV1gg411W7m8>

<https://www.bilibili.com/video/BV19e411N7CD>

<https://space.bilibili.com/470332016/channel/collectiondetail?sid=1896763>

(使用指南)