

可视化集群系统(HPC via Web v3.1)

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

English Version <https://hpc4you.github.io>

ask@hpc4you.top

二〇二三年十二月二十六日

目录

1	格式约定	4
2	可视化界面示例	5
3	Quick Start	5
4	FAQ	6
5	v3.1新特性	6
6	基础版与专业版	7
7	写在前面	7
8	支持的集群架构	8
8.1	硬件与网络拓扑	8
8.2	用户数据与应用程序	10
9	系统与网络	10
9.1	已有系统	10
9.2	安装系统	11
10	组建集群	12
10.1	准备工作	12
10.1.1	在微软上操作(非必需)	12
10.1.2	在master操作获取授权许可	12
10.1.3	上传hpc4you toolkit压缩包	14
10.1.4	继续在master机器操作	14
10.1.5	机器名和IP信息录入注意事项	14
10.1.6	自定义机器名(可选)	15
10.1.7	确保软件源工作	15
10.2	安装集群系统	16

	10.2.1	运行逻辑	16
	10.2.2	自助模式	16
	10.2.3	技术协助模式	17
	10.2.4	甩手掌柜模式	17
	10.3	集群就绪	17
11		集群系统套件安装演示	19
12		管理集群: 仅限管理员操作	19
	12.1	修改root密码	20
	12.2	添加用户(组)	20
	12.2.1	技术规范	20
	12.2.2	管制逻辑	20
	12.2.3	添加用户/组	20
	12.2.4	删除用户/组	23
	12.2.5	视频教程	23
	12.3	资源分配管理	23
	12.3.1	技术规范	23
	12.3.2	资源管制逻辑	23
	12.3.3	登记集群信息	24
	12.3.4	登记PI/课题组长信息	24
	12.3.5	视频教程	24
13		申请成为PI: 管理员与用户均可操作	24
	13.1	管制逻辑	24
	13.2	课题组长/PI权限	25
	13.3	视频教程	25
14		登录和使用集群: 用户层面	25
	14.1	登录集群	25
	14.1.1	账户初始化	25
	14.1.2	账户初始化视频教程	25
	14.1.3	菜单功能	25
	14.1.4	提交计算	26
	14.1.5	操作演示	26
15		性能监测	26
	15.1	Ganglia负载监测	26
	15.2	Netdata集群性能实时监测	27
	15.3	性能监测有啥用	27
16		很少用的功能	28

16.1	集群开/关机/重启	28
16.2	添加新机器	28
16.2.1	方案1: 硬件克隆	29
16.2.2	方案2: 在线自动配置	29
17	Web界面安全设定	29
18	故障排除	30
18.1	Web模块无法安装	30
18.2	重启失败	30
18.3	软件源超时	30
18.4	主控机器无法登录节点	31
18.5	UserControl失效	31
18.6	502 Bad Gateway	31
18.7	意外停电	31
18.8	某段时间后,部分节点无法工作	32
19	SLURM技能自我修养	32
19.1	选一个浏览一下	32
19.2	快速制作slurm脚本	32
19.3	SLURM调度器内置参数	33
20	图片目录	35

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.

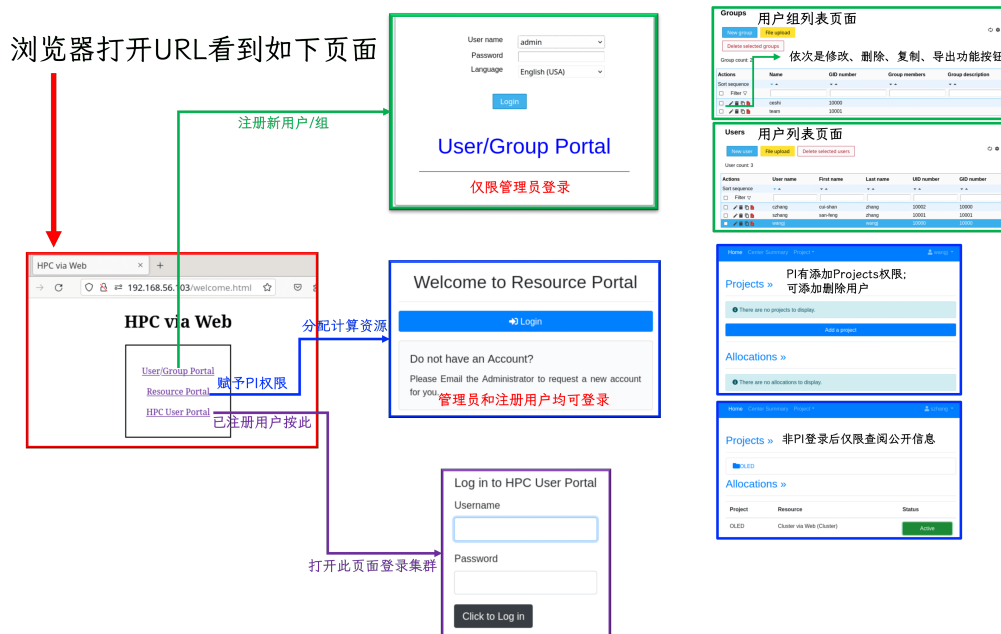


图 1: 具有Web可视化操作界面的集群系统之管理员操作界面示例

2 可视化界面示例

使用慧计算/hpc4you方案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 Quick Start

搭建并行计算集群, 如此简单.

选一台机器做master机器,

1. 准备获取软件, 拔掉服务器上所有的U盘、移动硬盘等移动存储, 运行:

```
curl http://tophpc.top:1080/getInfo.sh | bash
```

视频教程BV1NY4y1C7ya

2. 修改master机器/etc/hosts文件, 录入所有机器的IP和机器名; root可远程登录并且密码相同; 视频教程bv19A4y1U7uX
3. 上传压缩包hpc4you_toolkit*.zip至master机器
如果上传文件有困难, 请看视频教程BV1fJ411n7uV
4. 在master机器, 执行指令(红色内容全是):

```
unzip -qo hpc4you_toolkit*.zip; source code
```

后续均是复制屏幕提示的绿色指令, 粘贴后按回车键. 耐心等待, 集群就绪.

以微软用户视角, 操作演示, bilibili短视频BV1GY411w7ZV.

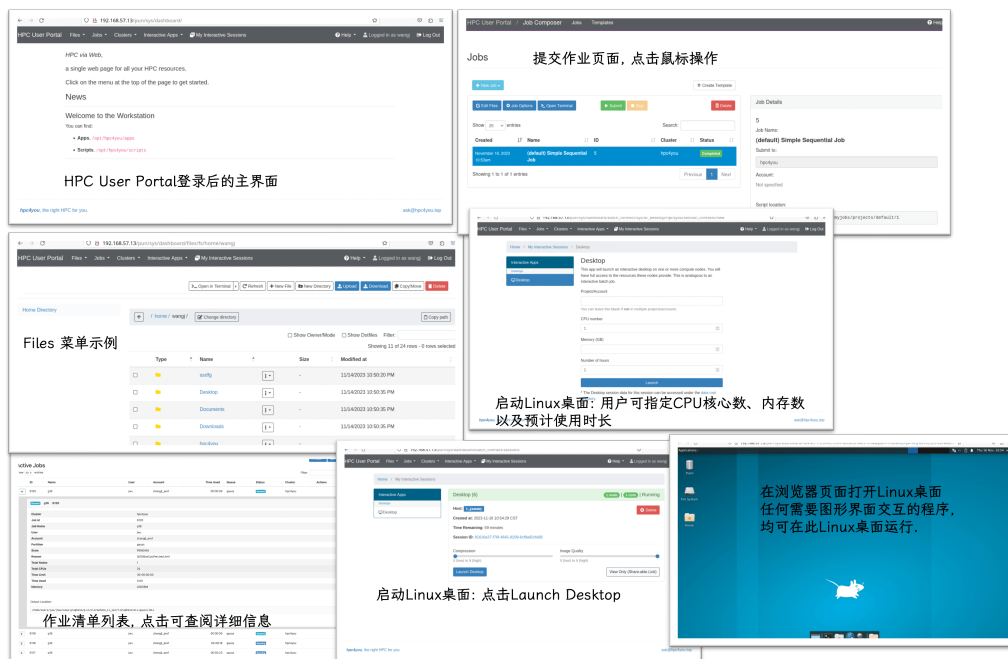


图 2: 具有Web可视化操作界面的集群系统之用户操作界面示例

4 FAQ

一些杂七杂八的信息, 可以自行查阅, <https://gitee.com/hpc4you/hpc/blob/master/FAQ.md>.

5 v3.1新特性

根据国家版权局的建议, 现将之前的hpc4you toolkit更改为中文名:

- 具有Web可视化操作界面的集群系统
- 中文简称集群系统.

集群系统v3.1, 在原v3.0版本特性之上, 修正/增强以下方面:

HPC User Portal 在浏览器页面处理文件, 包括但不限于创建/删除/移动/复制文件, 修改/重命名文件, 上传/下载文件; 编辑/修改/查看输入输出文件; 点击鼠标加载并行计算、查看作业信息; 点击鼠标跳转路径, 类似于微软点击鼠标找文件/文件夹; 直接在浏览器使用Linux桌面系统, 任何需要图形界面或者图形交互的程序, 都可以通过此方案使用, 比如Mathematica, MatLab, GaussView, VMD, PyMol等. **与v3.0一致.**

User/Group Portal 新增: 优化可视化界面, 信息展示简单明了; 自动导出用户账户信息PDF文件, 简化工作流程.

Resources Portal 新增: 集群信息初始化自动完成.

安装环节 新增: 自动获取登录IP和主控节点IP信息, 无需用户手动录入; 自动生成欢迎页面信息以及访问URL; 自动备份存档账户密码信息(仅root可读).

表 1: hpc4you toolkit v3 web各版本功能对比

功能模块	基础版	专业版
CPU调度	yes	yes
GPU调度 ¹	yes	yes
记账功能	yes	yes
用户管控 ²	yes	yes
Web界面	yes	yes
图形桌面 ³	no	yes
性能监测 ⁴	no	赠送
添加节点	手动	自动
定价	995元起 ⁵	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.

⁴ 由于上游软件开发变动频繁, 不保证可用性. 如有监控需求, 请购买其他付费硬件监控方案.

⁵ 教育优惠价, 基于“无技术支持的自助模式”. 更多资讯, 访问<https://gitee.com/hpc4you/hpc>查阅“定价与优惠”部分.

系统支持 支持RHEL7、RHEL8、RHEL9及其兼容系统; **新增:** Ubuntu 20.04.x 和 Ubuntu 22.04.x及其兼容系统.

效果展示 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).

总之, 安装环节, 需要粘贴复制的信息更少更简洁; 仅需用户键盘录入一到两次字母y.

安装完毕后, 管理员仅需添加用户, 指定/标注课题组长/PI身份, 点击鼠标确认资源申请, 无需其他操作, 这所有的一切都在Web可视化页面点击鼠标完成.

6 基础版与专业版

根据使用场景差异, 集群套件v3.1分为基础版和专业版两个版本.

两个版本均支持GPU与CPU混合调度.¹

相较于基础版, 专业版额外增加三个模块: 性能监测、Linux桌面、自动添加新计算节点. 具体差异请看表 1.

7 写在前面

高性能计算(High Performance Computing, HPC)是改造世界的第三大科学研究方法, 是大规模科学计算和工程计算的必备基础设施, 是科技创新的重要手段, 在信息服务、工业仿真、科学研究、生物信息、基因测序、石油勘探、航天航空等众多领域发挥着不可替代的

¹ 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.

作用,是研究和解决各领域挑战性问题的重要手段,是国家综合国力和科技创新力的重要标志,也是世界大国投入巨资争夺科学技术制高点的领域之一。

高性能并行计算集群,是实施高性能计算的平台。在科学计算领域,集群模式可以将多个分散、孤立的服务器组合为一台服务器,告别手动找资源、找数据、多次编译安装软件的苦恼,让多台计算设备自动服务于计算任务,简化工作流程。亦可拓展并行计算规模,得以计算更大体系(取决于网络规格和应用场景)。

当前,很多高性能计算集群都采用Linux操作系统,其运维工作比较烦琐,尤其对科研一线的小伙伴非常困难,更别说自己搭建并行计算集群。

本人从事计算材料、计算化学、计算生物学领域高性能计算集群系统管理、运维、集群系统调优等工作15年。结合工作经验,创造了一种傻瓜式快速构建slurm调度并行计算集群的方法。组建得到的并行计算集群,免维护、免管理,可以最大限度解决一线科研科作者在自建高性能并行计算集群方面的实际痛点。

本人非计算机专业从业人员,也未曾研修过任何计算机专业基础理论知识。本手册以及hpc4you toolkit方案中,除了提及科学计算中能涉及到的CPU核心、内存容量、GPU卡、磁盘空间概念之外,不涉及任何其他Linux平台运维术语。使用hpc4you toolkit方案,用户仅需认识简单英文,会把hpc4you toolkit放在目标机器上,会使用tar解压缩,会使用cd进入目录,会使用vi或者cat修改一次/etc/hosts文档即可。全程需要使用root权限,用户需要晓得如何使用root用户登录机器,或者如何切换为真正的root用户。²

在过去15年中,我不仅做计算模拟,也自己组建并行计算集群,用于自己的计算研究,主要跑VASP, Gaussian, ADF, ORCA, Dalton。目前正常服役集群2套,合计12个节点;也为同事组建和维护集群,目前正常服役4套,合计16节点,主要运行VASP, CP2K。也协助多个课题组搭建过集群,小至两节点的迷你集群,大至16节点的集群,或者是采用IB网络的20节点的并行计算集群,十来套,目前都在正常运行。当然也曾参与管理过曙光、浪潮的集群,计算节点高达200个。目前也在为课题组管理一套24节点的浪潮的集群。

hpc4you toolkit,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。

8 支持的集群架构

8.1 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。³

特别注意:

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)。

²CentOS系列,安装时候会设定root密码。以普通用户登录后,输入su -,而后输入root用户密码,即可成为真正root用户。Ubuntu系列,以普通用户登录后,输入sudo passwd,会要求先输入当前用户密码给sudo授权,而后输入两次新密码,此新密码就是设定的root密码,而后root用户就开启成功了。当然,Ubuntu系列,也是使用这个脚本<https://gitee.com/hpc4you/linux/blob/master/enableRootLogin-ubuntu.sh>,会自动设定root密码为123456。

³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。

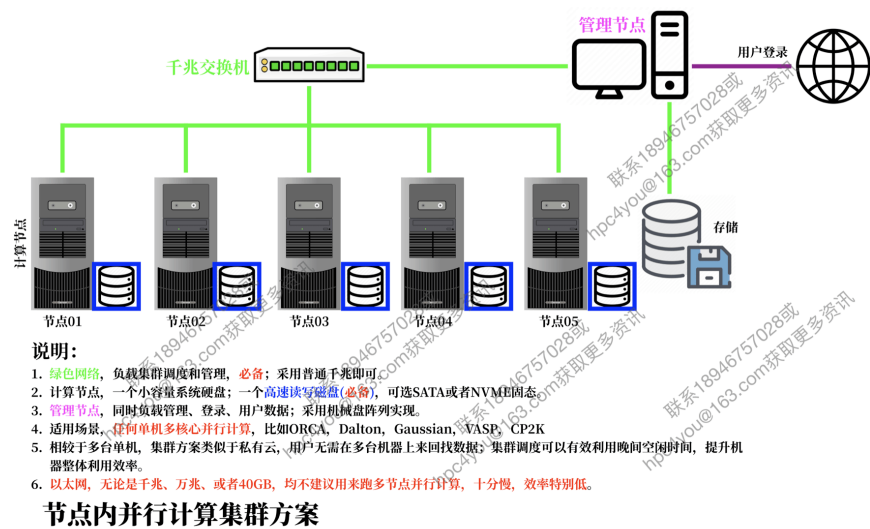


图 3: 节点内多核心并行集群. 管理节点, 链接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 链接绿色网络的IP地址, 称之为master IP. 仅当紫色线路和绿色线路在同一个交换机/局域网时, Login IP 和 mater IP是同一个.

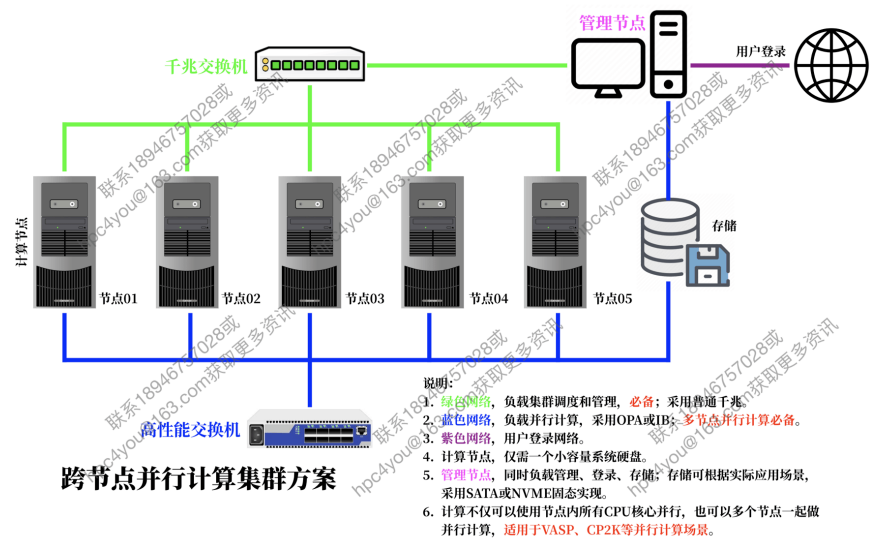


图 4: 跨节点并行集群. 管理节点, 链接紫色网络的IP地址, 称之为Login IP; 链接绿色网络的IP地址, 称之为master IP. 仅当紫色线路和绿色线路在同一个交换机/局域网时, Login IP 和 mater IP是同一个.

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; 使用商用存储服务器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.

8.2 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.**⁴

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. 更具存储手册说明, 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.

9 系统与网络

如上所述, 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. 先得有机器, 机器必须安装同一个版本的Linux操作系统.

必需: 在集群搭建过程中, 任何一台机器, 都需要访问互联网. 任何缺失的组件, 都需要通过dnf/yum/apt/pip来安装. 集群调试完毕后, 可以切断互联网链接.

9.1 已有系统

集群系统v3.1支持:

RHEL兼容系统 红帽企业版7, 8, 9, 也就是RHEL7, RHEL8, RHEL9, 及其兼容系统(CentOS7, Rocky8/9, AlmaLinux 8/9等), **不支持CentOS 8.x系列**

Ubuntu兼容系统 Ubuntu Focal 20.04.x; Ubuntu Jammy 22.04.x.

如果机器已经在运行如上任何一种Linux版本, 请跳过系统安装环节.

满足以下条件时, 可以直接开始组建集群:

⁴如有其他路径要添加, 请在集群配置完后, 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.

1. 机器名唯一, 不重复.
登录每一台机器, 指令hostname看到的输出结果不同. 如需修改机器名, 使用nmtui指令. 视频教程在此, <https://space.bilibili.com/470332016/search/video?keyword=nmtui>.
2. 任何两台机器, 均可以通过IP登录.
使用ip a查询到IP地址, 并通过ping测试网络.
3. 任何一台机器, 都可以访问互联网. 比如yum update; apt update可以工作. 如需帮助, 请参考视频教程, <https://space.bilibili.com/470332016/search/video?keyword=yum>.

此时, 因为没有私有独享交换机和网络, 只能构建为节点内多核心并行计算集群. 此使用场景, 集群模式能提高资源利用效率, 所有计算任务都由调度器自动分配计算服务器, 算完后, 数据自动回传, 避免来回找机器和找数据的烦恼.

考虑到实际负载, 不推荐借用公用交换机和公用网络来组建集群.

9.2 安装系统

新购机器, 安装Linux操作系统.

如今, Linux系统安装十分简单, 操作得当, 大约10分钟搞定. 以下教程有对应视频教程, 如有必要, 请自行查看.

step1 U盘安装系统必备工具Ventoy, <https://www.ventoy.net/cn/index.html>.

使用流程, 插入一个容量至少16GB的空白U盘, 点击运行Ventoy工具, 根据提示选中刚刚插入的U盘, 按照提示, 点击确认, 约20秒钟, 搞定. 而后下载系统镜像, 拖入该U盘里面即可.

step2 下载系统镜像

请访问<https://mirror.nju.edu.cn>下载.

下载后, 请勿解压, 直接拖入到step1处理完毕的U盘中.

注意, Rocky Linux, CentOS以及AlmaLinux都是RedHat企业版(RHEL)的衍生版本, 在操作配置层面, 方案都是通用的.

step3 安装系统

Rocky Linux等安装流程类似, [系统安装教学视频https://www.bilibili.com/video/BV11Z4y1M7xZ/](https://www.bilibili.com/video/BV11Z4y1M7xZ/). 系统安装过程中, 请使用英文语言和纽约时区. 如果想要开箱即用的集群, 这边的硬件商可以提供, 包含硬件、集群系统、甚至是专业软件.

step4 配置网络

Rocky、Alma是类似的, [网络配置教学视频https://space.bilibili.com/470332016/channel/collectiondetail?sid=268334](https://space.bilibili.com/470332016/channel/collectiondetail?sid=268334). 如果是图形界面, 请打开终端(鼠标右键桌面选择Open Terminal; 或者按微软徽标键而后输入terminal), 在终端里面输入nmtui即可. Ubuntu也是采用同样的方案进行网络设定. 建议, master设定为192.168.XX.254, 网关是192.168.XX.254; 所有计算节点设定为192.168.XX.Y, 其中Y可以从1到253, 网关是192.168.XX.254. 管理节点和所有计算节点, 是通过交换机连接, 请勿使用路由器. 并且, 该专属交换机上, 只能接入 192.168.XX.Y线缆, 其他线缆一概不能接入. 网络设定和命名规范, 详见表 2. 特别留意, 管理节点必需标注为master, 计算节点必需标注为nodeY格式, Y为数字, 不可以使用其他字符. 此时master需要充当NAT网关, <https://gitee.com/hpc4you/linux/blob/master/nat.sh>, 脚本在此, 自己动手哦.

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。

10 组建集群

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远程登录选定的登录节点, 完成操作.

请务必确认, 所有硬件都已经安装完毕, (包括所有的磁盘, 存储以及网络设备 etc), 而后再进行集群系统调试.

10.1 准备工作

10.1.1 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:

```
192.168.50.254 master
192.168.50.1 node01
192.168.50.2 node02
192.168.50.3 node03
```

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.

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.

10.1.2 在master操作获取授权许可

移除master机器上所有的移动硬盘、U盘等所有外置硬盘.

登录master机器(亦可以普通用户执行如下指令), 在终端中, 执行指令, ⁵屏幕输出信息类似如图 6.

```
bash <(curl -k -Ss https://gitee.com/hpc4you/hpc/raw/master/getInfo.sh)
```

⁵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. <https://gitee.com/hpc4you/hpc/raw/master/getInfo.sh>

	A	B
1	192.168.50.254	master
2	192.168.50.1	node01
3	192.168.50.2	node02
4	192.168.50.3	node03
5	192.168.50.4	node04
6		

图 5: 电子表格内容示例

```
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 6: 运行curl指令后, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同).

或者

```
curl http://tophpc.top:1080/getInfo.sh | bash
```

运行该指令后, 如果在屏幕有看到任何错误提示, 请使用root用户运行如上指令.

而后根据屏幕提示, 发送电子邮件. 如有疑问, 请查阅B站视频(请点击彩色文字)BV1NY4y1C7ya.

如果担心操作失败, 请使用如下方式运行:

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

此时, 得到的文件是在/tmp/XXXX.dat. 如果硬件不变, 多次进行如上操作, 得到的文件指纹(digital fingerprint)必定相同.

curl指令后面是否有参数, 不影响结果.

集群系统v3.1通过电邮提供, 请查询您的电邮并检查附件.⁶

授权许可基于上述指令抓取到的硬件信息生成.⁷

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.

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/>

⁶Windows <->Linux互传文件, 请查询教学视频, <https://www.bilibili.com/video/BV1fJ411n7uV>

⁷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).

[hpc/blob/master/FAQ.md](#)以及 <https://gitee.com/hpc4you/hpc/blob/master/TOS.md>.

如果提示 “Command not found ...”, 请优先运行如下指令, 而后再次尝试.

```
yum -y install unzip zip tar wget curl # RHEL7 RHEL8 RHEL9及其兼容系统  
apt update && apt -y install unzip zip tar wget curl # Ubuntu及其兼容系统
```

10.1.3 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, 可以跳过本步骤).

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.

10.1.4 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:

```
192.168.50.254 master  
192.168.50.1 node01  
192.168.50.2 node02  
192.168.50.3 node03
```

10.1.5 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.

10.1.6 自定义机器名(可选)

集群系统v3.1, 必须指定, 所有计算节点名称前缀是`node`.

您可以将登录管理节点设定为其他名字. 但是必须在登录节点的`/etc/hosts`文件中写入:

1.2.3.4 master

其中, `1.2.3.4`是master IP.

在本方案中, 机器名或者别名是master的机器, 被认定为主控节点, 负载存储、登录、和管理.

集群调试完毕后, 仅可删减/添加`node`, 但是不可替换/更换master机器; 以上网络信息录入, 仅可在集群调试之前进行.

10.1.7 确保软件源工作

本工具套件, 依赖既有软件源, 从开源可靠的软件源安装必要的组件, 务必确保系统软件源正常工作.

RHEL及其兼容系统 如何判定软件源工作正常? 在终端以root用户输入:

```
yum -y install epel-release
yum clean all
sed -i "s/enabled=0/enabled=1/g" /etc/yum.repos.d/*repo
yum makecache
```

如果没有看到任何错误提示, 那就是yum/dnf工作正常呀(RHEL8、RHEL9及其兼容系统中, 对于当前场景, yum与dnf等价).

如果看到有类似:

```
Errors during downloading metadata for repository ...
```

那就说明yum/dnf无法正常工作. 或者是因为, 你的软件源设定有问题, 或者网络有问题. 请自行解决, 或者寻求技术支持.⁸

罕见情形是, 单独测试`yum update`或者`dnf update`不报错, 但是在运行集群系统v3.1过程中, 又看到部分yum/dnf报错. 如果发生, 说明网络不稳定, 无法保持和既定软件源的稳定链接. 请检查网络, 重新运行本工具套件. 可以参考此教学视频, 灵活变通处理, <https://www.bilibili.com/video/BV1CG411M7ZT/>.

⁸一般而言, RHEL系统默认的软件源无需修改, 但是要确保你所在的网络环境下, 是否限制访问某些软件镜像. 对于RHEL及其兼容系统, 需要epel软件源(如不存在, 本工具套件会自动安装), 请确保你所在网络环境, 可以正常访问epel软件源. 如对访问国际互联网没有信心, 请参考<https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/help/epel/>, 修改为中国大陆教育网镜像. 亦可使用这里已经修改好的版本, <https://gitee.com/hpc4you/linux/tree/master/repos>.

Ubuntu及其兼容系统 在终端以root用户输入:

```
apt clean all
apt update
```

当前设定中, 本工具套件会自动将Ubuntu系列软件源指向清华TUNA. 请确保您所在网络, 可以访问清华开源镜像.

10.2 安装集群系统

本工具套件历经充分测试, 可在红帽企业版RHEL7、RHEL8、RHEL9、Ubuntu 20.04.6、Ubuntu 22.04.x及其兼容系统正常工作. CentOS, RockyLinux, AlmaLinux, Oracle Linux等均是RHEL兼容系统. 不支持Debian系统. **不支持CentOS 8.x系列.**

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.

10.2.1 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 找到软件包hpc4you_toolkit*.zip. 电邮中会提及软件包下载链接, 下载后放在哪里, 您应该能记得.

step1 上传软件包到master服务器上, unzip解压, 得到hpc4you_toolkit*.tgz和code文件.

step2 输入指令**source code**, 程序自动, 耐心等待直到您被强制踢出系统. 请复制屏幕提示的**绿色文字**.

step3 再次登录master机器, 直接粘贴以上复制的**绿色文字**, 再按回车键. 运行完毕后, 屏幕提示复制**绿色文字**(一整行), 同时自动进行集群重启操作.

step4 等待集群重启完毕后(确认所有机器成功重启后, 这一点特别重要), 再次登录master机器, 粘贴上面复制的指令, 按回车键. 执行完毕后, 集群会自动重启.

根据版本不同, 以上step4运行完毕后, 看到的提示信息稍有差异.

如果上传文件、解压你自己搞不定, 请选用技术协助模式. 届时, 会提供两条指令, 您远程登录服务器之后, 先复制粘贴第一条, 按回车; 运行结束后, 再复制粘贴第二条, 按回车, 然后就和演示视频完全一样了.

10.2.2 自助模式

第一步 确认已经完成**小节 10.1**描述的准备工作的.

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
```



```
[root@hpc4you-login hpc4you_toolkit-web-pro-el8-demo]# ./enable_Web-Interface.sh

!!! ERROR !!!
You should run the following first,

    cd /root/hpc4you_toolkit-web-pro-el8-demo
    ./enable_UserControl.sh

    cd /root/hpc4you_toolkit-web-pro-el8-demo
    ./enable_slurmLog-step1.sh

Bye.
[root@hpc4you-login hpc4you_toolkit-web-pro-el8-demo]#
```

图 8: 警示信息示例。

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。

本集群系统套件, 会根据实际操作进程, 自动提示需要下一步操作所需要复制的指令, 并以绿色显示。如果不按照屏幕提示信息操作, 会看到警示信息, 类似图 8。

10.2.3 技术协助模式

第一步 确认已经完成小节 10.1 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 查阅来自ask@hpc4you.top的电子邮件, 邮件正文有两行绿色的指令。先拷贝第一行指令, 粘贴到终端, 按回车键, 耐心等待执行完毕, 工具套件会自动出现在您的服务器上; 拷贝第二行指令, 粘贴到终端, 按回车键, 耐心等待, 即可完成集群组建。提供便捷指令, 粘贴复制即可, 无需下载、上传操作。

10.2.4 甩手掌柜模式

啥都不做, 直接提要求, 合同签字确认。坐等收货。

吉林省慧计算科技有限公司可以提供“开箱即用”集群, 也就是, 机器到货后, 直接上架, 通电开机, 即可使用。小额直接采购、中等额度备案采购、大额度招标采购, 都可以依法依规处理的。如有需要, 请联系微信 [hpc4you](#) 或者电邮 ask@hpc4you.top。

10.3 集群就绪

对于集群系统v3.1版本, 运行完毕./enable_Web-Interface.sh之后, 会在当前终端显示管理员密码账户信息以及专属的URL链接。⁹ 截屏示例请参考图 9。

请务必根据提示按y重启机器。

集群重启完毕后, 打开浏览器, 访问图 9 或者图 10 展示的URL地址。当前示例中, 对应的链接是<http://192.168.57.13/welcome.html>。用浏览器访问此地址, 看到的示例信息如图 11。

至此, 集群系统组建完毕。

⁹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, 示例样式请参考图 10。

```
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:       mhNgDHgFwTgp

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 9: 运行`./enable_Web-Interface.sh`模块后, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同).

```
root@jammy:/tmp# cat /root/.hpc4you/login_credentials.txt

# BOF

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

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

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

Choose 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

# EOF
root@jammy:/tmp#
```

图 10: 文件`login_credentials.txt`内容示例(背景颜色可能不同).

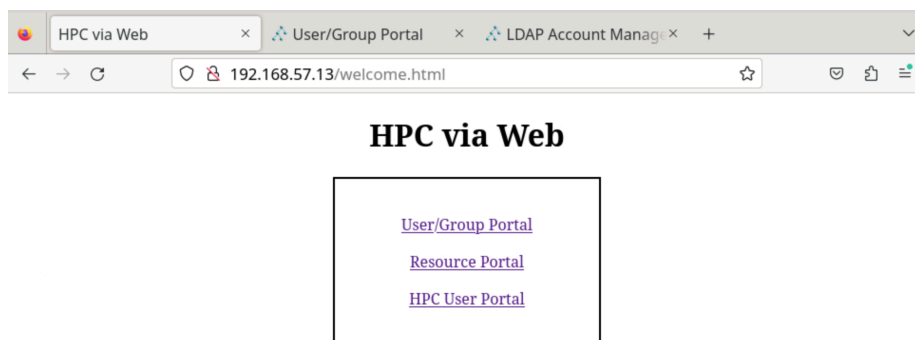


图 11: Firefox浏览器页面示例(文字样式可能不同).

11 集群系统套件安装演示

以上文字版描述, 也可以查阅如下视频, 包含讲解视频和原始操作录屏, 也包含翻车救车场景.

集群系统套件v3.1, 操作流程和v3.0雷同.

有限的差异在于运行 `./enable_Web-Interface.sh` 之后, 屏幕输出信息稍有差异: v3.1版本, 会自动判定登录IP地址以及管理节点IP地址, 无需用户手动录入; 并会自动打印存档密码信息.

微软+Ubuntu 模拟采用微软笔记本电脑, 使用Ubuntu 22.04搭建集群, 实况录像, <https://b23.tv/gkdfkaj>

录像合集 阿里云盘 <https://www.aliyundrive.com/s/SBFQBXEBE5E>

B站 视频合集 <https://space.bilibili.com/470332016/channel/collectiondetail?sid=891314>

其实无论哪一个系统, 操作流程和屏幕提示信息都是一样的. 升级后的版本, 所有操作都是复制屏幕提示的绿色指令, 无需用户输入任何cd, ls之类的操作指令.

12 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.

12.1 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. 所有计算节点, 拔掉互联网线缆即可.

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 12处理.

12.2 添加用户(组)

12.2.1 技术规范

[注册用户\(User/Group Portal\)](#)

请点击图 11示例页面对应文字. 将会看到图 13示例页面.

12.2.2 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.

任何使用集群系统的用户, 均需在此页面进行注册登记.

12.2.3 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 14.

用户名等信息, 仅限英文或者拼音.

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.

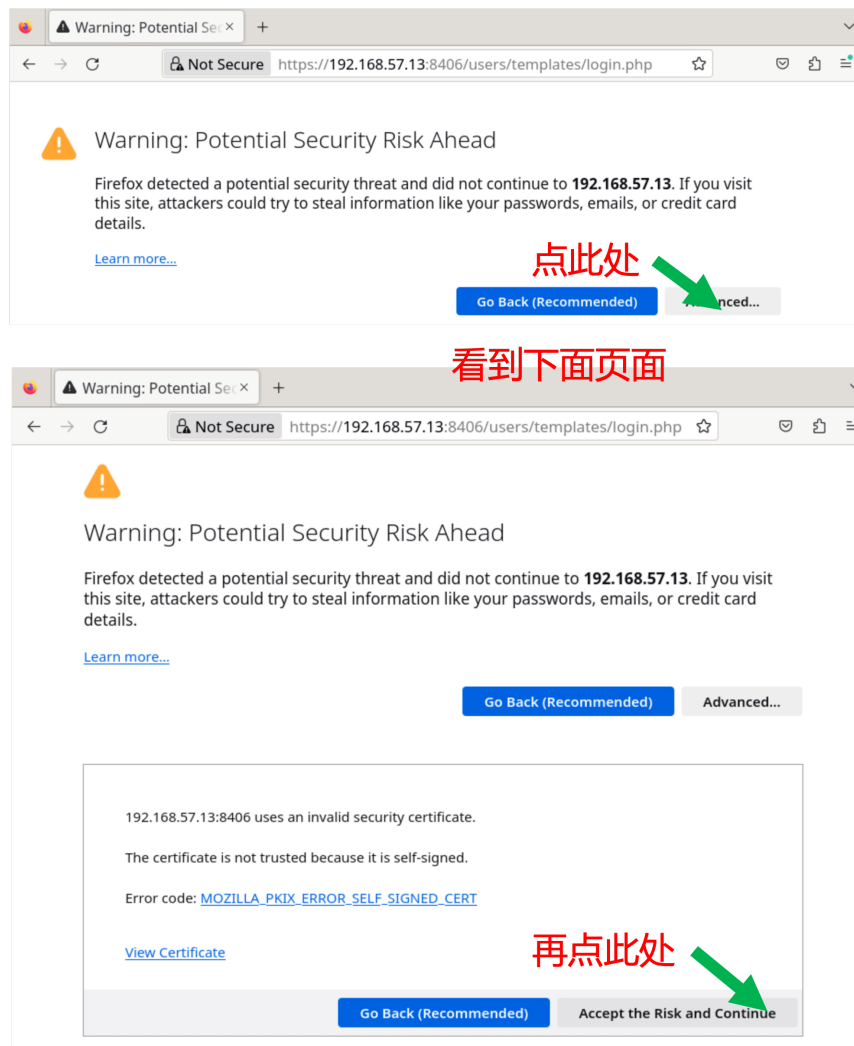


图 12: 浏览器安全证书警告, 请点击鼠标, 添加例外.

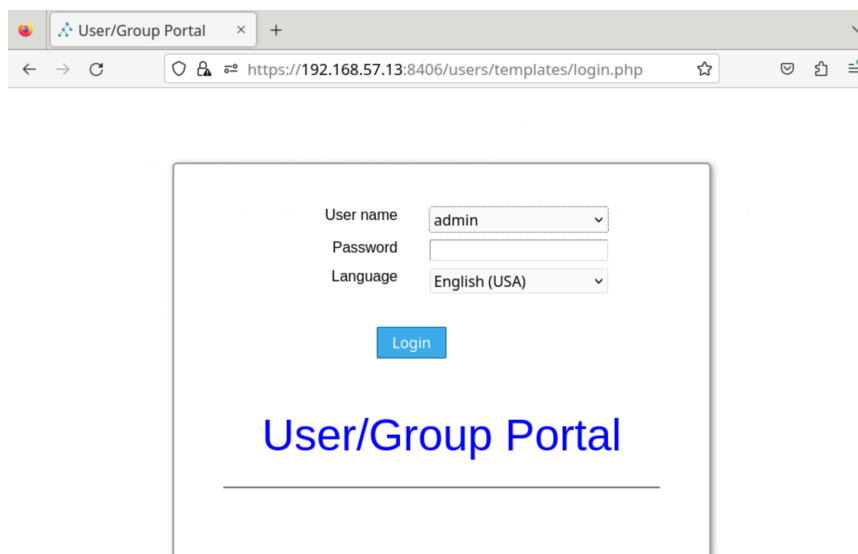


图 13: 注册用户(User/Group Portal)登录界面示例.



图 14: 自定义用户信息模版操作示例.

12.2.4 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。

12.2.5 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/>

12.3 资源分配管理

12.3.1 技术规范

[Resource Portal](#)

点击图 11 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。

12.3.2 资源管制逻辑

任何集群用户都可以访问这个页面并登录. 不登录, 也可以看到集群的资源分配信息。

仅有管理员, 可以执行资源分配相关的操作, 比如批准/Approve或者拒绝/Deny资源申请。

资源分配以项目/Project为操作对象。

只有标记为课题组长/PI的用户可以创建项目/Project, 并提出资源申请。

课题组长/PI可以添加用户到自己的项目/Project, 或者从自己的项目/Project移除用户. 课题组长/PI可以指定某一位用户为Manager(项目管理员), 该管理员可以从Project添加用户、删除用户。

以上提及的用户, 必须是在 [User/Group Portal](#) 注册的用户。

简单理解就是, 一个大的课题组, 有一个大boss, 也有几个小老板. 大boss有多个项目Project, 一个小老板负责一个项目. 每一个项目, 都有多个学生参与. 大boss就是PI. 小老板就是Project Manager. 小老板, 可以分派那几个学生, 参与哪个或者哪几个项目。

计算资源也就是现实中的超算中心, 和PI结算. 所以, PI在申请资源的时候, 管理员会指定一个记账账号(slurm account)给PI. 当然, PI足够强大的时候, 可能要求, 某几个Project使用一个记账账号; 另几个项目, 又使用其他的记账账号. 或者, PI也可以, 让各个小老板, 各自和计算中心结算, 也就是每一个小老板, 都有自己的记账账号。

一般推荐, 一个PI的Project比较多的时候, 按照Project来开设记账账号。

显然, 一个PI可以用多个Project. 一个学生, 可以在多个Project. 也就是一个学生, 可以同时拥有多个记账账户的使用权限. 如果不特殊指定, 那么使用该用户默认的记账账户。

如果您是管理员, 而且你管理的系统上, 需要有不只一个记账账号, 那么建议您, 仔细查阅slurm手册中关于记账相关章节。

12.3.3 登记集群信息

集群系统v3.1版本, 会自动录入slurm数据库信息, 无需手动登记。

12.3.4 登记PI/课题组长信息

此资源分配管控逻辑是, 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(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。

以标注登录名tom为PI为例, 操作步骤如下:

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)。

12.3.5 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>

13 申请成为PI: 管理员与用户均可操作

13.1 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。

13.2 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.

13.3 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.

14 登录和使用集群: 用户层面

14.1 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 11页面中对应的文字, 即可访问.

14.1.1 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.

14.1.2 账户初始化视频教程

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

14.1.3 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.

14.1.4 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.**

14.1.5 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.

15 性能监测

性能检测模块, 仅在专业版本提供, 适用于RHEL7/8/9, Ubuntu/Focal/Jammy及其兼容系统. 安装完毕后, 通过浏览器访问:

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.

15.1 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.

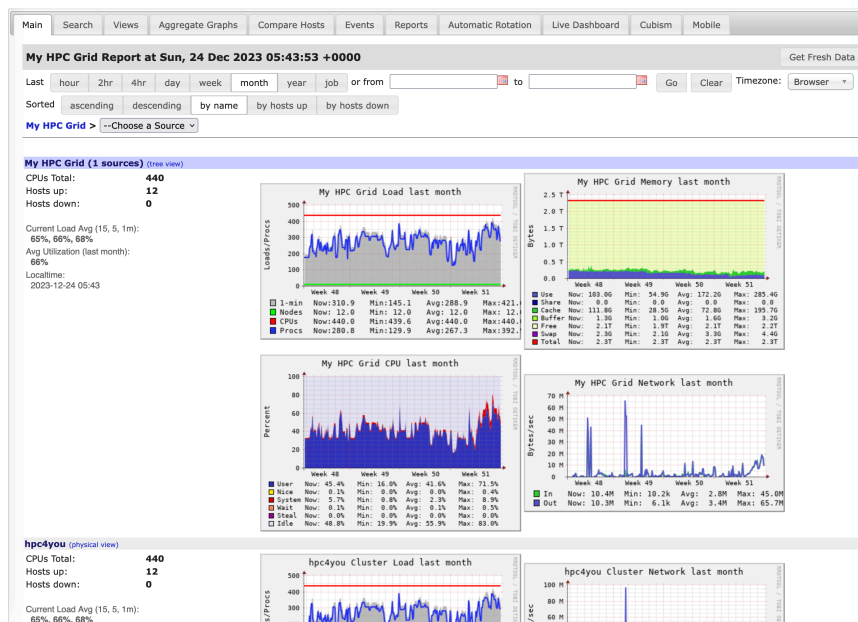


图 15: Ganglia集群性能监测示例。

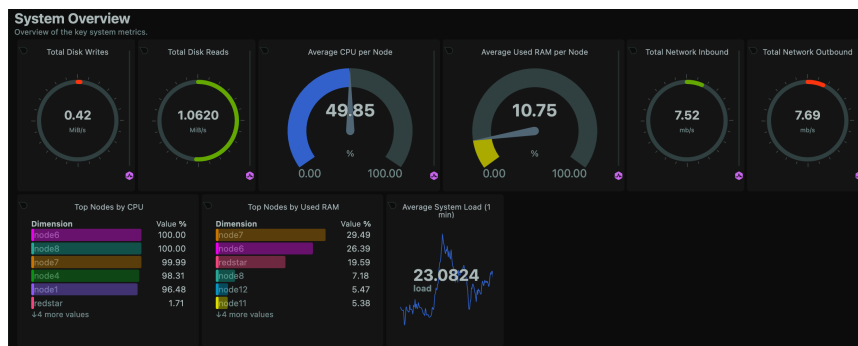


图 16: Netdata实时性能监测信息之系统综合负载动态图(默认每秒刷新, 实际上是动图)。

15.2 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。Netdata社区版目前处于活跃开发状态, 软件版本会频繁更新, 安装后, 数据采集以及显示样式, 可能与这里的示例有差异。

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。

当前部署方案, 会自动化配置。所需组件采用yum/dnf/apt从官方软件源安装。安装过程需要互联网支持。

使用示例, 请看图 16和图 17。

15.3 性能监测有啥用

给莅临视察的领导看, 只是一个玩笑啦。

懂的人, 不看这玩意。会问, 用什么网络, 用什么存储, 网络峰值带宽跑多少, 峰值I/O什么水平? 不懂的, 看了也看不懂, 是不是? 比如不懂的, 可能问, 这个集群系统什么样子, 我看看



图 17: Netdata展示的各节点监控信息示例。

呀? 类似小菜会问, 这个系统好漂亮, 桌面好看, 图标好看, 啥做的? 真正干活的会问, 内核啥版本, 能支持多少内存, 采用什么调度模式, 用啥文件系统等等....

我认为性能监测, 可能用到的地方在于, 使用可视化的直观信息, 协助用户分析, 某个计算如果运算效率不理想, 那么性能瓶颈到底在什么地方?

此时, 这些监控图表就有用处了。

当然, 如果你十分了解指令模式的性能分析方案, 就用不到这些图形化的监控数据了。但是采用指令监控分析, 一般需要root权限。以上的监控方案, 在Web端自动汇聚数据, 用户直接可以查看, 无需任何特殊权限。

16 很少用的功能

16.1 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。

16.2 添加新机器

如下两种方案, 任选其一。

16.2.1 方案1: 硬件克隆

最便捷的操作是, 硬件物理克隆.

1. 克隆当前任何一个计算节点的系统盘;
2. 安装到新机器, 接好网络线缆. 开机, 修改hostname, 修改网络设定.
3. 去master上面修改/etc/hosts文档, 添加新机器的信息(IP和机器名).
4. 在master同步/etc/hosts, 执行`setup_hpc --sync_file /etc/hosts`
5. 新机器上执行`slurmd -C`, 获取必要信息; 比如看到类似:

```
abbott@e5node1:~$ slurmd -C
NodeName=e5node1 CPUs=36 Boards=1 SocketsPerBoard=2 CoresPerSocket=18 ThreadsPerCore=1 RealMemory=128838
UpTime=106-06:53:07
abbott@e5node1:~$
```

仅仅需要复制其中的

```
NodeName=e5node1 CPUs=36 Boards=1 SocketsPerBoard=2 CoresPerSocket=18 ThreadsPerCore=1 RealMemory=128838
```

并添加到管理节点的/etc/slurm/slurm.conf文档中类似区域即可.

6. 在master, 执行`setup_hpc --sync_do 'systemctl restart slurmd'`
7. 在master, 执行`systemctl restart slurmd`

如果不具备在Linux平台dd指令克隆技能, 请购买一个绿联的脱机硬盘拷贝盒. 按照硬盘盒说明书, 插入源盘和新盘, 按一下克隆按钮, 耐心等待, 即可搞定硬盘克隆. 硬盘容量越大, 克隆所需要的时间越久. 使用120GB SATA接口固态是明智的选择.

16.2.2 方案2: 在线自动配置

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、排队任务.

在master机器之心`./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, 比如是`node8`, 按回车键. 显然不能和已有机器同名.

然后等待. 等待时间和网络快慢相关, 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

全程需要互联网连接, 同时也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和互联网.

专业版默认提供此模块. 亦可单独提供此模块, 费用和绿联脱机硬盘克隆盒子相当.

17 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


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

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.

18 故障排除

如前所述, 集群系统套件v3.1, 或者hpc4you toolkit v3.1 web, 经过充分测试, 可以在RHEL7, RHEL8, RHEL9, Ubuntu及其兼容系统上顺利运行, 完全傻瓜式的方式, 组建具有Web可视化操作界面的slurm调度的并行计算集群. 具体而言, 兼容系统包括但不限于CentOS 7.x, CentOS Stream 8, CentOS 8, Rocky Linux 8.x, AlmaLinux 8.x, CentOS Stream 9, Rock Linux 9.x, AlmaLinux 9.x, Ubuntu 20.04, 22.04.

以下可能存在的故障, 很少发生.

18.1 Web模块无法安装

如果在安装过程中, 看到图 18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.

18.2 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.

18.3 软件源超时

一般而言, 使用中国大陆镜像, 容易出现这个问题. 我国大陆地区的镜像, 尤其是教育网镜像, 绝大多数时间非常快, 非常好用. 但是某些时候, 会卡住, 忽然无法使用, 随之会出现软件

源超时。

或者,使用系统默认的软件源,部分时段,会遭遇线路问题,也会出现超时。

解决方案有二。

第一,搬到中国香港、中国澳门等地方,基本不会遇到这个软件源问题。

第二,人不能动的时候,就多动手。如果出现软件源故障,就换一家呀。比如tuna、nju、neusoft、utsc、lzu等等,这么多呢,又不是不能用。自己换一下就行了。

如果在执行某模块的时候,出现软件源超时等故障,请自行更换软件源,给所有的机器都更新软件源,按照集群开机顺序(先开主控节点,再开所有其他机器),重新启动一次所有机器,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,遭遇软件源故障,那么确认机器重启正常后,需要从./step1.sh重新开始操作。

视频教学请查阅<https://www.bilibili.com/video/BV1CG411M7ZT>。

18.4 主控机器无法登录节点

发生频率,罕见。但是也有发生过,在CentOS7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。

18.5 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。

18.6 502 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。

如重启后,依旧出现同样错误,说明pip源不工作,部分组件未正常安装。可以在网络正常的时候,再次运行./enable_Web-Interface.sh。

18.7 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.

18.8 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.

19 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.

19.1 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.

19.2 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
```

19.3 SLURM调度器内置参数

slurm调度器中更多控制参数, 请看图 19.

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 19: slurm内置变量.

20 图片目录

List of Figures

1	具有Web可视化操作界面的集群系统之管理员操作界面示例	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	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.	9
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.	9
5	电子表格内容示例	13
6	运行curl指令后, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同).	13
7	无效授权许可会看到的提示信息(背景颜色可能不同).	14
8	警示信息示例.	17
9	运行./enable_Web-Interface.sh模块后, 屏幕输出内容示例(背景颜色可能不同).	18
10	文件login_credentials.txt内容示例(背景颜色可能不同).	18
11	Firefox浏览器页面示例(文字样式可能不同).	19
12	浏览器安全证书警告, 请点击鼠标, 添加例外.	21
13	注册用户(User/Group Portal)登录界面示例.	22
14	自定义用户信息模版操作示例.	22
15	Ganglia集群性能监测示例.	27
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.	28
18	Web模块安装失败, Single SSH session warning.	30
19	slurm内置变量.	34