

HM

南京信息工程大学 GPU 集群使用说明

Aaron Liu
2013-6-17

目 录

一、	系统配置清单及产品介绍.....	3
1.1	集群管理节点 (ServMax XN-12301, 1 台)	4
1.2	存储节点配置 (ServMax XR-42303, 1 台)	4
1.3	GPU 节点配置 (SerMax Xr-4801GK2, 6 台)	4
二、	系统规划及配置图.....	5
2.1	系统网络拓扑图.....	5
2.2	各节点 IP 及主机名分配	5
三、	集群基础及配置.....	7
3.1.	支持的硬件架构	7
3.2	最低硬件需求	7
3.3	一般集群网络结构	8
3.4	网络规划及 IP 地址分配	8
3.5	集群的文件系统.....	10
3.5.1	管理节点文件系统	10
3.5.2	存储节点文件系统	10
3.5.2	计算节点文件系统	10
四、	常用软件的路径.....	12
五、	资源管理器 Torque 的使用	13
5.1	作业递交命令	13
5.2	查看队列中的作业状态: qstat.....	13
5.3	挂起作业: qhold	14
5.4	取消挂起: qrls	14
5.5	终止作业: qdel.....	14
5.6	显示节点信息: pbsnodes 和 qnodes	14
六、	windows 端用 ssh 工具远程登录.....	15
6.1	安装.....	15
6.2	从远程主机下载文件	15
6.3	ssh 远程登录.....	17

一、系统配置清单及产品介绍



总体配置：

项目	描述	数量
管理节点	1U	1 台
存储节点	4U	1 台
GPU 计算节点	4U	6 台
集群附件	千兆网络交换机、Infiniband 交换机、KVM 等	1 套

1.1 集群管理节点（ServMax XN-12301，1 台）

配置表：

项目	描述	数量
CPU	6 核心 Intel E5-2620	2
内存	DDR3 1333 4G ECC REG	8
硬盘	600GB 企业级 SAS 盘	2
Infiniband 卡	Mellanox FDR (56Gb/s)	1

1.2 存储节点配置（ServMax XR-42303，1 台）

配置表：

项目	描述	数量
CPU	6 核心 Intel E5-2620	2
内存	DDR3 1333 4G ECC REG	8
硬盘	3TB 企业级 SATA 盘	16
硬盘	240GB 企业级 SSD	1
Infiniband 卡	Mellanox FDR (56Gb/s)	1

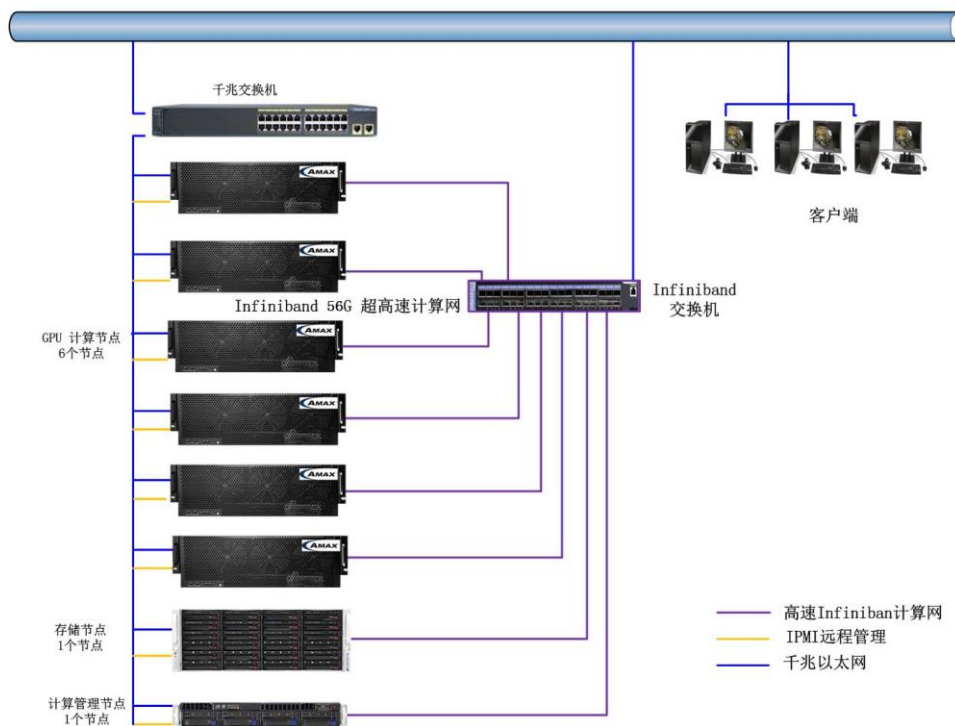
1.3 GPU 节点配置（SerMax Xr-4801GK2，6 台）

配置表：

项目	描述	数量
CPU	6 核心 Intel E5-2620	2
内存	DDR3 1333 8G ECC REG	8
硬盘	500GB 企业级 SATA 盘	1
Infiniband 卡	Mellanox FDR (56Gb/s)	1
GPU	Tesla K20	6

二、系统规划及配置图

2.1 系统网络拓扑图



2.2 各节点 IP 及主机名分配

主机名	外网访问及 IPMI 系统管理		管理网络	计算网络
	外网端口 IP(eth1)	IPMI 端口	内网端口 (eth0) IP	ib0
hpccluster	192.168.1.x	10.2.x.253	10.1.1.1	10.3.3.1
nas-0-0		10.2.x.254	10.1.1.254	10.3.3.254
compute-0-1		10.2.x.1	10.1.1.253	10.3.3.253

compute-0-2		10.2.x.2	10.1.1.252	10.3.3.252
.....
compute-0-6		10.2.x.6	10.1.1.248	10.3.3.248

三、集群基础及配置

AMAX 集群管理软件是一套以性能优秀、成熟和稳定的 RedHat Advance Server 基础，融合节点管理，任务管理，状态监控等多种功能，使用方便的集群管理系统。具有以下功能和特点：

在集群管理上，由 FRONTEND(前端或管理节点)加 NODE(计算节点)组成，默认的情况下前者承担集群的管理和服务，后者承担计算任务。

在系统的安装、维护方面简单易操作，因为系统集成大量的自动化脚本及各种所需功能的软件包，在安装的时候会自动设置好多种服务如 NFS、性能监控服务程序等，计算节点全部通过 PXE 网络系统从主节点下载文件并自动完成所有的安装与设置，增加删除节点等，管理起来相当方便。在故障维护上也非常简单，如对于故障节点，在硬件修复完成后，只需接入集群网络即会自动完成文件的下载与安装，无需人为干预。这些工作在管理节点上就可以完成，无需围绕每个计算节点重复设置。

在任务管理与状态监控上，集群管理系统提供了一整套基于 WEB 的组件用于监控自身的活动及配置状况，如处理器、内存及交换分区使用情况、网络负载、节点状态和当前计算任务的进展等。

3.1. 支持的硬件架构

处理器架构：

- x86 (ia32, AMD Athlon.)
- x86_64 (AMD Opteron and EM64T)

网络：

- 以太网

支持一些专用网络及组件 (e.g., Myrinet, Infiniband, nVidia GPU) 。可以从各自供应商的官网获得需要的硬件和软件信息。

3.2 最低硬件需求

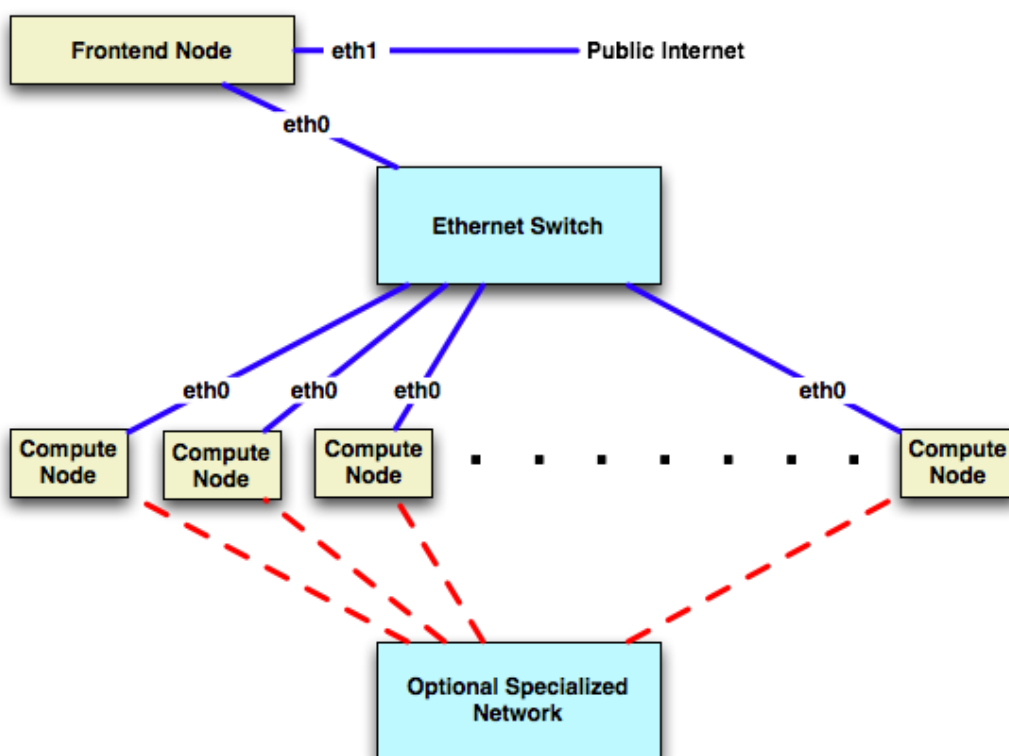
前端节点（管理节点或头节点）：

- 硬盘容量: 30 GB
- 内存容量: 1 GB

- 2 个以太网卡 (如: "eth0" and "eth1")
 - BIOS 启动顺序: 光驱, Hard Disk
- 计算节点:
- 硬盘容量: 30 GB
 - 内存 容量: 1 GB
 - 1 个以太网卡 (如 "eth0")
 - BIOS 启动顺序 : 光驱, PXE (Network Boot), 硬盘

3.3 一般集群网络结构

下图显示了前端节点与计算节点的连接关系:



计算节点管前端节点的 eth0 网卡接在交换机上, 通过此网络提供集群的安装管理和文件系统的共享和传递。管理节点至少需要 2 个网卡, 除了一个 eth0 接在交换机上与计算节点通信外, 还有另外的 eth1 接在外部网络上, 可以是公网也可以是校内局域网。

3.4 网络规划及 IP 地址分配

本次集群网络总共分为 3 个部分:

其中外网访问 192.168.1.x; 千兆以太网占用 10.1.1.x 网段, 主要作为计算节点的管理网络, 同时作为 infiniband 网络的备份, 辅助计算网络, 保证 Infiniband 网络出现故障需要维护时, 整个计算集群也依然可以继续使用; IPMI 远程管理在 10.2.2.x 网段, 方便同时进行远程访问和系统管理, 计算网络主要使用 infiniband 网络进行计算数据传递, 在 10.3.3.x 网段。

系统网络 IP 地址分配如下:

主机名	外网访问及 IPMI 系统管理		管理网络	计算网络
	外网端口 IP(eth1)	IPMI 端口	内网端口 (eth0) IP	ib0
hpccluster	192.168.1.x	10.2.x.253	10.1.1.1	10.3.3.1
nas-0-0		10.2.x.254	10.1.1.254	10.3.3.254
compute-0-1		10.2.x.1	10.1.1.253	10.3.3.253
compute-0-2		10.2.x.2	10.1.1.252	10.3.3.252
.....
compute-0-6		10.2.x.6	10.1.1.248	10.3.3.248

3.5 集群的文件系统

3.5.1 管理节点文件系统

Filesystem	Size	Used	Avail	Use%	Mounted on
/dev/sda1	197G	15G	173G	8%	/
tmpfs	16G	24K	16G	1%	/dev/shm
/dev/sda5	337G	3.8G	316G	2%	/export
/dev/sda2	7.9G	529M	7.0G	7%	/var
tmpfs	7.7G	49M	7.7G	1%	/var/lib/ganglia/rrds
nas-0-0.local:/export/home	15T	138M	14T	1%	/export/home

其中/export 下的一些目录还是 nfs 文件共享目录；/export/home 目录是通过网络共享的存储节点的文件系统，所以文件其实是保存在存储节点，这个目录保存的是普通用户的数据文件。

3.5.2 存储节点文件系统

Filesystem	Size	Used	Avail	Use%	Mounted on
/dev/sda1	197G	31G	157G	17%	/
tmpfs	16G	0	16G	0%	/dev/shm
/dev/sda3	288G	191M	273G	1%	/export/data1
/dev/sdb1	15T	139M	14T	1%	/export/home
/dev/sdb2	12T	154M	11T	1%	/export/data2
/dev/sdb3	12T	154M	11T	1%	/export/data3

3.5.2 计算节点文件系统

Filesystem	Size	Used	Avail	Use%	Mounted on
/dev/sda1	16G	5.1G	9.6G	35%	/
tmpfs	32G	0	32G	0%	/dev/shm
/dev/sda5	439G	2.2G	414G	1%	/state/partition1
/dev/sda2	3.9G	163M	3.5G	5%	/var
nas-0-0.local:/export/home/user	15T	138M	14T	1%	/home/user

其中 *user* 为实际用户名称的代表。

四、常用软件的路径

/opt

大部分软件位于/opt 下，如 openmpi 位于/opt/openmpi，torque 位于/opt/torque 等，是 Linux FHS 标准建议的软件安装路径。

```
[root@hpccluster ~]# ls /opt/  
acm          bio          ganglia      iozone       knem-0.9.7mlnx1  mpich2  
amax-tools   confuse      ibutils      iperf        mellanox          openmpi
```

/share/apps

一些可执行程序可以放在/share/apps 下，计算节点就可以看到和运行，因为这个目录是管理节点通过 NFS 共享出来给其它节点使用的目录。

/export/local

在管理和计算节点实际创建的目录，软件会真正安装在各个节点，这样软件在启动和运行中就会减少网络占用，提高效率，但相比/share/apps 来说安装会比较花费时间。

/root/backup

此目录下暂时放置一些重要的配置文件，软件。

五、资源管理器 Torque 的使用

与作业相关常用的用户命令主要有：

`pbsnodes`: 显示节点信息

`qdel`: 取消指定的作业

`qhold`: 挂起一个作业

`qmove`: 将一个作业从一个队列移到另一个队列中

`qnodes`: `pbsnodes` 的别名，显示节点信息

`qorder`: 交换两个作业的排队顺序

`qrls`: 将被挂起的作业送入准备运行的队列中

`qselect`: 显示符合条件的作业的作业号

`qstat`: 显示队列、服务节点和作业的信息

`qsub`: 提交作业

5.1 作业递交命令

```
qsub mytask.sh
```

`mytask.sh` 为作业脚本，下面为一简单样例：

```
#PBS -S /bin/bash
```

```
#PBS -o script.out
```

```
#PBS -j oe
```

```
#PBS -l nodes=1:ppn=1:gpus=1
```

```
cd $PBS_O_WORKDIR
```

```
/opt/NVIDIA_GPU_Computing_SDK/C/bin/linux/release/FDTD3d
```

5.2 查看队列中的作业状态: `qstat`

利用 `qstat` 可以查看作业的运行状态：

```
user@hpc:~$ qstat
```

输入上面命令后，将给出类似下面的输出：

Job id	Name	User	Time	Use	S	Queue
48.hpc	job name4	user		0	E	dque
49.hpc	job name1	user	00:00:00		R	dque
50.hpc	job name2	user		0	H	dque
51.hpc	job name3	user		0	Q	dque

上面几列的含义分别为：作业号、作业名、用户名、使用的时间、状态、队列名，其中状态中的 C、E、H、Q 和 R 分别表示作业处于完成、退出、挂起、排队和运行中，使用 `qstat -f` 可以查询作业退出状态。

5.3 挂起作业: **qhold**

qhold 命令可以挂起作业（只能是排队等待的作业才能挂起，正在运行的作业不能挂起），被挂起的作业将不被执行，这样可以使其余作业优先得到资源运行，被挂起的作业在用 **qstat** 命令查询时显示的状态标志为 **H**，下面命令将挂起作业号为 **50.hpc** 的作业：

```
user@hpc:~ $ qhold 50.hpc
```

5.4 取消挂起: **qrls**

被挂起的作业可以利用 **qrls** 来取消挂起，重新进入等待运行状态：

```
user@hpc:~$ qrls 50.hpc
```

5.5 终止作业: **qdel**

用户如果想终止一个作业，可以利用 **qdel** 来取消：

```
user@hpc:~ $ qdel 50.hpc
```

5.6 显示节点信息: **pbsnodes** 和 **qnodes**

利用 **pbsnodes** 和 **qnodes**（实际两者是同一个命令的两个名字）可以显示系统各个节点的信息，比如空闲（**free**）、当机（**down**）、离线（**offline**）。例如：显示所有空闲的节点：

```
user@hpc:~ $ pbsnodes -l free
```

其输出为：

```
node0101 free
```

```
node0102 free
```

```
node0104 free
```

六. windows 端用 ssh 工具远程登录

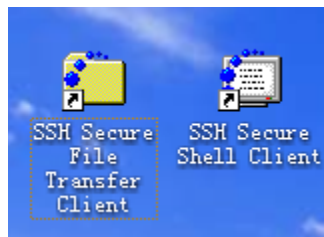
SSH Secure Shell Client 3.2.9 是一个免费的基于 SSH 协议的远程工具

下载地址: http://www.onlinedown.net/softdown/20089_2.htm

6.1 安装

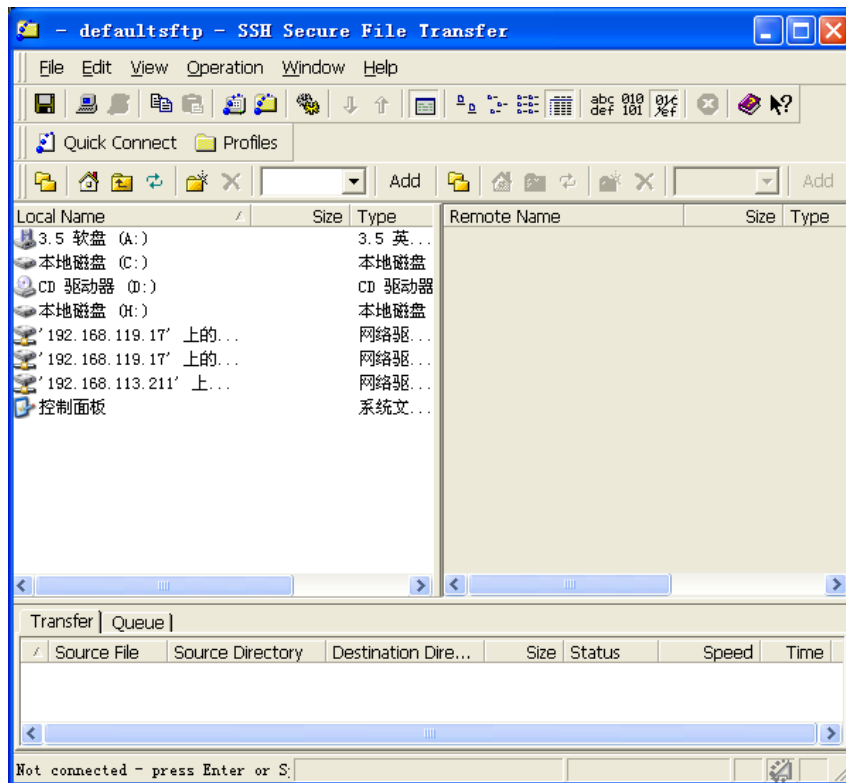
双击安装, 按默认设置, 直到完成。

安装后会在桌面产生两个快捷方式: 一个 (白色图标的 SSH Secure Shell Client) 用于远程登录操作, 另一个 (黄色图标的 SSH Secure File Transfer Client) 可以用来上传/下载文件, 后面会用到。请见下图:

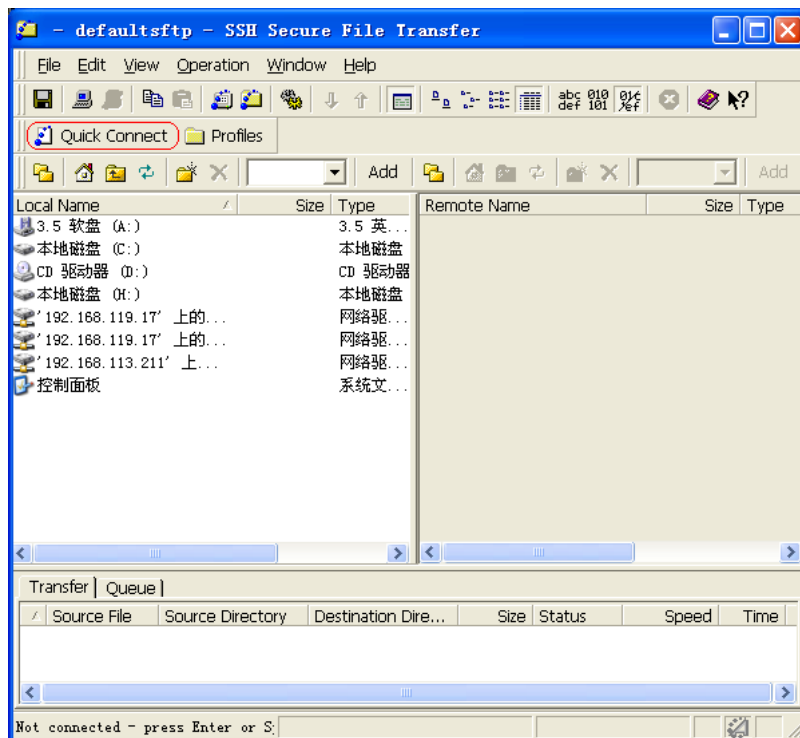


6.2 从远程主机下载文件

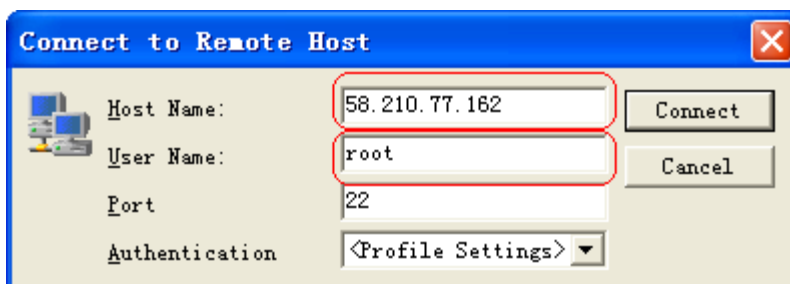
软件在我们公司的集群管理节点上, 使用 SSH Secure File Transfer Client 下载到本地。打开该文件, 如下图所示。



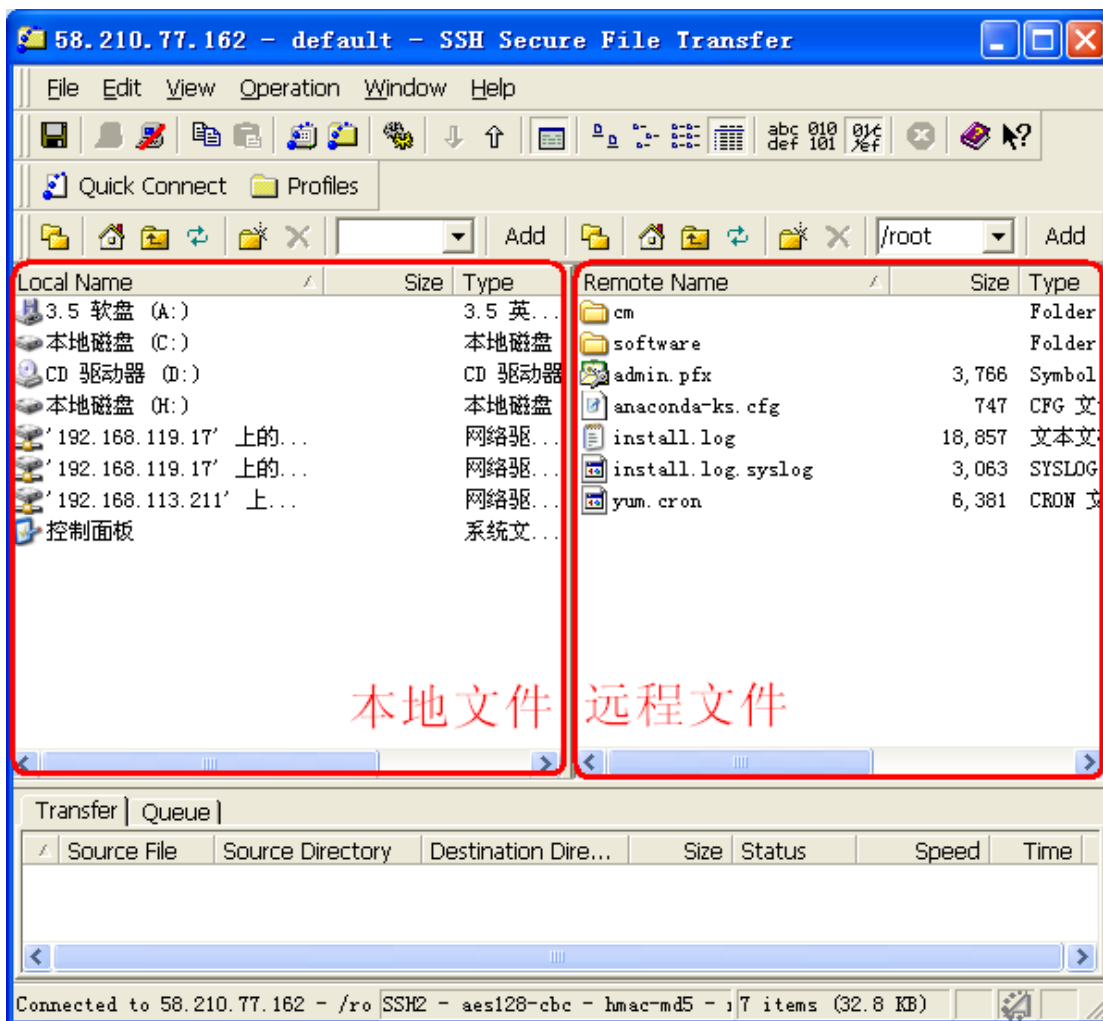
点击左上方的“Quick Connect”，见下图红色方框圈住的地方：



在弹出的窗口中输入 ip 地址和用户名，如下图所示：

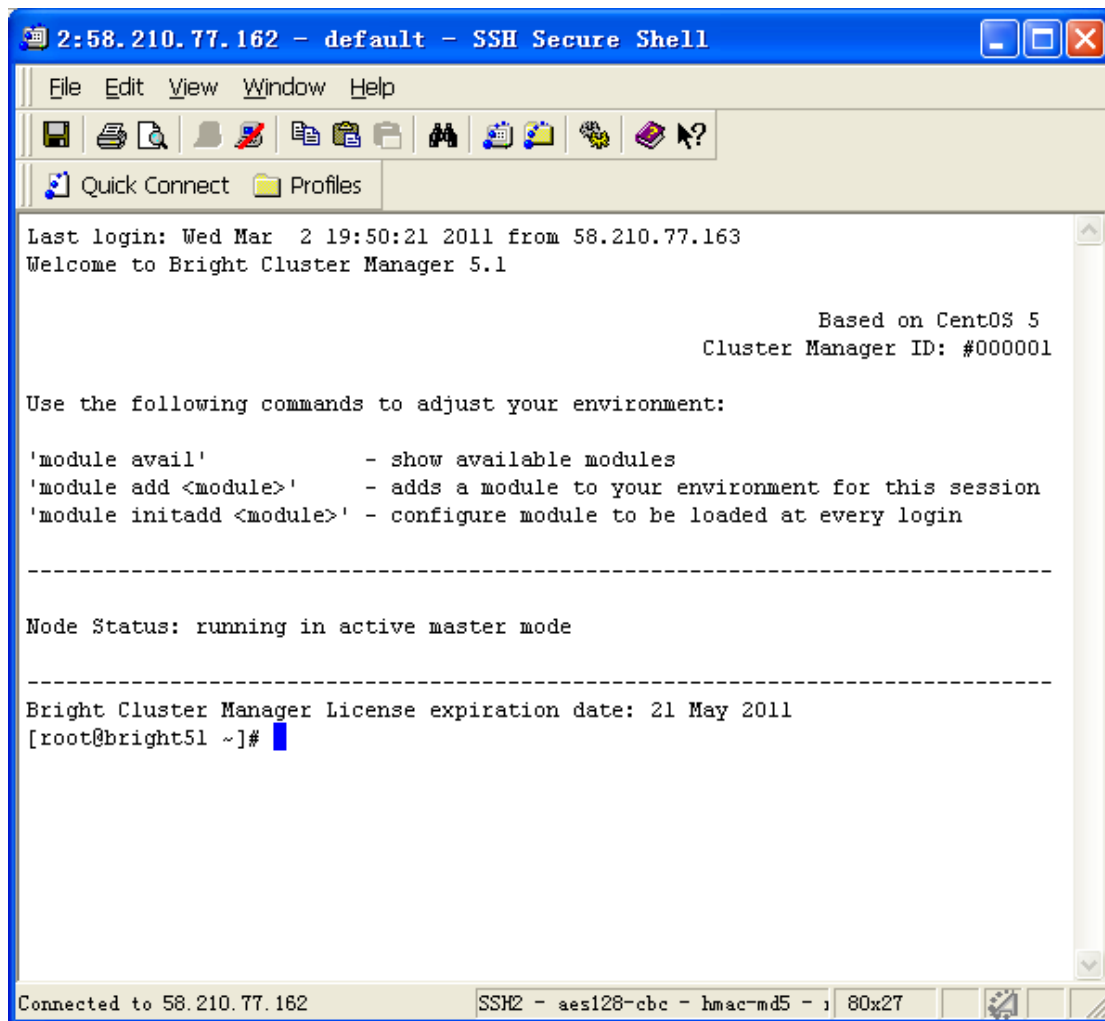


接下来会提示密码（见上面），然后就可以登录了，界面如下：



6.3 ssh 远程登录

Ssh 远程登录通过 SSH Secure Shell Client，登录方式和上述 SSH Secure File Transfer Client 一样：可以直接从双击 SSH Secure Shell Client 的白色图标开始，象上述 SSH Secure File Transfer Client 一样登录，登录后界面如下图所示：



```
2:58.210.77.162 - default - SSH Secure Shell
File Edit View Window Help
Quick Connect Profiles
Last login: Wed Mar  2 19:50:21 2011 from 58.210.77.163
Welcome to Bright Cluster Manager 5.1

Based on CentOS 5
Cluster Manager ID: #000001

Use the following commands to adjust your environment:

'module avail'           - show available modules
'module add <module>'    - adds a module to your environment for this session
'module initadd <module>' - configure module to be loaded at every login

-----

Node Status: running in active master mode

-----

Bright Cluster Manager License expiration date: 21 May 2011
[root@bright51 ~]#
```

接下来就可以象在本地一样操作了。