

弹性高性能计算E-HPC

快速入门

快速入门

使用流程

这部分文档将展示如何快速创建并使用E-HPC集群，引导您一站式完成HPC集群的配置、创建并在E-HPC集群上提交作业等操作。

一般地，购买和使用弹性高性能计算 E-HPC 集群需遵循以下步骤：

创建 E-HPC 集群。

- i. 登录管控
- ii. 硬件配置
- iii. 软件配置
- iv. 基础配置

提交作业。

说明：该操作仅适用于Web端管理控制台。如果您是 API 用户或有批量操作需求，请参考E-HPC OpenAPI概览。

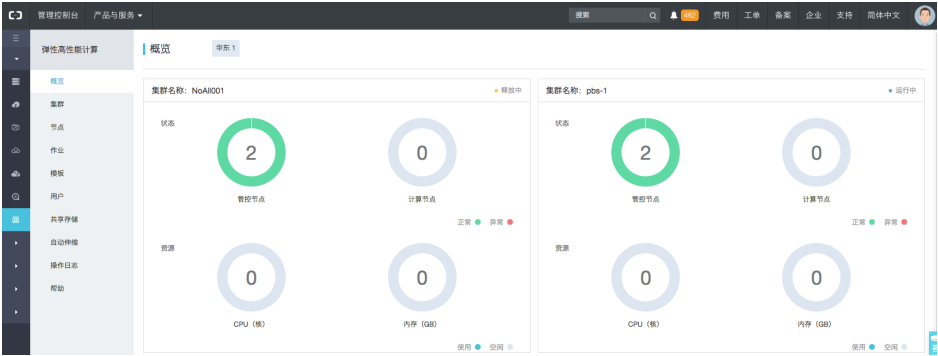
创建及配置集群

本文介绍了创建及配置集群的基本配置流程和查看配置清单的方法，并详细说明了各高级配置项的用法。

基本配置流程

准备工作

登录E-HPC管理控制台。如果尚未注册，请先单击 **免费注册** 完成注册流程（按照最新国家规定，需要实名制注册）。登录后概览界面如下：



定位到 **弹性高性能计算 > 集群**，选择地域（如**华东1**），单击 **创建集群**。

注意： 请先了解**地域和可用区**。

弹性高性能计算

集群

华东 1

创建

创建集群

概览

节点

作业

模板

用户

共享存储

自动伸缩

操作日志

帮助

集群ID/集群名称	状态	公网IP	计算节点数	配置	操作系统	调度器/镜像号	创建时间	操作
ehpc-hz-8VW2jxq8 NewMountPoint...	创建中		0/0	CPU: 0核 内存: 0GB	CentOS_7.2_64	pbs/his	2018-05-19 15:14:33	查看详情 扩容 回收 更多
ehpc-hz-4hc7t1j3H pbs-1	运行中	47.96.145.87	0/0	CPU: 0核 内存: 0GB	CentOS_7.2_64	pbs/his	2018-05-19 09:02:41	查看详情 扩容 回收 更多
ehpc-hz-4GHRpQg4g test-qianzheng	运行中	47.96.150.189	1/1	CPU: 1核 内存: 1GB	CentOS_7.2_64	pbs/sap	2018-05-16 12:02:52	查看详情 扩容 回收 更多

« 上一页

1

下一页 »

注意： 在创建、管理或使用E-HPC集群时，非特殊情况**请勿**使用云服务器ECS管理控制台调整单个集群节点。建议通过E-HPC集群管控平台操作。详情见 **为什么不能使用ECS管理控制台对E-HPC集群节点进行操作？**

第一步：硬件配置

硬件配置项包括：可用区、付费类型、部署方式和推荐配置，如下图所示：

1.硬件配置

2.软件配置

3.基础配置

* 可用区: 华东 1 可用区 G

* 付费类型: 包年包月 按量付费 竞价实例

部署方式: 标准 简易 One-box

推荐配置: 通用 GPU 网络增强 Skylake

计算节点 ecs.gn5,16核,120GB,NVIDIA P100 x 2 4

管控节点 ecs.sn1ne,2核,4GB 2

登录节点 ecs.gn5,16核,120GB,NVIDIA P100 x 2 1台

若选择按量开通集群, 8核及8核以上机型需要申请才能使用。[前往申请。](#)
[查看机型实例规格](#)

1. 选择可用区。

1.硬件配置

2.软件配置

3.基础配置

* 可用区: 请选择

* 付费类型: 华东 1 可用区 B 华东 1 可用区 E 华东 1 可用区 F 华东 1 可用区 G

部署方式: 标准 简易 One-box

推荐配置: 通用 GPU 网络增强 Skylake

计算节点 请选择 1

管控节点 请选择 2

登录节点 请选择 1台

若选择按量开通集群, 8核及8核以上机型需要申请才能使用。[前往申请。](#)
[查看机型实例规格](#)

说明：为了保证E-HPC节点间的网络通讯效率，所有开通的节点均位于同一地域同一可用区，请参见地域和可用区。如果在开通E-HPC集群时发现想用的区域不可选，请参见为什么某些地域无法开通E-HPC集群

2. 选择付费类型

付费类型是指集群节点ECS实例的计费方式，其中不包括弹性IP、NAS存储的费用。共有三种付费类型供您选择：包年包月、按量付费和竞价实例。

* 付费类型: 包年包月 按量付费 竞价实例

* 购买周期: 1周 1个月 2个月 3个月 6个月 1年 更多

* 自动续费:

3. 选择部署方式

部署方式: 标准 简易 One-box

说明：

- 标准：登录节点、管控节点和计算节点分离部署，管控节点可以选2台或4台（HA）。
- 简易：登录、管控服务混合部署在一台节点上，计算节点分离。
- One-box: 所有类型的服务都部署在一台计算节点上，整个集群只有一个节点，可选择使用本地存储或NAS存储。使用NAS存储时可支持集群扩容。

4. 选择推荐配置

推荐配置: ☒ 全部 ☒ GPU系列 ☐ 网络增强系列 ☐ Skylake系列

计算节点	ecs.gn5,16核,120GB,NVIDIA P100 x 2	4
管控节点	ecs.sn1ne,2核,4GB	2台
登录节点	ecs.gn5,16核,120GB,NVIDIA P100 x 2	1台

如上图，系统中自动分配了2个管控节点实例。通过选择**GPU系列**过滤实例列表后，**计算节点**和**登录节点**仅展示带GPU的实例供选择。计算节点的数量指定为4台。登录节点默认分配1台。点击节点的打开下拉菜单可进一步选择所需机型。

说明：E-HPC集群主要由以下3种节点构成

- 计算节点：用于执行高性能计算作业
- 管控节点：用于进行作业角度和域账户管理的节点，包括相互独立的2种节点：
 - 作业调度节点：部署作业调度器
 - 域帐户管理节点：部署集群的域账号管理软件
- 登录节点：具备公网IP，用户可远程登录该节点，通过命令行操作HPC集群

一般来说，作业调度节点只处理作业调度，域帐户管理节点只处理帐户信息，都不参与作业运算，因此原则上管控节点选用较低配置的企业级实例（如小于4CPU核的sn1ne实例）保证高可用性即可。计算节点的硬件配置选择是影响集群性能的关键点。登录节点通常会被配置为开发环境，需要为集群所有用户提供软件开发调试所需的资源及测试环境，因此推荐登录节点选择与计算节点配置一致或内存配比更大的实例。各种机型的详细信息可参考**推荐配置**。

完成硬件配置后，点击**下一步**进入**软件配置**界面。

第二步：软件配置

软件配置项包括：镜像类型、操作系统、调度器和软件包，如下图所示：

1.硬件配置

2.软件配置

3.基础配置

* 镜像类型:

公共镜像

* 操作系统:

CentOS_7.2_64

* 调度器:

☒ pbs
 ☐ slurm

* 软件包:

GROMACS

☐

分子动力学模拟软件包, 包含GROMACS软件与MPI运行环境

GROMACS-GPU

☐

GROMACS GPU版本

LAMMPS

☐

分子动力学模拟软件包, 包含LAMMPS软件与OpenMPI环境

OpenFOAM

☐

流体力学模拟软件包, 包含OpenFOAM软件与OpenMPI环境

RELION-GPU

☐

基于贝叶斯理论的冷冻电镜三维图像数据处理软件

TensorFlow

☐

用于各种感知和语言理解等任务的机器学习开源软件库

TensorFlow-GPU

☐

TensorFlow GPU版本

说明：

- 选择不同的镜像类型，操作系统的可选项也会变化。操作系统指部署在集群所有节点上的操作系统。
- 调度器是指HPC集群上部署的作业调度软件。选择不同的作业调度软件，向集群提交作业时作业脚本和参数也会有相应的不同。
- 软件包是指HPC集群上部署的HPC软件，HPC提供多种类型的典型配置软件包如GROMACS、OpenFOAM和LAMMPS等，包含相应的软件和运行依赖，集群创建完毕之后，所选的软件将会预装到集群上。

第三步：基础配置

基础配置项包括：基本信息和登录设置，如下图所示：

1.硬件配置

2.软件配置

3.基础配置

基本信息

* 名称: ?

NewCluster

长度2-64字符，只允许包含中文、字母、数字、两种符号-和_，必须以字母或中文开头

登录设置

* 登录节点方式:

☒ 密码

* 登录密码:

.....

8-30个字符，必须同时包含下面四项中的三项：大写字母、小写字母、数字、和特殊字符（仅支持下列特殊字符：()~!@#\$%^&*~+=[]{}|:;<>,.?/）

* 确认密码:

.....

说明：

5

- 基本信息中的名称是指集群名称，该名称将会在集群列表中显示，便于用户查找。
- 登录设置填写的是登录该集群的密码，该密码用于远程SSH访问集群登录节点时使用，对应的用户名为root。

完成基本配置后，勾选《E-HPC服务条款》，点击**确认**即可创建集群。

查看配置清单

您可以在创建集群界面的右侧查看当前配置清单。默认情况下，配置清单仅显示基础配置，您可以勾选**高级配置**

集群名称	NewCluster
地域	华东 1
可用区	华东 1 可用区 G
管控节点	ecs.sn1ne,2核,4GB,2台
计算节点	ecs.gn5,16核,120GB,NVIDIA P100 x 2,4台
登录节点	ecs.gn5,16核,120GB,NVIDIA P100 x 2,1台
调度器	pbs
软件配置	OPENMPI_1.10.7,GROMACS-OPENMPI_5.0.7
选择安全组	sec_g
VSwitch	switch_g
共享存储	0329048d94-yum26.cn-hangzhou.nas.aliyuncs.com:/
操作系统	CentOS_7.2_64
产品版本	1.0.0
域账号服务	nis

置选项查看更多配置项。

查看配置拓扑图

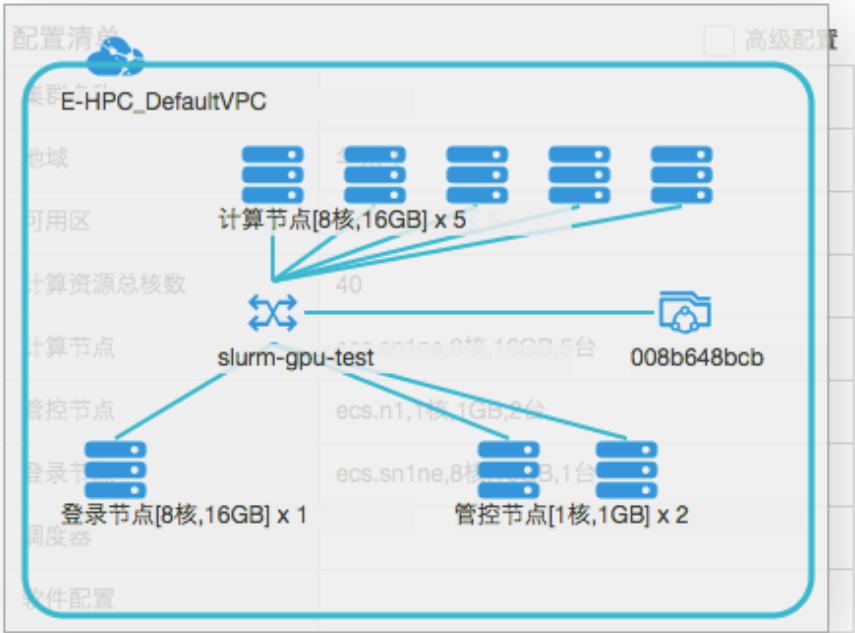
在创建集群界面的顶部按钮区，有显示/隐藏集群配置拓扑图的按钮：

显示拓扑

下一步 >

取消

点击按钮可以显示/隐藏当前配置拓扑图，包括VPC名称、交换机名称、NAS实例名、登录节点、管控节点、计



算节点的配置及数量等。

查询创建状态

大约20分钟后，您可以回到E-HPC集群列表页面，查看新集群状态。若新集群所有节点皆处于**正常**状态，则集群已创建完毕。下一步用户可登录到集群进行操作，请参见指引使用集群。

高级配置

按照基本配置流程可创建通用E-HPC集群，如果用户需要更灵活的配置，可以在**高级配置**选项下进行选择。创建集群的三个步骤中前两个步骤都有高级配置可供用户选择。

硬件高级配置

依次打开**创建集群** > **硬件配置** > **高级配置**，可以看到如下配置选项（本例在创建集群前已事先创建了网络、存

> 高级配置

网络配置

* 网络类型: ? ☒ 专有网络 (VPC)

VPC: ? quick_start_VPC_demo

创建VPC, 完成创建后请点击刷新, 点击查看创建VPC教程

VSwitch: ? switch_g

创建子网 (交换机), 完成创建后请点击刷新, 点击查看创建交换机教程

新建安全组: ? ☒

安全组名称:

NAS实例: ? 008b648bcb

创建NAS实例, 完成创建后请点击刷新, 点击查看创建NAS实例教程

挂载点: ? 008b648bcb-cem53.cn-hangzhou.nas.aliyuncs.com

创建挂载点, 完成创建后请点击刷新, 点击查看创建挂载点教程

远程目录: ? / ClusterId

储等基础服务) :

网络配置

网络配置

* 网络类型: ? ☒ 专有网络 (VPC)

VPC: ? E-HPC_DefaultVPC

创建VPC, 完成创建后请点击刷新, 点击查看创建VPC教程

VSwitch: ? vswitch-ok

创建子网 (交换机), 完成创建后请点击刷新, 点击查看创建交换机教程

新建安全组: ? ☒

安全组名称:

用户可自行在阿里云专有网络控制台创建VPC、交换机，在阿里云云服务器控制台创建安全组，创建完成后即可在这里可以选择所需的VPC、交换机、安全组等网络配置。如果不想跳转到其他服务的控制台，也可点击此处的“创建VPC”、“创建子网（交换机）”链接，在右侧的滑动窗口中创建相应的组件。

说明：如果用户事先没有创建VPC和交换机，创建集群的流程将会自动创建默认一个默认的VPC和交换机，VPC网段为192.168.0.0/16，交换机网段为192.168.0.0/20。用户如果自行创建了VPC，需要在所需的可用区下自行创建交换机才可继续创建集群。如果用户自行创建了VPC和交换机，使用基础配置流程创建集群时将会自动选择第一个VPC和交换机，请确保交换机下的IP地址空间足够（可用IP数大于集群所有节点的数量），用户也可以在高级配置下的VPC和交换机配置中自行选择任何已创建的VPC和交换机。

共享存储配置

共享存储

NAS实例: ⓘ

022464ab55

▼

[创建NAS实例](#), 完成创建后请点击[刷新](#), 点击查看[创建NAS实例教程](#)

挂载点: ⓘ

022464ab55-ubb73.cn-hangzhou.nas.aliyuncs.com

▼

[创建挂载点](#), 完成创建后请点击[刷新](#), 点击查看[创建挂载点教程](#)

远程目录: ⓘ /

ClusterId

E-HPC所有用户数据、用户管理、作业共享数据等信息都会存储在共享存储上以供集群各节点访问。目前共享存储是由文件存储NAS提供。而要使用NAS还要配套挂载点和远程目录（请参考NAS相关名词解释）。

说明：如果用户事先没有在当前可用区创建NAS实例和挂载点，创建集群的流程将会在可用区下自动创建默认一个默认的NAS实例与挂载点。如果用户在当前可用区自行创建了NAS实例和挂载点，使用基础配置流程创建集群时将会自动选择第一个NAS实例和挂载点。如果在该NAS实例在可用区下没有可用的挂载点，创建集群的流程会自动创建一个挂载点。请确保该NAS实例还有可用的挂载点余量。

软件高级配置

依次打开**创建集群** > **软件配置** > **高级配置**，进行高级选项配置。

安装后执行脚本

集群部署完毕后，用户可以在此处执行脚本：
安装后执行脚本

下载地址:

0/512

执行参数:

0/512

- 说明：**
- 下载地址是指脚本文件所在的地址，一般将脚本上传到OSS服务，这里填写OSS文件的url。
 - 执行参数是指执行脚本时需要传入的命令行参数。

软件版本

用户可以在此处选择域账号服务软件类型和具体的软件清单：

软件版本

* 产品版本:

1.0.0

▼

* 域账号服务:

i

☒ nis

☐ ldap

其他软件:

☐	名称	版本
☐	gromacs-gpu	2016.3
☐	gromacs-openmpi	5.0.7
☐	gromacs	5.0.7
☐	hpl-openmpi	2.2
☐	lammps-mpich	31Mar17
☐	lammps-openmpi	31Mar17
☐	mpich	3.0.4
☐	mpich	3.2

注意：在选择预装高性能计算应用软件时，必须选择所依赖的软件包（如mpich或openmpi，参见软件包名后缀）。如选择“-gpu”后缀的软件，必须确保计算节点使用GPU系列机型。否则会有集群创建失败或软件无法正常运行的风险。

使用集群

若您尚未拥有E-HPC集群，请先[创建E-HPC集群](#)

准备工作

E-HPC集群创建完成后，应参考[用户管理](#)，根据需要创建非root帐号供集群普通用户或管理者使用。

另外还可以参考[导入数据流程](#)，把需要计算的数据导入E-HPC集群。

登录集群

请到[登录集群](#)中了解如何获悉E-HPC集群登录节点公网IP，并以E-HPC管理员分配给您的普通权限用户登录即

可。

使用集群

进入登录节点后，我们推荐按照运行计算作业指引使用专业调度工具提交计算任务。**非集群管理员请勿通过E-HPC集群内网IP登录计算节点，以免干扰其他用户提交的作业的运行。**

登录节点同时还可兼任高性能的开发机，用户可在上面进行日常软件开发及调试工作。

创建混合云集群

E-HPC 混合云集群

您可以通过E-HPC可以创建HPC混合云集群，将本地的HPC集群向阿里云扩容计算资源，统一调度公共云上资源和用户本地计算节点。

集群的调度结点（头结点），域账号管理节点都在本地，您可以通过以下方式进行本地和云上的节点通信：

- 云企业网：请参见 [什么是云企业网](#)。
- 物理专线：请参见 [申请专线接入](#)。
- VPN网关：请参见 [什么是VPN网关](#)。

如何搭建VPN网关和建立连接，请参见 [配置站点到站点连接](#)。本地网关如果使用strongswan，请参见 [strongSwan配置](#)。

注意：本地网关需要允许 UDP 端口 500 和 4500 连入, strongswan 对外监听端口是 500 和 4500。本地网关需要允许域账号系统以及 HPC 集群头结点相关服务监听的端口连入。

环境要求

本地HPC集群管理节点的环境要求如下：

- 操作系统：Linux CentOS 6.8、6.9 或者 7.2、7.3、7.4
- 调度集群类型：PBSPro 18.1.1、Slurm 17.2.4、SGE 6.2u5
- 账号管理类型：nis 2.31、ldap 2.4

创建混合云集群

准备工作

- 搭建好网络连接、VPN、云企业网或者物理专线。
- 提供本地HPC集群调度节点信息：hostname、ip。
- 提供本地域账号节点信息: hostname、ip、账号域名 (domain name)。

E-HPC支持如下两种方式创建混合云集群

- 本地集群已经存在，那么本地集群节点不需要做额外的配置
- 本地集群还不存在，E-HPC会自动安装配置本地集群调度节点和域账号节点

API调用创建混合云集群

OpenAPI：CreateHybridCluster, 这里假设选择的地域是杭州（regionId：cn-hangzhou）。有关 API 文档，请参见 混合云管理API。

部分参数说明：

- VpcId：指定以上搭建网络连接相关的VPC。

Nodes：json格式的字符串，内容包含本地集群的调度节点以及账号节点的信息，可以参照以下的例子。

```
[
  {"Role":"AccountManager", "HostName":"account", "IpAddress":"...", "AccountType":"nis"},
  {"Role":"ResourceManager", "HostName":"scheduler", "IpAddress":"...", "SchedulerType":"pbs"}
]
```

- 如果本地调度节点和账号节点为同一个节点，以上 AccountManager 和 ResourceManager 下只需配置 HostName 和 IpAddress 的其中一个。

集群创建成功之后，通过E-HPC控制台可以查看集群基本信息，集群状态处于“安装中”。

集群ID/集群名称	状态	公网IP	计算节点数	配置	操作系统
ehpc-hz-3FoluXRxWy hybridCluster-si...	● 安装中		0/0	CPU: 0核 内存: 0GB	CentOS_7.2_64

本地集群配置

获取集群配置

在混合云集群创建成功之后，通过 API 获取集群配置信息。OpenAPI GetHybridClusterConfig，有关文档请参见 混合云管理API。

配置本地集群节点

登录本地集群调度节点和域账号管理节点，执行如下命令：

```
echo -e "集群配置信息" > /root/ehpc.conf
```

账号节点和调度节点为两个节点

登录本地域账号管理节点运行如下命令安装配置 E-HPC agent：

```
curl -O http://e-hpc-hangzhou.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/packages/deploy_ehpc_agent.sh
chmod +x deploy_ehpc_agent.sh
./deploy_ehpc_agent.sh -r AccountManager -i
-r: # 指定节点角色
-i: # 如果本地集群是已经存在的，指定这个选项就会跳过安装配置域账号服务
```

登录本地集群调度节点运行如下命令安装配置E-HPC agent：

```
# 下载或者从以上域账号节点拷贝部署脚本
curl -O http://e-hpc-hangzhou.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/packages/deploy_ehpc_agent.sh
chmod +x deploy_ehpc_agent.sh
./deploy_ehpc_agent.sh -r ResourceManager -i
-r: # 指定节点角色
-i: # 如果本地集群是已经存在的，指定这个选项就会跳过安装配置HPC集群调度服务
```

账号节点和调度节点为同一个节点

登录本地集群节点运行如下命令安装配置E-HPC agent

```
curl -O http://e-hpc-hangzhou.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/packages/deploy_ehpc_agent.sh
chmod +x deploy_ehpc_agent.sh
./deploy_ehpc_agent.sh -r AccountManager,ResourceManager -i
-r: #指定节点角色
-i: #如果本地集群是已经存在的，指定这个选项就会跳过安装配置HPC集群调度服务
```

本地管理节点部署之后，通过E-HPC控制台可以查看集群基本信息，集群状态会转变为“运行中”。

集群ID/集群名称	状态	公网IP	计算节点数	配置	操作系统
ehpc-hz-ZDRaoDaTSv hybridCluster-si...	● 运行中	116.62.186.233	0/1	CPU: 1核 内存: 1GB	CentOS_7.2_64

增加节点

调用 E-HPC OpenAPI AddNodes，请参见 节点管理API。

镜像，调度器，域账号类型说明

镜像

E-HPC支持使用公共镜像，自定义镜像，共享镜像以及镜像市场镜像创建集群，选中一种镜像之后，集群所有节点都使用该镜像创建。在创建集群的“软件配置”阶段，用户可以选择镜像类型，以及具体镜像

1.硬件配置

2.软件配置

3.基础配置

* 镜像类型:

公共镜像

^

* 操作系统:

公共镜像

自定义镜像

* 调度器:

共享镜像

* 软件包:

镜像市场

支持的具体镜像如下表所示：

公共镜像	自定义镜像	共享镜像	镜像市场镜像
CentOS_7.2_64	CentOS 7.2/7.3/7.4 64位 64位	CentOS 7.2/7.3/7.4 64位 必须是基于公共镜像创建的	CentOS 7.2 64位 必须是基于公共镜像创建的
CentOS_6.8_64	CentOS 6.8/6.9 64位 必须是基于公共镜像创建的	CentOS 6.8/6.9 64位 必须是基于公共镜像创建的	CentOS 6.8 64位 必须是基于公共镜像创建的

如果在“镜像类型”下拉列表看不到部分选项，比如看不到“自定义镜像”，说明当前账号在当前地域是没有符合以上条件的自定义镜像。

关于如何创建自定义镜像，共享镜像，发布到镜像市场，可以参见

使用快照创建自定义镜像

共享镜像用户指南

云市场镜像

集群调度软件

E-HPC支持创建PBSPro，Slurm，GridEngine（SGE）集群，支持情况如下：

OS类型	集群调度软件类型
CentOS 7.2/7.3/7.4 64位	PBS Pro，Slurm
CentOS 6.8/6.9 64位	PBSPro，GridEngine

在创建集群的“软件配置”阶段，用户选择镜像之后，会显示可选的集群调度软件列表

1.硬件配置

2.软件配置

3.基础配置

* 镜像类型:

公共镜像

▼

* 操作系统:

CentOS_6.8_64

▼

* 调度器:

☒ pbs

☐ gridengine

1.硬件配置

2.软件配置

3.基础配置

* 镜像类型:

公共镜像

▼

* 操作系统:

CentOS_6.8_64

▼

* 调度器:

☒ pbs

☐ gridengine

域账号服务类型

E-HPC支持创建NIS或者LDAP域账号服务，在创建集群的“软件配置”阶段，用户点击高级配置，可以看到域

软件版本

* 产品版本:

1.0.0

▼

* 域账号服务:

?

☒ nis

☐ ldap

账号服务列表，默认选择NIS