

弹性高性能计算E-HPC

快速入门

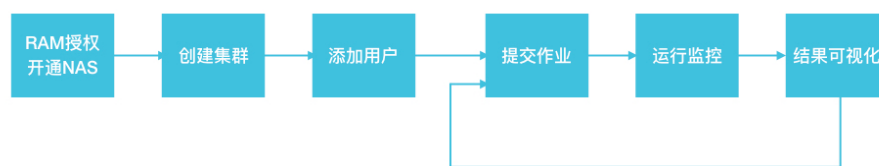
快速入门

使用流程

这部分文档将介绍创建和使用E-HPC集群的基本流程，引导您一站式完成集群的创建、配置并在E-HPC集群上完成高性能计算作业。

说明：本文档的操作仅适用于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。

购买和使用弹性高性能计算 E-HPC 集群进行高性能计算，一般遵循以下步骤：



RAM授权与开通NAS服务。

首次进入E-HPC控制台会弹出对话框提示进行RAM授权，点击“前往RAM进行授权”按钮，在跳转后的页面中点击同意授权即可。

E-HPC集群使用NAS共享文件存储，因此在创建E-HPC之前需要先开通NAS服务，您可以登录文件存储产品页面 [开通NAS服务](#)。

创建集群。

集群是用于高性能并行计算的资源集，由阿里云弹性计算实例组成，E-HPC集群部署完成后即包含了调度管理集群资源的高性能调度器，以及运行业务所需的软件栈。请参考[创建 E-HPC 集群流程](#)完成集群的创建与配置。

添加用户

E-HPC需要使用非root用户提交作业，因此在提交作业之前，您需要先通过用户管理功能添加用户。

创建提交作业。

集群和用户创建完毕，即可向集群提交计算作业。E-HPC控制台提供了图形化的作业编辑、提交流程，请参考[作业提交流程](#)完成作业提交。

您也可以通过SSH方式登录集群，使用命令行进行作业提交操作，参考[命令行提交](#)。

运行监控。

通过E-HPC的集谛功能，用户可以实时查看集群运行性能，剖析性能热点，也可以查看历史作业运行时的性能数据。

结果可视化。

通过E-HPC提供的远程可视化功能，用户可以通过GUI查看作业的运行结果。

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

开通并创建NAS

首次创建E-HPC集群之前，需要先登录文件存储产品页面 [开通NAS服务](#)，NAS服务开通后，登录到NAS控制台开始 [创建NAS文件系统](#)，并为文件系统 [添加挂载点](#)，操作完成之后，就可以登录到EHPC控制台创建集群了。

创建集群

1.. 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）。登录后定位到 [弹性高性能计算](#)，会直接显示如下的集群界面：



2.. 在该 **集群** 界面，先选择地域（如**华东1**），单击右上角开始 **创建集群**。

注意1：请先了解**地域和可用区**。

注意2：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、部署方式和节点配置，如下图所示：

1. 硬件配置
2. 软件配置
3. 基础配置

* 可用区：②

* 付费类型：② 包年包月 按量付费 抢占式实例

部署方式：② 标准 精简 One-box

计算节点

管控节点

登录节点

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。

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

* 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. 节点配置

如上图，系统中默认分配2个管控节点实例，还可以自己选择1个或者4（HA）。计算节点的数量指定为3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
 - 域账户管理节点：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，域账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：

The screenshot shows a software configuration interface with three main sections: 1. 硬件配置 (Hardware Configuration), 2. 软件配置 (Software Configuration), and 3. 基础配置 (Basic Configuration). The '2. 软件配置' section is active and contains the following options:

- 镜像类型 (Image Type):** 公共镜像 (Public Image)
- 操作系统 (OS):** CentOS_7_2_64
- 调度器 (Scheduler):** pbs (selected), slurm
- 软件包 (Software Packages):**
 - 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 (checked)
 - NAMD-GPU:** 分子动力学模拟和能量最小化软件包, 包括NAMD-2.12的GPU加速版本, OpenMP和CUDA运行环境
 - OpenFOAM:** 流体动力学模拟软件包, 包含OpenFOAM软件与OpenMPI环境
 - RELION-GPU:** 基于贝叶斯理论的冷冻电镜二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: 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：

- 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**选项查看更多配置项。

配置清单

 高级配置

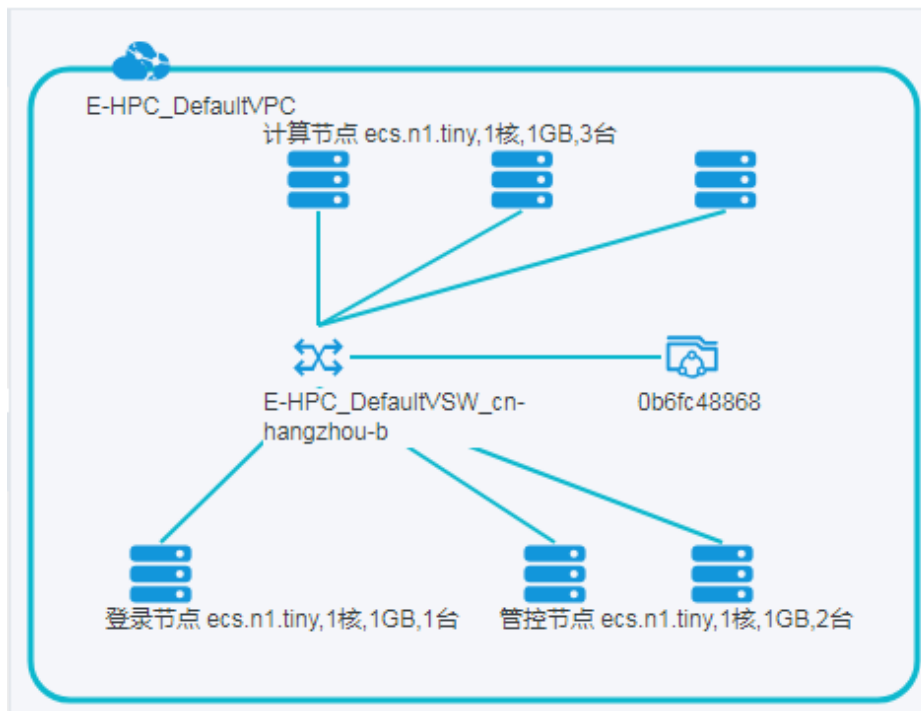
集群名称	NewCluster
地域	华东1（杭州）
可用区	华东1（杭州）可用区 B
计算资源总核数	3
计算节点	ecs.n1.tiny,1核,1GB,3台
管控节点	ecs.n1.tiny,1核,1GB,2台
登录节点	ecs.n1.tiny,1核,1GB,1台
调度器	pbs
软件配置	OPENMPI_1.10.7,LAMMPS-OPENMPI-31Mar17
新建安全组	test_st
VSwitch	E-HPC_DefaultVSW_cn-hangzhou-b
共享存储	0b6fc48868-pty61.cn-hangzhou.nas.aliyuncs.com/
操作系统	CentOS_7.2_64
产品版本	1.0.0
域账号服务	nis
系统盘大小	40 G

查看配置拓扑图

在创建完集群之后，点击右上角查看详情，我们可以查看到集群的在拓扑图。

[查看详情](#) [执行命令](#) [+ 扩容](#) [更多](#) ▼

可以看到当前配置拓扑图中，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集群页面，查看新集群状态。若新集群所有节点皆处于 **运行中** 的状态，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、存储等基础服务）：

> 高级配置

网络配置

* 网络类型：② 专有网络（VPC）

VPC：② ▼
[创建VPC，完成创建后请点击刷新，点击查看创建VPC教程](#)

VSwitch：② ▼
[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：②

安全组名称：

共享存储

NAS实例：② ▼
[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：② ▼
[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：② /

* 系统盘大小：
系统盘大小取值在40-500（GB）之间

网络配置

上图中的网络配置部分，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

上图中的共享存储部分，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。

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当前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。

系统盘大小配置

用户可以根据自己实际需求，在这里指定创建集群计算节点的系统盘大小，默认值是40，范围在40-500 (G) 之间。

该值与集群扩容时系统盘大小的默认值保持一致，用户也可以在集群扩容时为新扩容的节点重新设置系统盘大小。

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。

队列配置

用户可在此处为创建的集群指定队列，当不指定时集群会加入到默认的队列，如，PBS集群的默认队列为workq，slurm集群的默认队列为comp。

队列配置

Default queue New queue

* 队列名:

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: nis ldap

其他软件:

<input type="checkbox"/>	名称	版本
<input type="checkbox"/>	gromacs-gpu	2016.3
<input type="checkbox"/>	gromacs-openmpi	5.0.7
<input type="checkbox"/>	gromacs	5.0.7
<input type="checkbox"/>	hpl-openmpi	2.2
<input type="checkbox"/>	lammps-mpich	31Mar17
<input type="checkbox"/>	lammps-openmpi	31Mar17
<input type="checkbox"/>	mpich	3.0.4
<input type="checkbox"/>	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。

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



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



* 镜像类型: 公共镜像

* 操作系统: CentOS_6.8_64

* 调度器: pbs gridengine



* 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