

弹性高性能计算E-HPC

用户指南

用户指南

该部分文档将详细介绍如何使用E-HPC管理控制台对E-HPC集群、节点、用户和共享存储等进行管理，帮助用户深入了解E-HPC的特性和功能。同时开发者也可以通过OpenAPI来管理E-HPC。

如果您需要紧急人工协助，请在E-HPC管理控制台选择 **工单** > **提交工单**，或者直接提交工单。

有关阿里云弹性高性能计算更多的功能说明和定价信息，请登录E-HPC产品首页进行查询。

声明

本文中描述的部分产品特性或者服务可能不在您的购买或使用范围之内，请以实际商业合同和条款为准。本文档内容仅作为指导使用，文档中的所有内容不构成任何明示或暗示的担保。由于产品版本升级或其他原因，本文档内容会不定期更新，使用文档时请注意文档配套的软件版本。

集群管理

前提条件

若您尚未拥有E-HPC集群，请先创建E-HPC集群。

弹性高性能计算E-HPC的管理控制台提供了E-HPC集群相关的集群创建，集群概要信息浏览及修改，集群扩容和释放等功能。

进入集群管控界面

进入E-HPC管理控制台，单选左侧导航栏中的**集群**标签，进入如下界面：



图中的界面主要包括以下几部分信息：

地域（Region）

关于地域的说明，请参考地域和可用区。



若您单击不同的地域标签，可以在下方表格看到该用户在当前所选地域所创建的所有E-HPC集群的概要信息。若表格为空，则说明没有在该地域创建过集群。

从上图示例可以看到，该用户在华东1地域已创建了 2 个E-HPC集群。

这里选择的地域也会影响新创建集群所在的地域。详细参见创建E-HPC集群。

集群概要信息

地域选择完成后，该地域下各个已创建的集群会展示如下信息。

ID/集群名称	状态	计算节点数	配置	操作系统	调度器 / 区域号	创建时间	操作
ehpc-dVVLVJbbde yonguntest	运行中	2	CPU : 2core's ram : 2GB	CentOS_7_2_64	pbs/nis	2017-08-23 09:27:38	管理 扩容 更多

ID/集群名称

ID是E-HPC管控系统自动分配的唯一标识，用户无需修改。

集群名称是用户在创建集群时赋予的名称，建议使用有意义的命名，以明确区分集群，方便管理。

状态

创建中/安装中/初始化中：E-HPC集群创建期间的状态，对应ECS实例创建/安装软件/初始化E-HPC管控等阶段。无需用户干预。

运行中：E-HPC集群创建完毕处于可用状态。

注意：这是集群唯一可以正常使用的状态。

- 异常：请提交工单，我们会协助处理。
- 释放中：集群在停机释放过程中。

计算节点数：指集群中计算节点实例数量。

- 配置：特指计算节点的计算资源配置（CPU+内存）。
- 操作系统：集群所有节点统一使用的操作系统版本。
- 调度器/域帐号：集群所使用的高性能作业调度工具（PBS或SLURM），以及域帐号管理系统（目前默认NIS）。

在E-HPC管理控制台的集群页的集群概要信息表中，点击目标集群ID（如下图的 ehpc-MO55N2wmJj）

ID/集群名称

ehpc-MO55N2wmJj
yaohouCluster4

或集群对应操作栏的管理



即可进入集群详情页面（如下图）。用户可从中查看E-HPC集群创建时所使用的各项配置参数，主要是节点配置和存储配置等。

集群yaohouCluster4

刷新

基本信息		
集群ID：ehpc-MO55N2wmJj	状态：运行中	地域：华东 1
安全组ID：sg-bp16iga7ihuqb6usi7wy	虚拟交换机ID：vsw-bp1bmogpv4evrtp9yc5mxi	密钥对名称：
描述：		
节点信息		
付费类型：	开高可用：否	
管控节点数量：2	管控节点规格：ecs.n1.tiny（CPU：1核 内存：1GB）	
计算节点数量：1	计算节点规格：ecs.n1.tiny（CPU：1核 内存：1GB）	
登录节点数量：1	登录节点规格：ecs.n1.tiny（CPU：1核 内存：1GB）	
存储信息		
存储类型：nas	存储实例ID：O45324a6dd	
挂载协议：nfs	挂载点：O45324a6dd-meb81-cn-hangzhou.nas.aliyuncs.com	
远程挂载目录：/		

在E-HPC管理控制台的集群页的集群概要信息表中，点开目标集群对应操作栏的更多 -> 修改信息



在弹出的界面可以修改**集群名称**及**集群描述**

修改信息

* 集群名称:

user-manual_demo

16/64

长度限制2~64个字符

* 集群描述:

This is a demo

14/128

长度限制2~128个字符

确认

取消

修改后可以在集群概要信息中看到集群名称的变化。

在E-HPC管理控制台的集群页的集群概要信息表中，点击目标集群对应操作栏的扩容



弹出扩容界面

集群扩容

基本配置

集群名称: yaohouCluster4

当前计算节点数: 1

* 新增计算节点数量:

当前配置

CPU	1核
内存	1GB
GPU	0

☒ 《E-HPC服务条款》

总价 : ¥ 0.00元 / 小时

立即购买

取消

用户仅需填写需扩容的节点数量即可，新增计算节点配置与E-HPC集群原有配置是一致的。确认同意《E-HPC服务条款》后购买即可。

注：购买完成后新增计算节点并非立即可用（需要初始化），但原有计算节点的使用不受影响。稍过几分钟后回到集群概要信息界面，若计算节点数发生增加则说明新增节点已初始化完成，可接受作业调度。

在E-HPC管理控制台的集群页的集群概要信息表中，点击目标集群对应操作栏的更多 -> 释放



在弹出界面点击确认即可释放集群。

注意：集群删除后不可恢复。请在释放前务必先备份数据。



之后集群会进入**释放中**状态，一段时间后将集群概要信息表中不再出现集群相关信息，此时即释放完成。

若您尚未拥有E-HPC集群，请先[创建E-HPC集群](#)

弹性高性能计算E-HPC的管理控制台提供了E-HPC集群节点相关的节点查询、重启、重置和释放等功能。

进入节点管控界面

进入E-HPC管理控制台，点选左侧栏的**节点**标签，进入如下界面：



选择节点

选出需要调整的节点主要有以下步骤

选择地域

关于地域的说明，请参考[地域和可用区](#)

节点所属集群所在的地域即为节点所在地域，需通过地域筛选出节点所在集群。

选择集群

在地域标签下方，点击集群旁边的下拉菜单，根据集群名称可选择节点所在的集群。



选择节点类型

E-HPC集群主要有三种节点类型：



1.管控节点，包括调度服务器和域帐户服务器。

- 调度服务器：主要作用是运行PBS或SLURM等调度工具的服务端，处理作业提交、管理调度等。
- 域帐户服务器：集中管理E-HPC集群内用户帐户。

2.计算节点

- 运行高性能计算作业的服务器，其配置决定了E-HPC集群总体性能。

3.登录节点

- E-HPC集群普通用户能够操作的唯一节点类型。用户可在登录节点上进行软件调试、编译和安装，作业提交等操作。

管理节点

完成以上节点所在地域、集群以及节点类型选择后，用户可从节点概要信息表中找到需要调整的节点，在操作栏点选所需操作



重启节点

注意：如无特殊需要（如故障修复等），请勿对处于运行中状态的节点执行重启操作。

点击重启，在弹出界面选择普通重启或强制重启



- 普通重启：向节点上运行的操作系统（如CentOS）远程发送重启指令，由操作系统完成终止进程，系统重启等操作。相当于物理机按下Ctrl+Alt+Del触发的重启。
- 强制重启：直接重启节点运行的虚拟机，相当于物理机按下Reset按钮。一般是普通重启无效时才使用强制重启方式。

重置节点

注意：如无特殊需要（如故障修复等），请勿对处于运行中状态的节点执行重置操作。

点开更多下拉菜单，点击重置节点。确认后即触发节点重置流程。



重置节点的流程：

1. 把当前节点恢复到刚创建ECS实例云服务器的初始状态
2. 重新安装初始化E-HPC管控系统，如调度配置或域帐号管理配置等
3. 重新安装E-HPC集群软件栈
4. 加入E-HPC集群

当节点重启无法修复故障时可尝试重置节点。

删除节点

注：仅**计算节点**可从集群移除，**管控节点**和**登录节点**不可删除。且删除计算节点是目前集群缩容的唯一途径。若需增加计算节点，请参考**集群扩容**

点开更多下拉菜单，点击删除节点。确认后节点将停机释放。



若您尚未拥有E-HPC集群，请先[创建E-HPC集群](#)

弹性高性能计算E-HPC的管理控制台提供了E-HPC集群用户相关的新增用户、修改用户权限、重置用户密码和删除用户等功能。

进入用户管控界面

进入E-HPC管理控制台，点选左侧栏的[用户](#)标签，进入如下界面：



创建用户

注：集群刚创建完毕时，默认不建立任何非root用户。此处创建的用户为非root用户。root用户仅能在创建集群时初始化（设置密码等）。

点击界面右上角的创建用户，在弹出的界面中配置用户信息，需注意用户名命名规则及密码强度的要求：

新增用户

* 用户名:

21/30

限制为6-30个字符，英文字母数字或符号"."组成，必须英文开头

* 用户组:

普通权限组

▼

* 密码:

限制为8-30个字符，必须同时包含三项（大写字母、小写字母、数字、特殊符号）

* 再次输入:

确认

取消

需要对[用户组](#)下拉菜单提供的两类用户说明如下：

- 普通权限组：非root且无sudo权限的用户，推荐E-HPC集群的普通使用者平时提交作业或调试使用。
- sudo权限组：非root但可通过sudo执行命令的用户，推荐E-HPC集群管理员使用。**请谨慎使用此权限，操作错误时（如误删除E-HPC软件栈模块）会导致集群故障**

点击确认即创建完成，并可在界面的用户列表中看到相关信息：

用户名	权限组	操作
user_manual_demo_user	普通权限组	修改权限 重置用户密码 删除

修改权限

在用户列表中根据用户名找到需修改的用户，点击操作栏中对应的修改权限：

修改用户权限

用户名: user_manual_demo_user

* 用户组:

普通权限组

普通权限组

sudo权限组

取消

在用户组下拉菜单中选定权限组，点击确定即完成。

重置密码

E-HPC不提供密码找回功能，可通过该功能为丢失或泄漏密码的用户直接重置密码。在用户列表中根据用户名找到需重置密码的用户，点击操作栏中对应的重置用户密码：

重置用户密码

用户名: user_manual_demo_user

* 密码:

限制为8-30个字符，必须同时包含三项（大写字母、小写字母、数字、特殊符号）

* 再次输入:

确认

取消

重置的新密码同样需要符合密码强度要求。

删除用户

在用户列表中根据用户名找到需删除的用户，点击操作栏中对应的删除：



注意上图的提示，虽然/home对应所删除用户名称的目录不会被清空，但即使再次创建同样用户名的用户，\$HOME目录的数据是不会复用的。但其他用户仍然能够访问这些数据。

登录节点

如果您尚未拥有E-HPC集群，请先[创建E-HPC集群](#)

E-HPC集群创建完成后，会自动为每个登录节点分配一个公网IP。点选左侧栏的**节点**，在主界面的**集群**右侧下拉菜单中选择所创建集群的名字：



再到**节点类型**右侧下拉菜单中选择**登录节点**。表格中**IP地址/ID**栏即显示登录节点对应的公网地址：



若在集群创建最后一步生成了密钥对，则可通过支持密钥登录的终端软件（如putty等）使用密钥登录（**推荐，安全性更好也更方便**）。或通过普通ssh终端使用预设root密码即可登录。默认登录shell为bash。

注意：请妥善保管密钥或登录密码

上传数据

用户作业数据及执行文件主要通过对象存储OSS导入E-HPC集群。

若您尚未创建OSS或不了解OSS，请参考OSS主页和开通OSS。请尽可能选择与E-HPC集群Region相同的区域开通。

开通OSS后还需创建bucket，请参考创建存储空间，并详细了解访问域名及相关说明。

用户首先把作业相关文件上传到OSS Bucket中，请参考OSS上传文件。

导入文件

登录后即可通过HTTP访问VPC网络Endpoint导入作业文件。

这里假定用户的作业脚本为test.py，作业数据为test.data；E-HPC集群和OSS都创建在华东1区域；存放作业文件的OSS Bucket名为e-hpc-quickstart，test.py和test.data放在该bucket根目录下。

```
cd /ehpcdata
wget http://e-hpc-quickstart.vpc100-oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/test.py
wget http://e-hpc-quickstart.vpc100-oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/test.data
```

若当前系统镜像没有安装wget可以通过软件源安装（如‘yum install wget’）。或改用curl

```
curl -O http://e-hpc-quickstart.vpc100-oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/test.py
curl -O http://e-hpc-quickstart.vpc100-oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/test.data
```

私有Bucket文件访问临时链接

若Bucket设置为私有访问，则可通过OSS控制台界面点选所需文件，获取临时含签名的URL（带有临时OSSAccessKeyId等参数的访问链接）进行导入，如：

名称：**file name**

签名： 链接有效时间 3600

秒

地址：
http:// **bucket name** .oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/
file name ?Expires=1503385326&OSSAccessKeyId=TMP.AQGwwMpavjYmaVsaYhOfRa5H51JUXeu-emk

[复制文件 URL](#) | [复制文件路径](#)

自定义签名有效时间后，单击**复制文件URL**即可获得外部可临时访问的URL。

准备工作

在使用E-HPC集群提交作业前，请确保：

- 已通过用户管理创建了非root用户。
- 了解登录集群的相关操作。
- 了解如何导入数据，把数据放在当前用户的\$HOME目录。

注意：不推荐使用root帐号进行任何作业提交，避免作业脚本中的误操作导致E-HPC集群数据遭受破坏。

提交作业

相关约定

以下假定作业相关文件路径为：

```
$HOME/test.py      # 作业执行程序  
$HOME/test.data # 作业相关数据
```

作业执行命令行为：

```
test.py -i test.data
```

作业调度

E-HPC目前支持两种主流的高性能计算作业调度器：

- PBS pro
- SLURM

PBS

```
$ cat > test.pbs
#!/bin/sh
#PBS -l ncpus=4,mem=1gb
#PBS -l walltime=00:10:00
#PBS -o test_pbs.log
#PBS -j oe
cd $HOME
test.py -i test.data
$ qsub test.pbs
```

PBS作业调度脚本test.pbs解释如下：

- Line3是对作业所需计算资源的预估：需要4个CPU核及1GB内存。
- Line4是对作业运行时间的预估：10分钟。
- Line5是指定stdout输出文件。
- Line6是把stderr和stdout的输出合并到上面指定的输出文件。
- Line7~8为作业具体执行命令。

PBS结合算例的使用示例可参考：

- GROMACS (算例2)
- LAMMPS (PBS提交作业部分)

更详细的使用文档可参考PBS官方的PBS User Guide。

SLURM

```
$ cat > test.slurm
#!/bin/sh
#SBATCH --job-name=slurm-quickstart
#SBATCH --output=test_slurm.log
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time=00:10:00
#SBATCH --mem-per-cpu=1024
cd $HOME
test.py test.data
$ sbatch test.slurm
```

SLURM结合算例的使用示例可参考：

- LAMMPS
- WRF

更详细的使用文档可参考SLURM官方说明。