

弹性高性能计算E-HPC

用户指南

用户指南

概述

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

本文档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

管控界面概览

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 / 域名号	创建时间	操作
ehpc-dvLVjbbde yongjuntest	运行中	2	CPU : 2core's ram : 2GB	CentOS_7_2_64	pbs/mis	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）。

集群详情

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

操作

管理 | 扩容
更多

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-bp16iga7ihuqbusi7wy	虚拟交换机ID：vsw-bp1bmgnqv4svrlp0yc5mxi	秘钥对名称：
描述：		
节点信息		
付费类型：	开应用可用：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：/		

修改集群信息

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。

集群扩容

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

操作

管理 | 扩容
更多

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:

3

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。

集群释放

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。

集群命令运行

本文介绍如何运行集群命令。

远程命令运行

进入集群界面

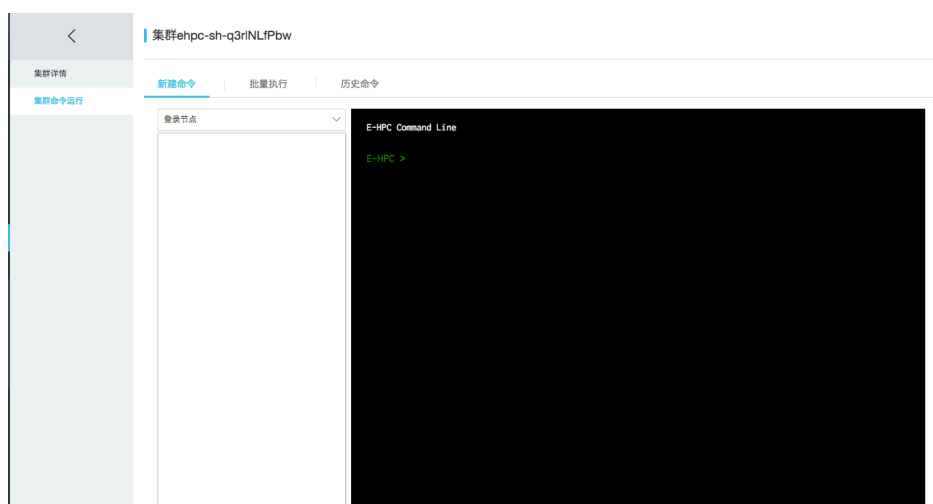
若您尚未拥有E-HPC集群，请先创建E-HPC集群，然后按照以下步骤进入“集群命令运行”页签。

1. 进入E-HPC管理控制台。

前往“集群”页签，在指定集群的“操作”列下单击“运行”。

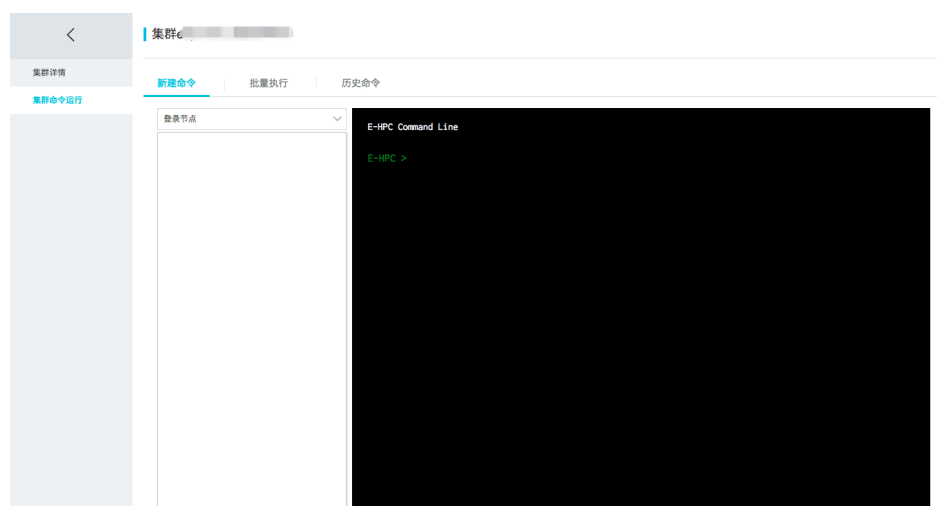


前往“集群命令运行页签”进行后续操作。



单节点执行命令

进入“新建命令”页签，可以命令行的方式执行命令。命令输入后将在所选择的节点执行。首先在左侧选择需要执行命令的节点，然后在右侧输入命令即可执行，如下图执行ls -l命令：

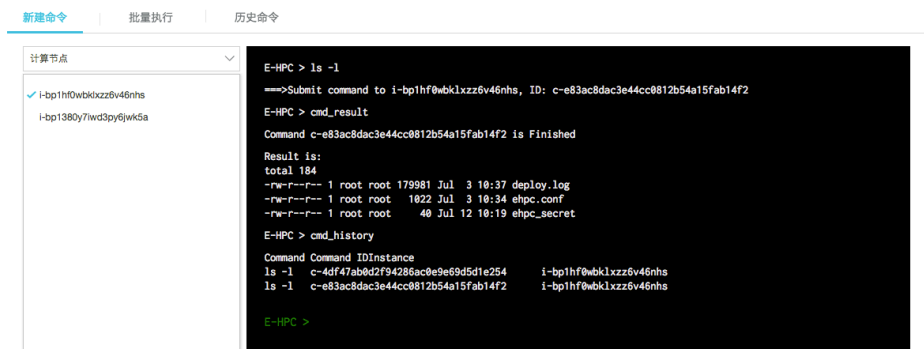


由于命令是异步执行，因此提交后只会返回本次命令的执行节点id，以及命令id。一般情况下命令会在提交到节点之后立即执行，当节点负载较高或多个用户同时提交命令时，命令会排队执行。

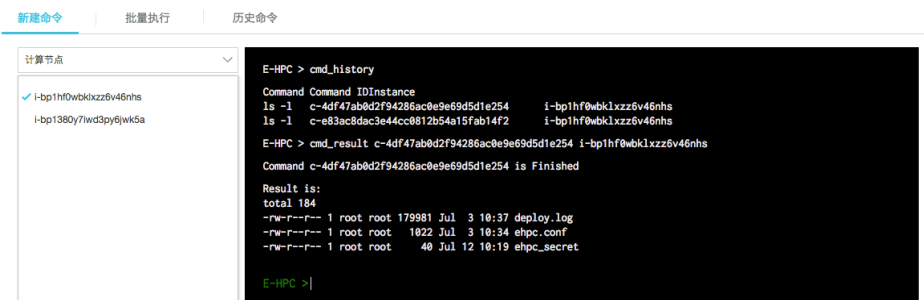
如需查看上次命令的执行结果，可输入内置命令cmd_result。如果命令未执行完成，将会返回空。



如需查看历史命令，可输入内置命令cmd_history，该命令会列出提交过的命令、命令ID以及执行的实例ID。



如需查询具体某条命令的执行结果，可在cmd_result命令后带上参数：命令ID和实例ID（如上图cmd_history内列出的内容）



注意：

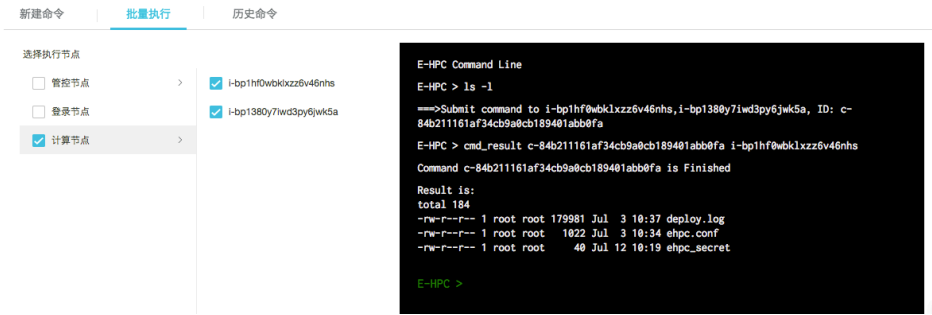
- 远程命令执行的默认路径为/root。
- 远程命令执行的超时时间为10秒，如果节点在执行命令时所需的时间超过10秒命令将执行失败。

多节点批量执行命令

您可以在“批量执行”页签下使用多个节点批量执行命令的功能。多节点批量执行的操作方法与单节点执行类似，但可以选择多个节点，如下图所示：



提交命令后，返回信息中会包含执行该命令的节点ID（多个）。当需要查询命令执行结果时，需要使用cmd_result命令并带上具体的命令ID、实例ID来查询：



历史命令查询

虚拟控制台上的cmd_history命令只能查询当前用户本次进入集群命令运行界面后提交的命令。退出界面再进入时，使用cmd_history命令查询不到之前提交过的命令。如果需要查询历史命令，您可以在“历史命令”页签下查询，单击“刷新”按钮即可显示之前提交过的命令。



点击“+”符号展开一条命令，单击“点击加载...”按钮可看到执行命令的多个节点，在具体节点右侧单击“点击显示”按钮可查看执行结果。



集群停机

E-HPC提供对整个集群停机的功能，这个功能只适用于按量收费的集群，就是集群里的实例是按量收费的。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集群停机

操作

查看详情 | 扩容
监控 | 更多 ▼

修改信息

释放

集群停机

空

空

弹出集群停机界面



用户首先需要确认是否设置了停机不收费功能，关于按量付费实例停机不收费的定义以及如何设置，参考https://help.aliyun.com/document_detail/63353.html?spm=5176.10496245.0.0.6580e91akhRTcW

用户点击确认，集群将进入“释放中”状态，最终变为停止状态



用户可以对已经停止的集群再启动，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

作栏的集群启动

操作

查看详情 | 扩容
监控 | 更多 ▼

修改信息

释放

集群启动

弹出集群启动界面

启动集群



集群名称：pbs-chess-test

集群ID：ehpc-hz-rnpPRchSE2

⚠ 启动集群各节点，按量付费的节点将开始收费。

确认

取消

用户点击确认，集群将进入“初始化中”状态，最终变为运行状态

节点管理

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：

弹性高性能计算	节点	华东 1	华东 2	华北 2	华南 1	刷新
概览	集群	集群：user-manual_demo	节点类型：管控节点			
节点		ID/IP地址	节点类型	状态	配置	资源使用量
用户		i-bp18k4yknupxibgfn2 私网 192.168.1.14	主网络器	运行中	CPU 1 cores 内存 1GB	-
共享存储		i-bp1a853p73axmlvqnkq 私网 192.168.1.13	主域服务器	运行中	CPU 1 cores 内存 1GB	-
帮助						
						1

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

操作

重启 | 更多 ▼

重启 |

重置节点

删除节点

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

重启节点

重启方式：☒ 普通重启 ☐ 强制重启

⚠ 您选择的节点i-bp10xrji3nzrtc0tzlev将执行重启操作，正在运行的作业可能受到影响，是否确认？

确认 取消

- 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。



用户管理

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:

user_manual_demo_user

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

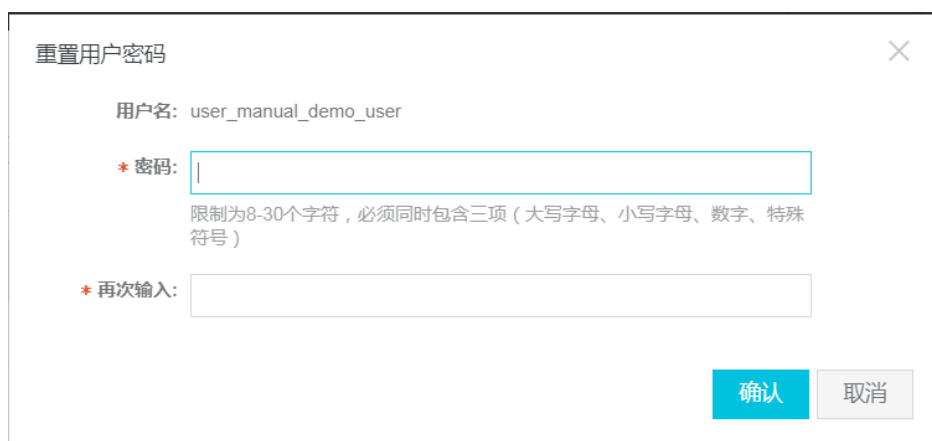
- ✓ 普通权限组
- sudo权限组

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：



删除节点

用户名: user_manual_demo_user

⚠ 删除用户后不可恢复，用户数据（home目录下的文件等）不删除，是否确认？

确认 取消

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。

登录集群

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

导入数据

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：

<code>http:// bucket name .oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/ file name ?Expires=1503385326&OSSAccessKeyId=TMP.AQGwvMpavjYmaVsaYhOfRa5H51JUXeu-emk</code>	▲ ▼
--	--------

[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**即可获取外部可临时访问的URL。

作业提交

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。

自动伸缩

简介

E-HPC自动化伸缩可以根据您配置的策略动态分配云资源，例如您可以设置根据实时负载自动增加或者减少云资源。E-HPC自动化伸缩可以为您：

- 减少管理运维集群的人力成本。
- 保证可用性的前提下，最大限度减少云资源消耗，降低集群成本。
- 提高容错能力，自动化伸缩自动检测节点状态，停止处于错误状态下的节点，并创建新的节点。
- 提高可用性，保证集群有充足的云资源。

配置自动伸缩服务

用户创建集群的时候，默认自动伸缩服务是没有启用的，用户如果希望使用的话，可以通过E-HPC控制台做如下配置。

功能配置选项

自动化伸缩提供如下配置选项：

- 是否启动扩容(EnableGrow): 是否启用自动扩容。
- 扩容时间间隔(GrowIntervalInMinutes): 每轮资源扩展的时间间隔。默认值2分钟，最小值2分钟，最大值10分钟。
- 扩容超时时间(GrowTimeoutInMinutes): 等待启动节点的超时时间。默认值20分钟，最小值10分钟

，最大值60分钟。如果超时时间后，节点依然未达到运行状态，将会把这个节点重置，用于新的扩容。

- 额外节点百分比(ExtraNodesGrowRatio): 额外扩张节点的百分比，默认值0，最小值0，最大值100。例如，根据作业负载需要新增100个计算节点，ExtraNodesGrowRatio值为2，那么最终扩展的节点数量是102。场景如下。

一个需要32个节点才能运行的mpi作业，如果将集群扩充至刚好32个节点，若其中一个节点启动失败或者启动过慢，就会导致其他31个节点一直处于空闲状态。但如果配置了额外节点百分比，将集群扩展至35个节点，就会一定程度上降低这种情况发生的概率，而且作业正常运行后，多启动的资源很快会被释放。

此配置在保证可用性的同时，减少了资源的等待浪费，且只增加用户很少的成本（几乎可以忽略）。

- 扩容比例（根据工作负载）(GrowRatio): 扩展比例(百分比)默认值100，最小值1，最大值100。比如当前根据作业负载需要新增10个计算节点，如果GrowRatio配置为50，就新增5个计算节点。场景如下。

有10个作业需完成，且每个作业只需要运行几分钟。默认自动伸缩会扩容10个节点，每个节点启动初始化都需要几分钟的时间，而节点进入运行状态后，运行作业也是只需要几分钟。这种情况下，有的用户会希望只扩容5个节点，同时运行5个作业，等这5个作业运行结束，再继续在这5个节点上运行剩余的5个作业。

通过这个配置选项，用户可以根据作业类型，运行时间长短对默认自动伸缩进一步优化，提高集群资源利用率。

- 集群最大计算节点数(MaxNodesInCluster): 集群最多可以扩展的节点数量，默认值100，最小值1。

- 是否启动缩容(EnableShrink)：是否启用自动缩容。

缩容时间间隔(ShrinkIntervalInMinutes): 每轮资源收缩的时间间隔，默认2分钟，最小值2分钟，最大值10分钟。

说明：ShrinkInterval必须大于等于GrowInterval，确保空闲节点不被任何作业所需要的前提下，释放节点

节点连续空闲次数(ShrinkIdleTimes): 资源收缩检查时，一个节点连续处于空闲的次数。默认值3，最小值2。最大值5。如果一个计算节点连续空闲超过3次，就会被释放。所以默认配置下，一个资源的连续空闲时间超过6分钟，就会被释放。

- 例外节点列表(ExcludeNodes): 不使用自动伸缩的节点列表，以半角逗号分割。用户如果希望一直保留一个最小规模的集群，可以使用此配置项。

使用场景及配置

总的来说，自动伸缩服务适合于不使用包年包月服务的用户，比如：

- 用户每天集中提交一批作业，使用HPC集群几个小时进行大规模计算，然后释放资源。
- 用户不定期的会提交作业，但不是每天24小时满负荷运行的。

针对不同的作业类型，用户可以使用不同的配置项参数，根据自己的HPC集群实际使用情况进行自定义配置。例如批量作业，作业数量大，单作业运行用时短，则用户可以通过配置扩容比例(GrowRatio)来调节扩容的比例

。若用户提交1000个作业，每个作业虚使用一个CPU，运行1分钟。则用户可以配置GrowRatio为10，那么就会扩容100个CPU。

使用E-HPC集群运行lammps算例

1) 创建集群, 选择安装的软件列表。

☐	mpich	3.0.4
☒	mpich	3.2
☐	openmpi	1.10.7
☐	openmpi	1.8.8
☐	mpitests-openmpi	4.1
☐	npb-openmpi	3.3
☐	hpl-openmpi	2.2
☐	gromacs	5.0.7
☐	gromacs-openmpi	5.0.7
☐	gromacs-gpu	2016.3
☒	lammps-mpich	31Mar17

2) 配置自动伸缩：启用自动扩容和缩容。

集群

pbs-33

扩容

缩容

是否启动：是

时间间隔：2分钟

超时时间：20分钟

额外节点百分比：0%

集群最大计算节点数：100

扩容比例（根据工作负载）：100%

是否启动：是

时间间隔：2分钟

节点连续空闲次数：3

例外节点列表：N/A

修改

3) 如果没有作业运行，几分钟之后，集群所有的计算节点都会被释放。

4) 通过控制台创建集群用户。

新增用户 ×

* 用户名： 9/30
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： ▾

* 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）

* 再次输入密码：

5) 用户把相应的数据，及程序放到NAS共享存储上。

6) 用户通过控制台或者SSH连接到登录节点，提交作业。

创建作业 ×

* 作业名： 10/30
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

* 集群名称：

* 软件信息：

* 作业优先级：

* 失败重运行： ☐

* 作业执行命令：

* 用户名：

* 密码：

执行文件路径：

启动作业队列： ☐

标准输出路径：

错误输出路径：

环境变量：

例如job1.sh里的内容如下，可以看出需要两个计算节点。

```
#!/usr/bin/env bash
#PBS -l select=2:ncpus=1

export MODULEPATH=/opt/ehpcmodulefiles/
module load lammps-mpich/31Mar17
module load mpich

mpirun lmp -in ./in.intel.lj
```

7) 两分钟左右，从控制台可以看到，自动扩容了两台计算节点。

集群：

pbs-demo

节点类型：

计算节点

☐	节点ID/IP地址	主机名称	节点类型	状态	配置	资源使用量	加入时间	到期时间	操作
☐	i-bp10mytzeewq9v691mks 私网：192.168.1.18	compute1	计算节点	● 初始化的	CPU:1核 内存:1GB	CPU:0核 内存:0.00GB	2017-12-10 01:55:11	-	重启 更多
☐	i-bp1cnaxgsvnidwg64g 私网：192.168.1.19	compute2	计算节点	● 初始化的	CPU:1核 内存:1GB	CPU:0核 内存:0.00GB	2017-12-10 01:55:11	-	重启 更多

8) 几分钟后，计算节点ready，可以看到作业开始运行。

作业

华北 2

华东 1

华东 2

华南 1

刷新

集群：

pbs-demo

作业名称	状态	优先级	开始时间	结束时间	创建者	操作
job.sh	R	0	Sat Dec 9 18:04:01 2017	Sat Dec 9 18:04:01 2017	testuser1@login0	详情

作业运行完毕之后,可以通过控制台看到作业详情。

作业名称： job.sh	作业脚本路径：
集群名称： ehpc-T1eM3rEbY4	启用作业队列： 否
软件类型： undefined, undefined, undefined, undefined, undefined	环境变量： env1=value1
开始时间： Sat Dec 9 18:04:01 2017	
最后更新时间： Sat Dec 9 18:44:11 2017	
作业状态： F	
作业重运行： 否	
创建者： testuser1@login0	
标准输出路径： login0:/home/testuser1/job.sh.o4	
错误输出路径： login0:/home/testuser1/job.sh.e4	

9) 几分钟之后，计算节点被释放。

集群：

pbs-demo

节点类型：

计算节点

☐	节点ID/IP地址	主机名称	节点类型	状态	配置	资源使用量	加入时间	到期时间	操作
--------------------------	-----------	------	------	----	----	-------	------	------	----

没有数据

10) 从操作日志可以看到，扩容和缩容的日志记录。

操作日志

华北 2

华东 1

华东 2

华南 1

集群：

pbs-33

操作类型	日志级别	内容	提交时间
DeleteNode	信息	Success to delete node i-bp19cjs81mh1io7a8eme compute72	2017-12-05 11:59:34
DeleteNode	信息	Begin to delete nodes compute72 compute72	2017-12-05 11:59:22
AddNode	信息	Success to add nodes i-bp19cjs81mh1io7a8eme compute72	2017-12-05 11:52:06
AddNode	信息	Begin to add 1 nodes	2017-12-05 11:47:45

集谛

弹性高性能计算E-HPC的集谛是针对E-HPC集群提供的性能监控与性能剖析平台，您可以通过 集谛完成监控集群性能指标、查看集群性能历史记录、分析进程级的性能热点等操作。

说明：若您尚未拥有E-HPC集群，请先[创建集群](#)。

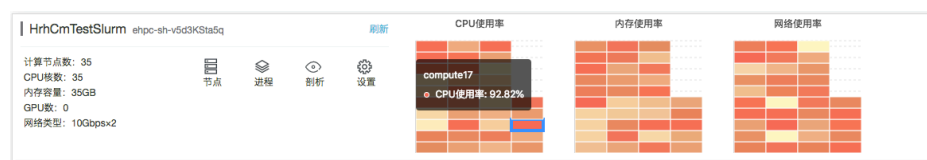
进入集谛界面

进入E-HPC管理控制台，单击左侧栏的集谛标签，可进入集谛界面。

集谛包含四个主要功能：性能大盘、节点性能、进程性能和性能剖析。

性能大盘

性能大盘界面能够呈现当前用户的集群基本信息，包含集群基本信息和集群节点性能热力图两部分。

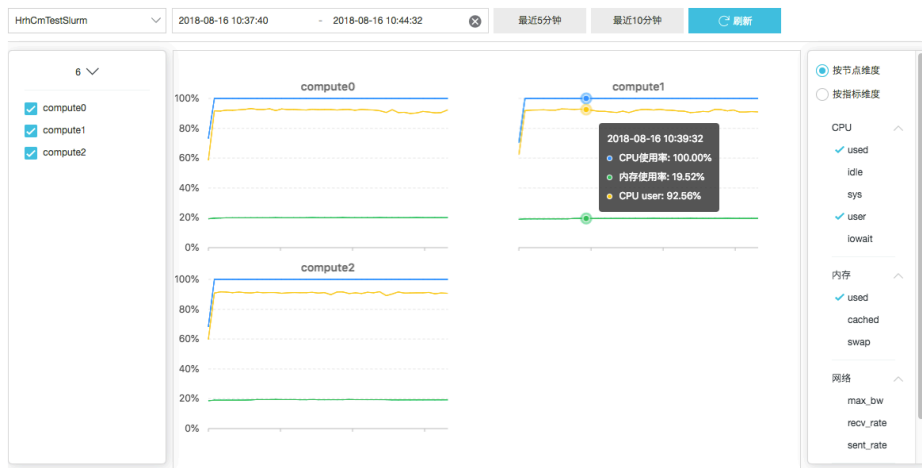


如上图所示，左侧是集群基本信息和操作按钮，其中基本信息包含集群名称、集群ID、资源配置（CPU、内存等）。中部的四个操作按钮中，节点、进程、剖析按钮可直接跳转到该节点对应的节点性能、进程性能和性能剖析界面，设置按钮用于设置大盘展示的性能指标，目前可选择的指标为：CPU使用率、内存使用率、网络使用率、磁盘吞吐率和磁盘使用率，最多可同时选择3个指标展示。

右侧是节点性能热力图，颜色越深代表该指标的负载越高。您可以单击感兴趣的节点，该节点将以蓝色边框显示，此时单击节点按钮将直接进入该节点的性能视图。

节点性能

节点性能界面供用户查询某个集群下的具体节点指标，您需要在左侧选择集群与节点，右侧指标栏显示性能指标，集谛将会以图表方式呈现节点历史性能信息。您也可以单击“选择作业”下拉框，选择之前从E-HPC控制台提交的作业，集谛会自动列出作业关联的节点和运行起止时间，以方便查询具体作业的性能信息：



上图展示的是作业ID为6的三个节点性能信息，包含CPU使用率、内存使用率和用户态CPU使用率三项指标。您可以选择按节点维度或者指标维度展示性能数据，节点和指标都可多选。

- 按节点维度展示：每个子图展示的是一个节点的性能数据，不同的指标显示为不同的曲线；
- 按指标维度展示时：每个子图展示的是一个指标的性能数据，不同的节点显示为不同的曲线。

进程性能

进程性能供用户查询/分析某个节点的进程级性能数据。您需要在左侧选择集群和具体的节点，图表中将会展示出一个时间段内Top 5进程CPU占用率，鼠标移动时会在图表下方显示具体时间点的Top5进程信息。您也可以单击“选择作业”下拉框，选择之前从E-HPC控制台提交的作业，集谛会自动列出作业关联的节点和运行起止时间，以便查询具体作业的进程性能信息。



上图展示的是作业ID为6、节点名为compute0的进程性能数据，可以看到节点正在执行LAMMPS计算任务，进程lmp的CPU占用最高，达到97%以上。

单击图表后，图表上方将出现5个启动剖析的按钮，分别对应单击时间点的Top5进程ID，您也可以单击启动剖析按钮进行性能剖析。

性能剖析参数设置

集群:

HrhCmTestSlurm

节点:

compute0

进程:

14907

* 剖析时长(秒):

300

* 采样频率:

2000

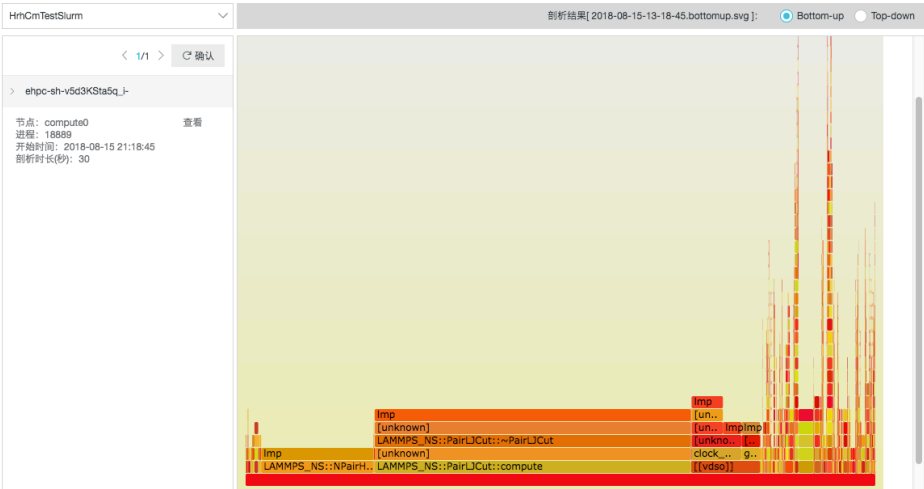
确认

取消

性能剖析需要配置剖析时长和采样频率参数。单击确认后E-HPC将在该节点上剖析该进程的函数级运行信息，具体的剖析结果将在性能剖析界面查询显示。

性能剖析

性能剖析界面查询并展示剖析结果，左侧下拉框选择集群将会自动列出该集群上曾经进行过的剖析记录，每项记录都可展开查看详细信息。单击详细信息内的“查看”按钮，将会显示性能分析的火焰图，您可以查看函数级的运行信息，分析性能热点函数，为具体的性能优化提供参考。



作业管理

作业管理

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作业相关的创建作业、停止作业、查看作业状态等功能，用户可通过作业管理功能快速创建作业。

进入作业界面

进入E-HPC管理控制台，点选左侧栏的[作业](#)标签，进入如下界面：

创建作业

操作步骤

1. 点击作业界面右上角的“创建作业”按钮，
2. 在弹出的界面中配置需要创建的作业信息，
3. 点击“确认”按钮可将作业提交到集群执行。

集群名称

HrhJobTestP

软件信息

openmpi, lammps-openmpi

作业名

LammpsTest10/30

作业模板

lammps-test

用户名

alibaba

密码

作业执行命令

./lammpsTest/lammps.cbp

后处理命令

./lammpsTest/lammps_post.sh

作业文件

http://hrh-test.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.cc选择文件

下载后解压

☒

自动解压到以作业名命名的目录下。

解压命令

tar xzf

启动job array

☐

作业优先级

-

0

+

标准输出路径

./LammpsTest12/512

错误输出路径

./LammpsTest12/512

作业变量

+

Name

Value

作业相关参数说明如下：

- 作业名：该作业的名称，所设置的作业名将会在作业列表中展示，另外如需自动下载解压作业文件，解压目录也以作业名命名。
- 作业模板：可选择已配置的作业模板快速创建作业。
- 用户名/密码：执行该作业使用的用户名和密码，该用户名需要提前在“用户”界面创建。
- 作业执行命令：向调度器提交的作业执行命令，可以是脚本文件，也可以是一段命令文本。
- 后处理命令：作业执行完成后的后处理脚本。
- 启动job array：是否启用调度器的job array功能。

作业文件：可选择一个已上传到OSS上的作业文件。用户可以将作业执行脚本、作业输入数据文件以及后处理脚本打包为一个压缩包上传到OSS，E-HPC在执行作业时可自动下载。点击“选择文件”按钮，可以打开OSS资源管理器对话框，展示当前区域下的OSS bucket。如果用户事先没有创建OSS

注意：使用此功能需先开通OSS服务。

注意: E-HPC会将压缩包解压到当前工作目录（即用户的home目录）下以作业名命名的文件夹中，因此如果要执行压缩包内的脚本，需要加上作业名目录，如图中“作业执行命令”所示。

- ## 查看作业

点击作业列表的“查看输出”按钮，可以查看OSS上的作业输出文件：

如下图所示，点击链接即可下载文件：

×

注意：

- 36



停止作业

处于“QUEUE”或“RUNNING”状态的作业可以停止。点击作业详情界面的“停止作业”即可。

作业模板管理

弹性高性能计算E-HPC的管理控制台提供了作业模板相关的创建模板、删除模板、编辑模板等功能，用户可通过作业模板管理功能，快速创建作业。

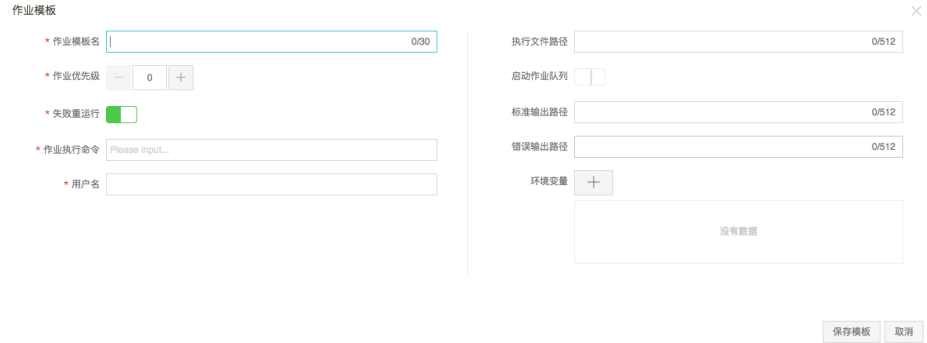
进入模板界面

进入E-HPC管理控制台，點選左侧栏的模板标签，进入如下界面：



创建作业模板

点击界面右上角的“创建作业模板”，在弹出的界面中可填写作业模板信息，具体参数可参考作业管理。



点击“保存模板”可保存该模板，同一个区域下最大可保存20个作业模板，作业模板名不能重复。

编辑作业模板

点击模板管理界面的“编辑”按钮，在弹出的窗口中可以修改作业模板的参数：

作业模板

作业模板名

Template3

9/30

作业优先级

—

0

+

失败重运行

作业执行命令

~/bin/ping -c 100 localhost

用户名

alibaba

执行文件路径

0/512

启动作业队列

标准输出路径

0/512

错误输出路径

0/512

环境变量

+

没有数据

保存模板

由模板创建作业

取消

点击“保存模板”将保存修

改后的参数。点击“由模板创建作业”将进入创建作业界面：

作业模板

作业模板名

Template3

9/30

作业名

0/30

集群名称

请选择

▼

软件信息

作业优先级

—

0

+

失败重运行

作业执行命令

~/bin/ping -c 100 localhost

用户名

alibaba

密码

执行文件路径

0/512

启动作业队列

标准输出路径

0/512

错误输出路径

0/512

环境变量

+

没有数据

保存模板

创建作业

取消

需要填写作业名、选择运行

作业的集群并填写执行作业的用户密码，点击“创建作业”即可向指定集群提交作业并执行。

删除作业模板

点击模板管理界面的“删除”按钮，可删除相应作业模板。

E-HPC支持LSF集群

E-HPC支持创建LSF集群，对于LSF集群进行扩容，缩容，作业管理，用户管理等功能。在创建LSF集群之前，用户首先需要创建包含LSF的自定义镜像，然后联系我们申请开放创建LSF集群的功能。

创建LSF自定义镜像

当前E-HPC支持LSF的版本为9.1.3，操作系统是CentOS 6.8/6.9

38

用户登录阿里云ECS控制台创建实例，镜像选择CentOS，6.9 64位



镜像 * 公共镜像 自定义镜像 共享镜像 镜像市场 ?

CentOS 6.9 64位 安全加固 ?

通过SSH，登录到该实例，将LSF 9.1.3相关安装配置，license文件拷贝到/usr/local/lsf_distrib目录下，例如

```
lsf9.1.3_documentation.tar.Z
lsf9.1.3_lsfinstall_linux_x86_64.tar.Z
lsf9.1.3_linux2.6-glibc2.3-x86_64.tar.Z
platform_lsf_std_entitlement.dat
```

- 解压安装文件

```
cd /usr/local/lsf_distrib
zcat lsf9.1.3_lsfinstall_linux_x86_64.tar.Z | tar xvf -
```

- 修改install.config文件，修改设置以下相关的配置项，注意value一定要和以下一致

```
LSF_TOP="/opt/lsf"
LSF_ADMINS="lsfadmin"
LSF_CLUSTER_NAME="ehpc-lsf-cluster"
LSF_MASTER_LIST="<LSF_MASTER_LIST>"
LSF_ENTITLEMENT_FILE="/usr/local/lsf_distrib/platform_lsf_std_entitlement.dat"
LSF_TARDIR="/usr/local/lsf_distrib/"

SILENT_INSTALL="Y"
LSF_SILENT_INSTALL_TARLIST="All"
```

- 修改lsfinstall，注释掉egoconfig

```
if [ "$_lsfconfig_stat" = "0" ]; then
# egoconfig
```

- 安装ed

```
yum -y install ed
```

- 登录ECS控制台，实例页面，选择“创建自定义镜像”



关于使用实例创建自定义镜像，可以参照https://help.aliyun.com/document_detail/35109.html

使用自定义镜像创建E-HPC集群

- 打开E-HPC控制台，选择创建集群
- 在第二步“软件配置”里选择刚刚创建的自定义镜像，调度器选择Isf

1.硬件配置

2.软件配置

3.基础配置

* 镜像类型:

自定义镜像

* 操作系统:

lsf-custom-image4

* 调度器:

☐ pbs ☒ lsf

- 创建集群的其他步骤，参照[创建及配置集群](#)