

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)

在左上角部分，可以看到地域选择按钮，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。

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

集群状态

- 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。

基本信息

- 集群ID：ID是E-HPC管控系统自动分配的唯一标识，用户无需修改。
- 公网IP：该IP可定位到专有网络的**弹性公网IP**界面，通过搜索该IP地址，查询更多信息和操作。
- 可用区：关于可用区的说明，请参考地域和可用区。
- 创建时间：集群创建开始安装时间。
- 集群描述：在这里可以修改集群名称和对该集群的描述信息。**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。

应用信息

部署方式：部署方式有三种（标准，精简，One-box），用户可根据自己实际需求在创建集群时进行选择。

调度器：目前centOS_7.2操作系统下可选的调度器有pbs、slurm、opengridscheduler和deadline四种，centOS_6.9操作系统下可选的有pbs、gridengine、cube和lsf四种。其中LSF是商业调度器，需要客户自己的自定义镜像，设置license才可以使用。

域账号服务：目前可选的有nis和ldap两种。具体请参考镜像，调度器，域账号类型说明，查看相关内容。

操作系统：根据不同镜像的选择，会有不同的操作系统，目前主要是centOS_6.9和centOS_7.2两种可用操作系统。如，公共镜像下这两种都会包含，上图中选择了7.2的操作系统。

软件管理：用来安装用户执行作业需要的软件系统，具体操作请参照 软件管理详细操作说明。

资源信息

- 这一部分通过表盘的方式直观的显示集群 **计算节点**，**核数**，**内存** 使用的情况。
- 资源使用报表：报表显示指定时间段内，集群各个用户提交的作业数量，以及对应的集群资源使用量。目前仅支持PBS集群，且遵循整点统计原则。

集群详情

在E-HPC管理控制台的集群页的集群左侧，点击 **查看详情** 按钮，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，存储配置，集群TOPO等。

集群HRHLammpsTest 刷新

基本信息		
集群ID : ehpc-hz-Rbuw6uKkNP	状态 : ● 运行中	地域 : 华东1 (杭州)
安全组ID : sg-bp1853xzzbsbm76qtl33	虚拟交换机ID : vsw-bp16z96z058jauwk3pgw2	密钥对名称 :
Scs集群 :	客户端版本 : 1.0.41	描述 :
后处理脚本 Uri :	后处理脚本 Args :	

节点信息	
开启高可用 : 否	
管控节点数量 : 1	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.sn1.medium (CPU : 2核 内存 : 4GB)
登录节点数量 : 0	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 : 008b648bcb
挂载协议 : nfs	挂载点 : 008b648bcb-sca54.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打开集群，点开目标集群左侧更多按钮，操作更多 -> 修改信息。或者可直接在集群基本信息的 集群描述来修改信息。

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:** 16/64
长度限制2~64个字符

*** 集群描述:** 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进入集群，找到要扩容的集群，点击右侧“扩容”按钮，会弹出扩容的配置界面，如下所示：

集群扩容
×

基本配置

集群名称： Test_Job_FF

* 可用区： 华东1（杭州）可用区 B

* 虚拟交换机ID： ecs-vsw-12345678

* 付费类型： 包年包月 按量付费 抢占式实例

* 新增计算节点数量： ecs.n1.small 1

* 镜像类型： 公共镜像

* 操作系统： CentOS_7_2_64

队列： workq

系统盘大小： 40

系统盘大小取值在40-500（GB）之间。默认使用高效云盘，当前可用区无高效云盘时，会自动使用SSD云盘。

当前配置

可用区	cn-hangzhou-b
实例规格	ecs.n1.small
计算节点数	5
CPU	5核
内存	8GB
GPU	N/A

[《E-HPC服务条款》](#)

总价：0.00 /小时 省：NaN /小时

立即购买
取消

- E-HPC可支持跨可用区扩容，用户依据实际需求选择可用区，以及对应区域的虚拟交换机，若没有可用交换机，请前往“专有网络 VPC”进行创建。

然后选择付费类型，新增计算节点数量，镜像类型，操作系统。

“镜像类型”说明：

用户在对计算节点扩容时，若选用镜像类型为自定义镜像，则必须用以计算节点为基础创建产生的自定义镜像，不可用以登录节点或管理节点为基础创建的镜像，否则扩容会产生异常。

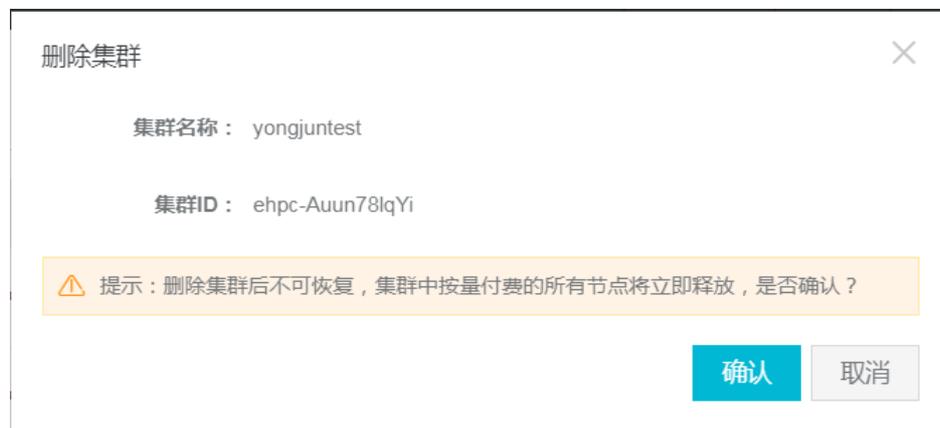
选择该扩容节点要加入的队列，否则会加入到默认队列。

- 扩容的系统盘的大小，该值默认和集群创建时硬件高级配置下的系统盘大小保持一致。
- 最后，用户确认同意《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，点击目标集群右侧操作栏对应更多 按钮，选择 释放按钮，弹出释放集群界面，如下图所示：



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

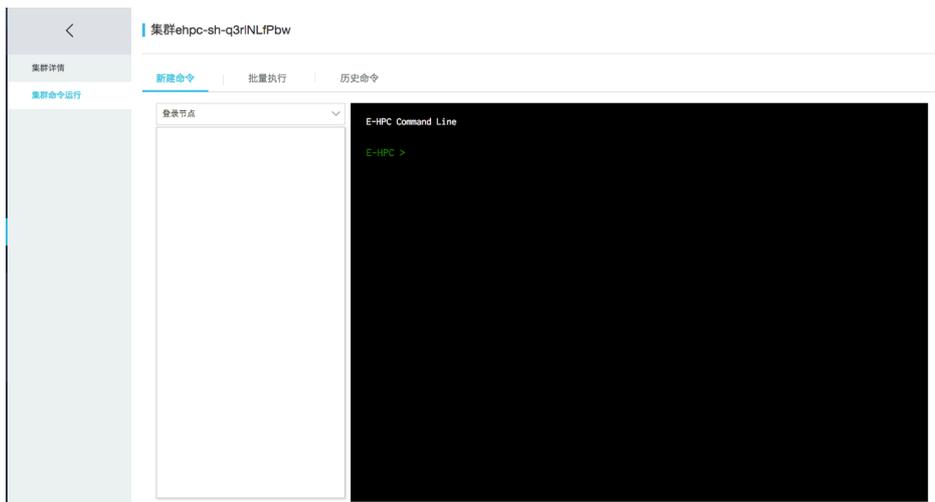
进入集群界面

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。

进入E-HPC管理控制台。

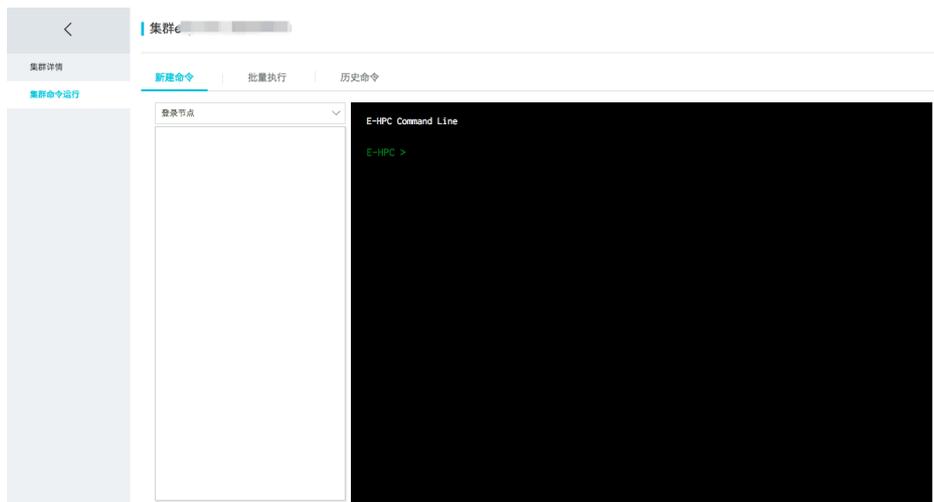
前往“集群”页签，在指定集群的右侧点“执行命令”按钮，页面跳转到执行命令行的界面。

如下图所示，在“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：

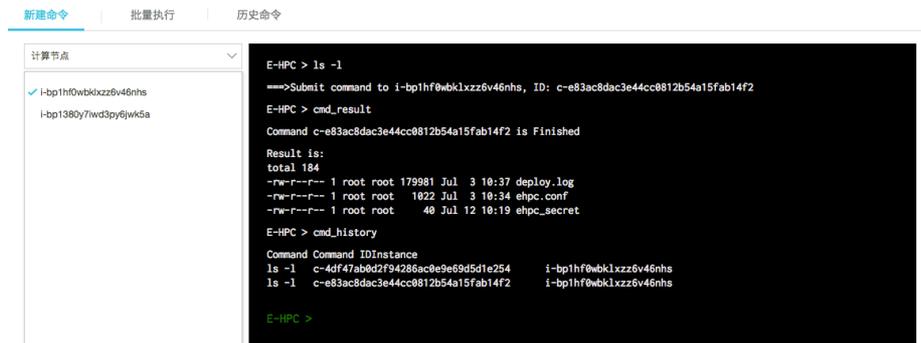


由于命令是异步执行，因此提交后只会返回本次命令的执行节点id，以及命令id。一般情况下命令会在提交到节点之后立即执行，当节点负载较高或多个用户同时提交命令时，命令会排队执行。

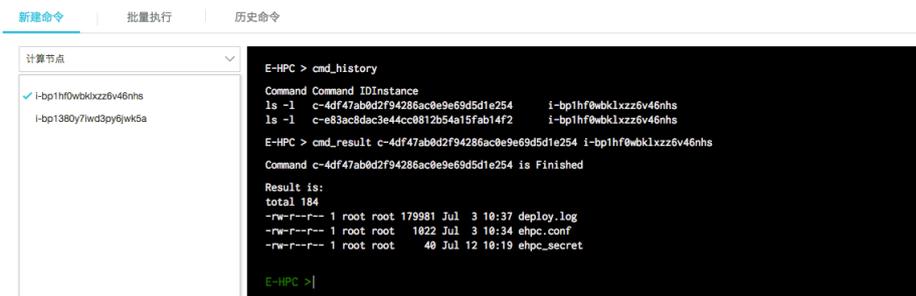
如需查看上次命令的执行结果，可输入内置命令cmd_result。如果命令未执行完成，将会返回空。



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：

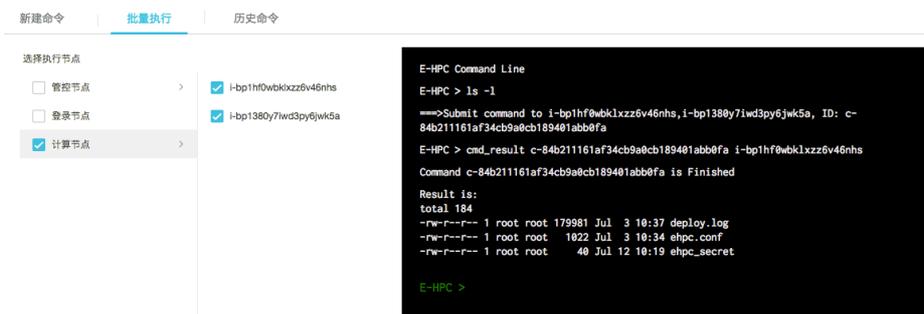
- 远程命令执行的默认路径为/root。
- 远程命令执行的超时时间为10秒，如果节点在执行命令时所需的时间超过10秒命令将执行失败

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。

停机

在E-HPC管理控制台的集群页的集群信息表中，点击目标集群右侧对应操作栏的“更多”按钮，选择“集群停机”按钮，弹出集群停机界面，如下图所示：



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



再启动

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，点击目标集群右侧对应操作栏的“更多”按钮，选择“集群启动”按钮，弹出集群启动界面，如下图所示：

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、删除、停机等功能，以及调度器管理功能，如节点队列创建、迁移、删除。

进入节点管控界面

进入E-HPC管理控制台，点选左侧栏的[节点和队列](#)标签，进入如下界面：

节点ID/IP地址	状态	主机名称	配置	资源使用量	付费类型	可用区	虚拟交换机ID	加入时间	操作
i-hp13g7hg* 私网: 192.168.211.23	运行中	compute0	CPU:1核 内存:1GB	CPU:0核 内存:0.00GB	按量付费	cn-hangzhou-b	vsw-bp1igd84da*	2019-05-20 11:21:48	重启 更多
i-hp15fg3f6 私网: 192.168.211.24	运行中	compute1	CPU:1核 内存:1GB	CPU:0核 内存:0.00GB	按量付费	cn-hangzhou-b	vsw-bp1igd84da*	2019-05-20 11:21:51	重启 更多
i-hp15fka*	安装中	compute2	CPU:1核 内存:1GB	CPU:0核 内存:0.00GB	按量付费	cn-hangzhou-b	vsw-bp1igd84da*	2019-05-20 11:34:04	重启 更多

选择节点

选出需要调整的节点主要有以下步骤：

1. 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。

2. 选择集群

在地域标签下方，点击集群选择框旁边的下拉菜单，根据集群名称可选择节点所在的集群。

3. 选择节点类型

E-HPC集群主要有三种节点类型，可在节点类型按钮旁边的下拉框选择节点。

(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。您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。

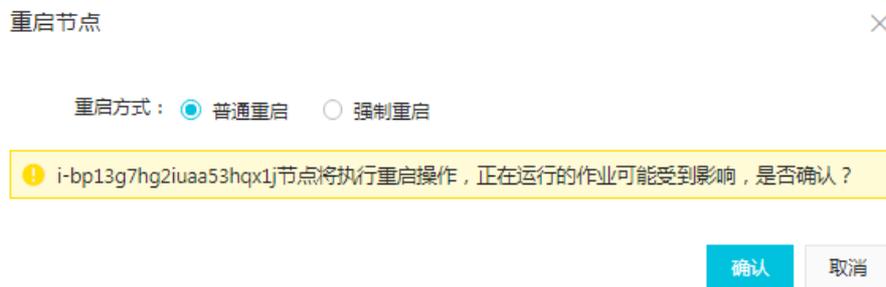
管理节点

完成以上节点所在地域、集群以及节点类型选择后，您可从节点概要信息表中找到需要调整的节点，在右侧操作栏点击“重启”或“更多”按钮，进行重启节点、重置节点、删除节点、查看详情等操作；对于多个节点，可进行批量停机、启动、删除操作。

1. 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。

点击重启按钮，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。

提醒：当节点重启无法修复故障时可尝试 **重置节点**。

2. 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，点击重置节点按钮，确认后即触发节点重置流程：

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

3. 删除节点

注意：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**。

- 单个节点删除：点开更多按钮下拉菜单，点击删除节点按钮，确认后节点将释放。
- 批量节点删除：勾选需要删除的计算节点，点击界面上方批量删除按钮，确认后选中节点将被全部释放。

4. 停机和启动

注意：仅**计算节点**可进行停机操作，**管控节点**和**登录节点**不可停机。

E-HPC控制台支持批量节点的停机和启动操作。

节点停机：首先，勾选需要停机的节点，然后点击上方停机按钮，确认后选中的节点将全部被停机。

节点启动：同理，勾选需要启动的节点（说明：节点已处在停机状态，否则不可启动），点击上方启动按钮，确认后停机节点将在5分钟左右被全部启动。

节点启动推荐使用上面的方法。

除了以上启动方式外，您也可以进入云服务器ECS管理控制台，选择左侧的**实例**标签，跳转后选择您集群所在region，找到被停止的实例，点击**实例ID**进入停止实例页面，最后在右上角，点击启动按钮，启动该节点。操作完成之后，再去E-HPC管理控制台的节点界面，查看节点启动成功。

调度器管理

为更高效的管理大量运行作业的计算节点，E-HPC推出调度器管理功能，将运行不同作业或执行不同任务的节点进行分类，加入到不同的队列进行分类管理。如下图所示：



首先，选择集群节点类型为计算节点，点击新建队列按钮，在弹出框输入队列名称，确认后队列创建完成。

说明：新建的队列，可以在“队列”栏的下拉框中查看。

其次，新创建的队列中不包含节点，您可以勾选需要移动到新队列的节点，然后点击移动到队列按钮，在弹出框选择目标队列，确认后即可完成迁移。

最后，删除不需要的队列时，只需要在“队列”栏选择需要删除的队列名称，然后点击删除队列按钮，确认后即可完成删除操作。

说明：1. 默认队列不可删除；2. 使用pbs调度器的集群，队列中存在节点时不可删除；

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: 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: ▼

* 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:

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

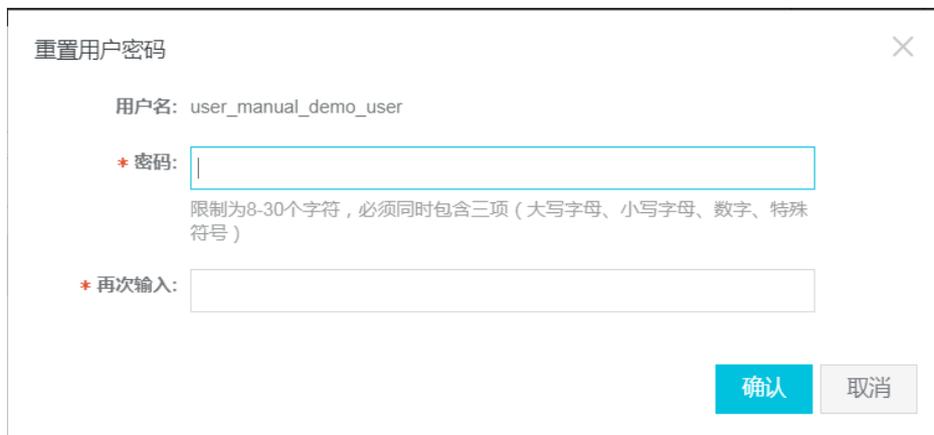
在用户列表中根据用户名找到需修改的用户，点击操作栏中对应的修改权限：



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。

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。

队列名	自动扩容	自动缩容	可用区	实例类型	竞价策略	每小时最高价格	
workq	否	否	cn-hangzhou-b	ecs.n1.large	不使用抢占式实例	0	编辑
				cn-hangzhou-e	ecs.n1.medium	不使用抢占式实例	0
low	是	是	cn-hangzhou-b	ecs.n1.small	不使用抢占式实例	0	编辑
				cn-hangzhou-f	ecs.n2.3xlarge	不使用抢占式实例	0
high	是	是	cn-hangzhou-f	ecs.n2.3xlarge	不使用抢占式实例	0	编辑

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。

多队列调度自动伸缩的策略

在多种类型业务和计算的驱动下，您可能需要在一个E-HPC集群里面运行不同类型的作业，而每种类型的作业对资源的需求是不一样的，例如，前处理作业需要普通8核32GiB内存的ECS虚拟机，后端计算性任务需要使用裸金属服务器。E-HPC为您提供支持多队列部署的功能以及自动伸缩支持多队列的弹性配置策略。

1. E-HPC支持多队列部署功能如下所示：

- 扩容的时候支持指定新的实例类型
- 创建集群和扩容的时候支持加入指定队列，如果队列不存在则会自动创建队列
- 提交作业的时候支持提交到指定的队列
- 支持跨AZ扩容和缩容，以解决单个AZ域内资源库存不足的问题

2. 自动伸缩服务支持多队列弹性策略的配置，队列配置说明：

- 队列名称 (QueueName) :为集群和节点指定的队列名称。
- 是否启动扩容(EnableGrow)和缩容(EnableShrink) :是否启动队列的自动扩容和缩容。
- 实例类型 (InstanceType) :队列目标扩容的类型。
- 竞价策略 (SpotStrategy) :扩充的实例需要配置的竞价方式。有三种选择：不使用抢占实例；设置上限价格的抢占实例；系统自动出价，最高按量付费价格。
- 每小时最高价格(SpotPriceLimit):在竞价策略为“设置上限价格的竞价实例”时，需要设定每小时最高价格区间。

3. 跨AZ自动伸缩，队列配置详细信息

选择自动伸缩页面中需要操作的队列，如low队列，点击最右侧编辑按钮，跳转至如下页面，开始配置：

队列配置
×

队列名 low

VPC vpc-bp1nq8oshqu

启动扩容： 启动缩容：

新建配置 + 增加

可用区 华东1（杭州）可用区 F cn-hangzhou-f

虚拟交换机ID vsw-bp1mg2crnc... 创建子网（交换机）

实例类型 ecs.n2.small 手动输入

竞价策略 系统自动出价，最高按量付费价格

每小时最高价格

配置清单

可用区	虚拟交换机ID	实例类型	竞价策略	每小时最高价格	
cn-hangzhou-e	vsw-bp1gbjqs55...	ecs.n1.medium	不使用抢占式...	0	✕
cn-hangzhou-b	vsw-bp1igd84x...	ecs.n1.large	不使用抢占式...	0	✕
cn-hangzhou-f	vsw-bp1mg2crnc...	ecs.n2.small	系统自动出价...	0	✕

配置步骤及说明：

- 1) 打开启动扩容，启动缩容按钮；
- 2) 在队列配置栏下选择目标可用区和目标虚拟交换机ID，如果目标可用区没有可用的虚拟交换机，可以点击页面中“创建子网（交换机）”按钮进行创建；
- 3) 选择目标扩容实例类型，或者可以手动输入；根据实际情况选择竞价策略；
- 4) 点击“增加”按钮,添加配置信息到配置清单中。

注意：集群在扩容时，按照配置清单中的由上而下的顺序扩容，只有当上一个实例类型库存不存在或者库存不足时才会跳开上一个，开始扩容下一个实例类型。

- 5) 点击左下角“确认”按钮，完成队列信息配置。

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lammmps算例

1) 创建集群, 选择安装的软件列表。

<input type="checkbox"/>	intel-mkl	2018
<input type="checkbox"/>	intel-mpi	2018
<input type="checkbox"/>	intel-tbb	2018
<input checked="" type="checkbox"/>	lammmps-mpich	31Mar17
<input type="checkbox"/>	lammmps-openmpi	31Mar17
<input type="checkbox"/>	mpich	3.0.4
<input checked="" type="checkbox"/>	mpich	3.2
<input type="checkbox"/>	mpitests-openmpi	4.1
<input type="checkbox"/>	mvapich2	2.2

2) 在软件配置界面的高级配置下，指定集群需要加入的队列，如low队列，此时该队列会自动创建。同时，也可以在节点和队列界面单独创建队列，具体操作请参照 [节点管理](#)。

3) 配置自动伸缩：启用自动扩容和缩容，启动目标队列的扩容和缩容，完成目标队列的信息配置。（对于pbspro来说，workq是默认队列，会自动创建，当新增加的nodes未指定队列时会默认加入到workq队列）

4) 自动伸缩启动之后，如果没有作业运行，几分钟之后,指定队列的计算节点都会被释放。

5) 通过控制台创建集群用户，用户组可以是普通权限组或者sodo权限组，本例设置为普通权限组。

6) 用户把相应的数据，及程序放到NAS共享存储上。

7) 创建并提交作业：用户可通过在线新建编辑，或者OSS文件上传的方式来进行SubmitJob的操作。具体操作流程，请参看 [作业管理](#) 模块的描述，进行作业信息配置和作业脚本文件创建。

例如 job.sh 脚本文件里的内容如下，可以看出需要1个计算节点。

```
* 文件名: /home/alibaba/ lammmps.pbs

1  #!/bin/sh
2  #PBS -l select=1:ncpus=1:mpiprocs=1
3  #PBS -j oe
4
5  export MODULEPATH=/opt/ehpcmodulefiles/
6  module load lammmps-openmpi/31Mar17
7  module load openmpi/1.10.7
8
9  echo "run at the beginning"
10 mpirun lmp -in ./lj.in
11
12
```

8) 两分钟左右，从控制台可以看到，low队列自动扩容了一个计算节点。

9) 几分钟后，计算节点ready，同时可以看到作业开始运行，并运行完成。

在作业运行完毕之后，可以通过控制台看到作业详情。

作业信息 ×

作业名称: LammpsTest	作业状态: FINISHED
任务ID: 2.scheduler	优先级: 0
集群ID: ehpc-hz-cs-000000000000	启用job array: 否
软件类型: openmpi_1.10.7,lammmps-openmpi_31Mar17	标准输出路径: scheduler/home/alibaba/LammpsTest.o2
用户名: alibaba@scheduler	错误输出路径: scheduler/home/alibaba/LammpsTest.e2
开始时间: Mon May 20 16:26:27 2019	
最后更新时间: Mon May 20 16:26:35 2019	
作业运行信息: Job run at Mon May 20 at 16:26 on (compute3:ncpus=1) and finished	

10) 几分钟之后，扩容产生的计算节点被释放。

11) 从操作日志可以看到，扩容和缩容的日志记录。其中，第一次缩容 (DeleteNode) 为集群原来的节点，第二次缩容为提交作业后扩容产生的Node。

操作日志

操作类型	日志级别	内容	提交时间
DeleteNode	信息	Success to delete node i-bp1aaggsx8or1d2gytkn compute3	2019-05-20 16:32:53
DeleteNode	信息	Begin to delete nodes i-bp1aaggsx8or1d2gytkn compute3	2019-05-20 16:32:41
AddNode	信息	Begin to add 1 nodes	2019-05-20 16:20:34
DeleteNode	信息	Success to delete node i-bp1fjkagok5lrezrtk89 compute2	2019-05-20 16:18:52
DeleteNode	信息	Begin to delete nodes i-bp1fjkagok5lrezrtk89 compute2	2019-05-20 16:18:40

SGE(SunGridEngine)支持自动伸缩配置

SGE队列如果为空，没有任何计算节点的时候，用户提交作业的时候，会提交失败，或者作业不会被分配到默认队列中。因此如果在SGE集群中使用自动伸缩，可以使用如下的方式之一：

- 保持队列中至少有一个节点，在自动伸缩配置页面，设置“例外节点列表”包含这个节点这样保证集群至少有一个计算节点，如果集群需要保持最小规模的话，推荐使用这种方式
- 添加dummynode到队列中，可以参考以下的设置

```
以下操作都是在调度节点上执行
1, 在/etc/hosts增加以下记录
127.0.0.1 dummynode0
2, 将dummynode0加入默认节点组
qconf -aattr hostgroup hostlist dummynode0 @allhosts
用户也可以使用类似命令将dummynode0加入到别的节点组或者队列
```

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](#)

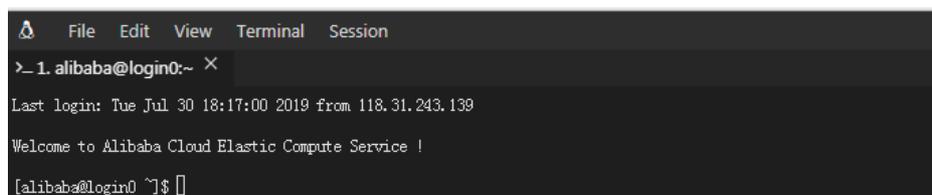
在集群节点登录之前，首先需要为集群添加至少一个用户，请参考[用户管理](#)。E-HPC提供了如下两种登录方式：

1. 控制台远程连接

进入E-HPC管理控制台首页，在集群页面对应集群的右侧，点击“远程连接”按钮，弹出远程连接框，输入添加的用户名和密码，点击“连接”。



最后，在新页窗口跳出登录节点终端页面，则表示登陆成功。



2. 第三方软件登录

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”，跳转至节点界面，在集群栏下拉框选择目标集群，然后在节点类型栏下拉框选择“登录节点”，跳转至如下界面，在IP地址/ID栏会显示登录节点对应的公网IP地址和私网IP地址。



在获取到公网IP地址之后，通过普通ssh终端使用预设root账户和集群密码即可登录。默认登录shell为bash。

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**即可获得外部可临时访问的URL。

作业管理

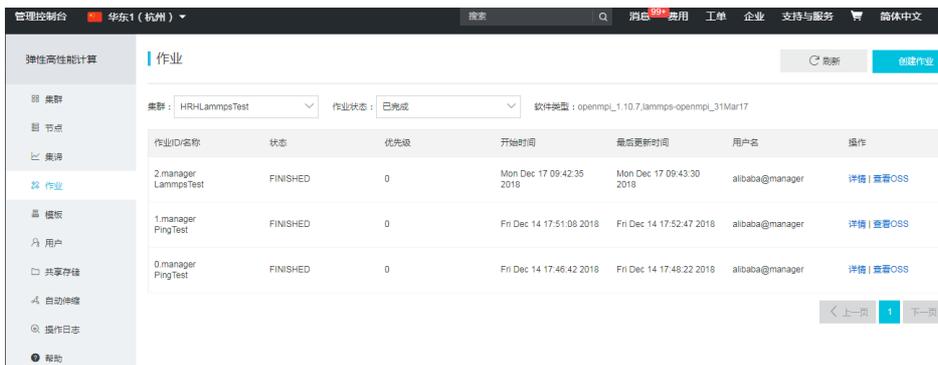
控制台提交作业

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：

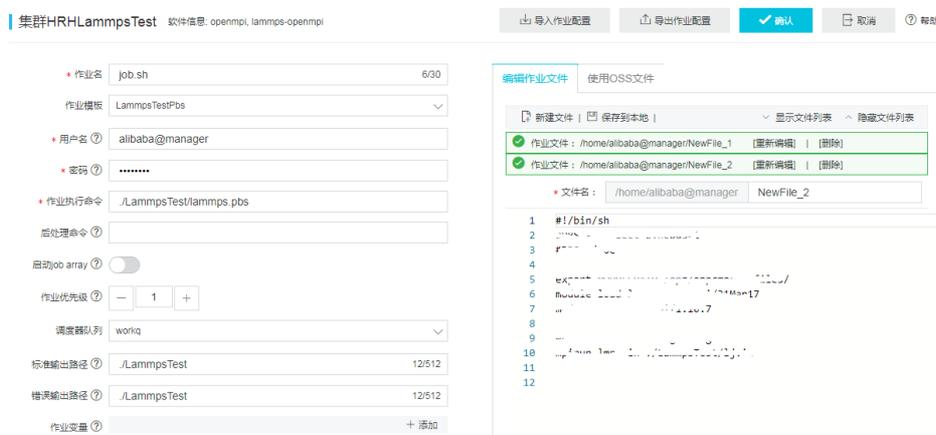


上图，显示为已完成的作业列表，用户也可以切换到未完成页面，查看正在进行的作业列表。

创建作业

操作步骤

- 点击作业界面右上角的“创建作业”按钮；
- 在弹出的界面（如下图所示）中配置需要创建的作业信息。用户也可以通过直接**导入作业配置**文件的方式来配置信息。若用户需要保存该配置信息，可通过**导出作业配置**文件，将作业信息保存在本地。
- 所有信息配置完之后，点击“确认”按钮可将作业提交到集群，开始执行。



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。
- 作业优先级：在提交了多个作业时，对于需要优先执行的作业，用户可通过设置高优先级来优先执行

- 调度器队列：在创建集群时，若计算节点已加入了指定的QUEUE，则需要将作业提交到对应的指定Queue；若没有指定，则需要将作业提交到调度器默认的队列中，否则作业会执行失败。
- 编辑作业文件：可在线新建，编辑，保存作业文件。当存在多个作业文件时，可通过显示文件列表来进行查看、编辑、删除操作。
- 文件：作业要执行的脚本文件名称。为了方便查询区分，请设置时注意名称区别。

使用OSS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 bucket，可以点击资源管理器对话框内的“OSS控制台上传”链接，在弹出的OSS控制台界面中创建OSS Bucket。OSS上传流程具体可参考OSS帮助文档。

注意：使用此功能需先开通OSS服务。

下载后解压：打开该选项后，E-HPC在执行作业之前会自动解压作业文件包，目前支持zip格式、tar打包以及gzip格式。

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。

- 标准输出路径/错误输出路径：定义Linux系统的stderr/stdout输出重定向路径，包含输出文件名。
- 环境变量：运行作业时需要的环境变量，环境变量会输出到作业执行脚本中，可以在脚本内引用。点击“+”号可按名值对的方式配置。

查看作业

- 点击作业列表右侧的“详情”按钮，可以查看到如下的作业详细信息。如果是正在运行中或者排队中的作业，可在作业信息界面右下角停止作业。

The screenshot displays the E-HPC console interface. On the left is a navigation sidebar with options like '弹性高性能计算', '集群', '节点', '队列', '作业', '模板', '用户', '共享存储', '自动伸缩', '操作日志', and '帮助'. The main area shows a '作业' (Jobs) table with columns for '作业ID/名称' and '状态'. Three jobs are listed, all with a 'FINISHED' status. A modal window titled '作业信息' (Job Information) is open, showing details for a job named 'LammpsTest'. The job status is 'FINISHED'. Other details include: 任务ID: 2.manager, 优先级: 0, 集群ID: ..., 启用job array: 否, 软件类型: openmpi_1.10.7_lammps-openmpi_31Mar17, 标准输出路径: manager:/home/alibaba/LammpsTest.e2, 用户名: alibaba@manager, 错误输出路径: manager:/home/alibaba/LammpsTest.e2, 开始时间: Mon Dec 17 09:42:35 2018, 最后更新时间: Mon Dec 17 09:43:30 2018, and 作业运行信息: Job run at Mon Dec 17 at 09:42 on (compute0.ncpus=2) and finished. A '停止作业' (Stop Job) button is visible in the bottom right corner of the modal.

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。

命令行提交作业

准备工作

在使用命令行提交作业前，请确保：

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

您需要先通过ssh客户端远程登录到集群。

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目前支持多种主流的高性能计算作业调度器：

- PBS pro
- SLURM
- SGE (Sun GridEngine)

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。

SGE

```
qsub -V -b y -cwd hostname
qsub -V jobscript.sh
```

更详细的使用参考qsub的manual

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，点击左侧栏的模板标签，进入如下界面：

模板名	优先级	作业执行命令	失败重运行	用户名	操作
Template2	0	gromacs.qbs	true	alibaba	编辑 删除
ping-work	0	-- /bin/ping -c 100 localhost		alibaba	编辑 删除
Template0	0	gromacs.qbs		alibaba	编辑 删除
Template1	0	gromacs.qbs	false	alibaba	编辑 删除
Template	0	gromacs.qbs	false	alibaba	编辑 删除

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。

保存模板 取消 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：



改后的参数。

点击“由模板创建作业”将进入创建作业界面需要填写作业名、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。

VNC连接

弹性高性能计算E-HPC的通过VNC方式提供了集群远程可视化功能。用户可在创建集群时部署远程可视化服务，并且能够直接通过控制台Web方式访问远程图形桌面。

说明：若您尚未拥有E-HPC集群，请先创建集群。

部署远程可视化服务

远程可视化服务需要先创建集群。在创建集群的第二步即“软件配置”中，可以打开“可视化服务”开关，这样新集群将自动部署可视化服务。

首次使用可视化

集群创建成功后，可通过集群信息上方的“VNC”按钮打开远程可视化窗口，首次使用时需要先完成以下步骤：

1. 打开远程可视化窗口，
2. 点击窗口顶部的“启动服务”按钮，在弹出的对话框中点击确定，
3. 点击“修改密码”按钮，输入集群用户密码（在创建集群时指定）以及远程可视化连接的密码，点击“确认”。
4. 点击窗口顶部的“连接”按钮，
5. 在弹出的“输入连接密码”对话框中，点击提示信息中的Link，打开新浏览器窗口

6. 目前的远程可视化连接采用安全链接，证书使用的是系统生成的自签名证书。需要允许浏览器访问。如果使用Chrome浏览器，可在弹的新窗口中点击“高级” - “继续前往”；如果使用Firefox浏览器，可在弹出窗口中点击“高级” - “添加例外”；您也可以直接在集群上导入自己的证书。
7. 操作完毕后，回到可视化窗口，输入密码点击确认，或重新打开远程可视化窗口，输入刚才设置的连接密码即可连接。

说明：

- 启动服务后需要等待3~5分钟再连接。
- 可视化服务默认使用root用户，但连接密码可以与集群用户密码不同。

打开/关闭可视化窗口

集群页面点击某个集群上方工具栏的“VNC”按钮，可以开启可视化窗口。

您还可以在作业页面上方点击“可视化窗口”按钮，开启可视化窗口。

窗口开启后，点击右上角的“关闭”按钮即可关闭窗口。关闭窗口并不会停止可视化服务，桌面上打开的应用仍然会保留。

停止/启动可视化服务

在远程可视化窗口中点击“停止服务”即可停止远程可视化服务。停止服务后，登录用户台的其他用户也无法使用该集群的远程可视化功能。

在远程可视化窗口中点击“启动服务”即可启动远程可视化服务。

E-HPC优化器

弹性高性能计算E-HPC优化器是针对E-HPC集群提供的性能监控与性能剖析平台，您可以通过E-HPC优化器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E-HPC优化器界面

进入E-HPC管理控制台，单击左侧栏的E-HPC优化器标签，可进入E-HPC优化器界面。

E-HPC优化器主要包含四个主要功能：性能大盘、节点性能、进程性能和性能剖析。

性能大盘

性能大盘界面主要呈现三部分内容：集群基本信息、集群节点性能热力图、操作栏。如下图所示：



- 顶部是集群名称和集群ID；
- 左侧是集群基本信息，包含计算节点数量、资源配置信息（CPU、内存容量、GPU数）。
- 中间是节点性能热力图，颜色越深代表该指标的负载越高。单击节点，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。
- 右侧是操作栏中，单击 节点、进程、剖析 按钮可直接跳转到节点性能、进程性能和性能剖析界面。
- 右上角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。

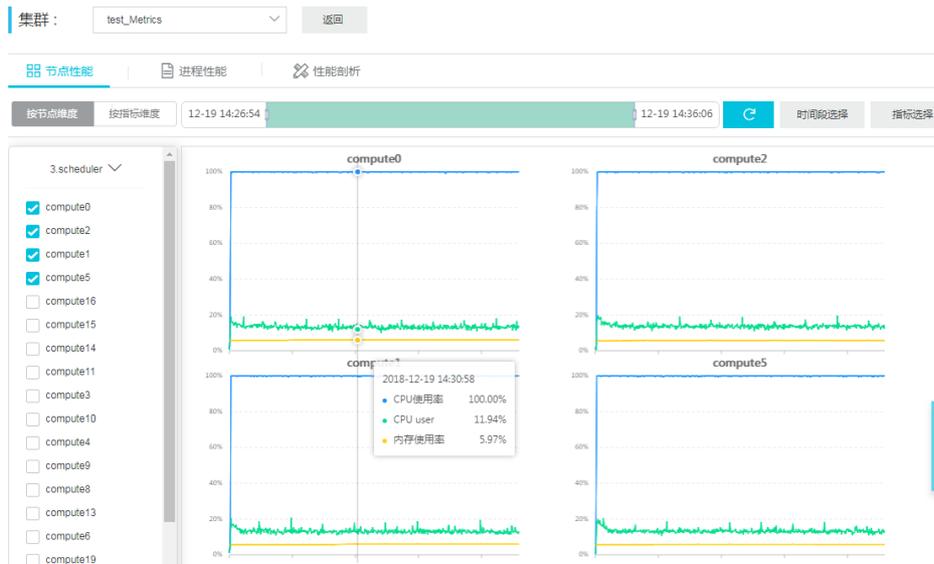
节点性能

节点性能界面可提供用户查询集群下指定节点各项指标的功能。

查询操作方法：

在左侧选择集群与节点（可多选），点击右侧指标选择按钮选择需要显示的节点性能指标（可多选），点击 时间段选择按钮选择需要查询的时间段，E-HPC优化器将会以图表方式呈现指定节点的历史性能信息。

也可以通过单击“选择作业”下拉框，选择之前从E-HPC控制台提交的作业，E-HPC优化器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。然后通过点击右侧指标选择按钮选择需要显示的节点性能指标，点击 时间段选择按钮选择需要查询的时间段。



如上图所展示，为作业3.scheduler下4个计算节点的性能信息，包含CPU使用率、内存使用率、CPU user 三项指标。

其次，除了选择按节点维度展示性能数据外，也是可选择按指标维度展示性能数据。

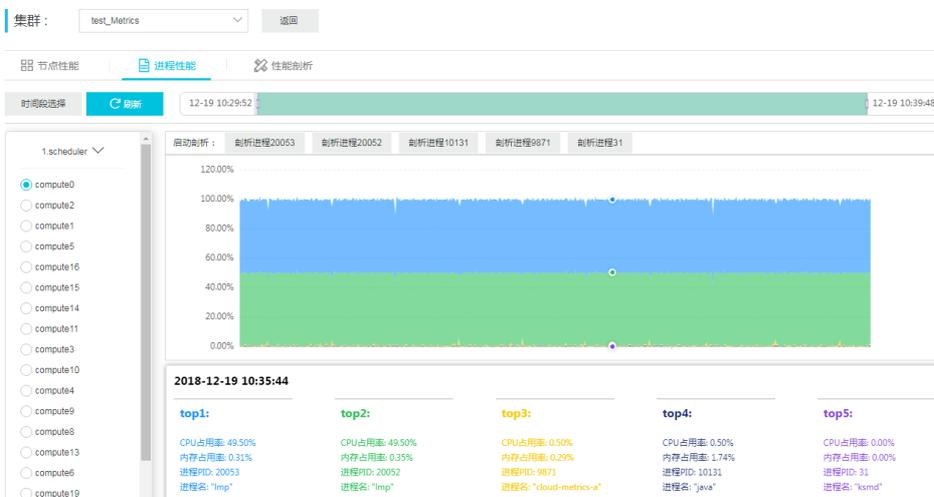
- 按节点维度展示：每个子图展示的是一个节点的性能数据，不同的指标显示为不同的曲线；
- 按指标维度展示时：每个子图展示的是一个指标的性能数据，不同的节点显示为不同的曲线。

进程性能

进程性能界面可提供用户 **查询/分析** 单个节点的进程级性能数据的功能。

查询操作方法：

- 在左侧选择集群并指定节点，右侧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。
- 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，E-HPC优化器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进程性能信息。



如上图所展示，是作业1.scheduler，计算节点名为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Imp的CPU占用最高，达到98%以上。本示例中作业脚本选择了2核的配置(select=20:ncpus=2:mpiprocs=2),故而存在两个Imp进程，其CPU占用率总和接近100%。

- 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，然后点击需要启动进程，接着会弹出性能剖析参数设置框，按照自己需要设置就可以，单击确认后启动剖析，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。

性能剖析参数设置

✕

集群： test_Metrics

节点： compute0

进程： 19373

* 剖析时长(秒)：

* 采样频率：

确认
取消

性能剖析

性能剖析界面可提供查询、展示、下载剖析结果的功能。

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。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。



创建混合云集群

E-HPC 混合云集群

您可以通过E-HPC创建HPC混合云集群，利用本地的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。

集群的调度节点（头节点），域账号管理节点都在本地，您可以通过 ([a href="#">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 集群头节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
- 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, 这里假设选择的区域是杭州 (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"}
]
```

注意 : 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](#)。

管理本地节点

E-HPC支持管理部署本地计算节点, 将本地计算节点加入到混合云集群, 也可以加入到云上的集群, 最终统一调度管理。目前支持API方式接入:

增加本地计算节点到E-HPC集群

调用 E-HPC OpenAPI AddLocalNodes，请参见 [混合云管理API](#)。

获取新增加的节点配置

调用 E-HPC OpenAPI GetHybridClusterConfig获取该节点配置信息，注意请求参数' Node' 必须设置为本地节点的hostname，请参见 [混合云管理API](#)。

登录本地计算节点运行如下命令安装配置E-HPC agent：

```
# 设置节点配置
echo -e "节点配置信息" > /root/ehpc.conf
# 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 ComputeNode -i
-r: # 指定节点角色
-i: # 如果本地计算节点已经安装配置好，指定这个选项就会跳过安装配置HPC集群调度相关服务
```

HPC容器应用

简介

E-HPC高性能容器应用可以让您使用容器进行高性能计算作业。例如您可以通过高性能容器应用使用自定义的容器应用镜像或是云端公共镜像。E-HPC高性能容器应用可以为您：减少每个节点的环境配置时间。保证镜像生态多样性的同时，与多种调度器结合使用从而提供弹性容器服务。提供基于高性能共享存储与高性能集群互联的安全、便捷的超算容器。

名词	描述
镜像	镜像是集群范围内的定义。每个集群需要单独进行镜像的拉取，在拉取之后才能对该镜像进行容器应用的部署。
容器应用	容器应用是用户区域范围内的定义。每个用户在每个区域内进行容器应用的创建，容器应用包含：容器应用ID、容器名、仓库路径、镜像标签、描述。
注册服务器 (Registry)	一个集中的存储、分发镜像的服务。
仓库	一个集中仓库 (Repository) 类似于代码仓库，是集中存放镜像文件的场所。
标签	每个仓库集中存放某一类镜像，往往包括多个镜像文件，通过不同的标签 (tag) 来进行区分。

镜像和容器应用的关系，就像是面向对象程序设计中的 **类** 和 **实例** 一样，镜像是静态的定义，容器应用是镜像运行时的实体。容器应用可以被创建、部署。一个Registry中可以包含多个仓库；每个仓库可以包含多个标签；每个标签对应一个镜像。以Ubuntu镜像为例，ubuntu 是仓库的名字，其内包含有不同的版本标签，如

, 14.04, 16.04。我们可以通过 ubuntu:14.04，或者 ubuntu:16.04 来具体指定所需哪个版本的镜像。如果忽略了标签，比如 ubuntu，那将视为 ubuntu:latest。

功能说明

高性能容器应用界面

进入E-HPC管理控制台，点选左侧栏的高性能容器应用标签，选择页面上容器应用标签，进入如下界面：



新增容器应用

点击右上角新增容器应用按钮，可以增加一个新的容器应用。新增容器应用填写信息释义如下：

- 类型：容器应用的类型，目前支持singularity。
- 容器应用名：自定义的容器应用名，每个用户每个区域内不可重复。
- 仓库路径：容器应用镜像的仓库路径，如果不填写Registry则为默认Registry，取值比如：busybox或tensorflow/tensorflow；如果填写Registry则例如：registry.docker-cn.com/library/busybox。镜像标签：取值例如 16.04，如果不填标签则为默认值latest
- 应用描述：选填，可以修改。
- 编辑：点击容器应用的右侧编辑按钮，可以对容器应用的描述进行编辑。

部署容器应用

点击容器应用的右侧部署容器应用按钮，可以在容器应用当中运行作业。其所填参数与提交作业相同，具体请见 提交作业。

注意：在部署容器应用前：

- 请确认使用的集群上已经拉取容器应用对应的镜像文件，并且镜像的状态为READY，具体拉取镜像的使用请参见本文档镜像管理部分。
- 请确认您已经创建有一个用户。

使用容器提交作业
✕

* 容器应用名

* 作业名

* 集群名称

* 作业优先级

* 作业执行命令

* 用户名

* 密码

启动job array

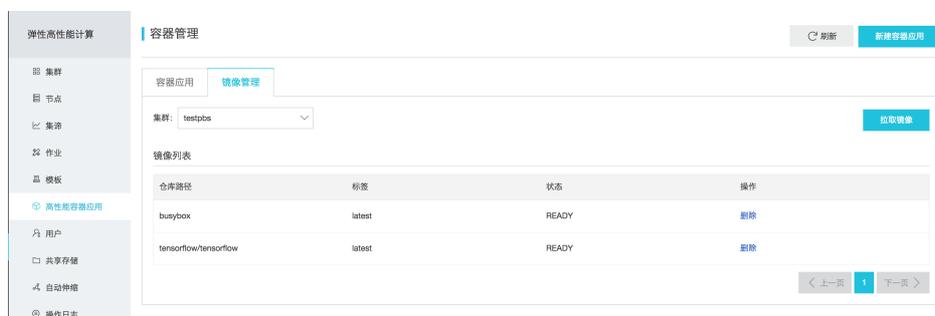
标准输出路径

错误输出路径

作业变量

删除容器应用

点击容器应用的右侧删除按钮，可以对容器应用的描述进行删除。镜像管理界面进入E-HPC管理控制台，点选左侧栏的高性能容器应用标签，选择页面上镜像管理标签，进入如下界面：



镜像管理

选取集群

在镜像管理界面的左上角集群下拉条中可以进行集群的选择。

拉取镜像

点击右上角拉取镜像按钮可以进行镜像的拉取。拉取镜像参数释义如下：容器类型：容器应用的类型，目前支持Singularity。仓库路径：容器应用镜像的仓库路径，如果不填写Registry则为默认Registry，取值比如：`busybox`或`tensorflow/tensorflow`；如果填写Registry则例如：`registry.docker-cn.com/library/busybox`。镜像标签：取值例如 `16.04`，如果不填标签则为默认值`latest`拉取后可以在下方镜像列表查看，状态取值为：`PULLING`（正在拉取中），`READY`（拉取完毕可以使用），`FAILURE`（拉取失败）。

使用流程

1. 创建集群，请参见 [创建集群](#)。

2. 在高性能容器应用->容器管理->容器应用->新建容器应用中，创建容器应用。
3. 在高性能容器应用->镜像管理->新建镜像中拉取对应的镜像，可以在页面中的镜像列表查看和管理集群中的镜像。
4. 将工程代码和作业文件放到节点上。
5. 在高性能容器应用->容器应用->部署该容器应用中提交作业。

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10.1，操作系统是CentOS 6.8/6.9

用户登录阿里云ECS控制台创建实例，镜像选择CentOS，6.9 64位



通过SSH，登录到该实例，将LSF 10.1相关安装配置，license文件拷贝到/usr/local/lsf_distrib目录下，例如

```
lsf10.1_lsfinstall_linux_x86_64.tar.Z
lsf10.1_linux2.6-glibc2.3-x86_64.tar.Z
.....
```

- 解压安装文件

```
cd /usr/local/lsf_distrib
zcat lsf10.1_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/lfs_distrib/platform_lsf_std_entitlement.dat"
LSF_TARDIR="/usr/local/lfs_distrib/"

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

- 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lsf

The screenshot shows the 'Software Configuration' step of the E-HPC cluster creation process. It features a progress bar with three steps: '1. Hardware Configuration', '2. Software Configuration' (which is the active step), and '3. Basic Configuration'. Below the progress bar, there are three configuration fields:

- * 镜像类型: 自定义镜像 (Custom Image)
- * 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

安装后脚本

使用场景

- 选择标准系统镜像创建E-HPC集群后，安装自定义的软件，或者配置软件环境；
- 选择自定义镜像创建E-HPC集群后，执行自定义脚本配置软件环境；
- 选择云市场镜像创建E-HPC集群后，执行云市场镜像指定的初始化脚本。

使用方法

控制台上创建集群，在“软件配置”页，点开“高级配置”项，在底部“安装后脚本”输入框中，填入需要在集群安装后执行的自定义脚本下载地址（支持http/https协议下载，推荐存放脚本到oss公开可读bucket），以及执行参数。

支持包含bash、python等可以在Linux Shell环境中运行的脚本类型，脚本第一行务必加上注解指明运行时调用的命令，例如bash脚本第一行为“#!/bin/bash”。

云市场镜像附带的初始化脚本，由镜像提供商注册到E-HPC后台，普通用户无需填写。

如果使用附带初始化脚本的云市场镜像创建E-HPC集群，用户同时指定了自定义的安装后脚本，则执行顺序是，先执行云市场镜像附带的初始化脚本，再执行用户自定义的安装后脚本。

执行时机

集群所有节点启动并安装好必要的软件后，将下载安装后脚本，在集群所有节点上执行一次。此时集群的调度器、域账号等服务都已就绪，登录节点可以连接。

异常处理

- 如果集群创建过程中出现异常，导致集群创建失败，则不会继续执行安装后脚本；
- 如果集群创建成功，但是单个计算节点异常，该异常节点上不会执行安装后脚本；
- 后台根据用户脚本的返回值决定是否执行成功，返回值约定同Shell，非0代表失败；
- 如果集群创建成功，但是执行安装后脚本失败，将在“操作日志”界面给出警告，集群状态仍保持“运行中”。详细错误信息请登录集群，在执行失败的节点/root目录下查询日志文件。

可利用的环境变量

自定义安装后脚本默认将在集群的所有节点上执行，用户通常需要根据节点的角色（是否调度器节点、计算节点或者登录节点），来决定具体执行的操作，执行脚本过程中可能需要集群的某些元数据。这些信息作为环境

变量，可在脚本的运行时获取。

可用环境变量如下（所有变量类型为字符串）：

变量名	取值	说明
ClusterId		集群ID
HOSTNAME		主机名
AccountType	NIS / LDAP	域账号类型
SchedulerType	PBS / SLURM / GRIDENGINE	调度器类型
Role	AccountManager / AccountManagerBackup / ResourceManager / ResourceManagerBackup / ComputeNode / LoginNode	Role为单一角色名称或者多个角色名称以逗号分隔组成字符串。即单个节点可能同时具有多种角色。
ResourceManagerIp		主调度器私网IP
ResourceManagerHost		主调度器主机名
AccountManagerIp		主域服务器私网IP
AccountManagerHost		主域服务器主机名
ResourceManagerBackupIp		备用调度器私网IP（开启HA）
ResourceManagerBackupHost		备用调度器主机名（开启HA）
AccountManagerBackupIp		备用域服务器私网IP（开启HA）
AccountManagerBackupHost		备用域服务器主机名（开启HA）
isLoginNode	true / false	是否登录节点
isAccountManager	true / false	是否主域服务器
isResourceManager	true / false	是否主调度器
isAccountManagerBackup	true / false	是否备用域服务器
isResourceManagerBackup	true / false	是否备用调度器
isComputeNode	true / false	是否计算节点

安装后脚本示例

示例下载地址：http://public-ehs.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/scripts/postscript_example.sh

```
#!/bin/bash
echo "call $0 with param: $@" | tee /root/command.log
```

```
## show all availble environment variables
printenv | tee /root/env.log

## Cluster meta data
echo "ClusterId: ${ClusterId}" | tee /root/cluster.log
echo "AccountType: ${AccountType}, SchedulerType: ${SchedulerType}" | tee -a /root/cluster.log

## Role of current machine
echo "${Role}" | tee /root/role.log

if [ "${isLoginNode}" == "true" ]; then
## Do your work on login node
echo "This is login node" | tee -a /root/role.log
exit $?
fi

if [ "${isAccountManager}" == "true" ]; then
## Do your work on NIS/LDAP master
echo "This is account manager" | tee -a /root/role.log
exit $?
fi

if [ "${isResourceManager}" == "true" ]; then
## Do your work on Slurm/PBS master
echo "This is scheduler" | tee -a /root/role.log
exit $?
fi

if [ "${isComputeNode}" == "true" ]; then
## Do your work with on compute node
echo "This is compute node" | tee -a /root/role.log
exit $?
fi
```

服务包

服务包

在E-HPC管理控制台，集群界面的顶部，会自动显示该地域是否购买服务包，以及该地域中所有核数已经相应的价格信息。

简介

- 每个地域限制新购服务包数量1个，不能重复购买
- 不同地域的服务包不叠加

- 支持升级已有服务包规格，目前不支持降级

购买服务包

进入E-HPC管理控制台，点击左侧“服务包”标签，进入服务包页面。若本地地域尚未购买服务包，则点击右上角“购买服务包”按钮，跳转至如下页面，进行购买。

说明：同一区域，同一时段或者相交时段，只能购买一个服务包。

E-HPC软件服务(预付费)

① E-HPC服务包抵扣E-HPC后付费费用，请参考集群总CPU核数购买，抵扣后超出部分仍按后付费每核小时单价计费

资源包类型	E-HPC服务(杭州)					
地域	华东1(杭州)	华北2(北京)	华东2(上海)	华南1(深圳)	华北1(青岛)	华北3(张家口)
	华北5(呼和浩特)	新加坡	香港	德国(法兰克福)	澳大利亚(悉尼)	日本(东京)
规格	600核	1000核	2000核	3000核	5000核	

如有超出最大规格的需求，请联系客户经理

购买数量: 1

购买时长: 1个月 | 6个月 | 1年

购买成功后即刻生效，可以升级规格，不可叠加使用

当前配置

资源包类型: E-HPC服务(杭州)

地域: 华东1(杭州)

规格: 600核

购买数量: 1

购买时长: 1个月

配置费用: **¥ 0.00**

省 ¥ 4,500.00

立即续费用户0元付

立即购买

价格说明：

E-HPC服务包抵扣E-HPC软件后付费费用，一个地域所有集群的节点总核数（vCPU数）不超过600核，则不再额外收取E-HPC软件费用；超过600核的部分，按照E-HPC软件后付费单价收取（国内地域0.02元/核小时，海外地域0.03元/核小时）。

服务包升级

当已经购买的服务包不能满足未来业务的核需求时，需要对当前服务包进行升级（变配），扩大核规格，可以在服务包页面中，已购买的服务包“规格”栏中点击“升级”按钮，跳转至如下界面进行变配操作：

变配

当前配置

实例名称: E-HPCBAG-cn-76v12vbm00019

规格: 600核 资源包类型: E-HPC基础服务 地域: 华东2(上海)

到期时间: 2019-05-10 00:00:00

配置变更

规格	600核	1000核	2000核	3000核	5000核
----	------	-------	-------	-------	-------

如有超出最大规格的需求，请联系客户经理

购买时长: 1个月 | 6个月 | 1年

购买成功后即刻生效，可以升级规格，不可叠加使用

订购过期不能升级或者降配

(E-HPC软件服务(预付费)服务协议)

去支付

服务包续费

进入到服务包页面，点击“时间”栏中的“续费”按钮，跳转至续费页面，选择需要的续费时长，勾选《E-HPC软件服务(预付费)服务协议》，确认支付即可。

软件管理

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整个集群生命周期的软件管理功能，支持多款主流HPC软件、通信库的一键查询、安装与卸载。

软件管理界面

进入E-HPC管理控制台，点击左侧栏的**集群**标签，进入**集群管控**界面。



在集群的**应用信息**概要栏中，点击**软件管理**右侧的**查看**按钮，进入如下界面：



图中界面主要包括两部分：**可安装软件**和**已安装软件**。

可安装软件

可安装软件界面展示了当前E-HPC已经集成的软件列表，包括主流科学计算应用、编译器运行时库、MPI通信

库等等。用户只需要勾选想要安装的软件，然后点击**安装**按钮，就可以实现多款软件的一键安装部署。搜索框支持软件的查询功能。

另：软件包的安装部署还可以在**集群创建**过程中的**软件配置**阶段进行勾选。

配置清单

集群名称	
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	1
计算节点	ecs.n1.tiny.1核,1GB,1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	

已安装软件

已安装软件界面展示了该集群目前已经安装的软件列表。用户只需要勾选想要卸载的软件，然后点击**卸载**按钮，就可以实现多款软件的一键卸载。搜索框支持软件的查询功能。

E-HPC软件栈

HPC BenchMark

名称	版本	简介	需要勾选的依赖包
LINPACK	2018	浮点性能评测工具	Intel-MPI 2018
STREAM	2018	访存带宽评测工具	N/A
Intel-MPI-Benchmarks	2019	MPI通信效率评测工具	Intel-MPI 2018
OSU-Micro-Benchmarks	5.4.4	MPI通信效率评测工具	Intel-MPI 2018
Iperf	2.0.12	网络带宽评测工具	N/A
FIO	3.1	磁盘读写效率评测工具	N/A

运行时库

MPI通信库	GPU加速库	Intel高性能库
Intel-MPI OpenMPI MPICH MVAICH	CUDA-Toolkit cuDNN	Intel-ICC-RUNTIME Intel-IFORT-RUNTIME Intel-MKL Intel-DAAL Intel-IPP Intel-TBB

软件列表

名称	版本	简介	需要勾选的依赖包
ABySS	2.1.5	基于短序列的基因组双端组装工具，支持多节点并行	Intel-MPI 2018
Anaconda	2018.12-py27 2018.12-py37	Python环境管理工具，E-HPC同时支持Python2.7和Python3.7版本	N/A
BLAST	2.8.1	在生物信息数据库中进行相似性比较的分析工具	N/A
DeepChem	2.0.0	面向药物设计的深度学习Python库	N/A
GAMESS-GPU	2018.2	从头计算量子化学软件，GPU加速版本	CUDA-Toolkit 9.0
GROMACS	5.0.7	分子动力学模拟软件，单机版	N/A
GROMACS-OpenMPI	5.0.7	分子动力学模拟软件，多节点并行版	OpenMPI 1.10.7
GROMACS-CPU-AVX512	2018.3	分子动力学模拟软件，多节点并行版，支持AVX512指令集	Intel-MPI 2018 Intel-MKL 2018 Intel-ICC-RUNTIME 2018
GROMACS-GPU	2018.1	分子动力学模拟软件，多节点GPU加速版本	OpenMPI 3.0.0 CUDA-Toolkit 9.0
HELYX-OS	2.4.0	流体力学前处理软件，支持可视化	N/A
HMMER	3.2.1	基于隐马尔可夫模型，用于生物序列比对分析的软件	N/A
LAMMPS-CPU-INTELMPI	12Dec18	分子动力学模拟软件，多节点并行版本	Intel-MPI 2018
LAMMPS-GPU-OpenMPI	12Dec18	分子动力学模拟软件，多节点GPU加速版本	OpenMPI 3.0.0 CUDA-Toolkit 9.0
Miniconda	py27 py37	精简版conda环境，E-HPC同时支持Python2.7和Python3.7版本	N/A
MOMAP	1.0.1	理论研究、预测分子材料性质的软件包，支持多节点并行	MPICH2

NAMD-OpenMPI	2.12	分子动力学模拟软件，多节点并行版本	OpenMPI 1.10.7
NAMD-GPU-MULTICORE	2.12	分子动力学模拟软件，单节点GPU加速版本	CUDA-Toolkit 9.0
NAMD-GPU	2.12	分子动力学模拟软件，多节点GPU加速版本	OpenMPI 3.0.0 CUDA-Toolkit 9.0
OpenFOAM-OpenMPI	5.0	流体力学模拟软件，多节点并行版本	OpenMPI 1.10.7
OVITO	2.9.0	用于原子和粒子模拟数据的科学可视化和分析软件	N/A
ParaView	4.3.1	二维、三维数据分析和可视化软件	N/A
Relion-OpenMPI	2.0.3	单颗粒冷冻电镜软件，多节点并行版本	OpenMPI 1.10.7
Relion-GPU	2.0.3	单颗粒冷冻电镜软件，多节点GPU加速版本	OpenMPI 3.0.0
Semtex	8.2	流体力学求解器，支持多节点并行	OpenMPI 1.10.7
TensorFlow	1.7.0-cp27-pypi	基于数据流的开源深度学习框架	N/A
TensorFlow-GPU	1.7.0-cp27-pypi	基于数据流的开源深度学习框架，GPU加速版本	N/A
VMD	1.9.3	分子动力学模拟可视化软件	N/A
WRF-MPICH	3.8.1	用于气象研究和天气预测的大气模型系统，多节点并行版本	MPICH 3.2
WRF-OpenMPI	3.8.1	用于气象研究和天气预测的大气模型系统，多节点并行版本	OpenMPI 1.10.7

存储管理

存储管理

若您尚未拥有E-HPC集群，请先[创建E-HPC集群](#)

为支持更大规模集群的计算任务，多存储管理实现了存储NAS的水平扩容，缓解单个nas性能在计算上的压力。

弹性高性能计算E-HPC的管理控制台提供了NAS存储的自定义挂载，多个NAS同时挂载，和资源卸载的功能。

进入存储管理界面

首先，进入E-HPC管理控制台，點選左侧栏的 **共享存储** 标签，进入存储管理界面。



挂载存储资源

- 在多存储挂载nas到不同目录时，/ehpcdata、/home、/opt三个目录是默认的，不允许重新挂载资源或者卸载资源。但是我们可以创建集群时，在硬件配置下的 **高级配置** 模块，打开共享存储的**按文件夹配置**按钮对其进行自定义配置。

注意： 只有在同一个VPC下的NAS才可以挂载上去

共享存储

按文件夹配置



/ehpcdata 文件夹

文件系统ID： ?

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： ?

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： ?

/home 文件夹

文件系统ID：

挂载点：

远程目录：

 默认 自定义

/opt 文件夹

文件系统ID：

挂载点：

远程目录：

 默认 自定义

- 在存储管理界面，直接挂载自定义目录的NAS。点击页面上 **挂载存储资源** 按钮，跳出NAS添加框（如下图），配置NAS挂载信息，然后点击左下角 **确定** 按钮，完成挂载资源。

需要注意的是，挂载NAS资源时，如果本地或者远程没有对应的目录，E-HPC会自动创建该自定义的目录

。

* 本地目录

* 存储实例Id

* 挂载点地址

* 远程挂载目录

* 节点类型 计算节点 管控节点 登录节点

- 在多存储挂载NAS中，新增挂载点只针对新扩容的计算节点生效；而对已存在的计算节点，可以通过重置节点的操作，让新增挂载点对原有计算节点也生效。

卸载存储资源

当存储资源过剩时，也可以将资源卸载掉。勾选需要卸载的NAS资源，点击页面中 **卸载存储资源** 按钮，跳出卸载确认框，点击确认即可完成资源卸载。

注意：对于默认目录/ehpcdata,/home,/opt下的nas资源是不能进行卸载的

图 集群

节点

队列

集群

作业

模板

高性能容器应用

用户

共享存储

集群： TestCaseNAS

挂载存储资源 卸载存储资源

<input checked="" type="checkbox"/>	本地目录	存储实例Id	挂载点地址	远程挂载目录	存储协议	节点类型
<input type="checkbox"/>	/ehpcdata		cn-hangzhou.nas.aliyuncs.com	/	nfs	
<input type="checkbox"/>	/home		hangzhou.nas.aliyuncs.com	/test	nfs	
<input type="checkbox"/>	/opt		cn-hangzhou.nas.aliyuncs.com		nfs	
<input checked="" type="checkbox"/>	/Test		hangzhou.nas.aliyuncs.com	/	nfs	

< 上一页 1 下一页 >

卸载存储资源

即将卸载以下存储资源：

本地目录	存储实例Id	挂载点地址	远程挂载目录	存储协议	节点类型
/Test		hangzhou.nas.aliyuncs.com	/	nfs	

确认

取消

可视化服务

帮助文档-可视化服务

弹性高性能计算E-HPC通过为每个地域提供可视化服务，通过可视化服务，用户可以创建阿里云远程图形工作站，直接通过控制台远程打开图形工作站桌面或App，进行高性能计算的图形化前后处理工作。

进入E-HPC管理控制台，点选左侧栏的 **可视化服务** 标签，即可看到可视化服务操作界面。该界面主要分三大块：可视化服务创建和删除，可视化服务信息，以及可视化实例列表。

说明：

1. 首次使用请通过页面上的链接开通阿里云图形工作站RAM授权；
2. 阿里云图形工作站服务目前仅支持杭州、上海、北京、张家口、呼和浩特以及深圳地域

创建可视化服务

首次使用时需要先创建可视化服务，该服务将自动部署远程桌面的授权管理、用户管理等，以便后续创建图形工作站实例，可视化服务计费信息可参考文档。

说明：可视化服务的信息只有主账号才可以看到，子账号不显示这一部分内容。

可视化服务信息

可视化服务信息包括：可视化服务ID、VPCId、可视化服务运行状态、服务创建时间，以及实例数目。

实例操作流程

下载客户端

在使用可视化实例前，建议先下载可视化实例客户端。E-HPC控制台目前支持的客户端有windows和mac两种。用户可根据自己实际情况，点击 **下载客户端** 按钮，下载和本地系统相适用的客户端版本。下载之后运行该文件，在本地进行简单安装即可用作连接使用。

创建实例

当可视化服务为running状态时，可以通过“创建实例”按钮创建新实例，该实例将部署阿里云远程桌面或远程App应用，并可通过网络连接。实例费用将按照具体选择的实例配置进行计费，可参考文档

如您已经通过VPN或专线等方式打通云上云下网络，可以选择不需要公网IP，客户端将使用内网IP地址与图形工作站实例进行连接。

实例分为两种模式：1) 桌面模式，用户连接后使用方式与直接进入操作系统桌面效果一致；2) App模式，用户连接后仅可打开并使用所设置的应用。创建APP模式的实例的一般步骤：

1. 创建一个桌面模式的实例；
2. 登录该实例，安装相关应用；
3. 将该实例停机，然后点击创建镜像；
4. 创建App模式的实例，此时选择“自定义镜像”，使用之前做好应用部署的镜像；
5. 等待实例创建完成，进入“已注册”状态，即可连接实例；

关联阿里云子账号

因为子账号登录控制台后只能看到与之关联的实例，因此主账号需要先为实例分配子账号。具体方法为：

1. 在可视化实例列表中，选择需要分配实例，在用户列点击“分配”；
2. 选择需要使用该实例的子账号，点击确认；
3. 实例分配完成，实例的用户列将显示当前分配的用户，可通过点击“收回”按钮解除子账号与该实例的关联关系；

说明： 一个实例只能分配给一个子账号

挂载NAS

创建的实例如果需要挂载NAS，用户可点击操作栏的 **更多—NAS挂载** 按钮，弹出“挂载存储资源”页面，输入本地目录，选择需要挂载的存储实例Id、挂载点地址、远程挂载目录，点击确定，即可完成挂载。

说明：

1. 可视化实例仅支持挂载SMB协议的存储资源，如您的集群创建时挂载的是NFS协议的共享文件系统，可在NAS服务控制台创建一个SMB协议的文件系统，并通过E-HPC的“共享存储”页面挂载到当前集群，使得可视化实例与集群计算节点能够共享相关文件
2. 本地目录是指当前实例上的目录，Windows系统即盘符，如Z:。

连接

连接实例之前，用户需要确保已经下载安装了正确的客户端版本。然后点击操作栏的 **连接** 按钮，弹出相应实例的.ica文件保存到本地，点击该文件即可通过已安装的客户端连接到该实例桌面。

说明： 若关闭该实例桌面的连接，则本地.ica文件会自动清除，下次连接时需要重新下载保存该文件。

删除

用户可通过操作栏 **更多** 选项下的 **删除** 按钮，删除掉可视化服务下的实例。

删除可视化服务

如您不再使用可视化服务，可点击“删除可视化服务”按钮删除，删除后可视化服务不再计费。只有先删除服

务内的所有可视化实例之后，才可删除可视化服务。