HPC-NOW 使用手册

目录

- ,		关于本软件	1
=,		快速安装与使用	1
	2.1	下载安装包	1
		2.1.1 Microsoft Windows	2
		2.1.2 GNU/Linux	4
		2.1.3 macOS	4
	2.2	安装 HPC-NOW 服务	5
		2.2.1 Microsoft Windows	5
		2.2.2 GNU/Linux	6
		2.2.3 macOS	7
	2.3	HPC-NOW 服务初始化	8
		2.3.1 切换至 hpc-now 运行环境	8
		2.3.2 初始化 hpcopr 组件	11
	2.4	注册并创建第一个集群	
	2.5	部署第一个 HPC 应用	15
	2.6	提交第一个 HPC 任务	16
		2.6.1 准备 HPC 数据	16
		2.6.2 启动计算	17
		2.6.3 计算后处理	17
	2.7	关闭/销毁集群	21
三、		核心功能介绍	21
	3.1	查看帮助文档	21
	3.2	主要功能介绍	22
		3.2.1 环境检查	22
		3.2.2 多集群管理	22
		3.2.3 全局管理	22
		3.2.4 集群初始化	22
		3.2.5 单集群管理	23
		3.2.6 集群操作	23
		3.2.7 用户管理	23
		3.2.8 <i>数据管理</i>	24
		3.2.9 应用管理	24
		3.2.10 任务管理	25
		3.2.11 其他功能	25
四、		编译与开发	
	4.1	环境要求	
	4.2	编译与安装	25
		编译组件介绍	

	4.4	部署、安装及使用	.26
五、		卸载与删除	.26
六、		异常处理	.27
	6.1	数据备份	.28
	6.2	资源销 毁	28

一、 关于本软件

HPC-NOW 云超算平台(以下简称"本平台"或"本软件")是由<u>上海即算科技有限公</u>司开发、遵循 MIT 协议 开源的软件。

软件源代码的主要托管位置请点击链接。

本软件遵循的开放源代码许可协议请点击链接。协议内容如下:

MIT License

Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologies Co., Ltd 上海即算科技有限公司

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.

请您在使用本软件之前,充分知晓并完全同意上述条款。如不同意上述条款,请勿使用本软件。

二、快速安装与使用

2.1 下载安装包

使用本软件的第一步是安装。当前的主版本为 0.2.0, 适配版本及链接如下。为避免浏览器不必要的阻拦,请务必使用命令行方式下载。

操作系统类型	操作系统版本(已验证)	下载链接
Microsoft Windows	Windows 10/11	Windows
	Windows Server 2019	
GNU/Linux	Ubuntu 18.04 LTS	<u>GNU/Linux</u>

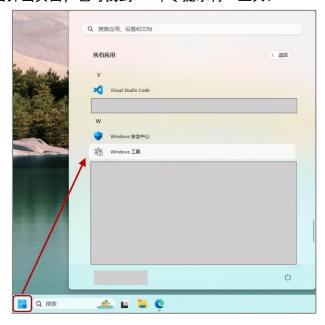
	Ubuntu 20.04 LTS	
	Ubuntu 22.04 LTS	
	CentOS Stream 9	
	CentOS 8	
macOS	Monterey (12.0)	macOS
	Ventura (13.0)	

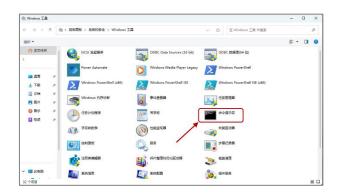
2.1.1 Microsoft Windows

1) <u>如您的工具栏有搜索框</u>,在位于工具栏的 Windows 搜索框输入 "cmd"**,请勿直** 接点击或者敲击回车。



如您的工具栏没有搜索框,请依次点击 Windows 徽标 [■] ,找到 "Windows 工具",单击弹出页面,也可找到 "命令提示符"工具。





2) 右击"命令提示符"图标,点击"以管理员身份运行"。如弹出"用户账户控制"窗口,请点击"是",用于给本次下载和安装授予权限。







3) 在弹出的命令提示符窗口中,请输入以下命令,以将安装包下载至本地目录(此处以 c:\users\public\installer.exe 为例)。

curl https://hpc-now-1308065454.cos.ap-guangzhou.myqcloud.com/installerdev/installer-win-0.2.0-latest.exe -o c:\users\public\installer.exe



2.1.2 GNU/Linux

- 1)请打开发行版自带的终端(Terminal)。
- 2) 在终端中输入以下命令,以将安装包下载至本地目录(此处以/tmp/installer.exe 为例)。

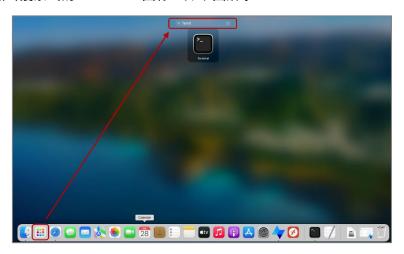
curl https://hpc-now-1308065454.cos.ap-guangzhou.myqcloud.com/installerdev/installer-lin-0.2.0-latest.exe -o /tmp/installer.exe

3) 为下载的安装包赋予执行权限。命令如下:

chmod +x /tmp/installer.exe

2.1.3 macOS

1) 请点击桌面 Dock 栏中的 Launchpad 图标,并在弹出的搜索框中输入"terminal", 并点击搜索出的 Terminal 图标。如下图所示。



2) 在弹出的终端中输入以下命令,以将安装包下载至本地目录(此处以/tmp/installer.exe 为例)

curl https://hpc-now-1308065454.cos.ap-guangzhou.myqcloud.com/installerdev/installer-dwn-0.2.0-latest.exe -o /tmp/installer.exe

3) 为下载的安装包赋予执行权限。命令如下:

chmod +x /tmp/installer.exe



至此,您的安装包已经下载至本地目录。分别是:

Microsoft Windows: C:\Users\Public\installer.exe

GNU/Linux: /tmp/installer.exe
MacOS: /tmp/installer.exe

您也可以指定其他本地目录。本手册以上述目录为例进行说明。

2.2 安装 HPC-NOW 服务

假定您已经参考 2.1 节,将安装包下载至相对应的目录,则请按照以下步骤进行安装。需注意,安装 HPC-NOW 服务需要临时提权,对于 Microsoft Windows 操作系统用户,需要以管理员方式运行命令提示符;对于 GNU/Linux 和 macOS 操作系统用户,需要使用 sudo 提升权限。

2.2.1 Microsoft Windows

请参考 2.1.1 小节, 以管理员身份打开"命令提示符"窗口。

输入如下命令, 开始自动化安装。

c:\users\public\installer.exe install

此时将弹出 License 条款,请输入"accept" 以确认并接受。

```
■ 管理员: 命令提示符
       \Windows\System32>c:\users\public\installer.exe install
   [1m] Welcome to the HPC-NOW Service Installer! Version: U.Z
Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologie: Co., Ltd
                                                                                                                                                                                             U127
LICENSE: MIT
    This is free software; see the source for copying conditions. There is NO warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNE S FOR A PARTICULAR PURPOSE.
 MIT License
 Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologies (c., Ltd 上海即算科技有限公司
Permission is hereby granted, free of charge, to my person obtaining a copy of this software and associated documentation fills (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including wi hout limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to thom the Software is furnished to do so, subject to the following cond tions:
The above copyright notice and this permission no ice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.
THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANT OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANT ES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEM NT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CL.IM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE
  SOFTWARE.
    -INFO- ] If you accept the terms and conditions above, please input 'accept', If you do not accept, this installation will exit immediately.

INPUT: ] Please input ( case-sensitive ) accept
-INFO- ] Checking and cleaning up current environment ...
-INFO- ] Adding the specific user 'hpc-now' to your OS ...
-INFO- ] Creating and configuring the running directory ...
-INFO- ] Creating a random file for encryption/decryption ...
-INFO- ] Will download the latest 'hpcopr' from the default URL.
-INFO- ] Will download the component 'now-crypto.exe' from the default URL.
     -INFO-] Congratulations! The HPC-NOW services are ready to run!
The user 'hpc-now' has been created with initial password: nowadmin2023~
Please follow the steps below:
1. net user hpc-now YOUR_COMPLEX_PASSWORD
2. runas /savecred /user:mymachine\hpc-now cmd
     * You will be required to input the password set just now.
3. In the new CMD window, run hpcopr envcheck
-DONE- ] Enjoy you Cloud HPC journey! Exit now.

◇ visit: https://www.hpc-now.com ⟨> mailto: info@hpc-now.com
```

2.2.2 GNU/Linux

请在 Terminal 中,输入如下命令,开始自动化安装。

sudo /tmp/installer.exe install

此时将弹出 License 条款,请输入"accept" 以确认并接受。

```
File Edit View Search Terminal Help
  vzr@ubuntu:~$ sudo /tmp/installer.exe install
Welcome to the HPC-NOW Service Installer: version: 0.2.0.012
    Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologies Co., Ltd
                                                                                                                                                             LICENSE: MIT
    This is free software; see the source for copying conditions. There is NO warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.
    -INFO- ] Please read the following important in formation before continuing.

You can press 'Enter' to continue reading, or press 'q' to quit reading.
MIT License
 Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologies co., Ltd 上海即算科技有限公司
Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:
The above copyright notice and this permission no<mark>c</mark>ice shall be included in all
copies or substantial portions of the Software.
THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANT, OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE
SOFTWARE.
    -INFO- | Adding the spectric user inc-now to your os...
-INFO- | Creating and configuring the running directory ...
-INFO- | Creating a random file for encryption/decryption ...
-INFO- | Will download the latest 'hpcopr' from the default URL.
-INFO- | Will download the component 'now-crypto.exe' from the default URL.
-INFO- | Setting up environment variables for 'hpc-now' ...
    -INFO- ] Setting up environment variables for 'hpc-now' ...
-INFO- ] Creating other key running directories ...
-INFO- ] Congratulations! The HPC-NOW services are ready to run!
The user 'hpc-now' has been created *WITHOUT* an initial password.
Please follow the steps below:

<> SUDO-MODE (simple and fast for *sudoers*):
    sudo -u hpc-now hpcopr envcheck
    * You will be required to input the password for the current sudoer.
<> USER-MODE (a little bit more steps):
    1. sudo passwd hpc-now
                          1. sudo passwd hpc-now
                             You will be required to set a password without echo.
                          2. su hpc-now
                           * You will be required to input the password set just now.
```

2.2.3 macOS

请在 Terminal 中,输入如下命令,开始自动化安装。

sudo /tmp/installer.exe install

此时将弹出 License 条款,请输入"accept" 以确认并接受。

```
build — -zsh — 144×58
 wangzhenrong@wangzhenrongs-Mac build % sudo /tmp/installer.exe install | Welcome to the HPC-NOW Service Installer! Version: 0.2.0.0127
 | Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologie Co., Ltd
 | This is free software; see the source for copying conditions. There is NO
| warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNE'S FOR A PARTICULAR PURPOSE.
[ -INFO- ] Please read the following important in ormation before continuing.

You can press 'Enter' to continue read ng, or press 'q' to quit reading.
MIT License
 Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologies
                                                                                           o., Ltd 上海即算科技有限公司
Permission is hereby granted, free of charge, to my person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:
The above copyright notice and this permission notice shall be included in all
copies or substantial portions of the Software.
THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANT OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANT ES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE
SOFTWARE.
-INFO- ] Creating and configuring the running directory ...
[ -INFO- ] Creating an acommigring the romany directory...
[ -INFO- ] Creating a random file for encryption/decryption ...
[ -INFO- ] Will download the latest 'hpcopr' from the default URL.
[ -INFO- ] Will download the component 'now-crypto.exe' from the default URL.
[ -INFO- ] Setting up environment variables for 'hpc-now' ...
[ -INFO- ] Creating other key running directories ...
    -INFO- ] Congratulations! The HPC-NOW services are ready to run!
                    The user 'hpc-now' has been created *WITHOUT* an initial password.
                    Please follow the steps below:
           SUDO-MODE (simple and fast for *sudoers*):
cd /Applications && sudo -u hpc-now hpcopr envcheck
                     * You will be required to input the password for the current sudoer.
            <> USER-MODE (a little bit more steps):

    sudo dsc1 . -passwd /Users/hpc-now YOUR_COMPLEX_PASSWORD
    su hpc-now

                    * You will be required to input the password set just now.
 [ -DONE- ] Enjoy you Cloud HPC journey! Exit now.
 <> visit: https://www.hpc-now.com <> mailto: info@hpc-now.com
 wangzhenrong@wangzhenrongs-Mac build % 🏾
```

2.3 HPC-NOW 服务初始化

HPC-NOW 的核心组件为 hpcopr.exe (简称为 hpcopr)。为了安全性和隔离性考虑,您必须使用名为 hpc-now 的操作系统用户来运行 hpcopr。在上一节的过程中,该用户已经被创建在您的操作系统之中。

2.3.1 切换至 hpc-now 运行环境

请参考如下过程为该用户设置密码,务必确保该密码的复杂程度。

Microsoft Windows

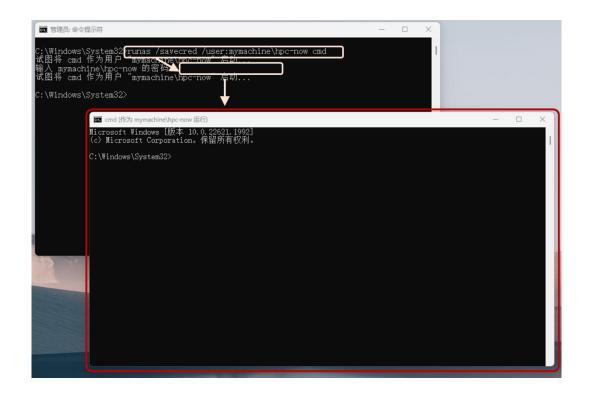
```
请在由管理员运行的"命令提示符"窗口中,输入:
net user hpc-now XXXXXXXX (请将 XXXXXXXX 替换为复杂的字符串!)
```



请在同一窗口中继续输入命令:

runas /savecred /user:mymachine\hpc-now cmd

并按照提示输入密码,即可切换至以 hpc-now 身份运行的 "命令提示符"环境中(下图红框所示)。后续请使用该窗口操作 hpc-now 服务,为了安全起见,请关闭原来的"管理员:命令提示符"窗口。



GNU/Linux

请在 Terminal 窗口中, 输入:

sudo passwd hpc-now

此时, 您将首先需要输入当前用户的密码获取 sudo 权限。然后, 输入两遍密码字符串, 来为 hpc-now 用户设置密码。请注意,此时的窗口不会有任何回显,您输入密码字符串之后敲击回车即可。

```
File Edit View Search Terminal Help
wzr@ubuntu:~$ sudo passwd hpc-now
[sudo] password for wzr:
Enter new UNIX password:
Retype new UNIX password:
passwd: password updated successfully
wzr@ubuntu:~$
```

设置好密码之后,您可以输入如下命令切换至 hpc-now 用户的环境:

su hpc-now

您将需要输入刚刚设置好的密码;同样的,输入密码的过程中也不会有回显。请输入命令 cd ~ 以进入 hpc-now 用户的家目录。

```
wzr@ubuntu:~$ su hpc-now
Password:
hpc-now@ubuntu:/home/wzr$ cd ~
hpc-now@ubuntu:~$
```

macOS

请在 Terminal 窗口中, 输入:

sudo dscl . -passwd /Users/hpc-now XXXXXXXXX

请将 XXXXXXXX 替换为复杂的密码字符串!

此时,您将需要输入当前用户的密码获取 sudo 权限,输入密码的过程不会回显。



设置好密码之后,您可以输入如下命令切换至 hpc-now 用户的环境:

su hpc-now

您将需要输入刚刚设置好的密码;同样的,输入密码的过程中也不会有回显。请输入命令 cd ~ 以进入 hpc-now 用户的家目录。

```
wangzhenrong@wangzhenrongs-Mac build % su hpc-now
Password:
shell-init: error retrieving current directory: getcwd: cannot access parent directories: Permission denied

The default interactive shell is now zsh.
To update your account to use zsh, please run `chsh -s /bin/zsh`.
For more details, please visit https://support.apple.com/kb/HT208050.
bash-3.2$ cd ~
chdir: error retrieving current directory: getcwd: cannot access parent directories: Permission denied
bash-3.2$
```

在完成上述步骤之后,您已经为运行 hpcopr 做好了所有准备工作,后续的操作方式 将与您的操作系统类型无关。

2.3.2 初始化 hpcopr 组件

仅在首次运行 hpcopr 时,需要初始化 hpcopr 相关的各个组件。请放心,该过程完全自动化,无需手动干预。

请参照 2.3.1 节的说明, 切换至 hpc-now 运行环境。

请在切换至 hpc-now 运行环境的命令行窗口(命令提示符工具或者 Terminal 窗口)中,输入以下命令(请注意中间的管道符和各个空格):

echo y-e-s | hpcopr envcheck

此后,将自动下载和部署各个附加组件到您当前的环境中。该过程无需提权,完全由 hpc-now 用户完成。如果您是首次安装 hpcopr,则会下载并部署 6 个组件,共计约 300MB。如果您不是首次安装 hpcopr,则会使用已经下载并部署的组件,无需重新下载安装。

输入上述命令之后,您无需任何其他操作,只需要关注屏幕回显,查看是否部署完毕。 屏幕回显如下:

```
hpc-now@ubuntu:~$ echo y-e-s | hpcopr envcheck
| /HPC-> Welcome to HPC-NOW Cluster Operator! Version: 0.2.0.0146
|\\/ ->NOW 2023-7-27 23:50:27
| Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologies Co., Ltd LICENSE: MIT
   -INFO- ] Checking the environment for HPC-NOW services ...
  -INFO- ] No registry file found. Creating a blank cluster registry now ...
-INFO- ] Location configuration file not found.
-INFO- ] Would you like to use the default settings? Only y-e-s is accepted
                to confirm.
  INPUT: ] [ -INFO- ] Versions and md5sums not found. Trying to fix ...
-INFO- ] Downloading/Copying the Terraform binary ...
Usually *ONLY* for the first time of running hpcopr or repair mode.
                                                Average Speed Time Time
Dload Upload Total Spent
4021k 0 0:00:05 0:00:05
                                                                                                 Time Current
Left Speed
[ -INFO- ] Downloading/Copying the cloud Terraform providers (1/3) ...
                Usually *ONLY* for the first time of running hpcopr or repair mode.
                                                                                                 Time Current
Left Speed
  % Total
                                                Dload Upload Total
[ -INFO- ] Downloading/Copying the cloud Terraform providers (2/3) ...
                Usually *ONLY* for the first time of running hpcopr or repair mode.
                                                                                               Time Current
Left Speed
--:--:- 4206k
  % Total % Received % Xferd Average Speed
                                                                oad Total Spent
0 0:00:06 0:00:06
100 25.3M 100 25.3M
  -INFO- ] Downloading/Copying the cloud Terraform providers (3/3) \dots
                Usually *ONLY* for the first time of running hpcopr or repair mode.
                                                                oeed Time Time Time Current
.oad Total Spent Left Speed
0 0:00:14 0:00:14 --:--:- 6576k
             . Checking & installing the dataman components: 1/3 \dots
               Dataman component 1 not found. Downloading and installing ...

**Received ** Xferd Average Speed Time Time

Dload Upload Total Spent Left
                                                               peed Time Time Time Current
load Total Spent Left Speed
0 0:00:01 0:00:01 --:--:- 6323k
100 11.0M 100 11.0M
            v Installed the dataman components: 1/3 .
             . Checking & installing the dataman components: 2/3 ...
                Dataman component 2 not found. Downloading and installing ...
                                                              peed Time Time Time Current
load Total Spent Left Speed
0 0:00:02 0:00:02 --:--:- 5776k
                 % Received % Xferd Average Speed Time Time
Dload Upload Total Spent
  % Total
            v Installed the dataman components: 2/3 .
             . Checking & installing the dataman components: 3/3 ..
               Dataman component 3 not found. Downloading and installing \dots
. Kotal % Received % Xferd Average Speed Time Time Current
Dload Upload Total Spent Left Speed
100 55.4M 100 55.4M 0 0 16.8M 0 0:00:03 0:00:03 --:--:-- 16.8M
             v Installed the dataman components: 3/3 .
```

当自动部署工作结束时,将回显绿色字体的[-INFO-]行如下。

```
| v Installed the dataman components: 3/3 .
[ -INFO- ] Running environment successfully checked.
<> visit: https://www.hpc-now.com <> mailto: info@hpc-now.com
```

此时 hpcopr 初始化完成, 您已经可以开始云上的 HPC 工作了。

2.4 注册并创建第一个集群

请参照 2.3.1 节和 2.3.2 节的说明,切换至 hpc-now 运行环境。

请在切换至 hpc-now 运行环境的命令行窗口(命令提示符工具或者 Terminal 窗口)中,输入以下命令:

hpcopr new-cluster

此时,您将被请求提供云账号的密钥对(即 Access Key 和 Secret Key)。目前 HPC-NOW 服务支持 阿里云、亚马逊云科技/AWS、腾讯云。请您准备好其中任一云厂商账号下的密钥对,并粘贴至弹出的窗口中,敲击回车确认。

请注意,如果您不在 Microsoft Windows 环境下,则在粘贴密钥对时不会有任何回显。如果您处于 Microsoft Windows 环境,则在粘贴密钥对时会回显星号,如上图所示。

随后,请在同一个窗口中,输入以下命令,用于创建第一个默认集群。

hpcopr init --ci a8c16g

自动化创建过程将开启,在询问是否确认创建集群时,您需要键入"y-e-s"字符串用于确认。除此之外无需进行其他操作,仅需等待自动创建完成即可。屏幕回显类似如下内容:

若一切顺利,您将看到如下 "Congratulations! ..." 回显,集群资源的初始化完成。

请注意,以上仅表示资源初始化完成。您仍然需要再等待大约 5~7 分钟左右的时间,以完成整个集群内 HPC 环境的**全自动初始化**。在此期间,您可以先后输入以下命令:

hpcopr ssh -u user1
sudo atq

如果 atq 命令仍后回显,则说明 HPC 环境初始化未完成,您仍需等待。如果再次输入 sudo atq 之后发现无回显,则说明 HPC 环境初始化已完成。您可输入以下命令验证:

sinfo -N

如果回显以下信息,则说明 HPC 环境初始化完全成功。您可以部署应用、启动 HPC 任务。

```
□ userl@master~

[userl@master ~]$ sinfo -N

NODELIST NODES PARTITION STATE

computel 1 debug* idle

[userl@master ~]$
```

2.5 部署第一个 HPC 应用

如果您在 2.4 小节中输入了 hpcopr ssh -u user1 进入到了集群环境,请您输入 exit 退出,并返回本地的 hpcopr 运行环境。如下图所示。

请输入以下命令,以在您的集群上部署 OpenFOAM-v9 应用:

```
hpcopr appman --acmd build --app of9 -u user1
```

仅需这一条命令, OpenFOAM-v9 的自动化部署立即开始。您无需任何额外操作, 等待即可,由于 OpenFOAM 是大型软件,部署过程大约需要 10 分钟;在此期间您可以处理其他事务,甚至可以关闭当前的窗口,不会影响 OpenFOAM-v9 的安装过程。

当 OpenFOAM-v9 编译完成之后,您输入以下命令将出现类似回显:

考虑到您可能需要使用 ParaView 来进行数据后处理,建议您运行如下命令,以安装 ParaView。

hpcopr appman --acmd build --app paraview -u user1

2.6 提交第一个 HPC 任务

在完成 2.1~2.5 步骤之后,您的集群和应用均已经部署完毕。现在可以运行第一个 HPC 任务了。

2.6.1 准备 HPC 数据

我们以 OpenFOAM-v9 中的教程案例 rhoSimpleFoam/squareBend 为例。

请输入以下命令,以 user1 的用户身份登录到您的集群之中:

hpcopr ssh -u user1

输入以下命令(黑色字体),将数据 squareBend 拷贝到指定位置,并做好预处理。如下图所示。

[user1@master ~]\$ cp -r /hpc_apps/user1_apps/OpenFOAM/OpenFOAM9/tutorials/compressible/rhoSimpleFoam/squareBend /hpc_data/user1_data/
[user1@master ~]\$ cd /hpc_data/user1_data/squareBend
[user1@master squareBend]\$ of9.env
[user1@master squareBend]\$ blockMesh
[user1@master squareBend]\$ decomposePar
[user1@master squareBend]\$ exit

2.6.2 启动计算

在完成上述步骤之后,仅需如下一行命令即可启动 OpenFOAM 计算。

hpcopr jobman --jcmd submit --app of9 --jexec rhoSimpleFoam --jname demo --jtime y --nn 1 --tn 8 --jdata @d/squareBend -u user1 --echo

```
C:\ProgramData\hpc-now\.tmp>hpcorpionan_jond should agg off-jees cholomylefoan_jone deno_joney_real_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_viole_vi
```

2.6.3 计算后处理

您的计算结果数据位于 /hpc_data/user1_data/squareBend 目录之中。如您需要后处理,可用 RDP 工具可视化连接至您的集群桌面环境,进行必要的后处理。

请先使用 hpcopr vault -u user1命令获取到集群的IP地址和 user1 的登录密码。

17 / 31

如果您在 Windows 环境下,需要打开"远程桌面连接"工具,请参考如下步骤。



在"计算机"一栏中输入集群的 IP 地址;在用户名一栏中输入 user1,按照下图配置之后点击"连接",并将 user1 的密码粘贴到弹出的对话框中,即可连接到桌面环境中。



在"计算机"一栏中输入集群的 IP 地址;在用户名一栏中输入 user1,按照下图配置之后点击"连接",并将 user1 的密码粘贴到弹出的对话框中,即可连接到桌面环境中。

首次进入桌面环境时,背景为全黑色。请参考下图,点击 Terminal 以弹出 GNU/Linux 发行版自带的终端。

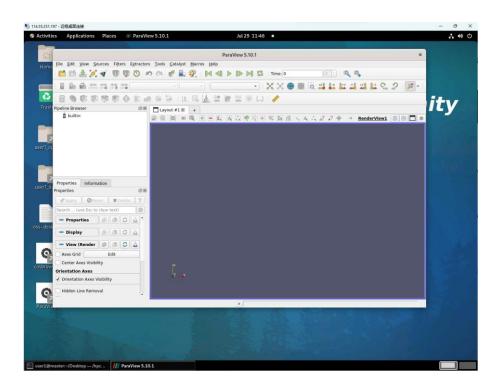


在弹出的终端中,输入以下命令,以对桌面环境进行初始化:

[user1@master ~]\$ gini

该命令将自动化设置桌面环境,包括背景图片、桌面图标等。进一步的,输入如下命令以唤出 ParaView 图形界面:

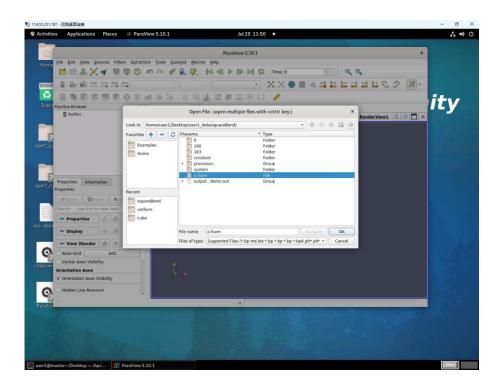
[user1@master ~]\$ paraview



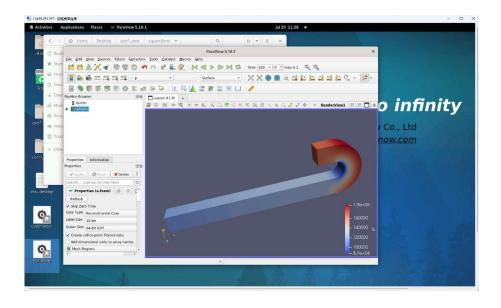
为了使用 paraview 对 squareBend 的计算结果进行后处理,您还需要依次输入如下命令:

[user1@master ~]\$ cd /hpc_data/user1_data/squareBend [user1@master squareBend]\$ of9.env #加载 OpenFOAM 环境 [user1@master squareBend]\$ reconstructPar #合并多线程计算结果 [user1@master squareBend]\$ touch a.foam #生成空文件,用于 Paraview 读取

接下来,请转至刚刚打开的 ParaView 界面,依次点击 <u>F</u>ile -> Open -> 导航至 Desktop/user1_data/squareBend -> 打开 a.foam。



此时,点击左侧的 Apply 按钮, 您的 case 后处理图像即渲染在窗口中。



2.7 关闭/销毁集群

如果您顺利完成了 2.1~2.6 所有内容,可以休眠或销毁整个集群,以避免不必要的浪费。仅需输入如下命令:

hpcopr sleep

如果您还需再次使用,可以输入:

hpcopr wakeup --all 或者 hpcopr wakeup --min

前者将启动所有节点,适用于立刻开始大规模计算;后者将仅不启动计算节点,适用于进行数据准备或者前后处理等。

在完成上述操作之后,建议您销毁整个集群,以避免产生额外的云计算账单。仅需输入如下命令:

hpcopr destroy

集群销毁过程即将展开,如下图所示。集群销毁即意味着所有云资源的永久销毁、以及 该集群中所有数据、应用的销毁。该过程不可逆、不可恢复,请谨慎使用。

三、核心功能介绍

3.1 查看帮助文档

请输入命令 hpcopr help 查看本软件的帮助信息。如需查看其中某个命令的使用方法,可以使用命令 hpcopr help --cmd CMD_NAME, 其中, CMD_NAME 为要查看使用方法的命令名,如 "dataman"。

3.2 主要功能介绍

如前所述, hpcopr 是您操作和管理 Cloud HPC 集群的核心界面。 hpcopr 目前以命令行的形式提供多种功能。一般用法为:

hpcopr command_name CMD_FLAG ... [CMD_KEYWORD1 CMD_KEY_STRING1] ...

- CMD FLAG: 单值选项, 例如 --force, --all 等
- CMD_KEYWORD: 键值选项,例如 -c myFirstCluster

3.2.1 环境检查

envcheck: 快速检查和修复 hpcopr 的运行环境,强烈建议首次运行 hpcopr 时运行该命令

3.2.2 多集群管理

- new-cluster: 创建集群。您需要输入 AWS | 阿里云 | 腾讯云 的访问密钥对。
 关于如何获取访问密钥,请参考各家云厂商的文档
- ls-clusters:列出当前的所有集群
- switch: 切换集群, 您需要提供目标集群的名字作为命令参数
- glance: 查看集群。您可以用 'all' 或者 目标集群的名字作为命令参数,以分别 快速查看所有集群或者某个集群
- refresh: 刷新集群。您可以不用参数以刷新当前集群(如果您已切换至一个集群)或者将目标集群的名字作为命令参数,以刷新目标集群
- export: 加密导出集群,以供他人使用或管理
- import: 解密导入集群,以进行使用或管理
- exit-current : 退出当前集群
- remove: 彻底删除某个集群。您需要提供目标集群的名字作为命令参数

3.2.3 全局管理

- help: 显示详细的帮助信息
- **usage** : 以文本方式查看集群的用量统计,该命令同样会将最新的用量统计导出 到您的工作目录中
- monman: 获取、筛选、导出集群的监控数据,包括 CPU 利用率、内存利用率、 存储占用等关键信息
- history : 以文本方式查看 hpcopr 的命令运行历史记录
- syserr: 以文本方式查看 hpcopr 运行过程中调用系统命令时触发的报错信息
- ssh : 免密 SSH 登录至您的当前集群
- * 开发者选项:仅面向开发者,涉及到较为复杂的技术细节。具体文档将在后续补齐
- configloc : 设置您自定义的 Terraform 相关包的位置。包括了 Terraform 的可执行程序以及云厂商的 provider
- showloc: 查看目前所使用的 Terraform 相关包的位置
- showmd5: 查看各个组件的 MD5 值, 用于校验
- resetloc:将上述位置重置为默认位置

3.2.4 集群初始化

get-conf: 获取默认的集群创建配置,如有需要,您可以编辑并保存

- edit-conf: 获取并编辑集群的创建配置
- rm-conf: 删除集群初始化配置文件
- **init**: 初始化集群。如您未在初始化之前下载任何创建配置文件,该命令将自 行使用默认的配置文件创建您的集群。无论对于开发者还是普通用户,我们都强烈 推荐使用免配置创建的方式,即: 您直接运行 hpcopr init 命令即可
- new-keypair: 建议您定期或不定期轮换云访问密钥对, 您可以用该命令轮换当前集群所使用的密钥对
- rebuild: 您可以重新构建集群的某些节点,适用于个别节点初始化失败的情况

3.2.5 单集群管理

- vault: 查看当前集群的敏感信息,包括 master 节点的登录方式
- graph: 绘制当前集群的配置和拓扑图
- viewlog: 以滚动方式显示集群当前的实时操作过程(例如正在创建的资源等)

3.2.6 集群操作

- delc: 删除若干个(指定数字作为命令参数)或所有(指定 'all' 作为命令参数) 计算节点
- addc:添加若干个(指定数字作为命令参数)计算节点
- shutdownc : 关闭部分或者所有计算节点
- turnonc: 开启部分或者所有计算节点
- reconfc : 计算节点改配置,您可以指定目标配置,如 a4c8g 。您也可以不带参数用于查看当前所有的可用配置
- **reconfm** : 主节点改配置。您可以指定目标配置,如 a8c16g 。 您也可以不带 参数用于查看当前所有的可用配置
- sleep: 休眠整个集群。该操作将使得集群所有节点处于关闭状态
- wakeup: 唤醒整个集群(all 参数)或者只唤醒集群的管理节点(minimal 参数) (计算节点仍保持关闭)
- **destroy:** 永久销毁整个集群。销毁之后,您可以再次运行 init 命令创建,但是 您之前的所有节点和数据已经全部销毁
- payment: 切换集群节点的计费状态,可在按量计费和按月计费之间切换

3.2.7 用户管理

注意:用户管理功能要求您的集群处于(最小或完整)运行状态。

用法: hpcopr userman --ucmd USER_CMD [CMD_KEYWORD CMD_KEY_STRING] ...

- --ucmd add: 新增一个用户。该命令最多可以带两个字符串作为参数,分别是用户名和密码
- --ucmd delete: 删除一个用户。该命令最多可以带一个字符串作为参数,用于 指定用户名
- --ucmd list: 列出当前的所有用户。该命令无需携带参数
- --ucmd enable: 激活一个已存在的用户,处于 enabled 的用户可以提交超算任务。该命令最多可以携带一个字符串作为参数,用于指定用户名
- --ucmd disable: 注销一个已经活跃用户,处于 disabled 的用户仍然可以登录 集群,但是无法提交超算任务。该命令最多可以携带一个字符串作为参数,用户指 定用户名
- --ucmd passwd : 重置用户的密码。该命令最多可以携带两个字符串作为参数,

用于指定用户名(已存在)和新的密码字符串

3.2.8 数据管理

用法: hpcopr dataman --dcmd DATA_CMD CMD_FLAGS ... [CMD_KEYWORD CMD_KEY_STRING] ...

存储桶级别操作:用于用户本地与集群存储桶之间的数据传输

• --dcmd put : 将本地文件或目录上传至存储桶

• --dcmd get : 将存储桶中的文件或目录下载至本地

• --dcmd list: 列出存储桶中的目录

--dcmd copy: 复制存储桶中的对象(文件或目录)
 --dcmd delete: 删除存储桶中的对象(文件或目录)
 --dcmd move: 移动存储桶中的对象(文件或目录)

集群存储级别操作:用于用户本地与远程集群中的直连数据操作

• --dcmd cp: 用户将本地文件复制到远程目录、将远程目录复制到本地、远程目录之间的复制

• --dcmd mv : 远程目录之间移动

--dcmd ls: 列出远程目录中的内容
 --dcmd rm: 删除远程目录中的内容
 --dcmd mkdir: 创建集群远程文件夹
 --dcmd cat: 查看集群远程文件内容

• --dcmd more: 阅读集群远程文件内容

• --dcmd less: 功能同 more

• --dcmd tail: 动态刷新查看集群远程文件的内容

• --dcmd rput : 将集群上的远程文件上传至集群存储桶

--dcmd rget: 将存储桶中的文件或文件夹下载至集群目录中

集群存储远程目录的前缀:

@h/: 用户家目录@d/: 用户数据目录@p/: 公共目录

@a/: 集群应用目录@R/: 集群的根目录@t/: 集群的 /tmp 目录

3.2.9 应用管理

用法: hpcopr appman --acmd APP_CMD [CMD_KEYWORD CMD KEY_STRING] ...

-u USERNAME: 指定集群用户名

--acmd store : 列出所有可用的软件目录
 --acmd avail : 列出已安装在集群内的软件
 --acmd check : 检查集群是否安装某个软件

• --acmd install : 安装部署软件

• --acmd build:编译软件

• --acmd remove : 从集群中删除已安装的软件

3.2.10 任务管理

用法: hpcopr jobman --jcmd APP_CMD [KEY_WORD1 KEY_STRING1] ...

-u USERNAME: 指定集群用户名

--jcmd submit : 向集群提交任务
--jcmd list : 列出正在运行的任务
--jcmd cancel : 取消正在运行的任务

3.2.11 其他功能

about : 关于本程序

license: 阅读程序的 License, 本程序使用 MIT License。

version: 查看当前版本号

repair: 快速修复 hpcopr, 包括检查运行环境和核心组件

四、 编译与开发

4.1 环境要求

代码管理:请使用 git。

编译器:

- Microsoft Windows: 您需要安装最新版 mingw
- **GNU/Linux**: 您需要安装 GNU Compiler Collections, 即 gcc。目前主流的版本 一般为 8.x.x 及以上
- **macOS**: 您需要安装 clang, 版本一般为 13.x.x 及以上。如果您的 mac 设备未 安装过 clang 编译器, 您可以尝试打开 Terminal 并输入 clang, 如果本机没有安装 clang, macOS 会询问是否安装, 您授权之后可根据提示进行自动安装

安装完之后,请您在命令提示符或者终端中输入 gcc --version 或者 clang --version 来确认编译器正确安装。

4.2 编译与安装

请参考如下步骤,获取源代码并编译生成各个组件。

Step 1. git clone https://gitee.com/zhenrong-wang/hpc-now.git

Step 2. cd hpc-now

Step 3. git checkout development

Step 4.

- Micorsoft Windows 用户: .\make windows.bat build
- GNU/Linux 用户: chmod +x ./make_linux.sh && ./make_linux.sh build
- macOS 用户: chmod +x ./make_darwin.sh && ./make_darwin.sh build

4.3 编译组件介绍

本项目的核心组件如下:

- installer: HPC-NOW 服务的安装器。主要负责服务的安装、卸载、更新三项工作。该安装器被设计为必须由管理员权限执行
- hpcopr: 意即 HPC Operator,是 HPC-NOW 的核心程序,也是用户需要执行的主程序。为了确保安全性和隔离性,该程序被设计为必须由专属 OS 用户 "hpc-now" 执行,其他用户,即使是管理员用户或者根用户也无法执行。由 hpcopr 管理基础设施代码,并调用 Terraform 对云资源进行全生命周期管理
- now-crypto:核心程序,主要作用是文本文件加密和解密,以确保敏感信息不以明文形式存放。请注意,该程序通过偏移字符的方式对文本信息进行随机修改,您的密文文件仍需要妥善保管
- **hpcmgr**:强大的集群内管理工具,包括集群的连接、SLURM 服务的启动、以及 HPC 软件包的自动化编译安装等。请注意,仅在 GNU/Linux 环境下会编译生成 hpcmgr 组件

4.4 部署、安装及使用

请参考本手册第二章。

五、 卸载与删除

您可以随时<u>以管理员身份</u>完全卸载 HPC-NOW 服务, 卸载过程将完全抹除 HPC-NOW 对 您的设备和操作系统的更改, 并删除您的云集群管理数据。

对于 Microsoft Windows 用户, 假设您的安装器位于如下位置: C:\Users\Public\installer.exe

则您需要在***由管理员运行***的命令提示符窗口中运行如下命令:

C:\Users\Public\installer.exe uninstall

对于 GNU/Linux 或者 macOS 用户,假设您的安装器位于如下位置:/tmp/installer.exe

则您需要在任一终端窗口中运行如下命令: sudo ./installer.exe uninstall

非常重要:请在卸载之前,务必确认销毁在当前设备上管理的所有集群。您可以用 hpc-now 用户运行 hpcopr glance --all 命令确认您的所有集群已经销毁。否则,您将永久失去对当前尚未销毁的集群的管理能力!



六、 异常处理

云资源的使用和管理受到多种因素的影响,包括但不限于:

- 密钥对过期或失效
- 本地网络突然中断
- 账号购买的资源达到限额
- 当前区域无法购买您所需要的配置或数量
- 开机/关机失败(为了成本考虑,云资源的模板之中默认购买的是停机不收费机型, 对于停机不收费的云主机,云厂商不保障再次开机时能够成功)
- 其他未知或不可抗的因素
-

HPC-NOW 平台在设计时,尽可能的考虑到上述异常,并作出一定的处理(详见代码的 cluster_operation.c 模块 和 cluter_init.c 模块),但是仍然无法保证完全不出差错。在极端情况下,如果发现 hpcopr 已经失去了管理您的集群的能力,为了避免产生意外的资源账单和成本,您必须在云平台提供的控制台上进行数据备份、资源监控和手动销毁。

假设您已经登录 AWS(亚马逊云科技) | 阿里云 | 腾讯云 的控制台。请参考以下建议进行操作:

6.1 数据备份

您的部分关键数据位于共享文件存储 hpc_data 中。在 AWS 上对应的产品为 EFS, 在腾讯云上对应的产品为 CFS, 在阿里云上对应的产品为文件存储 NAS。您可以另购云主机,将被损坏的集群之中的文件存储挂载至新的云主机上。建议您配置一个专用的对象存储桶(AWS - S3, 阿里云 - OSS, 腾讯 COS),将文件存储中的关键数据备份至该存储桶中。

您的另外部分关键数据可能位于集群所对应的专属存储桶中。每个集群都有一个专属的存储桶用于您做数据中转和持久存储,该桶与集群的生命周期相同。因此,您在手动销毁该桶之前,请务必确认您的关键数据已经下载或转储。

6.2 资源销毁

非常重要:我们强烈不建议您在集群中各个节点的系统盘(除 /hpc_apps 和 /hpc_data 之外的任何目录)中存放任何关键数据!请务必将所有的关键数据都放置在 /hpc data 对应的共享存储中。

因此,通常情况下,您对计算节点的销毁不会影响您的关键数据。在按照 9.1 步骤备份和转存完毕所有关键数据之后,您即可手动销毁该集群所针对的所有资源。此外,针对每个集群,HPC-NOW 都自动生成一个随机的唯一识别码,并将该识别码作为标签打在 VPC、云主机、对象存储、文件存储等关键资源上。您可以在控制台上非常直观的看到该集群所对应的资源。

请在创建完任一集群之后,使用 hpcopr vault 命令来查看每个集群对应的唯一识别码,如下图所示。

```
File Edit View Search Terminal Help
hpc-now@ubuntu:/usr/.hpc-now/.tmp$ hpcopr vault | | /HPC-> Welcome to HPC-NOW Cluster Operator! Version: 0.2.0.0146 |\\/ ->NOW 2023-7-29 20:19:4 | Copyright (c) 2023 Shanghai HPC-NOW Technologies Co., Ltd LICENSE: MIT
  -- HPC-NOW CLUSTER SENSITIVE INFORMATION: ------
 Unique Cluster ID: d1z8lu8fkg
                 - CLUSTER PORTAL AND *CREDENTIALS* -
  Cluster IP Address:
  Bucket Address: cos:
  Cloud Region: ap-gua
                ---- CLUSTER USERS AND *PASSWORDS*
                        Password:
  Username: user1
                                                            ENABLED
  Username: user2
                         Password:
                                                            ENABLED
  Username: user3
                        Password:
                                                            ENABLED
              DO NOT DISCLOSE THE INFORMATION TO OTHERS
```

请依次销毁如下资源:

1. 本集群所对应的所有节点,包括 nat 节点、database 节点、 master 节点、

compute 节点

- 2. 本集群所对应的 VPC 及其内部的所有资源
- **对于阿里云**,建议您直接在控制台上打开 VPC,查看其中的所有资源,并依次删除 文件存储、文件存储对应的权限组、ACL、交换机、安全组
- **对于腾讯云**,建议您在控制台上尝试删除 VPC,并按照相应的提示删除文件存储、 权限组、安全组等所有资源
- 对于 AWS(亚马逊云科技),建议您在控制台上尝试删除 VPC,并按照相应的提示 删除 VPC 内的残留资源之后再确认删除 VPC
- 3. 本集群所对应的对象存储桶, 名字为本集群的唯一识别码
- 4. 本集群所对应的对象存储专属用户:
- 对于 AWS (亚马逊云科技), 请打开 IAM 功能, 查看并删除该无用用户
- 对于阿里云,请打开 RAM 功能,查看并删除该无用用户
- 对于腾讯云,请打开 CAM 功能,查看并删除该无用用户
- 5. 本集群所对应的对象存储桶访问策略:
- 对于 AWS (亚马逊云科技), 您在上一个步骤中已经自动删除, 无需本操作
- 对于阿里云、请在 RAM 中打开 策略 自定义策略、查看并删除该策略
- 对于腾讯云,请在 CAM 中打开 策略 自定义策略,查看并删除该策略
- 6. 本集群所对应的资源组:
- 对于 AWS(亚马逊云科技),请搜索产品 Resource Group,找到并删除该资源组标签
- 对于阿里云,请搜索资源管理,找到并删除该资源组的标签
- **腾讯云**无需本操作

在完成以上步骤之后,请在本地运行 **hpcopr remove** 命令将该集群从本地 Registry 和文件目录之中彻底删除。