

华北电力大学高性能计算平台项目

HPC 部分使用手册

阿里云计算有限公司

日期：2023 年 12 月 5 日

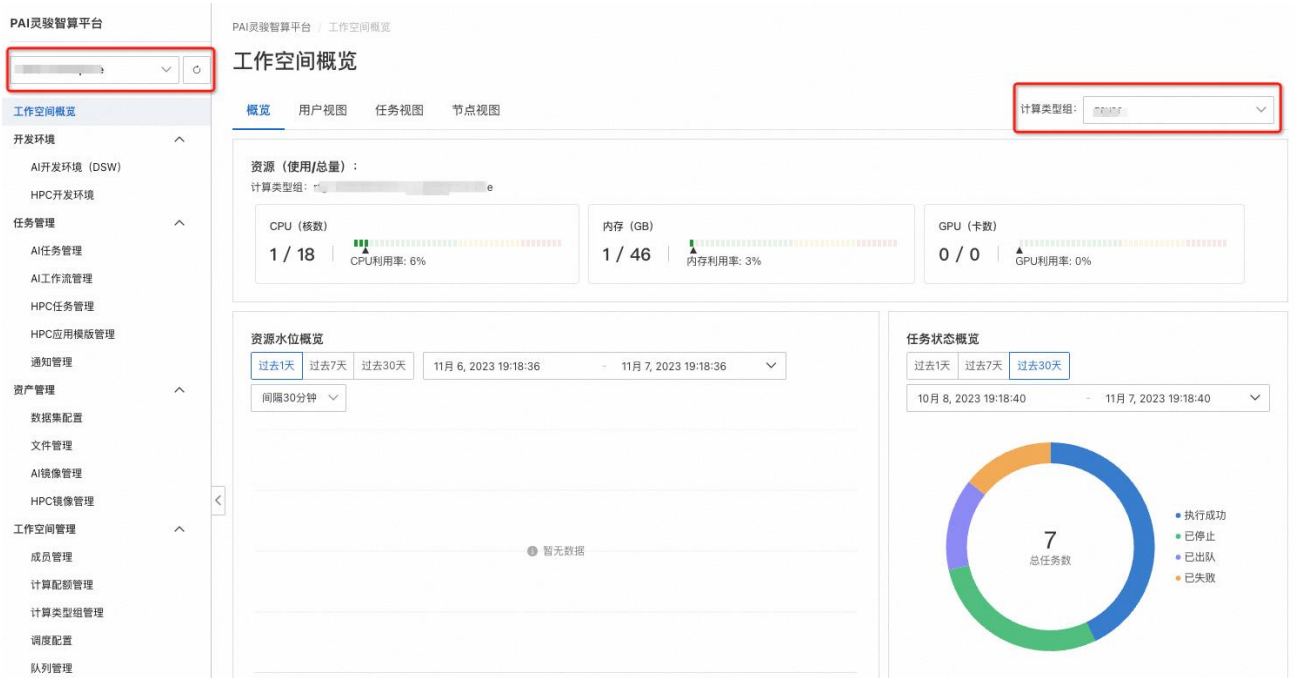
目 录

1.1 进入工作空间.....	1
1.2 准备数据.....	3
1.3 HPC 开发环境开发与调试.....	4
1.4 提交任务.....	11
1.4.1 HPC 任务管理.....	11
1.4.2 通知管理.....	24
1.5 高级功能.....	31
1.5.1 容错训练.....	31
1.5.2 HPC 任务模板.....	40
1.6 管理资产.....	49
1.6.1 文件管理.....	49
1.6.2 数据集配置.....	50
1.6.3 HPC 镜像管理.....	53

1.1 进入工作空间

用户登录平台后，自动进入一个**工作空间**，并打开该**工作空间**的**概览**页，显示缺省的**计算类型组**下的资源与任务的统计情况。如果用户拥有多个**工作空间**的权限，那么还可以通过控制台左上角的下拉框切换**工作空间**。如果该工作空间下有多个**计算类型组**，可以通过概览页右上角的**计算类型组**下拉框切换。

一. 工作空间概览



说明

1. 用户能够拥有多少个工作空间的权限，取决于他所隶属的项目，一个项目可以与一个或多个工作空间相关联，从而允许该项目内的成员使用对应的工作空间的资源。
2. 上图左侧菜单项是平台开发者功能的全集，其中工作空间管理功能只有工作空间管理员才可以看到。

3. 在概览页，可以看到在当前工作空间下某个计算类型组内的资源与任务情况。用户可以通过计算类型组下拉框切换不同的计算类型组，从而查看对应计算类型组的信息。这些信息包括：
4. 计算资源的用量与总量，包括 CPU、内存、GPU。
5. 资源水位概览，包括 CPU、内存、GPU，还可以通过选择图表右上角的下拉框选择资源统计的间隔时间。
6. 任务状态统计：按照任务不同状态统计的任务的数量。
7. 在概览页上有多个视图的页签，分别展示不同视图下的工作空间信息，包括：

二. 节点视图

节点视图：展示本工作空间下每个节点的基本信息、资源用量、I/O 读写速度、关联用户等信息。

节点名称	状态	CPU(用量/总量)	内存(用量/总量) (GB)	GPU(用量/总量)	GPU(卡型)	网络IO(读入/写出)	磁盘IO(读入/写出)
fudan-0146	NotReady	6 / 126	9.63 / 2012.99	6 / 8	nvidia_a100	0 / 0 MB/s	0 / 0 MB/s
fudan-0147	Ready	12 / 128	17.63 / 2015.18	7 / 8	nvidia_a100	0 / 0 MB/s	0 / 0 MB/s

< 1 > 10 条/页 ▾

三. 用户视图

用户视图：展示本工作空间下每个用户的资源使用情况、I/O 读写速度、节点使用情况等信息。

节点视图	用户视图	任务视图										
用户	CPU	CPU利用率	GPU	GPU利用率	内存(GB)	内存利用率	网络IO(读入/写出)	磁盘IO(读入/写出)	CPU节			
...	11	0%	7	0%	17	0%	0 / 0 MB/s	0 / 0 MB/s	0			
合计	11		7		17		0 / 0 MB/s	0 / 0 MB/s	0			

< 1 > 10条/页

四. 任务视图

任务视图：展示本工作空间下每个任务的资源使用情况、I/O 读写速度、节点使用情况等信息。

节点视图	用户视图	任务视图										
任务名称	用户	CPU	CPU利用率	GPU	GPU利用率	内存(GB)	内存利用率	网络IO(读入/写出)	磁			
tttt	...	1	0%	0	-	1	0%	0 / 0 MB/s				
Create_2023-06-21_10:49:55	...	1	0%	0	-	1	0%	0 / 0 MB/s				
hz1	...	1	0%	1	0%	1	0%	0 / 0 MB/s				

重要

- PAI 灵骏智算平台通过工作空间来隔离和管理不同的资产和任务。如果您拥有多个工作空间的权限，那么需要通过控制台左上角的工作空间下拉框选项，切换到不同的工作空间分别开发和管理。
- 您在不同工作空间下看到的内容是不同的，因此在开发和管理时，需要随时关注您当前工作在哪个工作空间下。

1.2 准备数据

本节介绍如何准备任务运行所需要的数据。

您可以将任务运行所需的数据上传到指定的存储路径下。上传和管理数据的途径有两种：

一. 文件管理

通过[资产管理](#)→[文件管理](#)，进入[文件管理](#)页面。一般情况使用这种方式即可，您可以方便地将本地文件上传到自己有权限的文件目录下。

二. 数据集管理

通过[资产管理](#)→[数据集管理](#)，进入[数据集配置](#)页面。如果您希望通过物理机的挂载点访问数据，则通过这种方式配置数据。

1.3 HPC 开发环境开发与调试

您可以使用 HPC 开发环境通过命令行或者图形界面在物理机上进行程序编写和调试工作，适合 HPC（也包括 AI）类型应用的开发和测试。本文为您介绍如何在 PAI 灵骏智算平台作业中心上创建和使用物理机开发环境，同时给出典型使用示例。

HPC 开发环境介绍

PAI 灵骏智算平台作业中心提供的 HPC 开发环境是通过 Slurm 管理的物理机共享使用机制，提供 Web Terminal 或者 VNC 可视化方式使用物理机资源。

HPC 开发环境管理

查看 HPC 开发环境列表

您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“[开发环境](#)→[HPC 开发环境](#)”菜单，进入“[HPC 开发环境](#)”界面查看 HPC 开发环境列表。



创建 HPC 开发环境

您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“开发环境->HPC 开发环境”菜单，进入“HPC 开发环境”界面使用 HPC 开发环境相关功能。单击“新建开发环境”按钮可以创建一个新的 HPC 开发环境。

创建 HPC 开发环境步骤

第一步：填写 HPC 开发环境基础信息

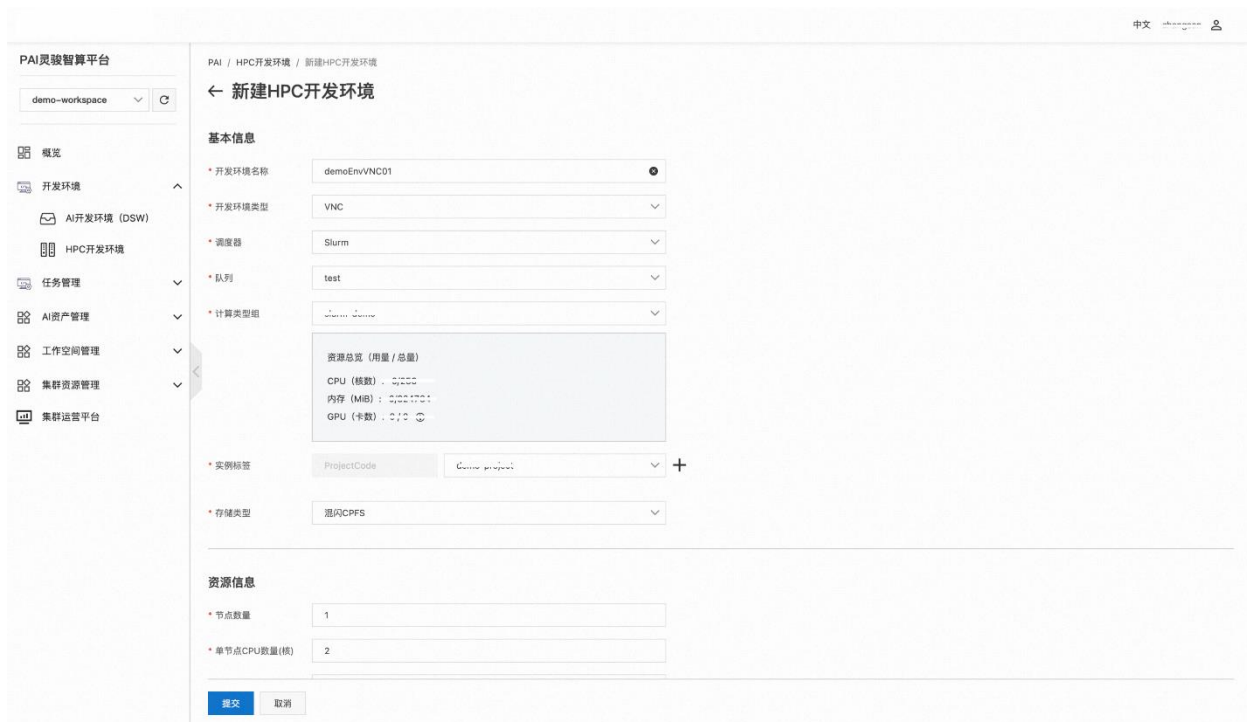
您可以在“基本信息”区域填写开发环境的基本信息，这些字段是开发环境的元数据，需要提供的字段和字段的取值范围说明如下表：

字段	必选字段	取值范围	说明
开发环境名称	必选	您可以输入一个合法的开发环境名称字符串，字符串的长度不得超过 20 字符，合法的字符包括：英文大小写字母、数字、下划线(_)、小数点(.)和中划线(-)	
开发环境类型	必选	您可以选择一种任务类型，目前支持两种开发环境： <ul style="list-style-type: none">• VNC：通过 VNC 图形界面使用物理机• Terminal：通过命令行界面是用物理机	
队列	必选	您可以从下拉菜单中选择一个作业队列。开发环境默认需要进入队列进行排队处理	
调度器	必选	您可以选择一种任务调度器，目前仅支持“Slurm”	后续平台会扩展支持其他调度器

计算类型组	必选	您可以从下拉菜单中选择一个计算类型组。选择后会显示该用户的计算资源限制情况，包括各类资源的总量和当前已用量	计算类型组与调度器相关联，选定了某种调度器后自动对计算类型组做筛选
实例标签	必选	实例标签目前包括固定的“Project Code”，用以指定用户作业对应的计费的项目编码，您可以从 Project Code 的 Value 域的下拉菜单中选择一个计费项目	除了固定的“Project Code”实例标签之外您还可以手动增加，最多支持 20 个实例标签。
存储类型	必选	您可以从下拉菜单中选择具体使用的存储类型。	

其中：

- “队列”、“调度器”和“计算类型组”是由 PAI 灵骏智算平台作业中心工作空间管理员在前序步骤中创建的，如果您在相应字段中没有合法可选值，请联系您的工作空间的管理员帮助创建。
- 实例标签的 Project Code 的值是 PAI 灵骏智算平台运营中心管理员管理和维护，如果您在提交任务时下拉列表中没有合法可选值，请联系 PAI 灵骏智算平台运营中心管理员创建。



第二步：填写 HPC 开发环境资源申请信息

您可以在“资源信息”区域填写开发环境的资源申请信息，也即您需要使用多少资源以及使用多久，具体需要提供的字段和字段的取值范围说明如下表格：

字段	必选字段	取值范围	说明
节点数量	必选	开发环境申请的节点数量，其中： VNC 类型的需要设置此值为“1” Terminal 类型的可以设置为自然数	
单节点 CPU 数量 (核)	必选	开发环境申请的单节点 CPU 核数，取值为自然数，当前固定为“1”	
单节点内存 (GiB)	必选	开发环境的内存容量需求，单位为 GiB	
单节点 GPU		开发环境申请的 GPU 卡型号和数量	

(卡类型:数量)			
使用时长(小时)	必选	开发环境使用时长, 单位为“小时”	超过使用时长的开发环境会被系统自动收回

完成开发环境的资源申请信息的配置系统会显示该任务总体的资源使用情况, 工作空间总体配额和用户的配额等信息。



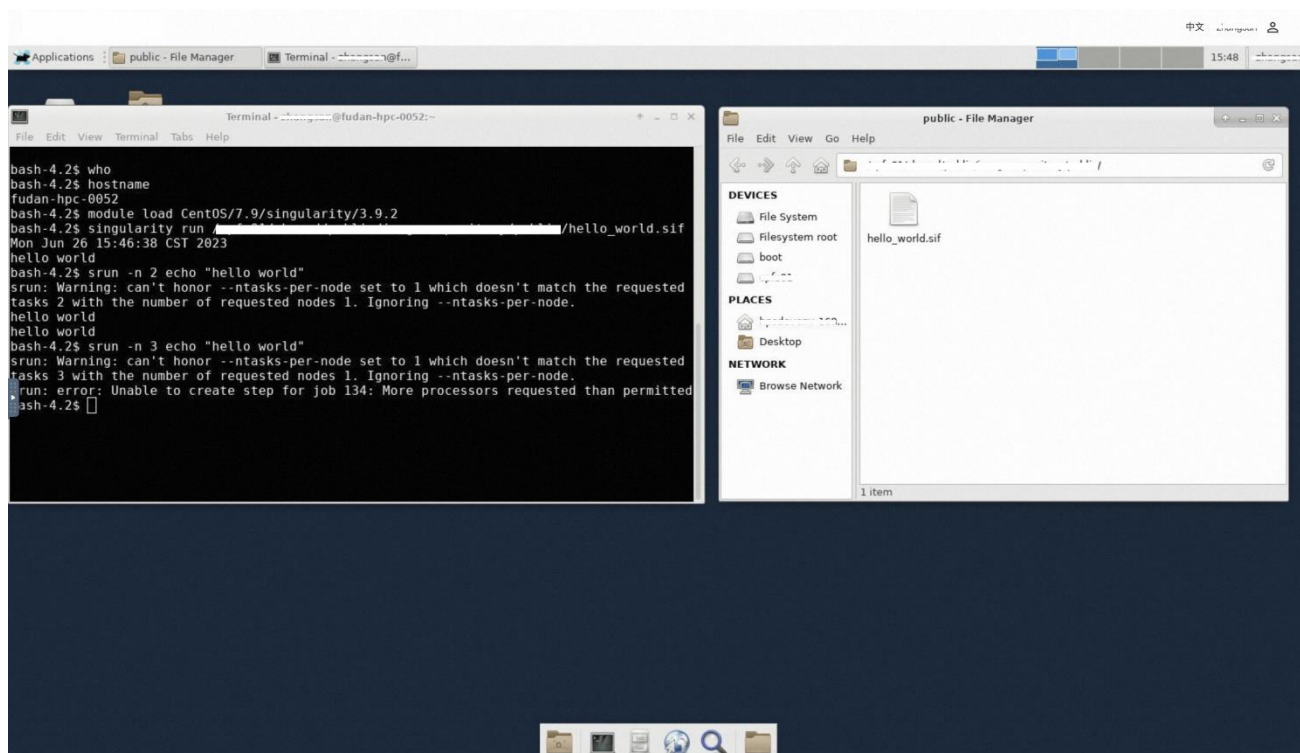
检查所有填写的信息准确无误后, 点击“提交”按钮提交开发环境申请, 系统会检测用户资源限制情况是否满足, 如果不满足相应资源限制则系统会给出提示, 开发环境申请提交成功。

HPC 开发环境使用

开发环境申请提交成功后等待系统调度该开发环境, 当开发环境状态为“运行中”时, 您可以点击开发环境记录的操作列的“打开”标签打开开发环境, 在此您就可以像使用普

通物理机窗口一样使用您申请的物理机。

下图为在 VNC 下打开 Terminal 和文件浏览器的使用示意。



当年关闭该窗口后，在此点击开发环境记录的操作列的“打开”标签会再次打开该环境，显示的状态为您上次离开时候的情况。

VNC 开发环境首次进入或者长时间无操作无操作会锁屏，您需要输入口令对开发环境进行解锁，默认的解锁口令是“admin”（或者联系您的系统管理员确认解锁口令）。

HPC 开发环境生命周期管理

查看开发环境详情

开发环境申请提交后，您可以点击开发环境名称进入某个开发环境的详情页面。您可以查看开发环境的基本信息，实例信息和调度的生命周期。同时您可以单击“打开”按钮进入 VNC 环境；单击“停止”按钮提前终止开发环境；单击“删除”按钮可以直接删除一

1.4 提交任务

1.4.1 HPC 任务管理

您可以通过该模块管理 HPC 物理机任务和容器任务。本文为您介绍如何在 PAI 灵骏智算平台作业中心上提交 HPC 物理机和容器任务，同时给出典型使用示例。

HPC 任务介绍

PAI 灵骏智算平台作业中心提供物理机/容器 Slurm 集群的作业提交和生命周期管理，平台支持通过 GUI 方式提交和管理 HPC 物理机任务，支持现场编辑脚本、已经编辑好的脚本和基于应用模板的方式提交物理机任务。

HPC 任务管理

[查看 HPC 任务列表](#)

您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“任务管理->HPC 任务管理”菜单，进入“HPC 任务”界面可以直接查看 HPC 任务列表。



[创建 HPC 任务](#)

[准备工作](#)

创建 HPC 任务需要您提前规划如下信息：

- **任务基础信息：**任务的名称、作业调度使用的调度器（目前仅支持 Slurm 调度器）、作业需要调度的计算资源组、用于用户作业计费的 Project Code 和作业运行截止的时间

- 子任务资源配置：子任务划分以及子任务的依赖（基于 Slurm Dependency）、子任务物理资源占用
- 子任务脚本：批处理任务脚本（目前支持 Slurm 调度器），您有以下几种方式指定任务脚本：
 - 路径提交：通过路径拾取器选择一个已经存在的任务脚本
 - 脚本提交：
 - 用户输入：您可以在平台上输入一个合法的任务脚本
 - 模板生成：您可以选择一个已经创建好的任务模板，选择任务模板后您可能需要提供模板要求的进一步输入信息

创建 HPC 任务步骤

您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“任务管理->“HPC 任务管理”菜单，进入“新建 HPC 任务”界面使用 HPC 任务相关功能。

第一步：设置任务的基本信息

您可以在“基本信息”区域填写任务的基本信息，这些字段是任务的元数据，需要提供的字段和字段的取值范围说明如下表格：

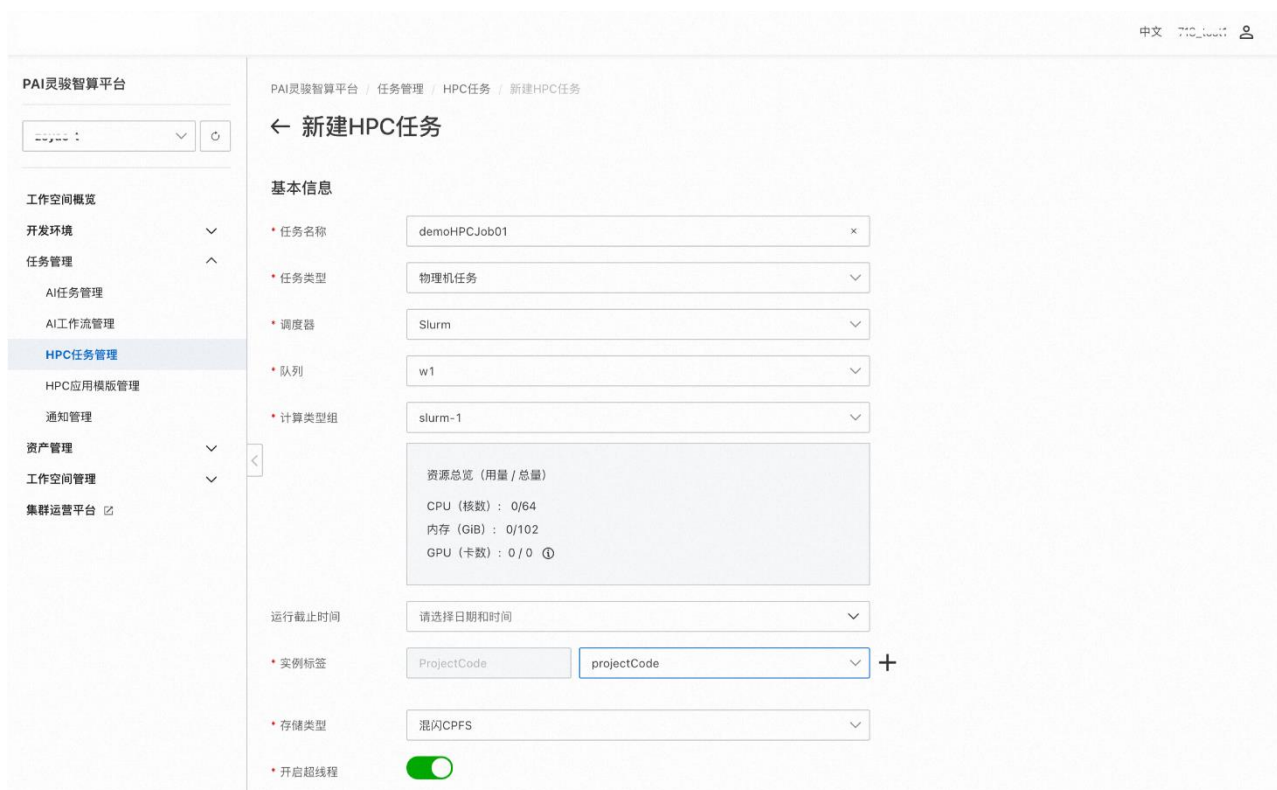
字段	必选字段	取值范围	说明
任务名称	必选	您可以输入一个合法的任务名称字符串，字符串的长度不得超过 20 字符，合法的字符包括：英文大小写字母、数字、下划线(_)、小数点(.)和中划线(-)	
任务类型	必选	您可以选择一种任务类型，可选的值包括： <ul style="list-style-type: none"> ● 物理机任务：使用物理集群 ● 容器任务：使用容器集群 	物理机任务和容器任务除了运行环境不一致之外，使用体验上是完全一致的。
用户镜像		仅当任务类型为“容器任务”时显示，您可以可选指定一个自定义的用户镜像。系	

		统部署时候已经提供了缺省的用户镜像，此处可以留空	
调度器	必选	您可以选择一种任务调度器，目前仅支持“Slurm”	后续平台会扩展支持其他调度器
队列	必选	您可以从下拉菜单中选择一个作业队列。 开发环境默认需要进入队列进行排队处理	
计算类型组	必选	您可以从下拉菜单中选择一个计算类型组。选择后会显示该用户的计算资源限制情况，包括各类资源的总量和当前已用量	计算类型组与调度器相关联，选定了某种调度器后自动对计算类型组做筛选
运行截止时间		您可以点击日期和时间拾取器选择一个未来时间作为作业停止运行的时间节点	
实例标签	必选	实例标签目前包括固定的“Project Code”，用以指定用户作业对应的计费的项目编码，您可以从 Project Code 的 Value 域的下拉菜单中选择一个计费项目	除了固定的“Project Code”实例标签之外您还可以手动增加，最多支持 20 个实例标签。
存储类型	必选	您可以从下拉菜单中选择具体使用的存储类型。	
开启超线程	必选	请可以选择是否开启 CPU 的超线程功能，默认是“打开”的状态	一些 HPC 应用对超线程支持不友好需要关闭超线程功能

其中：

- “队列”、“调度器”和“计算类型组”是由 PAI 灵骏智算平台作业中心工作空间管理员在前序步骤中创建的，如果您在相应字段中没有合法可选值，请联系您的工作空间的管理员帮助创建。

- 实例标签的 Project Code 的值是 PAI 灵骏智算平台运营中心管理员管理和维护，如果您在提交任务时下拉列表中没有合法可选值，请联系 PAI 灵骏智算平台运营中心管理员创建。



第二步：设置子任务资源配置和运行脚本

PAI 灵骏智算平台作业中心支持两种子任务提交方式：

- 标准模式：通过新建多个“子任务 Tab”方式创建和提交多个子任务，适用于 HPC 子任务数比较少且多个子任务的脚本差异比较大的情形；
- 进阶模式：通过“子任务命令行”方式创建和提交多个子任务，适用于同时提交数据巨大的 HPC 子任务的情形；

通过“标准模式”创建子任务

PAI 灵骏智算平台作业中心支持在同一个任务中包含多个子任务，多个子任务通过 Slurm Dependency 进行编排，如果您没有子任务编排需求，只创建一个子任务即可（系统默认创建一个子任务 Tab）。如果您有创建多个子任务的需求可以单击“**新子任务**”按钮添加新的子任务 Tab，并在新的子任务 Tab 中编辑相应子任务的资源需求和运行脚本。

在每个子任务 Tab 中您可以编辑改子任务的如下信息，需要提供的字段和字段的取值范围说明如下表格：

字段	必选字段	取值范围	说明
子任务名称	必选	您可以输入一个合法的子任务名称字符串，字符串的长度不得超过 20 字符，合法的字符包括：英文大小写字母、数字、下划线(_)、小数点(.)和中划线(-)	
依赖任务		任务存在多个子任务的情况下，您可以指定子任务运行依赖的子任务	平台目前仅支持 afterok 类型依赖，也即只有当被依赖的子任务运行成功，依赖的子任务才会启动运行。后续会扩展支持其他 Dependency 类型
节点数量	必选	子任务运行申请的节点数量，取值为自然数，默认值为“1”	
Task 申请方式	必选	子任务的 Slurm Task 数量，默认值为“1”，可以通过如下两种方式指定： <ul style="list-style-type: none"> 按总量申请：直接指定总体 Task 数量 按单节点申请：总体 Task 数量=单节点申请的 Task 数量（此处指定的）*节点数量 	
单 Task 核数	必选	子任务的每个 Task 运营使用的 CPU 核数，取值为自然数，默认值为“1”	MPI 分布式内存任务，一般设置为“1”即可；OpenMP 共享内存的任务，一般设置此值 > 1 每个 CPU 核扣除 1000m

			CPU 配额
内存	必选	<p>子任务的内存容量需求，单位为 MiB，默认值为“1 MiB”，可以通过如下两种方式指定：</p> <ul style="list-style-type: none"> 按单节点申请：按照每个节点维度申请子任务运行的内存需求 按单 Task 申请：按照每个 Task 维度申请子任务运行的内存需求 	
GPU 申请方式		<p>子任务的 GPU 需求，可以通过如下两种方式指定：</p> <ul style="list-style-type: none"> 按单节点申请：按照每个节点维度申请子任务运行的 GPU 需求 按单 Task 申请：按照每个 Task 维度申请子任务运行的 GPU 需求 	
子任务提交方式	必选	<p>子任务的运行脚本，您可以有如下两种方式指定该脚本：</p> <ul style="list-style-type: none"> 路径提交：直接通过路径拾取器选择一个已经存在的脚本 脚本提交： <ul style="list-style-type: none"> 用户输入：您可以现场编辑一个新脚本 模板生成：您可以选择一个已经存在的应用模板自动产生脚本 	<p>当您通过路径提交制定脚本时下拉框中没有候选路径是因为您的家目录中没有任何文件，您需要先行创建至少一个脚本文件再提交</p> <p>当您通过模板生成方式提交脚本时可能需要进一步填写模板生成的输入控件</p>

单击“更多配置”标签可以展开更多配置：

字段	必选字段	取值范围	说明

ArrayIndexes		如果您使用 Job Array, 此处用以指定子任务 Job Array 的编号, 缺省情况下则不使用该功能	目前仅支持从 0 开始的连续编号方式
运行时长		子任务运行最大运行时长, 单位为“分钟”, 如果缺省则不对子任务的运行时长进行控制	

完成每个子任务的资源配置, 系统会在子任务资源使用详情处罗列各种资源的使用情况。

同时系统会显示该任务总体的资源使用情况, 工作空间总体配额和用户的配额等信息。

检查所有填写的信息准确无误后, 点击“提交”按钮提交任务, 系统会检测用户资源限制情况是否满足, 如果不满足相应资源限制则系统会给出提示, 做业务提交成功。

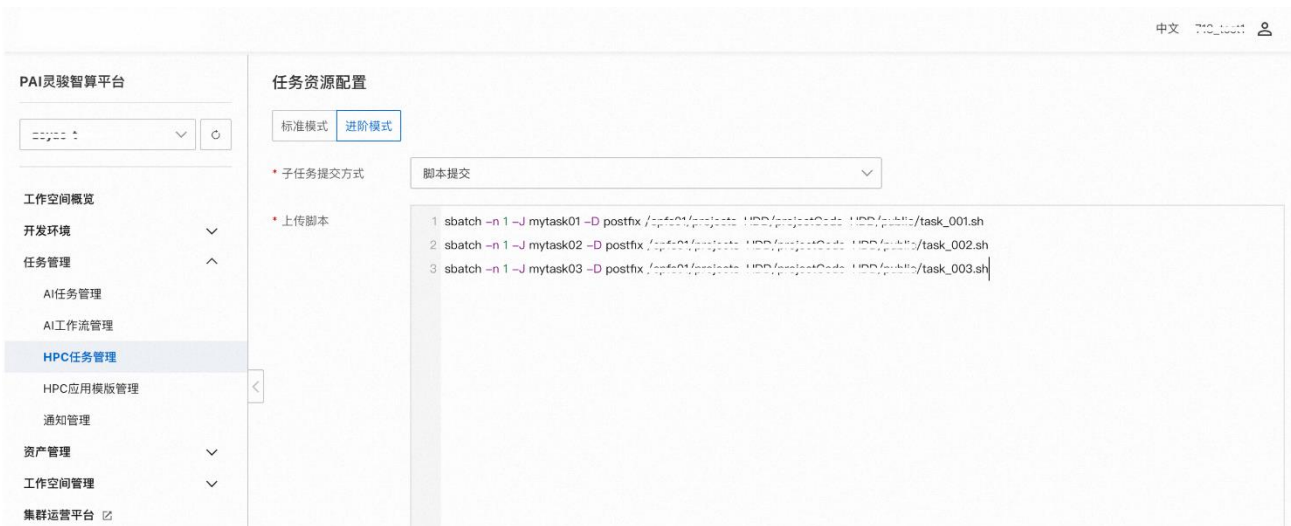
通过“进阶模式”创建子任务

PAI 灵骏智算平台作业中心支持在在一个“子任务命令行”文件中提交数量巨大的（具体支持多少需要根据您现场部署的软件版本确定，请在您的接口人确定）HPC 子任务。

字段	必选字段	取值范围	说明
子任务提交方式	必选	指定子任务提交方式，可选值包括： <ul style="list-style-type: none">• 路径提交：直接通过路径拾取器选择一个已经存在的“子任务命令行”文件• 脚本提交：现场编辑“子任务命令行”	
脚本路径	联动必选	仅当“子任务提交方式”为“路径提交”提交方式时显示，您可以通过路径拾取器选择一个已经存在的“子任务命令行”文件	
上传脚本	联动必选	仅当“子任务提交方式”为“脚本提交”提交方式时显示，您可以在多行文本编辑框内现场编辑“子任务命令行”	

使用“进阶模式”批量提交 HPC 任务您需要事先准备待提交的 Slurm 任务脚本并通过文件管理器上传到平台的用户 Home 目录（或者其他用户有权限的目录中，比如：public 目录）中，任务批量提交时每行写一个 sbatch 命令，sbatch 命令可以指定节点数、CPU 核数、内存容量、Task 数量、输出、工作目录和任务名等（与“标准”模式提供的信息量是对等的），具体支持在 sbatch 命令行指定的参数包括：

参数类别	参数	备注
节点相关	-N, --nodes=N	用户未填写时, 默认设置为 1
Task 申请	--ntasks-per-node=n	用户未填写时, 默认设置 task 数量为 1
	-n, --ntasks=ntask	
CPU 相关参数	-c, --cpus-per-task=ncpus	用户未填写时, 默认设置为 1 核
MEM 相关参数	--mem= MB / GB	用户未填写时, 默认设置为 1GB/核
	--mem-per-cpu= MB / GB	
其他	-o, --output=out	用户未填写时, 默认设置为 ./batch/%A-%a.err
	-e, --error=err	用户未填写时, 默认设置为 ./batch/%A-%a.err
	-D, --chdir=user-defined-postfix	/cpfs01/projects-HDD/<project-code>-HDD/<user-name>/<user-defined-postfix>
	-J, --job-name=jobname	用户未填写时, 默认设置为任务 id



注意，“子任务命令行”文件目前不支持 shell 脚本语句，请不要在批量提交输入框内边界 shell 脚本。以下为典型的批量提交的示例：

```

sbatch -n 1 -J mytask01 -D postfix /path-to-the-file/task_001.sh
sbatch -n 1 -J mytask02 -D postfix /path-to-the-file/task_002.sh
sbatch -n 1 -J mytask03 -D postfix /path-to-the-file/task_003.sh

```

通过命令行提交 HPC 任务

您可以使用平台提供的 Web Terminal 访问登录节点进而使用命令行（CLI）方式在平台上提交 HPC 任务。您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“任务管理”->“HPC 任务管理”菜单，进入“HPC 任务”界面后点击“创建 HPC 任务”按钮右边的“>_”按钮使用本功能。

您在使用 `sbatch` 提交任务之前需要事先执行以下初始化设置命令，该命令用于注册一个平台 HPC 任务，对应到平台 Web 页面里边的一个任务记录。一个任务下面可以支持最多 10,000 个通过 `sbatch` 命令提交的子任务。

在 20 分钟内您可以持续向同一个任务提交多达到 10,000 个 `sbatch` 子任务，20 分钟后您需要重新通过 `source` 命令重新注册一个新的任务，为了区分不同的任务，建议您至少

要修改任务的 Job Name（即-j 参数）。

```
source /etc/threeCenter/hpcJobInit.sh
```

执行命令您需要提供如下必要参数，各个参数的含义和示例参数如下表：

参数	参数含义	参数举例
-r	任务提交到的计算类型组的 ID	rtg-123456789-asdfghjkl
-p	任务提交所使用的 Project Code	1100-project
-d	任务使用的磁盘类型	HDD / SSD
-q	任务提交的队列 ID	queue-123456789-qwertyuio
-j	平台上管理和显示的任务名称	demo_job_name
-u	提交任务使用的用户 ID，可在平台右上角用户信息处获取	601
-i	提交任务使用的用户 AccessID，可在平台右上角用户信息处获取	demo_user
-a	提交任务使用的用户 AccessKey，可在平台右上角用户信息处获取	aqwErtyuiopLMnbvcx

完成以上任务信息注册后，您可以准备子任务的 Slurm 脚本，如下是一个典型的 slurm 脚本：

```
#!/bin/bash
```

```

module purge
module load CentOS/7.9/blast/2.14.0+
data_folder=/cpfs01/projects-HDD/projectCode-HDD/public
srun blastp -query $data_folder/testdna.fa -db $data_folder/swiss/sw -out
my_results.txt

```

在 20 分钟内您可以持续向同一个任务提交多个 **sbatch** 子任务，您可以手动提交，也可以通过脚本自动提交，但请确保在 20 分钟内完成提交动作，目前版本您可以提交最多 10,000 个子任务。

Bash

以下参数是您在提交子任务时建议显式指定的参数，如果不提供会被系统默认值替代，可能不符合您的原始意图。

参数类别	参数	说明
节点申请	-N, --nodes	用户未填写时，默认设置为 1
Task 申请	--ntasks-per-node -n, --ntasks	用户未填写时，默认设置 task 数量为 1
CPU 参数	-c, --cpus-per-task	用户未填写时，默认设置为 1 核
内存参数	--mem, --mem-per-cpu	内存相关的参数必须设置，单位可以为 MB/GB 重要

		在 sbatch 提交命令中必须显式指定内存参数
工作目录	-D, --chdir=user-defined-postfix	完整路径如下 (相比 slurm 原生我们强制加了平台相关的前缀路径): /cpfs01/projects-HDD/<projectCode>-HDD/<user-name>/<user-defined-postfix>
子任务名称	-J, --job-name=jobname	用户未填写时, 默认设置为任务 id

HPC 任务管理

查看 HPC 任务详情

HPC 任务提交后, 您可以点击任务名称或者任务记录操作列的“详情”标签进入某个任务的详情页面。

The screenshot displays the PAI HPC task management interface. The main content area shows the details for a task named 'demoHPCJob01'. The interface includes a sidebar with navigation options like '工作空间概述', '开发环境', '任务管理', and 'HPC任务管理'. The main panel is divided into several sections:

- 基本信息 (Basic Information):** A table showing task ID, user, queue, and other metadata.
- 任务配置 (Task Configuration):** A table showing task name, submission method, and path.
- 任务列表 (Task List):** A table listing individual tasks with columns for name, ID, status, start time, end time, node count, CPU, memory, and GPU usage.

The task list table contains the following data:

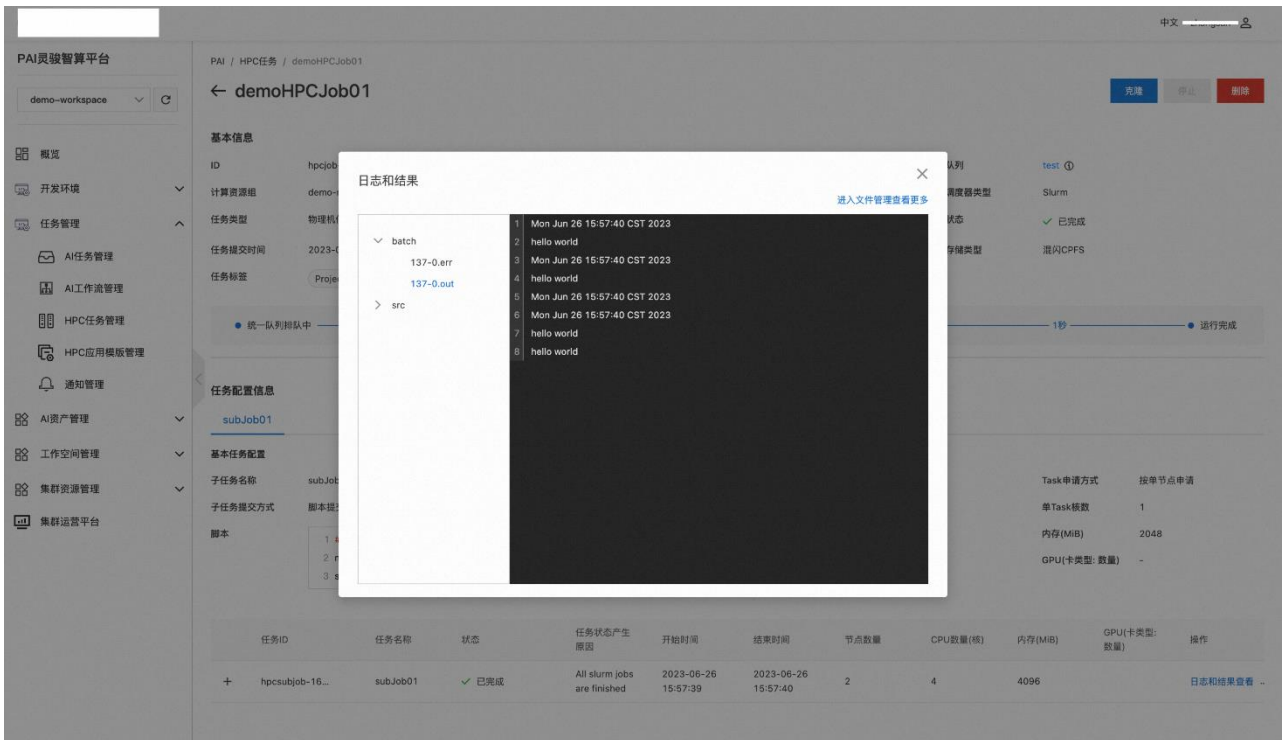
任务名称	slurm任务id	状态	开始时间	结束时间	节点数量	CPU数量(核)	内存(MB)	GPU(卡类型: 数量)	操作
Sub.Job01	1565660	运行中	2022-03-16 16:03:46	-	2	4	4096	-	结果查看

HPC 任务详情页面您可以查看到任务的：

- 基本信息和任务调度时间轴
- 子任务配置信息：如果存在多个子任务，每个子任务会有一个独立的 Tab，在每个子任务的 Tab 中您可以查看子任务的资源配置情况，子任务的运行脚本。

查看 HPC 任务的运行结果

在 HPC 任务的详情页面，单击每个子任务记录操作列的“日志和结果查看”标签会打开日志和结果查看页面，您可以查看子任务运行的结果、作业日志和提交的作业脚本。



1.4.2 通知管理

PAI 灵骏智算平台 AI 任务支持基于钉钉 Webhook 或企业微信 Webhook 进行消息推送，您可以通过创建通知渠道并关联通知规则，实现消息推送，更及时的跟踪您的训练任务状态的变化。本节介绍如何创建通知渠道及关联通知规则。

一. 创建通知渠道

下面以钉钉 Webhook 为例，介绍如何创建通知渠道，具体操作步骤如下所示。

1. 登录到 PAI 灵骏智算平台。

2. 按照下图操作指引，进入**通知渠道**页面。

PAI-DLC 支持基于钉钉 Webhook 或企业微信 Webhook 进行消息推送，您可以通过创建通知渠道并关联通知规则，实现消息推送，更及时的跟踪您的训练任务状态的变化。本文为您介绍如何创建通知渠道及关联通知规则。

3. 在**通知渠道**页签，单击**新建通知渠道**。

4. 在**新建通知渠道**对话框，配置以下参数。

参数	描述
渠道名称	通知渠道的名称。
渠道类型	支持以下两种渠道类型： <ul style="list-style-type: none">○ DingTalkWebhook○ WechatWebhook
渠道地址	如果您选择的是 Webhook 类型，此处填写 access_token。关于如何获取 access_token，详情请参见附录：获取 Access_token。

二. 关联通知规则

通知规则是指您希望在何种条件下，触发何种消息渠道的通知，关联通知规则的操作步骤如下所示。

1. 按照下图操作指引，进入**通知规则**页面。



2. 在通知规则页签，单击**新建通知规则**。

3. 在**新建通知规则**对话框，配置以下参数。



其中：

- **所属工作空间**：只通知该工作空间内的训练任务的状态。
- **通知渠道**：选择您创建的通知渠道。

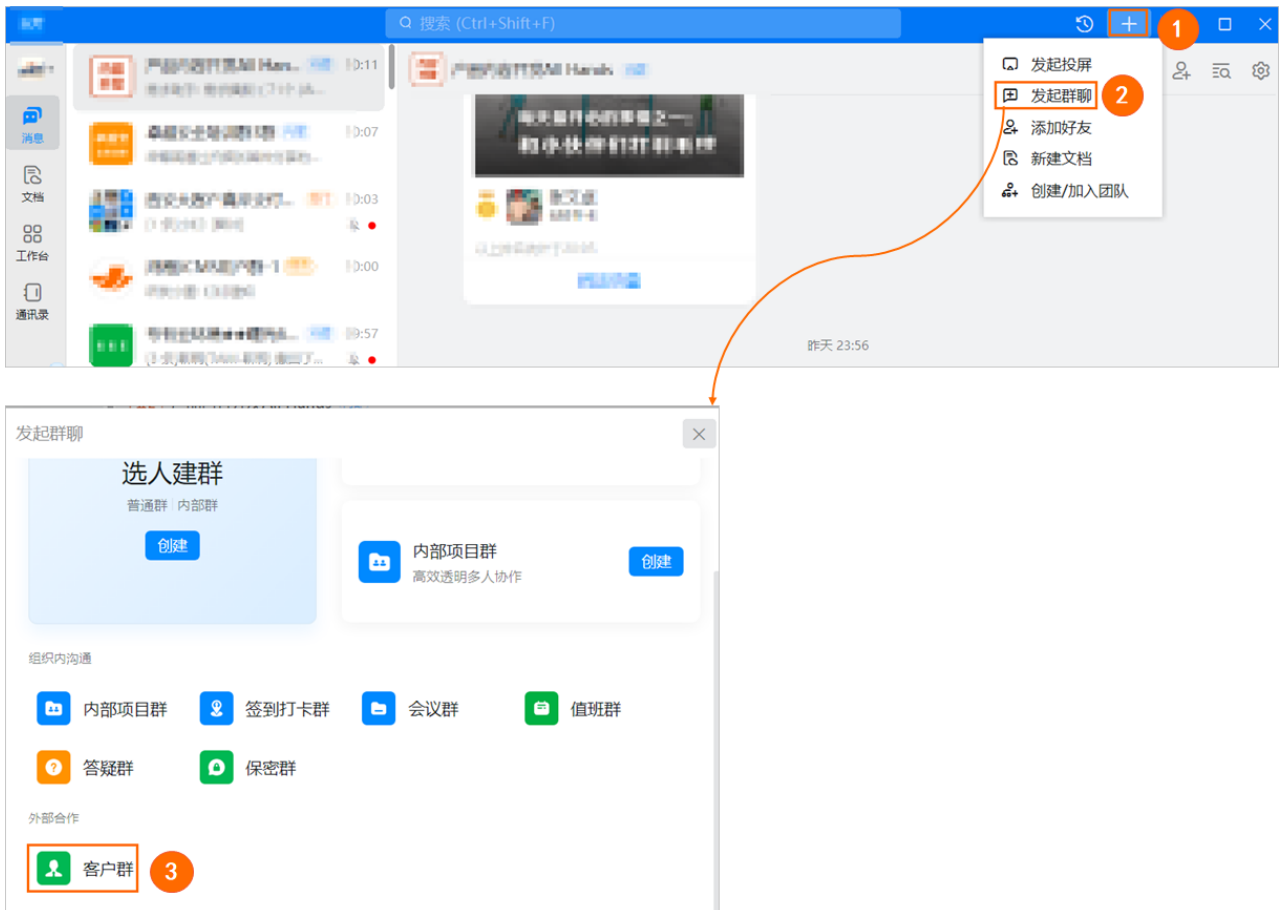
4. 单击**确定**。

当通知规则创建成功后，**启用状态**默认为**开启**状态。当训练任务状态变化时或子任务状态失败时，您会收到钉钉消息通知。

三. 附录：如何获取 Access_token

下面以钉钉群组机器人为例，介绍如何获取 access_token，具体操作步骤如下所示。

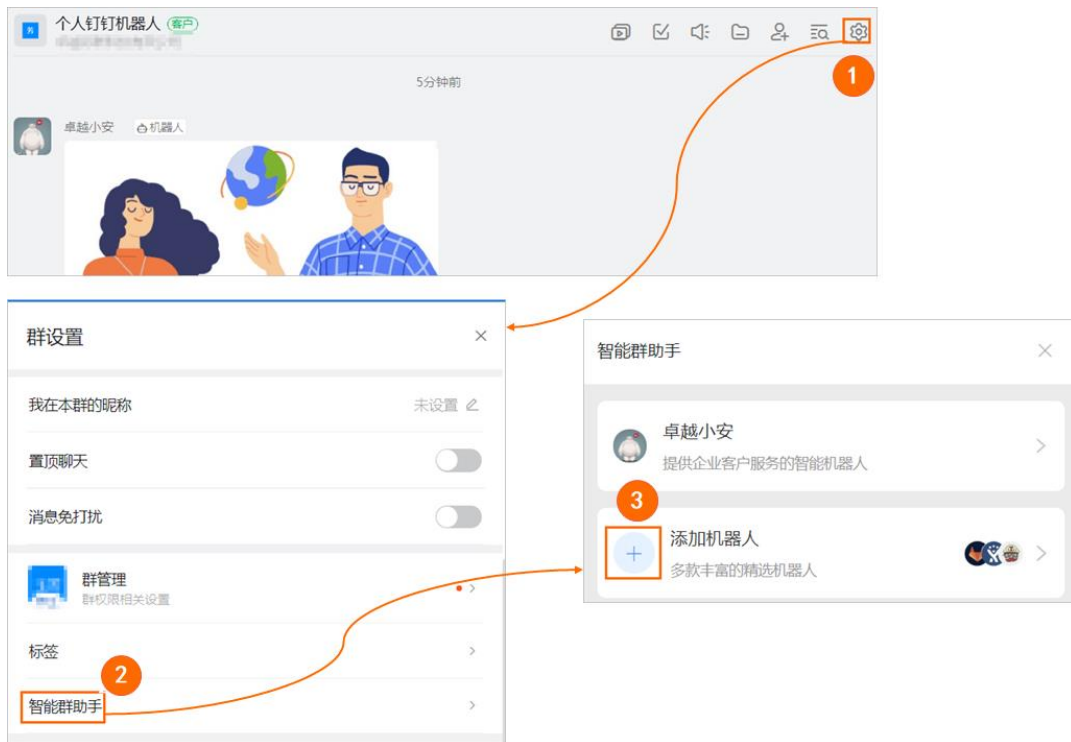
1. 在钉钉页面，按照下图操作指引，发起群聊。



2. 在发起群聊对话框，输入群名称并选择企业名，单击立即创建。



3. 在个人钉钉机器人群聊页面，按照下图操作指引，进入群机器人对话框。



4. 按照下图操作指引，进入**添加机器人**对话框。



5. 在**添加机器人**对话框，配置以下参数，并单击完成。

重要

其中**安全设置**需要选中**自定义关键词**，并配置为**PAI**，否则将无法收到消息。

添加机器人

机器人名字: ken的钉钉机器人

* 添加到群组: 个人钉钉机器人

* 安全设置 ?

说明文档

自定义关键词

pai

⊕ 添加 (最多添加 10 个)

加签

IP地址 (段)

我已阅读并同意《自定义机器人服务及免责条款》

取消 完成

6. 在**添加机器人**对话框，单击**复制**。



其中 Webhook 链接中 `access_token=` 后的内容, 即为您需要获取的 `access_token`。

企业微信 Webhook 的 `access_token` 获取方式同钉钉 Webhook, 最终会生成 Webhook 链接, 比如 `https://qyapi.weixin.qq.com/cgi-bin/webhook/send?key=a412d913-335a-4973-a36d-ffc78282xxxx`, 其中 `key=` 后的内容即为 `access_token`。

1.5 高级功能

1.5.1 容错训练

本文介绍如何使用 PAI 灵骏智算平台 **AI 任务管理** 提供的基于 AIMaster 的容错训练功能。

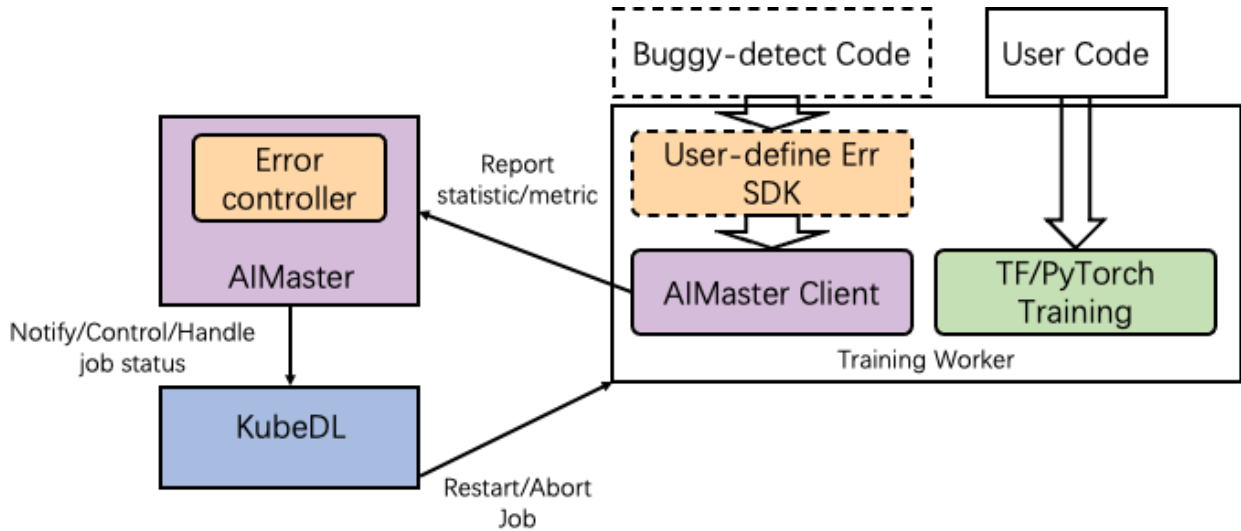
容错训练 AIMaster

当前深度学习已被广泛使用, 随着模型和数据规模越来越大, 常采用分布式方式运行

深度学习任务。当同一个任务运行实例个数增大后，由于依赖的软件栈和硬件环境都有可能

出现偶发异常，会导致任务停止运行。

为了保障大规模分布式深度学习任务稳定运行，PAI-DLC 提供了基于 AIMaster 的容错训练功能。整个基于 AIMaster 的容错训练系统架构如下图所示。



AIMaster 是一个任务级别的组件，当任务开启 AIMaster 的容错训练功能后，会拉起一个 AIMaster 实例和任务其他实例一起运行，起到任务监控、容错判断、资源控制的作用。

在作业容错训练方面，AIMaster 中集成了两个模块，一个是沉淀了我们的经验的通用错误监控和规避模块，二是 AIMaster 通过向用户提供 python 的 sdk，允许用户自定义容错信息，AIMaster 会自动扫描出错 pod 的日志并和自定义容错信息对比，若满足容错条件会触发容错。

使用流程

步骤一：配置容错训练参数

首先根据 AIMaster 支持的全量参数说明，并参考容错训练参数配置示例，来配置额外参数。

步骤二：开启容错训练功能

您可以在提交 PAI-DLC 训练任务时，通过控制台或 SDK 的方式开启容错训练控功能。

任务运行异常时，会根据配置的额外参数，对任务进行相应的处理，从而保障任务能正常运行。

步骤三：配置容错训练增强功能

如果当前的容错训练配置不能满足您的要求，您可以使用容错训练增强功能，通过 AIMaster SDK 自定义容错关键字。任务运行过程中，AIMaster 会自动扫描出错节点的日志，并和自定义容错信息对比，如果满足容错条件，也会触发容错。

步骤一：配置容错训练参数

当前容错训练功能支持配置的参数如下，您可以提前规划好要为任务配置的容错训练内容。后续开启容错训练功能时，将已规划的容错训练内容配置到额外参数即可。

配置分类	功能介绍	配置参数	参数说明	默认值
通用配置	任务运行类型	--job-execution-mode	配置任务运行类型，取值如下： <ul style="list-style-type: none"> • Sync：同步任务。 • Async：异步任务。 不同任务类型容错行为不同。对于可重试错误： <ul style="list-style-type: none"> • 同步任务需要重启任务。 • 异步任务一般只需重启失败的 Worker 实例。 	Sync
	任务最大运行时长	--job-max-running-time	配置任务允许的最大运行时长，正整数，单位为分钟。 如果任务运行时长超过该值后，则将任务标记为失败。 默认值为-1，表示不开启该功能。 说明：	-1

			<ul style="list-style-type: none"> • 当该参数取值为-1时，任务最大运行时长以控制台配置时间为准。 • 当控制台和容错训练参数均配置了任务最大运行时长时，以最短的时长为准。 	
	任务 重启 设置	--enable-job-restart	<p>在满足容错条件或检测到运行时异常时，是否允许任务重启。取值如下：</p> <ul style="list-style-type: none"> • False：不重启任务。 • True：重启任务。 	False
		--max-number-of-job-restart	<p>配置任务最大重启次数。超过最大重启次数后，会将任务标记为失败。</p>	3
运行时 配置 (针对 没有 Worker 实例失 败的场 景)	任务 Hang (停止执 行) 异常检 测	--enable-job-hang-detection	<p>是否开启任务 Hang 异常检测，只支持同步任务。取值如下：</p> <ul style="list-style-type: none"> • False：表示不开启。 • True：表示开启。如果所有 Worker 实例的 Stdout 和 Stderr 日志在指定时间内没有更新，将触发任务重启。 	False
		--job-hang-interval	<p>配置任务暂停执行的持续时长，正整数，单位为秒。</p> <p>当任务暂停执行时长超过该值时，则将任务标记为异常，并触发任务重启。</p>	1800

	任务退出时 Hang (停止执行) 异常检测	<p>--enable-job-exit-hang-detection</p>	<p>是否开启任务退出时 Hang 异常检测，只支持同步任务。取值如下：</p> <ul style="list-style-type: none"> • False: 表示不开启。 • True: 表示开启。当任务某个 Worker 实例执行成功后，如果在指定时间内任务没有结束，将触发任务重启。 	False
		<p>--job-exit-hang-interval</p>	<p>配置任务退出时停止执行的持续时长，正整数，单位为秒。</p> <p>当任务退出时长超过该值时，则将任务标记为异常，并触发任务重启。</p>	600
容错配置 (针对有 Worker 实例失败的场景)	容错策略	<p>--fault-tolerant-policy</p>	<p>容错策略参数取值如下：</p> <ul style="list-style-type: none"> • OnFailure: 任务实例出现异常时： <ul style="list-style-type: none"> ○ 异步任务会无条件重启失败的 Worker 实例。 ○ 同步任务会无条件重启任务。 • ExitCodeAndErrorMsg: 任务出现异常时，判断失败 Worker 实例的退出码及错误日志信息，如果满足重试条件： <ul style="list-style-type: none"> ○ 异步任务会重启失败的 Worker 实例。 ○ 同步任务会重启任务。 • Never: 对失败任务不做任何处理，直接将任务标记为失败。 	Never
	相同	<p>--max-num-</p>	<p>配置单个 Worker 实例上同</p>	10

错误 最大 允许 出现 次数	of-same- error	一错误允许出现的最大次数。 当错误出现次数超过该值时，直接将任务标记为失败。	
最大 容错 率	--max- tolerated- failure-rate	配置最大容错率。 当失败 Worker 实例比例超过该值时，直接将任务标记为失败。 默认值值为-1，表示不开启该功能。	-1


步骤二：开启容错训练功能

您可以在提交 PAI-DLC 训练任务时，开启**容错训练**功能。

通过控制台开启容错训练功能在控制台提交 PAI-DLC 训练任务时，您可以在**基本信息**区域，打开**容错训练**开关，并配置**额外参数**，详情请参见[新建任务](#)（通过控制台）。

← 新建任务

基本信息

• 计算类型组:	请选择	⌵	⊗
• 任务队列	请选择	⌵	
• 任务名称	<input type="text"/>		
• 任务类型	PyTorch	⌵	
• 实例标签	ProjectCode	请选择	⌵ ⊕
数据集配置	请选择	⌵	⊗
• 执行命令 	<input type="text"/>		
容错配置	<input checked="" type="checkbox"/>		
额外参数	<input type="text"/>		

其中：**额外参数**的配置详情，请参见以上步骤一的说明。

步骤三：配置容错训练增强功能

您可以通过 AIMaster 的 SDK，在您自己的代码里根据不同的场景配置容错训练增强功能。

1、使用以下命令安装 AIMaster SDK

```
pip install -U https://pai-dlc.oss-cn-zhangjiakou.aliyuncs.com/aimaster/aimaster-1.1.6-cp36-cp36m-linux_x86_64.whl
```

2、配置容错训练增强功能

(1) 配置自定义容错关键字

容错训练功能已内置了常见的可重试错误的监控模块，如果您希望异常 Worker 实例日志中出现某些关键字时也进行容错，则可以在您的代码中使用以下方法进行配置。配置完成后，容错训练模块会扫描失败的 Worker 实例尾部日志进行关键信息匹配。

说明

配置自定义容错关键字时，容错策略需要配置为 `ExitCodeAndErrorMsg`。

PyTorch 任务自定义容错关键字配置示例：

```
from aimaster import job_monitor as jm

jm_config_params = {}

jm_config = jm.PyTorchConfig(**jm_config_params)

monitor = jm.Monitor(config=jm_config)

monitor.set_retryable_errors(["connect timeout", "error_yyy", "error_zzz"])
```

说明

其中：`monitor.set_retryable_errors` 中配置的参数即为自定义容错关键字。

(2) 分阶段自定义任务 Hang 异常检测

目前任务 Hang 异常检测的配置是针对整个任务的，但是任务状态是分阶段的。例如：构建通信训练任务时，规模大且耗时长，但训练阶段日志更新比较快。为了在训练过程中能快速发现任务 Hang 异常的节点，PAI-DLC 提供了分阶段自定义任务 Hang 异常检测功能，支持您在不同训练阶段配置不同的任务 Hang 异常检测时长，具体配置方法如下。

```
monitor.reset_config(jm_config_params)

# Example:

# monitor.reset_config(job_hang_interval=10)
```

```
# or
# config_params = {"job_hang_interval": 10, }
# monitor.reset_config(**config_params)
```

PyTorch 任务分阶段自定义任务 Hang 异常检测示例如下。

```
import torch

import torch.distributed as dist
from aimaster import job_monitor as jm

jm_config_params = {
    "job_hang_interval": 1800 # 全局 30min 检测
}

jm_config = jm.PyTorchConfig(**jm_config_params)
monitor = jm.Monitor(config=jm_config)

dist.init_process_group('nccl')

...

# impl these two funcs in aimaster sdk
# user just need to add annotations to their func
def reset_hang_detect(hang_seconds):
    jm_config_params = {
        "job_hang_interval": hang_seconds
    }
    monitor.reset_config(**jm_config_params)

def hang_detect(interval):
    reset_hang_detect(interval)
```

```
...

@hang_detect(180) # reset hang detect to 3 min, only for func scope
def train():
    ...

@hang_detect(-1) # disable hang detect temperally, only for func scope
def test():
    ...

for epoch in range(0, 100):
    train(epoch)
    test(epoch)
    self.scheduler.step()
```

1.5.2 HPC 任务模板

您可以通过应用模板将常用的 HPC 任务脚本加以抽象变成通用的模板，可以提升您提交作业的效率，积累行业 HPC 行业使用习惯。本文为您介绍如何在 PAI 灵骏智算平台作业中心上创建 HPC 任务模板，和使用模板提交 HPC 任务，同时给出典型使用示例。

HPC 任务模板介绍

HPC 任务模板是指为特定的科学或工程应用程序创建的通用配置文件或脚本模板，这些模板包含了预定义的变量和参数，可以用于快速构建和定制特定的应用程序。HPC 任务模板通常包括了应用程序的执行命令、输入和输出文件的位置、调度系统的参数等信息，可以在不同的 HPC 系统上运行相同的应用程序，从而提高了应用程序的可移植性和可重复性。

HPC 任务模板的作用主要有以下几点：

1.提高应用程序的可重复性：HPC 应用模板可以确保在不同的 HPC 系统上以相同的方式运行应用程序，从而提高了应用程序的可重复性。

2.提高应用程序的可移植性：HPC 应用模板可以在不同的 HPC 系统上使用，从而提高了应用程序的可移植性，使得应用程序可以更容易地迁移到其他系统上。

3.提高应用程序的性能：HPC 应用模板可以针对特定的 HPC 系统进行优化，从而提高应用程序的性能，使得应用程序能够更快地执行。

4.提高应用程序的可维护性：HPC 应用模板可以将应用程序的配置信息和参数保存在一个文件中，从而使得应用程序更容易维护和修改。

HPC 应用模板可以使得科学和工程研究人员更容易地使用 HPC 系统来运行他们的应用程序，提高了应用程序的可重复性、可移植性、性能和可维护性。

以下是 Slurm 调度器执行 GROMACS 带有 5 个作业步的典型的 HPC 应用，脚本用到的输入输出和控制累的参数很多，通过调整不同参数可以快速形成不同的用途的应用脚本，HPC 任务模板支持对脚本中的变量部分进行抽离和定义，将一个专用的脚本转变成一个可以共享的通用脚本。

```
#!/bin/bash

#Gromacs 脚本示意，运行需根据实际情况做调整

#SBATCH --job-name="gromacs"

#SBATCH --nodes=1

#SBATCH --ntasks-per-node=8

#SBATCH --mem-per-cpu=2000M

#SBATCH --time=24:00:00

#SBATCH --output=gromacs.out

#SBATCH --error=gromacs.err

module load gromacs
```

第一个作业步：能量最小化

```
gmx grompp -f em.mdp -c start.gro -p topol.top -o em.tpr  
mpirun -np 8 gmx_mpi mdrun -v -deffnm em
```

第二个作业步：等温压缩

```
gmx grompp -f npt.mdp -c em.gro -p topol.top -o npt.tpr  
mpirun -np 8 gmx_mpi mdrun -v -deffnm npt
```

第三个作业步：等温动力学模拟

```
gmx grompp -f md.mdp -c npt.gro -t npt.cpt -p topol.top -o md_0_1.tpr  
mpirun -np 8 gmx_mpi mdrun -v -deffnm md_0_1
```

第四个作业步：继续等温动力学模拟

```
gmx grompp -f md.mdp -c md_0_1.gro -t md_0_1.cpt -p topol.top -o md_1_2.tpr  
mpirun -np 8 gmx_mpi mdrun -v -deffnm md_1_2
```

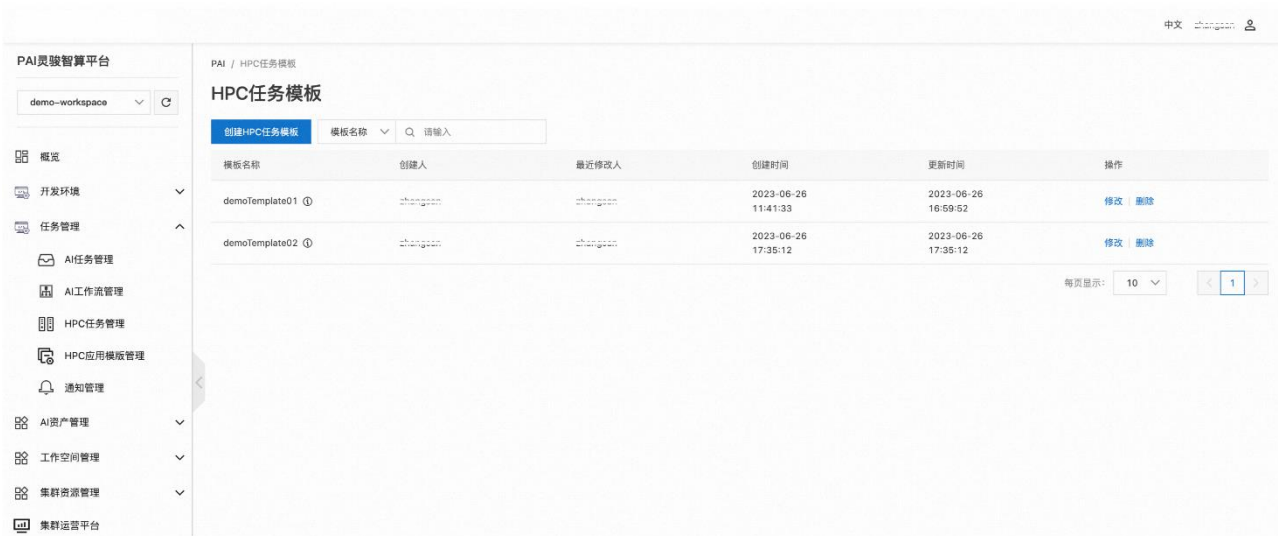
第五个作业步：分析动力学模拟结果

```
gmx rms -s md_1_2.tpr -f md_1_2.xtc -o rmsd.svg -tu ns  
gmx rmsf -s md_1_2.tpr -f md_1_2.xtc -o rmsf.svg -resnr
```

HPC 任务模板管理

查看 HPC 任务模板

您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“任务管理->HPC 应用模板管理”菜单，进入“HPC 任务模板”界面可以直接查看物理机 HPC 任务模板列表。



创建 HPC 任务模板

准备工作

创建 HPC 任务模板您需要经过如下几个步骤：

- 规划和思考脚本中有哪些内容需要抽离标准化成为控件的，以及哪种类型的控件能更加方便的解决您的问题

- 在“任务自定义参数”编辑用户自定义输入控件

- 在“任务脚本模板”编辑区编辑 HPC 任务模板的脚本，在这里您可以应用系统内置的“任务通用参数”，也可以引用第二步中自定义的“任务自定义参数”

创建 HPC 任务模板步骤

第一步：在“任务自定义参数”编辑用户自定义控件

“任务自定义参数”编辑区支持通过拖拽方式快速搭建网页控件，目前 PAI 灵骏智算平台支持 5 种输入类型控件和 1 种展示类型控件，控件的功能介绍如下表：

控件名称	控件类型	功能描述
输入框	输入控件	用来承载用户在模板中自定义输入的单行文本信息

多行输入	输入控件	用来承载用户在模板中自定义输入的多行文本信息
选择框	输入控件	用来承载用户在模板中事先指定的枚举类型的文本信息
单选框组	输入控件	用来承载用户在模板中事先指定的枚举类型的文本信息
开关	输入控件	用来承载用户在模板中输入是非/开关类型的变量信息
文本	展示控件	只读控件，用来单向展示信息，不用做输入

对每个控件您都可以编辑控件的属性，下面以“输入框”控件的属性为例说明控件的诸多属性的功能定义。

控件属性	控件属性功能说明
字段标识	控件的 ID，用于后续在“任务脚本模板”编辑阶段引用该控件的值
标题	控件的标题，显示在控件的标题栏
描述	控件的提示信息，用于提示该控件的输入限制、功能提醒能
默认值	控件的默认值
可选项	用于“选择框”等提供多个选项的控件输入多个值
检验规则	控件输入值的校验规则设置
必填	用以确定该控件是否为必选项

下图是对“HPC 任务模板介绍”章节提到的示意任务脚本的第一个作业步中的命令参

数做了抽离形成任务模板，分别添加了 1 个“选择框”和 4 个“输入框”空间，图中展示了一个“输入框”的属性设置。在编辑状态下已经添加的控件可以上下拖动变换位置，不需要的控件可以删除。



第二步：在“任务脚本模板”编辑区编辑 HPC 任务模板的脚本

以下表格中的字段为 PAI 灵骏智算平台作业中心提供的物理机 HPC 任务的默认元数据，您可以直接引用。

任务输入域	任务变量字段标识	任务变量解释
任务名称	job_name	任务名称
工作空间	job_workspace	任务所属工作空间 ID
任务类型	job_type	任务类型

调度器	job_scheduler_type	调度器
调度的计算类型组	job_rsc_type	任务调度的计算类型组 Id
子任务名称	job_sub_name	当前子任务名称
申请节点数	job_node_qty	子任务申请的计算节点的数量
单 Task 核数	job_per_task_core	子任务单任务节点数量
按总量申请 Task 数	job_task_count_of_total	子任务申请方式为按总量申请的 Task 数
按单节点申请 Task 数	job_task_count_per_node	子任务申请方式为按单节点申请的 Task 数
按单节点申请的内存	job_mem_per_node	按单节点申请的内存 (MiB)
按单 Task 申请的内存	job_mem_per_task	按单 Task 申请的内存 (MiB)
按单节点申请的 GPU	job_gpu_per_node	按单节点申请的 GPU
按单 Task 申请的 GPU	job_gpu_per_task	按单 Task 申请的 GPU
GPU 卡类型	job_gpu_type	任务申请的 GPU 卡的类型

您在第一步添加的“任务自定义参数”和“理机 HPC 任务的默认元数据”参数都可以在“**编辑任务脚本模板**”编辑区编辑 HPC 任务模板的脚本中引用，使用这些参数的方法为单击“脚本模板工作区”右上方的“插入任务参数”按钮，在弹出的下拉框中点选您需要选择的参数名称，被添加成功的参数形式为：{{控件字段标识}}。如下脚本为本例中编辑

完成的脚本模板(示例):

```
#!/bin/bash

#注意: 不需要指定 job-name/nodes/output/error 等 Slurm 调度参数, 系统会代为指定
module load {{gromacsVersion}}

# 第一个作业步: 能量最小化

gmx grompp -f {{MDPinputFile}} -c {{GROinputFile}} -p {{TOPinputFile}} -o
{{TPRoutputFile}}.tpr

mpirun -np ${{{job_task_count_of_total}}}:-
{{{job_task_count_per_node}}}*{{{job_node_qty}}}} gmx_mpi mdrun -v -deffnm
{{TPRoutputFile}}
```

您也可以从平台提供的脚本模板案例直接生成脚本初稿, 使用方法为在案例列表中选择
一个案例, 点击脚本显示区右上角的“从案例生成”按钮就可以将模板的内容复制到
脚本模板剪辑区。

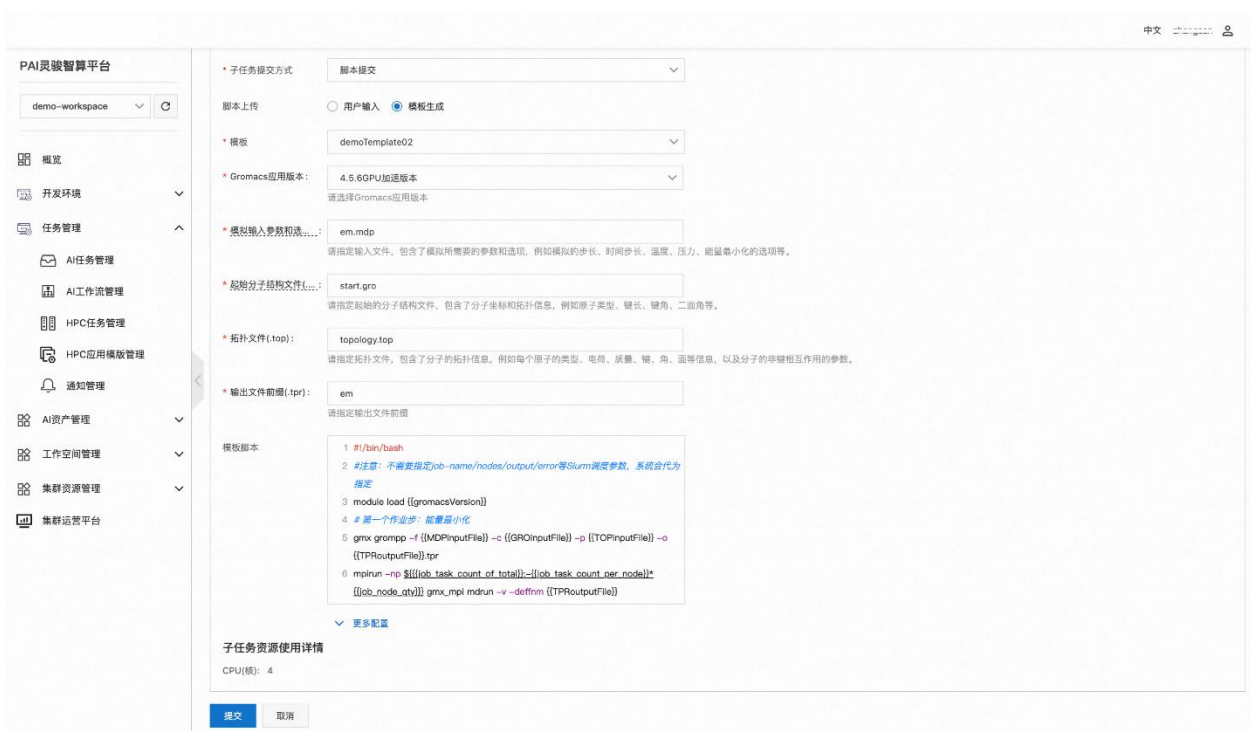
编辑任务脚本模板 ①

工作区	案例
脚本模板	OpenFOAM 并行 从案例生成
案例	
OpenFOAM 并行 <input checked="" type="checkbox"/>	<pre>1 #!/bin/bash 2 module load openmpi/2.1.5 3 source ~/OpenFOAM/OpenFOAM-2.4.0/etc/bashrc 4 cd \$SLURM_SUBMIT_DIR 5 srun -n \$SLURM_NTASKS icoFoam -parallel</pre>
Lammps CPU单节点	
Lammps CPU多节点	
Lammps KNL版本多节点	
Lammps GPU单节点	

脚本编辑完成后您可以点击“提交”按钮将该模板保存。

HPC 任务模板的使用

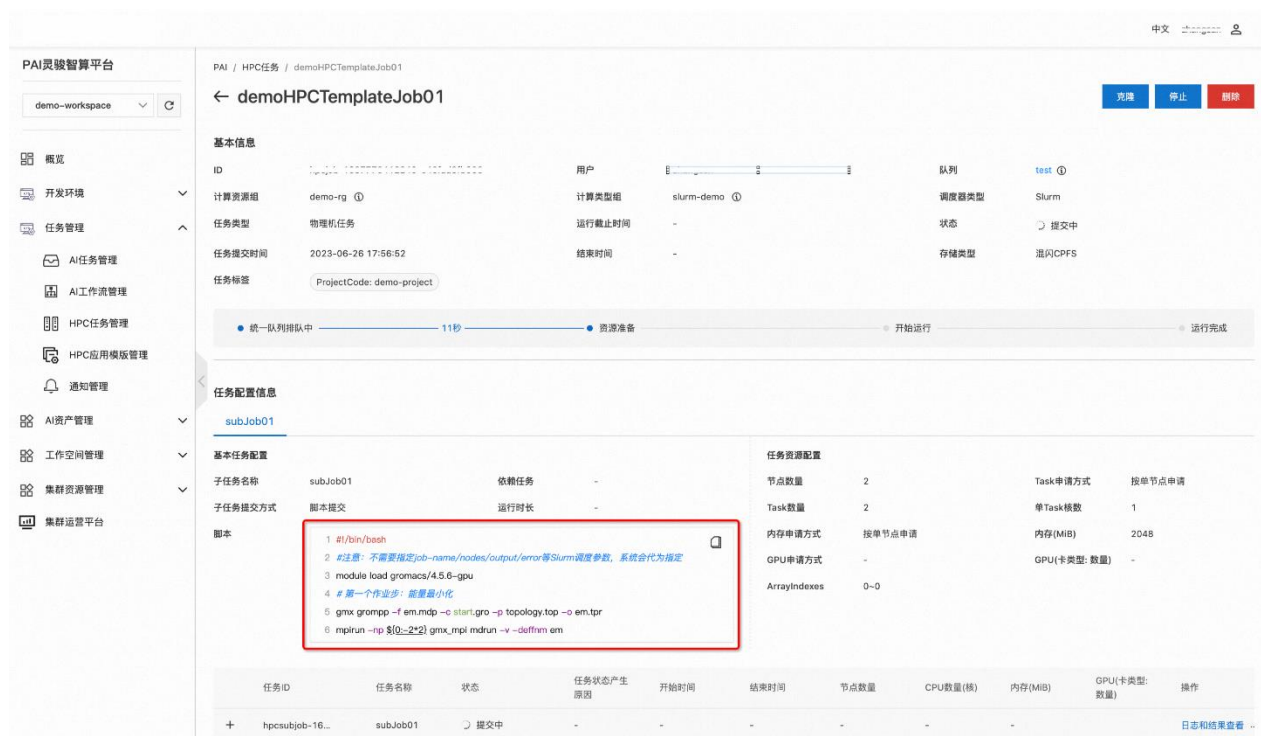
您可以在“新建 HPC 任务”模块使用 HPC 任务模板，您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“任务管理->HPC 任务管理”菜单，进入“新建 HPC 任务”界面后单击“创建 HPC 任务”，带有“HPC 任务模板”的任务的创建过程与普通任务类似，区别在于“子任务提交方式”需要选择“脚本方式提交”，再进一步选择“模板生成”方式就会加载模板选择框，您可以在这里选择一款之前创建好的物理机 HPC 任务模板，选择后会进一步加载任务模板特定的输入域，依次填写好模板要求的各个输入域，注意此处的模板脚本是只读的，您不需要做任何编辑操作，您在模板创建阶段已经做好了脚本的定制编辑工作（如果您确实需要修改脚本则需要到“应用模板管理”模块修改相应模板）。填写完成所有字段您就可以提交任务了。



提交任务后您可以在任务详情界面看到通过模板提交的任务实例化之后的任务脚本，如下图的方框所示。

说明：

- 模板的定制里边需要用户对 Linux Shell 有较深入的理解，您需要结合运行环境支持的 Shell 版本做模板脚本的定制工作，同时考虑脚本通用性、运行效率和易读性等。



HPC 任务模板的管理

修改 HPC 任务模板

HPC 任务模板创建以后，您可以单击任务模板记录的操作列的“修改”标签对模板进行修改。修改只对将来提交的任务起作用，之前使用模板提交的任务不受影响。

1.6 管理资产

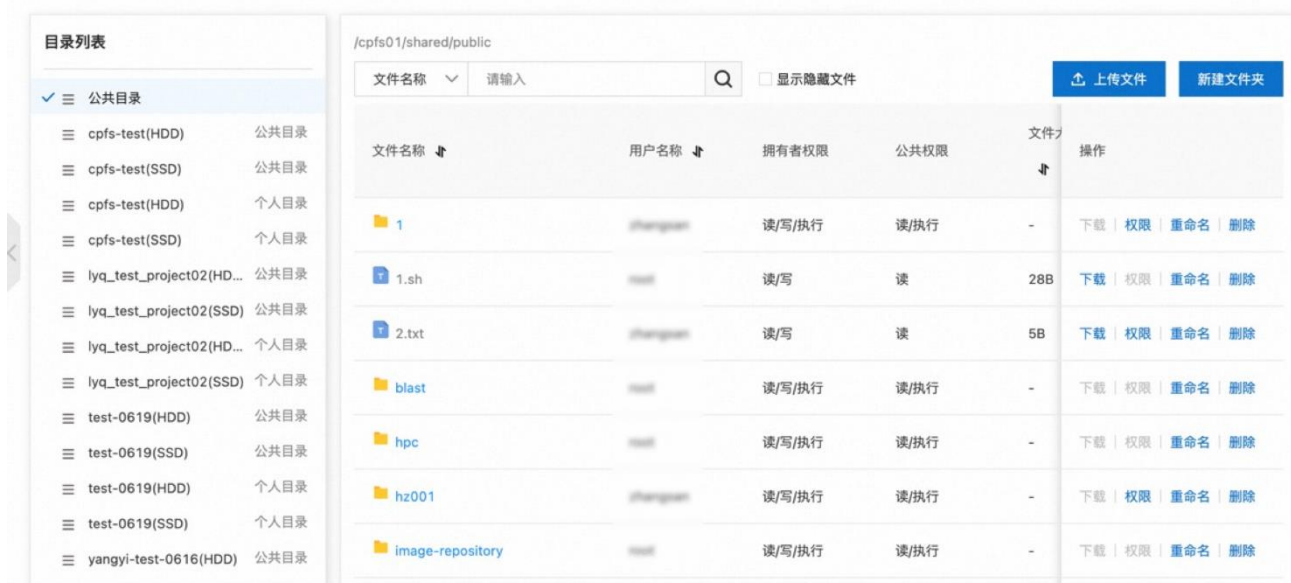
1.6.1 文件管理

本节介绍如何使用文件管理功能。

一. 进入文件管理

在控制台点击左侧菜单**资产管理**→**文件管理**，进入文件管理页面，如下所示：

文件管理



二. 使用文件管理

在左侧的目录列表，可以看到您拥有权限的所有目录，点击任何一个目录，右侧显示该目录下的文件。您可以做如下操作：

- 上传文件
- 新建文件夹
- 下载文件
- 修改权限
- 重命名文件或文件夹
- 删除文件或文件夹

1.6.2 数据集配置

本节介绍如何创建和使用数据集。

说明

一般情况下您只需要通过[文件管理](#)上传和管理数据即可。如果您需要通过物理机挂载点访问数据集，则可以通过数据集配置创建数据集，您可以在控制台点击左侧菜单**资产管理**→**数据集配置**，进入数据集配置列表。PAI 灵骏智算平台支持 NFS 和容器持久存

储卷两类数据集配置。

一. NFS 数据集配置

(1) 进入**数据集配置**，选择 **NFS** 标签页，打开 NFS 数据集列表。

The screenshot shows the '数据集配置' (Dataset Configuration) page. At the top, there is a search bar with the text '请输入任务名称' and a magnifying glass icon. Below the search bar, there are two tabs: 'NFS' (selected) and '容器持久存储卷'. The main content is a table with the following columns: '名称', 'NFS挂载点', 'NFS挂载目录', '本地存储目录', '描述', '创建时间', and '操作'. There are two rows of data:

名称	NFS挂载点	NFS挂载目录	本地存储目录	描述	创建时间	操作
test_nas_74832 ①	10.193.1.141	/test/nas/	/home/data	test_nas_74832	2023-06-20 15:40:40	删除
testcreat ①	10.193.1.141	/	/home/data		2023-06-20 15:03:23	删除

At the bottom right of the table, there are navigation buttons: '<', '1', and '>'.

(2) 点击**新建数据集配置**，进入创建 NFS 数据集页面：

The screenshot shows the '新建数据集配置' (New Dataset Configuration) page. At the top, there is a back arrow and the title '新建数据集配置'. Below the title, there are two tabs: 'NFS' (selected) and '容器持久存储卷'. The form contains the following fields:

- * 名称: [Text input field]
- 描述: [Text input field]
- * NFS挂载点: [Text input field] : [Text input field]
- 本地存储目录: [Text input field with a dropdown arrow]

Below the 'NFS挂载点' fields, there is a note: '您可以在此处填入您所使用计算集群网络可访问的NFS服务地址，格式为IP: 路径 如 8.8.8.8: /path/to/data'.

Below the '本地存储目录' field, there is a note: '使用时需要按照存储目录寻找文件如:python /root/data'.

At the bottom, there are two buttons: '提交' (Submit) and '置空' (Reset).

(3) 输入参数说明：

参数	描述
名称	名称长度 2~64 字符之间，允许数字、字母、下划线、小数点、短横线。
描述	描述长度 2~1024 字符之间。
NFS 挂载点	您可以在此处填入您所使用计算集群网络可访问的 NFS 服务地址，格式为 IP: 路径，如 8.8.8.8: /path/to/data
本地存储目录	使用时需要按照存储目录寻找文件如: python /home/data

二. 容器持久存储卷

(1) 进入数据集配置，点击容器持久存储卷，打开容器持久存储卷列表：

PAI-DLC / 数据集配置

数据集配置

+ 新建数据集配置

NFS **容器持久存储卷**

名称	工作空间	存储卷名称	数据源路径	本地存储目录	描述	创建时间	操作
dsds ①	all-test zjx-test1212 test_0919_12... jf test-no vcv hghghgzhjx dffdfd	hostpath-pvc1	hostpath:/nas/data	/home/data		2023-05-18 14:16:56	删除
zjx_dsds ①	all-test zjx-test1212 test_0919_12... jf test-no vcv hghghgzhjx dffdfd	hostpath-pvc3	hostpath:/tmp	/home/data		2023-03-06 15:05:07	删除

(2) 点击新建数据集配置，并选择容器持久存储卷，进入创建页面：

← 新建数据集配置

NFS 容器持久存储卷

* 名称:

* 计算类型组:

* 存储卷名称:

描述:

* 本地存储目录:
使用时需要按照存储目录寻找文件如: python /home/data

(3) 输入参数说明:

参数	描述
名称	名称长度 2~64 字符之间, 允许数字、字母、下划线、小数点、短横线。
计算类型组	从列表中选择您可以使用的计算类型组。
存储卷名称	从列表中选择您可以使用的存储卷。
描述	描述长度 2~1024 字符之间。
本地存储目录	使用时需要按照存储目录寻找文件如:python /home/data

1.6.3 HPC 镜像管理

Singularity 是一种轻量化高性能容器解决方案, 常用于 HPC 领域应用的打包。本文为您介绍如何在 PAI 灵骏智算平台作业中心上创建 Singularity 容器镜像, 同时给出典型

使用示例。

Singularity 容器简介

Singularity 容器是一种轻量级的虚拟化技术，可用于将应用程序和其依赖项打包成可移植的容器，以便在不同的计算机上部署和运行。与其他容器技术不同，Singularity 容器不需要特权访问，因此可以在大多数计算机上运行，包括共享集群和云环境。Singularity 容器还支持在容器中安装和管理软件包，并提供了强大的安全功能，可确保容器中的数据 and 应用程序受到保护。此外，Singularity 容器还支持许多高级功能，例如远程构建和共享，可帮助用户更轻松的管理和部署自己的应用程序。Singularity 容器还具有以下特点：

1.高度兼容性：Singularity 容器可以与其他常见的容器格式（如 Docker）相互转换，因此用户可以轻松地将现有的容器迁移到 Singularity 中。

2.高性能：由于 Singularity 容器不需要特权访问，因此它可以更好地利用系统资源，从而提供更高的性能和更快的启动时间。

3.可重复性：Singularity 容器具有可重复性，这意味着无论在哪个计算机上部署，容器中的应用程序和依赖项都将以相同的方式运行。

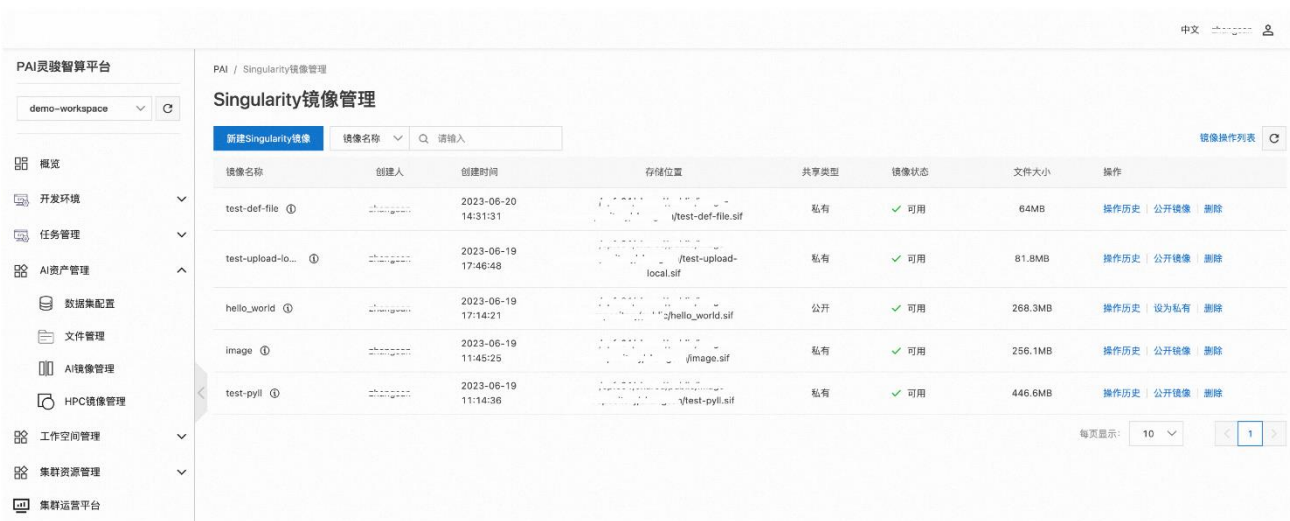
4.可定制性：Singularity 容器可以完全定制，用户可以选择安装和管理自己所需的软件包，并可以定制容器的配置和环境变量。

Singularity 容器是一种高度灵活且易于使用的容器技术，适用于许多不同的应用程序和环境。它提供了一种轻便的方法来管理和部署应用程序，同时保持高性能和安全性。

Singularity 容器镜像管理

查看 Singularity 容器镜像列表

您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“资产管理->HPC 镜像管理”菜单，进入“Singularity 镜像管理”界面可以直接查看 Singularity 镜像列表。



创建 Singularity 容器镜像

Singularity 支持丰富的创建镜像的方式,PAI 灵骏智算平台作业中心支持如下几种:

- 导入现有的 SIF 文件（上传本地文件）
- 拉取现有的镜像创建
 - 以 docker://开头的 URI，从 Docker Hub 构建
 - 以 shub://开头的 URI，从 Singularity Hub 构建
 - 以 library://开头的 URI，从其他容器库构建
- Singularity 定义文件

准备工作

您需要规划创建 Singularity 镜像的方式和相应方式下需要准备的安装的应用清单、定义脚本、依赖的附件等。

创建 Singularity 容器镜像的步骤

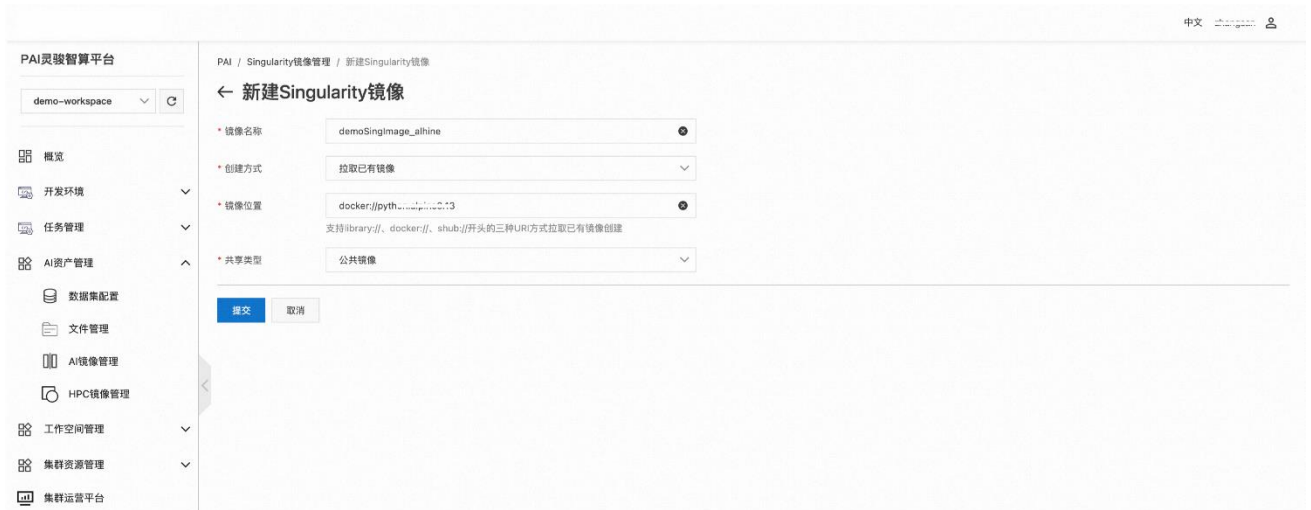
您在进入 PAI 灵骏智算平台作业中心后点击左侧菜单栏“自产管理->HPC 镜像管理”菜单，进入“Singularity 镜像管理”界面后单击“新建 Singularity 镜像”按钮进入新建 Singularity 镜像页面。

您需要填写创建镜像的必要的信息，这些字段是镜像的元数据，需要提供的字段和字段的取值范围说明如下表格：

字段	必选字段	取值范围	说明
镜像名称	必选	您可以输入一个合法的镜像名称字符串，字符串的长度不得超过 20 字符，合法的字符包括：英文大小写字母、数字、下划线(_)、小数点(.)和中划线(-)	
创建方式	必选	您需要选择镜像创建的方式： <ul style="list-style-type: none"> 拉取已有镜像 通过文件定义 上传本地文件 	
定义文件	从动必选	仅当创建方式为“通过文件定义”时显示，您可以在手动编辑 Singularity 定义脚本文件，支持行号、语法高亮和多行显示。	
依赖文件	从动可选	仅当创建方式为“通过文件定义”时显示，您可以在上传定义文件依赖的文件资源。	
镜像位置	从动必选	仅当创建方式为“拉取已有镜像”时显示，您可以在输入一个合法的资源 URI，目前支持如下几种： <ul style="list-style-type: none"> 以 docker://开头的 URI，从 Docker Hub 构建 以 shub://开头的 URI，从 Singularity Hub 构建 以 library://开头的 URI，从其他容器库构建 	
本地文件	从动必选	仅当创建方式为“上传本地文件”时显示	

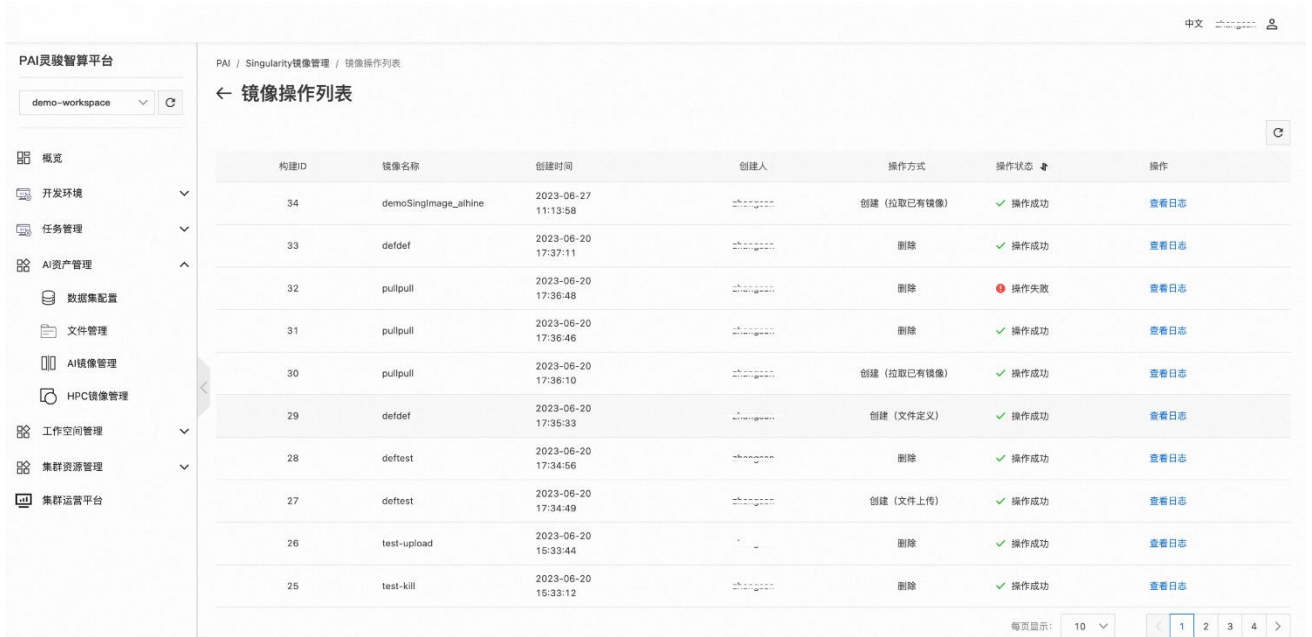
	选	示, 你可以直接拖拽本地.sif 文件到文件上传区域。	
共享类型	必选	您可以指定创建的镜像的共享属性。	

下面以“拉取已有镜像”方式说明如何创建 Singularity 镜像：

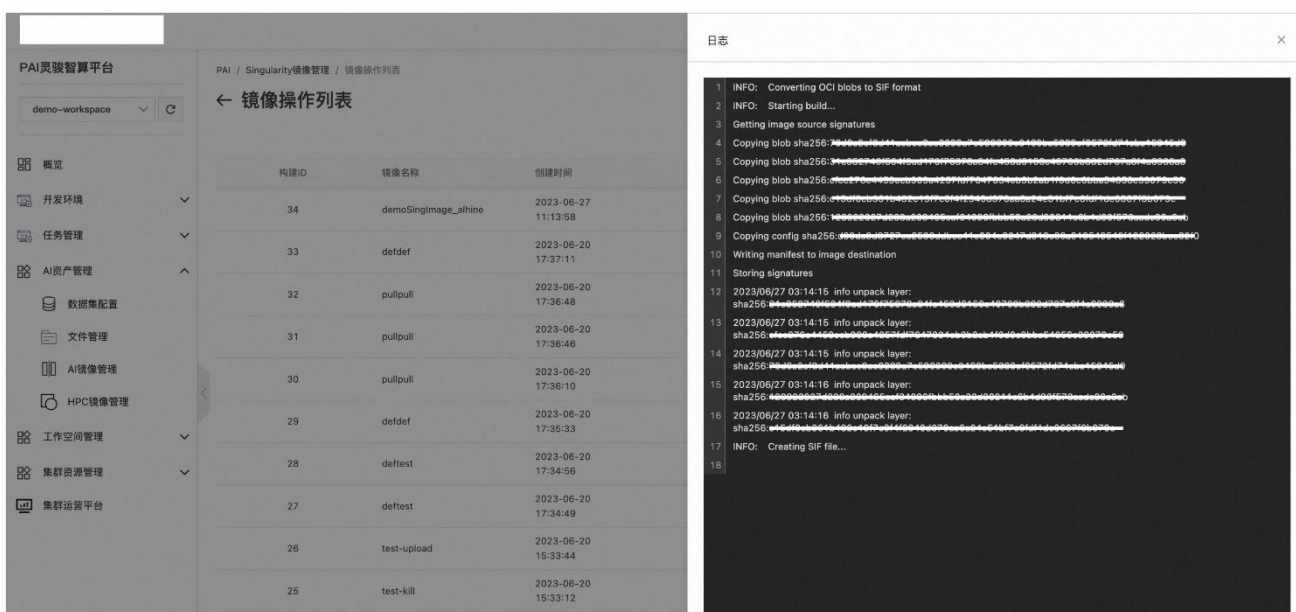


检查所有填写的信息准确无误后, 点击“提交”按钮提交镜像创建需求, 系统进入镜

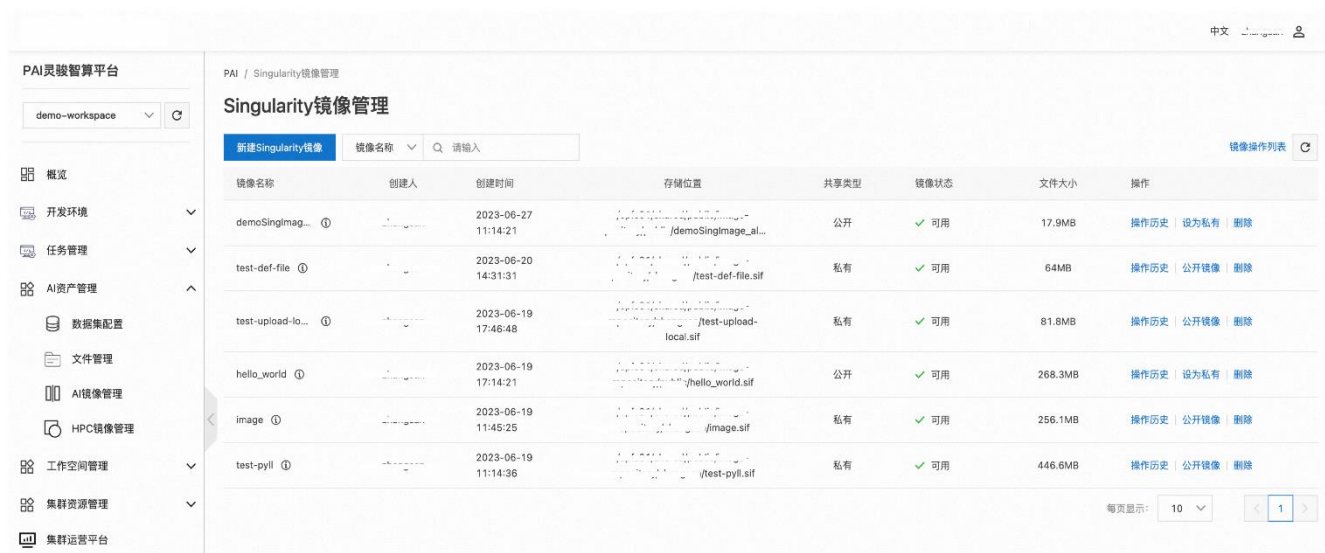
像构建阶段, 并自动跳转到“镜像操作列表”界面, 展现镜像的构建过程。



您可以点击镜像操作列表的镜像记录操作列的“查看日志”查看镜像具体的构建过程，如果构建过程出错，您可以在此查看构建出错的原因。



构建成功的镜像会出现在“Singularity 镜像管理”的列表中。

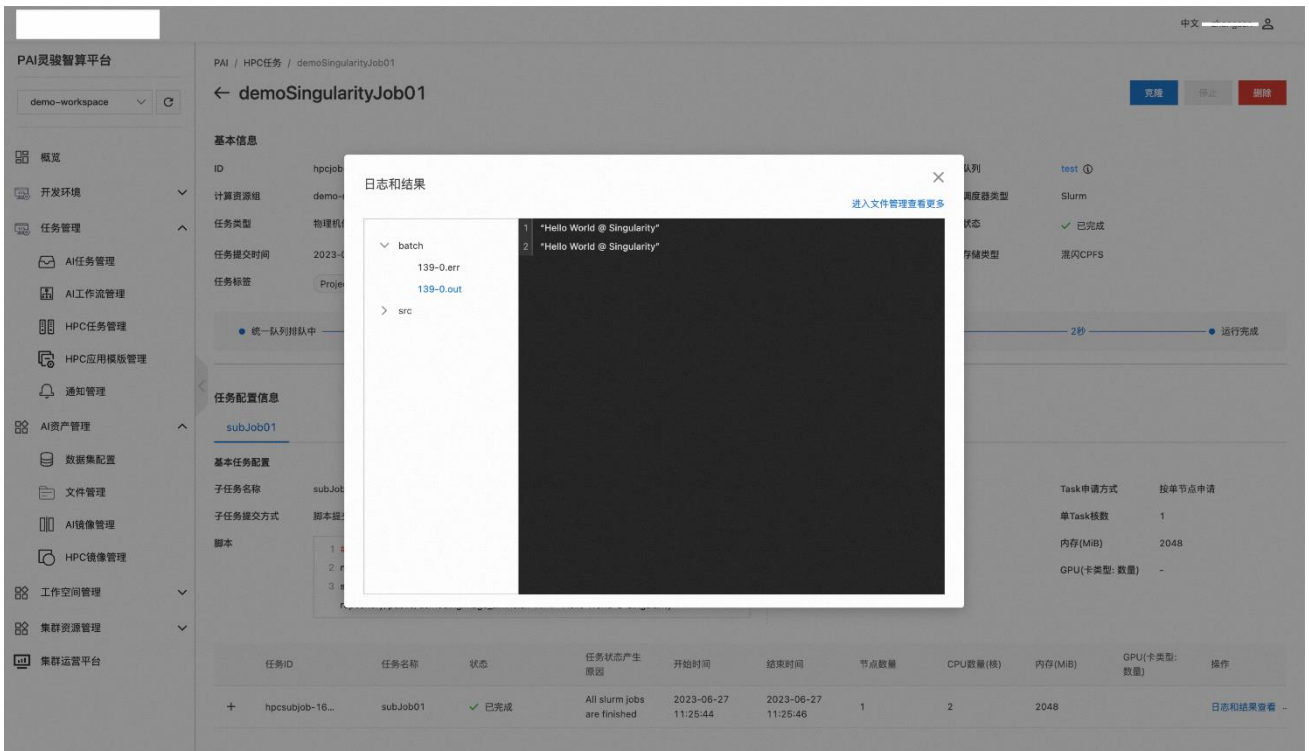
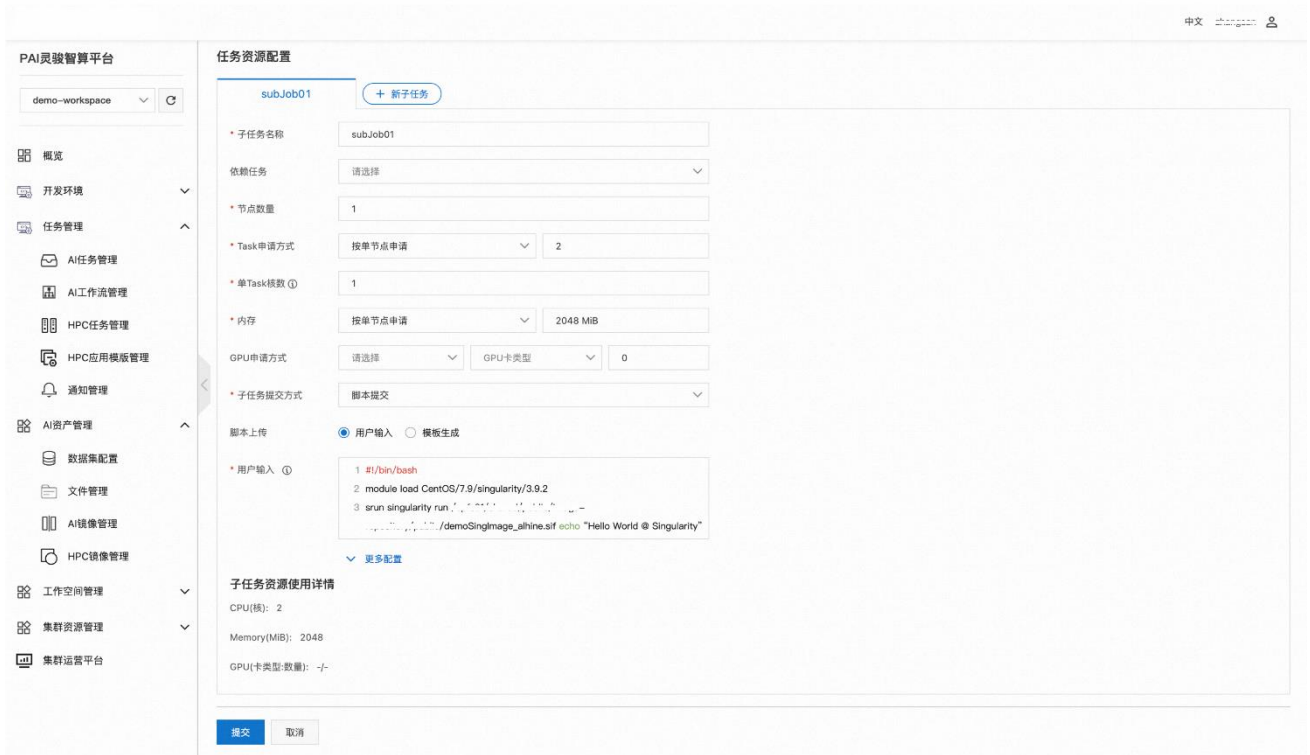


Singularity 容器容器镜像的使用

您可以在 PAI 灵骏智算平台作业中心的“HPC 任务管理”、“HPC 开发环境”等各种可以运行作业的位置使用平台创建的 Singularity 镜像。单击 Singularity 镜像记录“存

“**镜像位置**”列然后复制镜像位置，您就可以在任何支持运行任务的环境中运行通过 Singularity 打包的应用了。

如下截图是在“**HPC 任务管理**”中提交了一个 Singularity 容器任务的示意。



Singularity 镜像的生命周期管理

查看 Singularity 镜像操作历史

单击“**镜像操作列表**”可以查看所有镜像的构建、权限修改的记录。单击镜像列表的镜像记录操作列的“**操作历史**”标签可以查看该镜像的构建、权限修改的记录。

修改 Singularity 镜像共享属性

单击镜像列表的镜像记录操作列的“**设为私有**” / “**公开镜像**”标签可以切换镜像的共享属性。

删除 Singularity 镜像

单击镜像列表的镜像记录操作列的“**删除**”标签可以删除镜像。