

CHPC 文档



【版权声明】

版权所有©百度在线网络技术（北京）有限公司、北京百度网讯科技有限公司。 未经本公司书面许可，任何单位和个人不得擅自摘抄、复制、传播本文档内容，否则本公司有权依法追究法律责任。

【商标声明】



和其他百度系商标，均为百度在线网络技术（北京）有限公司、北京百度网讯科技有限公司的商标。 本文档涉及的第三方商标，依法由相关权利人所有。未经商标权利人书面许可，不得擅自对其商标进行使用、复制、修改、传播等行为。

【免责声明】

由于产品版本升级或其他原因，本文档内容会不定期进行更新。除非另有约定，本文档仅作为使用指导。 如您购买本文档介绍的产品、服务，您的权利与义务将依据百度智能云产品服务合同条款予以具体约定。本文档内容不作任何明示或暗示的保证。

目录	
目录	2
产品描述	4
产品定价	5
操作指南	5
管理集群	5
集群概述	5
创建公共云标准集群	7
创建混合云集群	10
登录集群	11
手动扩容集群	12
配置自动伸缩策略	12
释放集群	15
集群详情	15
管理队列	17
设置调度器参数	18
安装与卸载集群软件	19
权限策略说明	20
通过命令行管理用户	23
通过命令行管理作业	24
支持标签	28
队列标签	29
节点标签	30
自动扩缩容标签	32
作业标签	33
API参考	34
概述	34
通用说明	34
服务域名	36
公共请求头与响应头	37
集群管理相关接口	37
创建集群	37
释放集群	41
查询集群详情	42
查询集群列表	43
修改集群描述	45
队列管理相关接口	46
创建队列	46
删除队列	47
查询队列列表	48
查询队列详情	50

Baidu 百度智能云文档	产品描述
节点管理相关接口	51
扩容节点	51
释放节点	53
查询集群中的节点	54
自动扩缩容管理相关接口	56
设置自动扩缩容规则	56
查询自动扩缩容规则	58
应用服务	59
基因分析平台	60
平台概述	60
工作空间	60
工作流	61
运行任务	69
实践教程	70
使用螺旋桨HelixFold3预测生物分子结构	70
使用 BtuneAK对基因测序软件进行加速	77

产品描述

产品介绍

百度智能云云高性能计算（Cloud High Performance Compute，简称CHPC）基于百度智能基础设施，提供弹性、易运维的HPC平台服务。支持对集群、节点、作业、调度系统等进行运维及管理，客户可按实际业务需求使用计算资源。

核心概念

集群

集群是CHPC管理的核心单元，包含节点、HPC调度器、域账号系统、应用软件、共享存储、弹性公网IP等资源，可提供强大的计算能力。

节点

每个节点是一台云服务器实例，是执行计算任务的基本单元。节点可按照使用用途细分为登录节点、管控节点和计算节点。

队列

队列是计算节点的组织单元，通常一个队列会配置相同的计算节点规格来处理同一种计算作业。

调度器

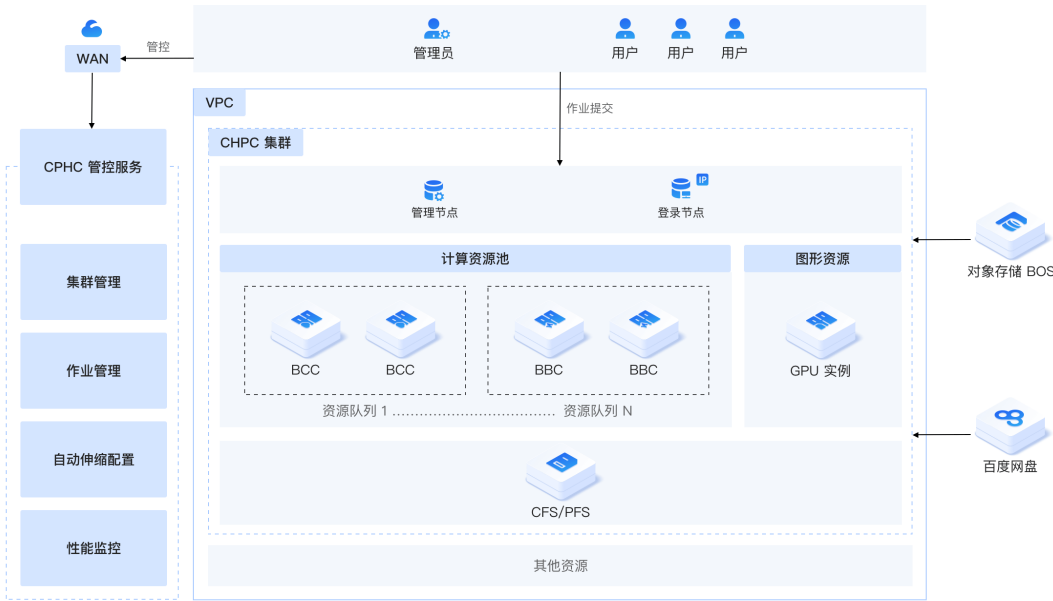
调度器是集群用来调度计算节点的系统，使用户无需为作业配置特定的计算资源，而只需要声明作业所需要的资源规格并提交给调度器即可自动为作业分配可获取的计算资源。

自动扩缩容

自动扩缩容是指授权CHPC根据集群当前作业及节点状态，自动来进行扩容或者缩容计算资源的策略。当有大量等待作业时，CHPC则会扩容配置的节点规格，当存在某个计算节点长期空闲时，CHPC则会释放这个节点。

产品架构

云高性能计算产品架构示意图如下：



基础设施管理人员通过公网访问CHPC的控制台或者OpenApi来统一使用CHPC服务。CHPC集群部署在用户的私有网络中，可支持扩展不同可用区或子网的计算节点，这些计算节点可配置访问共享存储空间，即文件存储产品。业务人员可通过公网或者云上跳转机访问集群的登录节点提交作业，作业的文件输入及输出可存储在云上对象存储或者百度网盘中。

产品优势

灵活配置

- 支持对接百度智能云多种云服务器规格，满足不同应用负载的算力需求。
- 支持多种调度器系统，满足不同的行业使用习惯需求。

弹性按需

- 在CHPC控制台快速创建基础设施资源及系统软件，在几分钟内即可提交作业开始计算。
- 按照业务对资源的需求波动，按需扩展或缩容集群。

高效管理

- 支持多种资源类型管理，包含集群、队列和节点等，全方位了解资源状态以及利用率。
- 控制台提供全面的操作日志，方便您了解集群动态。

🔗 产品特性

自动扩缩容

- 支持为集群配置多种自动可缩容配置，CHPC可根据任务及节点负载情况，动态调整集群资源。当有大量任务等待计算时，集群自动按照当前需求扩容节点。当节点长时间空闲时，集群缩容到配置的最小节点数量。

多种镜像和操作系统支持

- 提供多种操作系统，可根据需求灵活选择。
- 用户可基于集群中某个节点生成自定义镜像，通过该镜像创建新节点来获得更高效的扩容效率。

异构算力调度

- 支持调度多种计算资源类型，包括通用算力以及异构算力（例如GPU云服务器）。

🔗 应用场景

药物研发

药企或CRO可使用CHPC平台，快速部署药物分子模拟软件，亲和性检测软件，例如gromacs或autodock，并利用集群弹性的计算资源，轻松加速、管理大量计算任务。

工业仿真

汽车企业能够利用CHPC的高性能计算集群来辅助分析复杂的车辆工程架构和力学结构，并通过大量数据模拟路面真实情况。CHPC可提供高规格的计算规格，全面加速仿真软件计算效率。

产品定价

云高性能计算CHPC免费为用户提供服务，用户只需为实际使用的资源（如 BCC、CFS、EIP等）进行付费，具体计费标准可以参考[BCC定价](#)、[CFS定价](#)、[EIP定价](#)等。

操作指南

管理集群

集群概述

集群指运行高性能计算的节点集合，可以提供单节点不能提供的强大计算能力，拥有高性能、弹性扩展、稳定可靠等优点。本文介绍集群涉及的基本概念和功能。

节点

CHPC集群中的每个节点是一台BCC实例。

按节点功能分类，可以分为 **登录及管控节点**、**计算节点**。各节点功能如下表所示：

登录及管控节点：

用于远程登录集群，进行操作包括软件调试、编译和安装，以及作业提交等。

用于管理集群，部署调度服务和域账号服务。

- 调度服务：主要作用是运行Slurm等调度工具的服务端，处理作业提交、管理调度等。
- 域账号服务：集中管理CHPC集群内用户信息。

重要：管控节点负责作业的管理调度和域账号解析，在管控节点谨慎进行编译软件、上传下载打包数据等操作，以免影响业务稳定性。

计算节点：

用于执行高性能计算作业的节点。

对于不同规模的集群，建议的管控节点配置和作业执行数量如下：

集群规模	管控节点配置建议	作业建议
计算节点数≤10个	• vCPU≥4核 • 内存≥16GiB	• 排队作业数量<1000条 • 未完成作业数量<2000条
计算节点数≤100个	• vCPU≥16核 • 内存≥64 GiB	• 排队作业数量<5000条 • 未完成作业数量<10000条
计算节点数≤500个	• vCPU≥32核 • 内存≥128 GiB	• 排队作业数量<10000条 • 未完成作业数量<20000条
计算节点数>500个	• vCPU≥64核 • 内存≥256 GiB	• 排队作业数量<10000条 • 未完成作业数量<20000条

调度器

调度器是集群上调度作业的软件。CHPC支持的调度器如下：

类型	调度器	控制台显示
Slurm	Slurm 22	slurm
SGE	SGE	SGE

域账号服务

域账号服务用于管理集群用户。

CHPC支持LDAP域账号服务：

- LDAP：轻型目录访问协议（Lightweight Directory Access Protocol），在CHPC中，LDAP被用来对用户进行身份权限认证。您可以在LDAP中对用户进行授权，分组，以创建具有不同的访问权限的用户。

共享存储

CHPC集群的用户数据、调度器信息、作业共享数据等信息均会存储在文件系统，以供集群所有节点共享访问。

CHPC支持支持CPFS-NFS方式挂载CFS文件系统。

用户

创建集群用户后，您才能在集群上提交、调试、运行作业。您可以创建两种不同权限的用户来使用集群。

- 普通权限组：适用于只有提交、调试作业需求的普通用户。
- sudo权限组：适用于需要管理集群的管理员，除提交、调试作业外，还可以执行sudo命令进行安装软件、重启节点等操作。
- 重要root用户仅能在创建集群时初始化创建，不推荐使用root用户提交任何作业，避免作业脚本中的误操作导致CHPC集群数据遭受破坏。更多信息，请参见创建用户。

集群状态

- 创建中：集群创建初始状态，对应BCC实例创建和安装软件状态。
- 运行中：集群创建完成后处于正常可用状态。
- 异常：当管理节点被删除或停止、调度器软件退出时，集群状态为异常。您可以尝试修复集群，若修复无效后，请提交工单。
- 释放中：集群在停机释放过程中。

创建公共云标准集群

创建集群时，您需要配置集群的基础信息、网络配置、存储配置、节点配置等。本文介绍如何在控制台页面创建公共云标准集群。

🔗 前提条件

- 已开通CHPC服务，开通服务时，系统会自动创建服务关联角色。
- 已创建专有网络VPC和安全组。具体操作，参见[私有网络VPC](#)
- 已创建存储资源。CHPC集群支持挂载CFS文件系统。
 - 挂载CFS-POSIX：需开通CFS服务，创建CFS文件系统和挂载点。更多CFS相关信息，请参见[CFS说明](#)。

🔗 背景信息

集群可为CHPC计算提供计算资源、存储资源等，用于后续提交作业、调度作业、存储作业结果、查看作业结果。

创建和使用CHPC集群前请了解以下内容：

- 限制条件：一个地域下最多可创建3个集群，如需要创建多个集群，请[提交工单](#)。
- 费用说明：创建集群会产生一些费用，包括CHPC服务费用和其他资源费用。具体费用说明请参见[计费概述](#)。
- 注意事项：创建CHPC集群后，非特殊情况请勿使用云服务器管理控制台调整单个集群节点。建议您通过CHPC管理控制台操作。

🔗 步骤一：集群配置

创建集群时，您必须配置集群的基础信息、网络配置、存储配置。

您可以根据您的业务需求选择合适的配置参数。

1. 登录CHPC控制台：<https://console.bce.baidu.com/chpc/>

- 2. 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
- 3. 在左侧导航栏，选择 集群管理。
- 4. 在集群管理页面左上角，单击创建集群。
- 5. 选择 公共云集群 部署模式。
- 6. 完成基础配置内容填写。
- 7. 安全组新增企业安全组支持，适用于网络控制更精细化的场景，您可按需选择。

基础信息

地域：

华北 - 北京

华北 - 保定

华南 - 广州

华东 - 苏州

可用区：

可用区D

可用区E

可用区F

可用区H

可用区I

不同地域云产品之间内网不互通；选择最靠近您客户的地域，可降低访问延时，创建成功后不支持更换地域

网络

请选择子网

如需创建子网，您可以 [创建子网](#)

安全组：

普通安全组

企业安全组

使用普通安全组集群节点数量不能超过2000，如有更高需求，请选择企业级安全组。 [安全组介绍](#)

新建并绑定CHPC安全组

8. 完成集群配置内容填写。

集群配置

部署模式：

公共云集群

混合云集群

自动安装所有服务组件，提供完整集群功能

集成外部调度器等服务组件，提供完整集群功能

系列：

标准版

创建云上代理节点，用户自主完成配置，维护集群服务可用性

集群类型：

Slurm

Open PBS-Plugin

使用插件模式代理外部PBS Pro调度服务

管理节点：

实例规格	镜像	存储	规模	付费方式	参考价格	操作
bcc.g5.c2m8	CentOS 7.9 x86_64 (64bit)	系统盘：40GB 通用型SSD	0 ~ 500节点	按量付费	0.0093811/分钟	编辑

基础配置

集群配置

自定义选项

9. 完成自定义选项内容填写。

自定义选项

调度器、域账号、集群最大节点数、集群最大核数、集群删除保护

调度器：

Slurm 22.05.9

域账号：

OpenLDAP

集群最大节点数：

1000

请填写正整数。如果填0或者不填则无限制，系统将根据队列实际负载需求进行扩容

集群最大核数：

10000

集群删除保护：

开

步骤二：节点与队列

- 1.系统自动生成默认队列defaultQueue，您可按需增加其他队列
- 2.支持开启和关闭“队列自动伸缩”

+ 添加队列

defaultQueue

队列自动伸缩：

关

*节点数：

-

0

+

*节点间互联：

VPC网络

计算节点之间通过VPC网络通信

*选择子网：

请选择子网

请选择子网

*节点规格：

+ 添加计算节点

步骤三：文件存储

- 1./home集群挂载目录必填
- 2./home/software集群挂载目录用于软件安装，和/home保持一样的文件系统及挂载点
- 3.支持按需添加其他的存储挂载，点击“添加存储”即可

+ 添加存储

/home 集群挂载目录

home目录

*类型：

文件系统 CFS

*文件系统：

cfs-fiQlyLZE3i/test_20240320_1_recoverd_2

去创建文件系统

cfs-fiQlyLZE3i/lib-5be24753.cfs.bj.baidubce.com

去创建挂载点

文件系统目录：

/

/home/software 集群挂载目录

软件安装目录

类型：

文件系统 CFS

文件系统：

cfs-fiQlyLZE3i/test_20240320_1_recoverd_2

文件系统目录：

/

步骤四：软件与组件

1.您可以按需添加软件

安装软件：

+ 添加安装软件

软件名称	版本	说明	操作
您还没有安装任何软件 立即添加			

2.您可以按需添加服务组件

安装服务组件：

+ 添加服务组件

CHPC 集群必须配置“登录节点”组件，才能支持公网远程连接和使用 CHPC 客户端服务

组件名称	组件服务	组件自定义参数	组件部署资源	操作
您还没有安装任何服务组件 立即安装				

步骤五：确认订单

- 1.确认配置概要信息
- 2.填写管理设置

管理设置

集群名称:

以大小写字母开头、支持数字、大小写字母、3到15位字符

登录凭证:

用户自定义

1

有集群节点默认使用管理设置的密码作为用户的登录凭证，并用于集群远程连接认证

密码:

确认密码:

创建混合云集群

混合云集群指混合部署在本地和云上的集群，调度节点、域账号节点都在本地，计算节点在本地和云上。
您可以利用本地的HPC集群在百度智能云扩容计算节点资源，统一调度云上资源和您的本地资源进行高性能计算。
本文介绍如何通过CHPC管理控制台创建混合云集群。

前提条件

- 已开通CHPC服务，开通服务时，系统会自动创建服务关联角色。
- 已创建专有网络VPC和安全组。具体操作，参见[私有网络VPC](#)
- 已通过VPN或者物理专线搭建好本地和云上的网络连接。

步骤一：创建混合云集群

第一步，基本配置

- 登录CHPC控制台：<https://console.bce.baidu.com/chpc/>
- 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
- 在左侧导航栏，选择集群管理。
- 在集群管理页面左上角，单击创建集群。
- 选择 混合云集群 部署模式。
- 完成基础配置内容填写。

基础信息

地域:

华北 - 北京

华北 - 保定

华南 - 广州

华东 - 苏州

可用区:

可用区D

可用区E

可用区F

可用区H

不同地域云产品之间内网不互通：选择最靠近您客户的地域，可降低访问延时，创建成功后不支持更换地域

网络

如需创建子网，您可以 [创建子网](#)

安全组:

新建并绑定CHPC安全组

- 完成集群配置内容填写。

集群配置

部署模式：

公共云集群

自动安装所有服务组件，提供完整集群功能

混合云集群

集成外部调度器等组件，提供完整集群功能

系列：

标准版

创建云上代理节点，用户自主完成配置，维护集群服务可用性

集群类型：

PBS Pro-Plugin

使用插件模式代理外部PBS Pro调度服务

Open PBS-Plugin

调度器：

23.06.06

云上代理节点：

实例规格	镜像	存储	规格	付费方式	参考价格	操作
bcc.g5.c2m8	CentOS 7.9 x86_64 (64bit)	系统盘：40GB 通用型SSD	0 ~ 500节点	按量付费	0.0093811/分钟	编辑

集群删除保护：

开关

基础配置

集群配置

共享存储

管理配置

8. 完成共享存储和管理配置内容填写。

共享存储

文件存储位置：

暂不需要

本地文件系统

云上文件系统

管理配置

调度节点IP：

请输入调度节点IP

调度节点主机名：

请输入调度节点主机名

第二步，确认订单 1.确认配置概要信息

2.填写管理设置

管理设置

集群名称：

请输入集群名称

以大小写字母开头、支持数字、大小写字母、3到15位字符

登录凭证：

用户自定义

有集群节点默认使用管理设置的密码作为用户的登录凭证，并用于集群远程连接认证

密码：

确认密码：

步骤二：在集群列表中，查看集群状态

可以在执行进度中，查看混合云集群创建部署情况。

集群管理

创建集群

test 创建中 混合云 pbs 23.06.06

公有云

执行进度

集群创建中，预计需要5-10分钟。

创建安全组

2024-07-23 15:57:56

创建资源：BCC、EIP、CFS

2024-07-23 15:59:09

部署、启动 BCC 代理节点

运行中/节点总数	过去 12小时用量	应用软件数
0 / 2	0 核	0 个
2 / 2	0 核	0 个

根据执行进度和执行状态，修复检查。

登录集群

创建集群后您可以登录集群进行相关操作。

前提条件

- 已为集群登录节点分配固定公网IP或绑定EIP。

12

- 登录节点状态为运行中。
- 登录节点所在的安全组已放行对相应端口的访问。具体操作，参见[私有网络VPC -安全组](#)。

🔗 使用SSH工具登录

1. 输入SSH命令。

```
ssh <用户名>@<集群的固定公网IP或EIP>
```

2. 输入集群登录密码。

如果出现<用户名>@<主机名>:~#，表示成功连接到实例。

手动扩容集群

CHPC集群支持手动扩容，当业务发展导致集群计算节点不足时，您可以根据实际需求扩容集群，增加计算节点。

🔗 前提条件

- 扩容节点所在地域有可用子网，关于如何创建子网，请参见[私有网络VPC-子网](#)。
- 扩容节点所在地域有足够的BCC实例配额，具体操作，请参见[查看和提升实例配额](#)。

🔗 操作步骤

1. 登录CHPC控制台：<https://console.bce.baidu.com/chpc/#>
2. 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
3. 在左侧导航栏，单击集群。
4. 在集群页面，找到需要扩容的集群，单击扩容节点。
5. 在扩容节点面板，完成节点配置。扩容时，支持增加新建节点，请根据需要选择对应的页签进行配置。

🔗 执行结果

扩容后，新增计算节点会自动安装集群软件并初始化，原有计算节点的使用不受影响。

您可以在集群列表中选择扩容的集群，点击集群名称，在节点管理列表中，即可查看已扩容节点的状态。当该节点状态为运行中，说明扩容集群已完成。

配置自动伸缩策略

自动伸缩可以根据您配置的伸缩策略动态分配计算节点实例，实现根据实时负载自动增加或减少计算节点，以提高集群可用性，降低使用成本。

本文介绍如何配置自动伸缩策略。

🔗 功能优势

自动伸缩可以实现以下功能：

- 根据实时负载，自动增加计算节点，提高集群的可用性。
- 在保证集群可用性的前提下，自动减少计算节点，降低集群成本。
- 停止异常状态的节点，并创建相应的新节点，提高集群容错能力。

🔗 使用限制

- 仅支持调度器为SLURM或SGE的集群配置自动伸缩。

- 不支持基于内存维度的自动伸缩。建议在提交作业时指定作业所需的vCPU来实现自动伸缩，另外作业指定的内存使用大小不能超出BCC资源的内存规格。

🔗 注意事项

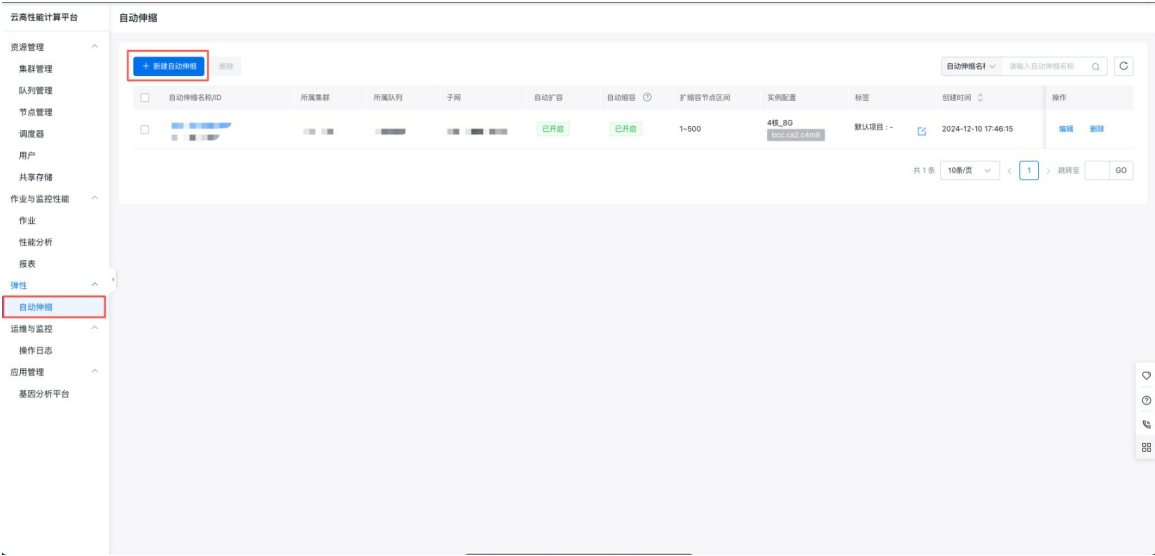
自动伸缩服务依赖于调度器服务和域账号服务运行正常。开启自动伸缩后，管控节点需要一直保持运行中。

说明

如果管控节点需要关机或者重启，请在计算节点没有作业运行，并且自动伸缩已经释放了空闲节点后再进行操作。此时，建议您先关闭自动伸缩，在管控节点重新启动后，再开启自动伸缩。

🔗 操作步骤

- 登录弹性高性能计算控制台：<https://console.bce.baidu.com/chpc/#>
- 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
- 在左侧导航栏，选择自动伸缩。



- 点击『新建自动伸缩』，在弹出的页面中完成参数配置。

新建自动伸缩

✕

●

开启扩容后 CHPC 会自动释放该队列中连续 10 分钟调度状态为空闲的后付费实例，释放后的实例及其云磁盘 CDS 无法找回。

自动伸缩名称：

test

长度为 1~63 个字符，可包含数字、字母、下划线(_)或中划线(-)，需以字母或数字开头

*所属集群：

*所属队列：

defaultQueue

*是否开启扩容：

开

*是否开启缩容：

开

不参与缩容节点：

请选择

扩容节点区间：

0

 ~

100

单次最大伸缩节点数：

99

请填写正整数。如果填 0 或者不填则无限制，系统将根据队列实际负载需求进行扩容

可用区：

可用区 D

可用区 E

可用区 F

可用区 H

可用区 I

*子网：

系统预定义子网 D (192.168.80.0/20)

*实例配置：

筛选：

全部 vCPU

全部内存

规格名称：

请输入实例规格如：bcc.g5.c4m

查看产品定价

产品：

BCC

EBC

架构：

x86 计算

异构计算 GPU / FPGA / NPU

处理器：

Intel

AMD

配置费用：

¥0.0035896/分钟

明细

取消

保存配置

5. 点击『保存配置』，操作成功。

6. 在自动伸缩列表中，可以编辑或删除自动伸缩策略。

云高性能计算平台

自动伸缩

资源管理

集群管理

队列管理

节点管理

调度器

用户

共享存储

作业与监控性能

作业

性能分析

报表

弹性

自动伸缩

运维与监控

操作日志

应用管理

基因分析平台

新建自动伸缩

删除

自动伸缩名称

所属集群

所属队列

子网

自动扩容

自动缩容

扩容节点区间

实例配置

标签

创建时间

操作

☐	自动伸缩名称ID	所属集群	所属队列	子网	自动扩容	自动缩容	扩容节点区间	实例配置	标签	创建时间	操作
☐					已开启	已开启	1-500	4核_8G bcc.c4u.xlarge	默认项目	2024-12-10 17:46:15	编辑 删除

共 1 条

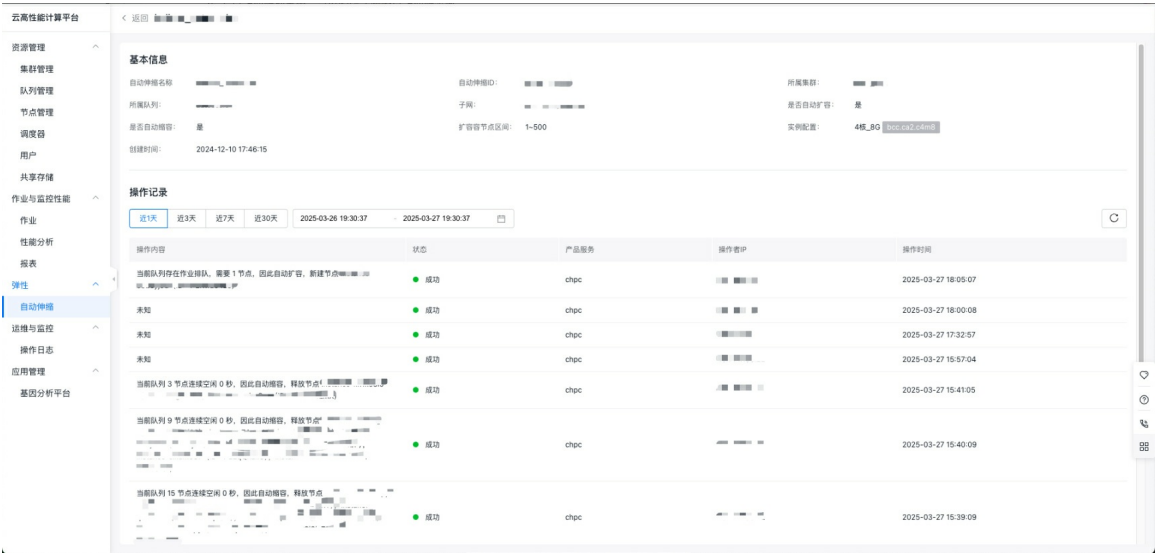
10条/页

1

跳转到

GO

7. 点击自动伸缩名称，可以看到自动伸缩策略的详细信息和最近的操作记录。



释放集群

当集群不再使用时，您可以随时选择释放集群，以节约使用成本。
本文介绍如何释放集群。

前提条件

已备份好集群数据。

警告

释放集群后数据不可恢复，请谨慎操作。

背景信息

释放集群后，集群中的按量付费的节点将自动释放，到期前的包年包月节点会保留，到期后的包年包月节点会自动释放。

操作步骤

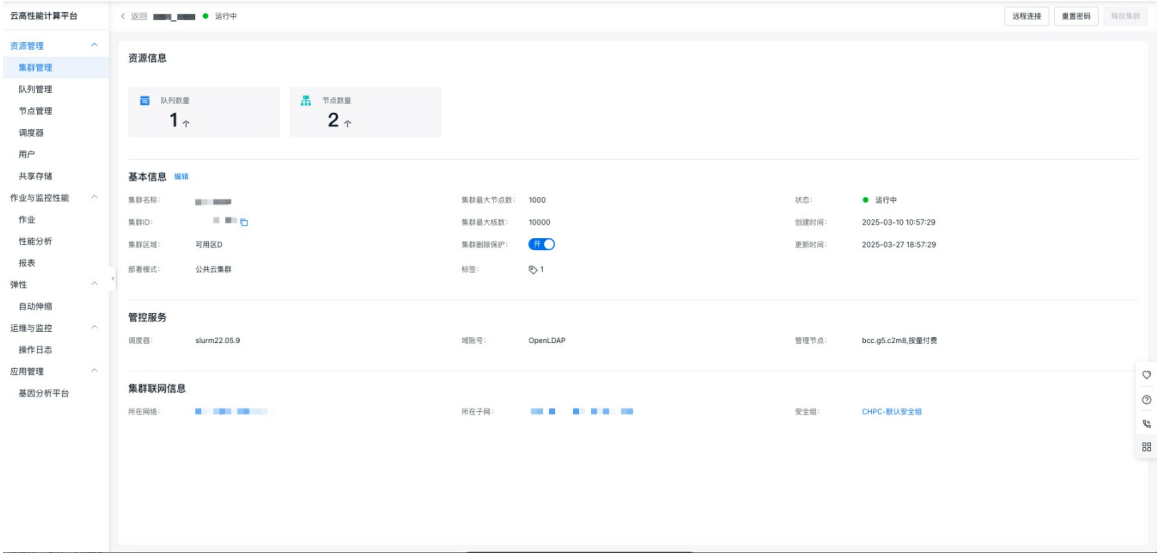
1. 登录弹性高性能计算控制台：<https://console.bce.baidu.com/chpc/#>
2. 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
3. 在左侧导航栏，单击集群管理。
4. 在集群页面，找到需要释放的集群，单击操作栏『更多』。
5. 若『释放』为灰色，请首先点击『关闭集群保护状态』并确认。
6. 单击操作栏『更多』，点击『释放』，并在弹出的删除集群对话框，单击确认。集群将进入释放中状态，释放完成后集群列表不再有此集群信息。

集群详情

您可以通过点击集群管理列表里的集群名，进入集群详情页面。

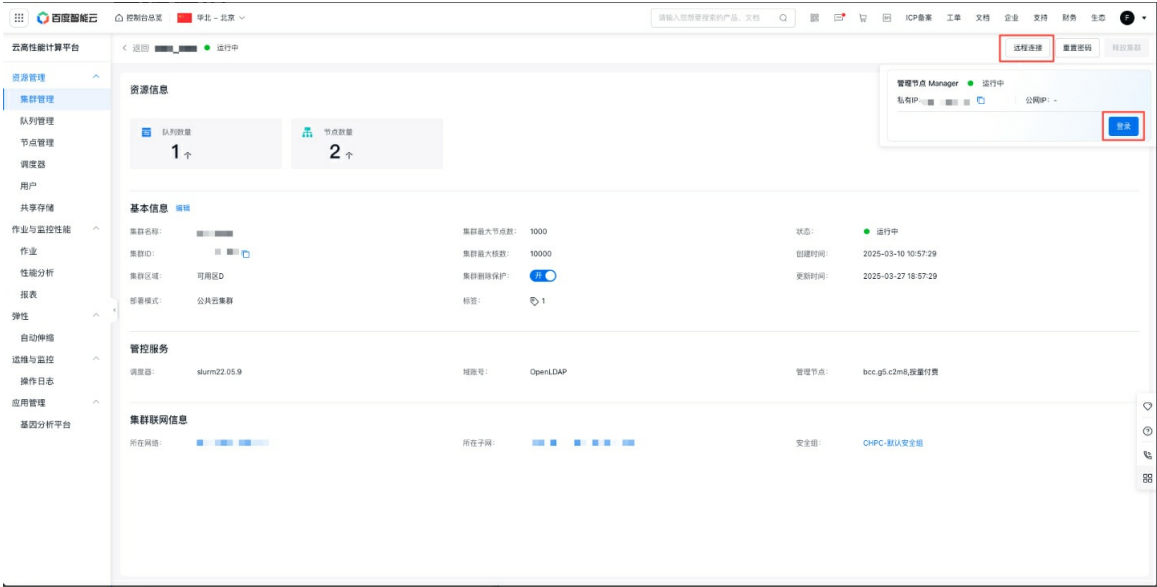
集群信息

- 在此页面，您可以查看集群的资源信息、基本信息、管控服务和集群联网信息。



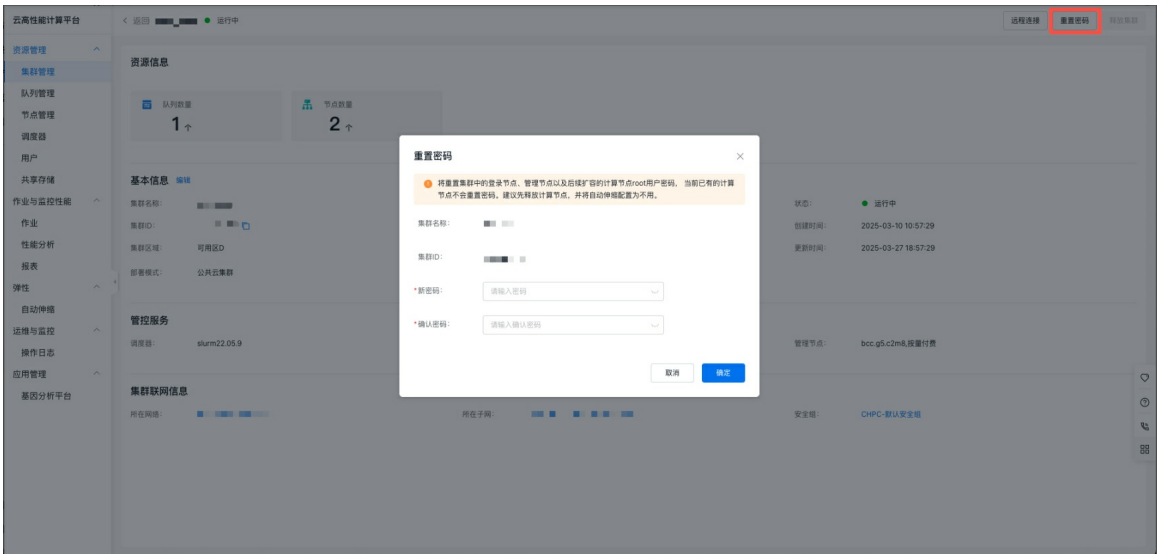
远程连接

- 通过远程连接，您可以一键登录管理节点，轻松管理集群。



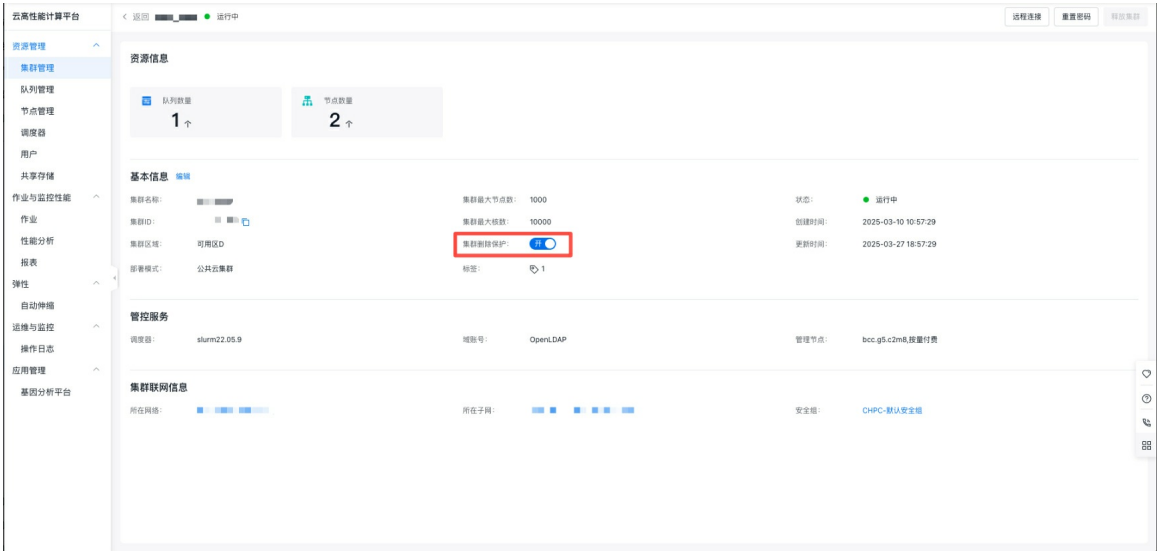
重置密码

- 通过重置密码，您可以重新设置集群密码。

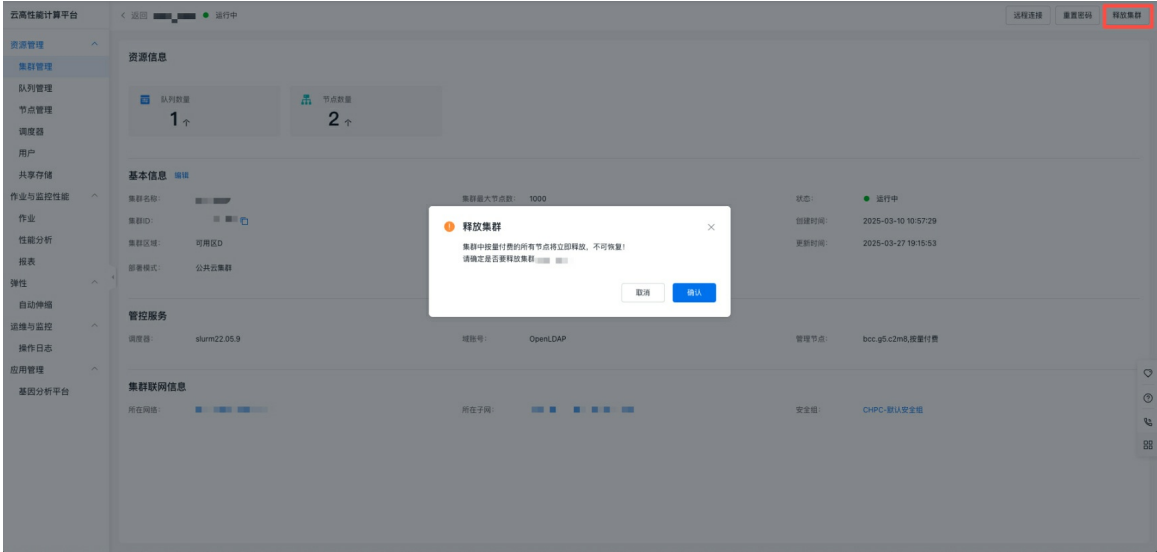


释放集群

- 您可以开启或关闭集群删除保护。



- 关闭集群保护后，您可以释放集群。



管理队列

CHPC支持将运行不同作业或执行不同任务的计算节点进行分类，便于筛选节点。
本文介绍如何在CHPC管理控制台创建队列、将节点加入队列和删除队列。

创建队列

1. 登录CHPC控制台：<https://console.bce.baidu.com/chpc/#>
2. 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
3. 在左侧导航栏，选择队列管理。
4. 在上方选择目标集群。
5. 单击『创建队列』。
6. 在创建队列面板，输入队列名称以及相关描述，单击确定。

扩容节点到指定队列

1. 登录CHPC控制台：<https://console.bce.baidu.com/chpc/#>
2. 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。

3. 在左侧导航栏，选择队列管理。
4. 在上方选择目标集群。
5. 在队列列表区域，找到要扩容节点的队列，单击扩容节点。

1. 新建节点：

1. 在扩容节点面板，完成节点配置。
2. 点击提交订单。
3. 集群将自动扩容节点并加入到指定队列。您可以在节点管理查看结果。

2. 选择已有节点

1. 在扩容节点面板，您可以选择已购买的BCC节点添加到集群。
2. 节点添加到集群前将重新安装系统，您需要在扩容节点面板选择镜像类型和操作系统。
3. 点击确认。
4. 集群将自动将您选择的节点重新安装系统并加入到指定队列。您可以在节点管理查看结果。

🔗 删除队列

1. 登录CHPC控制台：<https://console.bce.baidu.com/chpc/#>
2. 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
3. 在左侧导航栏，选择队列管理。
4. 在上方选择目标集群。
5. 在队列列表区域，选择要删除的队列，单击删除队列。
6. 在删除队列对话框，单击确定。

说明

1. 集群中默认队列不可删除。
2. 使用调度器的集群，队列中存在节点时不可删除。

设置调度器参数

调度器是集群上调度作业的软件，负责分发作业、处理作业优先级、按需分配计算节点资源（如vCPU、内存、节点个数）等。您可以根据作业大小，预估使用的节点资源和作业完成时间，设置集群的调度器参数，从而提高资源使用率。本文介绍如何在控制台设置调度器参数。

🔗 使用限制

集群的调度器为PBS。其他类型的调度器暂不支持通过控制台设置参数。

🔗 操作步骤

1. 打开调度器页面。
 - a. 登录弹性高性能计算控制台。
 - b. 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
 - c. 在左侧导航栏，选择资源管理 > 调度器。
2. 在集群列表选择目标集群，在调度器列表选择调度器。

3. 设置调度器配置信息，然后在页面右上角，单击提交。

PBS调度器，可以设置以下参数：

参数区域	参数	说明
调度器全局参数配置	历史作业保留时间	历史作业的保留时间。超过保留时间后，作业数据会被销毁。
	调度周期	相邻调度周期的时间间隔。如果没有其他操作触发调度（例如提交作业、重启调度服务），则时隔调度周期触发一次调度。
	最大作业数	最大允许的作业数。
	最大排队作业数	最大允许的排队作业数。
调度器队列参数配置	队列	选择要设置的队列。
	队列资源限制	单击新增限制。限制项如下： 用户：选择要限制的用户。 CPU：在选择的队列中，该用户可以使用的最大vCPU个数。 内存：在选择的队列中，该用户可以使用的最大内存数。例如 1 gb， 200 mb 等。 节点：在选择的队列中，该用户可以使用的最大节点数。 最大作业数：在选择的队列中，该用户可以提交的最大作业数。 说明 当用户提交的作业资源超过队列中用户资源限制，那么提交的作业会处于排队状态。
	队列用户映射	单击新增用户，在弹出的对话框中选择用户，单击确定，即可设置所选队列仅能被该用户使用。 说明 默认情况下，所选队列可以被集群的所有用户使用。设置后，所选队列仅能被选择的用户使用。

安装与卸载集群软件

使用CHPC集群进行高性能计算时，需要根据业务需求安装相关业务软件。本文介绍如何安装和卸载软件。

安装软件

您可以通过控制台直接安装CHPC提供的常用软件，也可以在集群中手动安装其他软件。

通过控制台安装

1. 登录CHPC控制台。
2. 在顶部菜单栏左上角处，选择地域。
3. 在集群列表页面，找到目标集群，在更多操作中，选择“软件管理”。
4. 在软件管理面板，单击“未安装软件”页签。



5. 选中需要安装的软件，单击安装。
6. 在弹出的对话框中单击确定。安装可能耗费几分钟时间。
7. 操作后，在软件管理面板的已安装软件页签下，您可以查看软件安装状态，软件状态为已安装时表示软件已安装完成。
8. 使用时，在作业脚本里，通过如下命令加载软件环境变量后，即可直接调用软件命令行。
module load <软件名>/<版本>

手动安装

CHPC集群使用共享存储实现计算节点间的数据共享，并通过 environment - modules 对软件多版本进行管理。软件安装目录默认为：/home/software/{software-name}/{version}，modulefile 目录默认为

/home/share/modules/modulefiles。

手动安装业务软件有以下两种方案：

- 将软件安装在/home/software/{software-name}/{version} 目录，（可选）将对应modulefile 放在 /home/share/modules/modulefiles 中，该方案下所有集群用户可以访问并使用业务软件。
- 安装在集群用户的home目录，一般情况下仅该集群用户可以访问并使用。

重要

某些软件需要在计算节点安装驱动或者运行环境等，例如GPU驱动、YUM安装的包等。在计算节点独立安装软件后，您可以使用该节点制作的自定义镜像来扩容节点，实现自动化安装。

🔗 卸载软件

您可以通过控制台直接卸载CHPC提供的常用软件。如果是手动安装的软件，请自行根据软件情况手动卸载。

1. 在CHPC控制台的集群列表页，找到目标集群，在更多操作中，选择“软件管理”。
2. 在软件管理面板，单击已安装软件页签，查看集群已安装的软件。
3. 选中要卸载的软件，单击卸载。
4. 在弹出的对话框中单击确定。

权限策略说明

🔗 多用户访问控制产品介绍

多用户访问控制(Identity and Access Management, IAM)，主要用于百度智能云的身份管理和访问控制，解决云账户的集中授权与管理、资源分享与多用户协同工作等问题。多用户访问控制适用于企业内的不同职能角色，你可以对不同员工赋予产品的不同权限，以共享你账户内的资源，完成他们的工作。当你的企业存在需要多用户协同工作、分享资源时，推荐你使用多用户访问控制。以下是多用户访问控制适用的典型场景：

- 中大型企业客户：对公司内多个部门的不同员工进行集中资源和权限管理；
- 独立软件服务商(ISV)或SaaS平台商：对代理客户进行集中的资源和权限管理；
- 中小开发者或小企业：添加项目成员或协作者，进行资源和权限管理。

当前 CHPC 产品支持“产品级所有资源”的“系统权限”管理和“细粒度特定资源”的“自定义权限”管理。

🔗 系统权限

策略名称	权限说明	权限范围
CHPCReadAccessPolicy	只读访问云高性能计算平台(CHPC)的权限	仅可以查看集群列表，及拥有的队列列表、节点列表、作业与监控报表、应用列表、作业列表
CHPCOperateAccessPolicy	运维操作云高性能计算平台(CHPC)的权限	队列管理： - 新增/创建队列 - 删除队列 - 扩容节点 - 配置扩缩容 节点管理： - 停止调度 - 移出队列 - 移动队列 作业与监控： - 提交作业 - 调整作业优先级 - 获取作业可配置字段 应用管理： - 创建空间等变更操作
CHPCFullControlAccessPolicy	完全控制管理高性能计算平台(CHPC)的权限	拥有除运维权限外，所有集群的创建、释放

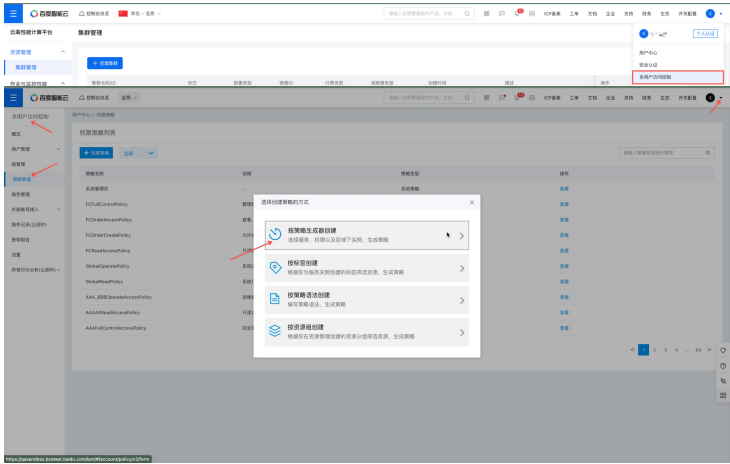
自定义权限

△ 仅对特定资源有权限的子用户无法创建新的集群和队列

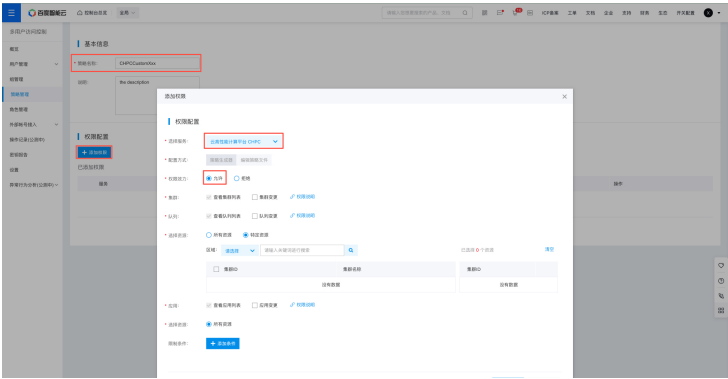
策略名称	权限说明	权限范围
CLUSTER_READONLY（默认） QUEUE_READONLY（默认） SERVICE_READONLY（默认）	集群资源只读 队列资源只读 应用服务资源只读	仅可以查看集群列表，及拥有的队列列表、节点列表、作业与监控报表、应用列表
CLUSTER_MODIFY	集群资源可操作	集群管理： - 创建集群（不支持对特定资源拥有权限的子用户操作） - 释放集群
QUEUE_MODIFY	队列资源可操作	队列管理： - 新增/创建队列（不支持对特定资源拥有权限的子用户操作队列管理） - 删除队列 - 扩容节点 - 配置扩缩容 节点管理： - 停止调度 - 移出队列 - 移动队列
SERVICE_MODIFY	应用服务资源可操作	应用管理： - 创建空间等变更操作
JOB_SPEC	特定作业资源可读可操作	作业管理： - 仅对当前用户的作业有可读可操作权限
JOB_ALL	所有作业资源可读可操作	作业管理： - 对所有用户的作业都有可读可操作权限

创建自定义权限

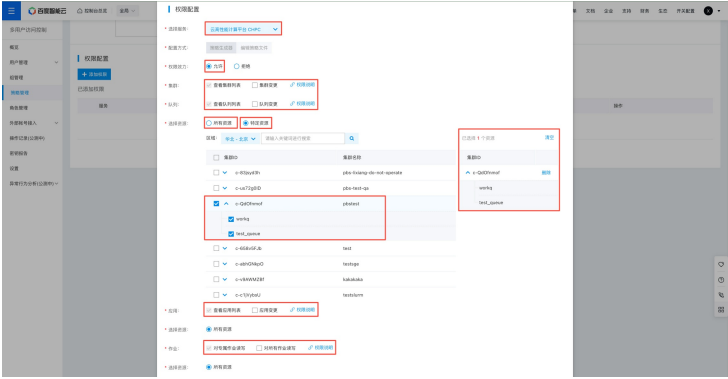
1. 主账户登录后点击右上角三角，点击“多用户访问控制”后，点击左侧菜单栏中的“策略管理”，然后点击“+创建策略”，选择“按策略生成器创建”。



2. 给自定义权限命名后，点击“添加权限”，服务选择“云高性能计算平台CHPC”，权限效力选择“允许”。

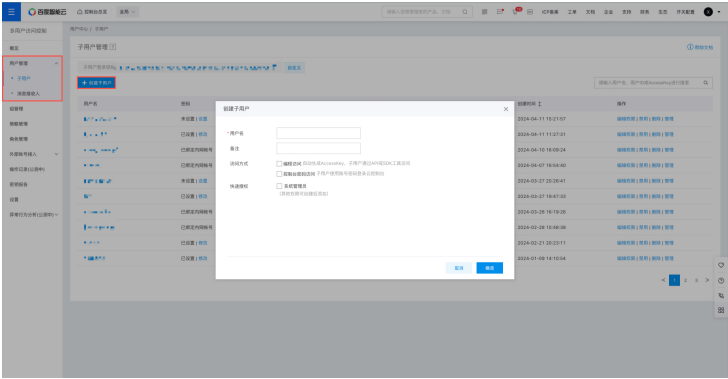


3. 根据“自定义权限”说明章节内容，在这里自定义配置对“所有资源”或不同地域下的“特定资源”的“只读”或“可修改”权限（这里默认携带“集群只读”和“队列只读”权限，以及仅支持对“所有资源”生效的“应用只读”和“专属作业读写”权限），配置完成后点击“确认”后返回上一页面，再次点击“确认”后保存。

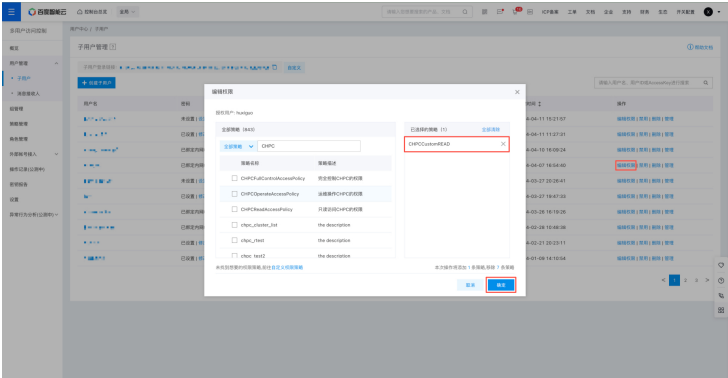


新建子用户或为已有子用户赋权

1. 您可以在左侧菜单栏的“用户管理”->“子用户”页面创建一个新的子用户。



2. 也可以直接为已有子用户赋予刚刚创建出来的自定义权限。点击“编辑权限”，搜索并添加权限给子用户，点击“确定”“保存”。



通过命令行管理用户

CHPC集群支持用户登陆管理节点来管理用户。

前提条件

- 1、参考登陆集群，登录CHPC集群管理节点。
- 2、下载添加用户脚本到管理节点

```
wget https://cfc-sns.bj.bcebos.com/addUser.sh
```

添加用户

步骤一：添加ldap用户

```
bash addUser.sh -ntestwork -pchpc@1234
```

```
root@ ~ # cd /home/work# bash addUser.sh -ntestwork -pchpc@1234
adding new entry "uid=testwork,ou=people,dc=baidu,hpc,dc=com"
adding new entry "cn=testwork,ou=groupe,dc=baidu,hpc,dc=com"
root@ ~ # cd /home/work#
```

步骤二：添加Account

```
sacctmgr -i add account testwork
```

```
root@ ~ # cd /home/work# sacctmgr -i add account testwork
Adding Account(s)
testwork
Settings
  Description = Account Name
  Organization = Parent/Account Name
Associations
  A = testwork C = qtest
root@ ~ # cd /home/work#
```

步骤三：添加用户，需要和ldap创建的用户保持一致

```
sacctmgr -i add user testwork Account=testwork
```

```
root@ ~ # cd /home/work# sacctmgr -i add user testwork Account=testwork
Adding User(s)
testwork
Associations =
  U = testwork A = testwork C = qtest
Non Default Settings
root@ ~ # cd /home/work#
```

查看结果

查看用户列表

```
sacctmgr list assoc
```

```
root@ ~ # cd /home/work# sacctmgr list assoc
Cluster Account User Partition Share Priority GrpJobs GrpTRES GrpSubmit GrpWall GrpTRESMins MaxJobs MaxTRES MaxTRESPerNode MaxSubmit MaxWall MaxTRESMins
-----
qtest normal root 1
qtest normal root root 1
qtest normal test 1
qtest normal test test 1
qtest normal testwork 1
qtest normal testwork testwork 1
qtest normal work 1
qtest normal work work 1
root@ ~ # cd /home/work#
```

通过命令行管理作业

CHPC集群支持用户登陆管理节点来提交任务。

前提条件

- 1、参考登陆集群，登录CHPC集群管理节点
- 2、已经通过命令添加用户，或者使用work用户提交任务。

🔗 slurm提交作业

🔗 sinfo

slurm 的 sinfo 命令用于显示集群中节点（compute nodes）的信息，包括节点状态、分区（partitions）信息、节点数量以及资源信息等。基本用法如下：

```
sinfo [OPTIONS]
```

```
root@ ~ # sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE MODELIST
default_queue* up       infinite    1   idle instance-tt8nenie
root@ ~ #
```

基本选项包括：

- N, --nodes: 显示节点的详细信息。
- l, --long: 显示更详细的信息。
- p, --partition: 仅显示指定分区的信息。

🔗 srun

slurm 的 srun 命令是用于在 Slurm 集群中直接启动作业或任务的命令。srun 更适合用于运行短期、交互式的任务，而不是长期运行的作业。

主要命令格式如下：

```
srun [options] program
```

```
root@ ~ # srun hostname
instance-tt8nenie
root@ ~ #
```

基本选项包括：

- n, --ntasks: 指定要运行的任务数量。
- N, --nodes: 指定要使用的节点数量。
- p, --partition: 指定要提交作业的分区（或队列）。
- t, --time: 指定任务的最大运行时间。
- o, --output: 指定标准输出文件。
- e, --error: 指定标准错误文件。

🔗 sbatch

slurm 的 sbatch 命令是用于将作业（jobs）提交到 Slurm 集群以进行调度和执行的命令。它允许用户将包含作业描述的脚本文件（通常是 shell 脚本）提交到集群中执行。

主要命令格式如下：

```
sbatch [OPTIONS] script.sh
```

```
root@ ~ # sbatch test.sh
Submitted batch job 120
root@ ~ #
```

一些常用的选项包括：

- J, --job-name: 指定作业的名称。
- p, --partition: 指定要提交作业的分区（或队列）。
- n, --ntasks: 指定要分配的任务数量。
- t, --time: 指定作业的最大运行时间。
- o, --output: 指定标准输出文件。
- e, --error: 指定标准错误文件。

🔗 squeue

slurm 的 squeue 命令用于显示当前集群中正在运行的作业的信息。它可以列出各种作业的状态、队列信息、用户信息等。基本用法如下：

```
squeue [OPTIONS]
```

```
root@ ~ # squeue
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
120 default_q test.sh root R 0:29 1 instance-1t8nenie
root@ ~ #
```

一些常用的选项包括：

- u, --user: 显示指定用户的作业信息。
- t, --state: 根据作业状态进行筛选显示。
- p, --partition: 指定要显示的分区（队列）信息。

🔗 scancel

scancel 是 slurm 提供的用于取消正在运行的作业或任务的命令。

基本用法如下：

```
scancel [OPTIONS] job_id
```

一些常用的选项包括：

- u, --user: 取消特定用户提交的作业。
- t, --state: 取消特定状态的作业。
- n, --name: 取消特定作业名称的作业。

```
root@ ~ # squeue
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
Submitted batch job 121
root@ ~ # squeue
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
121 default_q test.sh root R 0:01 1 instance-1t8nenie
root@ ~ # scancel 121
root@ ~ # squeue
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
root@ ~ #
```

🔗 SGE作业提交

需要注意SGE不能在root用户下提交任务，可创建用户或者在work用户下提交任务。

🔗 qhost

qhost 是 SGE（Sun Grid Engine）中用于显示计算节点（execution hosts）信息的命令。

它用于查看和显示集群中计算节点的状态、资源使用情况以及其他相关信息。

基本用法如下：

```
qhost [选项]
```

```
work@ ~ # qhost
HOSTNAME ARCH NCPUS NSOCK NCOR NTER LOAD MEMTOT MEMUSE SWAPTO SWAPUS
-----
global 1x-amd64 2 1 1 2 0.00 7.8G 435.3M 0.0 0.0
work@ ~ #
```

一些常用的选项包括：

- q, --queue: 显示队列的信息。
- j, --jobs: 显示节点上正在运行的作业信息。
- F, --verbose: 显示更详细的信息。

🔗 qsub

qsub 是 SGE (Sun Grid Engine) 中用于提交作业到集群进行调度和执行的命令。

基本用法如下：

```
qsub [选项] job_script
```

```
work@ ~ % qsub test.sh
Your job 20 ("test.sh") has been submitted
work@ ~ %
```

其中 job_script 是包含作业描述的本脚本文件。qsub 命令将作业提交到集群中执行。一些常用的选项包括：

- N job_name : 指定作业名称。
- l resource=value : 指定作业需要的资源，如时间、内存等。
- o output_file : 指定标准输出文件。
- e error_file : 指定标准错误文件。

🔗 qstat

qstat 是 SGE (Sun Grid Engine) 中用于显示作业状态信息的命令。

它可以用于查看在集群中正在运行的作业的状态、队列信息、用户信息等。

基本用法如下：

```
qstat [选项]
```

```
work@ ~ % qstat
job-ID prior name user state submit/start at queue slots ja-task-ID
-----
20 0.55500 test.sh work r 12/13/2023 10:14:47 default_queue 1
```

一些常用的选项包括：

- u, --user: 显示指定用户的作业信息。
- f, --full: 显示作业的详细信息。
- g, --queue: 显示队列的信息。

🔗 qhold

qhold 是 SGE (Sun Grid Engine) 中用于暂停作业的命令。它可以用来暂时停止正在运行的作业，使其暂时不会继续执行。

基本用法如下：

```
qhold job_id
```

其中 job_id 是要暂停的作业的标识符。

```
work@ ~ % qsub test.sh
Your job 21 ("test.sh") has been submitted
work@ ~ % qstat
job-ID prior name user state submit/start at queue slots ja-task-ID
-----
21 0.00000 test.sh work qw 12/13/2023 10:16:35 1
work@ ~ % qhold 21
modified hold of job 21
work@ ~ % qstat
job-ID prior name user state submit/start at queue slots ja-task-ID
-----
21 0.55500 test.sh work hr 12/13/2023 10:16:47 default_queue 1
```

🔗 qrls

qrls 是 SGE (Sun Grid Engine) 中用于释放暂停作业的命令。

当你使用 qhold 命令暂停了一个作业后，可以使用 qrls 命令来释放暂停状态，使作业恢复运行。

基本用法如下：

qrls job_id

其中 job_id 是要释放暂停状态的作业的标识符。

```
work@ ~$ qrls 21
modified hold of job 21
work@ ~$ qstat
job-ID prior name user state submit/start at queue slots ja-task-ID
-----
21 0.55500 test.sh work r 12/13/2023 10:16:47 default_queue 1
work@ ~$
```

🔗 qdel

qdel 是 SGE（Sun Grid Engine）中用于删除作业的命令。它可以用来取消或删除已经提交到队列中的作业。
基本用法如下：

qdel job_id

其中 job_id 是要删除的作业的标识符。

```
work@ ~$ qstat
job-ID prior name user state submit/start at queue slots ja-task-ID
-----
21 0.55500 test.sh work r 12/13/2023 10:16:47 default_queue 1
work@ ~$ qdel 21
work has registered the job 21 for deletion
work@ ~$ qstat
job-ID prior name user state submit/start at queue slots ja-task-ID
-----
work@ ~$
```

支持标签

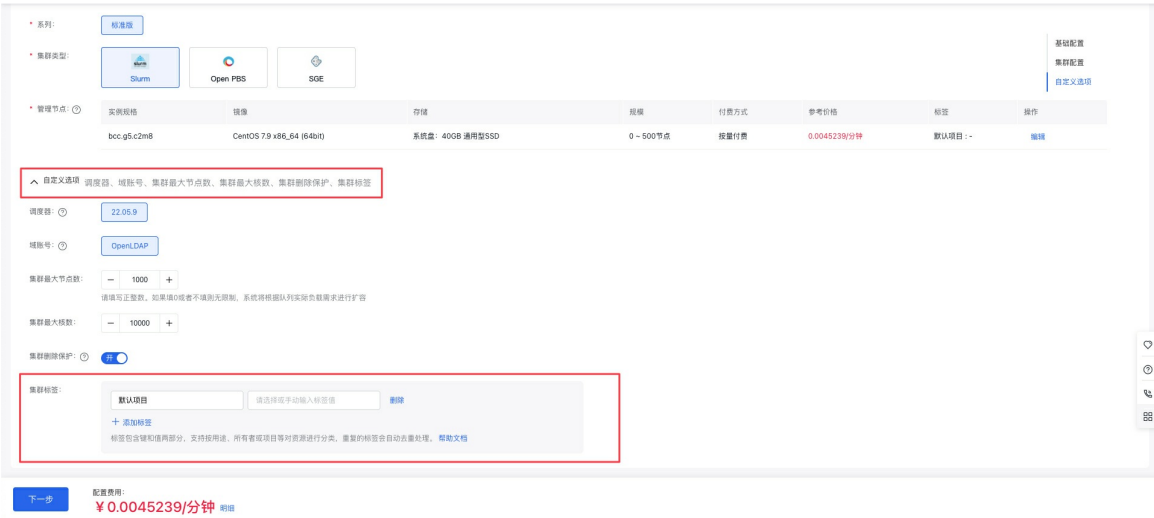
CHPC支持用户对集群、队列、节点、自动扩缩容、作业的信息打标签，方便用户按照标签进行筛选以及汇聚统计资源。
本文介绍如何在控制台设置资源的标签。

🔗 使用限制

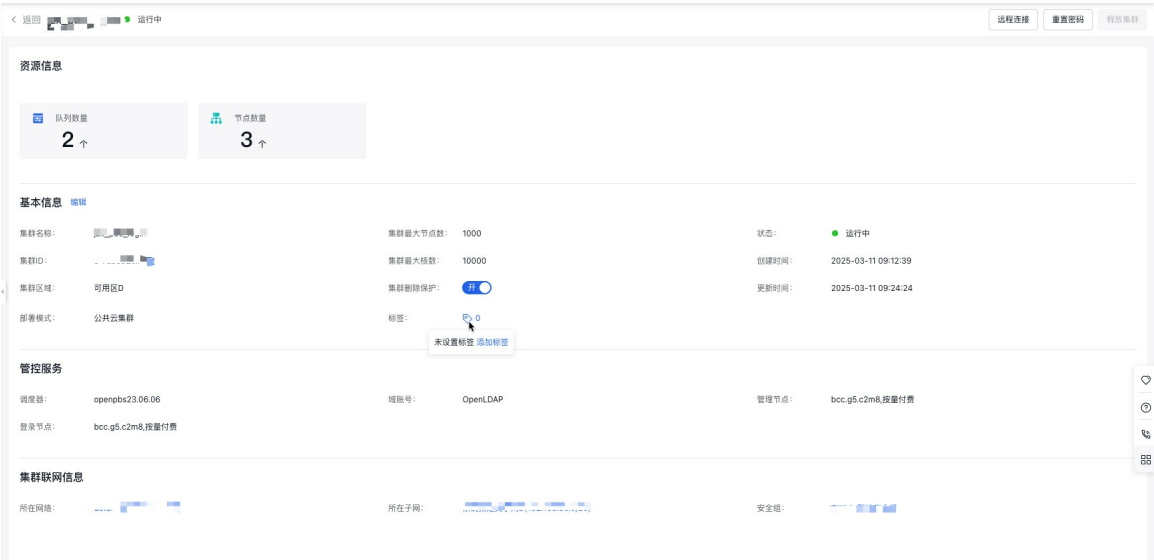
作业标签当前仅支持有登录节点的集群。

🔗 集群标签

1.创建集群时候，支持绑定集群标签



2.已创建的集群，可以在集群详情中，绑定/更新集群标签

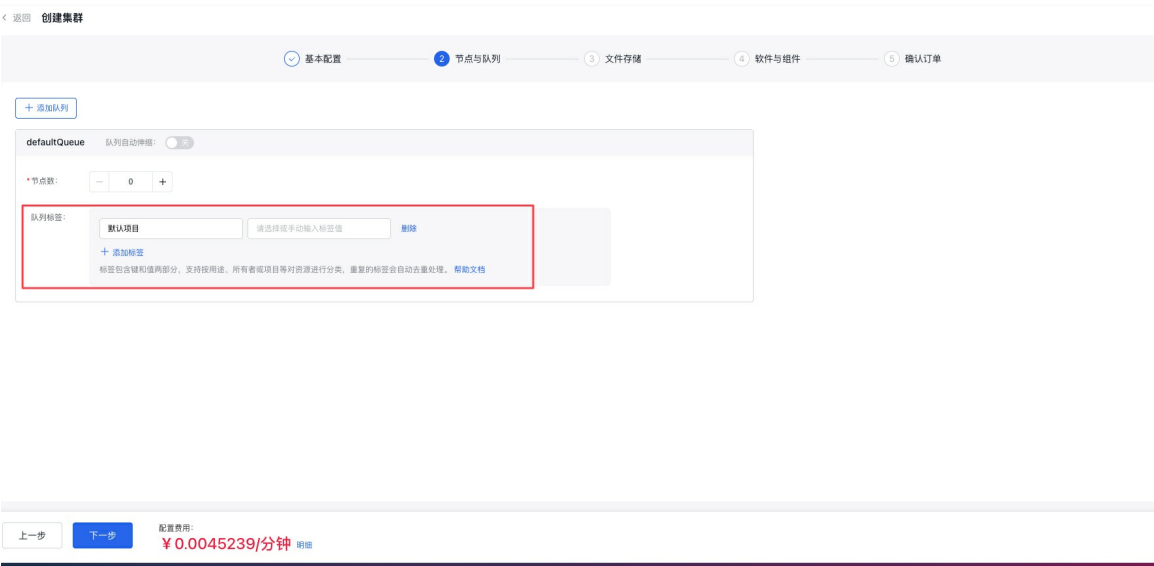


3.同时也支持给集群关联的队列、节点统一加标签

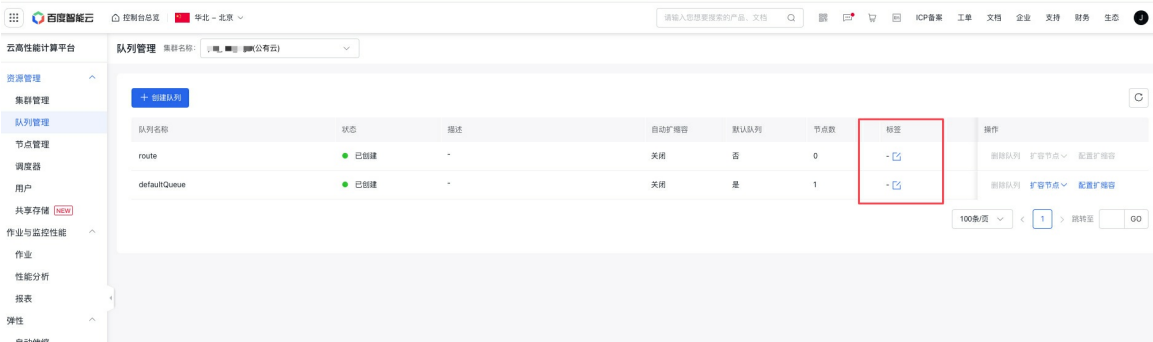


队列标签

1.创建集群时候，支持队列绑定标签



2.已创建的集群，可以在队列管理中，绑定/更新队列标签

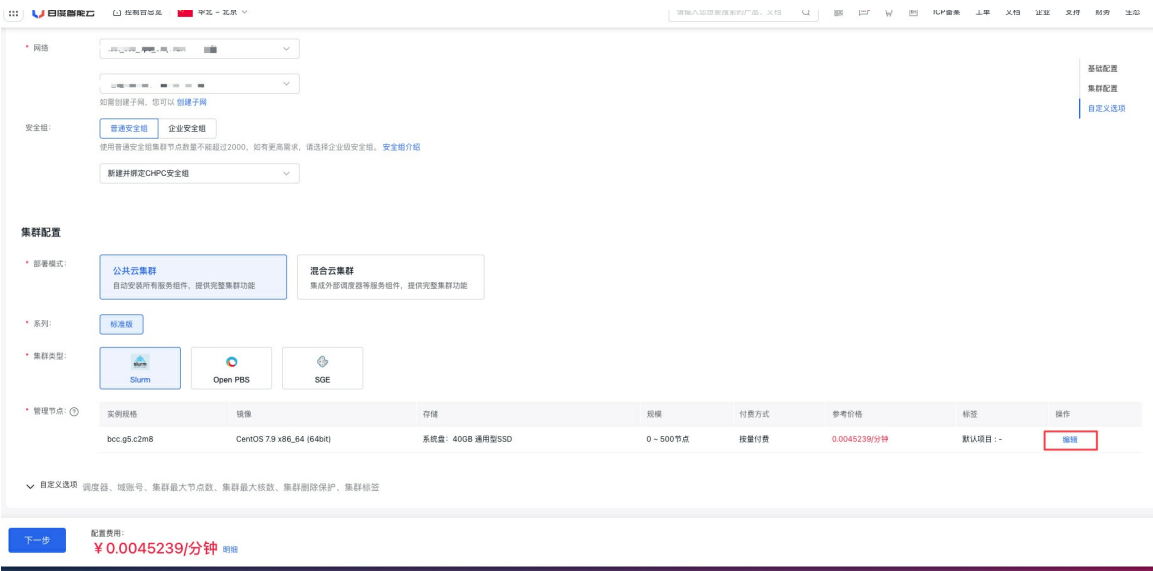


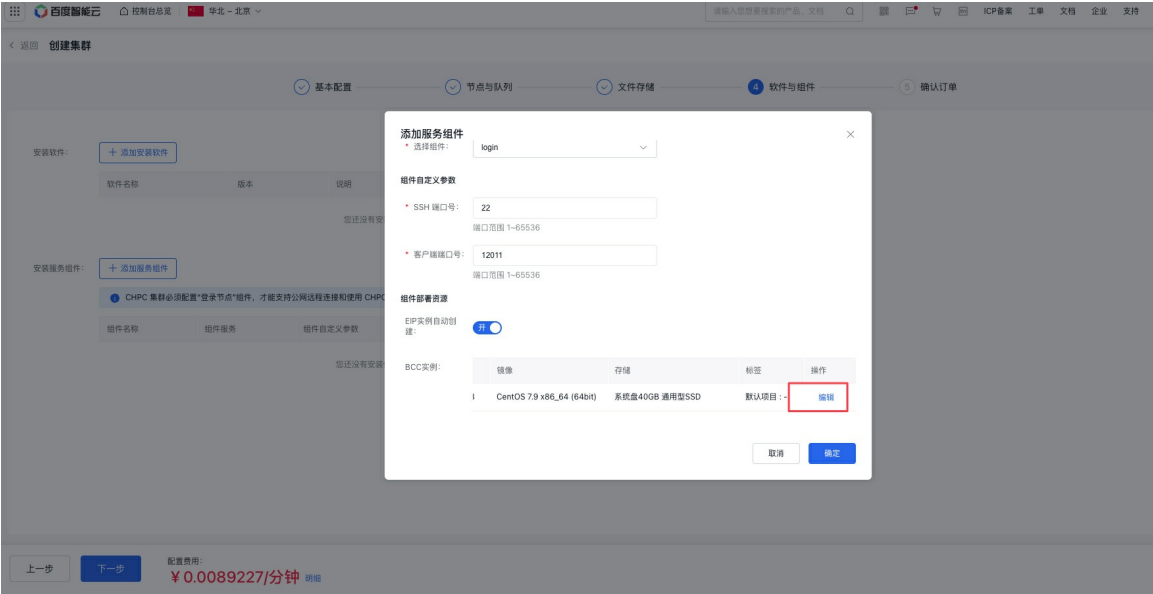
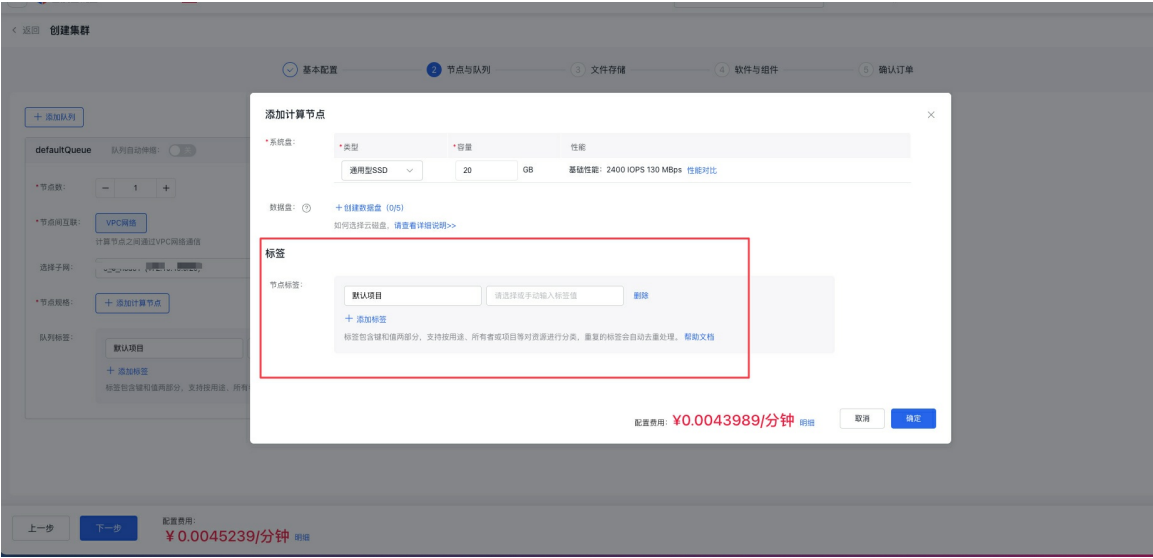
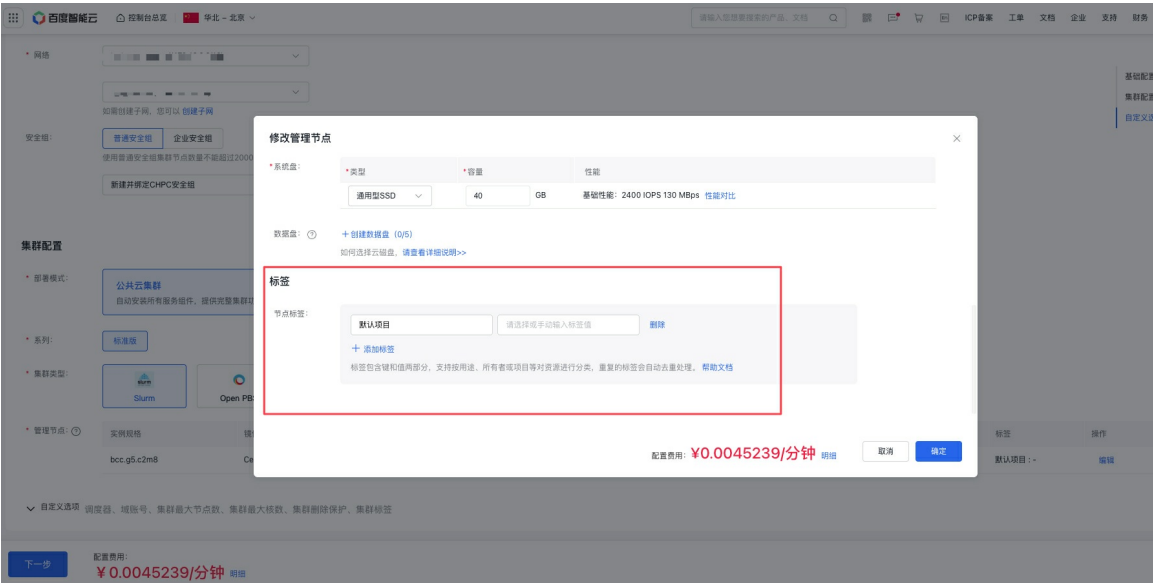
3.同时也支持给队列关联的节点统一加标签

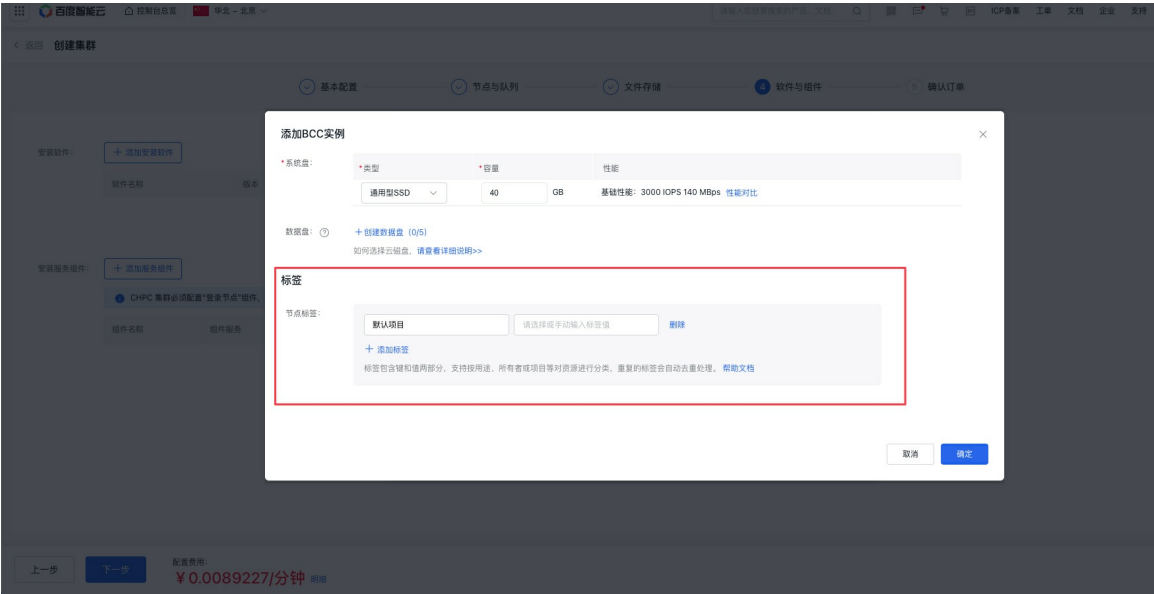


节点标签

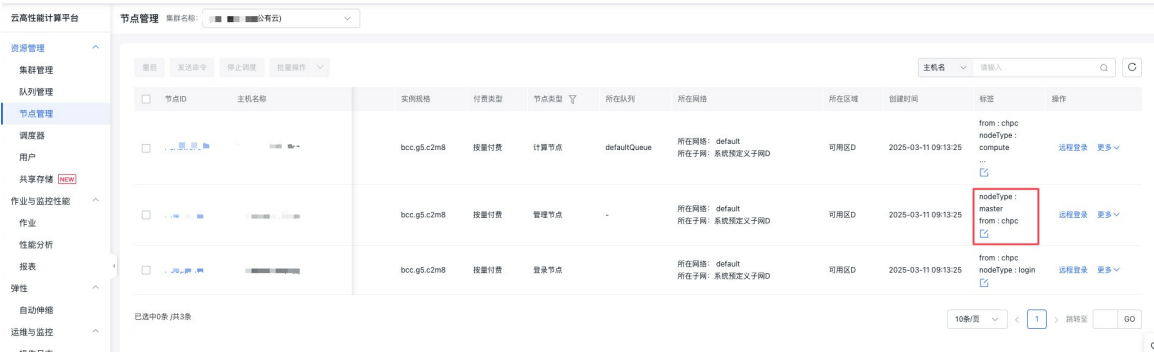
1.创建集群时候，支持管理节点/计算节点/登录节点绑定标签







2.已创建的集群，可以在节点管理中，绑定/更新节点标签

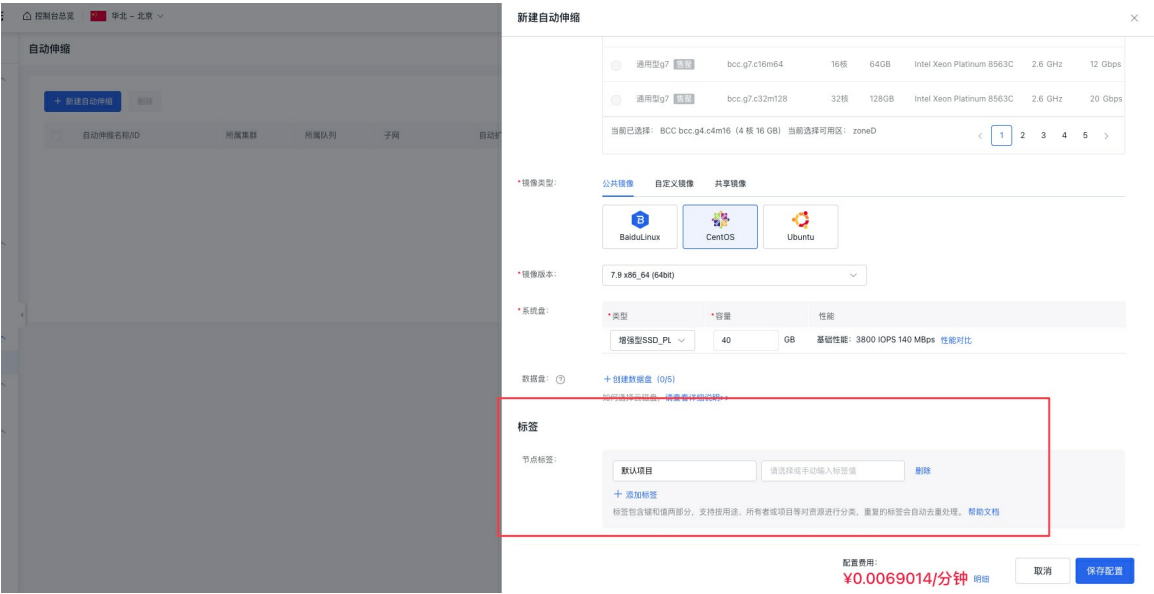


编辑之后，点击保存即可

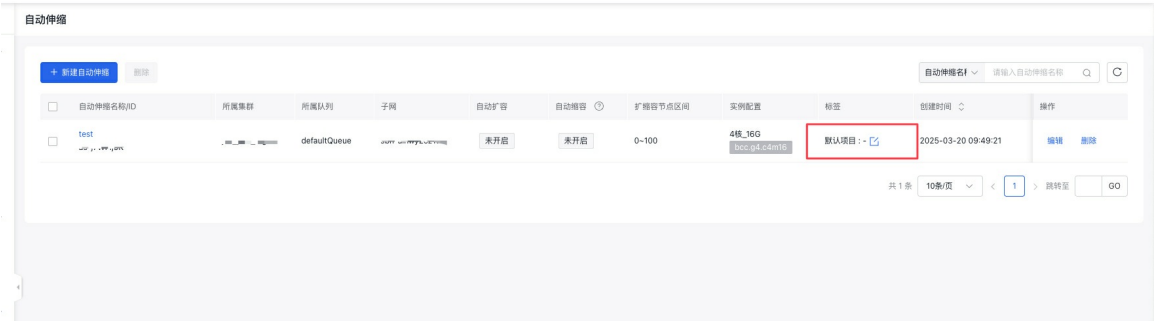


自动扩缩容标签

1.创建自动伸缩时候，支持绑定标签

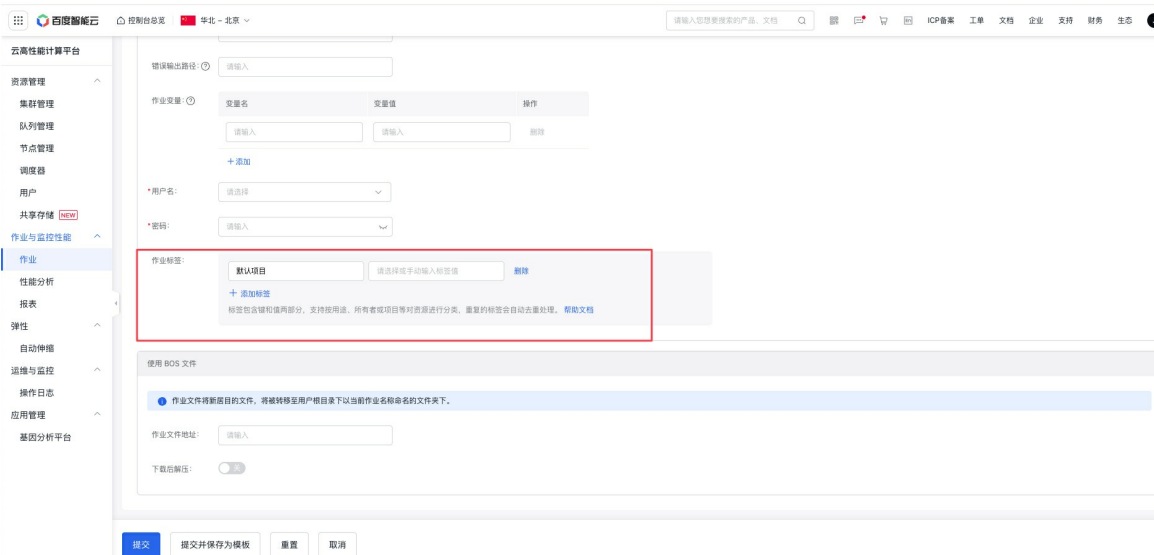


2.已创建的自动伸缩，也支持更新标签

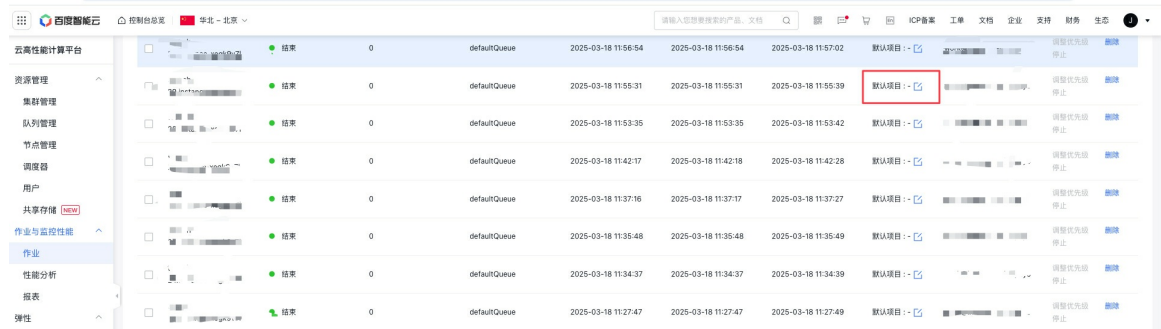


作业标签

1.当前集群只有创建登录节点，才能绑定作业标签。提交作业时候，可以选择作业标签



2.已提交的作业，也支持更新作业标签



API参考

概述

欢迎使用百度智能云云高性能计算CHPC(Cloud High Performance Compute)。

您可以使用本文档介绍的API对CHPC服务进行灵活的操作。当前CHPC处于公测阶段，请您提交调查问卷后会有工作人员帮您开通API使用。

CHPC API 提供下列接口类型：

接口类型	描述
集群管理	CHPC API 提供对集群的生命周期管理，包含创建、查询、编辑、释放等接口。
队列管理	CHPC API 提供对集群中队列的生命周期管理，包含创建、删除、查询等接口。
节点管理	CHPC API 提供对队列中节点的生命周期管理，包含扩容、释放、查询等接口。
自动扩缩容配置	CHPC API 提供对集群中的队列配置自动扩缩容规则，包含设置规则、查询等接口。

通用说明

API调用遵循HTTP协议，各Region采用不同的域名，具体域名为chpc.{region}.baidubce.com。数据交换格式为JSON，所有request/response body内容均采用UTF-8编码。

实名认证

使用CHPC API的用户需要实名认证，没有通过实名认证的可以前往[百度开放云官网控制台](#)中的安全认证下的实名认证中进行认证。没有通过实名认证的用户请求将会得到以下错误提示码：

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
QualifyNotPass	The User has not pass qualify.	403	账号没有通过实名认证

API认证机制

所有API的安全认证一律采用Access Key与请求签名机制。Access Key由Access Key ID和Secret Access Key组成，均为字符串。对于每个HTTP请求，使用下面所描述的算法生成一个认证字符串。提交认证字符串放在Authorization头域里。服务端根据生成算法验证认证字符串的正确性。认证字符串的格式为**bce-auth-v{version}/{accessKeyId}/{timestamp}/{expirationPeriodInSeconds}/{signedHeaders}/{signature}**。

- version是正整数。
- timestamp是生成签名时的UTC时间。
- expirationPeriodInSeconds表示签名有效期限。
- signedHeaders是签名算法中涉及到的头域列表。头域名之间用分号（;）分隔，如host;x-bce-date。列表按照字典序排列。（本API签名仅使用host和x-bce-date两个header）

- signature是256位签名的十六进制表示，由64个小写字母组成。

当百度智能云接收到用户的请求后，系统将使用相同的SK和同样的认证机制生成认证字符串，并与用户请求中包含的认证字符串进行比对。如果认证字符串相同，系统认为用户拥有指定的操作权限，并执行相关操作；如果认证字符串不同，系统将忽略该操作并返回错误码。

鉴权认证机制的详细内容请参见[鉴权认证](#)。

通信协议

CHPC API支持HTTP和HTTPS两种调用方式。为了提升数据的安全性，建议通过HTTPS调用。

请求结构说明

数据交换格式为JSON，所有request/response body内容均采用UTF-8编码。

请求参数包括如下4种：

参数类型	说明
URI	通常用于指明操作实体，如：POST /v{version}/cluster/{clusterId}
Query参数	URL中携带的请求参数
HEADER	通过HTTP头域传入，如：x-bce-date
RequestBody	通过JSON格式组织的请求数据体

响应结构说明

响应值分为两种形式：

返回内容	说明
HTTP STATUS CODE	如200,400,403,404等
ResponseBody	JSON格式组织的响应数据体

API版本号

参数	类型	参数位置	描述	是否必须
version	String	URL参数	API版本号，当前值为1。	是

幂等性

当调用创建接口时如果遇到了请求超时或服务器内部错误，用户可能会尝试重发请求，这时用户通过clientToken参数避免创建出比预期要多的资源，即保证请求的幂等性。

幂等性基于clientToken，clientToken是一个长度不超过64位的ASCII字符串，通常放在query string里，如<http://chpc.bj.baidubce.com/v1/cluster?clientToken=be31b98c-5e41-4838-9830-9be700de5a20>。

如果用户使用同一个clientToken值调用创建接口，则服务端会返回相同的请求结果。因此用户在遇到错误进行重试的时候，可以通过提供相同的clientToken值，来确保只创建一个资源；如果用户提供了一个已经使用过的clientToken，但其他请求参数（包括queryString和requestBody）不同甚至url Path不同，则会返回IdempotentParameterMismatch的错误代码。

clientToken的有效期为24小时，以服务端最后一次收到该clientToken为准。也就是说，如果客户端不断发送同一个clientToken，那么该clientToken将长期有效。

密码加密传输规范

所有涉及密码的接口参数都需要加密，禁止明文传输。密码一律采用AES 128位加密算法进行加密，用SK的前16位作为密钥，

加密后生成的二进制字节流需要转成十六进制，并以字符串的形式传到服务端。具体步骤如下：

- `byte[] bCiphertext= AES(明文,SK)`
- `String strHex = HexStr(bCiphertext)`

🔗 日期与时间规范

日期与时间的表示有多种方式。为统一起见，除非是约定俗成或者有相应规范的，凡需要日期时间表示的地方一律采用UTC时间，遵循ISO 8601，并做以下约束：

1. 表示日期一律采用YYYY-MM-DD方式，例如2014-06-01表示2014年6月1日
2. 表示时间一律采用hh:mm:ss方式，并在最后加一个大写字母Z表示UTC时间。例如23:00:10Z表示UTC时间23点0分10秒。
3. 凡涉及日期和时间合并表示时，在两者中间加大写字母T，例如2014-06-01T23:00:10Z表示UTC时间2014年6月1日23点0分10秒。

🔗 规范化字符串

通常一个字符串中可以包含任何Unicode字符。在编程中这种灵活性会带来不少困扰。因此引入“规范字符串”的概念。一个规范字符串只包含百分号编码字符以及URI（Uniform Resource Identifier）非保留字符（Unreserved Characters）。

RFC 3986规定URI非保留字符包括以下字符：字母（A-Z，a-z）、数字（0-9）、连字号（-）、点号（.）、下划线（_）、波浪线（~）。

将任意一个字符串转换为规范字符串的方式是：

- 将字符串转换成UTF-8编码的字节流。
- 保留所有URI非保留字符原样不变。
- 对其余字节做一次RFC 3986中规定的百分号编码（Percent-Encoding），即一个%后面跟着两个表示该字节值的十六进制字母。字母一律采用大写形式。

示例：

原字符串：`this is an example for 测试`，对应的规范字符串：`this%20is%20an%20example%20for%20%E6%B5%8B%E8%AF%95`。

🔗 排版约定

排版格式	含义
< >	变量
[]	可选项
{ }	必选项
	互斥关系
等宽字体Courier New	屏幕输出

服务域名

CHPC API的服务域名为：

Region	Endpoint	Protocol	Zone
北京（bj）	chpc.bj.baidubce.com	HTTP and HTTPS	cn-bj-b、cn-bj-d、cn-bj-e、cn-bj-f
保定（bd）	chpc.bd.baidubce.com	HTTP and HTTPS	cn-bd-b、cn-bd-c、cn-bd-d
广州（gz）	chpc.gz.baidubce.com	HTTP and HTTPS	cn-gz-c、cn-gz-d、cn-gz-e、cn-gz-f
苏州（su）	chpc.su.baidubce.com	HTTP and HTTPS	cn-su-a、cn-su-b、cn-su-c、cn-su-d、cn-su-e、cn-su-f、cn-su-g、cn-su-h

公共请求头与响应头

公共请求头

公共头部	描述
Authorization	包含Access Key与请求签名。具体请参考 鉴权认证
Content-Type	application/json; charset=utf-8
x-bce-date	表示日期的字符串，符合API规范。具体请参考 日期与时间规范
Host	请求的域名

HTTP协议的标准头域不在这里列出。公共头域将在每个CHPC API中出现，是必需的头域。POST、PUT、DELETE等请求数据放在request body中。

公共响应头

公共头部	描述
Content-Type	application/json; charset=utf-8。
x-bce-request-id	CHPC后端生成，并自动设置到响应头域中。

其中，x-bce-request-id 使用UUID version4由CHPC服务生成。

集群管理相关接口

创建集群

接口描述

创建一个用户指定配置的集群。

注意：

用户创建集群前，需要开通CHPC服务。

请求结构

```
POST /v{version}/cluster HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必须	参数位置	描述
version	Integer	是	URL参数	API版本号。例如1，如/v1/cluster
clientToken	String	否	URL参数	幂等性Token，是一个长度不超过64位的ASCII字符串。
clusterName	String	是	RequestBody参数	集群名称，长度为2~15个字符。集群名称只能包含英文大小写字母、数字、和_。必须以英文字母开头，英文或数字结尾。
description	String	否	RequestBody参数	集群描述
chargeType	String	否	RequestBody参数	集群中所有节点的付费类型，取值范围：Postpaid：按量付费Prepaid：包年包月默认Postpaid
period	Integer	否	RequestBody参数	购买集群节点的时长。单位由periodUnit指定，取值范围：当参数priceUnit取值为Year时：1~3。当参数priceUnit取值为Month时：1~9。默认值：1。
periodUnit	Integer	否	RequestBody参数	购买集群节点的时长单位。取值范围：YearMonth默认值：Month。
autoRenew	Boolean	否	RequestBody参数	是否自动续费，取值范围true：自动续费false：不自动续费默认值：false
autoRenewPeriod	Integer	否	RequestBody参数	自动续费时长。默认为1
autoRenewPeriodUnit	String	否	RequestBody参数	自动续费时长单位。默认为Month
zoneName	String	是	RequestBody参数	可用区名字，如cn-bj-d
managerSpec	String	是	RequestBody参数	管控节点规格，如bcc.g5.c16m64
computeSpec	String	否	RequestBody参数	计算节点规格，如bcc.c5.c32m64
computeCount	Integer	否	RequestBody参数	计算节点数量，取值范围[1-100]默认1
systemDiskSize	Integer	否	RequestBody参数	系统盘大小，默认40，单位GB

systemDiskType	Integer	否	RequestBody参数	系统盘类型，可选类型参考 StorageType 默认cloud_hp1
dataDiskCount	Integer	否	RequestBody参数	每个节点数据盘个数，默认0个
dataDiskSize	Integer	否	RequestBody参数	数据盘大小，默认0，单位GB，不创建数据盘
dataDiskType	String	否	RequestBody参数	数据盘类型，可选类型 StorageType 默认空
managerImageId	String	是	RequestBody参数	管控镜像ID
computeImageId	String	否	RequestBody参数	计算节点镜像ID
keypairId	String	否	RequestBody参数	密钥对登录
schedulerType	String	否	RequestBody参数	用户可选slurm默认slurm
cfsId	String	否	RequestBody参数	共享存储cfsId例如：cfs-6B76rT04vS
cfsMountPoint	String	否	RequestBody参数	cfs挂载点例如：cfs-6B76rT04vS.lb-c659e6c1.cfs.bj.baidubce.com
mountDirectory	String	否	RequestBody参数	挂载共享存储的目录默认：/mnt/cfs
networkCapacityInMbps	Integer	否	RequestBody参数	管控节点公网带宽。默认值0，表示不使用公网
internetChargeType	String	否	RequestBody参数	公网带宽计费方式，可选参数详见internetChargeType，若不指定internetChargeType，默认付费方式同BCC，预付费默认为包年包月按带宽，后付费默认为按使用带宽计费。当networkCapacityInMbps大于0时，此参数生效。BANDWIDTH_PREPAID 预付费按带宽结算TRAFFIC_POSTPAID_BY_HOUR 流量按小时后付费BANDWIDTH_POSTPAID_BY_HOUR 带宽按小时后付费
eipName	String	否	RequestBody参数	长度1~65个字节，字母开头，可包含字母数字_./字符。若不传该参数，服务会自动生成name。
			Request	

vpcl	String	是	tBody参 数	新创建集群所属的VPC ID
security Groupld	String	是	Reques tBody参 数	指定新创建集群所属的安全组ID,安全组需要开通所有端口号
subnetl d	String	是	Reques tBody参 数	新建集群的子网ID

🔗 响应头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

🔗 响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
clusterId	String	集群ID

🔗 错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
BadRequest	computeSpec is empty.	400	计算节点规格为空。
BadRequest	The chargeType only support: Postpaid,Prepaid	400	付费方式只支持后付费和预付费。
BadRequest	zoneName should not empty.	400	zoneName 不应该为空。
BadRequest	zoneName illegal.	400	zoneName非法
BadRequest	cfsId is empty.	400	cfsId 为空。

🔗 请求示例

```
POST /v1/cluster
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T09:48:15Z/1800/host/2fab6012ac3ba584ba990d5773bb56e5ce8e7f466398220c2842d33d02c6818a
{
  "clusterName": "test_chpc",
  "description": "descriptiontest",
  "zoneName": "cn-bj-g",
  "managerSpec": "bcc.g5.c2m8",
  "computeSpec": "bcc.g5.c2m8",
  "vpcl": "vpc-xqcev5h16hir",
  "subnetld": "sbn-4ggfji6pcmic",
  "securityGroupld": "g-nhycu70gh3cr",
  "systemDiskSize": 50,
  "managerImageld": "m-3GFgXfwl",
  "computeImageld": "m-3GFgXfwl"
}
```

🔗 响应示例

```
{
  "requestId": "ae0bb335-1a55-4aa9-9807-1963ac8063b1",
  "clusterId": "c-AgDIAdOk"
}
```

释放集群

接口描述

根据用户指定集群ID，释放特定集群。

请求结构

```
DELETE /v{version}/cluster/{clusterId} HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必须	参数位置	描述
version	Integer	是	URL参数	OpenApi参数
clusterId	String	是	URL参数	集群ID

响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
clusterId	String	集群ID
status	String	状态

错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
NoSuchObject	The specified object is not found or resource do not exist.	404	资源不存在
BadRequest	cluster c-xxxxxxx cannot delete with xxx status."	400	只有处于active状态的集群可以删除
BadRequest	cluster c-xxxxxxx contains queue queueName with xxx status.	400	集群中有处于非active状态的队列，无法删除集群。
BadRequest	cluster c-xxxxxxx contains instance i-xxxxxxx with xxx status.	400	集群中有处于非started状态的虚机，无法删除集群

请求示例

```
DELETE /v1/cluster/c-arPHgRIb
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
```

响应示例

```
{
  "requestId": "817636cf-c860-41d9-9131-98469a303feb",
  "clusterId": "c-arPHgRIb",
  "status": "deleting"
}
```

查询集群详情

接口描述

根据用户指定集群ID，返回集群详情。

请求结构

```
GET /v[version]/cluster/[clusterId] HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必须	参数位置	描述
version	Integer	是	URL参数	OpenApi版本号
clusterId	String	是	URL参数	集群ID

响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
cluster	Cluster	集群ID

错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
NoSuchObject	The specified object is not found or resource do not exist.	404	资源不存在

请求示例

```
GET /v1/cluster/c-8M1tr65x
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T09:44:03Z/1800/host/1122afced26ec25d05af5e31451c7a3f0c241389405361b14809bdeab6f81164
```

🔗 响应示例

```
{
  "requestId": "9a341a80-dc70-460c-8330-b5b25f0e21f4",
  "cluster": {
    "clusterId": "c-8M1tr65x",
    "clusterName": "test_chpc1",
    "description": "",
    "createdTime": "2023-08-28T12:28:52Z",
    "zoneName": "cn-bj-g",
    "chargeType": "Postpaid",
    "vpcId": "vpc-5mbbq0mx2a1n",
    "subnetId": "sbn-vcagauncd1qz",
    "securityGroupId": "g-rsi4mws81hgf",
    "schedulerType": "slurm",
    "enableHa": false,
    "imageId": "m-3GFgXfwl",
    "status": "active",
    "bccInfo": [
      {
        "nodeType": "master",
        "specCountList": [
          {
            "spec": "bcc.g5.c2m8",
            "count": 1
          }
        ]
      }
    ],
    "cfsInfo": [],
    "queueInfo": [
      {
        "queueName": "default_queue",
        "isDefault": true,
        "isAutoScale": false,
        "status": "active"
      }
    ]
  }
}
```

查询集群列表

🔗 接口描述

查询集群列表。

🔗 请求结构

```
GET /v{version}/clusters HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

🔗 请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

🔗 请求参数

参数名称	类型	是否必须	参数位置	描述
version	Integer	是	URL参数	OpenAPI版本号
pageNo	Integer	否	Query参数	显示页码，默认1
pageSize	Integer	否	Query参数	页大小，默认10，最大100

🔗 响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

🔗 响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
pageNo	Integer	当前页码
pageSize	Integer	当前页大小
totalCount	Integer	总大小
clusters	List	集群列表

🔗 请求示例

```
GET /v1/clusters HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T09:39:29Z/1800/host/8d23cd789b287ecce02c230bb8f181887fef8d0c32846b09ce76248f0c3adf5e
```

🔗 响应示例

```
{
  "requestId": "c0e995a0-f82c-43f0-8629-ef1b26d48b48",
  "pageNo": 1,
  "pageSize": 3,
  "totalCount": 3,
  "clusters": [
    {
      "clusterId": "c-Nht2ISy2",
      "clusterName": "test_chpc_bddwd",
      "description": "testchpc",
      "status": "active",
      "createdTime": "2023-08-22T09:27:14Z",
      "chargeType": "Postpaid",
      "imageId": "m-3GFgXfwl",
      "schedulerType": "slurm",
      "zoneName": "cn-bj-g"
    },
    {
      "clusterId": "c-pLmIYRvJ",
      "clusterName": "test_chpc_bddwd",
      "description": "testchpc",
      "status": "creating",
      "createdTime": "2023-08-22T09:35:11Z",
      "chargeType": "Postpaid",
      "imageId": "m-3GFgXfwl",
      "schedulerType": "slurm",
      "zoneName": "cn-bj-g"
    },
    {
      "clusterId": "c-epQVMT6E",
      "clusterName": "bddwd_prepaid",
      "description": "testchpc",
      "status": "creating",
      "createdTime": "2023-08-22T09:35:43Z",
      "chargeType": "Prepaid",
      "imageId": "m-3GFgXfwl",
      "schedulerType": "slurm",
      "zoneName": "cn-bj-g"
    }
  ]
}
```

修改集群描述

接口描述

修改集群描述

请求结构

```
PUT /v{version}/cluster/{clusterId} HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必须	参数位置	描述
version	Integer	是	URL参数	OpenApi参数
clusterId	String	是	URL参数	集群ID
clusterDescription	String	否	RequestBody参数	修改后的集群描述

🔗 响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

🔗 响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
clusterId	String	集群ID
status	String	集群状态

🔗 错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
BadRequest	description should be different.	400	修改的集群描述应该与当前集群描述不一样

🔗 请求示例

```
PUT /v1/cluster/c-arPHgRlb
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:30:08Z/1800/host/c3eec4e0e6ccb0b11c7ca4e8fe02e35ad519e02c72968dba70a44e7901cd85d8
{
  "clusterDescription": "update description"
}
```

🔗 响应示例

```
{
  "requestId": "8a368457-88da-4956-8bde-15530dd017ec",
  "clusterId": "c-arPHgRlb",
  "status": "active"
}
```

队列管理相关接口

创建队列

🔗 接口描述

指定集群创建一个队列。

🔗 请求结构

```
POST /v{version}/cluster/{clusterId}/queue HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

🔗 请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号。
clusterId	String	是	URL参数	创建队列所属的集群id
clientToken	String	否	Query参数	幂等性Token，是一个长度不超过64位的ASCII字符串，生效时长为24小时。
queueName	String	是	RequestBody参数	队列名，集群内唯一，长度为2~15个字符。队列名称只能包含英文大小写字母、数字、和_。必须以英文字母开头，英文或数字结尾

响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID

错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
BadRequest	cluster c-xxxxxxx is in xxx status, cannot add queue, only active status allowed.	400	只有处于active状态的虚机可以创建队列
The default queue does not allow deletion	queue already exists	400	对列已存在

请求示例

```
POST /v1/cluster/c-arPHgRIb/queue
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:30:08Z/1800/host/c3eec4e0e6ccb0b11c7ca4e8fe02e35ad519e02c72968dba70a44e7901cd85d8
Content-Type:
{
  "queueName": "queue1"
}
```

响应示例

```
{
  "requestId": "633e6471-ea6b-4a05-89ef-5f51a3338454"
}
```

删除队列

接口描述

- 删除指定集群的一个指定队列。

- 默认队列不可删除。
- 使用调度器的集群，队列中存在节点时不可删除

请求结构

```
DELETE /v{version}/cluster/{clusterId}/queue/{queueName} HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号。
clusterId	String	是	URL参数	队列所属的集群id
queueName	String	是	URL参数	队列名
clientToken	String	否	Query参数	幂等性Token，是一个长度不超过64位的ASCII字符串。

响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID

错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
BadRequest	The default queue does not allow deletion	400	修改的集群描述应该与当前集群描述不一样
BadRequest	The queue which is not active does not allow deletion	400	只有处于active状态的队列允许删除
BadRequest	he queue which is not empty does not allow deletion	400	对列中存在节点，无法删除。

请求示例

```
DELETE /v1/cluster/c-arPHgRlb/queue/queue1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
```

响应示例

```
{
  "requestId": "4ea842e2-2285-4f67-8b40-ddff746c6e49",
  "queueName": "queue1"
}
```

查询队列列表

🔗 接口描述

查询指定集群全部队列列表。

🔗 请求结构

```
GET /v{version}/cluster/{clusterId}/queues HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

🔗 请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

🔗 请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号
clusterId	String	是	URL参数	查询的集群id
pageNo	Integer	否	Query参数	当前页，默认1
pageSize	Integer	否	Query参数	页大小，默认10，最大100

🔗 响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

🔗 响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
queues	List	队列列表
count	Integer	数量

🔗 请求示例

```
GET /v1/cluster/c-arPHgRIb/queues
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
```

🔗 响应示例

```
{
  "requestId": "5f90b36f-d1f6-47ac-b3d4-d58d079b8d22",
  "pageNo": 1,
  "pageSize": 1,
  "totalCount": 1,
  "queueList": [
    {
      "queueName": "default_queue",
      "isDefault": true,
      "isAutoScale": false,
      "status": "active"
    }
  ]
}
```

查询队列详情

接口描述

查询指定集群指定队列详情。

请求结构

GET /v{version}/cluster/{clusterId}/queue/{queueName} HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string

请求头域

除公共头域，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号
clusterId	String	是	URL参数	查询的集群id
queueName	String	是	Query 参数	对列名称

响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
queue	Queue	队列详情

错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
NoSuchObject	The specified object is not found or resource do not exist.	404	资源不存在

请求示例

```
GET /v1/cluster/c-arPHgRIb/queue/default_queue
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
```

响应示例

```
{
  "requestId": "2843c8c7-efd5-4a3c-bf84-7ad623ab5f3a",
  "queue": {
    "queueName": "default_queue",
    "isDefault": true,
    "isAutoScale": false,
    "status": "active",
    "instanceCount": 0
  }
}
```

节点管理相关接口

扩容节点

接口描述

对已存在的队列扩容新的节点。

请求结构

```
POST /v1/cluster/{clusterId}/queue/{queueName}/instances HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号。
clientToken	String	否	Query参数	幂等性 Token，是一个长度不超过64位的ASCII字符串。
clusterId	String	是	URL参数	扩容节点所属的集群id
queueName	String	是	URL参数	扩容节点所属的队列
count	Integer	否	RequestBody参数	计算节点数量。取值范围：1~99，默认值为1
spec	String	是	RequestBody参数	新增计算节点规格，如bcc.g5.c32m128
systemDiskSize	Integer	否	RequestBody参数	系统盘大小，默认40，单位GB
systemDiskType	String	否	RequestBody参数	系统盘类型，可选类型： StorageType 默认cloud_hp1
dataDiskCount	Integer	否	RequestBody参数	每个节点数据盘个数，默认0个
dataDiskSize	Integer	否	RequestBody参数	数据盘大小，默认0，单位GB，不创建数据盘
dataDiskType	String	否	RequestBody参数	数据盘类型，可选类型： StorageType 默认空
chargeType	String	否	RequestBody参数	扩容节点的付费类型，取值范围：Postpaid：按量付费Prepaid：包年包月默认Postpaid
period	Integer	否	RequestBody参数	购买时长默认1；
periodUnit	String	否	RequestBody参数	购买资源的时长。取值范围：MonthYear默认值：Month
autoRenew	Boolean	否	RequestBody参数	是否自动续费，当参数chargeType取值为Prepaid时才生效。取值范围：true：自动续费false：不自动续费默认值：false
autoRenewPeriod	Integer	否	RequestBody参数	自动续费时长。默认为1
autoRenewPeriodUnit	String	否	RequestBody参数	自动续费时长单位。默认为Month
zoneName	String	否	RequestBody参数	可用区名字，如cn-bj-d默认为集群创建时所在可用区
subnetId	String	否	RequestBody参数	子网ID。默认为当前集群初始创建的子网ID。
securityGroupId	String	否	RequestBody参数	安全组ID。默认为当前集群初始创建的安全组ID。
imageId	String	是	RequestBody参数	镜像ID

响应头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

响应参数

参数	类型	描述
requestId	String	请求ID

错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
BadRequest	description should be different.	400	修改的集群描述应该与当前集群描述不一样
QuotaExceeded	Exceed compute node quota	403	计算节点超出配额
BadRequest	cn-bj-d does not equals to subnetId sbn-xxxxxx's zoneName cn-bj-f	400	zoneName不等于子网的zoneName

请求示例

```
POST /v1/cluster/c-arPHgRIb/queue/default_queue/instances
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
```

响应示例

```
{
  "requestId": "5193e5d3-f467-4059-96b4-a97fd115f1c4",
  "clusterId": "c-arPHgRIb",
  "queueName": "default_queue",
  "status": "creating"
}
```

释放节点

接口描述

- 释放集群中的节点。
- 预付费节点无法释放，只能释放后付费节点。

请求结构

```
DELETE /v{version}/cluster/{clusterId}/instances HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号。
clusterId	String	是	URL参数	队列所属的集群id
clientToken	String	否	Query参数	幂等性Token，是一个长度不超过64位的ASCII字符串。
instanceIds	List	是	RequestBody参数	实例ID

🔗 响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

🔗 响应参数

参数	类型	描述
requestId	String	请求ID

🔗 错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
NoSuchObject	The specified object is not found or resource do not exist.	404	资源不存在
NoSuchObject	instanceId i-aaaa,i-bbbb does not exist.	400	资源不存在
BadRequest	cannot delete master node i-aaaa	400	不能删除master 节点
BadRequest	cannot deleted prepay instance i-aaaa	400	不能删除预付费节点

🔗 请求示例

```
DELETE /v1/cluster/c-arPHgRIb/instances
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
{
  "instanceIds": [
    "i-tH9Uk3tz"
  ]
}
```

🔗 响应示例

```
{
  "requestId": "d34745b2-149b-4bac-ab9e-5417008cd358"
}
```

查询集群中的节点

🔗 接口描述

查询集群中全部节点。

🔗 请求结构

```
GET /v{version}/cluster/{clusterId}/instances HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

🔗 请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

🔗 请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号。
clusterId	String	是	URL参数	集群id
pageNo	Integer	否	Query参数	当前页，默认1
pageSize	Integer	否	Query参数	页大小，默认10，最大100

🔗 响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

🔗 响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
pageNo	Integer	当前页码
pageSize	Integer	当前页大小
totalCount	Integer	总数
instances	List	集群节点

🔗 错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
NoSuchObject	The specified object is not found or resource do not exist.	404	资源不存在

🔗 请求示例

```
GET /v1/cluster/c-arPHgRIb/instances
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
```

🔗 响应示例

```
{
  "requestId": "3c523a44-0944-45db-a06e-9c7a8f4413ae",
  "pageNo": 1,
  "pageSize": 2,
  "totalCount": 2,
  "instances": [
    {
      "clusterId": "c-arPHgRIb",
      "instanceId": "i-eGxm28x3",
      "instanceUuid": "744f8e28-4fc9-4749-b6e2-c8b35c3ced2d",
      "queueName": "default_queue",
      "nodeType": "master",
      "subnetId": "sbn-vcagauncd1qz",
      "eipNetworkCapacity": 0,
      "cosStackId": "st-zypQJc2K",
      "createdTime": "2023-08-22T11:28:45Z",
      "hostName": "instance-0eto3vs9",
      "status": "started",
      "oosExecutionId": "d-S00kbZPGgG1u",
      "publicIp": "",
      "privateIp": "192.168.100.7",
      "spec": "bcc.g5.c2m8",
      "chargeType": "Postpaid"
    },
    {
      "clusterId": "c-arPHgRIb",
      "instanceId": "i-tH9Uk3tz",
      "instanceUuid": "9362b7c7-8696-4e26-8ae5-fce9445bdac7",
      "queueName": "default_queue",
      "nodeType": "compute",
      "subnetId": "sbn-vcagauncd1qz",
      "eipNetworkCapacity": 0,
      "cosStackId": "st-zypQJc2K",
      "createdTime": "2023-08-22T11:28:45Z",
      "hostName": "instance-nl9loqr",
      "status": "started",
      "oosExecutionId": "d-lWpqPgZ9qVIW",
      "publicIp": "",
      "privateIp": "192.168.100.8",
      "spec": "bcc.g5.c2m8",
      "chargeType": "Postpaid"
    }
  ]
}
```

自动扩缩容管理相关接口

设置自动扩缩容规则

🔗 接口描述

对已存在的队列设置自动扩缩容规则，设置新的自动扩缩容规则将覆盖存量自动扩缩容规则。

🔗 请求结构

```
POST /v{version}/cluster/{clusterId}/queue/{queueName}/autoscaler HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

🔗 请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号。
clientToken	String	否	URL参数	幂等性Token，是一个长度不超过64位的ASCII字符串。
clusterId	String	是	URL参数	扩容节点所属的集群id
queueName	String	是	URL参数	扩容节点所属的队列名称
zoneName	String	否	RequestBody参数	扩容节点所在可用区。
imageId	String	是	RequestBody参数	扩容节点使用的镜像ID。
maxNodesInQueue	Integer	否	RequestBody参数	队列计算节点最大数量。取值范围：1~500默认值为100
minNodesInQueue	Integer	否	RequestBody参数	队列计算节点最小数量。取值范围：1~500默认值为0
enableAutoGrow	boolean	否	RequestBody参数	是否开启自动扩容。true：开启false：关闭默认值：false
enableAutoShrink	boolean	否	RequestBody参数	是否开启自动缩容。true：开启false：关闭默认值：false
excludeNodes	Array	否	RequestBody参数	不参与自动缩容的已有节点
spec	String	是	RequestBody参数	自动扩容的实例规格
systemDiskSize	Integer	否	RequestBody参数	系统盘大小。默认40G
systemDiskType	String	否	RequestBody参数	系统盘类型，可选类型： StorageType 默认值：cloud_hp1
dataDiskSize	Integer	否	RequestBody参数	数据盘大小，默认0GB，不创建数据盘
dataDiskType	String	否	RequestBody参数	数据盘类型，可选类型： StorageType 默认空
dataDiskCount	Integer	否	RequestBody参数	数据盘个数

响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

响应参数

参数	类型	描述
requestId	String	请求ID

错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
NoSuchObject	The specified object is not found or resource do not exist.	404	资源不存在
BadRequest	maxNodesInQueue should bigger than minNodesInQueue.	400	队列最大节点数应该大于队列最小节点数
BadRequest	cn-bj-d does not equals to subnetId sbn-xxxxxx's zoneName cn-bj-f	400	zoneName不等于子网的zoneName
NoSuchObject	some instances do not exist.	404	实例不存在
BadRequest	spec must not be empty.	400	spec不能为空
BadRequest	imageId must not be empty.	400	镜像ID不能为空

请求示例

```
POST /v1/cluster/c-arPHgRlb/queue/default_queue/autoscaler
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
{
  "maxNodesInQueue": 500,
  "minNodesInQueue": 0,
  "enableAutoGrow": false,
  "enableAutoShrink": false,
  "systemDiskSize": 50,
  "imageId": "m-3GFgXfwl",
  "spec": "bcc.g5.c2m8"
}
```

响应示例

```
{
  "requestId": "f82d0bbe-aa19-48ca-a5f1-1cdff2c52d39"
}
```

查询自动扩缩容规则

接口描述

查询自动扩缩容规则。

请求结构

```
GET /v{version}/cluster/{clusterId}/autoscalers HTTP/1.1
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: authorization string
```

请求头域

除公共头域外，无其他特殊头域。

请求参数

参数名称	类型	是否必需	参数位置	描述
version	String	是	URL参数	API版本号。
clusterId	String	是	URL参数	集群id
pageNo	Integer	否	Query参数	当前页，默认1
pageSize	Integer	否	Query参数	页大小，默认10，最大100

响应头域

除公共头域，无其他特殊头域。

响应参数

参数名称	类型	描述
requestId	String	请求ID
pageNo	Integer	当前页码
pageSize	Integer	当前页大小
totalCount	Integer	总数
AutoScalers	List	自动扩容策略列表

错误码

错误码	错误描述	HTTP状态码	中文解释
NoSuchObject	The specified object is not found or resource do not exist.	404	资源不存在

请求示例

```
GET /v1/cluster/c-arPHgRIb/autoscalers
Host: chpc.bj.baidubce.com
Authorization: bce-auth-v1/ALTAKfdDegfDEgedgyhted54dg/2023-08-22T11:35:34Z/1800/host/99a18198dfd91ecaf821207a93ba04176b19afab948c001a5c11beffc7a5ff6b
```

响应示例

```
{
  "requestId": "bf4c62a3-bc19-496c-9be2-c4e0934b89f3",
  "pageNo": 1,
  "pageSize": 1,
  "totalCount": 1,
  "autoScalers": [
    {
      "asId": "as-YQSD0a0v",
      "accountId": "2dc26ca8a35f4de4a0fdb9eb9d54d5ce",
      "createdTime": "2023-08-22T11:54:08Z",
      "updatedAt": "1971-01-01T00:00:01Z",
      "clusterId": "c-arPHgRIb",
      "queueName": "default_queue",
      "zoneName": "",
      "subnetId": "",
      "securityGroupId": "",
      "maxNodesInQueue": 500,
      "minNodesInQueue": 0,
      "enableAutoGrow": false,
      "enableAutoShrink": false,
      "spec": "bcc.g5.c2m8",
      "systemDiskSize": 50,
      "systemDiskType": "cloud_hp1",
      "dataDiskSize": 0,
      "dataDiskType": "",
      "dataDiskCount": 0,
      "imageId": "m-3GFgXfwl"
    }
  ]
}
```

应用服务

基因分析平台

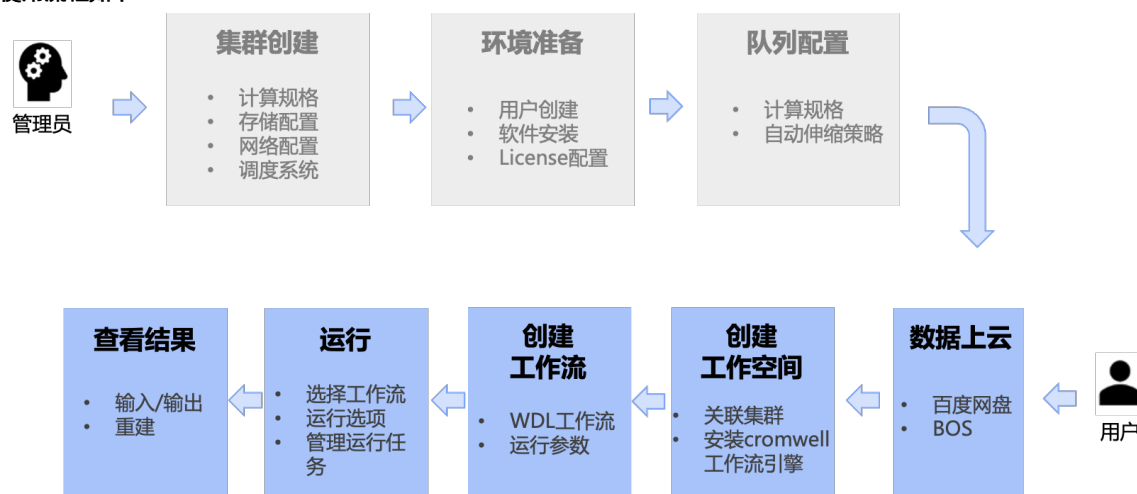
平台概述

基因分析平台广泛用于基因数据从样本到报告的分析过程。典型应用场景包括基因数据分析、测序生产自动化和基因云平台开发等。

基因分析平台是用户友好的基因分析一站式平台，端到端地提供数据传输、存储管理、生物信息分析等核心能力。平台支持Cromwell工作流引擎，帮助用户安全高效、敏捷弹性地处理任意规模基因数据。

基因分析平台提供完整的基因计算服务，简单易用、经济高效、灵活可靠、且超大规模。结合百度云海量的存储计算资源、百度网盘、连通测序上下游的用户网络、以及数据和应用的生态合作伙伴，广泛用于基因组学数据从样本到报告的分析全过程，可以作为不同应用系统计算底座，全方位满足基因组学科学研究和临床应用的需要。

使用流程如下：



工作空间

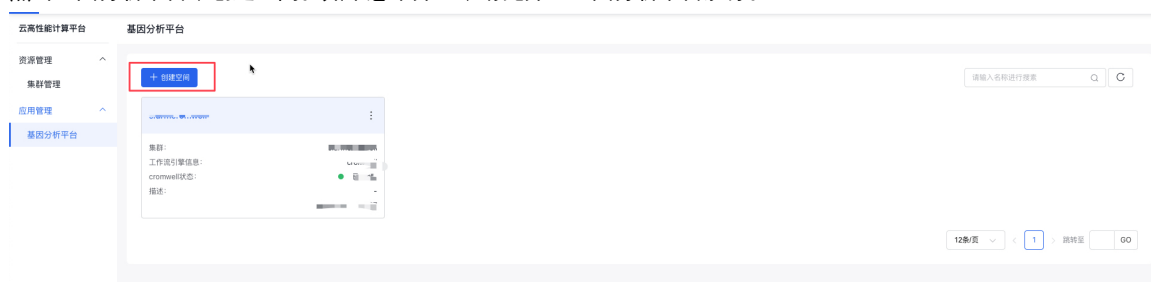
本文介绍基因分析平台中工作空间的使用方法。基因分析平台中的所有操作，都必须在工作空间内进行。用户可以通过工作空间进行工作流创建和运行任务的管理，满足数据隔离、权限控制、费用统计等业务需求。

前提条件

- 1、请提前创建集群，工作空间需要和已有集群关联。集群镜像请选择含cromwell部署镜像。请参考 [创建集群](#)。
- 2、为保证集群能正常安装cromwell工作流，集群管理节点内存需为16G及以上。

创建工作空间

点击基因分析平台，创建空间。如果您未开通，请先开通基因分析平台服务。



删除工作空间

点击集群卡片右上角，出现“删除”按钮，即可进行删除。



工作流

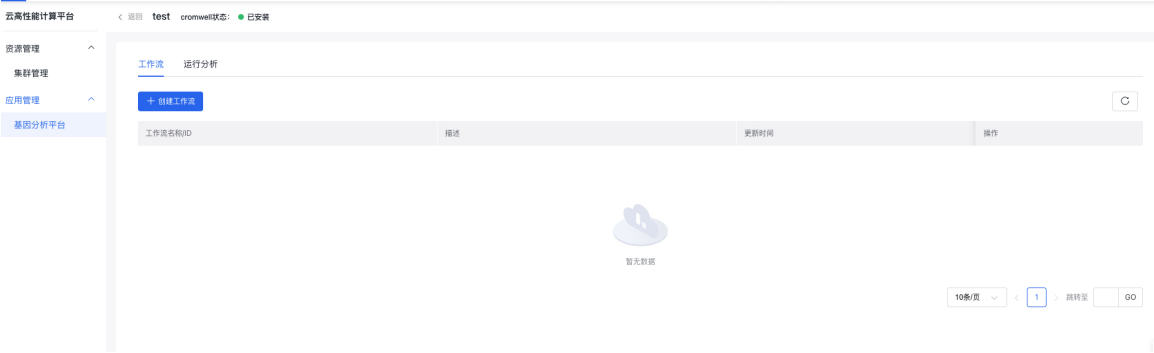
创建工作流

本文介绍如何在工作空间中从头创建和编辑工作流。您可以从头创建WDL工作流，将本地或社区中的WDL工作流迁移到基因分析平台中，并且为工作流配置常用的分析运行参数。

进入工作空间 点击工作空间卡片，进入工作空间



创建工作流 1、进入工作空间后，默认展示工作流列表，点击“创建工作流”。



2、输入

工作流名称和描述

创建 workflows

1 基本信息

2 工作流文件

3 帮助文档

基本信息

工作流名称: testworkflow

只能包含英文大小写字母、数字、和_，必须以英文字母开头，英文或数字结尾，3-15个字符

描述语言: WDL

简短描述: 简短介绍该工作流的功能或用途

0/250

下一步

3、填写

WDL工作流文件

支持上传本地文件，或在文本框内编辑文件

如果测试可点击“加载范例”，使用测试WDL文件

创建 workflows

1 基本信息

2 工作流文件

3 帮助文档

上传本地文件 (.wdl) 加载范例

./main.wdl

主文件

```
1
2 version 1.0
3 workflow myWorkflow {
4   # 工作流输入参数
5   # https://github.com/openwdl/wdl/blob/main/versions/1.0/SPEC.md#types
6   input {
7     String guest = "input"
8   }
9
10  # 工作流调用任务或子流程，提供对应任务或子流程的输入参数
11  # https://github.com/openwdl/wdl/blob/main/versions/1.0/SPEC.md#call-statement
```

+ 添加文件

上一步 下一步

4、提交工作流，完成创建后，自动跳转到工作流列表。

创建 workflows

1 基本信息

2 工作流文件

3 帮助文档

版本介绍:

帮助文档: 编辑 预览

1

上一步 提交



🔗 使用网盘工作流示例

基因分析平台支持和网盘打通数据流。
网盘使用支持 **外网** 和 **百度内网** 两种使用方式。

前置工作 1、外网方式：
请确保节点能正常访问外网，推荐配置NAT网关访问外网，请参考[NAT网关](#)
视频教程：<https://cloud.baidu.com/video-center/video/726>。
2、百度内网方式：
需要在VPC控制台购买两张服务网卡，分别用于访问网盘控制流及数据流服务。请参考：<https://cloud.baidu.com/doc/VPC/s/6jwvyu1dn%E5%88%9B%E5%BB%BA%E6%9C%8D%E5%8A%A1%E7%BD%91%E5%8D%A1>

服务网卡参数填写说明：

1、控制流服务网卡：

- 购买入口：https://console.bce.baidu.com/network/?_=1705038976282#/vpc/endpoint/create
- 字段说明：
 - 网卡名称：自定义名称，建议关键字带有网盘控制流服务，以方便区分
 - 所在网络：和您新建的 hpc 集群，vpc & 子网保持一致
 - IP 地址：自动分配
 - 安全组：普通安全组
 - 挂载服务：选择公共服务，百度网盘，域名带有 control 关键字（yq.baidupan-control.com）
 - 关联添加解析：关闭
 - 内网带宽：默认 1000 Mbps
 - 公网IP：暂不需要

配置信息

* 网卡名称:

baidupan-control

16/65

以字母开头，支持大小写字母、数字以及 -/_/ 特殊字符

* 所在网络:

default (172.18.0.0/16)

▼

系统预定义子网 (172.18.0.0/20)

▼

当前可用区A，可用IP共4089个；如需创建子网，您可以到 [私有网络-子网](#) 去创建

IP地址:

自动分配

指定

安全组:

普通安全组

企业安全组

已选择1项

▼

挂载服务: ①

公共服务

自定义服务

对象存储

稳定、安全、高效、高可扩展的云存储服务

百度网盘

提供云端备份等服务，便捷安全的管理数据

API网关

提供API全方面的管理能力

容器镜像服务

提供分布式全托管的容器镜像管理服务

yq.baidupan-control.com

▼

关联添加解析:

开启

推荐

关闭

开启后在内网DNS服务中自动添加解析，可直接通过服务域名访问到所挂载的服务。内网DNS服务为付费产品，可按需使用。

* 内网带宽:

1Mbps

1250Mbps

2500Mbps

3750Mbps

5000Mbps

1000

Mbps

单地域所有服务网卡的累计购买带宽峰值总和/配额: 3000Mbps/50000Mbps

2、数据流服务网卡：

- 购买入口：https://console.bce.baidu.com/network/?_=1705038976282#/vpc/endpoint/create
- 字段说明：
 - 网卡名称：自定义名称，建议关键字带有网盘数据流服务，以方便区分
 - 所在网络：和您新建的 hpc 集群，vpc & 子网保持一致
 - IP 地址：自动分配
 - 安全组：普通安全组
 - 挂载服务：选择公共服务，百度网盘，域名不带有 control 关键字 (yq.baidupan.com)
 - 关联添加解析：关闭
 - 内网带宽：默认 1000 Mbps
 - 公网IP：暂不需要

* 网卡名称:

baidupan-data|

13/65

以字母开头, 支持大小写字母、数字以及 -、_、特殊字符

* 所在网络:

default (172.18.0.0/16)

系统预定义子网 (172.18.0.0/20)

当前可用区A, 可用IP共4089个; 如需创建子网, 您可以到 [私有网络-子网](#) 去创建

IP地址:

自动分配

指定

安全组:

普通安全组

企业安全组

已选择1项

挂载服务: ①

公共服务

自定义服务

对象存储

百度网盘

API网关

容器镜像服务

yq.baidupan.com (阳泉区域百度网盘服务)

关联添加解析:

开启

推荐

关闭

开启后在内网DNS服务中自动添加解析, 可直接通过服务域名访问到所挂载的服务。内网DNS服务为付费产品, 可按需使用。

* 内网带宽:

1Mbps

1250Mbps

2500Mbps

3750Mbps

5000Mbps

1000

Mbps

单地域所有服务网卡的累计购买带宽峰值总和/配额: 3000Mbps/5000Mbps

3、服务网卡管理页：

- 入口：https://console.bce.baidu.com/network/?_=1705038976282#/vpc/endpoint/list
- 获取内网IP

网卡名称ID	状态	所在网络	所在子网	内网IP/带宽	公网IP/线路类型/带宽	关联安全组	服务名称	标签	资源分组	支付方式	操作
netdisk_control_endpoint-bb79427d	可用	default	vpc-8ch7pdd9hy2z	172.18.0.5 / 1000Mbps	- / -Mbps	1	yq.baidupan-control.com	-	默认分组	后付费	监控 内网带宽调整 编辑资源分组
netdisk_data_endpoint-5c9de7e8	可用	default	vpc-8ch7pdd9hy2z	172.18.0.5 / 1000Mbps	- / -Mbps	1	yq.baidupan.com (阳泉区域百度网盘服务)	-	默认分组	后付费	监控 内网带宽调整 编辑资源分组

WDL支持网盘相关参数及示例

1、外网方式：

WDL支持网盘相关参数，如下表：

runtime参数	示例值	说明
memory	100 MB	执行工作流的内存限制，单位为MB，GB
cpu	1	执行工作流的cpu限制，单位为核
queue	default_queue	调度器的队列
netdisk_appId	111111	网盘的appid，请参考注意事项获取appid
netdisk_spaceToken	xxxxxx	网盘的Spacetoken，请参考注意事项获取Spacetoken
remote_address	netdisk://test/test.json	网盘地址，在执行工作流前，将该文件下载到本地的local_address
local_address	/chpcdata/	共享存储地址，在执行工作流前，将remote_address的网盘文件下载到该地址
local_upload_address	/chpcdata/output	共享存储地址，在执行工作流后，将该路径下文件都上传到网盘的upload_address
upload_address	netdisk://test/output	网盘地址，在执行工作流后，将local_upload_address的文件上传到该网盘地址

注意事项：

- 请您提前接入网盘，完成认证，获取 appid 与 spacetoken
 - 用户接入需要完成企业认证、开发者认证，创建应用(appid)，详见: [使用教学](#)
 - 然后通过相关接口从相应的 appid 进行账号初始化，同时获取 spacetoken，详见: [账户系统](#)

2. local_address路径请不要修改，保持共享存储路径为/chpcdata/。如更改可能导致计算节点无法读取网盘下载的文件。
3. local_upload_address上传网盘文件夹名称，请确保和本地文件夹名称一致。例如：共享存储文件夹名称为output：/chpcdata/output，则网盘文件夹名称也为netdisk://test/output

示例WDL文件如下：

```
version 1.0
workflow myWorkflow {
  input {
    String guest = "input"
  }
  call myTask {
    input:
      who = guest
  }
}
task myTask {
  input {
    String who
    # Int i = 0
    # Float f = 27.3
    # Boolean b = true
  }
  command {
    echo "hello world"
  }
  runtime {
    memory: "100 MB"
    cpu: "1"
    queue: "default_queue"
    # 网盘的apld
    netdisk_apld: "1111111"
    # 网盘的Spac token
    netdisk_spaceToken: "xxxx"
    # 网盘地址，在执行工作流前，将该文件下载到本地
    remote_address: "netdisk://test/test.json"
    # 共享存储地址，在执行工作流前，下载到本地的路径
    local_address: "/chpcdata/"
    # 共享存储地址，在执行工作流后，将该路径下文件都上传到网盘
    local_upload_address: "/chpcdata/output"
    # 网盘地址，在执行工作流后，文件上传的地址
    upload_address: "netdisk://test/output"
  }
  output {
    String out = "${who}"
  }
}
```

2、百度内网方式：

WDL支持网盘相关参数，如下表：

runtime参数	示例值	说明
memory	100 MB	执行工作流的内存限制，单位为MB，GB
cpu	1	执行工作流的cpu限制，单位为核
queue	default_queue	调度器的队列
data_inner_ip	127.0.0.1	网盘内网访问的数据流网卡ip
control_inner_ip	127.0.0.2	网盘内网访问的控制流网卡ip
netdisk_appId	111111	网盘的appId，请参考注意事项获取appId
netdisk_spaceToken	xxxxxx	网盘的Spacetoken，请参考注意事项获取Spacetoken
remote_address	netdisk://test/test.json	网盘地址，在执行工作流前，将该文件下载到本地的local_address
local_address	/chpcdata/	共享存储地址，在执行工作流前，将remote_address的网盘文件下载到该地址
local_upload_address	/chpcdata/output	共享存储地址，在执行工作流后，将该路径下文件都上传到网盘的upload_address
upload_address	netdisk://test/output	网盘地址，在执行工作流后，将local_upload_address的文件上传到该网盘地址

注意事项：

- 1. 请您提前接入网盘，完成认证，获取 appId 与 spacetoken
 - a. 用户接入需要完成企业认证、开发者认证, 创建应用(appid), 详见: [使用教学](#)
 - b. 然后通过相关接口从相应的 appId 进行账号初始化, 同时获取 spacetoken, 详见: [账户系统](#)
- 2. 网盘使用内网，需提前创建服务网卡，并且在工作流参数中配置数据流网卡ip和控制流网卡ip。data_inner_ip为网盘内网访问的数据流网卡ip、control_inner_ip为网盘内网访问的控制流网卡ip。
- 3. local_address路径请不要修改，保持共享存储路径为/chpcdata/。如更改可能导致计算节点无法读取网盘下载的文件。
- 4. local_upload_address上传网盘文件夹名称，请确保和本地文件夹名称一致。例如：共享存储文件夹名称为output：/chpcdata/output，则网盘文件夹名称也为netdisk://test/output

示例WDL文件如下：

```
version 1.0
workflow myWorkflow {
  input {
    String guest = "input"
  }
  call myTask {
    input:
      who = guest
  }
}
task myTask {
  input {
    String who
    # Int i = 0
    # Float f = 27.3
    # Boolean b = true
  }
  command {
    echo "hello world"
  }
  runtime {
    memory: "100 MB"
    cpu: "1"
    queue: "default_queue"
    # 网盘内网访问的数据流网卡ip, 如果您需要内网访问, 该值必填
    data_inner_ip: "xxxxx"
    # 网盘内网访问的控制流网卡ip, 如果您需要内网访问, 该值必填
    control_inner_ip: "xxxxx"
    # 网盘的appld
    netdisk_appld: "11111111"
    # 网盘的Spacetoken
    netdisk_spaceToken: "xxxx"
    # 网盘地址, 在执行工作流前, 将该文件下载到本地
    remote_address: "netdisk://test/test.json"
    # 共享存储地址, 在执行工作流前, 下载到本地的路径
    local_address: "/chpcdata/"
    # 共享存储地址, 在执行工作流后, 将该路径下文件都上传到网盘
    local_upload_address: "/chpcdata/output"
    # 网盘地址, 在执行工作流后, 文件上传的地址
    upload_address: "netdisk://test/output"
  }
  output {
    String out = "${who}"
  }
}
```

使用Docker工作流示例

基因分析平台支持Docker运行作业。

WDL支持Docker相关参数，如下表：

runtime参数	示例值	说明
memory	100 MB	执行工作流的内存限制，单位为MB，GB
cpu	1	执行工作流的cpu限制，单位为核
queue	default_queue	调度器的队列
docker	registry.baidubce.com/kun-public/clustalomega:latest	docker镜像，目前支持百度CCR公有镜像
docker_user	root	docker运行的用户

注意事项：

- Docker镜像目前支持百度CCR公有镜像
- 建议把自定义软件打包在Docker镜像中

示例WDL文件如下：

```
version 1.0
workflow myWorkflow {
  call myTask
}

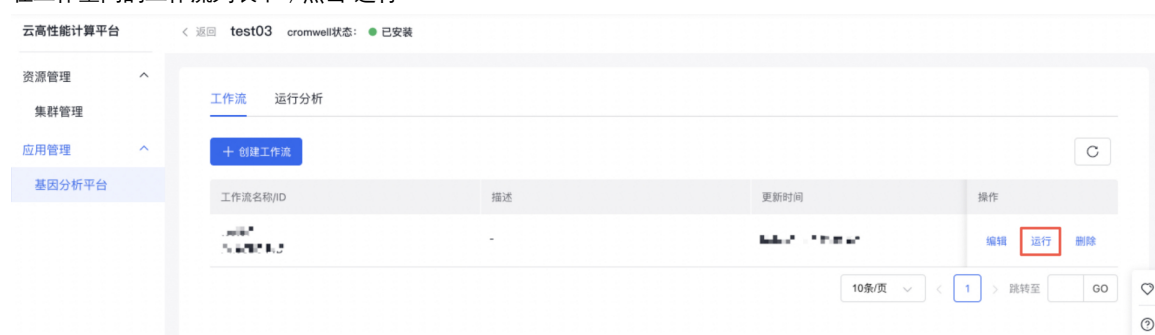
task myTask {
  input {
    String input_fasta
    String output_fasta
  }
  command {
    clustalo -i "${input_fasta}" -o "${output_fasta}"
  }
  runtime {
    memory: "1 GB"
    cpu: "1"
    queue: "default_queue"
    # docker镜像，目前仅支持内网或者公共镜像
    docker: "registry.baidubce.com/kun-public/clustalomega:latest"
    # 指定docker用户
    docker_user: "root"
  }
  output {
    String out = "${output_fasta}"
  }
}
```

运行任务

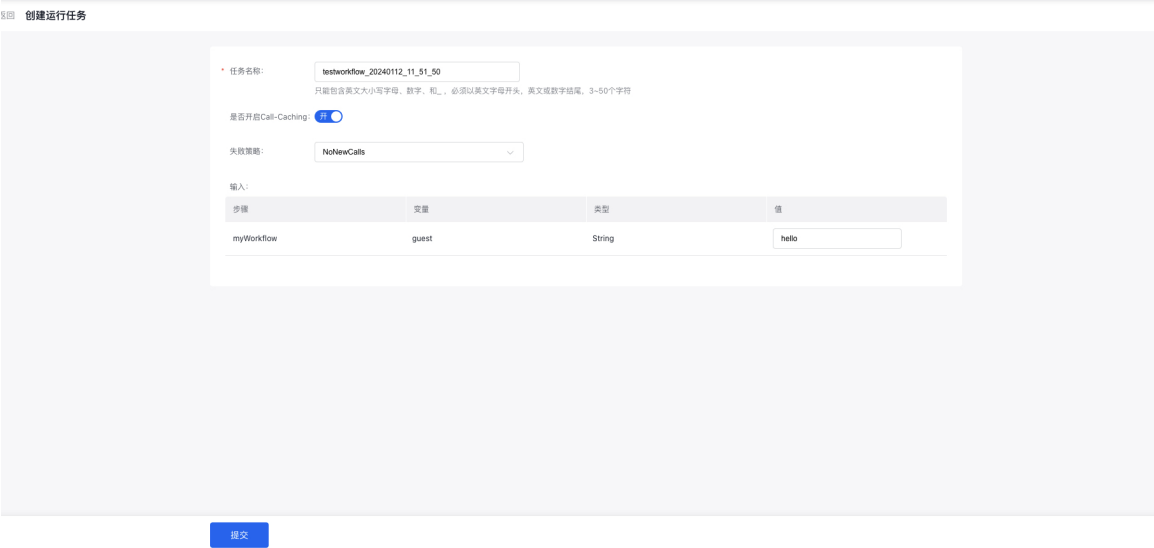
本文介绍如何在工作空间中，使用工作流创建运行任务。

1、选择工作流

在工作空间的工作流列表中，点击“运行”



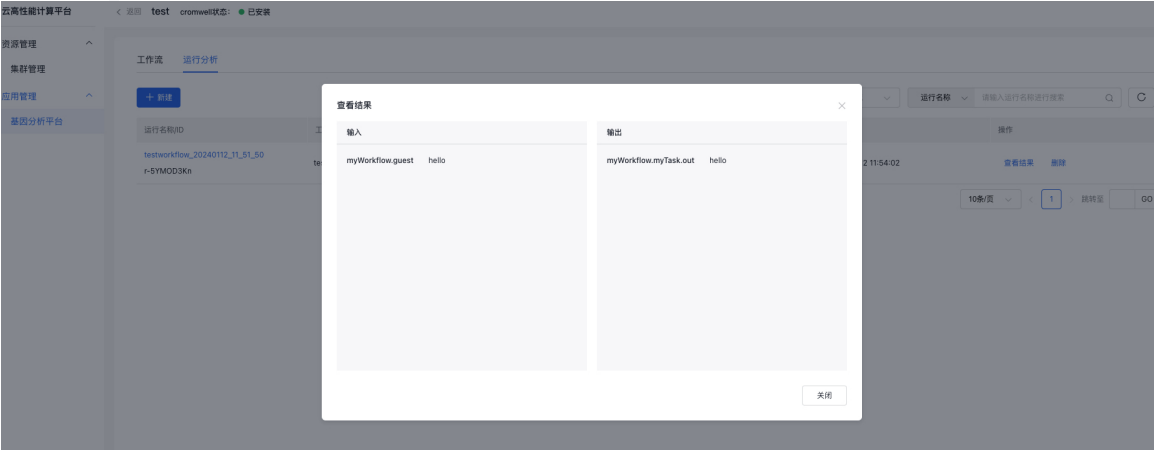
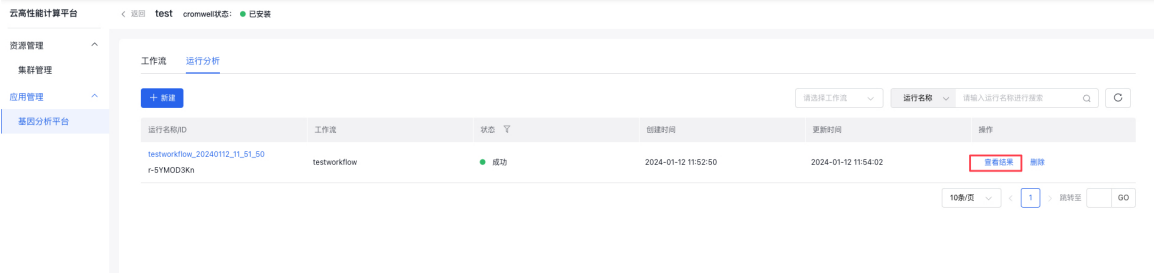
2、输入input参数，点击提交



3、查看运行状态



4、运行执行完毕后，查看结果



实践教程

使用螺旋桨HelixFold3预测生物分子结构

使用Paddle HelixFold3预测生物分子结构，有两种方式：

- 方式一：通过页面进行单次分子预测，适用于体验/测试场景；
- 方式二：通过OpenAPI进行批量分子预测，适用于生产环境；

🔗 背景

AlphaFold系列模型具备预测蛋白质单链、蛋白质复合体以及复杂生物分子结构的能力，凭借与实验方法相媲美的准确性，极大地推动了生命科学领域的进步。从AlphaFold2到AlphaFold-Multimer再到AlphaFold3，这些模型为科研工作者提供了强大的工具，显著提升了对蛋白质功能和相互作用的理解。尽管AlphaFold3支持生物分子相互作用的预测，技术本身对药物研发有极大的价值，但因其尚未开源被众多科学家所诟病，也阻碍了其在更广泛科研领域的应用和进一步发展。

完全复刻AlphaFold3的能力对促进生命科学领域的发展意义重大，但面临着模型结构和数据复杂性极高以及训练和运行所需的计算资源巨大等诸多挑战。在模型结构上，AlphaFold3 在 AlphaFold2 的基础上引入了原子级别的建模，使得整体建模更加复杂且计算量大幅增加。同时，AlphaFold3 使用了扩散模型来端到端地推理所有原子坐标。在数据层面上，由于 AlphaFold3 不仅需要建模蛋白质，还要处理小分子配体、核酸和离子等多种生物分子，复杂的数据预处理和大规模的自蒸馏数据生成对模型效果的增强至关重要。

百度螺旋桨 PaddleHelix 团队研发的 HelixFold3，在常规的小分子配体、核酸分子（包括 DNA 和 RNA）以及蛋白质的结构预测精度上已与 AlphaFold3 相媲美。具体效果指标参见：[HelixFold3生物分子结构预测技术报告](#)

🔗 使用方式一：通过页面进行单次分子预测

适用于体验/测试场景。
体验地址：<https://paddlehelix.baidu.com/app/all/helixfold3/forecast>

🔗 数据录入

输入实体 用户首先需要输入实体（Entity）数据。每一行为一条实体数据，您需要指定以下内容：

- 实体类型：目前我们支持的实体类型为“蛋白”、“配体”、“DNA”、“RNA”、“离子”
- 数量：代表该实体的复制数量，默认为1
- 序列：具体的实体内容。

输入实体:

实体类型

数量

内容

蛋白

1

MGANDYVPSPITINTSTLPVVVGPAADHTYPRVIGELTGTSNQYIFNGGSLJALMRGKFTPTLPKIGKITYNFRQGNNTQSSDFIDFTGVPLGLIIIMAGYWATPLVPINSSSIYIDPVAANTPNAYNGATGSFGARLYVAFVATGRLPNGYVTIPTKQLGHILLESNRASLNKRLTAPVMLNGGRIQVQSLEHHHHH

输入实体 +

不同实体的输入要求与示例请参考下表：

实体类型	数量	序列说明	示例输入
蛋白	1-2000的整数	由20种标准氨基酸组成的序列（支持fasta格式）	GPDSMEEVVVPEEPPKL
配体^	1-50的整数	【CCD】用户通过输入CCD或名称来从列表中选择小分子配体	ATP
		【SMILES】用户直接输入小分子的SMILES（重核数量不超过50，支持绘制）	CCccc(O)ccc
DNA	1-2000的整数	由4种标准脱氧核糖核酸ATCG组成的序列（支持fasta格式）	ACGTTTACGGGG
RNA	1-2000的整数	由4种标准核糖核酸AUCG组成的序列（支持fasta格式）	ACCCCCCC
离子	1-50的整数	从列表中选择	Zn2+

^ 水、助剂和少量特殊的配体目前是模型所不支持的，我们会将这些配体从CCD列表中除去，如果您通过输入SMILES的方式进行了这些输入，可能会造成结果的表现下降。具体不支持的配体的CCD列表参见HelixFold3 FAQ。

请注意，除了上述输入要求，每个任务中所有实体加起来总token数量不能超过2000，不同实体的token计算方式参见HelixFold3 FAQ部分。

数据预览

- 实体类型为蛋白/DNA/RNA时，完成输入后，输入的序列会进行自动整理成为预览态。此时如果您需要编辑序列，直接点击序列即可重新恢复到编辑态

输入数据

输入实体:

实体类型

数量

内容

蛋白

1

MGANDYVP¹⁰ ITINTSTL²⁰ VVIGPADAH³⁰ YPRVIGEL⁴⁰ TSNQYIFNG⁵⁰ SLIALMRG⁶⁰ TPTLFRIGKI⁷⁰ TYNFRQGNV⁸⁰ QSSDFDIPT⁹⁰ GVPGLGLIIG¹⁰⁰ MAGYWPAPL¹¹⁰ VPINSSSI¹²⁰
DPVAANTPH¹³⁰ AYNGATGSG¹⁴⁰ ARLYVAFVAT¹⁵⁰ GRLPNGVYTI¹⁶⁰ PTEQLGHILL¹⁷⁰ ESNRASLNK¹⁸⁰ RLTAQVMDAG¹⁹⁰ GRIQVQSLEH²⁰⁰ HHHHH

输入实体 +

- 实体类型为配体时，完成输入后，输入框后会出现“2D”标识。鼠标悬浮在这个标识上可以预览当前配体的二位结构。

实体操作

点击每一行实体数据最后的三个点，可以对该条数据进行操作。以下是不同实体支持的操作一览：

实体类型	操作名称	操作说明
蛋白	PTMs（即将上线）	为序列添加翻译后修饰
	删除	删除该条实体数据
配体	共价弹头（即将上线）	为配体添加共价弹头
	删除	删除该条实体数据
DNA	修饰（即将上线）	为序列添加修饰
	反向互补序列	增加一条实体类型为DNA的数据，其序列为当前序列的反向互补序列
	删除	删除该条实体数据
RNA	修饰（即将上线）	为序列添加修饰
	删除	删除该条实体数据
离子	删除	删除该条实体数据

指定相互作用（即将上线） 该模块支持用户指定已知的不同实体之间的相互作用，使得预测结果更贴合实际。

上传JSON 用户可以将需要预测的任务输入保存为JSON格式的文件，通过“上传JSON”按钮进行任务的快速读取和提交。JSON文件的说明与示例请参见：HelixFold3 JSON说明

🔗 查看结果

结果页呈现三个部分的信息：预测指标表格、PAE图和预测结构。

预测结果指标表格

左上角是预测指标表格，共四列：

- 第一列：结果的名称编号，每个任务默认输出5个结果
- 第二列：pLDDT (predicted local distance difference test)。这指的是局部置信度的每残差度量。它的范围从0到100，分数越高，表示置信度越高，通常预测也越准确。大于90的pLDDT被视为最高精度类别，其主链和侧链通常都能以高精度进行预测。相比之下，pLDDT高于70通常对应一些侧链错位的正确骨干预测。
- 第三列：pTM (predicted template modelling) 是一个综合指标，用于衡量模型对生物分子复合物整体结构预测的准确性。它表示的是预测结构与假设的真实结构叠加比对后的预估 TM 分数。TM 分数高于 0.5 表示预测的复合物整体折叠可能与真实结构相似，而 TM 分数低于 0.5 则意味着预测的结构可能是错误的。pTM 分数的定义与 TM 分数相同，但在解读 pTM 分数时需要谨慎。例如，在某些情况下，如果一个较大的蛋白结构被正确预测，而较小的伴随蛋白结构被错误预测，那么复合物的 pTM 分数可能会因为较大蛋白的贡献而高于 0.5。
- 第四列：ipTM (interface predicted template modelling)。ipTM 衡量的是生物分子复合物的亚基的相对位置的预测准确性。ipTM 值高于 0.8 表示高置信度的高质量预测，而低于 0.6 则表明预测可能失败。ipTM 值在 0.6 到 0.8 之间则属于灰色区域，预测可能是正确的，也可能是错误的。需要注意的是，即使复合物结构预测正确，ipTM 分数也可能因无序区域或 pLDDT 分数较低的区域而受到负面影响。ipTM 可能比 pTM 对用户更有用。这是因为亚基相对位置预测的质量与整个复合物预测的质量高度相关：如果亚基的相对位置是正确的（反映在较高的 ipTM 分数中），用户可以预期整个复合物结构也是正确的。

PAE图

您可以在这里查看到预测排名第一的结构的PAE图。PAE (Predicted aligned error) 是一个二维图，蛋白残基沿着轴延伸。在每个方格中，绿色阴影表示一对残基的预期距离误差，单位为Ångströms (Å)。PAE图是衡量模型在预测结构内两个残基的相对位置上有多自信的指标。PAE被定义为当预测和实际结构在残基Y上对齐时，残基X处的预期位置误差，以Ångströms (Å) 为单位测量。

来自两个不同域的两个残基之间的低PAE得分意味着低预测误差，也就是说，模型对这些残基的位置有信心。相反，PAE得分高意味着模型对其相对位置没有信心。

预测结构

您可以在3D视窗中查看预测排名第一的结构。

🔗 数据下载

所有5个结构的结果可以通过点击“下载结果”按钮来下载。下载好的压缩包的层级结构如下

```
task_name.zip/
|
|——user_input.json
|
|——*-rank1/
|  |——all_results.json
|  |——predicted_structure.cif
|
|——*-rank2/
|  |——all_results.json
|  |——predicted_structure.cif
|
|——*-rank3/
|  |——all_results.json
|  |——predicted_structure.cif
|
|——*-rank4/
|  |——all_results.json
|  |——predicted_structure.cif
|
|——*-rank5/
|  |——all_results.json
|  |——predicted_structure.cif
```

- user_input.json- 本次任务输入数据的json文件。可以用于重新提交任务或回顾本次任务的输入。
- *-rankX/- 包含排序为第X的预测结果的文件夹
 - all_results.json- 该预测结果的相关指标。具体包含的内容如下
 - predicted_structure.cif- 该预测结果的结构文件

🔗 使用方式二：通过OpenAPI进行批量分子预测

适用于生产环境。

目前限制白名单使用，如需使用请工单联系开通。

🔗 接口说明

准备工作

1. 获取生成接口鉴权信息所需的访问密钥ID(AK)及秘密访问密钥(SK)，参考：[如何获取AKSK](#)
2. 开通 CHPC 服务：[开通页](#) [接口描述](#) 该接口可用于提交和查看HelixFold任务。 [接口鉴权](#)

3. 百度云如何对您的API请求进行鉴权 当您将HTTP请求发送到百度智能云时，您需要对您的请求进行签名计算，以便百度智能云可以识别您的身份。您将使用百度智能云的访问密钥来进行签名计算，该访问密钥包含访问密钥ID(Access Key Id, 后文简称AK)和秘密访问密钥(Secret Access Key, 后文简称SK)。

了解如何创建、查看和下载Access Key Id(AK)和Secret Access Key(SK), 请参考[如何获取AKSK](#)

4. 签名API请求

在请求签名之前，请先计算请求的哈希(摘要)。然后，您使用哈希值、来自请求的其他信息以及您的秘密访问密钥(Secret Access Key, SK)，计算另一个称为签名(Signature)的哈希，得到签名后，进行一定规则的拼装成最终的认证字符串，也就是最终您需要包含在API请求中的Authorization字段。

您可以通过以下方式携带认证字符串：

- 在HTTP Header中包含认证字符串
- 在URL中包含认证字符串 您也可以将认证字符串放在HTTP请求Query String的authorization参数中。常用于生成URL给第三方使用的场景，例如要临时把某个数据开放给他人下载。关于如何在URL中包含认证字符串，请参考[在URL中包含认证字符串](#)。

您可以参看[从零开始用Python调用API接口](#)，视频的前半部分介绍了百度智能云鉴权认证机制，帮助您更快的进行了解。

3. 使用 Python 进行请求的鉴权代码样例

```
####!/usr/bin/env python3
####-*- coding: utf-8 -*-

import hashlib
import hmac
import urllib
import time

#### 1.AK/SK、host、method、URL绝对路径、querystring
AK = "input your AK"
SK = "input your SK"
host = "chpc.bj.baidubce.com"
method = "POST"
query = ""
URI = "/api/submit/helixfold"

#### 2.x-bce-date
x_bce_date = time.gmtime()
x_bce_date = time.strftime('%Y-%m-%dT%H:%M:%SZ',x_bce_date)
#### 3.header和signedHeaders
header = {
    "Host":host,
    "content-type":"application/json;charset=utf-8",
    "x-bce-date":x_bce_date
}
signedHeaders = "content-type;host;x-bce-date"
#### 4.认证字符串前缀
authStringPrefix = "bce-auth-v1" + "/" + AK + "/" + x_bce_date + "/" + "1800"
#### 5.生成CanonicalRequest
#### 5.1生成CanonicalURI
CanonicalURI = urllib.parse.quote(URI)    # windows下为urllib.parse.quote，Linux下为urllib.quote
#### 5.2生成CanonicalQueryString
CanonicalQueryString = query    # 如果您调用的接口的query比较复杂的话，需要做额外处理
#### 5.3生成CanonicalHeaders
result = []
for key,value in header.items():
    tempStr = str(urllib.parse.quote(key.lower(),safe="")) + ":" + str(urllib.parse.quote(value,safe=""))
```

```
        result.append(tempStr)
    result.sort()
    CanonicalHeaders = "\n".join(result)
    ##### 5.4拼接得到CanonicalRequest
    CanonicalRequest = method + "\n" + CanonicalURI + "\n" + CanonicalQueryString + "\n" + CanonicalHeaders
    ##### 6.生成signingKey
    signingKey = hmac.new(SK.encode('utf-8'),authStringPrefix.encode('utf-8'),hashlib.sha256)
    ##### 7.生成Signature
    Signature = hmac.new((signingKey.hexdigest()).encode('utf-8'),CanonicalRequest.encode('utf-8'),hashlib.sha256)
    ##### 8.生成Authorization并放到header里
    header['Authorization'] = authStringPrefix + "/" + signedHeaders + "/" + Signature.hexdigest()
    ##### 9.发送API请求并接受响应
    import requests
    import json

    body={
        "name" : "QQQQQQ"
    }

    url = "http://" + host + URI

    r = requests.put(url,headers = header,data=json.dumps(body))

    print(r.text)
```

接口信息 helixfold 作业提交

内容	说明
HTTP方法	POST
请求地址	http://chpc.bj.baidubce.com/api/submit/helixfold
接口鉴权	详见上方“接口鉴权”部分说明

请求参数：

```

{
  "job_name": "Protein-RNA-Ion: PDB 8AW3",          # string | 任务名，如未指定，则系统自动生成
  "recycle": 4,                                     # 可选，int | 范围[1,100]。模型推理参数，影响模型效果，越大越好。如果用户不
  设置，默认设为4。
  "ensemble": 1,                                   # 可选，int | 范围[1,100]。模型推理参数，影响模型效果，越大越好。如果用户
  不设置，默认设为1。
  "entities": [                                     # list | 定义各种实体。支持的实体类型：“protein”，“dna”，“rna”，“ion”，“ligand”。
  注：每个任务中所有实体加起来总token数量不能超过2000，不同实体的token计算方式见下方注释或参见HelixFold3 FAQ
  部分。
    {
      "type": "protein",                            # string | 实体类型（此处以蛋白为例）
      "sequence": "GPDSMEEVVPEEPPKLVSALATYVQGERLCTMFLSIANKLLPLKP", # string | 蛋白序列，仅支持20种标准
      氨基酸。一个氨基酸算做一个token，最大不可超过2000。
      "count": 1                                    # int | 实体复制数量
    },
    {
      "type": "ion",                                # string | 实体类型（此处以离子为例）
      "ccd": "ZN",                                  # string | 离子的CCD标准名字。目前支持的离子列表请参考“离子CCD列表”。一个
      离子算作一个token。
      "count": 2                                    # int | 实体复制数量。实体为离子时，数量不可超过50。
    },
    {
      "type": "dna",                                # string | 实体类型（此处以DNA为例）
      "sequence": "ACGTTTACGGGG",                  # string | DNA序列，仅支持4种标准脱氧核糖核酸ATCG。一个核苷酸算
      做一个token，最大不可超过2000。
      "count": 1                                    # int | 实体复制数量
    },
    {
      "type": "ligand",                             # string | 实体类型（此处以配体为例）
      "ccd": "ATP",                                 # string | 支持用户用CCD输入小分子配体，CCD和下方的SMILES只需输入其中一
      个即可。如果两个字段中都有输入，则以CCD的输入为准。配体中的一个原子算做一个token。注：水、助剂和少量特殊的
      配体目前是模型所不支持的，我们会将这些配体从CCD列表中除去，如果您通过输入SMILES的方式进行了这些输入，可能
      会造成结果的表现下降。具体不支持的配体的CCD列表参见[HelixFold3 FAQ]。
      "smiles": "CCccc(O)ccc",                      # string | 小分子的SMILES，重核数量需在50以内。SMILES和上方的CCD只需
      输入其中一个即可。如果两个字段中都有输入，则以CCD的输入为准。配体中的一个原子算做一个token。
      "count": 1                                    # int | 实体复制数量。实体为配体时，数量不可超过50。
    },
    {
      "type": "ion",                                # 同上离子部分。
      "ccd": "ZN",
      "count": 1
    },
    {
      "type": "dna",                                # 同上 dna 部分。
      "sequence": "CCCCGTAAACGT",
      "count": 1
    },
    {
      "type": "rna",                                # string | 实体类型（此处以RNA为例）
      "sequence": "ACCCCCC",                       # string | 序列，仅支持4种标准核糖核酸AUCG。一个核苷酸算做一个
      token，最大不可超过2000。
      "count": 1                                    # int | 实体复制数量。
    }
  ]
}

```

返回参数

```
{
  "code": 0,      # int | 状态码
  "msg": "xxx",   # string | 提示信息
  "data": {
    "task_id": 123 # uint64 | 任务ID
  }
}
```

helixfold 任务结果查询

内容	说明
HTTP方法	POST
请求地址	http://chpc.bj.baidubce.com/api/task/info
接口鉴权	详见上方“接口鉴权”部分说明

请求参数

```
{
  "task_id": 123 # uint64 | 任务ID
}
```

返回参数

```
{
  "code": 0,      # int | 状态码
  "msg": "xxx",   # string | 提示信息
  "data": {
    "status": 10,  # 任务执行状态
    "run_time": 123, # 任务执行时间
    "result": "http:xxx", # 结果临时下载URL
  }
}
```

HelixFold3使用条款与许可证请参考：[HelixFold3 Server 使用条款](#)

使用 BtuneAK对基因测序软件进行加速

🔗 背景

本文主要介绍在 CHPC 平台使用 BtuneAK 自动化加速组件，可以直接对BWA、FastQC、Picard、Trimmomatic等业务端到端时长加速。

🔗 Btune 简单介绍

BtunePK介绍

BtunePK是百度自研的一款性能分析和调优工具，兼容Intel、AMD、ARM三个CPU平台，从底层到上层覆盖CPU微架构、内核、runtime和基础库、业务应用等，对业务进行全栈性能分析和优化，快速定位并解决性能瓶颈，实现业务性能最优。

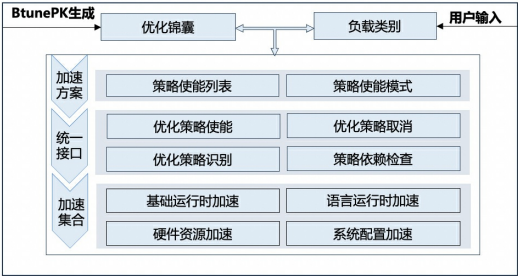
Btune功能上分为两个部分：

- （1）指标采集和分析展示：采集各种指标（整机配置、整机资源、进程热点、进程资源等），进行分析展示，初步确定异常点

（2）性能瓶颈定位和优化建议：Btune提供的诊断报告中包含两部分：分析摘要和详细报告。其中，分析摘要展示了业务性能瓶颈点和相应的优化建议，可以满足绝大部分的场景的需求。详细报告提供了更详细的性能分析数据，从系统配置、系统性能、进程线程模型、函数指令热点等多个维度呈现负载的资源分布、耗时分布、线程关系等运行特性，满足用户做更细粒度度性能优化。

详情可参见：[应用性能诊断工具Btune](#)

BtuneAK介绍 BtuneAK可以根据加速锦囊或者负载类别一键使能对应加速策略，无需改造用户程序实现透明加速。其中加速锦囊是由BtunePK一键分析生成，负载类别由用户执行BtuneAK时指定。两种方式可根据情况任选其一。



加速套件安装后成为一个系统工具，以命令行的形式执行，一键使能加速策略。

- 加速套件执行前的输入：CHPC 生科类用户输入的BtuneAK支持的负载名称或者类别。
- 加速套件执行过程（包含使能/回滚两种执行）：加速套件使能执行后，返回使能结果。

加速套件回滚执行后，返回回滚成功失败的结果。

🔗 适用软件

注：优化效果为软件在测试基准版本运行结果。

workload	测试基准版本	优化效果
BWA	0.7.17	内存管理优化综合提升12%
FastQC	0.11.9	压缩库优化综合提升12.15%
Picard	2.27.5	压缩库优化综合提升20%
Trimmomatic	0.39	压缩库优化综合提升55%

🔗 在 CHPC 使用 BtuneAK 对基因测序软件加速

🔗 准备工作

- 1、创建 CHPC 集群，具体操作，请参见 [创建公共云标准集群](#)

推荐配置参数

页面	参数	值
基本配置	部署模式	公共云模式
	集群类型	slurm
	管理节点	默认配置，规格 bcc.g5.c2m8
节点和队列	节点数	1（测试），可按实际需求选择
	计算节点-实例配置	bcc.g5.c16m64（测试），可按实际需求选择
	计算节点-镜像类型&版本	公共镜像 - Ubuntu, 20.04 LTS
软件与组件	添加服务组件	选择组件：login 并确定

- 2、登录集群：参考 [登录集群](#)，并切换到 work 用户

```
ssh root@<登录节点EIP>
su work
mkdir -p /home/work/local && cd /home/work/local
```

3、安装 BtuneAK 工具

在 /home/work 下载 BtuneAK 工具包并解压

```
cd /home/work/local && wget https://chpc-online.bj.bcebos.com/hic/release/output.tar.gz
tar zxvf output.tar.gz && mv output btuneAK
```

BtuneAK 加速使能

BtuneAK安装完成后，共 2 个文件夹，3 个文件，文件树如下：

```
[work@instance-xx ~]$ tree
.
├── btuneAK
│   ├── bin
│   │   └── btuneAK
│   └── conf
│       ├── accdata.conf
│       └── ak.conf
└── output.tar.gz

3 directories, 4 files
```

加速使能方法

workload	使能方法	效果
BWA	/<path>/bin/btuneAK -enable -workload=tlb	内存管理优化综合提升12%
FastQC	/<path>/bin/btuneAK -enable -workload=zip	压缩库优化综合提升12.15%
Picard	/<path>/bin/btuneAK -enable -workload=zip	压缩库优化综合提升20%
Trimmomatic	/<path>/bin/btuneAK -enable -workload=zip	压缩库优化综合提升55%

这里以 Trimmomatic 使能为例

1) 下载依赖软件及基因组数据信息

```
cd /home/work && mkdir -p /home/work/local
cd /home/work/local
wget https://chpc-online.bj.bcebos.com/hic/btuneak-example-files/software/jdk-17_linux-x64_bin.tar.gz && tar -zxf jdk-17_linux-x64_bin.tar.gz
wget https://chpc-online.bj.bcebos.com/hic/btuneak-example-files/software/Trimmomatic-0.39.zip && unzip Trimmomatic-0.39.zip

cd /home/work && mkdir -p /home/work/testjob/input && mkdir -p /home/work/testjob/output && cd /home/work/testjob/input
wget https://chpc-online.bj.bcebos.com/hic/btuneak-example-files/data/ctDNAFilter_node2.filtered_fq1.fastq
wget https://chpc-online.bj.bcebos.com/hic/btuneak-example-files/data/ctDNAFilter_node2.filtered_fq2.fastq
cp /home/work/local/Trimmomatic-0.39/adapters/TruSeq3-PE.fa /home/work/testjob
```

2) 编写作业提交脚本

```
cd /home/work/testjob
```

```

#### !/bin/bash
#### SBATCH -n 1
#### SBATCH -c 2
#### SBATCH --mem 4g

enableBtuneAK=0
inputDir=/home/work/testjob/input
outputDir=/home/work/testjob/output

#### 使能 BtuneAK 加速
if [[ $enableBtuneAK -eq 1 ]]; then
    /home/work/local/btuneAK/bin/btuneAK -enable -workload=zip
    source /home/work/local/btuneAK/common/lib/env_setup.sh
fi

/home/work/local/jdk-17.0.12/bin/java -jar /home/work/local/Trimmomatic-0.39/trimmomatic-0.39.jar PE -threads 1
${inputDir}/ctDNAFilter_node2.filtered_fq1.fastq ${inputDir}/ctDNAFilter_node2.filtered_fq2.fastq
${outputDir}/output_for_input1_paired.gz ${outputDir}/output_for_input1_unpaired.fq.gz
${outputDir}/output_for_input2_paired.gz ${outputDir}/output_for_input2_unpaired.fq.gz ILLUMINACLIP:TruSeq3-
PE.fa:2:40:15

#### 回滚 BtuneAK 加速
if [[ $enableBtuneAK -eq 1 ]]; then
    /home/work/local/btuneAK/bin/btuneAK -disable -workload=zip
fi

```

3. 提交未启用 btuneak 优化的任务

```
sbatch trimmomatic.sbatch
```

通过查看 slurm-.out，可看到运行结果：

```

TrimmomaticPE: Started with arguments:
-threads 1 /home/work/testjob/input/ctDNAFilter_node2.filtered_fq1.fastq /home/
work/testjob/input/ctDNAFilter_node2.filtered_fq2.fastq /home/work/testjob/outpu
t/output_for_input1_paired.gz /home/work/testjob/output/output_for_input1_unpair
ed.fq.gz /home/work/testjob/output/output_for_input2_paired.gz /home/work/testjo
b/output/output_for_input2_unpaired.fq.gz ILLUMINACLIP:TruSeq3-PE.fa:2:40:15
Using PrefixPair: 'TACACTCTTCCCTACACGACGCTCTTCCGATCT' and 'GTGACTGGAGTTCAGACGTG
TGCTCTTCCGATCT'
ILLUMINACLIP: Using 1 prefix pairs, 0 forward/reverse sequences, 0 forward only
sequences, 0 reverse only sequences
Quality encoding detected as phred33
Input Read Pairs: 58423964 Both Surviving: 55956473 (95.78%) Forward Only Surviv
ing: 2467491 (4.22%) Reverse Only Surviving: 0 (0.00%) Dropped: 0 (0.00%)
TrimmomaticPE: Completed successfully

```

通过 slurm 命令可看到运行时长

```
sacct -l -j <jobid>
```



```

使能加速策略：
尝试使能加速策略： 1 个， 成功使能： 1 个， 失败使能： 0 个
TrimmomaticPE: Started with arguments:
  -threads 1 /home/work/testjob/input/ctDNAFilter_node2.filtered.fq1.fastq /home/
work/testjob/input/ctDNAFilter_node2.filtered.fq2.fastq /home/work/testjob/outpu
t2/output_for_input1_paired.gz /home/work/testjob/output2/output_for_input1_unpa
ired.fq.gz /home/work/testjob/output2/output_for_input2_paired.gz /home/work/tes
tjob/output2/output_for_input2_unpaired.fq.gz ILLUMINACLIP:TruSeq3-PE.fa:2:40:15
Using PrefixPair: 'TACTACTCTTTCCCTACACGACGCTCTCTCCGATCT' and 'GTGACTGGAGTTCAGACGTG
TGCCTCTCCGATCT'
ILLUMINACLIP: Using 1 prefix pairs, 0 forward/reverse sequences, 0 forward only
sequences, 0 reverse only sequences
Quality encoding detected as phred33
Input Read Pairs: 58423964 Both Surviving: 55956473 (95.78%) Forward Only Surviv
ing: 2467491 (4.22%) Reverse Only Surviving: 0 (0.00%) Dropped: 0 (0.00%)
TrimmomaticPE: Completed successfully
取消加速策略：
尝试取消加速策略： 1 个， 成功取消： 1 个， 失败取消： 0 个

```

通过 slurm 命令可看到运行时长

sacct -l -j <jobid>

```

JobID      JobIDraw      JobName      Partition      MaxVMSize      MaxVMSizeNode      MaxVMSize
SizeTask   AveVMSize      MaxRSS      MaxRSSNode      MaxRSSTask      AveRSS      MaxPages      MaxPage
sNode      MaxPagesTask   AvePages      MinCPU      MinCPUNode      MinCPUTask      AveCPU      NT
asks      AllocCPUS      Elapsed      State      ExitCode      AveCPUFreq      ReqCPUFreqMin      ReqCPUFr
eqMax      ReqCPUFreqGov      ReqMem      ConsumedEnergy      MaxDiskRead      MaxDiskReadNode      Maxi
skReadTask      AveDiskRead      MaxDiskWrite      MaxDiskWriteNode      MaxDiskWriteTask      AveDi
skWrite      ReqTRES      AllocTRES      TRESUsageInAve      TRESUsageInMax      TRESUsageInMaxNode
TRESUsageInMaxTask      TRESUsageInMin      TRESUsageInMinNode      TRESUsageInMinTask      TRESUsage
InTot      TRESUsageOutMax      TRESUsageOutMaxNode      TRESUsageOutMaxTask      TRESUsageOutAve      TR
ESUsageOutTot

-----
8          8          trimmomat+ defaultQu+

-----
known      2          00:23:12      COMPLETED      0:0          Unknown      Un
Unknown

-----
billing=2+ billing=2+

-----
8.batch      8.batch      batch      4178916K      instance-f0ql+
0          4178916K      104364K      instance+      0          104364K      363 instance
e-f0+      0          363      00:20:17      instance+      0          00:20:17
1          2          00:23:12      COMPLETED      0:0          2.60M      0
0          0          0          179.06M      instance-f0qlu+
0          179.06M      21.33M      instance-f0qlui+      0
21.33M      cpu=2,mem+      cpu=00:20:17,+      cpu=00:20:17,+      cpu=instance-f0ql+      c
pu=0,fs/disk=0,m+      cpu=00:20:17,+      cpu=instance-f0ql+      cpu=0,fs/disk=0,m+      cpu=00:20:
:17,+      energy=0,fs/di+      energy=instance-f0+      fs/disk=0      energy=0,fs/di+      en
ergv=0,fs/di+

```

根据返回结果，相同执行方式下，运行时长为 23 分 12 秒，对比未加速前的 51 分 57 秒，端到端运行时长缩短 55% 左右。

附：

安装生科类软件方式

- 安装BWA。具体请参见 [BWA](#)。
- 安装FastQC。具体请参见 [FastQC](#)。
- 安装Picard。具体请参见 [Picard](#)。
- 安装Trimmomatic。具体参见 [Trimmomatic](#)。