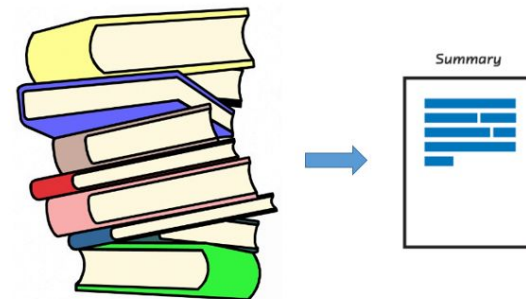
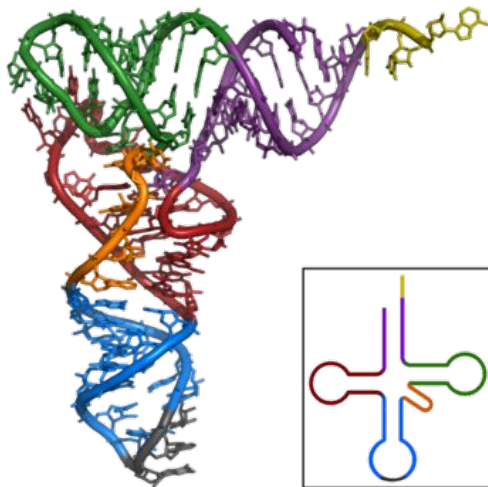


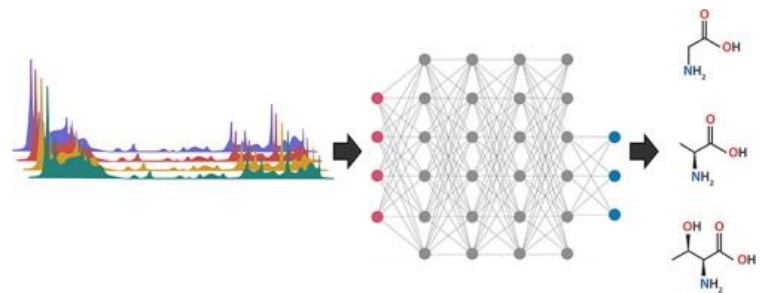
Praktické užití ML frameworku v MetaCentru

Michal Starý, Adam Hájek



Motivace

Albert Einstein **PER** Albert Einstein was born in **Ulm LOC** in **Germany LOC** on March 14, 1879. Six weeks later the family moved to **Munich LOC**, where he later on began his schooling at the **Luitpold Gymnasium. ORG**. In 1896 he entered the **Swiss Federal Polytechnic School. ORG** in **Zurich LOC** to be trained as a teacher in physics and mathematics.



 PyTorch Lightning

 PyTorch

 python

 K

Keras



TensorFlow

Pytorch & GPU

```
# Check GPU availability
use_cuda = torch.cuda.is_available()
device = torch.device('cuda' if use_cuda else 'cpu')

# Train on GPU

X,y = X.to(device), y.to(device)
model = model.to(device)

train(model, X, y, ...)

# Leave GPU
#...
```

MetaCentrum

- gridové a cloudové služby
- přístup k masivním výpočetním zdrojům
- stroje s desítkami CPU jádry, moderními GPU kartami, ...

GPU clusters in MetaCentrum					
Cluster	Nodes	GPUs per node	Compute Capability	CuDNN	gpu_cap=
zia.cerit-sc.cz	zia1.cerit-sc.cz - zia5.cerit-sc.cz	4x nVidia A100 40GB	8.0	YES	cuda35,cuda61,cuda75,cuda80
gita.cerit-sc.cz	gita1.cerit-sc.cz - gita7.cerit-sc.cz	2x nVidia GeForce RTX 2080 Ti 11GB	7.5	YES	cuda35,cuda61,cuda75
adan1.grid.cesnet.cz	adan1.grid.cesnet.cz - adan61.grid.cesnet.cz	2x nVidia Tesla T4 16GB	7.5	YES	cuda35,cuda61,cuda75
doom1.metacentrum.cz	doom1.metacentrum.cz - doom30.metacentrum.cz	2x nVidia Tesla K20 5GB (aka Kepler)	3.5	YES	cuda35
konos1.fav.zcu.cz	konos1.fav.zcu.cz - konos8.fav.zcu.cz	4x GPU nVidia GeForce GTX 1080 Ti	6.1	YES	cuda35,cuda61
zubat1.ncbr.muni.cz	zubat1.ncbr.muni.cz - zubat8.ncbr.muni.cz	2x nVidia Tesla K20Xm 6GB (aka Kepler)	3.5	YES	cuda35
glados10.cerit-sc.cz	glados10.cerit-sc.cz - glados16.cerit-sc.cz	nVidia 1080Ti GPU	6.1	YES	cuda35,cuda61
glados17.cerit-sc.cz	glados17.cerit-sc.cz	nVidia 1080Ti GPU	6.1	YES	cuda35,cuda61
glados.cerit-sc.cz	glados1.cerit-sc.cz	nVidia TITAN V GPU	7.0	YES	cuda35,cuda61,cuda70
zefron.cerit-sc.cz	zefron8.cerit-sc.cz	nVidia Tesla K40	3.5	YES	cuda35
black1.cerit-sc.cz	black1.cerit-sc.cz	nVidia Tesla P100	6.0	YES	cuda35, cuda60
grimbold.metacentrum.cz	grimbold.metacentrum.cz	2x nVidia Tesla P100	6.0	YES	cuda35, cuda60

A100
T4
...

20x
120x

Gridové služby

0) Registrace do systému MetaCentra

1) Alokace zdrojů

- CPU jádra, GPU karty, RAM, scratch na požadovanou dobu (max 24h*)

2) Přidělení zdrojů

- běžné požadavky (např. 16 jader, 20GB RAM, 2 GPU T4 -> řádově minuty)
- záleží na dni/denní době

3) Využití zdrojů

* Možnost dlouhých GPU front až na 14 dní

Prakticky - módy spuštění úloh

- alokace zdrojů pomocí příkazu **qsub**
- Interaktivní mód
 - přepojení na stroj s požadovanými zdroji
 - standardní CLI
 - +: můžeme zasahovat do procesů, spouštět je víckrát a sledovat výpisy bez nutnosti dokola alokovat
 - -: přerušování spojení/zavření terminálu → přicházíme o zdroje a neuložené výpočty
 - *jenicek@elmo5-26~: qsub -l -l select=1:ncpus=2:mem=4gb:scratch_local=10gb -l walltime=1:00:00*
- Dávkový mód (Batch mode)
 - požadavky na zdroje ve spouštěcím bash skriptu
 - +: úloha jede samostatně, skončí až vyprší čas
 - -: nevidíme na výpočet, dokud neskončí (řešení: logování do souborů během výpočtu)

- konkrétní příkazy a použití na https://wiki.metacentrum.cz/wiki/Beginners_guide#Batch_or_interactive_job.3F

Jupyter mód

- jupyter spuštěný v batch mode
- přístup k úloze přes URL
- +: máme k dispozici UI jupyteru, terminál,
- +: vše je plně interaktivní,
- +: o přístup ke zdrojům při vypnutí počítače nepřijdeme

Jupyter Lab

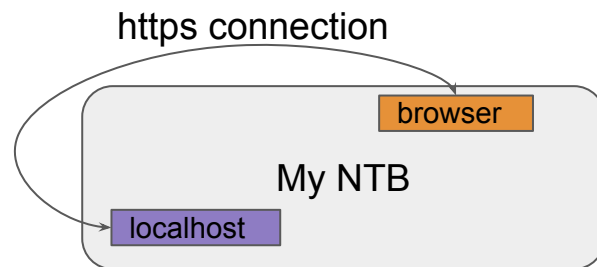
- IPython prostředí (Jupyter Notebook)
- přímá instalace balíčků
- přístup k terminálu

Práce s Jupyter Laby lokálně i remote

- 1) lokální
- 2) remote přes ssh forwarding
- 3) remote nad Metacentrem

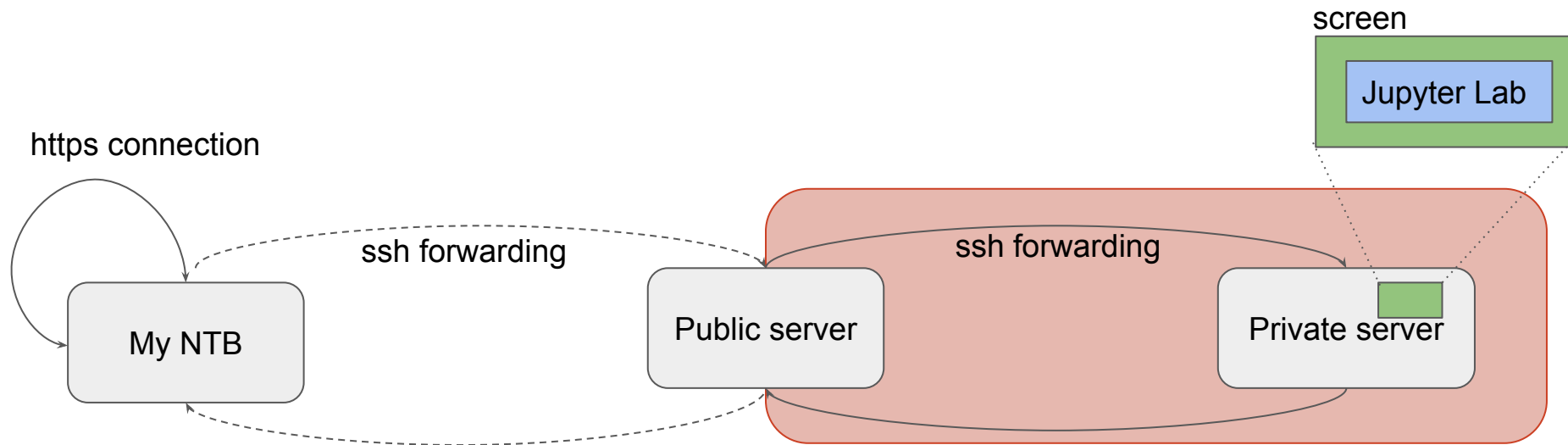
Lokální

- server i klient běží na našem počítači
- k dispozici pouze lokální zdroje



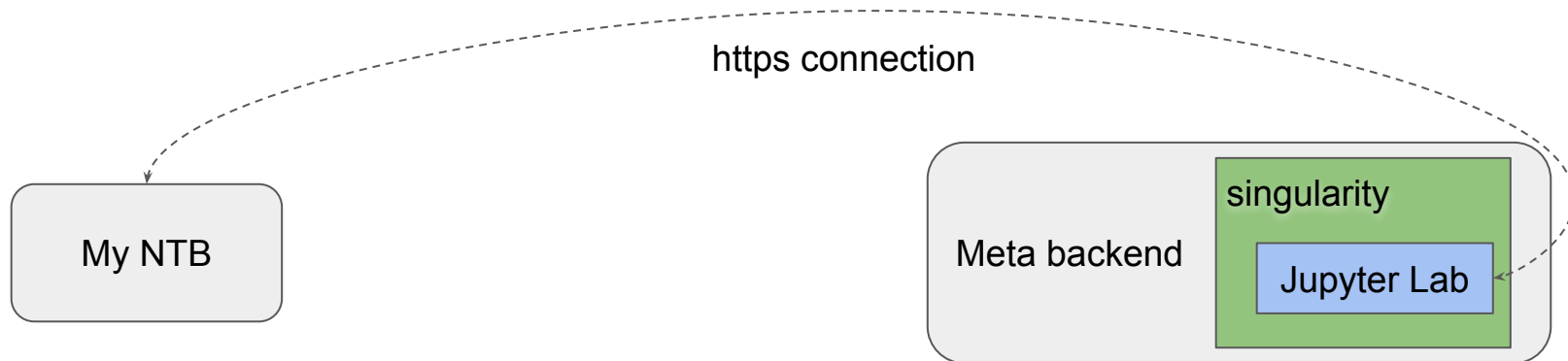
Remote na vlastní (klasický) server

- připojení k serveru se zdroji, bez veřejné IP adresy / bez veřejných portů
- stále stejná workflow
- +: výpočet běží na serveru



Remote nad Metacentrem

- připojení k serveru s veřejnou IP adresou
- složitější kvůli alokaci zdrojů
- +: výpočet běží na serverech MetaCentra,
- +: použití Singularity (má i nevýhody, viz dále)



Skripty (rychlý rozbor kódu a jak ho personalizovat)

Nvidia Singularity Image

- Singularity \approx Docker pro HPC
- spustí i Docker image
- předpřipravené image v metacentru (*/cvmfs/singularity.metacentrum.cz/NGC*)
- +: uzavřené prostředí, odladěná kompatibilita, snadná aktualizace, možnost doinstalovat balíčky přes pip
- - : složitější odinstalace původních balíčků a složitější instalace přes apt-get
 - tyto operace potřebují přebuildování kontejnerů

JupyterLabPyTorch_Job.sh	PyTorch:20.09-py3.SIF	TensorFlow:20.09-tf2-py3.SIF
JupyterLabTensorFlow1_Job.sh	PyTorch:20.12-py3.SIF	TensorFlow:20.12-tf2-py3.SIF
JupyterLabTensorFlow2_Job.sh	PyTorch:21.02-py3.SIF	TensorFlow:21.02-tf1-py3.SIF
opencv-NGC-PyTorch21.02.SIF	PyTorch:21.03-py3.SIF	TensorFlow:21.02-tf2-py3.SIF
opencv-NGC-PyTorch21.03.SIF	PyTorch:21.04-py3.SIF	TensorFlow:21.03-tf2-py3.SIF
opencv-NGC-PyTorch21.04.SIF	PyTorch:21.05-py3.SIF	TensorFlow:21.04-tf2-py3.SIF
opencv-NGC-TensorFlow20.12.tf2.SIF	qEspresso.SIF	TensorFlow:21.05-tf2-py3.SIF

- další ke stažení: <https://ngc.nvidia.com/catalog>

Problémy které řešíme

- složité rebuildování Singularity image
- multi node / multi GPU trénink

Děkujeme za pozornost

Adam: 485410@mail.muni.com
Michal: 485367@mail.muni.com