GPU erőforrások használata konténer alapon a Slurm szolgáltatásban a HUN-REN Cloudon

Integrált szolgáltatások - Singularity

- Konténer futtatókörnyezet, hasonló a Dockerhez
- HPC környezetekhez tervezve
- Docker image-ek letöltése és építése
- Nincs szükség root jogosultságra

Singularity

- Konténer letöltés
  - **singularity pull**
  - image fájl → *.sif* formátom
  - forrásként a Dockerhub-ot kell megjelölni

User | Slurm_PaaS

```
konrad@slurm-master:~$ singularity pull pytorch.sif docker://pytorch/pytorch:2.1.2-cuda11.8-cudnn8-runtime
INFO:    Converting OCI blobs to SIF format
INFO:    Starting build...
INFO:    Fetching OCI image...
27.3MiB / 27.3MiB [==========================================================================] 100 % 20.6 MiB/s 0s
9.6MiB / 9.6MiB [============================================================================] 100 % 20.5 MiB/s 0s
173.4MiB / 3.5GiB [===>----------------------------------------------------------------------] 5 % 20.6 MiB/s 2m44s
```

Singularity

- *.def* fájlok
  - saját személyre szabott könyvtárak letöltése vagy definiálása
  - konténeren belül környezeti változók beállítása
  - script-ek futtatása

Slurm_PaaS | User

```
 GNU nano 7.2
Bootstrap: docker
From: pytorch/pytorch:2.1.2-cuda11.8-cudnn8-runtime

%post
    # Update package lists
    apt-get update

    # Install system dependencies
    apt-get install -y \
        git \
        wget \
        curl \
        vim \
        build-essential \
        python3-pip

    # Install Python packages
    pip3 install --no-cache-dir \
        numpy \
        pandas \
        matplotlib \
        scikit-learn \
        jupyter

    # Clean up
    apt-get clean
    rm -rf /var/lib/apt/lists/*

%environment
    # Set environment variables
    export LC_ALL=C
    export PYTHONPATH=/workspace:$PYTHONPATH

%runscript
    # Default command when container is run
    exec /bin/bash "$@"
```

Singularity

- Konténer build-elés
  - **singularity build**
  - **--fakeroot** flag → nincs szükség root jogosultságra
  - image fájl → *.sif* formátum

User | Slurm_PaaS

```
konrad@slurm-master:~$ nano pytorch.def
konrad@slurm-master:~$ singularity build --fakeroot pytorch.sif pytorch.def
INFO:    Starting build...
INFO:    Fetching OCI image...
9.6MiB / 9.6MiB [==========================================================] 100 % 36.7 MiB/s 0s
27.3MiB / 27.3MiB [========================================================] 100 % 36.7 MiB/s 0s
3.5GiB / 3.5GiB [==========================================================] 100 % 36.7 MiB/s 0s
INFO:    Extracting OCI image...
```

Singularity

- Pytorch konténer futtatása
  - terminálon keresztül
  - **srun singularity exec**

User | Slurm_PaaS

```
konrad@slurm-master:~$ srun singularity exec pytorch.sif python3 pytorch_code.py
INFO:    Setting 'NVIDIA_VISIBLE_DEVICES=all' to emulate legacy GPU binding.
INFO:    Setting --writable-tmpfs (required by nvidia-container-cli)
Epoch [10/100], Loss: 1.4294
Epoch [20/100], Loss: 1.3638
Epoch [30/100], Loss: 1.3253
Epoch [40/100], Loss: 1.3016
Epoch [50/100], Loss: 1.2862
Epoch [60/100], Loss: 1.2756
Epoch [70/100], Loss: 1.2674
Epoch [80/100], Loss: 1.2611
Epoch [90/100], Loss: 1.2570
Epoch [100/100], Loss: 1.2534
Prediction for test input: 0.3572
Training complete!
konrad@slurm-master:~$
```

User | Slurm_PaaS

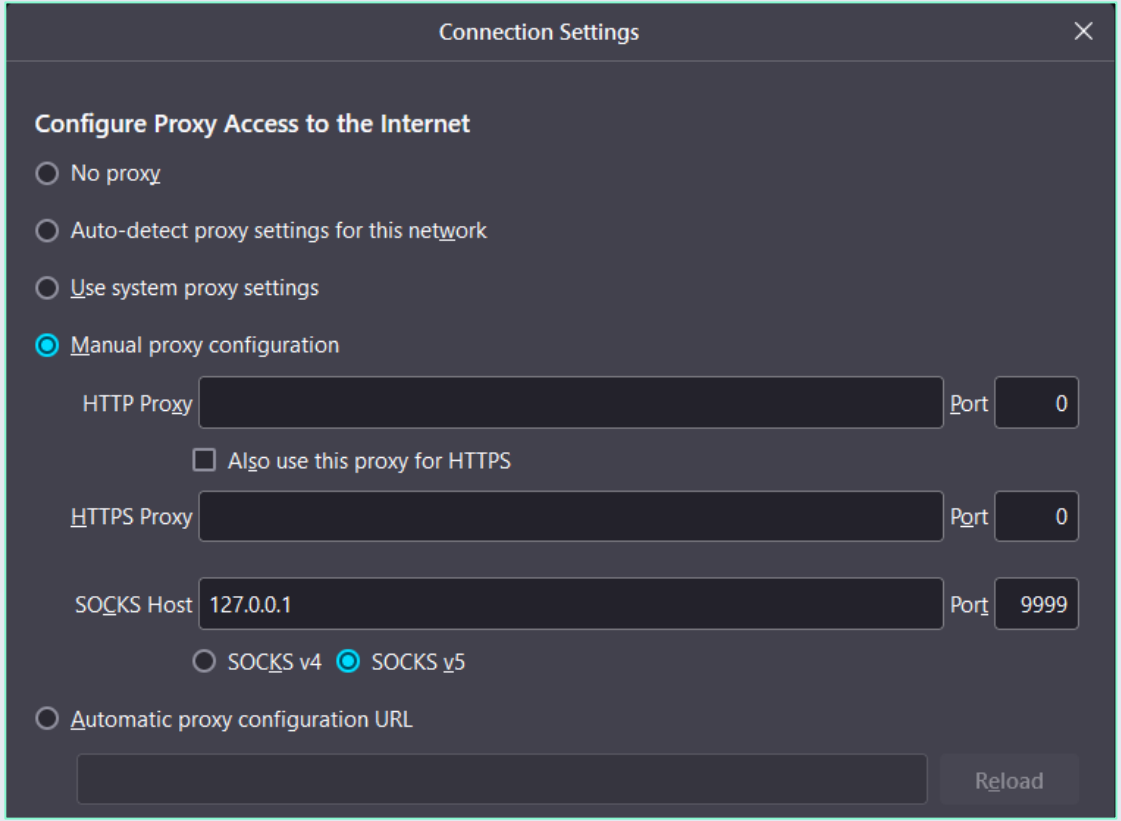
```
 GNU nano 7.2                                          pytorch.batch *
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=pytorch_code          # Job name
#SBATCH --output=pytorch_job.out         # Standard output log file
#SBATCH --error=pytorch_job.err          # Standard error log file
#SBATCH --gres=gpu:nvidia:1

# Run a script inside the Singularity container:
srun singularity exec pytorch.sif python3 pytorch_code.py
```

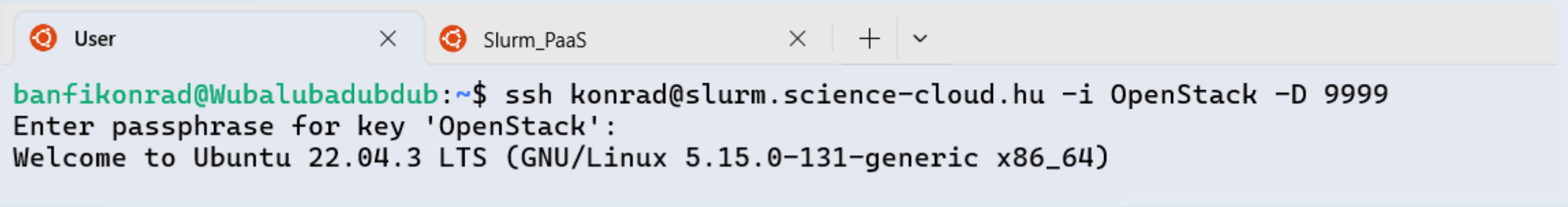
Interaktív job

- Lépések
  - *.sif* konténer fájl */home* könyvtár alá másolása
  - *.batch* fájl létrehozása, paraméterezése és ellenőrzése
  - *.batch* fájl beküldése a feladatütemezőn keresztül az **sbatch <feladat_név>.batch** paranccsal
  - Adott feladatot futtató gép IP címének lekérdezése
  - Webes fejlesztői környezet elérése

Interaktív job

- Proxy csatlakozás
  - interaktív job-ok esetén
- Javasolt böngésző
  - Mozilla Firefox
- Proxy port
  - opcionális non-standard port





Interaktív job

- Jupyterlab - példa *.batch* fájl
  - **#SBATCH –-gres=gpu:nvidia:1** → job szintű GPU hozzáférés
  - **srun** → futtató parancs
  - **singularity exec** → konténerizált függőségek
  - Jupyterlab paraméterek

User | Slurm_PaaS

```
 GNU nano 7.2                                                    jupyterlab.batch
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=jupyterlab_job      # Job name
#SBATCH --output=jupyterlab_job.out    # Standard output log file
#SBATCH --error=jupyterlab_job.err     # Standard error log file
#SBATCH --ntasks=1                     # Number of tasks (typically 1)
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH --gres=gpu:nvidia:1

# Run a script inside the Singularity container:
srun singularity exec jupyterlab.sif jupyter lab --no-browser --ip=0.0.0.0 --port=8888 --NotebookApp.token='L*&kD#Ed8MDVof'
```

Interaktív job

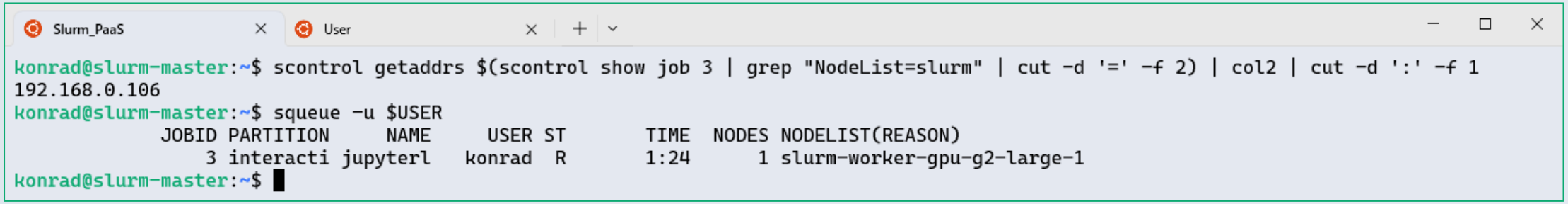
- Interaktív partíció kiválasztása a futtatáshoz → **-p** paraméter

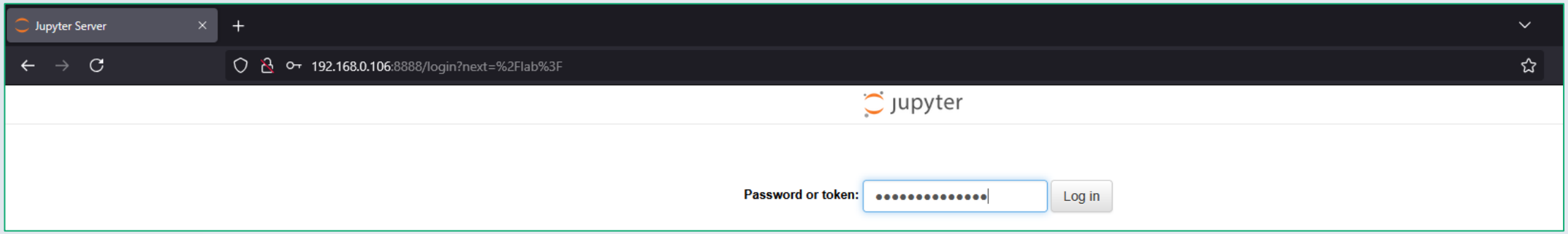
Slurm_PaaS | User

```
konrad@slurm-master:~$ cp /storage/shared_batch_examples/example.batch ~
konrad@slurm-master:~$ pv /storage/shared_singularity_images/jupyterlab.sif > ~/jupyterlab.sif
6.49GiB 0:00:43 [ 152MiB/s] [=================================================================>] 100%
konrad@slurm-master:~$ nano jupyterlab.batch
konrad@slurm-master:~$ sinfo
PARTITION                 AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
batch_cpu_m2.large           up 1-00:00:00      4   idle slurm-master,slurm-worker-cpu-m2-large-[1-3]
batch_gpu_g2.large_8*        up 1-00:00:00      7   idle slurm-worker-gpu-g2-large-[1-7]
batch_gpu_g2.xlarge_16       up 1-00:00:00      2   idle slurm-worker-gpu-g2-xlarge-[1-2]
batch_gpu_g2.2xlarge_32      up 1-00:00:00      1   idle slurm-worker-gpu-g2-2xlarge-1
interactive_cpu_m2.large     up 7-00:00:00      4   idle slurm-master,slurm-worker-cpu-m2-large-[1-3]
interactive_gpu_g2.large_8   up 7-00:00:00      7   idle slurm-worker-gpu-g2-large-[1-7]
konrad@slurm-master:~$ sbatch -p interactive_gpu_g2.large_8 jupyterlab.batch
Submitted batch job 3
konrad@slurm-master:~$ squeue -u $USER
             JOBID PARTITION     NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
                 3 interacti jupyterl   konrad  R       0:06      1 slurm-worker-gpu-g2-large-1
konrad@slurm-master:~$
```

Interaktív job

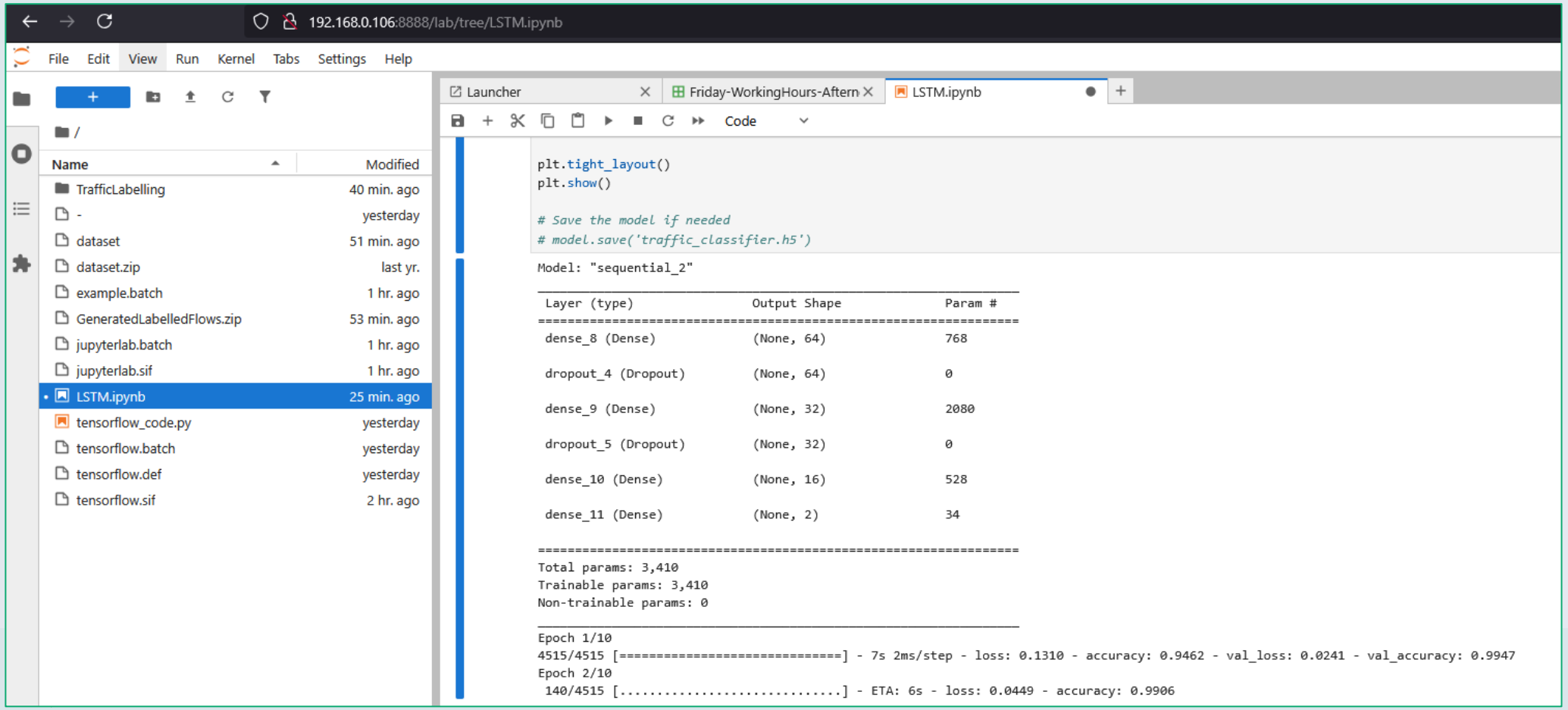
- Webes fejlesztői környezet elérése a lekérdezett IP cím alapján
  - port → 8888
  - token alapú autentikáció → a batch fájlban került definiálásra





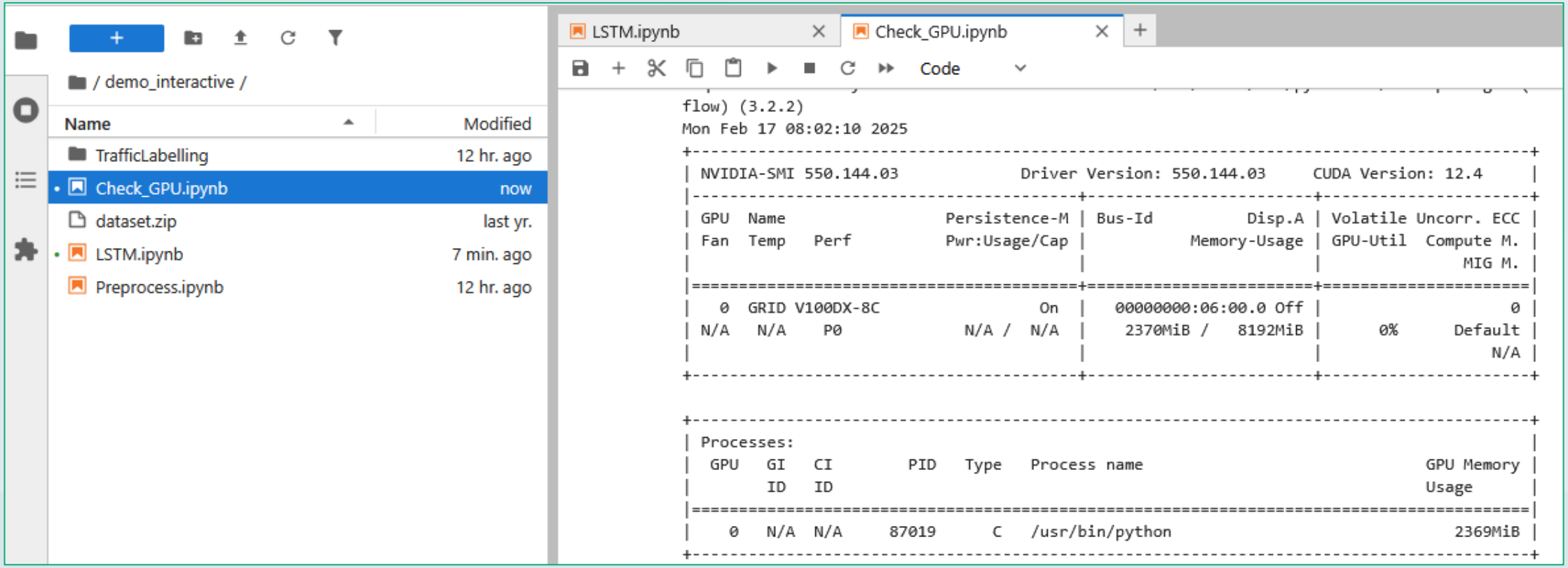
Interaktív job

- Webes fejlesztői környezet használata
  - */home* mappa elérhető a konténerizált környezetben is



Interaktív job

- GPU erőforrás ellenőrzése
  - elérhető a webes fejlesztői környezetben
  - **singularity exec –-nv** → parapméter, GPU hozzáférés a konténer által
  - globális beállítás, a felhasználónak nem szükséges használnia



MP

- Közös memóriájú párhuzamos programozás
- A fő szál párhuzamos szálakat indít, amelyek ugyanazt a memóriaterületet osztják meg
- Egyetlen gépen történő kód párhuzamosításra használják, több mag/processzor esetén

MP

User | Slurm_PaaS

```
  GNU nano 7.2
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=omp_job        # Job name
#SBATCH --nodes=1                 # Run on a single node
#SBATCH --ntasks=1                # Run a single task
#SBATCH --cpus-per-task=4         # Use 4 CPU cores
#SBATCH --mem=4G                  # Request 4 GB of memory
#SBATCH --time=00:30:00           # Time limit: 30 minutes
#SBATCH --output=%j_output.log    # Standard output log
#SBATCH --error=%j_error.log      # Standard error log

# Set the number of OpenMP threads to match requested CPUs
export OMP_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK

# Compile the OpenMP program (if needed)
gcc -fopenmp mp.c -o mp

# Run the program
srun ./mp
```

Slurm_PaaS

```
konrad@slurm-master:~$ nano mp.batch
konrad@slurm-master:~$ sbatch mp.batch
Submitted batch job 110
konrad@slurm-master:~$ cat 110_
110_error.log   110_output.log
konrad@slurm-master:~$ cat 110_output.log
Sum: 2499999975000000.000000
Time taken: 0.114638 seconds
Number of threads used: 4
konrad@slurm-master:~$ cat 110_error.log
konrad@slurm-master:~$
```

MPI

- OpenMPI
  - Elosztott memóriájú párhuzamos programozás
  - Üzenetküldés olyan folyamatok között, amelyek saját, elkülönített memóriaterülettel rendelkeznek
  - Több gépen átívelő párhuzamos számításokhoz tervezve egy számítási klaszterben
  - Potenciális erőforrás limitáció

MPI – 2 node

Slurm_PaaS

```
 GNU nano 7.2
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=mpi_2n_job
#SBATCH --output=mpi_2n.out
#SBATCH --error=mpi_2n.err
#SBATCH --ntasks-per-node=2
#SBATCH --nodes=2
#SBATCH --gres=gpu:nvidia:1

# Compile the OpenMPI program (if needed)
mpicc -o mpi_code mpi_code.c

# Run MPI script
srun -n 2 ./mpi_code
```

Slurm_PaaS

```
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$ sbatch mpi_2n.batch
Submitted batch job 260
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$ cat mpi_2n.out
Process rank 1 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-1
Rank 1: I received: Message from master
Process rank 3 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-2
Rank 3: I am a worker process
Process rank 2 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-2
Rank 2: I am a worker process
Process rank 0 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-1
Rank 0: I am the master process
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$
```

- OpenMPI
  - CPU és RAM erőforrássok egyidejű használata
  - Slurm node-ok közötti kommunikáció

MPI – 4 node

Slurm_PaaS

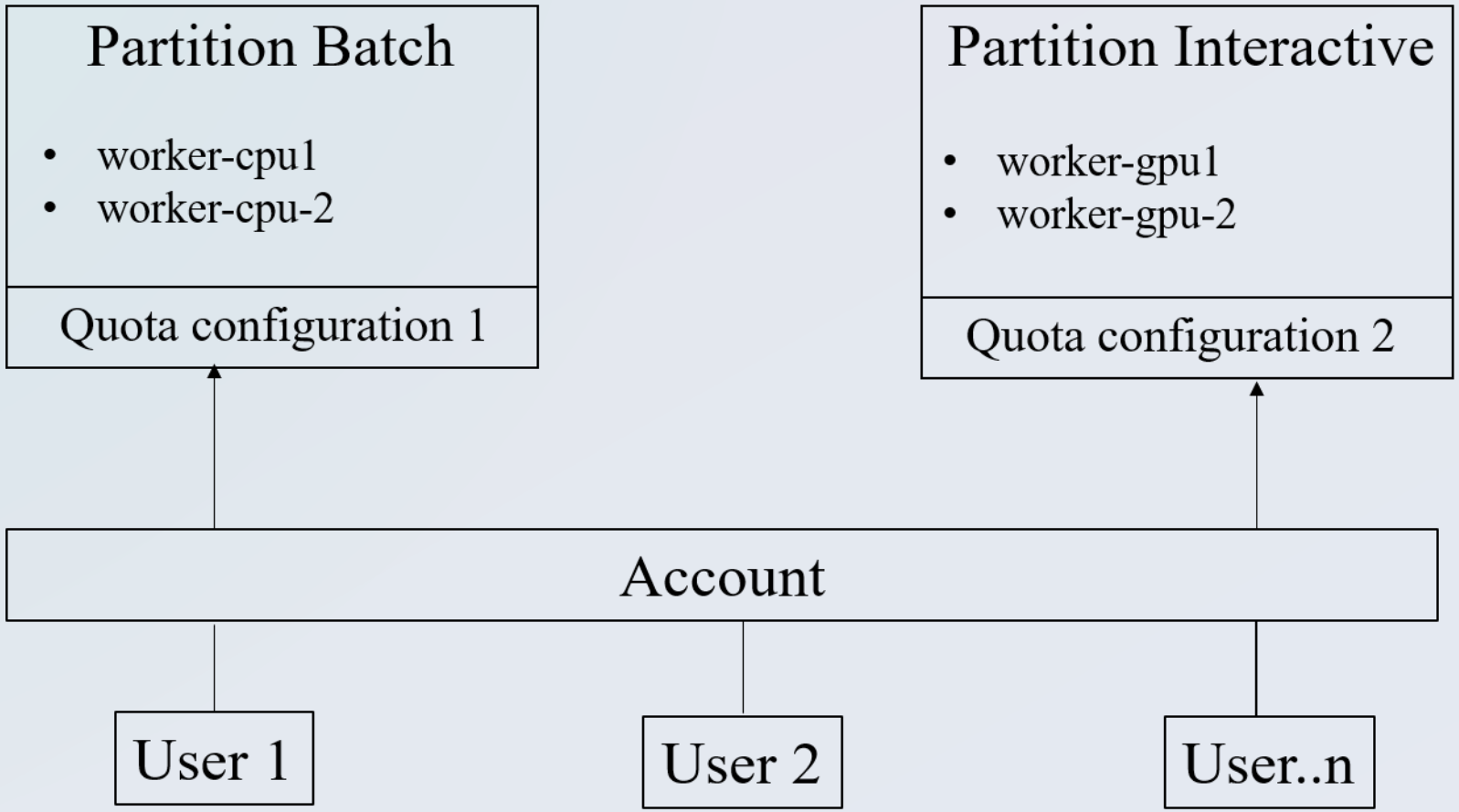
```
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$ sbatch mpi_4n.batch
Submitted batch job 261
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$ cat mpi_4n.out
Process rank 1 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-1
Rank 1: I received: Message from master
Process rank 5 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-3
Rank 5: I am a worker process
Process rank 0 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-1
Rank 0: I am the master process
Process rank 3 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-2
Rank 3: I am a worker process
Process rank 7 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-4
Rank 7: I am a worker process
Process rank 4 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-3
Rank 4: I am a worker process
Process rank 6 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-4
Rank 6: I am a worker process
Process rank 2 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-2
Rank 2: I am a worker process
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$
```

Slurm_PaaS

```
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$ sbatch mpi_4n.batch
Submitted batch job 261
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$ cat mpi_4n.out
Process rank 1 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-1
Rank 1: I received: Message from master
Process rank 5 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-3
Rank 5: I am a worker process
Process rank 0 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-1
Rank 0: I am the master process
Process rank 3 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-2
Rank 3: I am a worker process
Process rank 7 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-4
Rank 7: I am a worker process
Process rank 4 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-3
Rank 4: I am a worker process
Process rank 6 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-4
Rank 6: I am a worker process
Process rank 2 running on node slurm-worker-gpu-g2-large-2
Rank 2: I am a worker process
konrad@slurm-master:~/demo_mpi$
```


- OpenMPI
  - CPU és RAM erőforrássok egyidejű használata
  - Slurm node-ok közötti kommunikáció

Slurm – kvóta limitációk

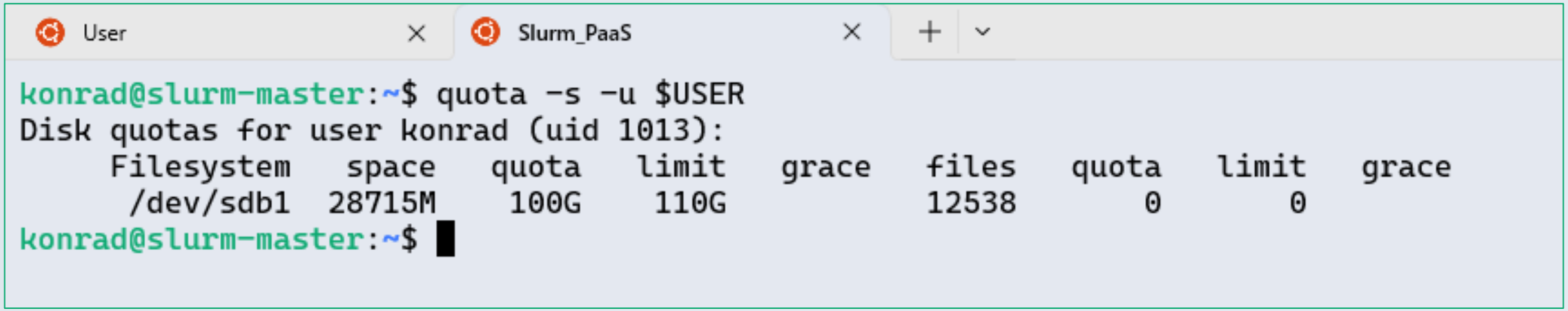


Slurm – kvóta limitációk

- Felhasználói szintű kvóták
  - felhasználónként 100GB tárhely áll rendelkezésre
    - */storage* hálózati meghajtó
  - felhasználónként 1 feladat futhat adott időben
    - lehet parameter sweep feladat (**n** db job steps)
  - felhasználónként 3 feladat lehet beütemezve egyszerre
    - squeue

Slurm – kvóta limitációk

- Felhasználónként 100GB tárhely áll rendelkezésre
  - *quota –s –u $USER*



Slurm – kvóta limitációk

- Felhasználónként 1 feladat futhat adott időben
- Felhasználónként 3 feladat lehet beütemezve egyszerre

User | Slurm_PaaS

```
konrad@slurm-master:~$ sbatch -p interactive_gpu_g2.large_8 jupyterlab.batch
Submitted batch job 158
konrad@slurm-master:~$ sbatch -p batch_gpu_g2.xlarge_16 jupyterlab.batch
Submitted batch job 159
konrad@slurm-master:~$ sbatch -p batch_gpu_g2.2xlarge_32 jupyterlab.batch
Submitted batch job 160
konrad@slurm-master:~$ sbatch -p interactive_gpu_g2.large_8 jupyterlab.batch
sbatch: error: QOSMaxSubmitJobPerUserLimit
sbatch: error: Batch job submission failed: Job violates accounting/QOS policy (job submit limit, user's size and/or time limits)
konrad@slurm-master:~$ squeue -o "%.18i %.20P 15j %.8u %.8T %.10M %.20R"
             JOBID            PARTITION 15j     USER    STATE       TIME     NODELIST(REASON)
               160 batch_gpu_g2.2xlarge 15j   konrad  PENDING       0:00 (QOSMaxJobsPerUserLi
               159 batch_gpu_g2.xlarge_ 15j   konrad  PENDING       0:00 (QOSMaxJobsPerUserLi
               158 interactive_gpu_g2.l 15j   konrad  RUNNING       0:24 slurm-worker-gpu-g2-large-1
konrad@slurm-master:~$
```

Slurm – kvóta limitációk

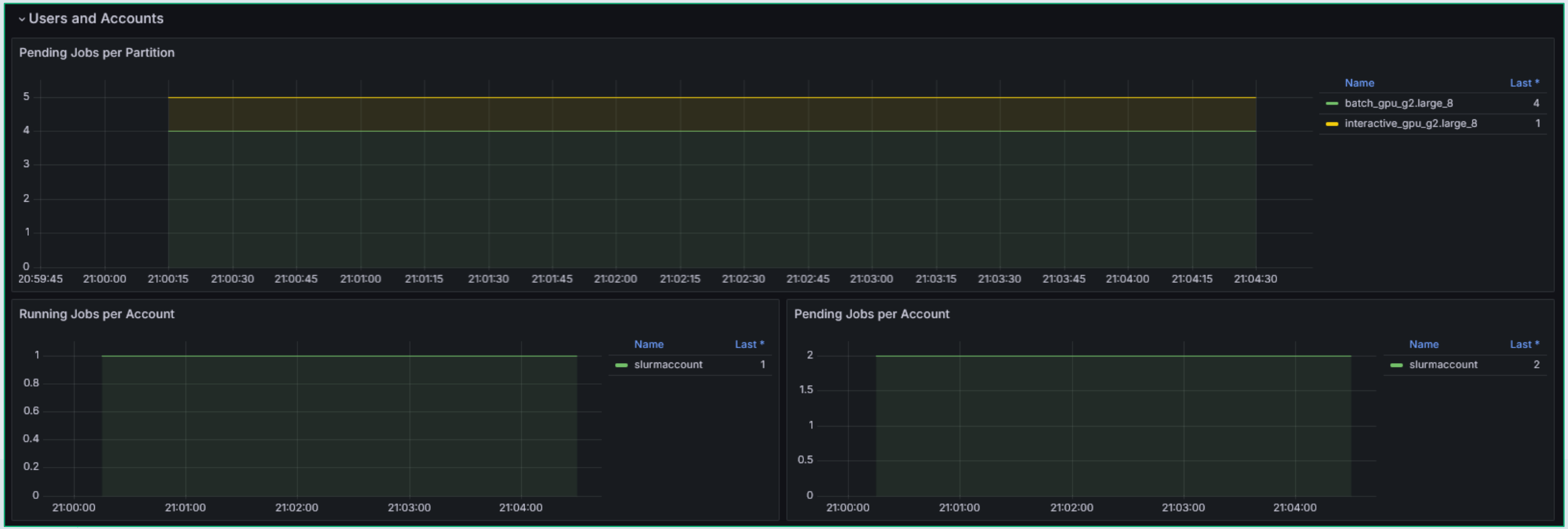
- Feladat szintű kvóták
  - Futási idő limitáció → *CANCELED* feladat státusz
    - Addig számított eredmények elérhetőek
    - **Batch** partíciók → 24 óra
    - **Interactive** partíciók → 7 nap

Slurm – kvóta limitációk

- Cél → maximális erőforrás kihasználtság fair módon
- Igény és rendelkezésre álló erőforrás esetén
  - megengedőbb kvóta limitációk
  - más *Batch* és *Interactive* partíció felosztás
  - több GPU erőforrás → skálázható klaszter
  - további példa kódok és előre build-elt image-ek

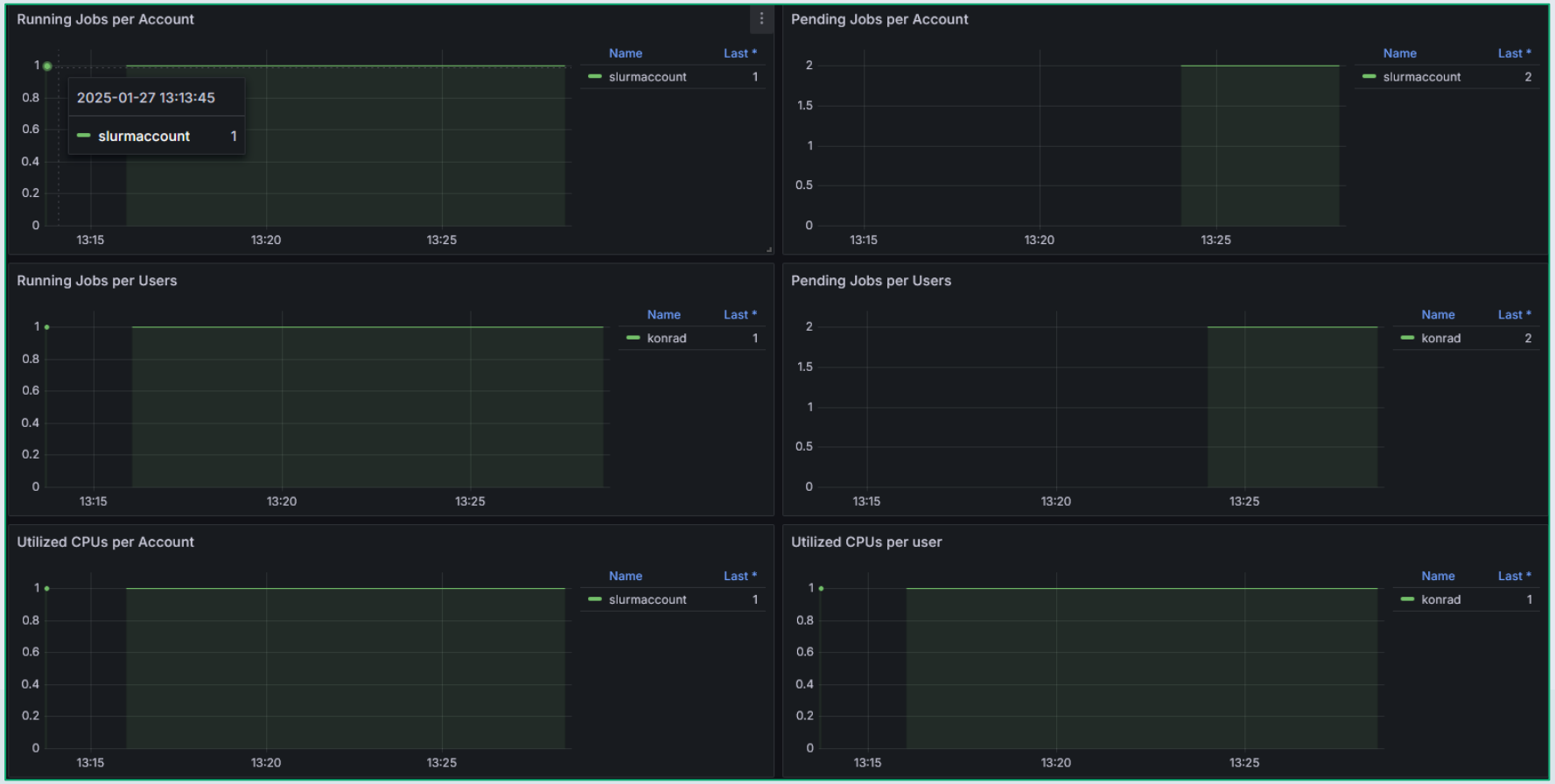
Monitoring

- Publikus dashboard-ok
  - erőforrás-kihasználtság nyomon követése



Monitoring

- Publikus dashboard-ok
  - erőforrások ellenőrzése
    - GPU
    - CPU
    - Partíciók



HUN-REN Cloud

Összefoglalás

- Egy elosztott, többfelhasználós rendszerben:
  - hogyan tudnak a felhasználók **egyéni függőségeket** definiálni?
    - *Singularity*
  - hogyan tudunk **dinamikusan** és **fair módon** különböző GPU erőforrássokat allokálni?
    - *GPU partíciók*
  - hogyan tudunk **párhuzamos számítást** támogató környezetet biztosítani?
    - *MP & MPI*
    - *Parameter Sweep*

Köszönöm a figyelmet!