

# Grafické karty a jejich podpora v MetaCentru

## Podpora prostředí Alphafold a NGC

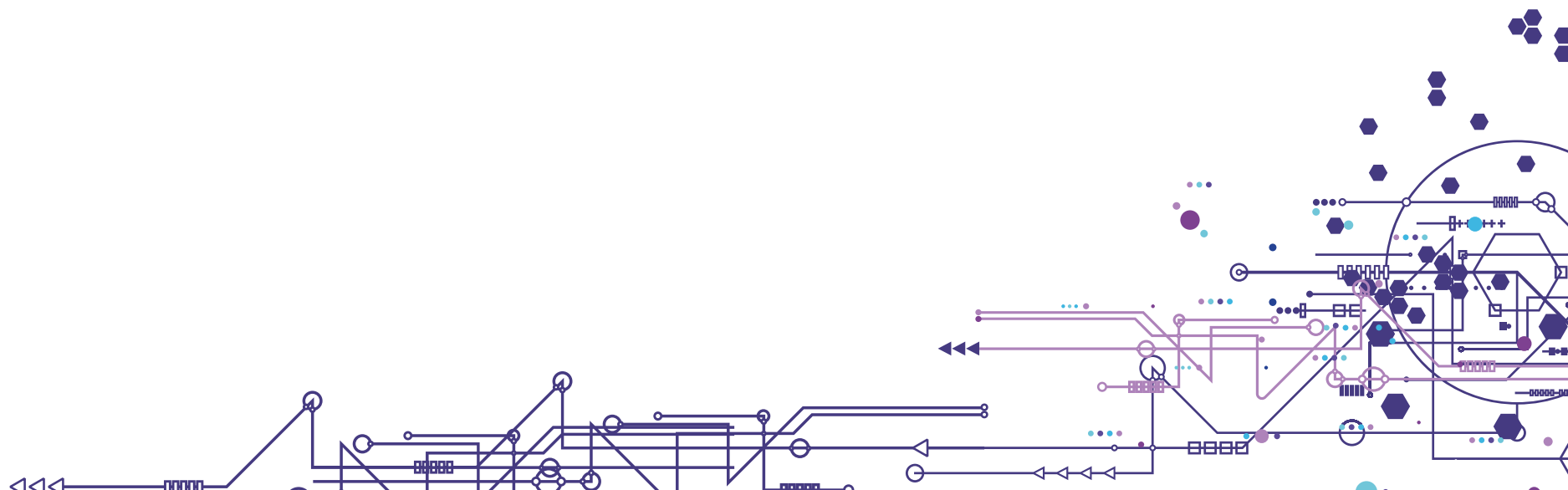
Jan Hoidekr

CESNET

Praha, květen 2022

# Obsah

- Prostředí pro GPU výpočty v MetaCentru
- Alphafold
- NVIDIA GPU Cloud

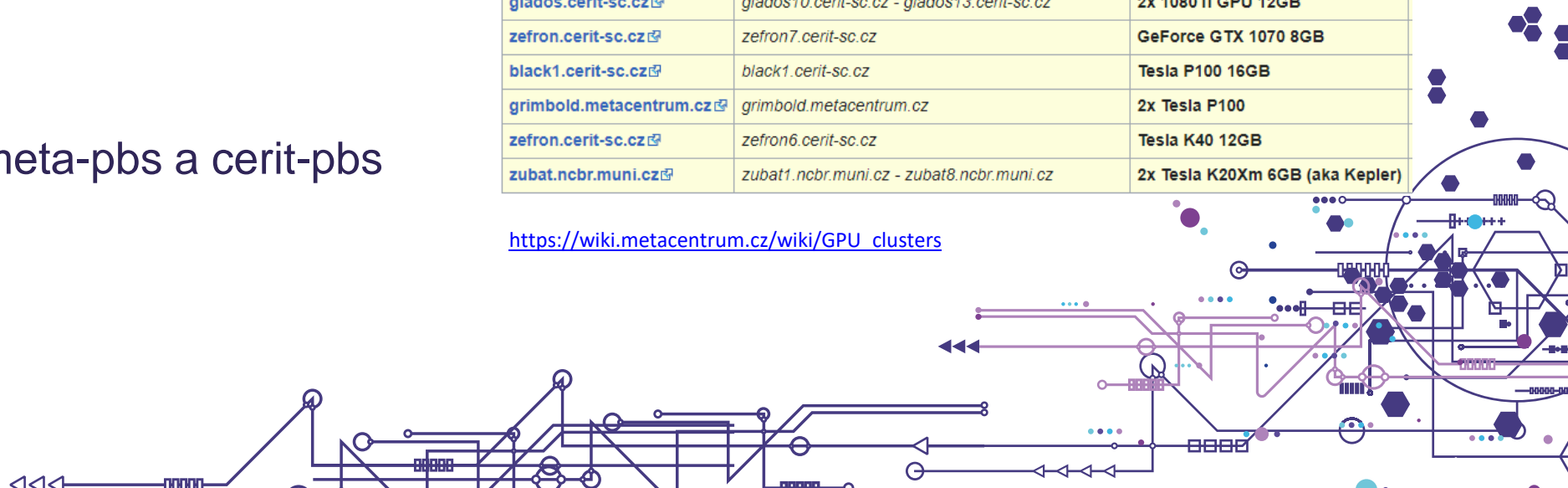


# Prostředí pro GPU výpočty v MetaCentru

- Metacentrum + CERIT-SC
  - 363 GPU karet
  - starší Tesla K20Xm až A100, A40
  - nové clustery
    - GALDOR 80ks A40
    - FER 24ks RTX A4000
- PBS fronty
  - gpu, gpu\_long
  - migrace úloh meta-pbs a cerit-pbs

Cluster	Nodes	GPUs per node
<a href="https://galdor.metacentrum.cz">galdor.metacentrum.cz</a>	<i>galdor1.metacentrum.cz - galdor20.metacentrum.cz</i>	4x A40 48GB
<a href="https://fer.natur.cuni.cz">fer.natur.cuni.cz</a>	<i>fer1.natur.cuni.cz - fer3.natur.cuni.cz</i>	8x RTX A4000 16GB
<a href="https://zefron.cerit-sc.cz">zefron.cerit-sc.cz</a>	<i>zefron8.cerit-sc.cz</i>	1x A10 24GB
<a href="https://zia.cerit-sc.cz">zia.cerit-sc.cz</a>	<i>zia1.cerit-sc.cz - zia5.cerit-sc.cz</i>	4x A100 40GB
<a href="https://fau.natur.cuni.cz">fau.natur.cuni.cz</a>	<i>fau1.natur.cuni.cz - fau3.natur.cuni.cz</i>	8x Quadro RTX 5000 16GB
<a href="https://cha.natur.cuni.cz">cha.natur.cuni.cz</a>	<i>cha.natur.cuni.cz</i>	8x GeForce RTX 2080 Ti 11GB
<a href="https://gita.cerit-sc.cz">gita.cerit-sc.cz</a>	<i>gita1.cerit-sc.cz - gita7.cerit-sc.cz</i>	2x GeForce RTX 2080 Ti 11GB
<a href="https://adan.grid.cesnet.cz">adan.grid.cesnet.cz</a>	<i>adan1.grid.cesnet.cz - adan61.grid.cesnet.cz</i>	2x Tesla T4 16GB
<a href="https://glados.cerit-sc.cz">glados.cerit-sc.cz</a>	<i>glados2.cerit-sc.cz - glados7.cerit-sc.cz</i>	2x GeForce RTX 2080 8GB
<a href="https://glados.cerit-sc.cz">glados.cerit-sc.cz</a>	<i>glados1.cerit-sc.cz</i>	TITAN V GPU 12GB
<a href="https://konos.fav.zcu.cz">konos.fav.zcu.cz</a>	<i>konos1.fav.zcu.cz - konos8.fav.zcu.cz</i>	4x GeForce GTX 1080 Ti 12GB
<a href="https://glados.cerit-sc.cz">glados.cerit-sc.cz</a>	<i>glados10.cerit-sc.cz - glados13.cerit-sc.cz</i>	2x 1080Ti GPU 12GB
<a href="https://zefron.cerit-sc.cz">zefron.cerit-sc.cz</a>	<i>zefron7.cerit-sc.cz</i>	GeForce GTX 1070 8GB
<a href="https://black1.cerit-sc.cz">black1.cerit-sc.cz</a>	<i>black1.cerit-sc.cz</i>	Tesla P100 16GB
<a href="https://grimbold.metacentrum.cz">grimbold.metacentrum.cz</a>	<i>grimbold.metacentrum.cz</i>	2x Tesla P100
<a href="https://zefron.cerit-sc.cz">zefron.cerit-sc.cz</a>	<i>zefron6.cerit-sc.cz</i>	Tesla K40 12GB
<a href="https://zubat.ncbr.muni.cz">zubat.ncbr.muni.cz</a>	<i>zubat1.ncbr.muni.cz - zubat8.ncbr.muni.cz</i>	2x Tesla K20Xm 6GB (aka Kepler)

[https://wiki.metacentrum.cz/wiki/GPU\\_clusters](https://wiki.metacentrum.cz/wiki/GPU_clusters)



# Prostředí pro GPU výpočty v MetaCentru

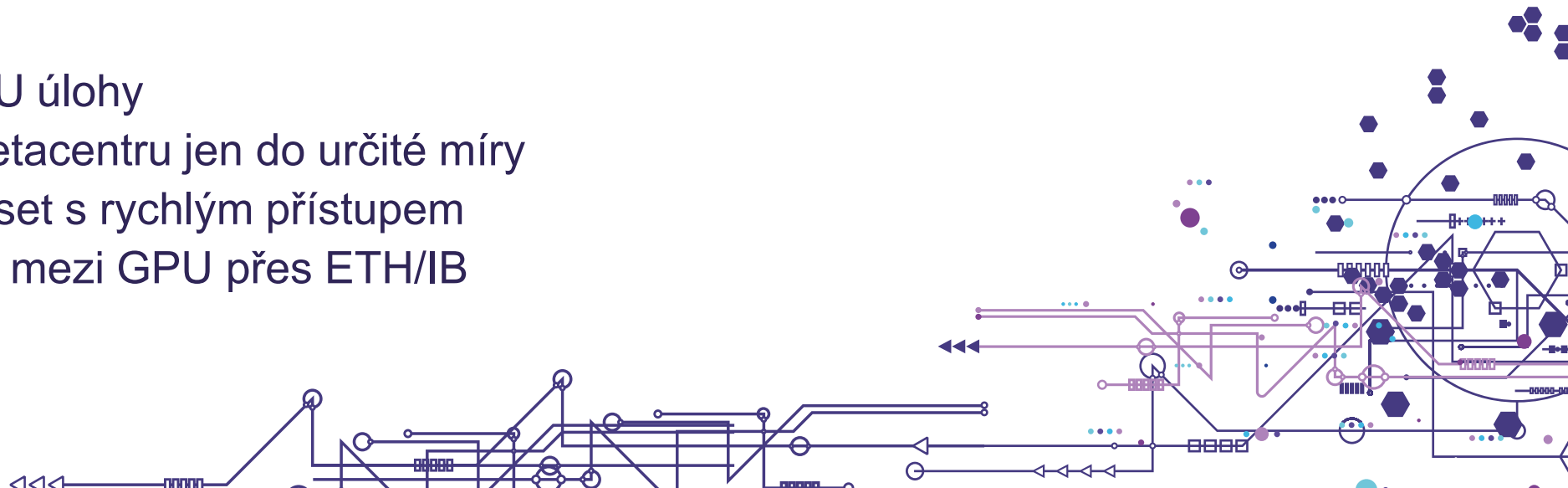
- GPU úlohy v MetaCentru
  - AI, ML, DL – PYTHON frameworky
  - GROMACS – molecular dynamics
  - NAMD – computation biophysics
  - Alphafold – odhad konformace z primární struktury proteinu
  - a další ...
- Potřeby úloh
  - GPU – různý výkon, kapacita paměti
  - Storage – kapacita a rychlost
  - Network – multinode úlohy - data na storage + inter-GPU komunikace



# Prostředí pro GPU výpočty v MetaCentru

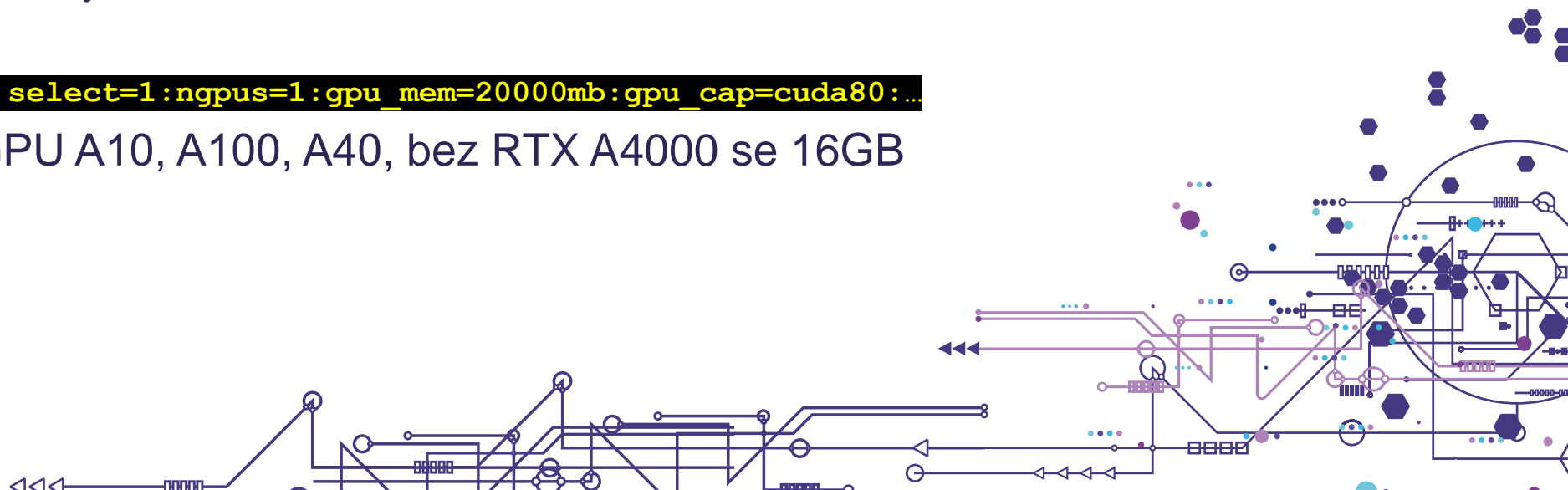
- Jak začít počítat na GPU?
  - není to složité, ale ...
  - postupně - od základních úloh pro 1xGPU
  - špatný přístup – „v článku psali, že pořebovali 100x GPU na měsíc, potřebuji také“
- PBS – úloha s 1x GPU

```
$ qsub -I -q gpu -l select=1:ncpu=1:ngpus=1:mem=1gb  
$ nvidia-smi
```
- multinode-multiGPU úlohy
  - reálně lze v Metacentru jen do určité míry
    - velký dataset s rychlým přístupem
    - sdílení dat mezi GPU přes ETH/IB



# Prostředí pro GPU výpočty v MetaCentru

- Vlastnosti GPU karet v PBS
  - GPU compute capability
    - `gpu_cap: cuda35 ... cuda86`
  - GPU memory **! nové !**
    - `gpu_mem -`
      - minimální velikost GPU paměti podle *nvidia-smi*
      - čtyři modely GPU se 16 GB – 15 109 až 16 280 MiB
- PBS
  - `qsub -q gpu -l select=1:ngpus=1:gpu_mem=20000mb:gpu_cap=cuda80:...`
  - vyhovují GPU A10, A100, A40, bez RTX A4000 se 16GB



# Prostředí pro GPU výpočty v MetaCentru

- Monitorování běhu úloh, efektivní využití GPU

- `nvidia-smi`

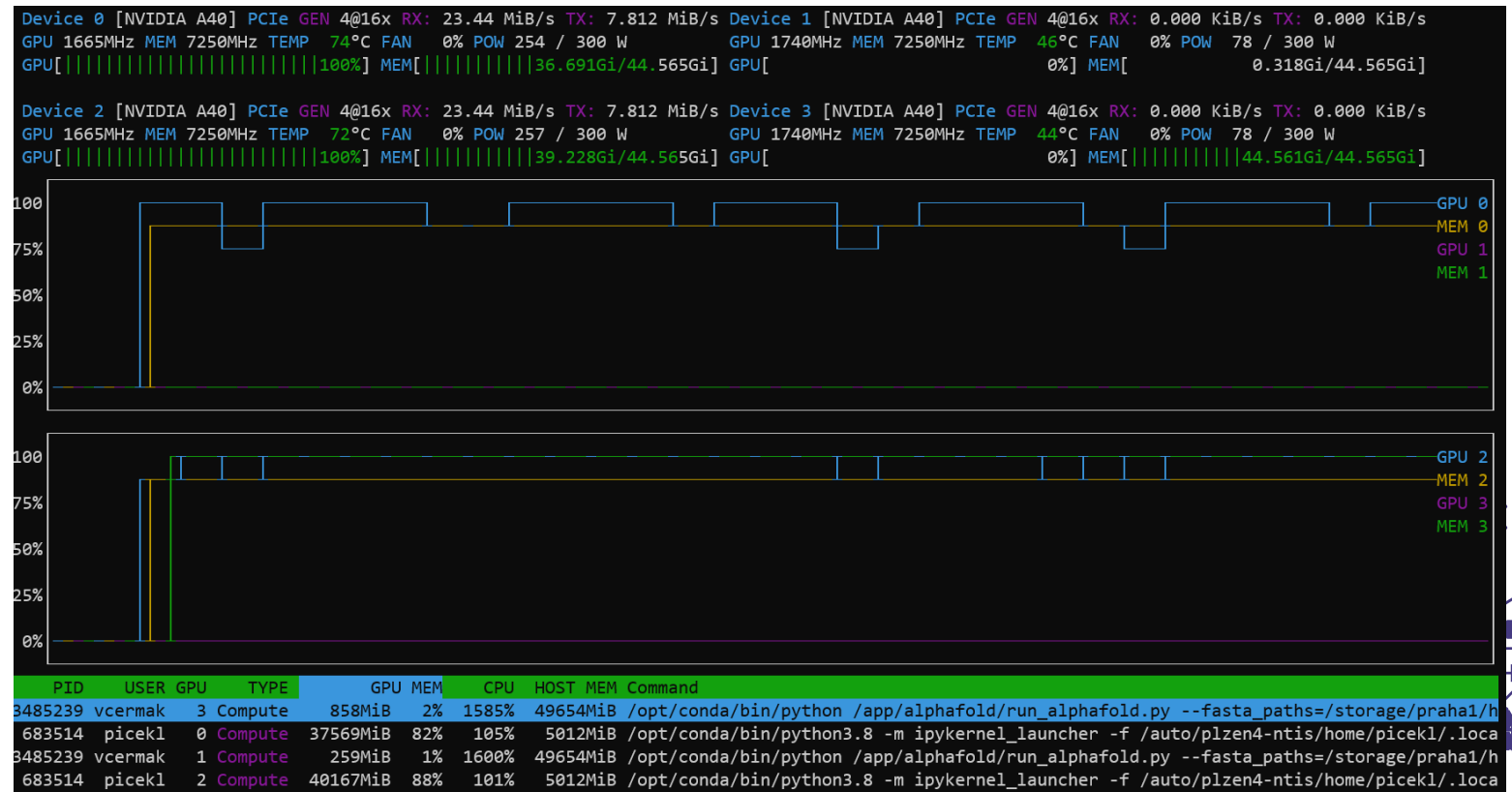
- `-l 1`

- `nvidia-smi`

- `-s 1`

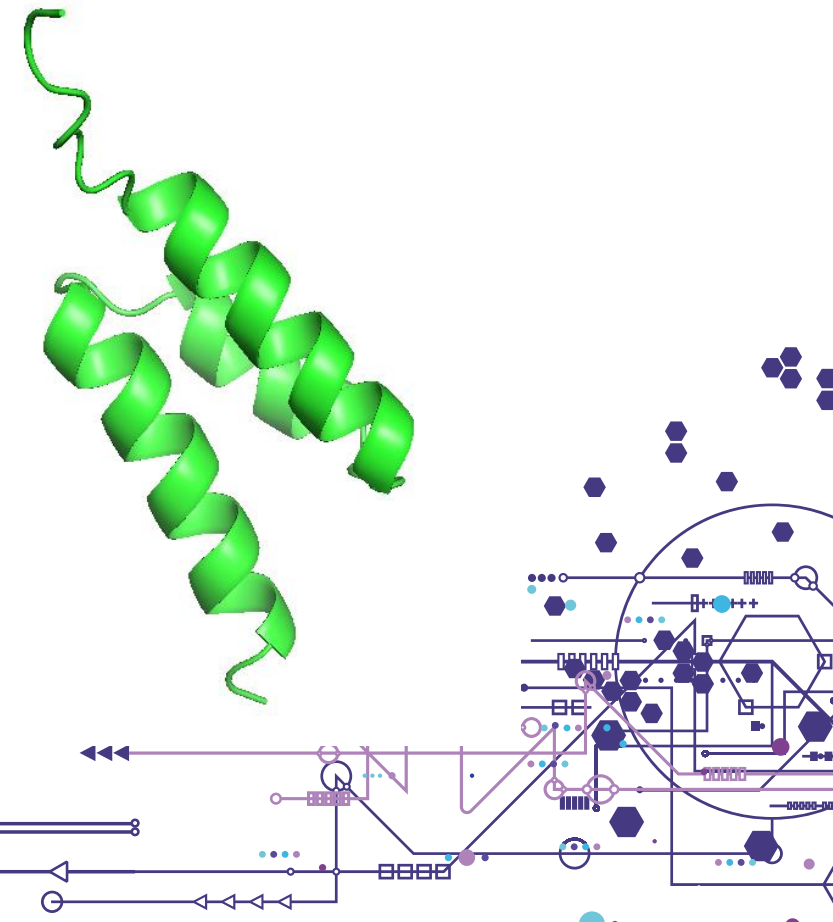
- [www.wandb.ai](http://www.wandb.ai)

- komerční
  - python modul
  - cloud
  - historie



# AlphaFold v Metacentru

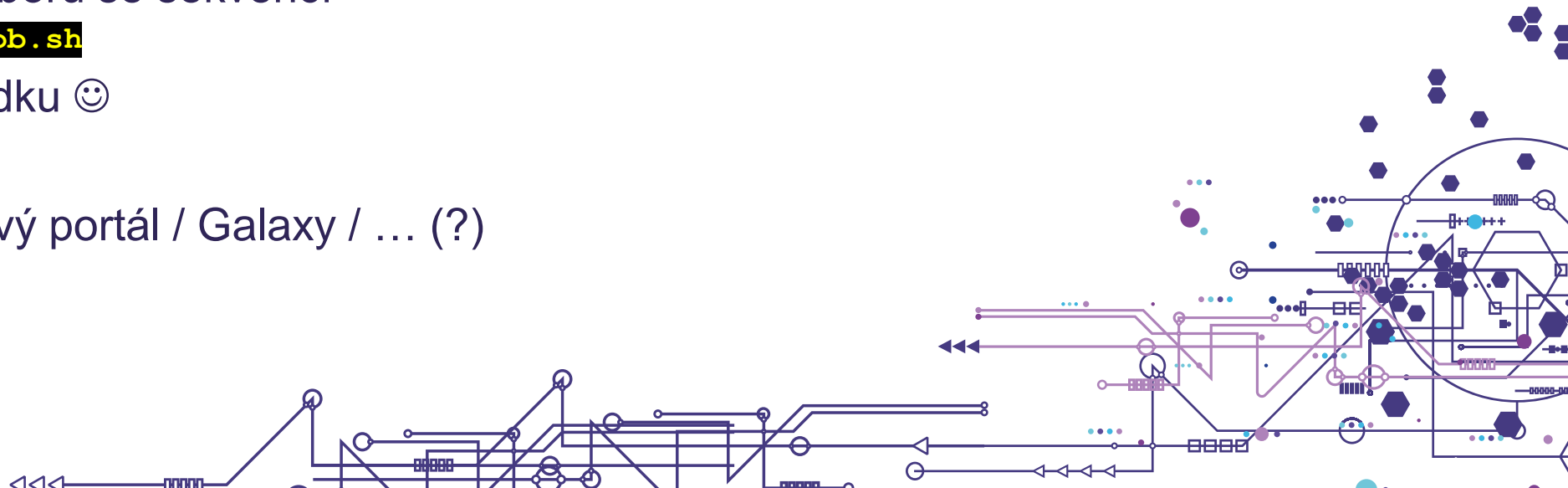
- CASP - “kritické vyhodnocení předpovědi proteinových struktur“
  - soutěž, v roce 2020 AlphaFold – dosáhl přesnosti srovnatelné s experimenty
  - zveřejněno 2021 k otevřenému použití
  - přednáška [K. Berka, M. Novotný – AlphaFoldology](#)
- Úlohy
  - připraveno v Metacentru
    - ukázkový skript, singularity kontejner pro běh s GPU
    - aktuální verze 2.2
    - <https://wiki.metacentrum.cz/wiki/AlphaFold>
  - databáze 2TB – geografické kopie
  - náročnost úlohy podle délky sekvence
    - sekvence 600aa - cca 2h, 8x CPU, 150GB RAM, 1x GPU





# AlphaFold v Metacentru

- Postup spuštění AlphaFold pro uživatele
  - Nový adresář pro úlohu
  - Vytvoření vstupního souboru se sekvencí
  - Kopie ukázkového skriptu do adresáře
  - Úprava ukázkového skriptu
    - cesta do adresáře s úlohou
    - název souboru se sekvencí
  - `qsub AlphaFoldJob.sh`
  - Kontrola výsledku 😊
- Budoucnost: webový portál / Galaxy / ... (?)



# NVIDIA GPU CLOUD

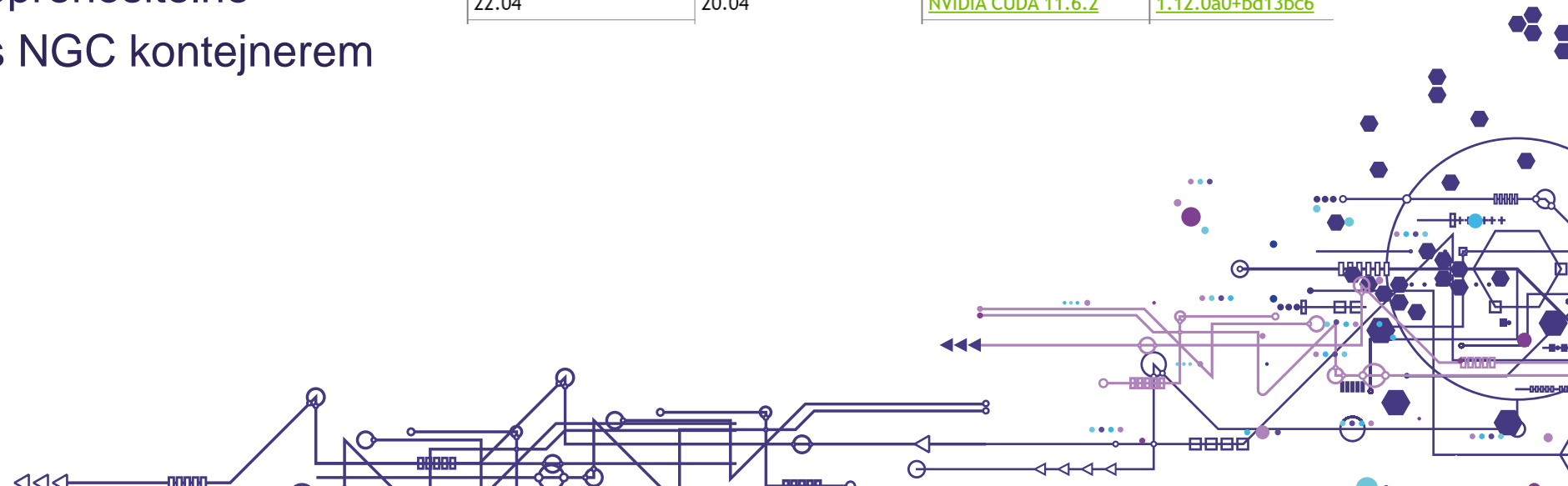


- <https://ngc.nvidia.com/>
  - docker kontejnery s připraveným software v různých verzích
    - v Metacentru konverze do singularity formátu
      - `/cvmfs/singularity.metacentrum.cz/NGC/`
- Příklad – prostředí s PyTorch v1.12
  - A) virtualenv, conda
    - pracné, nepřenositelné
  - B) singularity s NGC kontejnerem

## NVIDIA PyTorch Container Versions

The following table shows what versions of Ubuntu, CUDA, PyTorch, and TensorRT are supported in for PyTorch. For earlier container versions, refer to the [Frameworks Support Matrix](#).

Container Version	Ubuntu	CUDA Toolkit	PyTorch
22.04	20.04	<a href="#">NVIDIA CUDA 11.6.2</a>	<a href="#">1.12.0a0+bd13bc6</a>



# NVIDIA GPU CLOUD



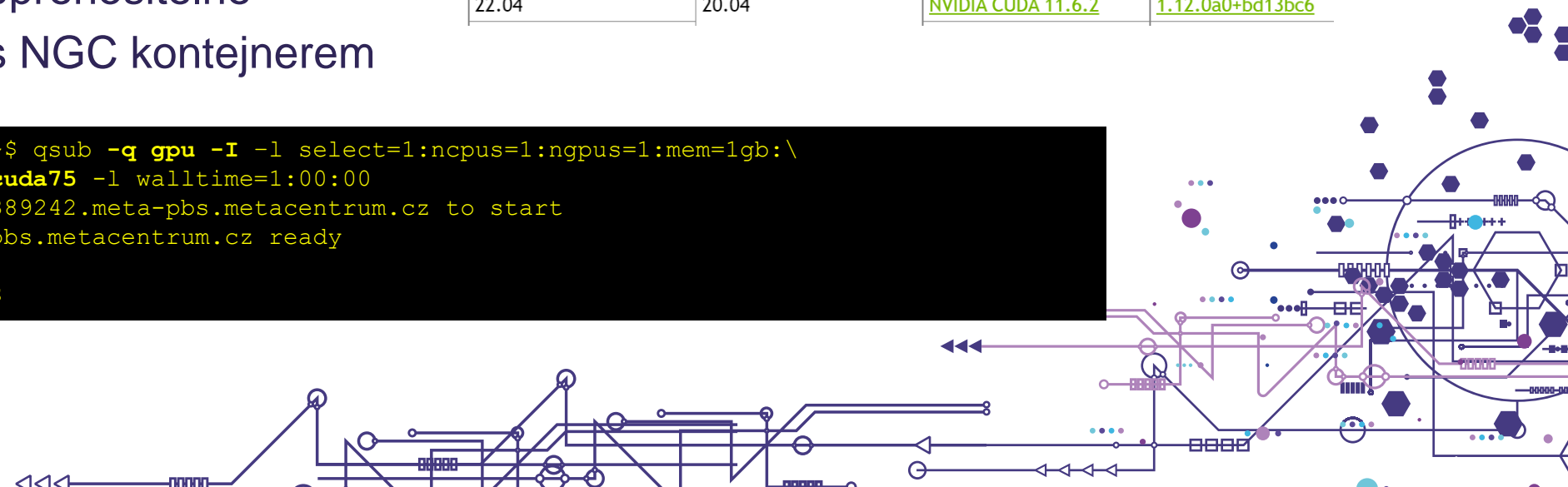
- <https://ngc.nvidia.com/>
  - docker kontejnery s připraveným software v různých verzích
    - v Metacentru konverze do singularity formátu
      - */cvmfs/singularity.metacentrum.cz/NGC/*
- Příklad – prostředí s PyTorch v1.12
  - A) virtualenv, conda
    - pracné, nepřenositelné
  - B) singularity s NGC kontejnerem

## NVIDIA PyTorch Container Versions

The following table shows what versions of Ubuntu, CUDA, PyTorch, and TensorRT are supported in for PyTorch. For earlier container versions, refer to the [Frameworks Support Matrix](#).

Container Version	Ubuntu	CUDA Toolkit	PyTorch
22.04	20.04	<a href="#">NVIDIA CUDA 11.6.2</a>	<a href="#">1.12.0a0+bd13bc6</a>

```
(BULLSEYE)hoidekr@minos:~$ qsub -q gpu -I -l select=1:ncpus=1:ngpus=1:mem=1gb:\  
gpu_mem=10000mb:gpu_cap=cuda75 -l walltime=1:00:00  
qsub: waiting for job 11389242.meta-pbs.metacentrum.cz to start  
qsub: job 11389242.meta-pbs.metacentrum.cz ready  
  
(BUSTER)hoidekr@adan22:~$
```



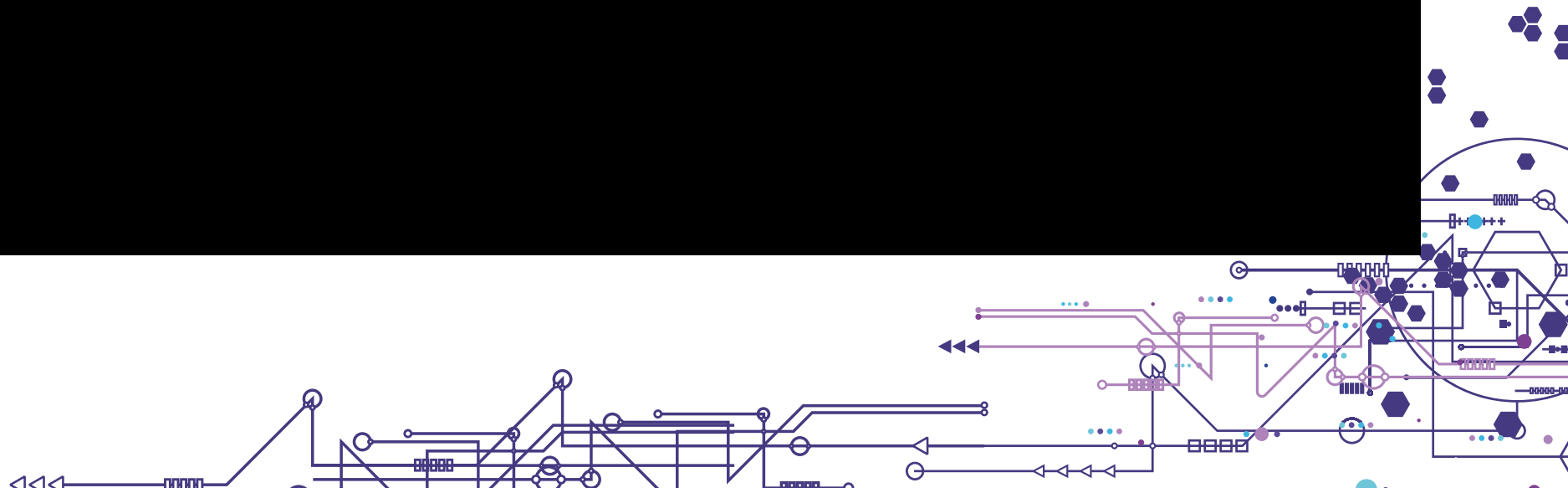
# NVIDIA GPU CLOUD



```
(BUSTER)hoidekr@adan22:~$ singularity shell --nv /cvmfs/singularity.metacentrum.cz/NGC/PyTorch\ :22.04.SIF
```

```
Singularity> pip list | grep torch  
pytorch-quantization      2.1.2  
torch                     1.12.0a0+bd13bc6  
torch-tensorrt            1.1.0a0  
torchtext                 0.13.0a0  
torchvision               0.13.0a0
```

```
Singularity>
```



# NVIDIA GPU CLOUD

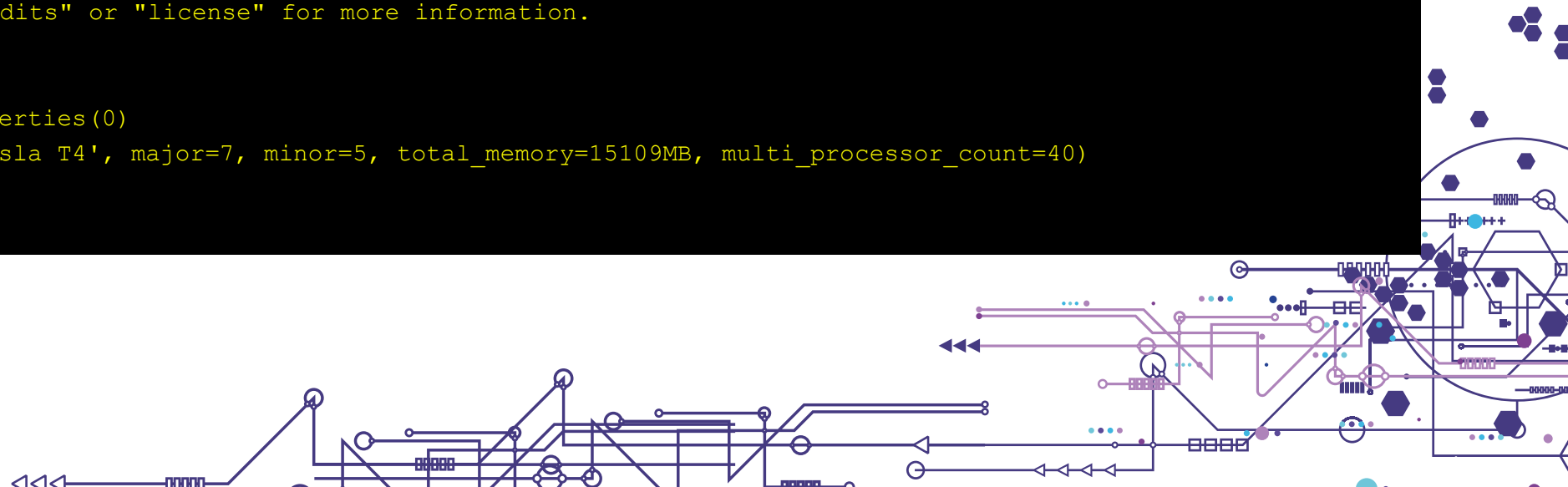


```
(BUSTER)hoidekr@adan22:~$ singularity shell --nv /cvmfs/singularity.metacentrum.cz/NGC/PyTorch\:22.04.SIF
```

```
Singularity> pip list | grep torch
pytorch-quantization      2.1.2
torch                     1.12.0a0+bd13bc6
torch-tensorrt            1.1.0a0
torchtext                 0.13.0a0
torchvision               0.13.0a0
```

```
Singularity> python
Python 3.8.13 | packaged by conda-forge | (default, Mar 25 2022, 06:04:10)
[GCC 10.3.0] on linux
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
```

```
>>> import torch
>>> torch.cuda.get_device_properties(0)
_CudaDeviceProperties(name='Tesla T4', major=7, minor=5, total_memory=15109MB, multi_processor_count=40)
>>>
```



# NVIDIA GPU CLOUD



## Dávková úloha

- skripty pro spuštění - *e-infra-GPU-Job.sh*

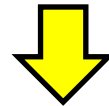
```
#!/bin/bash
#PBS -N e-infra_konference2022_uzivatelsky_seminar_GPU
#PBS -q gpu
#PBS -l select=1:ncpus=1:mem=1gb:ngpus=1:gpu_mem=10000mb:gpu_cap=cuda75
#PBS -l walltime=1:00:00

singularity exec --nv /cvmfs/singularity.metacentrum.cz/NGC/PyTorch\ :22.04.SIF \
python /storage/praha1/home/hoidekr/test/gpu_props.py
```

## gpu\_props.py

```
#!/usr/bin/env python
import torch
print("CUDA: " + str(torch.cuda.is_available()))
print("GPUs: " + str(torch.cuda.device_count()))
print(str(torch.cuda.get_device_properties(0)))
```

```
(BULLSEYE)hoidekr@tarkil:~/test$ qsub e-infra-GPU-Job.sh
```



```
CUDA: True
GPUs: 1
_CudaDeviceProperties(name='GeForce RTX 2080 Ti', major=7,
minor=5, total_memory=11019MB, multi_processor_count=68)
```



## Dávková úloha

- skripty pro spuštění - `e-infra-GPU-Job.sh`

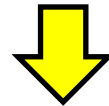
`gpu_props.py`

```
#!/bin/bash
#PBS -N e-infra_konference2022_uzivatelsky_seminar_GPU
#PBS -q gpu
#PBS -l select=1:ncpus=1:mem=1gb:ngpus=1:gpu_mem=10000mb:gpu_cap=cuda75
#PBS -l walltime=1:00:00

singularity exec --nv /cvmfs/singularity.metacentrum.cz/NGC/PyTorch\ :22.04.SIF \
python /storage/praha1/home/hoidekr/test/gpu_props.py
```

```
#!/usr/bin/env python
import torch
print("CUDA: " + str(torch.cuda.is_available()))
print("GPUs: " + str(torch.cuda.device_count()))
print(str(torch.cuda.get_device_properties(0)))
```

```
(BULLSEYE)hoidekr@tarkil:~/test$ qsub e-infra-GPU-Job.sh
```



```
CUDA: True
GPUs: 1
_CudaDeviceProperties(name='GeForce RTX 2080 Ti', major=7,
minor=5, total_memory=11019MB, multi_processor_count=68)
```



# NVIDIA GPU CLOUD



## Přidání python modulů k NGC image

```
(BUSTER)hoidekr@faul:~$ export PYTHONUSERBASE=/storage/praha1/home/hoidekr/.localPyTorch22.04
(BUSTER)hoidekr@faul:~$ singularity shell --nv /cvmfs/singularity.metacentrum.cz/NGC/PyTorch\:22.04.SIF

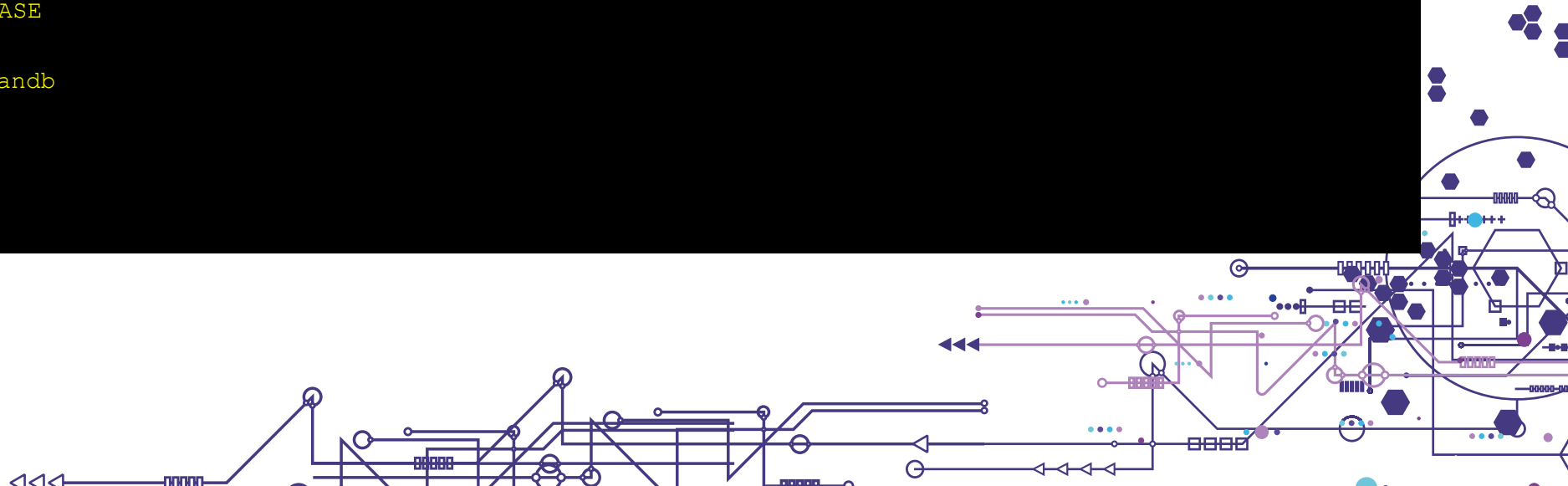
Singularity> pip list | grep wandb

Singularity> pip install wandb
Defaulting to user installation because normal site-packages is not writeable
...

Singularity> pip list | grep wandb
wandb                0.12.16

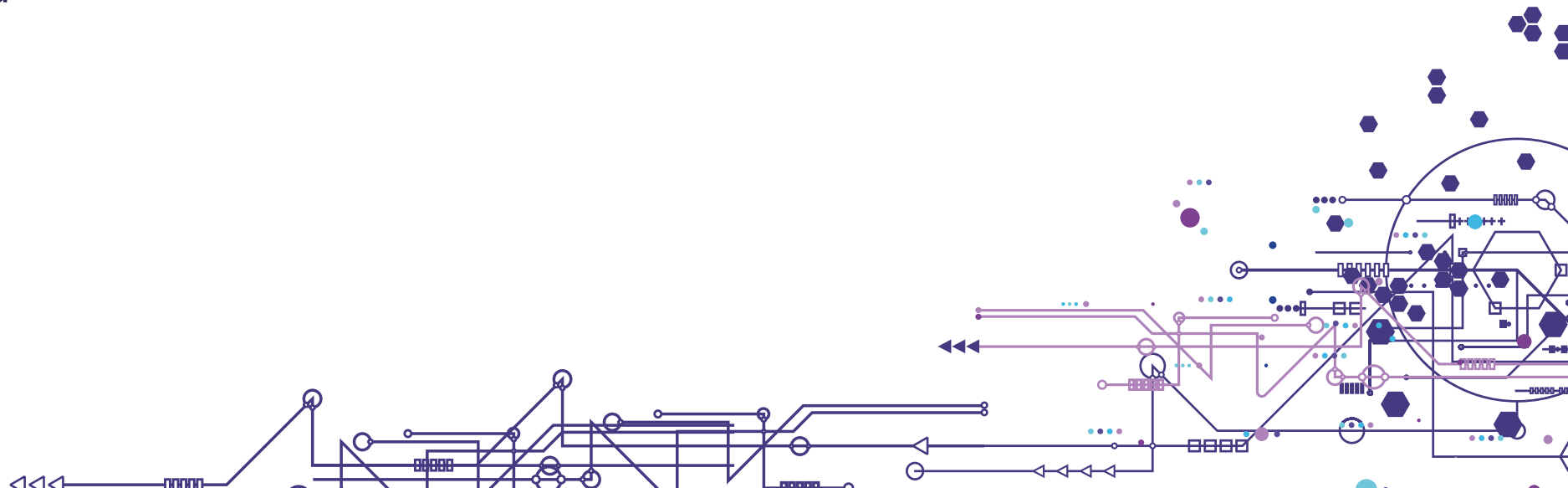
Singularity> unset PYTHONUSERBASE

Singularity> pip list | grep wandb
Singularity>
```





- Prostředí pro GPU výpočty v MetaCentru
  - geograficky rozprostřený HW
- Alphafold
  - noví uživatelé Metacentra
- NVIDIA GPU Cloud
  - jednoduchost
  - přenositelnost



Děkuji za pozornost

Máte nějaké dotazy?

Uživatelská podpora: [meta@cesnet.cz](mailto:meta@cesnet.cz)



Napište nám  
[info@e-infra.cz](mailto:info@e-infra.cz)

A large, dark blue circle with a thick border. Inside the circle, the text 'e-infra.cz' is written in a dark blue, sans-serif font. The circle is partially surrounded by two curved lines, one above and one to the right, suggesting a partial rotation or a dynamic element.

e-infra.cz