

คู่มือการใช้งาน
ระบบเครื่องคอมพิวเตอร์ ประสิทธิภาพสูง
MAI HPC Cluster



มหาวิทยาลัยมหิดล
Mahidol University

Project Code : MU-H100
G-ABLE Contract No. : A2301364
Contract No. : C4360000256 (IT)
Version No. : 1.0
Author: Surat Vanitampikul



2.	การเข้าใช้งานผ่าน GUI.....	6
•	Jupyter Hub.....	6

คู่มือการใช้งานระบบ MU AI HPC Cluster

ระบบ Bright Cluster ประกอบไปด้วย Workload Manager คือ Slurm ซึ่งสามารถเข้าทำงานได้ผ่าน GUI

การเข้าใช้งาน **Commandline** ผ่าน **GUI**

การใช้งานผ่าน GUI สามารถใช้งานได้ผ่าน Jupyter Hub โดยการเข้าใช้งานผ่าน browser ที่ URL <https://aim2.mahidol.ac.th:8000> และ login โดยใช้ user ที่สร้างให้

jupyterhub



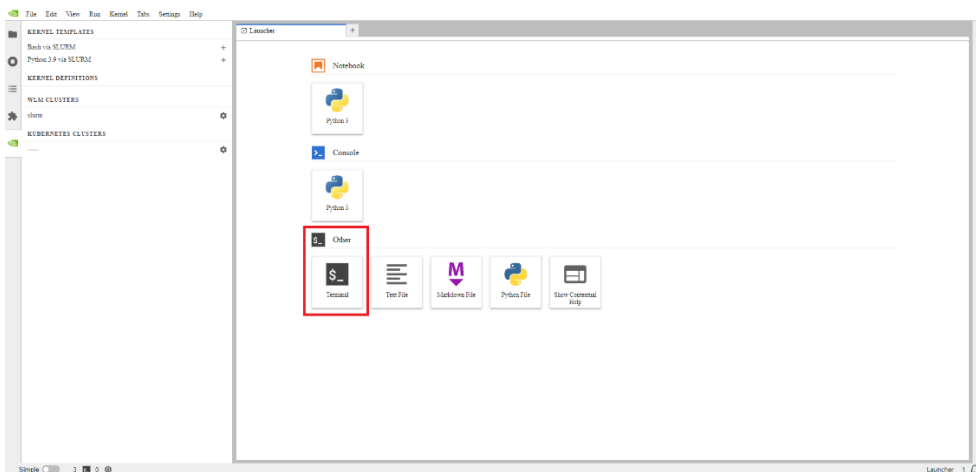
Sign in

Username:

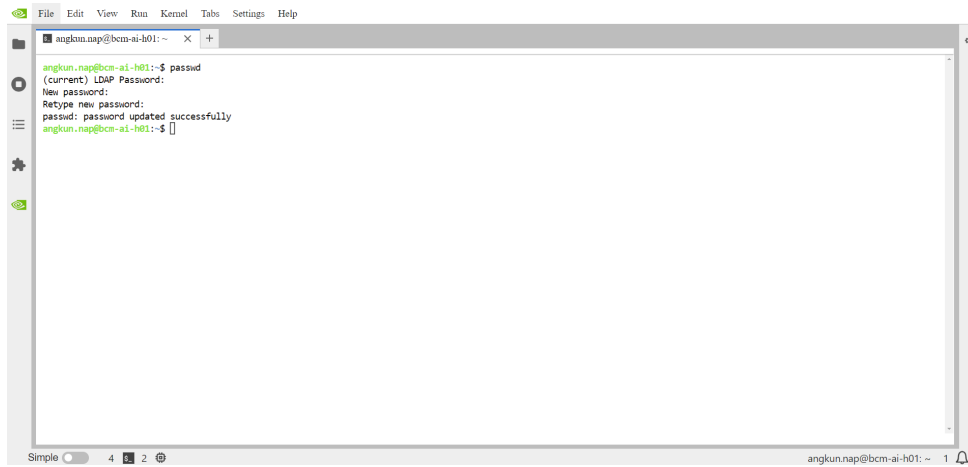
Password:

Sign in

ทำการ login แล้วเลือกที่ Terminal



เมื่อ login ครั้งแรกให้ทำการเปลี่ยน password ด้วยคำสั่ง passwd



```
angku.nap@bcm-ai-h01: ~  
angku.nap@bcm-ai-h01:~$ passwd  
(current) LDAP Password:  
New password:  
Retype new password:  
passwd: password updated successfully  
angku.nap@bcm-ai-h01:~$
```

- Slurm

การใช้งาน slurm ให้ทำการ run คำสั่ง load module ก่อนทุกครั้ง

\$ module load slurm

หลังจาก load module แล้ว สามารถ run คำสั่งอื่นๆของ slurm ได้ จากรูป ทดสอบ run job

\$ srun --nodelist=dgx-h100-01 sleep 200 &

จะได้ job id 143 ทำงานอยู่บน node dgx-h100-01

```
gable@bcm-ai-h01:~$
gable@bcm-ai-h01:~$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
defq*      up       infinite    2     mix  dgx-640-01,dgx-h100-01
gable@bcm-ai-h01:~$
gable@bcm-ai-h01:~$ squeue
JOBID PARTITION   NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
139     defq        bash    sarintip R        7:44:59      1 dgx-h100-01
140     defq      interact snit.san R       1:26:57      1 dgx-640-01
141     defq      interact snit.san R       1:26:22      1 dgx-h100-01
gable@bcm-ai-h01:~$
gable@bcm-ai-h01:~$ srun --nodelist=dgx-h100-01 sleep 200 &
[1] 3944959
gable@bcm-ai-h01:~$
gable@bcm-ai-h01:~$ squeue
JOBID PARTITION   NAME     USER ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
139     defq        bash    sarintip R        7:45:08      1 dgx-h100-01
140     defq      interact snit.san R       1:27:06      1 dgx-640-01
141     defq      interact snit.san R       1:26:31      1 dgx-h100-01
143     defq        sleep    gable  R          0:05      1 dgx-h100-01
gable@bcm-ai-h01:~$
gable@bcm-ai-h01:~$
```

ตัวอย่างการ run slurm with Parabricks

ทำการ load module ก่อน run คำสั่ง

\$ module load parabricks/3.8.0-1.ampere

\$ module load slurm

```
gable@bcm-ai-h01:~$
gable@bcm-ai-h01:~$ srun --gres=gpu:2 --nodelist=dgx-640-01 pbrun germline --ref $DATASET/parabricks_sample/Ref/Homo_sapiens_assembly38.fasta --in-fq $DATASET/HG001.novaseq.pcr-free.30x.R1.fastq.gz $DATASET/HG001.novaseq.pcr-free.30x.R2.fastq.gz --out-bam 30x.bam --out-variants 30x.vcf --knownSites $DATASET/parabricks_sample/Ref/Homo_sapiens_assembly38.known_indels.vcf.gz --out-recal-file 30x_recal.txt
Please visit https://docs.nvidia.com/clara/parabricks for detailed documentation

[Parabricks Options Msg]: Automatically generating ID prefix
[Parabricks Options Msg]: Read group created for /mnt/dataset/HG001.novaseq.pcr-free.30x.R1.fastq.gz and /mnt/dataset/HG001.novaseq.pcr-free.30x.R2.fastq.gz
[Parabricks Options Msg]: @RG\tID:HV3C3DSXX.2\tLB:lib1\tPL:bar\tSM:sample\tTPU:HV3C3DSXX.2

[Parabricks Options Msg]: Checking argument compatibility
[Parabricks Options Msg]: Read group created for /mnt/dataset/HG001.novaseq.pcr-free.30x.R1.fastq.gz and /mnt/dataset/HG001.novaseq.pcr-free.30x.R2.fastq.gz
[Parabricks Options Msg]: @RG\tID:HV3C3DSXX.2\tLB:lib1\tPL:bar\tSM:sample\tTPU:HV3C3DSXX.2
[PB Info 2024-May-14 17:37:24] ----- Parabricks accelerated Genomics Pipeline -----
[PB Info 2024-May-14 17:37:24] || Version 3.8.0-1.ampere ||
[PB Info 2024-May-14 17:37:24] || GPU-BWA mem, Sorting Phase-I ||
[PB Info 2024-May-14 17:37:24] || Contact: Parabricks-Support@nvidia.com ||
[PB Info 2024-May-14 17:37:24] -----
[M::bwa_idx_load_from_disk] read 0 ALT contigs
[PB Info 2024-May-14 17:37:29] GPU-BWA mem
[PB Info 2024-May-14 17:37:29] ProgressMeter      Reads      Base Pairs Aligned
[PB Info 2024-May-14 17:40:23] 5033176      769000000
```

ตัวอย่างการ run Slurm with Singularity

ทำการ load module ก่อน run คำสั่ง

\$ module load singularity

\$ module load slurm

```
gable@bcm-ai-h01:~/sif$
gable@bcm-ai-h01:~/sif$ salloc --gres=gpu:2 --nodelist=dgx-h100-01
salloc: Granted job allocation 133
salloc: Nodes dgx-h100-01 are ready for job
gable@bcm-ai-h01:~/sif$
gable@bcm-ai-h01:~/sif$
gable@bcm-ai-h01:~/sif$ module load singularity
gable@bcm-ai-h01:~/sif$
gable@bcm-ai-h01:~/sif$
gable@bcm-ai-h01:~/sif$ singularity run --nv pytorch-23.06.sif

=====
== PyTorch ==
=====

NVIDIA Release 23.06 (build 63009835)
PyTorch Version 2.1.0a0+4136153

Container image Copyright (c) 2023, NVIDIA CORPORATION & AFFILIATES. All rights reserved.

Copyright (c) 2014-2023 Facebook Inc.
Copyright (c) 2011-2014 Idiap Research Institute (Ronan Collobert)
Copyright (c) 2012-2014 Deepmind Technologies (Koray Kavukcuoglu)
Copyright (c) 2011-2012 NEC Laboratories America (Koray Kavukcuoglu)
Copyright (c) 2011-2013 NYU (Clement Farabet)
Copyright (c) 2006-2010 NEC Laboratories America (Ronan Collobert, Leon Bottou, Iain Melvin, Jason Weston)
Copyright (c) 2006 Idiap Research Institute (Samy Bengio)
Copyright (c) 2001-2004 Idiap Research Institute (Ronan Collobert, Samy Bengio, Johnny Mariethoz)
Copyright (c) 2015 Google Inc.
Copyright (c) 2015 Yangqing Jia
Copyright (c) 2013-2016 The Caffe contributors
All rights reserved.

Various files include modifications (c) NVIDIA CORPORATION & AFFILIATES. All rights reserved.

This container image and its contents are governed by the NVIDIA Deep Learning Container License.
By pulling and using the container, you accept the terms and conditions of this license:
https://developer.nvidia.com/ngc/nvidia-deep-learning-container-license

WARNING: The NVIDIA Driver was not detected. GPU functionality will not be available.
Use the NVIDIA Container Toolkit to start this container with GPU support; see
https://docs.nvidia.com/datacenter/cloud-native/ .

NOTE: Mellanox network driver detected, but NVIDIA peer memory driver not
detected. Multi-node communication performance may be reduced.

bash: /usr/bin/tclsh: No such file or directory
Singularity> █
```

1. การใช้งานผ่าน GUI

● Jupyter Hub

Jupyter Hub เป็น portal หลักในการ run งานผ่าน Slurm ของ Bright Cluster

เมื่อ login แล้ว ไปที่เมนูด้านซ้ายล่าง รูป logo nvidia จะปรากฏ Kernel Template ให้เลือกใช้งาน หากต้องการใช้งาน kernel ไหน ให้กดปุ่ม + เพื่อสร้าง kernel

ตัวอย่างการ run Python 3.9 via Slurm

PARTITION	AVAIL	TIMELIMIT	NODES	STATE	NOELIST
defq*	up	infinite	2	mix	dgx-640-01,dgx-h100-01

ตัวอย่างการ run Python+NGC on Kubernetes Operator โดยใช้ image Pytorch

```

import torch

# Define some data (replace with your actual data)
data = [1, 2, 3, 4]

# Create a tensor
tensor = torch.tensor(data)

# Perform an operation (replace with your desired operation)
result = tensor * 2 # Multiply each element by 2

# Create a filename (replace with a more descriptive name)
filename = "/data/pytorch_output3.txt"

# Open the file in write mode
with open(filename, "w") as f:
    # Write the tensor data to the file
    f.write(str(result))

print(f"Output written to: {filename}")

[11]: !ls -lrt /data

total 9
-rw-r--r-- 1 gable gable 0 May 17 16:30 test.txt
-rw-r--r-- 1 gable gable 20 May 17 16:37 pytorch_output.txt
-rw-r--r-- 1 gable gable 20 May 18 14:10 pytorch_output2.txt
-rw-r--r-- 1 gable gable 20 May 20 14:48 pytorch_output3.txt

[12]: !cat /data/pytorch_output3.txt

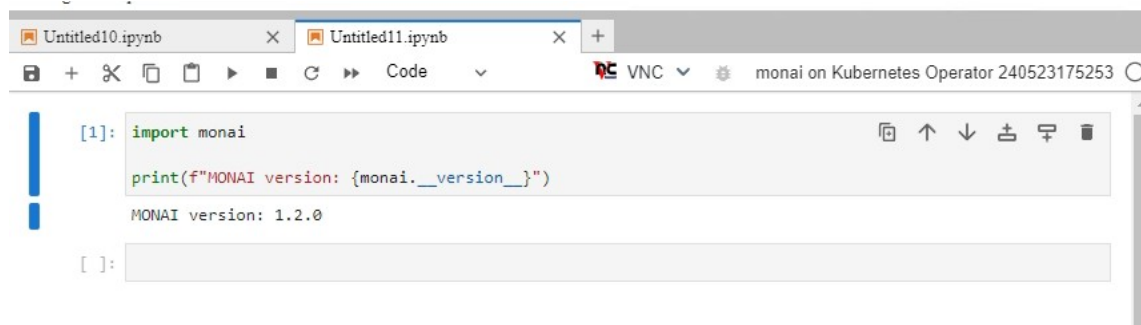
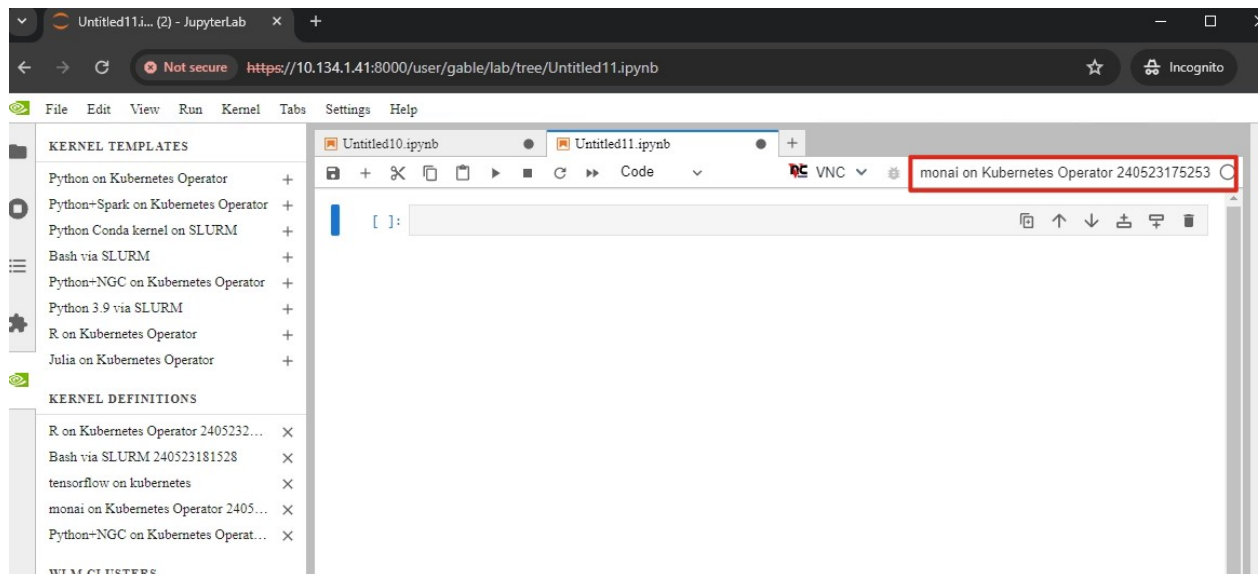
tensor([2, 4, 6, 8])

[13]: !date

Mon May 20 14:49:06 UTC 2024

```

ตัวอย่างการ run Python+NGC on Kubernetes Operator โดยใช้ image Monai



ตัวอย่างการ run Python+NGC on Kubernetes Operator โดยใช้ image r-notebook

