GPGPU

Informacje podstawowe

Obliczenia GPGPU (*General-Purpose computing on Graphics Processing Units*) to wykorzystanie procesorów graficznych wspólnie z jednostką CPU do przyspieszenia obliczeń naukowych i inżynierskich. Infrastruktura PLGrid oferuje swoim użytkownikom dostęp do maszyny zawierającej karty GPU.

Lokalizacja	**ACK CYFRONET AGH**	
Nazwa systemu	`Prometheus K40XL`	`Prometheus V100`
Nazwa maszyny dostępowej	`pro.cyfronet.pl`	`pro.cyfronet.pl`
Port dostępowy	22	22
Liczba rdzeni obliczeniowych		
Liczba kart GPU	144	32
Kolejka	`plgrid-gpu`	`plgrid-gpu-v100`
Oprogramowanie	TeraChem, Gromacs, NAMD, GAMESS, TensorFlow, Keras, PyTorch	
Opis konfiguracji zasobów obliczeniowych	www.plgrid.pl/oferta/zasoby_obliczeniowe/opis_zasobow/HPC	
Opis systemów składowania danych	www.plgrid.pl/oferta/zasoby_obliczeniowe/opis_zasobow/storage	
Informacje rozszerzone	Dokumentacja KDM	
Kontakt	https://helpdesk.plgrid.pl	

Parametry kart GPGPU

Parametr	**Wartość**	
Dostępność	Promtheus (plgrid-gpu)	Promtheus (plgrid-gpu-v100)
Producent	NVIDIA	NVIDIA
Model	K40 XL	V100
Architektura	Kepler	Volta
Szyna	PCI-Express 3.0 16x	NVLink
Liczba rdzeni Tensor	-	640
Liczba rdzeni CUDA	2880	5120
Maksymalna częstotliwość	928 MHz	1290 MHz
Moc obliczeniowa (HP)	-	31.33 Tflops
Moc obliczeniowa (DP)	1,78 Tflops	7,834 Tflops
Moc obliczeniowa (SP)	5,34 Tflops	15,67 Tflops
Pojemność i typ pamięci	12 GB GDDR5	32 GB HBM2
Przepustowość pamięci	288 GB/s	900 GB/s

Dostęp do usługi

Dostęp do GPGPU jest możliwy po aktywacji usługi. Aby aktywować usługę, postępuj zgodnie z instrukcjami zawartymi w Katalogu Aplikacji i Usług po uprzednim wyszukaniu usługi.

Usługa wymaga motywacji, którą należy wpisać podczas aplikowania o nią.

Zlecanie zadań

Dostęp do węzłów z GPGPU

Dla zadań korzystających w obliczeniach z kart GPGPU przeznaczona została specjalna partycja - **plgrid-gpu**. Aby móc przeprowadzać obliczenia z wykorzystaniem GPGPU na klastrze **Prometheus** konieczne jest złożenie wniosku o grant właściwy, który przeznaczony zostanie w całości wyłącznie na obliczenia z wykorzystaniem kart GPGPU. Grant taki nie powinien być używany do przeprowadzania obliczeń w partycjach innych niż **plgrid-gpu**. We wniosku o grant należy wyraźnie zaznaczyć, że wymagany jest dostęp do partycji **plgrid-gpu**. Zalecane jest także (ale nie jest to konieczne), aby grant taki posiadał w nazwie wyraz **gpu** (np. obliczeniagpu) - ułatwia to identyfikację grantów. Każdy wniosek o dostęp do partycji **plgrid-gpu** jest rozpatrywany indywidualnie przez dostawcę zasobów.

Dodatkowo dla obliczeń dedykowanych AI została udostępniona partycja **plgrid-gpu-v100** posiadająca karty GPGPU NVIDIA Tesla V100. Dostęp do nich realizowany jest podobnie, jak opisano powyżej dla partycji plgrid-gpu.

Informacje ogólne

Karty GPU w systemie kolejkowym SLURM są rodzajem tzw. generic resources (GRES), a ich identyfikatorem jest "gpu".
Informację o tym na których węzłach/partycjach znajdują się karty GPU można otrzymać np. przy pomocy komendy sinfo:

```
sinfo -o '%P || %N || %G'
```

Zlecanie zadań odbywa się poprzez podanie opcji `--partition=plgrid-gpu --gres=gpu[:count]` systemu kolejkowego.
W przypadku gdy nie ma podanej opcji count, system kolejkowy domyślnie alokuje jedną kartę na węźle obliczeniowym.

Po zleceniu zadania system kolejkowy automatycznie ustawia zmienną środowiskową $CUDA_VISIBLE_DEVICES oraz zezwala na dostęp do zaalokowanych do kart.

Zadania interaktywne

Przykładowo, gdy chcemy uruchomić zadanie interaktywne na jednym serwerze i zażądać 2 kart GPU:

```
srun -p plgrid-gpu -N 1 -n 24 -A <grant_id> --gres=gpu:2 --pty /bin/bash -l
```

Zadania interaktywne MPI

Uwaga! Wyjątkiem jest uruchamianie interaktywnych aplikacji MPI (np. w celach testów). Z powodu nieco innej obsługi kart GPU niż zwykłych procesorów przez system SLURM, uruchomienie zadania interaktywnego wymaga niestandardowej procedury.

Przykładowo, gdy chcemy uruchomić zadanie interaktywne na dwóch serwerach i zażądać 2 kart GPU na każdym z nich (łącznie 4 karty GPU) na czas 1 godziny:

```
salloc -p plgrid-gpu -N 2 --ntasks-per-node 24 -n 48 -A <grant_id> --gres=gpu:2 --time 1:00:00
```

Polecenie salloc zaalokowało nasze zadanie i zwróciło jego numer, przykładowo 1234.

Następnie uruchamiamy srun wymagając 0 kart GPU w zadaniu o numerze zwróconym przez salloc:

```
srun --jobid=1234 --gres=gpu:0 -O --pty /bin/bash -l
```

Otrzymaliśmy dostęp do powłoki na jednym z węzłów, teraz po załadowaniu odpowiedniego modułu MPI można już uruchomić własną aplikację za pomocą mpirun lub mpiexec. Isotne jest aby podczas uruchamiania aplikacji nie przekazywać zmiennych środowiska, czyli w przypadku IntelMPI należy dodać parametr `-genvnone`Aplikacja będzie miała dostęp do wszystkich kart GPU zaalokowanych w komendzie salloc, niezależnie od wymagania gpu:0 użytego w srun.

Po zakończeniu testów należy usunąć alokację za pomocą:

```
scancel 1234
```

Zadania wsadowe

Dla skryptu wsadowego dodatkowe zmiany nie są potrzebne, przykładowo gdy żądamy po jednej karcie na węzeł obliczeniowy, wystarczy dopisać do skryptu:

```
#SBATCH --partition=plgrid-gpu
#SBATCH --gres=gpu
```

Uwaga: Wszelkie informacje na temat komend SLURMa można znaleźć w manualu, np.: `man sbatch`

Przykładowe skrypty dla systemu kolejkowego

TeraChem (zrównoleglenie na dwie karty graficzne)

```
#!/bin/bash
#SBATCH -N 1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH -p plgrid-gpu
#SBATCH --gres=gpu:2
#SBATCH --time 1:00:00

# initializing proper environment for TeraChem
plgrid/apps/terachem/1.93

# actual job
$TERACHEMRUN ch.inp > ch.log
```

NAMD

```
#!/bin/bash
# NAMD GPPGU requires exactly one working node
#SBATCH -N 1
#SBATCH --ntasks-per-node=24
#SBATCH -p plgrid-gpu
#SBATCH --gres=gpu:2
#SBATCH --time 1:00:00

module load plgrid/apps/namd/2.14-ompi

cd $SLURM_SUBMIT_DIR

if [ ! -f stmv.tar.gz ]; then
        wget http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/utilities/stmv.tar.gz
fi
tar -xvf stmv.tar.gz -C $SCRATCHDIR

cd $SCRATCHDIR/stmv

sed -i 's/500/5000/g' stmv.namd
sed -i 's/\/usr\/tmp\/stmv-output/\$env\(SCRATCHDIR\)\/stmv-output/g' stmv.namd

namdrun stmv.namd
```