

Turpan Al environment

Jupyter notebook

Production Mode: Containers

Production Mode: Conda



TURPAN DOCUMENTATION



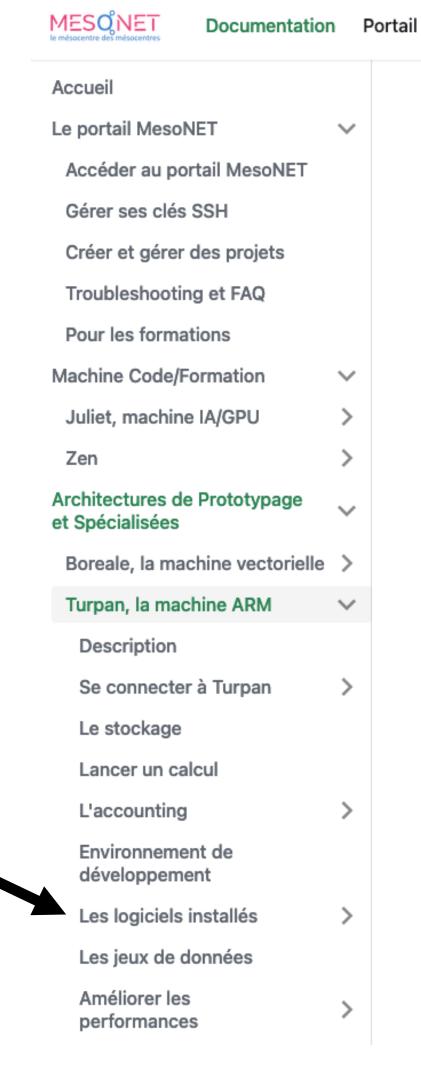
https://www.mesonet.fr/documentation/user-documentation/acces/portail





Register at **MesoNET SSO**

TURPAN WEBSITE



Présentation du cluster de prototypage ARM accélérée : Turpan

La machine Turpan est un cluster de prototypage pour le calcul HPC basé sur une architecture ARM Accélérée par des GPUS. Ce cluster est une des machines à architectures expérimentales du projet MesoNET.

Plus de détails de détails sur le cluster de prototypage Turpan

Faire appel au support

Si quelque chose ne fonctionne pas et que vous n'arrivez pas à vous en sortir, vous pouvez envoyer un courriel à cette adresse, en précisant :

- Le cluster de calcul concerné
- Chemin du répertoire d'appel
- Chemin du script d'appel
- Numéro du job concerné

Remercier le mésocentre Calmip et le projet MesoNET

Vous trouverez ci-dessous deux exemples de remerciement du mésocentre de calcul CALMIP et du projet MesoNET à intégrer dans vos publications :

- version longue: "This work was supported by a French government grant managed by the Agence Nationale de la Recherche under the "Investissements d'avenir" program (reference "ANR-21-ESRE-0051"). This work was granted access to the MesoNET resources center and the MesoNET Project under the allocation m[project_number]."
- version courte: "This work was supported by a French government grant managed by the Agence Nationale de la Recherche under the "Investissements d'avenir" program (reference "ANR-21-ESRE-0051")."



TURPAN WEBSITE

Python tools

MESONET Documentation	Portail	Site web					
Architectures de Prototypage et Spécialisées	~	↑ →	Architectures de Prototypa	age et Spécialisées > Tu	urpan, la machi	nine ARM > Les logiciels installés > L'écosystème Python	
Boreale, la machine vectorielle	>				l		
Turpan, la machine ARM	~	r.e	cosystè	eme Pyti	non		
Description							
Se connecter à Turpan	>	CALMIP	préconise l'utilisation de	e conda pour l'installati	ion de vos er	environnements python:	
Le stockage		• La	documentation pour con	nda			
Lancer un calcul							
L'accounting	>	Environnements conda prêts à être utilisés ou clonés :					
Environnement de		• pyť	hon (uniquement python	n)			
développement		• pyt	 python-tools (contenant les modules : Numpy, Scipy, Pandas, Matplotlib, JupyterLab plus quelques autres) 				
Les logiciels installés	~	 tensorflow via les conteneurs nvidia pytorch via les conteneurs nvidia scikit-learn et rapids (cuML, cuDF, cuGraph, etc) via les conteneurs nvidia 					
BLAS							
LAPACK							
ScaLAPACK		• mo	dulus via les conteneurs	nvidia			
HDF5		Outil	s interactife at d	lo vicualisation	ógaloma	ent disponibles :	
PETSc		Outilis	s interactirs et u	e visualisation	egalellie	ent disponibles .	
		• Jup	yterLab				
AmgX		• Ten	sorBoard				
FFTW							
NetCDF							
Parallel netCDF		Previo	us aview			Next Conda »	
Paraview							
L'écosystème Python	~						
Conda							
Python							

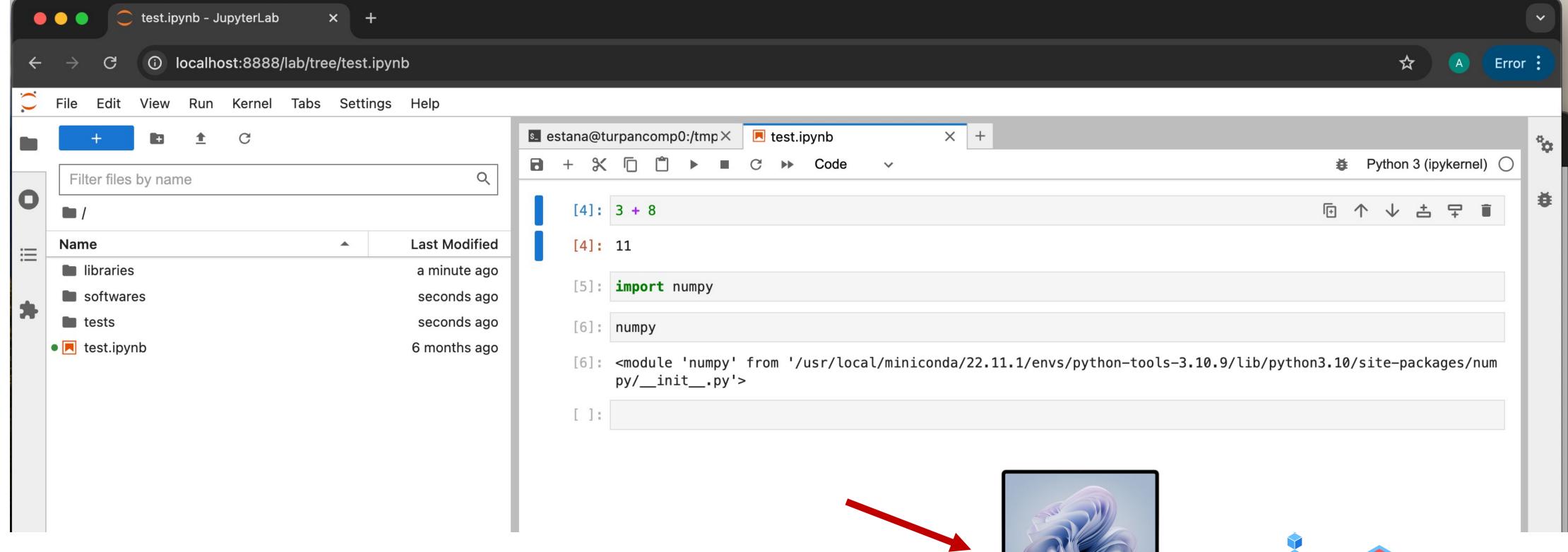




TURPAN JUPYTER NOTEBOOK



[estana@turpanlogin1 estana]\$ runJupyterSession.sh
[estana@turpanlogin1 estana]\$ runJupyterSession.sh --container pytorch



Allocated resources: 1 A100-GPU, 40 CPUs and 256G RAM



PRODUCTION MODE WITH CONTAINERS (APPTAINER)

Pytorch container example

Container setup

```
apptainer <a href="mailto:shell">shell</a> --nv /work/conteneurs/sessions-interactives/pytorch-24.02-py3-calmip-si.sif

Apptainer> pip install --user wandb
```

Running the code using the container

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J mon_job
#SBATCH -p shared
#SBATCH --nodes 1
#SBATCH --ntasks 1
#SBATCH --time=0:15:00
#SBATCH --gres=gpu:1

apptainer exec --bind /tmpdir,/work --nv /work/conteneurs/sessions-interactives/pytorch-24.02-
py3-calmip-si.sif python mon_script.py
```



CONTAINERS

A container is essentially a fully packaged and portable computing environment

Everything an application required to run:

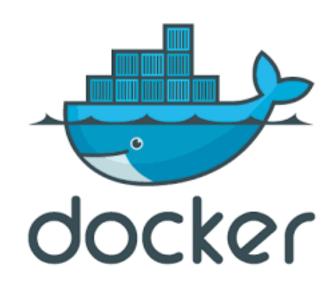
Binaries

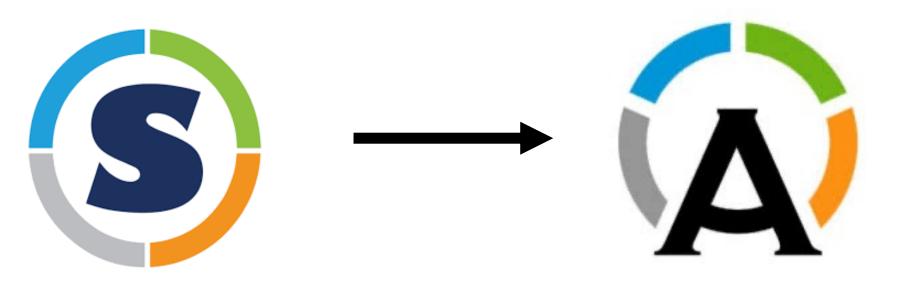
Libraries

Configuration files

Dependencies

Is encapsulated and isolation in its container

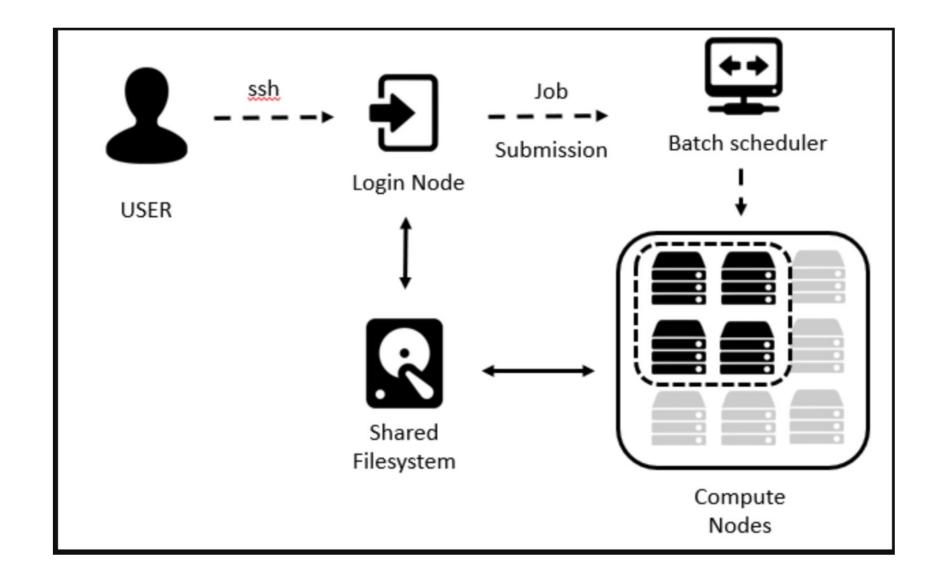






BATCH SCHEDULER: SLURM

Batch system



Sbatch script example

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=test_mpi
#SBATCH --partition=compute
#SBATCH --ntasks=96
#SBATCH --time=01:30:00
#SBATCH --output=job_%x_%j.out
#SBATCH --err=job_%x_%j.err
#SBATCH --exclusive

# setup environment
module load applications
#launch executable with or without inputs
srun ./mybinary input1 input2
```

Specify the name of the partition

Specify a reasonable time limit

Specify the names of your output files



PRODUCTION MODE WITH CONTAINERS (APPTAINER)

Pytorch container example

Container setup

```
apptainer <a href="mailto:shell">shell</a> --nv /work/conteneurs/sessions-interactives/pytorch-24.02-py3-calmip-si.sif

Apptainer> pip install --user wandb
```

Running the code using the container

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J mon_job
#SBATCH -p shared
#SBATCH --nodes 1
#SBATCH --ntasks 1
#SBATCH --time=0:15:00
#SBATCH --gres=gpu:1

apptainer exec --bind /tmpdir,/work --nv /work/conteneurs/sessions-interactives/pytorch-24.02-
py3-calmip-si.sif python mon_script.py
```



PRODUCTION MODE WITH CONDA

Charger l'environnement

```
module purge module load conda/22.11.1
```

Vérifier quels sont les environnements disponibles

```
conda env list
   pytorch-1.10
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/pytorch-1.10
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/pytorch-1.11
   pytorch-1.11
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/pytorch-1.12
   pytorch-1.12
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/pytorch-1.7
   pytorch-1.7
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/pytorch-1.7.1
    pytorch-1.7.1
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/pytorch-1.8.0
   pytorch-1.8.0
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/pytorch-1.9.1
   pytorch-1.9.1
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/pytorch-2.0.1
   pytorch-2.0.1
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/rdkit-23.03.1
    rdkit-23.03.1
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/scikit-learn-0.23.2
    scikit-learn-0.23.2
    tensorflow-1.15
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/tensorflow-1.15
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/tensorflow-2.2.0
    tensorflow-2.2.0
                            /usr/local/miniconda/4.9.2/envs/tensorflow-2.4.1
   tensorflow-2.4.1
```

Installer des paquets dans l'environnement courant

Pour installer une version spécifique de numpy :

```
(python-tools-3.10.9) [toto@turpanlogin1 ~]$ conda install numpy=1.22
```





QUESTIONS?

MERCI

