Entrenamiento de redes neuronales profundas

Diego Andrade Canosa

UNIVERSIDADE DA CORUÑA

citic

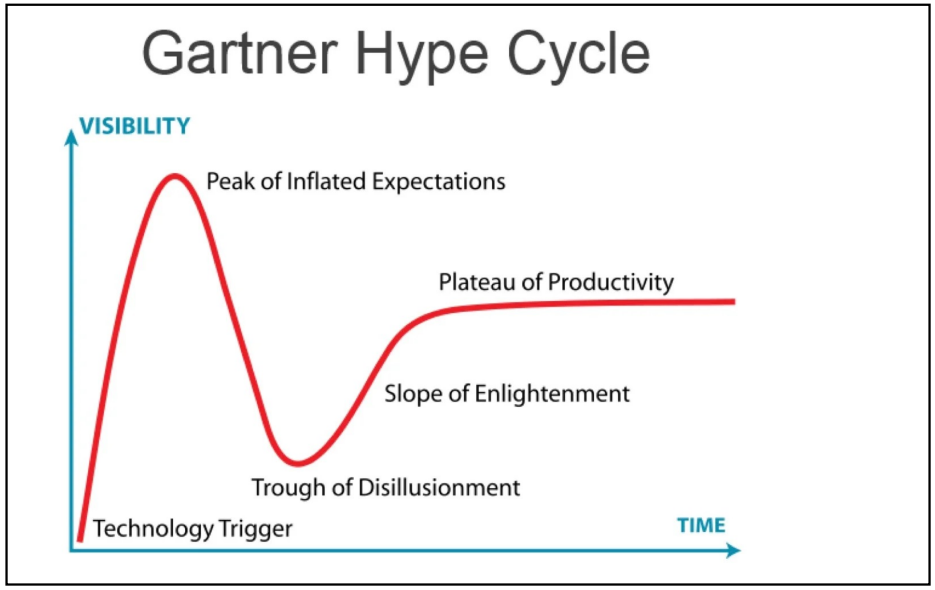
1. Introducción -

Diego Andrade Canosa

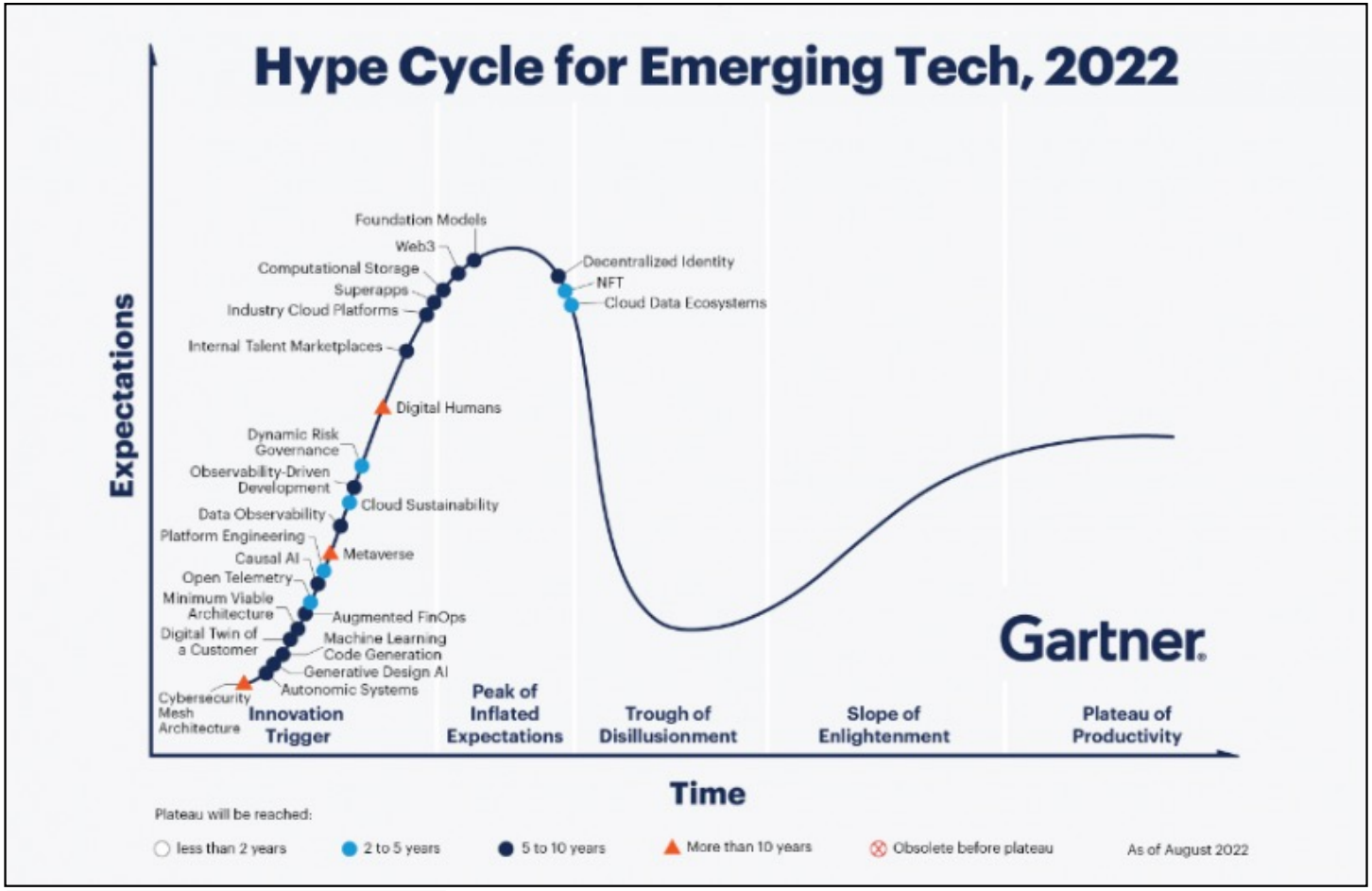
Introducción al curso: **Motivación**

Why AI is the new electricity por Andrew Ng

- **Motivo 1:** La Inteligencia Artificial (IA) juega y jugará un papel fundamental



Introducción al curso: Motivación

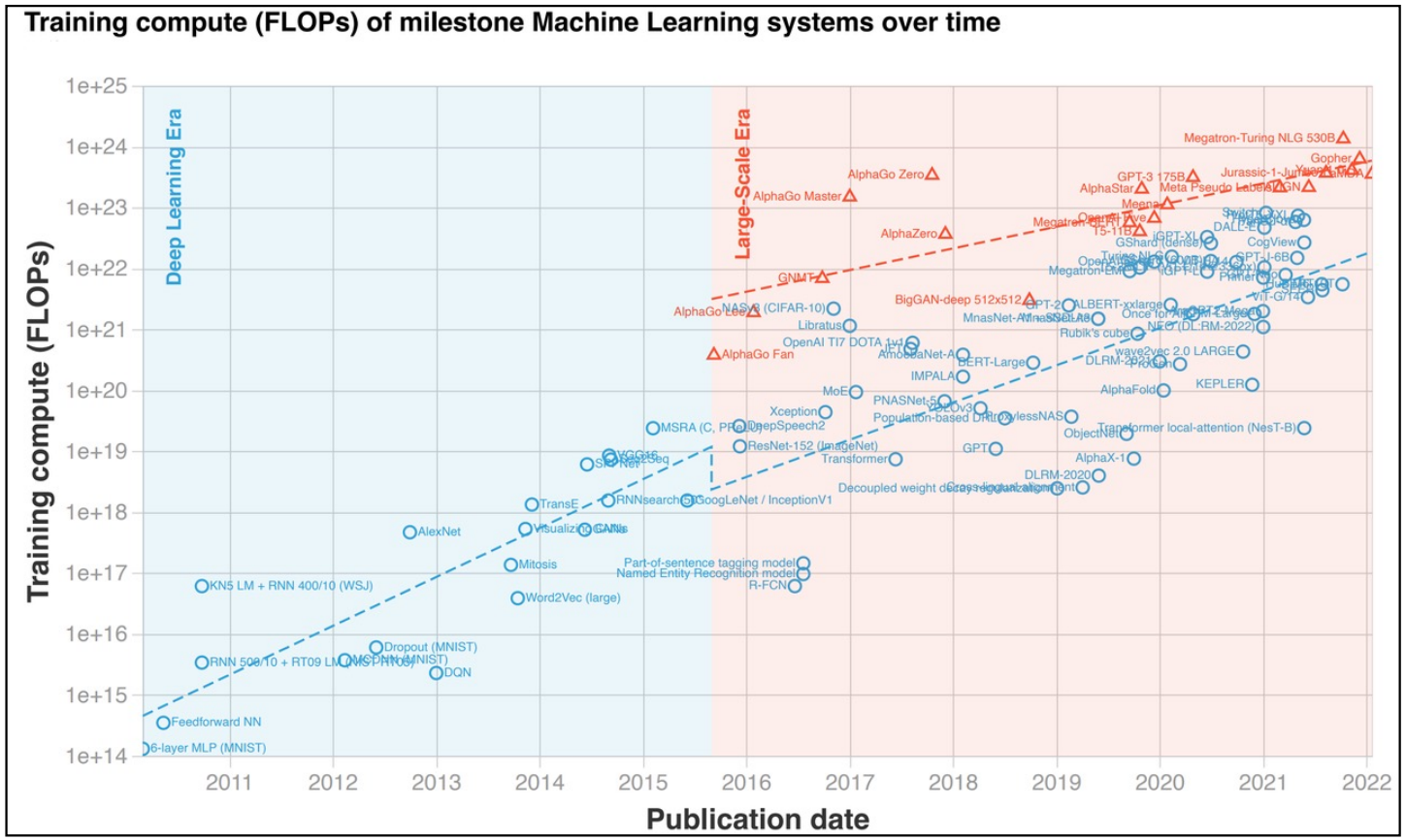


Ciclo del Hype de Gartner

Introducción al curso: Motivación

- **Motivo 2:** El coste de recursos (cómputo y memoria) de entrenar nuevos modelos está creciendo aceleradamente

Introducción al curso: **Motivación**



Fuente: https://www.marktechpost.com/2022/07/13/colossal-ai-a-unified-deep-learning-system-for-big-models-seamlessly-accelerates-large-models-at-low-costs-with-hugging-face/

Introducción al curso: **Motivación**

- **Motivo 3:** El entrenamiento de modelos requiere el uso de recursos computacionales heterogéneos
  - Tarjetas gráficas: Graphic Processing Units (GPUs)
    - Conceptos asociados: GPGPU, CUDA
    - Tienen hw especializado para IA: Tensor Cores, Sparse Tensor Cores
      - Explotado por las librerías especializadas de Nvidia (cudNN, cuBLAS, cuSparseLT, cutlass), usadas a su vez por los frameworks más conocidos de IA (TF, Pytorch)
  - CPUs multinúcleo: Multicores
    - Más lentas para IA que las GPU
    - Tienen hw especializado para IA
      - Principalmente extensiones del juego de instrucciones vectoriales o multimedia del procesador
        - Explotado por librerías especializadas de los fabricantes (Intel OneAPI AI Analytics)
  - Hardware de propósito específico
    - Ejemplo: Tensor Processing Units (TPUs) de Google
  - Computadores (o aceleradores) cuánticos (*en desarrollo*)

Introducción al curso: **Contenidos**

1. Introducción al curso y al uso del Supercomputador FT3: Recursos disponibles y modos de uso
2. Breve introducción a Pytorch
3. Soporte nativo para Pytorch Distribuido
4. Herramientas avanzadas para Pytorch Distribuido
5. Breve introducción a Keras y Tensorflow
6. Soporte nativo para TF Distribuido

Introducción al curso: **Metodología**

- El curso está dividido en 6 sesiones de 3 horas y 20 minutos
  - Intercalaremos presentaciones del profesor con actividades dirigidas más o menos autónomas (y descansos)
- Usaremos los recursos del FT3 para la mayoría de las prácticas
  - Algunas prácticas se pueden hacer, opcionalmente, en el equipo del alumno
- Los principales entornos de IA que usaremos serán Pytorch (Torch) y Tensorflow (TF)
- Además de otras herramientas
  - Entornos virtuales
    - Venv y Conda
  - Python
    - Jupyter (y Jupyter-Lab)
    - Diversos módulos de Python o de TF y Pytorch
  - Herramientas
    - Ssh (openSSH)
    - VSCode (opcional)
    - Navegador web

Índice

- Conceptos básicos de RNP
- Arquitectura y recursos en el supercomputador Finisterrae3
  - Guía básica de uso
- Actividades
  - Configuración del entorno del curso
  - Gestión de paquetes de Python
  - Uso básico del sistema de colas (SLURM)

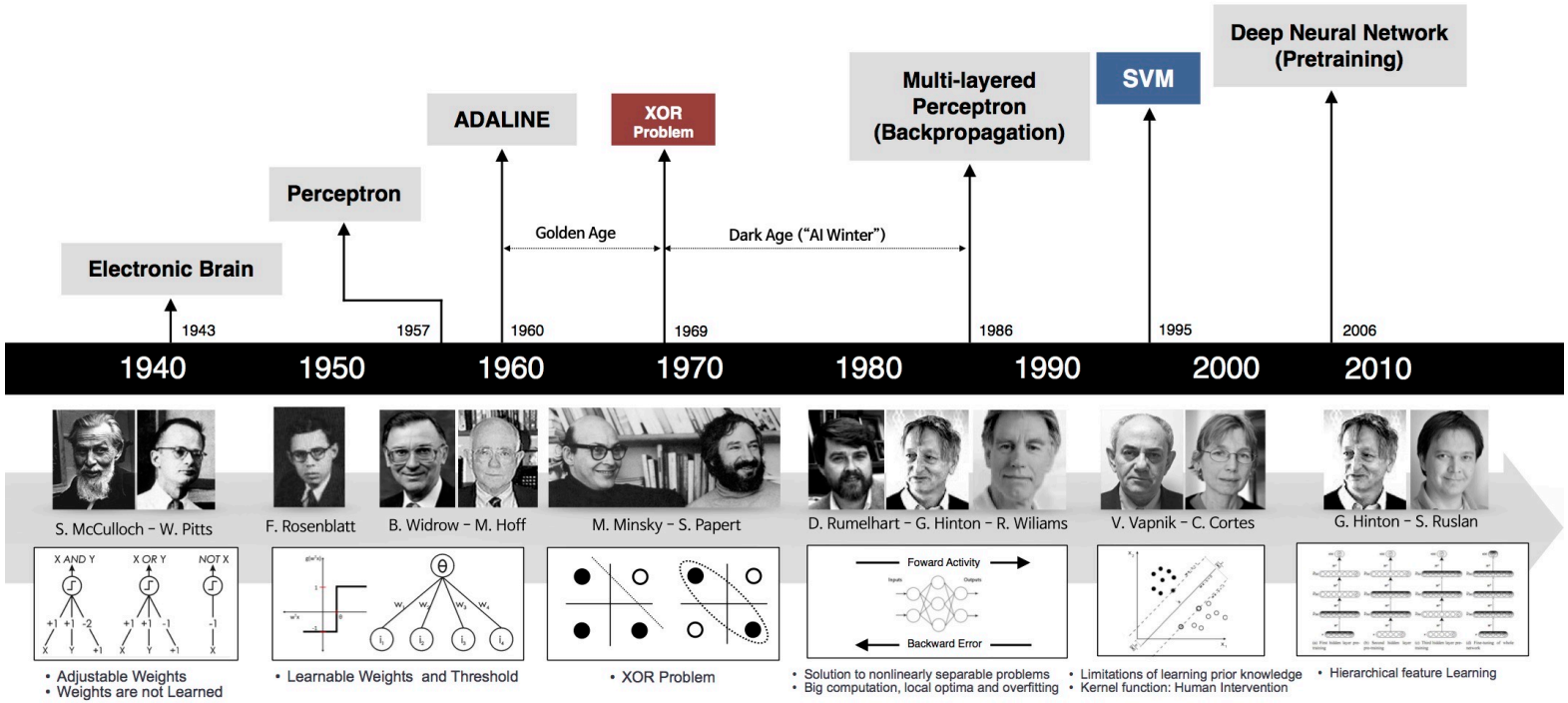
Introducción

- *Artificial Intelligence* (AI) es cualquier técnica que permita un computador emular el comportamiento humano
- *Machine Learning* (ML) es una rama de la Inteligencia Artificial (IA) que permite aprender a realizar tareas que requieran inteligencia sin una programación explícita
- *Deep Learning* (DL) es un subconjunto de ML que usa redes profundas (con muchas capas ocultas)
  - Permite procesar datos no estructurados
  - Extrae patrones de los datos
  - Basado en *representation learning*
- Tipos de aprendizaje:
  - Aprendizaje supervisado
  - No supervisado
  - Auto (self)-supervisado

Razones del auge del DL

- El Perceptrón Multicapa (1969) es el concepto fundacional de las RNP
- El auge actual tiene varios hitos clave
  - Año 1990: Se acuña el concepto de DL -> Artículo: Deep Learning Miracolous Year
  - Año 2009: Artículo de *Imagenet* -> ImageNet: A large-scale hierarchical image database
  - Año 2017: Artículo *Transformers* -> Attention is all you need
  - Otros conceptos recientes clave: *Generative Adversarial Networks, Autoencoders, NLP, Diffussion models*
- Razones del auge:
  - Recopilación masiva de datos digitalmente en diversos ámbitos
  - Avances técnicos que permiten procesar datos no estructurados (imágenes, vídeo, audio, texto, voz)
  - HPC Hardware: GPUs, Supercomputers, Clusters, Cloud
  - Software accesible: Google Colab, Kaggle, Tensorflow, Pytorch

Cronología general del ML



Fuente: http://beamandrew.github.io//images/deep_learning_101/nn_timeline.jpg

Modelos en auge

- GPT4
  - ChatGPT
- Whisper (v2)
- Visita el programa de NeuroIPS (https://neurips.cc/virtual/2023/papers.html?filter=titles#tab-browse)
- Google Gemini Ultra
  - Google Gemini 1.5
- OpenAI SORA (hace 3 días)
- …

Compañías y sitios web clave

- Todas las compañías *Big Tech*
  - Meta AI
  - Google AI
  - Baidu Research
- Especializadas en AI
  - DeepMind
  - Stability AI
  - Anthropic
- Hubs de recursos
  - Kaggle
  - Hugginface
  - Google Colab

Potenciadores de la innovación

- Accesibilidad
  - Modelos *open-source*
  - Herramientas *open-source*
  - Acceso gratuito a recursos computacionales básicos
- Documentación
  - Recursos de formación abiertos
  - Artículos de investigación *open-Access*
- Recursos computacionales masivos

¡La IA ha encontrado su transistor!

El proceso de *ML*

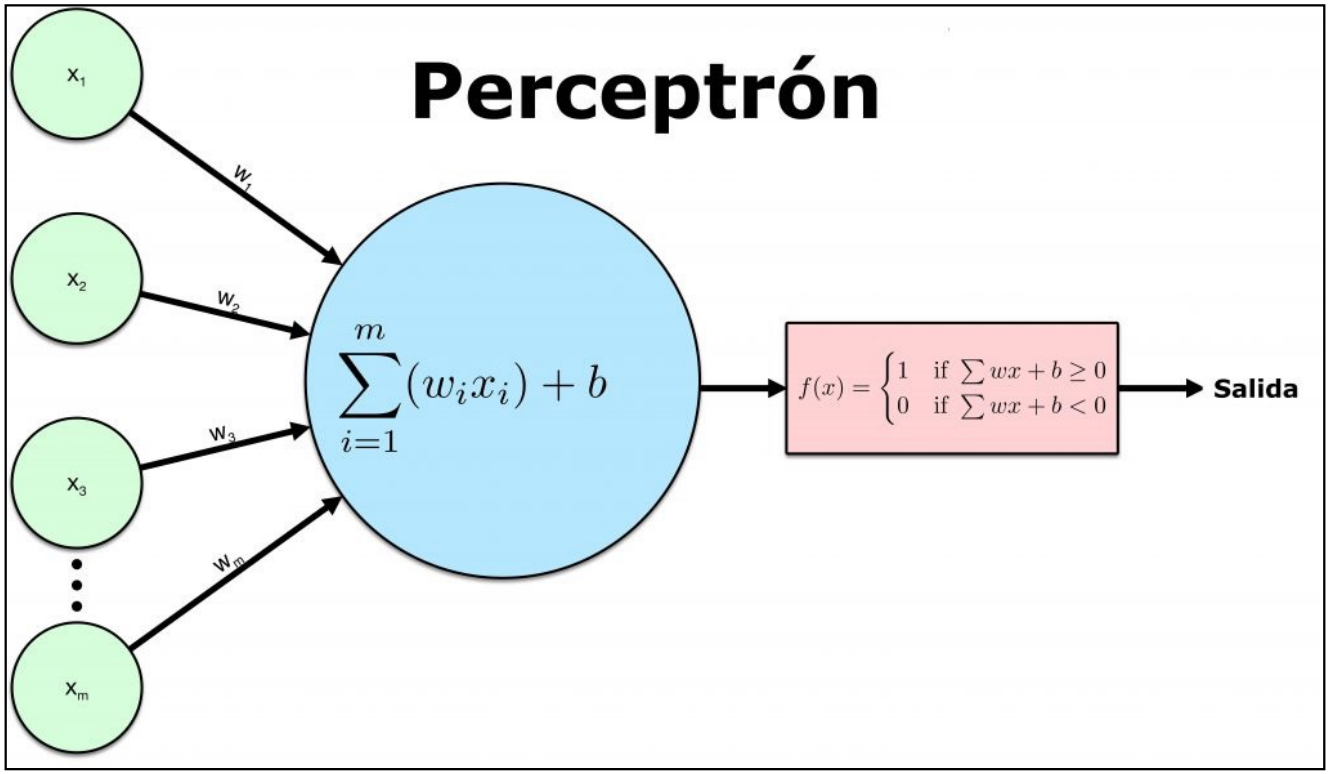
- Debemos entender el problema que queremos resolver
  - Qué salida proporcionará el modelo
  - En base a qué entradas
- Lo anterior nos permitirá definir…
  - Los datos que consideramos relevantes para el modelo
  - La representación más apropiada de estos datos
  - A partir de la anterior definimos el conjunto de datos (en adelante *dataset),* que a su vez dividiremos en:
    - Entrenamiento
    - Validación

El proceso de *representation learning*

- El aprendizaje de la representación (en adelante *representation learning)* se puede aprender:
  - Las características (*features*) relevantes de las entradas
  - Cómo relacionar esas características con cada una de las salidas posibles

El perceptrón

Forward propagation



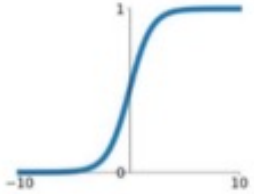
Fuente: http://blog.josemarianoalvarez.com/2018/06/10/el-perceptron-como-neurona-artificial/

Funciones de activación

Activation Functions

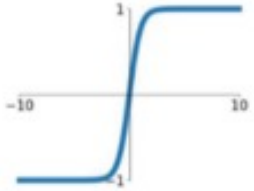
Sigmoid

$$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$



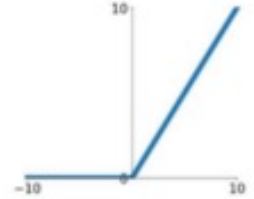
tanh

$$\tanh(x)$$



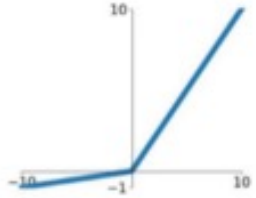
ReLU

$$\max(0, x)$$



Leaky ReLU

$$\max(0.1x, x)$$

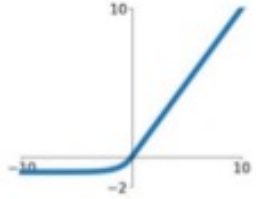


Maxout

$$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$$

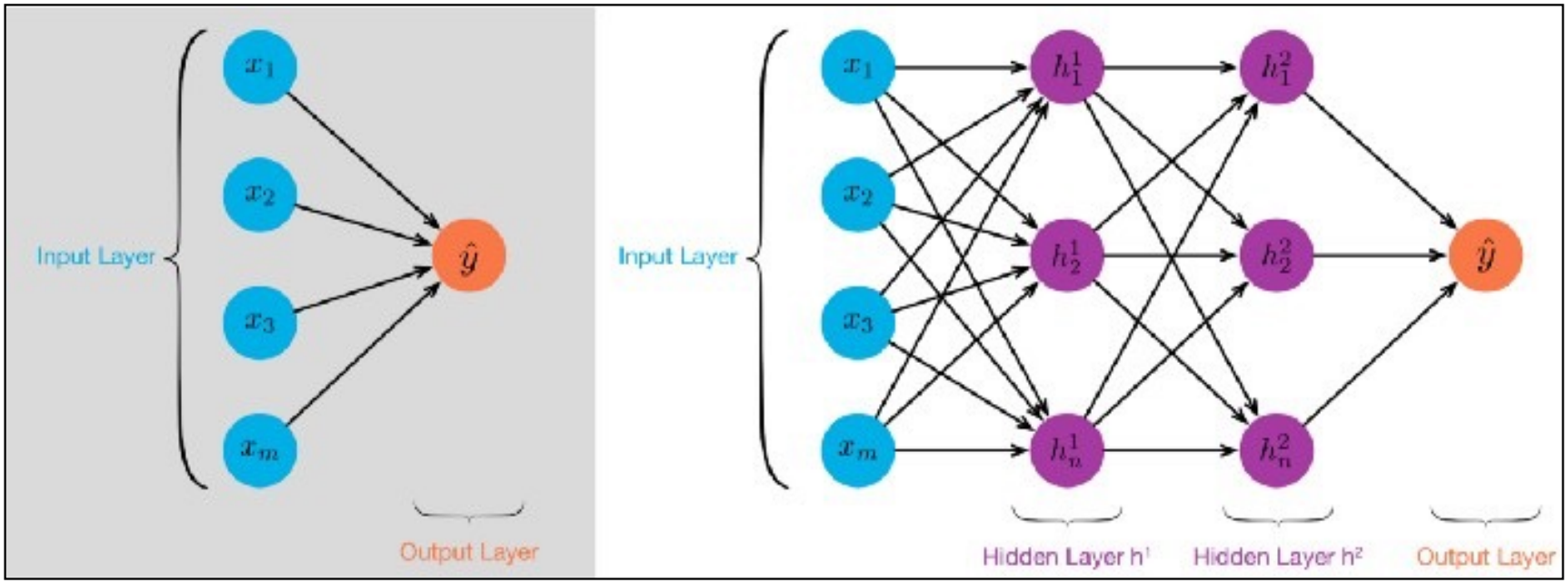
ELU

$$\begin{cases} x & x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1) & x < 0 \end{cases}$$



Fuente: https://medium.com/@shrutijadon/survey-on-activation-functions-for-deep-learning-9689331ba092

Perceptrón multicapa



Fuente: *https://towardsdatascience.com/multi-layer-neural-networks-with-sigmoid-function-deep-learning-for-rookies-2-bf464f09eb7f*

Componentes básicos de un modelo de DL

- Tres bloques de capas identificables:
  - Capa de entrada
  - Capas ocultas (intermedias). En inglés, *hidden layers*
  - Capa de salida
- Cada capa está compuesta de neuronas, interconectadas entre si, cuya señal se caracteriza por:
  - Peso
  - *Bias*
  - Función de activación

Conceptos clave: Repaso

- Inferencia, Entrenamiento
- *Dataset*: Conjunto de entrenamiento, conjunto de validación
- Función de activación
- Función de pérdida
  - Optimización de la función de pérdida
    - Algoritmos de *Gradient Descent*
      - SGD, Adam, Adadelta, Adagrad, RMSProp

El proceso de entrenamiento

- Durante el entrenamiento
  - El modelo se entrena con una parte del *dataset*: *training dataset*
  - Su precisión se calcula con otra parte del *dataset*: *validation dataset*
- Durante el entrenamiento, el modelo se expone a todo el *dataset* de entrenamiento de forma repetida
  - Cada exposición completa se conoce como *epoch*
- El *dataset* está compuesto de varios (muchos) *samples* formados por una entrada y una salida deseada (aprendizaje supervisado). Para cada sample:
  - Ejecutamos la inferencia (*forward pass)*
    - *Activation*
  - Calculamos cómo de lejos estamos de la salida deseada: *loss function*
  - Usamos esa información para actualizar los pesos de delante hacia atrás (de la salida a la entrada): *back propagation*
    - *Learning rate*

El proceso de entrenamiento

- Por eficiencia, el procesado de los samples del *dataset* se realiza en lotes (*batches).*
- *E*n cada paso (*step*) del entrenamiento se procesan *batch samples* del conjunto de entrenamiento

$$\text{num\_step} = num\_samples/tamaño\_batch$$

- Aspectos básicos configurables del entrenamiento:
  - Función de activación
  - *Loss function*
  - *Nº epochs*
  - *Learning rate*
  - *Tamaño_batch*

Otros conceptos a revisar relacionados con el entrenamiento

- *Minibatches*
  - Asociado al concepto de *Stochastic Gradiente Descent* (SGD)
  - Los gradientes de los pesos se calculan procesando a la vez *minibatches* de elemento del conjunto de datos
  - Permite acelerar el entrenamiento
    - Mediante paralelización
- *Learning rate*
  - Suelen adaptarse dinámicamente a la pendiente observada
- *Overfitting*
- Regularización
  - Mejora la capacidad de generalización de nuestro modelo
  - Mejora el rendimiento de nuestro modelo en datos no vistos

Batches y minibatches

- *batch_size=total_samples* -> El conjunto de datos se procesa por completo antes de actualizar los pesos
  - Batch Gradient Descent
- *batch_size*=n -> El conjunto de entrenamiento se procesa en batches de n *samples*. Después de procesar cada batch se actualizan los gradientes
  - Minibatch Gradient Descent
- *batch_size*=1 -> Los gradientes se actualizan después de procesar cada *sample*
  - *Stochastic Gradient Descent*

Epoch y step

- Cada procesado del conjunto de datos completo se conoce como *epoch*
- El procesado de los *batch_size* samples requeridos para actualizar los gradientes, produce que una *epoch* se divida en *total_samples/batch_size*

Métodos de regularización

- *Dropout*: Técnica que consiste en poner algunos pesos a 0 aleatoriamente
  - Alrededor del 50%
- *Early Stopping:* Parar un entrenamiento antes de que llegue a overfitting

Clasificación de modelos: Por tipo de aprendizaje

- Aprendizaje supervisado: El sistema se entrena con un conjunto de datos que contiene pares formados por una entrada y su correspondiente salida deseada (*ground-truth*)
- Semi-supervisado: Una parte del conjunto de datos de entrenamiento está etiquetado y otra no
  - La parte no etiquetada se etiqueta usando el modelo ya entrenado con la parte etiquetada
- Aprendizaje no-supervisado: El conjunto de entrenamiento está compuesto de datos no etiquetados
  - Concepto de clustering
- Aprendizaje auto-supervisado: El conjunto de entrenamiento usa datos no etiquetados. Debe usar técnicas creativas para identificar la ground-truth. Ejemplos:
  - Denoising: Se usan imágenes completas, se corrompe una parte de la imagen, y se usa el conocimiento de la imagen original (sin corromper) para entrenar el modelo
  - Autoregresión: Se quiere predecir el siguiente valor de una secuencia, se pueden usar distintas “ventanas” de esa secuencia para predecir el siguiente valor
  - Aprendizaje de embedding: En modelos de lenguaje la representación numérica de los tokens se suele aprender y promueve que los tokens con significados similares tengan valores numéricos parecidos

Por el tipo de tarea que aprende el modelo

- Modelos de regresión: Aprenden a predecir un valor
- Modelos de clasificación: Aprenden a clasificar la entrada en una de entre varias categorías
  - Binaria: Si las categorías son 2
  - Multiclase: Si las categorías son más que 2
- Modelos de clustering: Aprenden a agrupar los datos de entrada en varias categorías, o clústeres
- Aprendizaje por refuerzo: Aprenden a tomar decisiones que se evalúan en base a una función que calcula la recompensa de la decisión adoptada

Por tipo de arquitectura de red

- Perceptrón Multicapa
- *Convolutional Neural Networks* (CNN)
- *Recurrent Neural Networks* (RNN)
  - *Long Short-Term Memory* (LSTM)
- *Generative Adversarial Networks* (GAN)
- *Transformers: (encoder + decoder)*

Clasificaciones de modelos de DL

- Por tipo de aplicación:
  - Modelado de secuencia. Predicciones (RNNs)
    - Procesamiento de lenguaje natural (LSTMs)
      - Traductores
      - Asistentes/conversadores virtuales
      - Reconocimiento de voz
  - Visión por computador (CNNs)
    - Seguimiento de objetos
    - Identificación de imágenes
    - Conducción autónoma (LIDAR)
  - Modelos generativos (Autoencoders)
    - Imágenes. *Prompt models*
    - Vídeos
  - …

Modelos escalables vs no escalables

- Hay arquitecturas de red que son difícilmente paralelizables
  - Ejemplo RNNs
    - Al ser recurrentes dificulta la paralelización
      - No son escalables (usando más recursos hw no reducimos significativos el tiempo de entrenamiento)
    - Las redes de atención (*attention networks*) están concebidas para implementar RNNs de forma escalable
      - Permiten procesar diferentes partes de la entrada, en paralelo, con distintas cabezas (*heads*)
      - Cada *head* utiliza una máscara diferente

Modelos que requieren gran capacidad de cómputo

- Los modelos de Deep Learning (DL) actuales requieren cada vez más recursos:
  - Memoria
  - Cómputo
    - Entrenamiento
      - Inicial (pre-training) + Fine-tuning
    - Inferencia

Ejemplos de modelos grandes: Bert

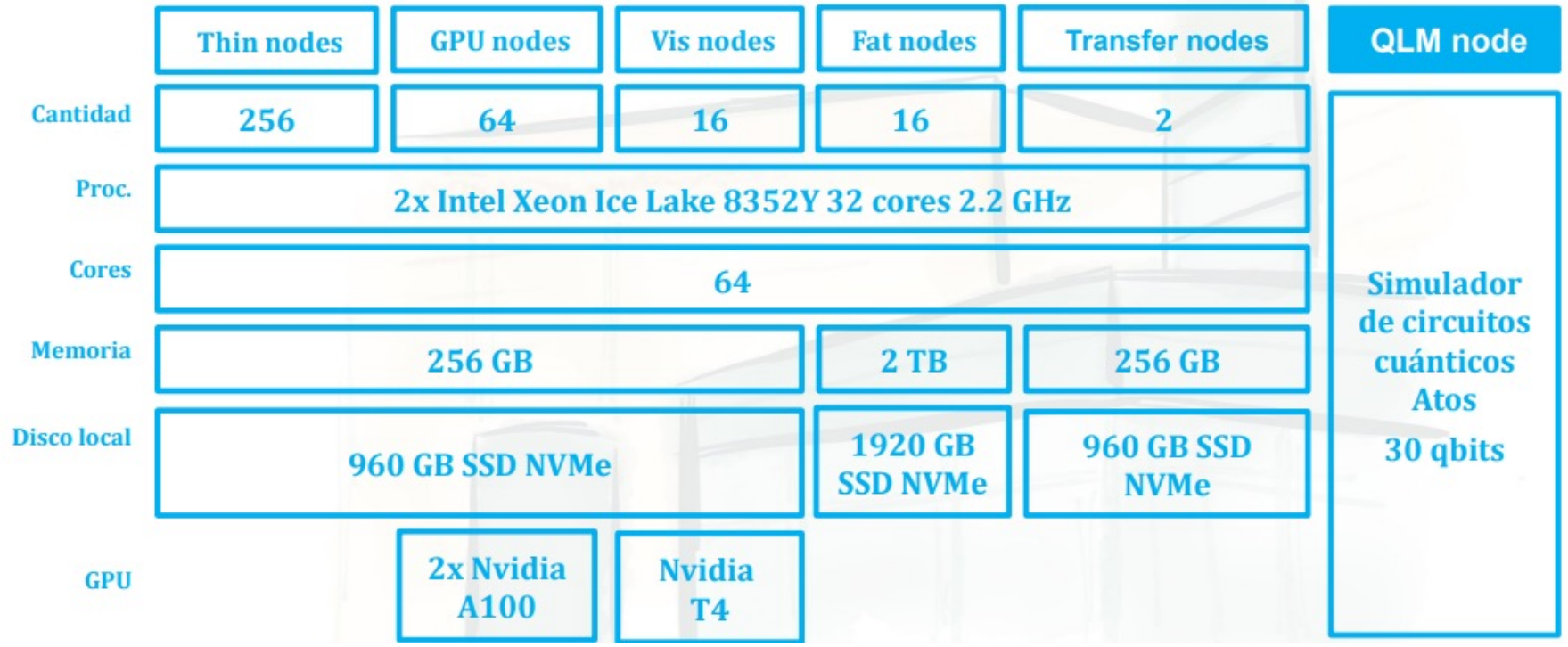
	BERT	RoBERTa	DistilBERT	XLNet
Size (millions)	**Base**: 110 **Large**: 340	**Base**: 110 **Large**: 340	**Base:** 66	**Base**: ~110 **Large**: ~340
Training Time	**Base**: 8 x V100 x 12 days* **Large:** 64 TPU Chips x 4 days (or 280 x V100 x 1 days*)	**Large:** 1024 x V100 x 1 day; 4-5 times more than BERT.	**Base**: 8 x V100 x 3.5 days; 4 times less than BERT.	**Large:** 512 TPU Chips x 2.5 days; 5 times more than BERT.
Performance	Outperforms state-of-the-art in Oct 2018	2-20% improvement over BERT	3% degradation from BERT	2-15% improvement over BERT
Data	16 GB BERT data (Books Corpus + Wikipedia). 3.3 Billion words.	160 GB (16 GB BERT data + 144 GB additional)	16 GB BERT data. 3.3 Billion words.	**Base**: 16 GB BERT data **Large**: 113 GB (16 GB BERT data + 97 GB additional). 33 Billion words.
Method	BERT (Bidirectional Transformer with MLM and NSP)	BERT without NSP**	BERT Distillation	Bidirectional Transformer with Permutation based modeling

Fuente: BERT, RoBERTa, DistilBERT, XLNet — which one to use? | by Suleiman Khan, Ph.D. | Towards Data Science

Ejemplos de de modelos grandes: GPT

- Llevaría 355 años entrenar este modelo en una sola Tesla V100
  - 4.6 millones de dólares de coste en un proveedor de cloud [fuente]
- El entrenamiento de GPT-4 requirió 25,000 Nvidia A100 GPUs durante 100 días [fuente]

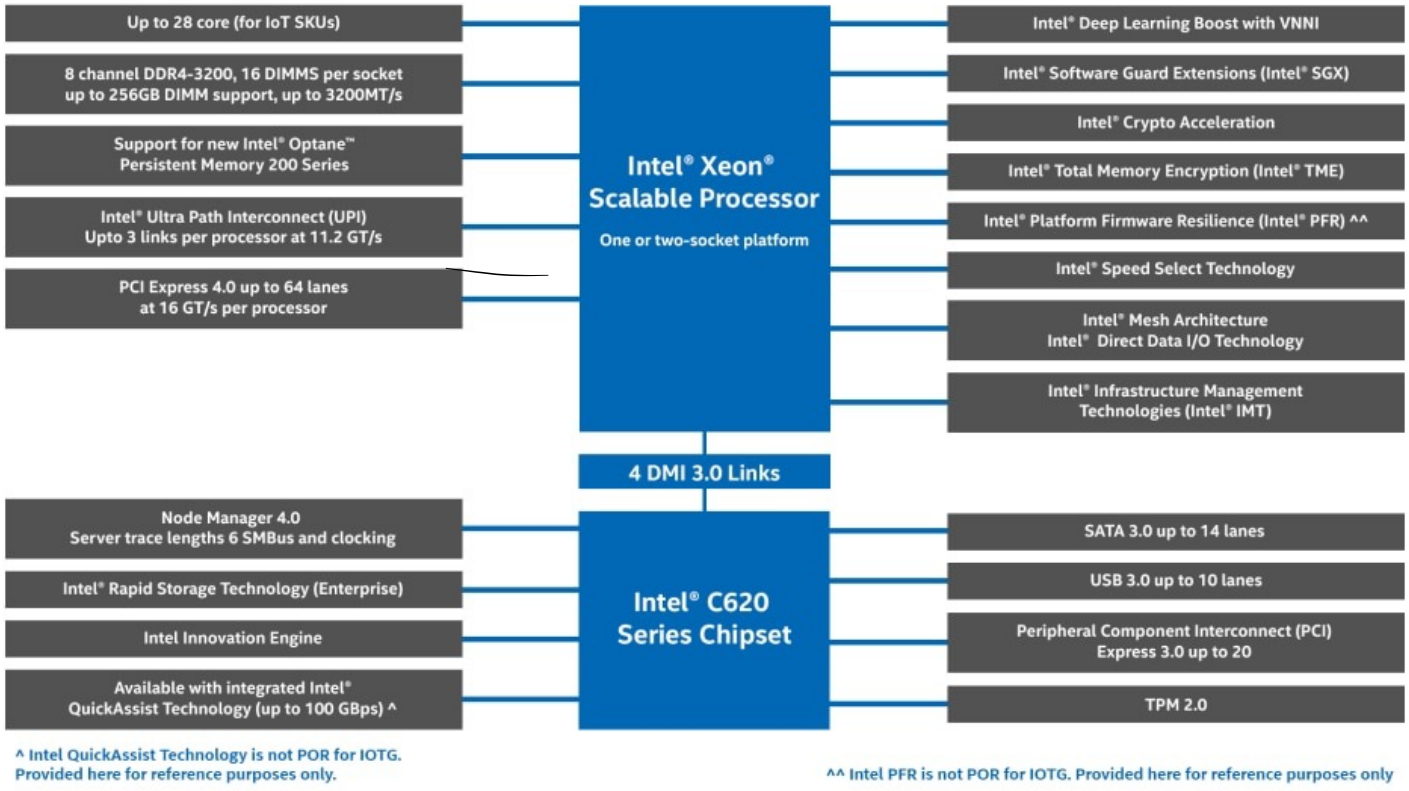
Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)



Fuente: [CESGA - Portal de usuarios]

Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)

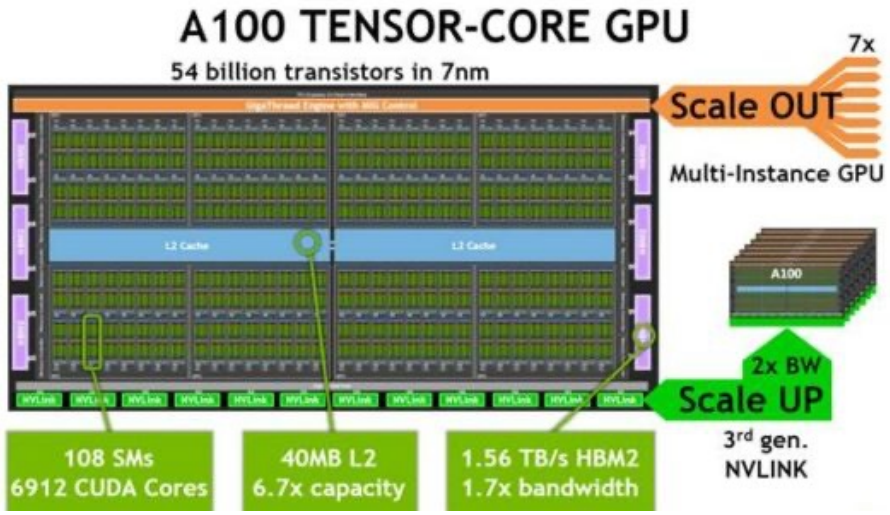
Cada nodo tiene 2 procesadores Intel Xeon 8352Y de 32 cores cada uno -> 64 cores por nodo



Fuente: Procesador Intel® Xeon® Platinum 8352Y y Xeon Platinum - Intel - WikiChip

Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)

- Varios modelos de GPU:
  - Tesla T4. Arquitectura Turing.
  - Tesla A100. Arquitectura A100.



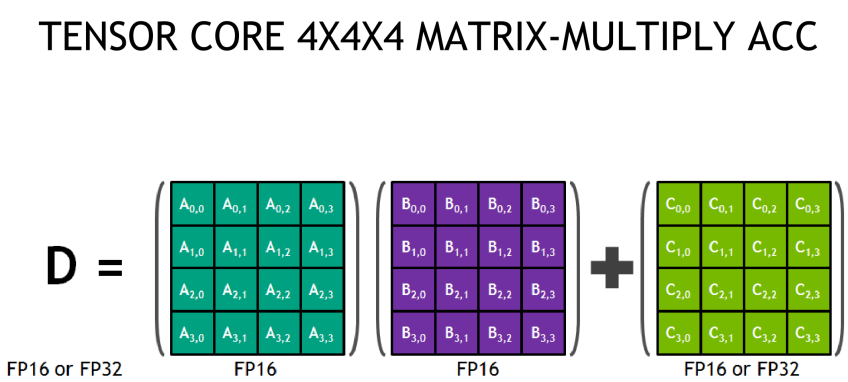
Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)

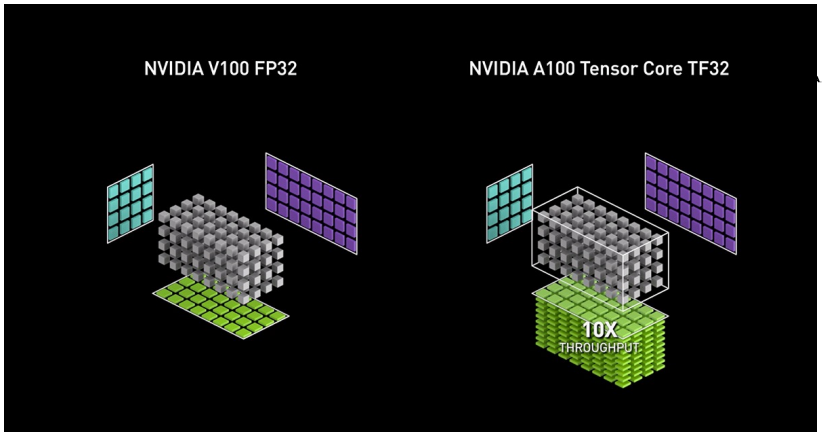
- Tesla A100. Arquitectura A100.

Fuente: [NVIDIA A100 | NVIDIA]

Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)

Nvidia Tensor Cores

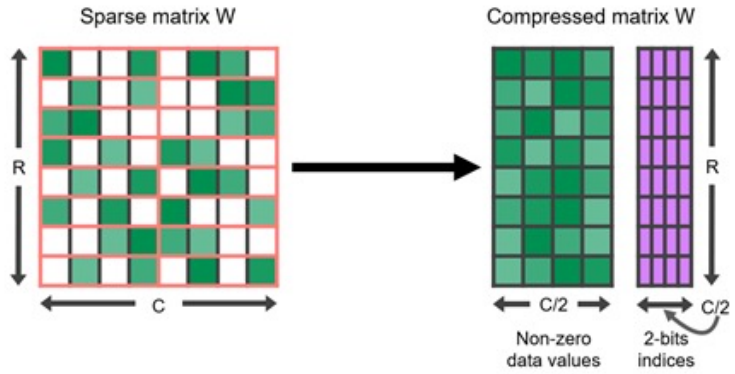




Fuente: [Tensor Cores: versatilidad para HPC e IA | NVIDIA]

Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)

Nvidia **Sparse** Tensor Cores



Fuente: [Working with sparse tensors | TensorFlow Core] y [Accelerating Inference with Sparsity Using the NVIDIA Ampere Architecture and NVIDIA TensorRT | NVIDIA Technical Blog]

Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)

- Almacenamiento compartido: Home y Store
- Accesible desde todas las infraestructuras de CESGA
- Localización cableada en las variables de entorno $HOME y $STORE
- Límites:
  - HOME: 10 GB y 100.000 ficheros
  - STORE: 500 GB y 300.000 ficheros
- Sólo se hace backup de Home

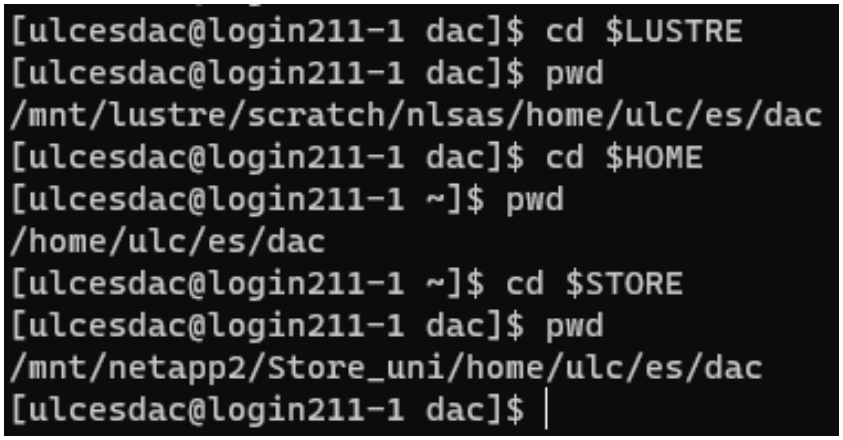
Directory	Use	User limits	Backup
$HOME	Store code files Low speed access	10GB 100.000 files	Yes
$STORE	Store simulations final results Low speed access	500GB 300.000 files	No
$LUSTRE	Simulation runs High speed access	3TB 200.000 files	No

```
[ulcesdac@login211-1 dac]$ cd $LUSTRE
[ulcesdac@login211-1 dac]$ pwd
/mnt/lustre/scratch/nlsas/home/ulc/es/dac
[ulcesdac@login211-1 dac]$ cd $HOME
[ulcesdac@login211-1 ~]$ pwd
/home/ulc/es/dac
[ulcesdac@login211-1 ~]$ cd $STORE
[ulcesdac@login211-1 dac]$ pwd
/mnt/netapp2/Store_uni/home/ulc/es/dac
[ulcesdac@login211-1 dac]$
```

Fuente: CESGA - Portal de usuarios

Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)

- Sistema paralelo de almacenamiento compartido basado en Lustre
- Dividido en 2 pools: NVMe y NLSAS
- Accesible a través de
  - $LUSTRE: Permanente. Pool NLSAS
  - $LUSTRE_SCRATCH: Disponible durante la ejecución de los trabajos. Pool NVMe.
- Límites: Hasta 3 TB por usuario y 200.000 ficheros



Fuente: CESGA - Portal de usuarios

Descripción avanzada de Finisterrae III (FT3)

- Usamos el comando myquota para conocer el espacio disponible

```
[ulcesdac@login211-1 ~]$ myquota

 - HOME and Store filesystems:
   -------------------------
Filesystem                space   quota   limit   files  quota  limit
10.117.49.201:/Home_FT2   7966M   10005M  10240M  48959  100k   101k
10.117.49.201:/Store_uni  96361M  499G    500G    280k   300k   301k
10.117.49.101:/Home_BD    3008M   800G    1024G   60     4295m  4295m

 - LUSTRE filesystem:
   -----------------
     Filesystem    used   quota   limit   grace   files   quota   limit   grace
/mnt/lustre/scratch
                  12.6G      3T    3.5T       -   86665  200000  240000       -
```

Fuente: [CESGA - Portal de usuarios]

Actividad 1.1: Configuración y conexión básicas

- Software instalado en nuestro equipo:
  - Obligatorio:
    - Cliente ssh o terminal
      - Linux/Mac (ya disponible de forma nativa)
      - Windows (https://learn.microsoft.com/en-us/windows/terminal/tutorials/ssh). Existen otras opciones como:
        - WSL: https://ubuntu.com/desktop/wsl
        - OpenSSH: https://www.openssh.com
    - Cliente VPN (Endpoint Security VPN) (https://cesga-docs.gitlab.io/ft3-user-guide/how_to_connect.html)
  - Recomendable: Configurar acceso a FT3 *passwordless*.

    Guía: https://www.hostinger.es/tutoriales/configurar-ssh-sin-contrasena-linux
  - Opcional: VSCode: Proporciona:
    - Ayudas en la escritura de código (numerosas extensiones (*plugins*))
    - Control de versiones fácil de utilizar (Git)
    - Acceso remoto transparente (navegación)
    - Terminal integrado

Actividad 1.1: Configuración y conexión básicas

- Acciones a realizar:
  - Conectarse al FT3 por ssh

    Desde un terminal local ssh *miusuario*@ft3.cesga.es
  - Comprobar el almacenamiento que tenemos disponible

    En FT3: quota –s
  - Solicitar un nodo de cómputo con una GPU y comprobar las características de la GPU asignada en el nodo

    En FT3:

    compute –gpu

    En el nodo de cómputo:

    nvidia-smi

Actividad 1.2: Clonación del repositorio del curso

- Conectarse al FT3
- Clonar el repositorio de código del curso en $STORE

  Cd $STORE

  git clone https://github.com/diegoandradecanosa/CFR24
- Ejecutar el script de comparació de rendimientos de particiones

  cd $STORE/CFR24/scripts

  ./scriptDisks.sh

Examinar e interpretar las salidas

Módulos de FT3

- El FT3 es un sistema Linux que usa la distribución Rocky Linux (8.4)
- Lógicamente no tenemos permisos de sudo en el sistema, como usuarios convencionales
- Existen mecanismos para cargar nuevas funcionalidades
  - A través del sistema de módulos
    - Basado en TCL modules
    - Accesibles a través del cliente Lua (lmod) -> COMANDO module
  - En Python
    - Instalando paquetes localmente
    - A través de la creación y configuración de entornos conda

Módulos de FT3

- Sistema de módulos de FT3
  - Los módulos están instalados en el S.O. a través de easy_build
  - El cliente con el que interaccionamos con ellos es un cliente Lua (https://lmod.readthedocs.io/en/latest/)
- Comandos principales
  - Consulta
    - module list — Proporciona una lista de módulos cargados
    - module avail — Proporciona una lista de módulos disponibles
    - module keyword *término1* — Proporciona una lista de módulo que contienen un término de búsqueda
    - module spider *módulo1* — Proporciona información sobre un módulo determinado
    - module show *módulo1* — Muestra información detallada sobre un módulo

Módulos de FT3

- Carga de módulos
  - module purge — Descarga todos los módulos cargados
  - module reset — Vuelve a carga solo los módulos por defecto
  - module load *módulo1* — Carga un módulo
    - A veces puede haber dependencias (módulos a cargar previamente)
      - Averiguables con el comando spider
  - module unload *módulo1* — Descarga un módulo
  - module swap *módulo1 módulo2* — Descarga el módulo1 y carga el módulo2

Módulos de FT3

- Entornos de usuario
  - module save *nombre1* — Guarda la lista de módulos cargados actualmente como una colección de usuario de nombre *nombre1*
  - module restore *nombre1* — Restaura la colección de usuarios *nombre1*
  - module savelist — Lista de colecciones disponibles
  - module describe *nombre1* — Contenido de una colección

Módulos de FT3

- Existen más comandos y parámetros (--parameter) modificadores a explorar
- Más información sobre lmod:
  - Comando module --help
  - Documentación: https://lmod.readthedocs.io/en/latest/010_user.html

Actividad 1.3: Manipulación de módulos

- Conéctate al FT3 (no te olvides de activar el VPN)
- Realizar las siguientes acciones
  - Obtén una lista de módulos cargados: module list
  - Obtén una lista de módulos disponibles: module avail
  - Busca módulos de pytorch: module keyword pytorch
    - Consulta información detallada sobre uno de esos módulos:
      module spider pytorch
      module spider pytorch/2.0.0-cuda
    - Carga ese módulo:
      module load cesga/system pytorch/2.0.0-cuda
  - Crea una colección propia para ese módulo
    module save torch2cuda
  - Comprueba que existe la colección
    module savelist
  - Purga todos los módulos
    module purge
  - Carga la colección
    module restore torch2cuda

Módulos de FT3

Cargando módulos en bash

Añade los siguiente al fichero .bashrc de tu $HOME

```
if [ -z "$BASHRC_READ" ];  then
        export BASHRC_READ=1
        # Place any module commands here
        # module load git
fi
```

Módulos relevantes FT3

- Módulos relevantes:
  - Módulos disponibles consultables con el commando: *module avail*
  - Cargables con el commando: *module load nombre_del_modulo*
  - Módulos relevantes para IA en FT3:
    - **intel:** Diversas herramientas de intel, algunas relacionadas con IA
    - **tensorflow:** Framework de google para IA
    - **transformers:** Varias herramietnas de IA relacionadas con NLP (procesamiento del lenguaje natural), incluído TensorFlow y Pytorch
    - **pytorch:** Popular framework de IA
    - **torchvision:** Conjuntos de datos, y modelos para vision por computador
    - **scikit-learn:** Librería que implementa diversos algoritmos de *Machine Learning*, implementados con numpy, scipy y matplotlib
    - **r-keras:** API en R para TensorFlow keras

Entornos Python en FT3

- El FT3 tiene varias versiones de Python y módulos instalador y accesibles a través del sistema de módulos
  - cesga/2020
    - Python 3.7.8 (la última es 3.11)
    - tensorflow/2.4.1-cuda-system
  - tensorflow/2.5.0-cuda-system (la última es 2.15)
  - Usando la versión de Python instalada en el FT3 con el módulo cesga/2020 (3.7.8) podemos
    - Instalar nuevos paquetes localmente con pip install *módulo*
      - Los paquetes se instalan en el directorio .local de nuestro $HOME
    - Ver la lista de paquetes instalados y sus versiones pip list
    - O comprobar un paquete concreto con pip list | grep *nombre*
    - Actualizar a una versión más reciente cualquier paquete (incluido TF)
      - Asegúrate de no tener ningún módulo de tensorflow cargado

```
python: python/2.7.18, python/3.6.12, python/3.9.9, python/3.10.10
  Python is a programming language that lets you work more quickly and
  integrate your systems more effectively. -- cesga/2020 python/2.7.18:
  Compiler: Requires gcccore/system
```

Entornos Python en FT3: Entorno local

- Buscar módulos: https://pypi.org/search/
- Problema: La instalación local se almacena en $HOME (solo 10GB de capacidad)
  - Cambiarlo con variantes de entorno
    - PYTHONPATH, etc…
- Opción en general engorrosa porque dependiendo del uso que le demos a Python, podemos mezclar paquetes y versiones
  - Mejor tener entornos aislados por tipo de aplicación

Entornos Python en FT3: Virtual Env

- Alternativa Virtualenv:
  - https://docs.python.org/3/library/venv.html
  - https://pypi.org/project/virtualenv/
- Ejemplo de creación de entorno

```
python3 -m venv $STORE/mypython
cd $STORE/mypython/bin
source ./activate

#A partir de aquí estoy dentro del entorno
```

- Forma de activación alternativa. Poner en la cabecera de cada script Python el path a la copia local del intérprete del entorno venv

```
#!/<path-to-venv>/bin/python
```

- El entorno se almacena de forma local

Entornos de Python en FT3: Conda

- Conda es una herramienta para la gestión de paquetes y entornos de software (Linux, MacOS, Windows)
- En nuestro caso, es especialmente útil para generar entornos Conda controlados
- Accesible con módulo miniconda3

  module load miniconda3
- Para evitar problemas de quota

  conda config --add envs_dirs $LUSTRE/conda/envs
  conda config --add pkgs_dirs $LUSTRE/conda/pkgs

o…

  export CONDA_ENVS_PATH=$LUSTRE/conda/envs
  export CONDA_PKGS_DIRS=$LUSTRE/conda/pkgs

Entorno de Python en FT3: Conda

- Creación de entornos:
  - De forma iterativa

    conda create –n *nombreentorno* python=3.9

    conda activate *nombreentorno*

    # Instalar paquetes con conda install y pip
  - A partir de un fichero yml

    conda env create -n *nombreentorno* --file *fichero.yml*
- Exportar entorno actual a fichero yml

  conda env export –name *nombreentorno* > *fichero.yml*

Entorno de Python en FT3: Conda

- Búsqueda de paquetes
  - Los paquetes están disponibles a través de canales
  - El comando conda search *termino1*
    - Busca en los canales predefinidos
  - También podemos buscar en:
    - https://anaconda.org/anaconda/repo
  - El comando conda info, me da información sobre conda, incluída una lista de canales por defecto

Entorno de Python en FT3: Conda

- Puede haber paquetes de Python instalables por
  - conda install
  - pip install
- La diferencia es la misma que cuando instalamos el paquete por pip o por apt en una instalación de Ubuntu
- Conda CheatSheet -> https://docs.conda.io/projects/conda/en/4.6.0/_downloads/52a95608c49671267e40c689e0bc00ca/conda-cheatsheet.pdf

Consideraciones generales sobre entornos Python

- Las librerías Python, y especialmente las de ML, tienen mal soporte entre versiones
  - Cambios continuos en el API
  - En la localización de los módulos
  - Códigos dejan de funcionar entre versiones
- Modelos de DL de código abierto suelen venir con definiciones de entornos predefinidas
  - Incluyen las versiones necesarias de cada paquete
- Los entornos propios de Python suelen ocupar mucho espacio
  - Problemas de cuota
    - Capacidad
    - Número de ficheros
  - pip cache remove

Especificación de número de versión de paquetes python

Constraint type	Specification	Result
Fuzzy	`numpy=1.11`	1.11.0, 1.11.1, 1.11.2, 1.11.18 etc.
Exact	`numpy==1.11`	1.11.0
Greater than or equal to	`"numpy>=1.11"`	1.11.0 or higher
OR	`"numpy=1.11.1|1.11.3"`	1.11.1, 1.11.3
AND	`"numpy>=1.8,<2"`	1.8, 1.9, not 2.0

Actividad 1.4: Actualización de TF

- Conectarse a FT3 (recuerda activar VPN)
- Instalar una versión reciente de TF en FT3 siguiendo las 3 vías estudiadas:
  - ~~Entorno local (no queremos llenar el HOME=~~
  - Entorno venv
  - ~~Entorno conda~~ (lleva mucho tiempo)
- Borraremos todas las instalaciones locales al final para evitar problemas de quota en el futuro
  - ~~Entorno local (borrar el contenido de la carpeta local $HOME/.local)~~
  - Entorno venv (borrar toda la carpeta)
  - ~~Entorno conda~~ ~~conda remove *nombredelentorno*~~

Actividad 1.4: Actualización de TF

- Instrucciones detalladas venv

```
module load python cesga/system python/3.10.10
python3 -m venv $STORE/mypython
source $STORE/mypython/bin/actívate
which python
pip install tensorflow[and-cuda]
```

Comprobamos la instalación

```
compute –gpu
cd $STORE/mypython/bin
source ./activate
python3 -c "import tensorflow as tf; print(tf.config.list_physical_devices('GPU'))"
```

Actividad 1.4: Actualización de Pytorch

- Instrucciones detalladas venv

  Debemos estar todavía en el nodo de cómputo con GPU

  pip install torch

  Comprobamos la instalación

  python3 -c "import torch; print(torch.cuda.device_count())"

Sistema de colas de FT3

- El acceso el FT3 se realizar a través de un sistema de colas basado en SLURM
  - https://slurm.schedmd.com
  - http://portalusuarios.cesga.es
- El portaldeusuarios del CESGA nos permite acceder a
  - Alguna información del sistema de colas
    - Secciones trabajos e información
  - También podemos hacer peticiones especiales de recursos (Sección solicitudes)
    - Almacenamiento y recursos
  - Soporte
    - Tickets (jira)
    - Consultas
    - Teléfono

Sistema de colas de FT3

- El FT3 está estructurado en
  - Nodos de front-end, a los que nos conectamos en primera instancia
    - No aptos para computación. Tampoco para compilación
  - Nodos de computación, a los que enviamos los trabajos computacionales
  - El almacenamiento, que puede ser local o distribuido
- Manejamos varias abstracciones
  - Nodos
    - Estructurados en particiones (conjuntos de nodos)
    - Trabajos (Jobs)
  - Recursos a solicitar
    - CPU: Sockets y cores. En número
    - **Memoria principal/RAM. En capacidad (GB)**
    - GPUs
    - **Tiempo máximo de computación**
    - …

Particiones

- Son conjuntos de nodos similares a los que se les aplica las mismas restricciones
  - Restricciones: recursos del trabajo, duración máxima
  - Un nodo puede estar en varias particiones

```
[ulcesdac@login210-19 ~]$ scontrol show partition short
PartitionName=short
   AllowGroups=ALL AllowAccounts=ALL AllowQos=short,clk_short,class_a,class_b,class_c,special
   AllocNodes=ALL Default=YES QoS=N/A
   DefaultTime=NONE DisableRootJobs=YES ExclusiveUser=NO GraceTime=0 Hidden=NO
   MaxNodes=UNLIMITED MaxTime=06:00:00 MinNodes=0 LLN=NO MaxCPUsPerNode=UNLIMITED
   Nodes=ilk-[1-256],a100-[1-66],smp-[1-16],optane,clk-[2-39,42-77,101-120]
   PriorityJobFactor=100 PriorityTier=100 RootOnly=NO ReqResv=NO OverSubscribe=NO
   OverTimeLimit=NONE PreemptMode=OFF
   State=UP TotalCPUs=26208 TotalNodes=433 SelectTypeParameters=NONE
   JobDefaults=(null)
   DefMemPerNode=UNLIMITED MaxMemPerNode=UNLIMITED
```

Sistema de colas del FT3

- Principales particiones:
  - La mayoría de los (336) nodos está en short, medium, long, ondemand y requeue
    - ilk: 256 nodos con 64 cores y 246GB de RAM dispoble
    - clk: 74 nodos (del anterior FT2) con 48 cores y 180GB de memoria
    - smp: 16 nodos con 64 cores y 2011GB de RAM disponible
    - a100: 64 nodos con 64 cores, 246GB de RAM disponible y 2 GPU A100
  - Partición viz con 10 nodos con 64 cores y 246GB de RAM disponible y 1 GPU T4 destinados a usos interactivos (comando compute)
  - 6 nodos para escritorios remotos

Sistema de colas del FT3

- Particiones short, medium, long, ondemand se diferencian en:
  - Prioridad: Los trabajos cortos tienen prioridad sobre los más largos
  - Duración máxima de un trabajo:
    - Short: 06:00:00
    - Medium: 3-00:00:00
    - Long: 7-00:00:00
    - Ondemand: 42-00:00:00 (solo disponible por solicitud)
  - Si no se piden GPUs los trabajos se asignan por defecto a los nodos ilk

Sistema de colas del FT3

- Por defecto, los nodos asignados suelen ser compartidos con otros usuarios
- Se pueden pedir nodos en exclusiva con el flag –exclusive
- La QoS (quality of service) impone restricciones adicionales a las de la partición
  - Consecuencia práctica: Cuanto más ajustemos nuestra solicitud de hardware, más prioridad tendrán nuestros trabajos
  - Normalmente la qos se asigna automáticamente en base a los recursos solicitudes
  - Se puede solicitar una diferente usando –qos *nombreqos*
    - Siempre que la petición se ajuste a los límites del qos solicitado
  - El comando batchlim proporciona mucha información práctica

- **GrpTRES**: Es el número máximo de recursos que pueden usar por todos los trabajos que usen esa QOS.
- **MaxTRES**: Es el número máximo de recursos que pueden pedir al enviar un trabajo.
- **MaxWall**: Es el tiempo máximo que se puede pedir a enviar un trabajo.
- **MaxJobsPU**: Número máximo de trabajos en ejecución por un usuario de forma simultánea.
- **MaxTRESPU**: Máximo número de recursos utilizados de forma simultánea por un usuario entre todos sus trabajos en ejecución.
- **MaxSubmit**: Número máximo de trabajos en cola por un usuario de forma simultánea.

Name	Priority	GrpTRES	MaxTRES	MaxWall	MaxJobsPU	MaxTRESPU	MaxSubmit	
short	50		cpu=2048		30	cpu=2048	100	
medium	40		cpu=2048		30	cpu=2048	100	
long	30	cpu=4096	cpu=2048		5	cpu=2048	10	
requeue	20		cpu=2048		5	cpu=2048	10	
viz	50				2	cpu=64, gres/gpu=1	2	
ondemand	10	cpu=2048	cpu=1024		2	cpu=1024	10	Recursos especialess
special	30		cpu=16384		2	cpu=16384	10	
data	50				2	cpu=64	2	
class_a	200		cpu=4096	3-00:00:00	40	cpu=8192	50	RES
class_b	40		cpu=4096	2-00:00:00	3	cpu=4096	15	
class_c	10		cpu=4096	1-00:00:00	1	cpu=4096	5	

Sistema de colas del FT3: QoS

Sistema de colas del FT3: QoS

```
ulcesdac@login210-19 ~]$ sacctmgr show qos short
      Name   Priority  GraceTime    Preempt   PreemptExemptTime PreemptMode                                    Flags UsageThres UsageFactor       GrpTRES   GrpTRESMins Grp
TRESRunMin GrpJobs GrpSubmit     GrpWall       MaxTRES MaxTRESPerNode   MaxTRESMins     MaxWall     MaxTRESPU MaxJobsPU MaxSubmitPU     MaxTRESPA MaxJobsPA MaxSubmitPA
  MinTRES
---------- ---------- ---------- ---------- ------------------ ----------- ------------------------------------ ---------- ----------- ------------- ------------- ---
---------- ------- --------- ----------- ------------- ------------- ------------- ----------- ------------- --------- ----------- ------------- --------- ----------- ---
---------
     short         50   00:00:00                                 cluster                              DenyOnLimit             1.000000
                                      cpu=2048                                                    cpu=2048        50         100
```

Sistema de colas del FT3: Comandos

- sbatch: Se utiliza para enviar trabajos por lotes. El comando queda encolado hasta que se ejecuta.
- salloc: Es una versión online de sbatch, es decir, el comando se queda esperando hasta que el trabajo se encola, se ejecuta y termina
  - Ejecutado en cualquier contexto produce una reserva de recursos nuevas
- srun: Similar a salloc pero:
  - Cuando se ejecuta dentro de un sbatch hereda los recursos pedidos por sbatch, con lo que se tiene que limitar a esa reserva. No genera una reserva nueva de recursos
  - Si se ejecuta sin que haya una reserva de recursos previa, la genera por él mismo

Sistema de colas del FT3: Comandos

- sinfo: Proporciona información sobre el estado de ocupación de las particiones
- squeue –u *miusuario*: Nos dice cuál es el estado de los trabajos de un ususario
- scancel *jobid*: Cancela un trabajo individual
- scancel –u *miusuario*: Cancela todos los trabajos de un usuario

Sistema de colas del FT3: Información complementaria

- Slurm cheat sheet: https://slurm.schedmd.com/pdfs/summary.pdf
- Taller avanzado del FT3 (parte 1) en portalusuarios.cesga.es (slides 35-final (72)) https://portalusuarios.cesga.es/layout/download/taller_ft3_avanzado_sesion1.pdf
- Directorio /opt/cesga/job-scripts-examples

```
[ulcesdac@login210-19 ~]$ ls /opt/cesga/job-scripts-examples
clDeviceQuery.cpp       dot.py                          matmat.F                                NVIDIAk80_Job.sh          run_snakemake.sh          task.sh
cluster.json            fftw_test.F                     matplotlib                              old                       saga_example_FT2.py       TensorFlow
compileCUDA.sh          g16                             matrix_inv                              omphello.c                sagemath                  test.ipynb
compile_deviceQuery.sh  GNUParallel.sh                  mem-dot                                 omphello.f                Simple_MPI_Job.sh         testlapack.cpp
compileMPIOpenMP.sh     help_fortran_find_core_id.c     monitoring                              openfoam                  simple_multiprog.config   test.snakefile
compileMPI.sh           hybrid.c                        MPIOpenMP_Job_on_exclusive_nodes.sh     pi3f90.f90                Simple_Multiprog_Job.sh   torun_under_saga.sh
compileOpenMP.sh        hybrid.f90                      MPIOpenMP_Job_on_shared_nodes.sh        R                         Simple_OpenMP_Job.sh      Trivial_Serial_Job.sh
dask-jobqueue.py        Job_Array.sh                    multiprog.config                        runGP.sh                  singularity               udocker
dask-mpi.py             job_signal_timeout.sh           Multiprog_Job.sh                        run_jupyter_notebook.sh   slurm                     wine
deviceQuery.cpp         JugandoConRedesNeuronales.tar   mysecond.c                              run-notebook-cesga2020.sh snakemake_job.sh
```

Actividad 1.5: Demo Slurm

- Conéctate al FT3 (recuerda activar previamente el VPN si es necesario)
- En el Front-end: ejecuta el comando sinfo para ver el estado de las particiones
- Usa el comando compute -–gpu para pedir un nodo interactivo con una GPU (T4)
  - Dentro del nodo ejecuta el comando hostname
  - Ejecutar el comando nvidia-smi para ver las características de la GPU asignada
  - Salgo de la sesión interactiva con el comando exit

Actividad 1.5: Demo Slurm

- De nuevo desde el front-end ejecuta el comando
  - srun -N 1 --time=00:01:00 --gres=gpu:a100 -c 32 --mem=4G nvidia-smi

- De nuevo desde el front-end ejecutar el comando
  - srun -N 1 --time=00:01:00 --gres=gpu:a100 -c 32 --mem=4G --pty bash
  - Dentro del nodo puedes ejecutar el comando nvidia-smi
- Ahora debes hacer lo mismo pero con sbatch