Istruzioni tecniche d'uso del cluster GPU DISI (aggiornamento Gennaio 2025)

Per l'utilizzo del cluster il primo passo è l'abilitazione dell'account istituzionale unibo.it all'accesso ai sistemi dipartimentali e al cluster stesso. In caso non si sia già abilitati si riceverà una e-mail di avvenuta abilitazione. Con le credenziali istituzionali si avrà accesso, anche in remoto, a tutte le macchine del laboratorio Ercolani. Nella e-mail si trova il link dedicato ai servizi informatici dipartimentali (https://disi.unibo.it/it/dipartimento/servizi-tecnici-e-amministrativi/servizi-informatici) e nella sezione Accesso remoto si trovano dettagli su tali macchine e su come accedervi. Inoltre è possibile accedere allo stesso modo alla macchina giano.cs.unibo.it da cui è possibile utilizzare lo schedulatore del cluster e in cui è necessario predisporre l'ambiente di esecuzione dei job in quanto sono presenti le versioni aggiornate di Python ed eventuali ulteriori librerie richieste.

La **quota utente** massima è ad oggi impostata a 400 MB. In caso di necessità di maggiore spazio è possibile ricorrere alla creazione di una propria directory in **/scratch.hpc/**, in cui i singoli file vengono cancellati se non acceduti negli ultimi 40 giorni (la directory **/public/** viene invece di norma cancellata ogni prima domenica del mese, mentre la directory **/public.hpc/** è in dismissione). La home utente è uno spazio di archiviazione condiviso tra le macchine, quindi l'ambiente di esecuzione e i file necessari all'elaborazione presenti nella macchina *giano.cs.unibo.it* da cui poi avviare il job che verrà eseguito nelle macchine dotate di GPU saranno visibili anche in tutte le altre macchine di laboratorio. Le directory **/scratch.hpc/** e **/public.hpc/** sono invece visibili esclusivamente dalla macchina *giano.cs.unibo.it*.

Nel cluster sono presenti due code di schedulazione:

- rtx2080: con nodi di elaborazione (CPU singola quad-core, RAM 44 GB) contenenti ognuno una scheda grafica Nvidia GeForce RTX 2080 Ti (GPU Turing TU102 con 4352 core, memoria 11 GB) pilotate con driver Nvidia v. 535 e librerie di computazione CUDA 11.8.
- **I40**: con nodi di elaborazione (CPU singola octa-core, RAM 64 GB) contenenti ognuno una scheda grafica Nvidia L40 (GPU Ada Lovelace AD102GL con 18176 core, memoria 48 GB) pilotate con driver Nvidia v. 535 e librerie di computazione CUDA 11.8.

Una possibile **impostazione del lavoro** è quella di creare nella macchina *giano* un virtual environment Python inserendo all'interno tutto ciò di cui si ha bisogno e utilizzando **pip** per l'installazione dei moduli necessari; ad esempio in caso di installazione di *pytorch* bisognerà utilizzare il comando **pip3 install torch --no-cache-dir --index-url** https://download.pytorch.org/whl/cu118 (rif. https://pytorch.org/).

N.B.: Il gestore di pacchetti pip utilizza per default una cache nello spazio utente, e la relativa quota potrebbe esaurirsi velocemente. Si consiglia quindi di includere sempre il parametro --no-cache-dir nel comando di installazione di moduli, e nel caso si debba cancellare una cache esistente di utilizzare il comando **pip3 cache purge**.

Il cluster utilizza uno schedulatore SLURM (https://slurm.schedmd.com/overview.html) per la distribuzione dei job. Per effettuare il submit di un job bisogna predisporre nella propria area di lavoro un file di script SLURM (ad es. script.sbatch) in cui inserire le direttive per la configurazione del job stesso. Dopo le direttive è possibile inserire comandi di script (ad es. BASH). Un esempio di script è il seguente:

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=nomejob
#SBATCH --mail-type=ALL
#SBATCH --mail-user=nome.cognome@unibo.it
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH -cpus-per-task=8
#SBATCH -mem=31G
#SBATCH --partition=nomepartition
#SBATCH --output=nomeoutput
#SBATCH --chdir=/scratch.hpc/nome.cognome
#SBATCH --gres=gpu:1
```

venv/bin/python3 test.py # per attivare il virtual environment python

Nell'esempio precedente la direttiva da riportare immutata è --gres=gpu:1 (ogni nodo di computazione ha un'unica GPU a disposizione e deve essere attivata per poterla utilizzare). Le altre possono essere personalizzate. Per la definizione di queste e altre direttive si rimanda alla documentazione di SLURM (https://slurm.schedmd.com/sbatch.html). Nell'esempio, dopo le direttive è stato invocato il programma. Il processo deve essere accodato dalla macchina giano.cs.unibo.it (accessibile via ssh) lanciando il comando sbatch nomescript (ad es. sbatch script.sbatch). Con le direttive specificate nell'esempio saranno inviate e-mail all'indirizzo specificato alla partenza del job, al termine dello stesso e in caso di errori. I risultati dell'elaborazione saranno presenti nel file nomeoutput come indicato nella direttiva.

L'esecuzione nelle macchine avviene all'interno dello stesso path relativo che, essendo condiviso, viene visto dalle macchine di laboratorio, dalla macchina *giano* e dai relativi nodi di elaborazione (ad eccezione delle directory /scratch.hpc/ e /public.hpc/ che non sono visibili dalle macchine di laboratorio).