

Criando o ambiente virtual

1) Carregar o módulo do anaconda

```
module load anaconda3/2024.02_sequana
```

2) Criar um ambiente virtual (na área do SCRATCH)

```
conda create --prefix $SCRATCH/conda-env/jupyter python=3.9
```

3) Ativar o ambiente virtual

```
source activate $SCRATCH/conda-env/jupyter
```

4) Instalar o jupyterlab (pode utilizar esse mesmo procedimento para instalar outras dependências)

```
pip install jupyterlab
```

5) Verificar o ip do nó de login:

Os ips dos nós de login, que são acessíveis através da conexão da VPN, possuem o prefixo 146.134.143 e com a seguinte terminação:

146.134.143.247 - sdumont17

146.134.143.248 - sdumont18

Então, ao executar o comando abaixo, verifique qual é o IP do nó que você está alocado.

```
ip address | grep 146.134.143
```

6) Iniciar o jupyter-lab

```
jupyter-lab --port=65100 --ip=0.0.0.0 --no-browser
```

... aí vai aparecer a url de acesso. Basta copiar e colar o browser do seu computador local, substituindo o hostname sdumont1[1-8] pelo IP que você achou no passo 6.

ATENÇÃO: O range da porta deve ficar entre **65000-65500**

Esse é só um caso de teste, para verificar o funcionamento. O correto é realizar a submissão através de um job/script, conforme abaixo.

Submetendo um job utilizando o jupyter

Também é possível fazer a submissão para um nó de computação, iniciar o jupyter lá e depois acessar através do seu browser local. Porém, para isso, é necessário fazer o tunelamento via ssh.

1) Script de submissão: jupyter.srm (**ATENÇÃO: DEVE ESTAR DENTRO DE UM DIRETÓRIO DA SUA ÁREA DE SCRATCH.** EX: \$SCRATCH/my-notebook).

```
=====
#!/bin/bash
#SBATCH --ntasks=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time 00:20:00
#SBATCH --partition=sequana_gpu_dev
#SBATCH --job-name jupyter-notebook
#SBATCH --output jupyter-notebook-%J.log

# get tunneling info
XDG_RUNTIME_DIR=""
node=$(hostname -s)
user=$(whoami)
port=65100

# carregar o modulo do anaconda
module load anaconda3/2024.02_sequana

#ativar o virtual env
source activate $SCRATCH/conda-env/jupyter

#acessar o diretorio do notebook (deve estar dentro da area do
SCRATCH)
cd $SCRATCH/my-notebook

# Executar o Jupyter
jupyter notebook --no-browser --port=${port} --ip=0.0.0.0
=====
```

2) Submeter o script

```
$ sbatch jupyter.srm
Submitted batch job XYZ
```

3) Verificar em qual nó o job está sendo executado:

```
squeue --me
JOBID PARTITION      NAME      USER      ST      TIME  NODES NODELIST(REASON)
XYZ    sequana_gpu_de jupyter- andrercs  R       0:13      1 sdumont8XXX <---
```

4) Verificar o arquivo de log se o jupyter está executando:

```
cat jupyter-notebook-XYZ.log
..
To access the notebook, open this file in a browser:
file:///scratch/<PRJ>/<USER>/local/share/jupyter/runtime/nbserver-18677-open.html
Or copy and paste one of these URLs:
http://sdumont3XXX:65100/?token=4606c10359515c039ce45c88968fc752d80ba6abec791880
or http://127.0.0.1:8559/?token=4606c10359515c039ce45c88968fc752d80ba6abec791880
```

5) Verificar o IP do nó de login que está conectado, a partir de onde submeteu o job:

Os ips dos nós de login, que são acessíveis através da conexão da VPN, possuem o prefixo 146.134.143 e com a seguinte terminação:

```
146.134.143.247 - sdumont17
146.134.143.248 - sdumont18
```

Então, ao executar o comando abaixo, verifique qual é o ip do nó que você está alocado.

```
$ ip address | grep 146.134.143
    inet 146.134.143.249/32 scope global lo
    inet 146.134.143.248/28 brd 146.134.143.255 scope global bond0
```

No meu caso, estou no sdumont18 - 146.134.143.248

6) Criar o tunel ssh para poder acessar o notebook a partir da máquina local:

No seu computador, abra um novo terminal e crie o túnel ssh.

Atente-se pois o túnel é criado apontando para o nó computacional que foi alocado pelo SLURM, onde o jupyter está em execução.

O último IP refere-se ao IP do nó de login a partir de onde submeteu o job

```
$ ssh -L65100:sdumont8XXX:65100 <meu.login>@146.134.143.248
```

7) Acessar o notebook utilizando a url disponibilizada pelo Jupyter, copiando no seu navegador:

127.0.0.1:65100/

No meu exemplo, coleí a url <http://127.0.0.1:8559/?token=4606c10359515c039ce45c88968fc752d80ba6abec791880> (que aparece no arquivo de log jupyter-notebook-XYZ.log) no navegador da minha máquina local

Lembrando que o tempo de execução da fila sequana_gpu_dev é de 20 min.