

Python3 Job 使用說明

OscarLi@nchc.narl.org.tw

以下示範如何在台灣杉一號高速計算主機，透過 Anaconda3 來安裝與執行 TensorFlow 程式。

1. 首先請建立一個專案子目錄。

```
$ [username@clogin1 ~]$ mkdir tf-job  
$ [username@clogin1 ~]$ cd tf-job
```

2. 確定您有載入正確的環境變數，以便於使用這些軟體時，有正確的路徑。

```
$ [username@clogin1 tf-job]$ module load anaconda3/5.1.10
```

3. 建立您自己家目錄下的 virtualenv。

```
$conda create --prefix /home/username/condapy3 python=3 anaconda
```

[中略]

zipp:	0.6.0-py_0
zlib:	1.2.11-h7b6447c_3
zstd:	1.3.7-h0b5b093_0

```
Proceed ([y]/n)? y
```

[中略]

4. 查看已建立的虛擬環境。

```
[username@clogin1 test_job]$ conda env list
```

```
# conda environments:
```

```
#
```

```
base * /home/username/condapy3  
* /pkg/anaconda3-5.1.0
```

5. 啟動與進入虛擬環境。

```
[username@clogin1 tf-job]$ source activate /home/username/condapy3  
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$
```

6. 安裝 CPU 版本的 TensorFlow 模組。

```
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$ conda install  
tensorflow=1.8.0 -y
```

7. 以下是試跑一個簡易的 TensorFlow 程式計算，請參考操作歷程。

```
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$ vi tf-cpu.py  
import sys  
import numpy as np  
import tensorflow as tf  
from datetime import datetime  
  
device_name="/cpu:0"  
  
shape=(int(10000),int(10000))  
  
with tf.device(device_name):  
    random_matrix = tf.random_uniform(shape=shape, minval=0, maxval=1)  
    dot_operation = tf.matmul(random_matrix, tf.transpose(random_matrix))  
    sum_operation = tf.reduce_sum(dot_operation)  
  
    startTime = datetime.now()  
with tf.Session(config=tf.ConfigProto(log_device_placement=True)) as session:  
    result = session.run(sum_operation)  
  
print(result)  
  
print("\n" * 2)  
print("Shape:", shape, "Device:", device_name)  
print("Time taken:", datetime.now() - startTime)  
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$  
  
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$ which python  
~/condapy3/bin/python  
  
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$ python tf-cpu.py  
[中略]  
Shape: (10000, 10000) Device: /cpu:0  
Time taken: 0:00:00.958718
```

8.如果您在 `clogin1` 或 `clogin2` 執行上述的工作都正確無誤。必須要將需要長時間計算的工作透過 PBS 排程系統，以批次的方式向叢集後端 CPU 計算節點群，提交計算工作。請先準備好 job script，範例如下：

```
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$ vi pbs_tf_job.sh
#####
###          TensorFlow job script example          ###
#####
#!/bin/bash
#PBS -l select=1:ncpus=40
#PBS -N tensorflow
#PBS -q ctest
#PBS -P TRI654321
#PBS -j eo

module purge
module load anaconda3/5.1.10

source activate /home/username/condapy3
python tf-cpu.py
source deactivate
```

9.編輯寫好 PBS job script，利用 `qsub` 指令將 job 派送到計算節點計算。

```
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$ qsub pbs_tf_job.sh
```

10.離開虛擬環境。

```
(/home/username/condapy3) [username@clogin1 tf-job]$ source deactivate
[username@clogin1 ~]$
```

(完)