

Jupyter Lab 利用の手引き

Table of contents

1. Jupyter Lab機能の使いかた	3
1.1. Jupyter Labの起動	3
1.2. Jupyter Labの終了	3
1.3. データの保存場所	3
1.4. PyPIからのモジュールのインストール	3
1.5. カスタムカーネルの作成	4
改訂履歴	5

1. Jupyter Lab機能の使いかた

Jupyter Labは、ブラウザ経由でPythonの対話的な利用、Linuxのコンソール、簡易的なファイル操作、Pythonプログラムのグラフィカルな出力などを実現するWebアプリケーションです。

TSUBAME3では、[TSUBAMEポータル](#)経由で、Jupyter Labを直接使用することができ、GPUを備える強力な計算ノードを手元のラップトップ上のJupyter Labと同じ感覚で使用することができます。

1.1. Jupyter Labの起動

TSUBAMEポータル上で専用のジョブを作成して、Jupyter Labを起動できます。

詳細は[TSUBAMEポータル利用の手引き](#)を参照してください。

Tips

起動済みのJupyter Labは、TSUBAMEポータルのWebサービス利用画面で該当するジョブの[表示]ボタンを選択することで、表示できます。

1.2. Jupyter Labの終了

Jupyter Lab内のFileメニューからShut Downを選択してください。

Logoutを選択した場合、ジョブが実行されたままになり、課金され続けます。

TSUBAMEポータルのWebサービス利用画面でも終了させることができます。

1.3. データの保存場所

Jupyter Labから見えるディレクトリは、ユーザのホームディレクトリの中の `t3workspace` ディレクトリのみになります。

また、JupyterのWebインタフェース経由でアップロードできるファイルのサイズは制限されていますので、大きなデータファイルをアップロードしたい場合は、コンソールから `wget` 等のコマンドを利用するか、`sftp`, `rsync`等の利用を検討してください。

1.4. PyPIからのモジュールのインストール

Jupyter Lab内のPython環境は、コマンドラインから起動するPython環境とは別に管理されています。

モジュールのインストール、更新はJupyter Lab内のコンソールで以下のコマンドで行うことができます。

```
python3 -m pip install --user モジュール名
```

ユーザディレクトリにインストールするため、`--user` が必要です。アップグレード時には `-U` オプションを付加してください。

また、上記のコマンドは、Notebook上でも1行目に `%%bash` と記載したセルで実行することができます。

```
%%bash
python3 -m pip install --user モジュール名
```

Warning

モジュールのインストール後は、カーネル(Python環境)のリスタートが必要です。

KernelメニューのRestart Kernelを選択(もしくは `0` を2回タイプ)してください。

1.5. カスタムカーネルの作成

GPUを利用する一部のPythonモジュールのインストール時には、CUDAなどのソフトウェアがロードされているカーネル(Python環境)を定義する必要があります。CUDA, CuDNN, NCCLを利用するCuPyを例に、カスタムカーネルの作成方法を示します。

Info

このセクションの説明およびコマンドを記載したNotebookがありますので、ご利用ください。

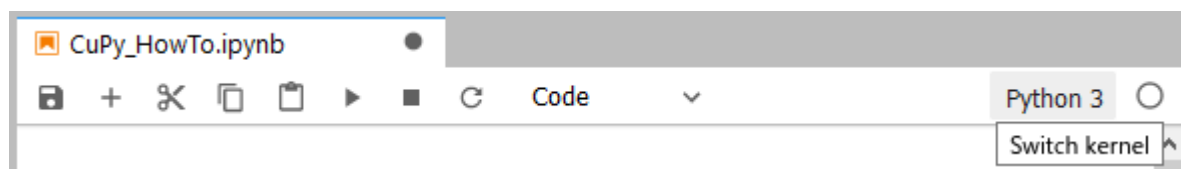
TSUBAME3のJupyter Labでは `t3jpttools` モジュールが提供されており、以下の関数が利用可能です。

- `create_kernel`(カーネル名, モジュールのリスト): 新しいカスタムカーネルを定義する
- `list_kernel`(): カーネルの一覧を表示する
- `delete_kernel`(カーネル名): カスタムカーネルを削除する

例えば、CUDA 10.2.89、CuDNN 7.6、NCCL 2.4.2を利用するカスタムカーネルを作成する場合は、以下のコマンドをNotebookのセルで実行します。

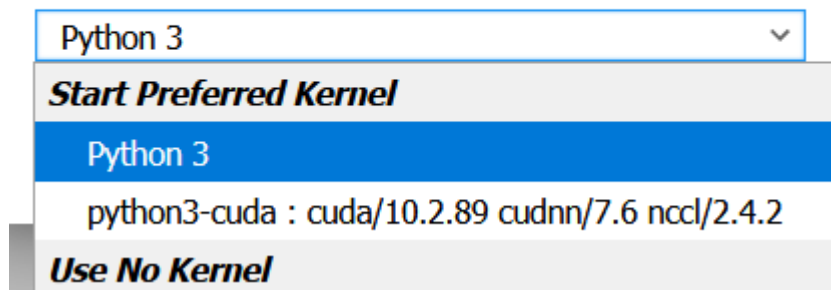
```
from t3jpttools import create_kernel
create_kernel('python3-cuda', 'cuda/10.2.89 cudnn/7.6 nccl/2.4.2')
```

`create_kernel()`実行後、数十秒待つと、画面右上より作成したカーネルを選択できるようになります。



Select Kernel

Select kernel for: "CuPy_HowTo.ipynb"



カーネルを切り替えることにより、CuPyなどのCUDA等に依存するモジュールのインストール・実行ができるようになります。

Info

Notebookで使用するPythonバージョンを変更する場合は、`create_kernel()`実行時に `jupyterlab/2.1.0-py383` を指定します。これは、Python 3.8.3を含んだJupyterモジュールであり、予め `module avail` コマンドにて存在をご確認ください。

実行例: `create_kernel('test', 'jupyterlab/2.1.0-py383 cuda/10.2.89 cudnn/7.6 nccl/2.4.2')`

改訂履歴

改定日付	内容
2020/04/20	新規作成
2020/06/29	Pythonバージョンの変更方法を追記