



Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Atelier ComputeOps : conteneurs pour le calcul intensif

Cécile Cavet et les membres de ComputeOps

Projets CNRS/IN2P3¹ R&D transverses
"Calcul&Données" : Master Projet DecaLog
13 Novembre 2018

¹Institut National de Physique Nucléaire et des Particules



Contexte

Contexte

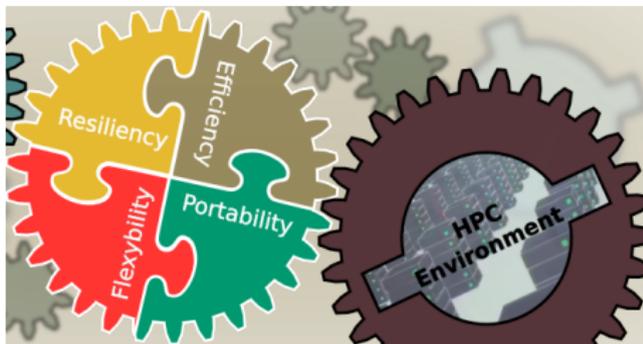
Réalisations

WIP

Événements

Calcul intensif :

- Portabilité : capacité de déplacer les applications d'un système à l'autre.
- Répétabilité : même environnement et mêmes résultats.





Contexte

Contexte

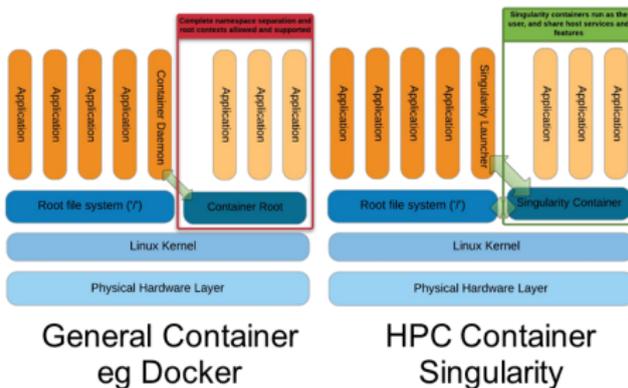
Réalisations

WIP

Événements

Calcul intensif : contraintes sur les conteneurs

- Sécurité : sans élévation des privilèges.
- Transparent aux I/O : openMPI, GPU, Infiniband...





Choix de solution

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Singularity :

- Compatibilité avec Docker et DockerHub.
- Facile à installer : sur la grille, les clusters de calcul locaux et le CC-IN2P3.





Master Projet DecaLog

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Projet ComputeOps :

- Durée : 3 ans à partir de 2018.
- Membres : 5 laboratoires IN2P3 (APC, LPNHE/ISCD, LLR, IPHC, LAL) ➔ 1,5 ETP.
- Partenaires :
 - LabEx P2IO : Projet Accelerated Computing for Physics (ACP).
 - Aristote : GENCI, IDRIS.
 - Laboratoires/Instituts : IAS, EC Nantes, INRA, CNES.
 - Depuis les JI : CC-IN2P3 (équipe C3).

Réalisations

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Ecole informatique IN2P3 2018 :

Conteneurs en production ➔ 4 – 8 juin au CC-IN2P3.

- 38 participants.
- Tutoriels référencés dans MaitresNageurs/EnBarque. 



Rechercher ok

Le CNRS | Annuaires | Mots-Clefs CNRS | Autres sites

Institut national de physique nucléaire et de physique des particules
Centre national de la recherche scientifique

Accueil IN2P3

Accueil Formation

Détecteurs et accélérateurs

Ecoles de Physique

Formation

Accueil Formation > Ecole d'informatique > Orchestration de clusters de conteneurs sur les infrastructures en production

Ecole IN2P3 d'informatique 2017 : "Conteneurs en production"

Site web de l'école : <https://indico.in2p3.fr/event/17124/>

Affiche de l'école

Planning des cours

Fiche d'inscription

Supports de cours



Réalisations

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Diffusion : CHEP 2018

Poster et acte de conférence (en préparation).

ComputeOps: container for High Performance Computing

C. Cavet and the ComputeOps project members
ccavet@apc.in2p3.fr



Abstract

The High Performance Computing (HPC) domain aims to optimize code in order to use the last multicore and parallel technologies including specific processor instructions. In this computing framework, portability and reproducibility are key concepts. A way to handle these requirements is to use Linux containers. These "light virtual machines" allow to encapsulate applications within its environment in Linux processes. Containers has been recently rediscovered due to their abilities to provide both multi-infrastructure environment for developers and system administrators and reproducibility due to image building file. Two container solutions are emerging: **Docker** for micro-services and **Singularity** for computing applications. We present here the **ComputeOps** project which has the goal to study the benefit of containers for HPC applications.

HPC

► Keywords:

- parallelisation methods.
- specific libraries.
- portability and reproducibility.



@Li Xiang—Xinhua News Agency/Getty Images.

French partners

► ComputeOps partners:

- Aristotle: GENCI, IDRIS (french supercomputers).
- Ecole Centrale Nantes.
- P2IO ACP.

Goal



The **ComputeOps** project [2] has the goal to study and provide:

- container technology interoperability.
- portability on various architectures and infrastructures.
- repeatability of computing.
- good practices for writing recipes.

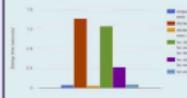
Pilot applications

- **GALOP**: ray tracing.
- **MEM**: analyse application running on multi-GPUs to study Higgs boson properties.
- **TensorFlow**: machine learning applications using TensorFlow.

Solution comparison

Several container solutions are under evaluation:

- Singularity.
- Shifter.
- uDocker.
- CharlieCloud.



Comparison of performance [1]: elapsed time (in s) for running hello world.

Singularity



► Advantages:

- Compatibility: Docker image.
- Security: unprivileged mode.
- I/O: transparent => compatibility with MPI processes and X11.
- Scheduler: native integration.
- GPU: easy GPU integration in containers.

Singularity Hub

► ComputeOps SHub [3]:

A Singularity private Hub for Research al-



Réalisations

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Tutoriels

- Docker/Singularity au FACe (janvier 2018).
- Singularity à SBAC-PAD (sept. 2018).
- Piscine Singularity aux JI.

SBAC-PAD 2018
30th International Symposium on Computer
Architecture and High Performance Computing
September 24-27, 2018
École Normale Supérieure, Lyon, France





Réalisations

Contexte

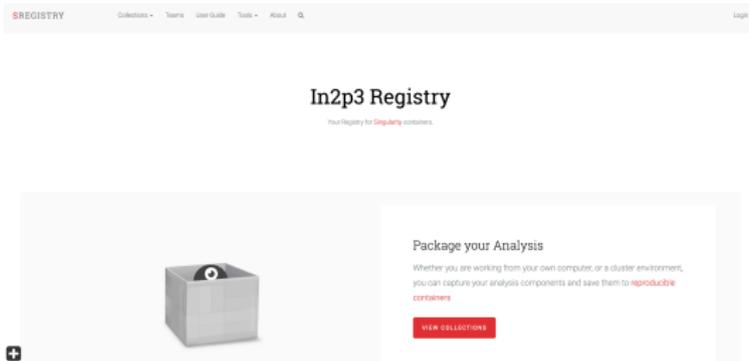
Réalisations

WIP

Événements

Outils pour la communauté :

- SingularityHub : images Singularity, authentification via GitLab/GitHub ➔ discussion avec le CC-IN2P3.
- CI avec Singularity : Singularity-in-Docker, artefact de GitLab-CI, sregistry-client.





Travail en cours

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Conteneurisation d'applications pilotes :

- **SMILEI**: an open-source, particle-in-cell code.
- **CMS MEM**: Matrix Element Method for the analysis of the Higgs boson production
- **HAhRD**: machine-learning application based on Tensorflow.
- **electron_capture**: electron capture rates.
- **TensorFlow**: machine learning applications using TensorFlow library.
- **LDC**: simulation pipeline for scientific challenges of the LISA spatial mission.
- **Geant4** simulation for direct Dark-Matter detection



Travail en cours

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Portage sur P2IO ACP :

- plateforme de R&D avec GPU.





Événements

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Atelier du 13 Novembre à l'APC :

<https://indico.in2p3.fr/event/18077/>

10:00	→ 10:15	Introduction Orateur: Cécile Cavet (APC)	⌚ 15m	🔗
10:15	→ 11:15	Singularity v3 ¹ Orateur: M. Cédric Clerget	⌚ 1h	🔗
11:15	→ 11:45	Pause café	⌚ 30m	
11:45	→ 12:30	Charliecloud Orateur: Violaine Louvet (CNRS)	⌚ 45m	🔗
12:30	→ 13:00	Registre Singularity amélioré Orateurs: Alexandre Delnie Garcia (INRA / CRISP), Martin Souchal (APC)	⌚ 30m	🔗
13:00	→ 13:45	Déjeuner	⌚ 45m	
13:45	→ 14:15	Docker+Spack Orateur: Hadrien Grasland (UMR 8607 - LAL)	⌚ 30m	🔗
14:15	→ 14:45	CI avec Singularity Orateur: Martin Souchal (APC)	⌚ 30m	🔗
14:45	→ 15:15	Conteneurisation pour le calcul accéléré Orateur: Andrea Saritrana (CNRS)	⌚ 30m	🔗
15:15	→ 16:15	Discussion	⌚ 1h	🔗



Evénements

Contexte

Réalisations

WIP

Evénements

Prochains actions :

- Atelier ComputeOps au printemps ?
- Journée RI3 sur les thématiques de l'école informatique de l'IN2P3.
- Journée du Groupe Calcul sur les conteneurs pour le HPC.





Plus d'informations

Contexte

Réalisations

WIP

Événements

Liens et contacts :

- Site Web : <http://www.apc.univ-paris7.fr/FACe/computeops>
- Wiki : <https://gitlab.in2p3.fr/CodeursIntensifs/DecaLog/wikis/ComputeOps>
- Liste : computeops-l@in2p3.fr

The screenshot shows a web interface for the DecaLog Wiki. On the left is a sidebar with navigation options: Project, Repository, Issues (3), Merge Requests (0), CI / CD, and Operations. The main content area shows the breadcrumb path: CodeursIntensifs > DecaLog > Wiki > Computeops. The page title is "Computeops" with buttons for "New page", "Page history", and "Edit". Below the title, it says "Last edited by Cecile Cavet 2 weeks ago". The main heading is "ComputeOps : calcul intensif en conteneurs". The text below explains that the "DevOps" movement helps developers deliver code with container images, making deployment easier and more consistent, and notes that Docker is the emblematic logo of this movement.