CCIN2P3-CNES : Calcul

cnes
CENTRE NATIONAL D'ÉTUDES SPATIALES

HPC usecases in CNES

Des développements

- Session visu (VNC, Fluxbox) + IDE
  - Quelques soucis de perfs en visu 3D
- Environnement logiciel et compilateur complet (modules lmod)
  - Gestion des piles logicielles faites manuellement, cronophage
- Jobs interactifs
- Jupyter notebook (voir après)

Du HTC

- Couche orchestration simple (script batch ou Python)
- Job arrays souvent, mpi4py parfois
- Parfois agressif envers le Scheduler PBS. On oriente vers GNU-parallel ou Dask
- Souvent intensif en IO :
  - Petits fichiers ou random access
  - Audit de code
  - Utilisation d'espace local
- Simulations paramétriques (dynamique du vol par exemple), Traitement d'image…

HPC usecases in CNES

Modélisation, CFD

- Logiciels spécifiques, parfois sous licence
- MPI/OpenMP : Lancés via les logiciels, peu utilisés sinon.

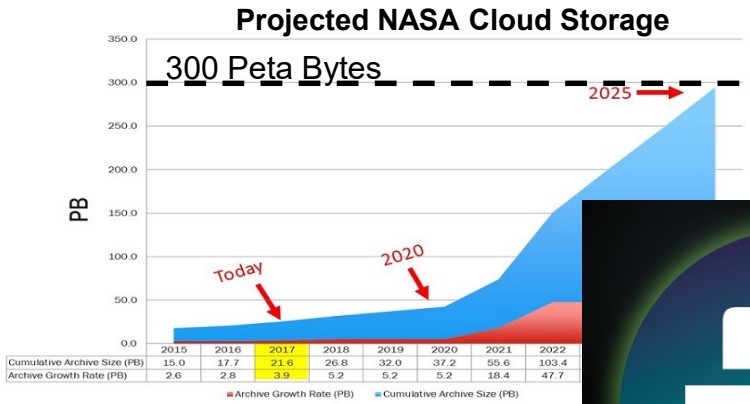
Analyse interactive, Big Data

- Voir Pangeo (après)
- Tests sur Spark également.

Chaine de traitement

- Orchestration lourde :
  - logiciels maisons :
    - gèrent jobs uniques ou job array
    - Saturent facilement le Scheduler PBS
    - Utilisent GPFS pour communiquer par fichier
  - Ou scripts complexes utilisant mpi4py, Dask.
- Généralement plutôt orienté HTC, mais avec des profils de jobs très variés.
- Campagne de retraitement, nœuds dédiés.

Pangeo community goals and motivation



Problems

- Data volume crisis in (geo)sciences
- Software multiplication, non reproducibility
- Many copies of the same datasets
- Local vs HPC vs Cloud
- Technology gap: industry vs academia

Mission

To cultivate an ecosystem in wh
the next generation of open-sou
analysis tools for the geosciences
can be developed, distributed, and
sustained.

als/vision

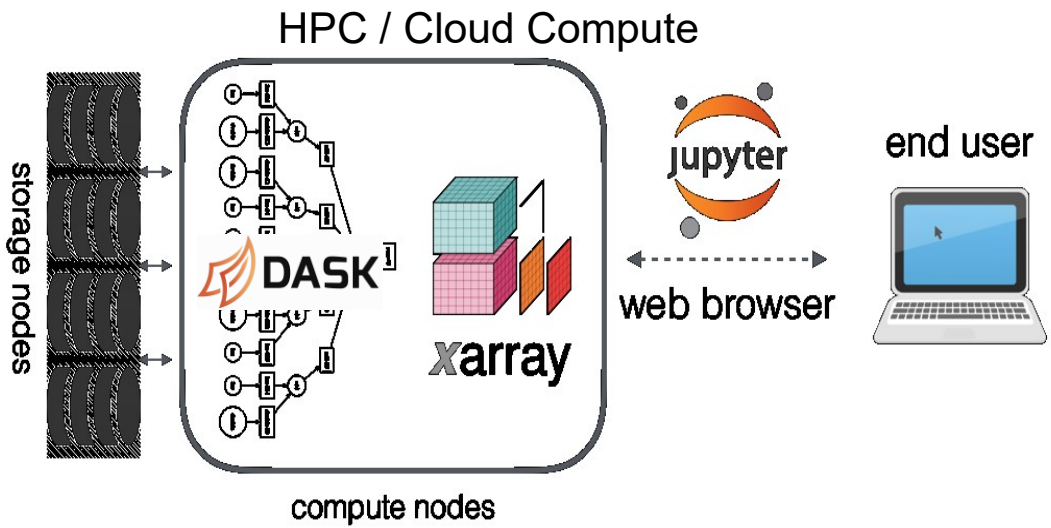
oster collaboration around the open source Scientific Python ecosystem:
  - open and collaborative development
  - Welcoming and inclusive culture
- Support the development with domain-specific (geo)science and transverse packages
- Improve scalability of these tools to handle gigabytes to petabytescale datasets

EARTHCUBE
TRANSFORMING GEOSCIENCES RESEARCH

NSF

Pangeo ecosystem

- Set of tools that will facilitate science at all scales
- Platform agnostic
- The core of the Pangeo ecosystem includes:
  - **Xarray** (data-model and toolkit for working with N-dimensional labeled arrays)
  - **Dask** (parallel computing)
  - **Jupyter** (interactive computing)
- Extensible: Series of 3rd party packages that build on top of core libraries
- Flexible: Individual components may be swapped in/out



Examples of 3rd party packages in the Pangeo Ecosystem:

- Data discovery
- Regridding and GIS
- Vector calculus
- Signal processing
- Thermodynamics

Pangeo diversity

BUILD YOUR OWN PANGEO

Storage Formats	HDF	OPeNDAP	Cloud Optimized COG/Zarr/Parquet/etc.
ND-Arrays	NumPy	DASK	More coming…
Data Models	xarray	Iris	pandas
Processing Mode	jupyter Interactive	Batch	Serverless
Compute Platform	HPC	Cloud Google Cloud Platform	Local

Pangeo vs state of the art

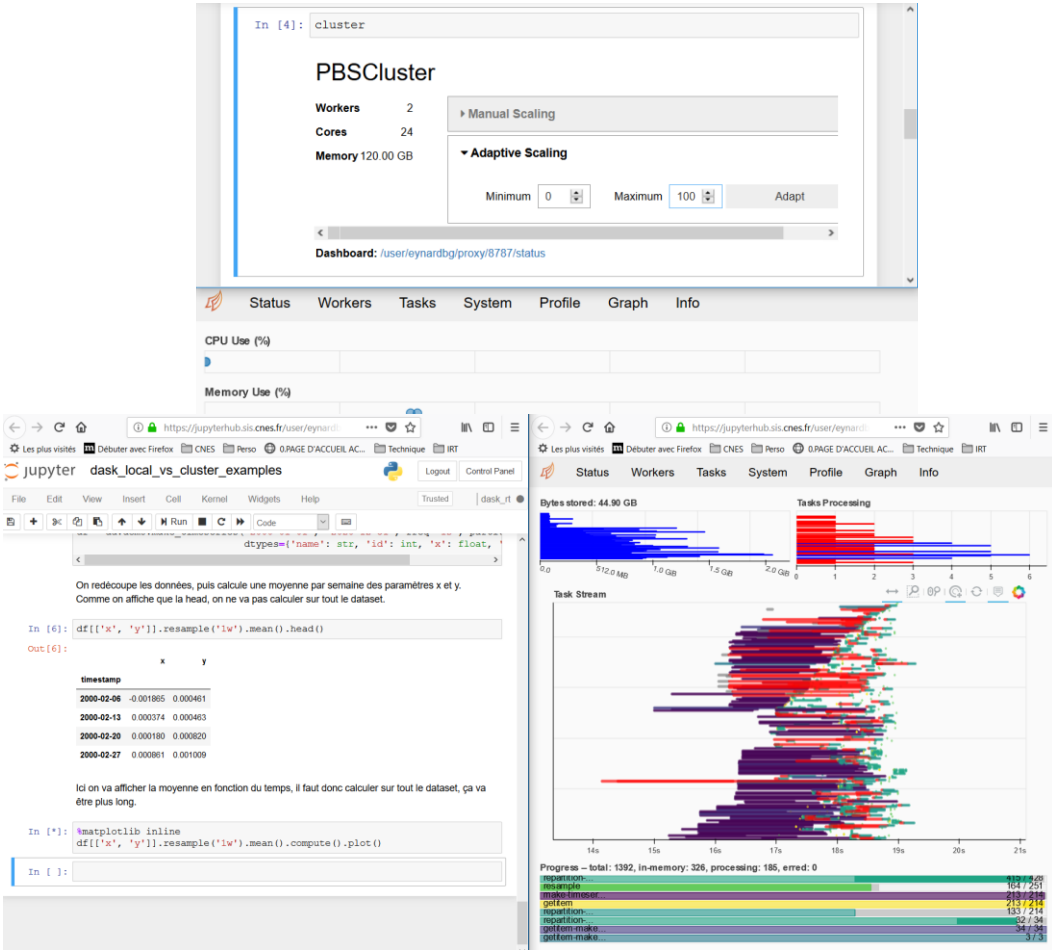
Spark	vs	DASK
Mature		Less Mature
Robust		Pretty strong
JVM/Python		Python only
Query optimized		Science optimized
Collections & Dataframes		Collections, DF, Arrays, Futures…
Python overhead		Python only
For big tabular data		For science data
Hadoop/Cloud/HPC		Hadoop/Cloud/HPC

I don't know much about Array DBs!!!

PANGEO	vs	y databases *(Rasdaman, SciDB…)*
		Laptop to cluster
		Serverless
		NetCDF/TIFF no ingestion
		Scales with Dask
		Python only
		Can build array db with Pangeo (Open data Cube)

Pangeo at CNES

- JupyterHub and notebooks for interactive computing
  - Hub on a VM with qsub access
  - Batchspawner, Wrapspawner
- dask.distributed: parallel workers across many HPC nodes
- Xarray for computational toolkit and I/O
- New tool for deploying dask clusters on HPC: **dask-jobqueue**
  - Start a cluster from a notebook
  - Interactive (or not) distributed computing
  - Auto scaling capabilities



Calcul et virtualisation

- Actuellement, VM basée sur VMWare, limitée à 4vcpus 16Go
  - Pas orientées traitement
  - Client du cluster HPC possible (annuaire utilisateur, client PBS, montage GPFS en NFS)
- Mais des réflexions sur Open Stack, Kubernetes. Une étude métier démarre cette année pour HPC 6è génération
- Calcul dans le cloud : des études, mais rien de réellement fait.