Centre de Calcul de l'Institut National de Physique Nucléaire et de Physique des Particules

Conteneurs @CC-IN2P3

Atelier ComputeOps v3
19/09/2019
Sébastien Gadrat

Activités autour des conteneurs

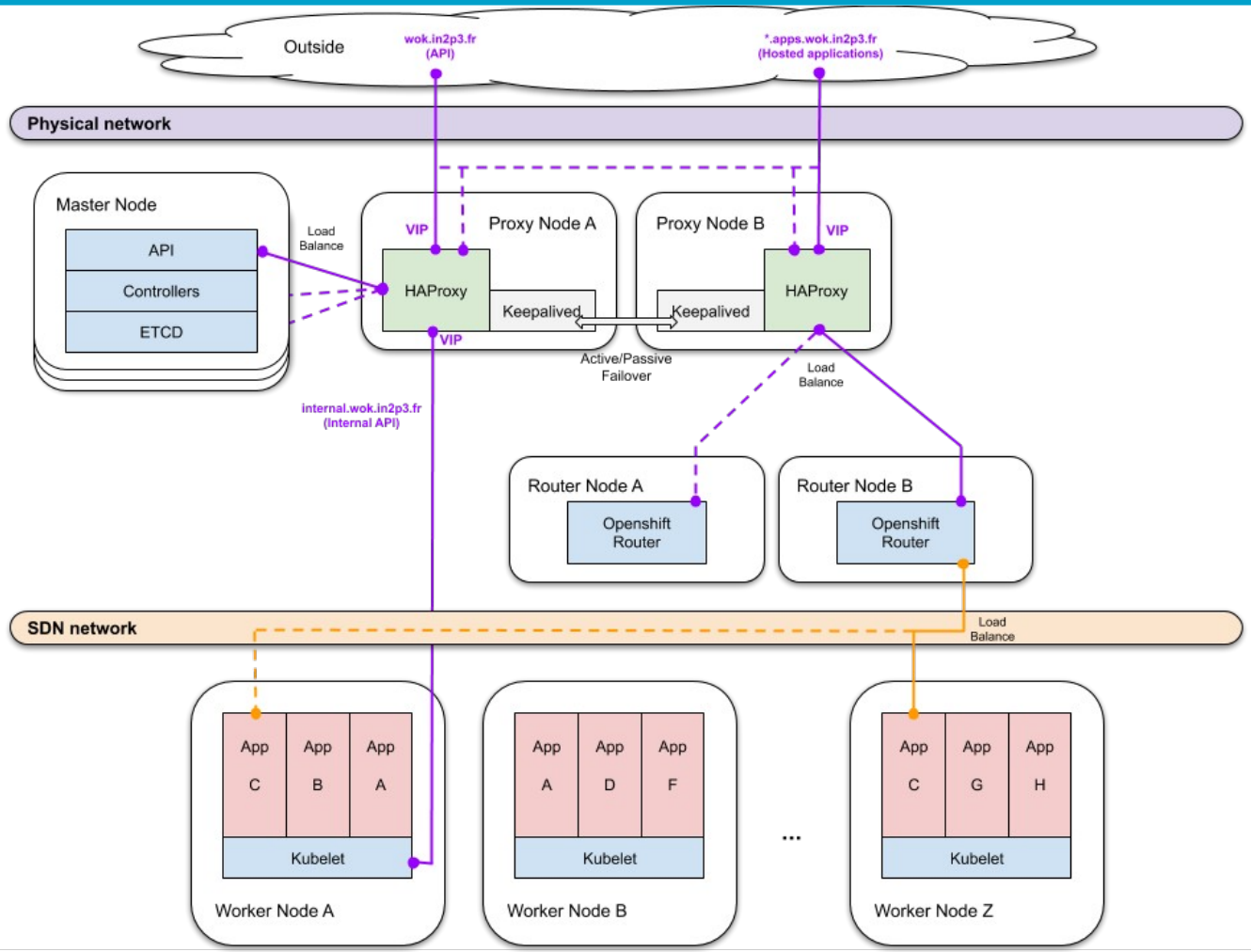
- Micro-services : Docker & k8s
  - Nouvelle infrastructure pour le cluster web
- Calcul : Singularity
  - Fournit Singularity pour le calcul : Grid / HTC / HPC / GPU
- Veille techno autour de k8s

Nouvelle infra Web

- Infra Web vieillissante (plus de 10 ans)
  - Problèmes techniques fréquents (sites web) et infra difficile à maintenir
  - Hébergement d'environ 350 sites à migrer (sites web & applications)
- Nouvelle infra basée sur Docker & k8s (distribution RH Openshift)
  - Stockage Ceph RBD & API S3
  - Sites isolés & mise en place de quotas de ressources
  - Auto-scaling pour les plus grosses applications
  - Système de proxy & load-balacing & certificats Let's Encrypt automatique
  - Mise en production prévue courant l'automne

2 personnes
Benjamin Guillon
Justin Bussery

Nouvelle infra Web

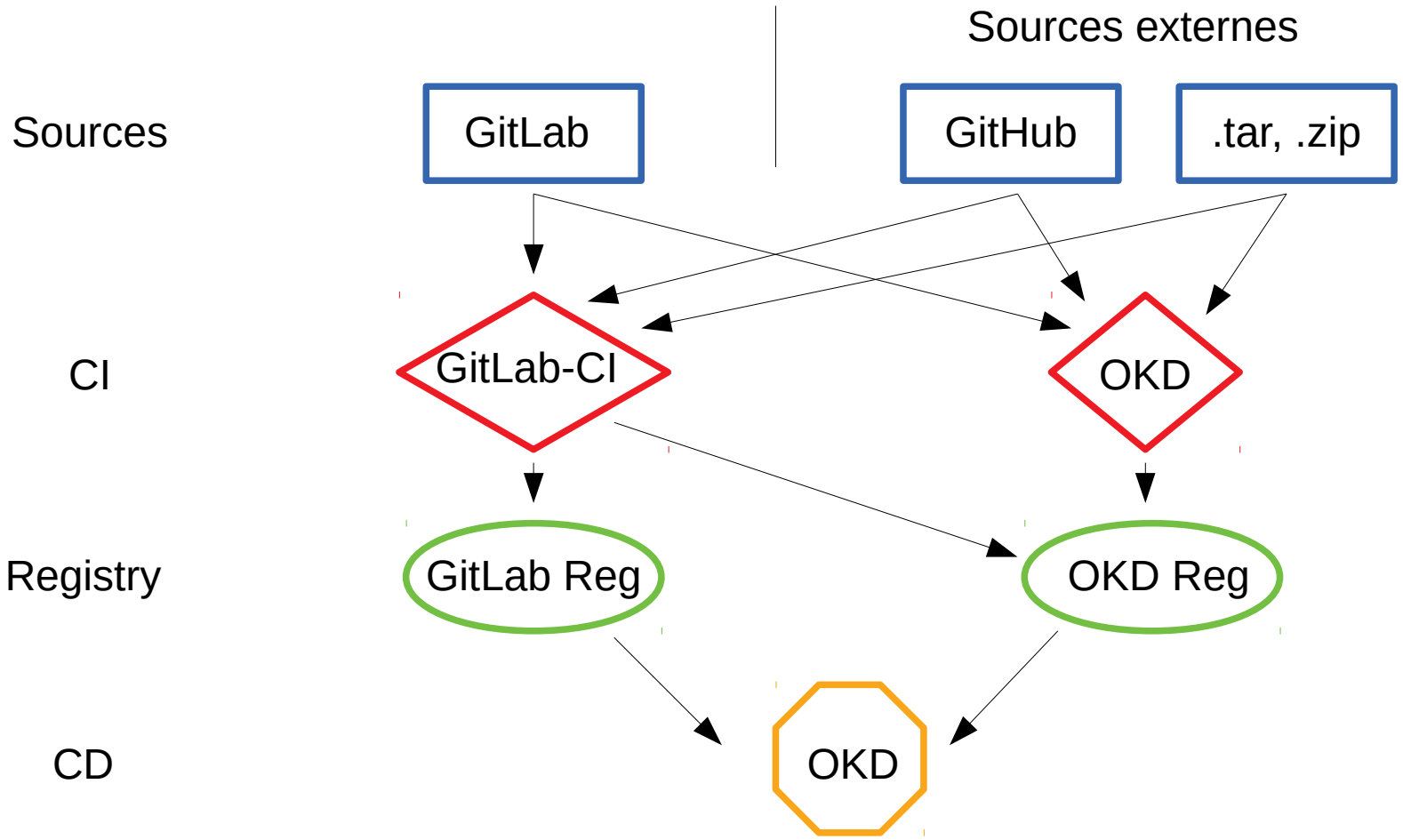


- Résilience via Keepalived & redondance
- Séparation des flux applicatifs et de gestions
- Répartition de charges pour les applicatifs possible

Nouvelle infra Web

- Outils pour l'hébergement
  - CI / CD
    - GitLab registry → CI
    - OKD registry → CD
- Monitoring
  - Utilisation des 2 stacks disponibles dans OKD
    - Stack actuel : Heapster / Cassandra & Hawkular
    - Bientôt remplacé par Prometheus & Grafana
- Logging
  - Stack EFK dans OKD
    - ElasticSearch, Fluentd & Kibana

Nouvelle infra Web



Calcul : Singularity

- Singularity disponible sur l'ensemble des clusters de calcul
  - HTC / HPC / GPU
- Versions disponibles
  - défaut : version recommandée par WLCG, actuellement 2.6
  - Versions plus récentes disponibles (la plus récente : 3.3.0)
- Build d'images via GitLab CI
  - Mais pas de registry pouvant recueillir les images automatiquement
- « catalogue » d'images
  - Hébergement d'images dans un dépôt CVMFS dédié (200 GB)
  - Essentiellement pour les images construites par le CC (mais pour les utilisateurs)
    - Pas (encore ?) ouvert à l'hébergement d'images des utilisateurs (SPS / throng)

5 personnes
Guillaume Cochard
Justin Bussery
Vanessa Hamar
Bertrand Rigaud
Sébastien Gadrat

Calcul GPU

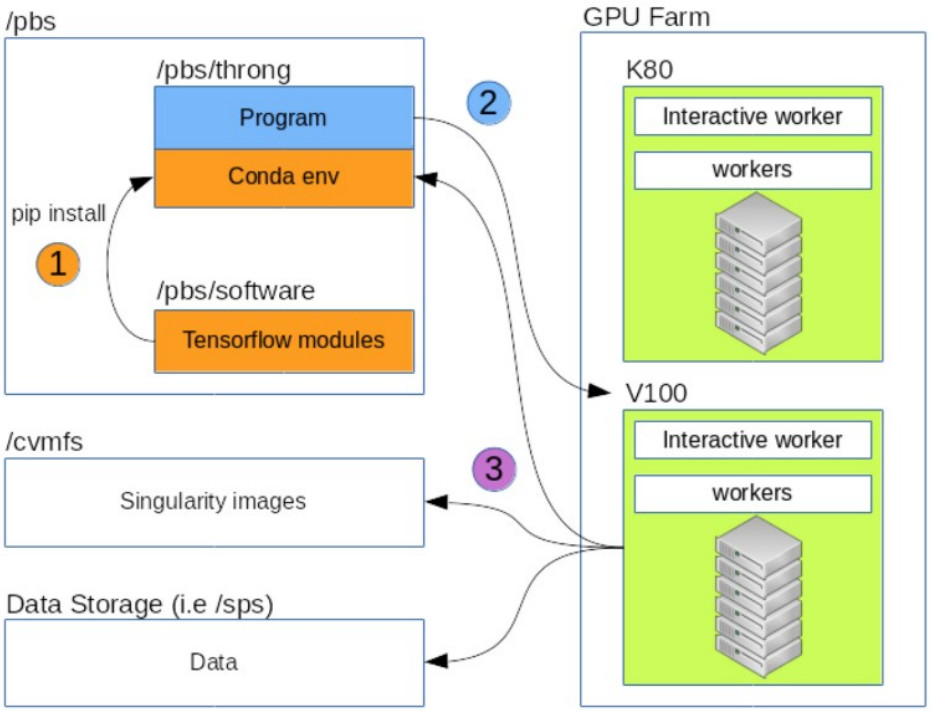
- Deux clusters de GPU : K80 & V100
  - ~2 versions de CUDA & CUDnn disponibles
  - Profils de calcul sur GPU variés, mais importance du DL (TensorFlow)

2 personnes
Bertrand Rigaud
Nicolas Fournials

- Différentes versions de TensorFlow requises
  - Dépendances fortes avec CUDA & CUDnn
  - Propose des conteneurs Singularity avec différentes versions de CUDA & CUDnn (CVMFS)
    - Et des modules TF respectant les dépendances compilés sur nos fermes GPU

Version	Python version	Compiler	Build tools	cuDNN	CUDA
tensorflow_gpu-1.13.0	2.7, 3.3-3.6	GCC 4.8	Bazel 0.19.2	7.4	10.0
tensorflow_gpu-1.12.0	2.7, 3.3-3.6	GCC 4.8	Bazel 0.15.0	7	9
tensorflow_gpu-1.11.0	2.7, 3.3-3.6	GCC 4.8	Bazel 0.15.0	7	9

https://gitlab.in2p3.fr/ccin2p3-support/formations/workshops-gpu/04-2019/jobs-gpu



1. Install the tensorflow module you need depending on your python environment (python 2.7 or python 3.6) and the GPU type you want (K80 or V100)
2. Submit your code to the GPU farm, specifying which image you want to run it, and your python environment
3. The GPU farm computes your code through the specified environment

Calcul : projet HPC-Europa3 & Workflows

- Projet européen dont l'un des objectifs est de mettre en place une infra assurant portabilité et reproductibilité des workflows de calcul (du monde HPC)

- Au CC → étude des contraintes sur un workflow dont chaque étape est conteneurisée
  - Conteneur utilisé : Singularity
  - 4 Workflow Management Systems évalués : Makeflow, Parsl, FireWorks & Pegasus

- Intégration de Singularity trivial (tout se fait via lignes de commandes)

- Partie technique bientôt terminée (30/10/2019)

<u>3 personnes</u>
Guillaume Cochard
Justin Bussery
Sébastien Gadrat

Use-case réel implémenté : spectre de la molécule de Silane SiH_4

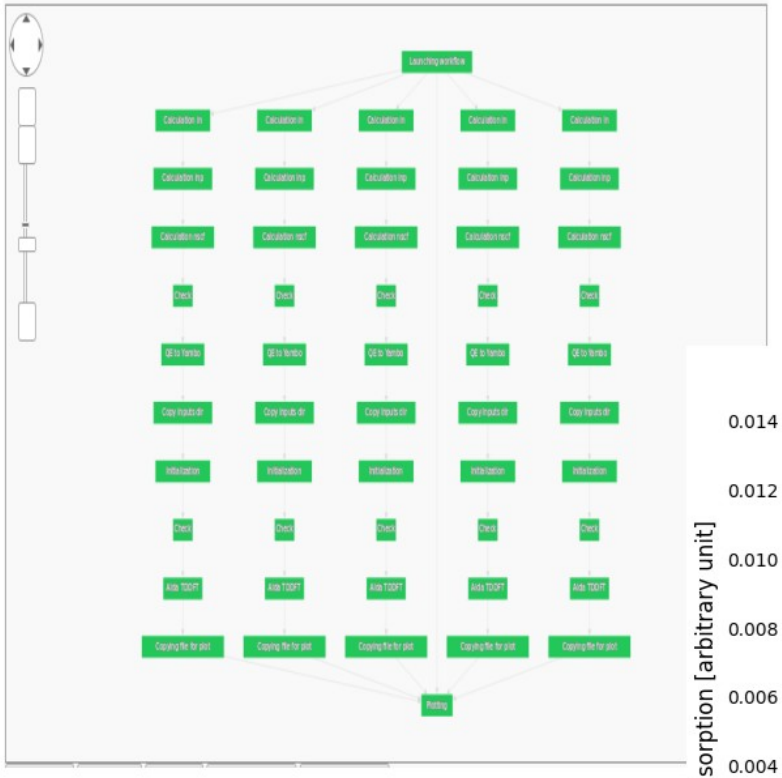
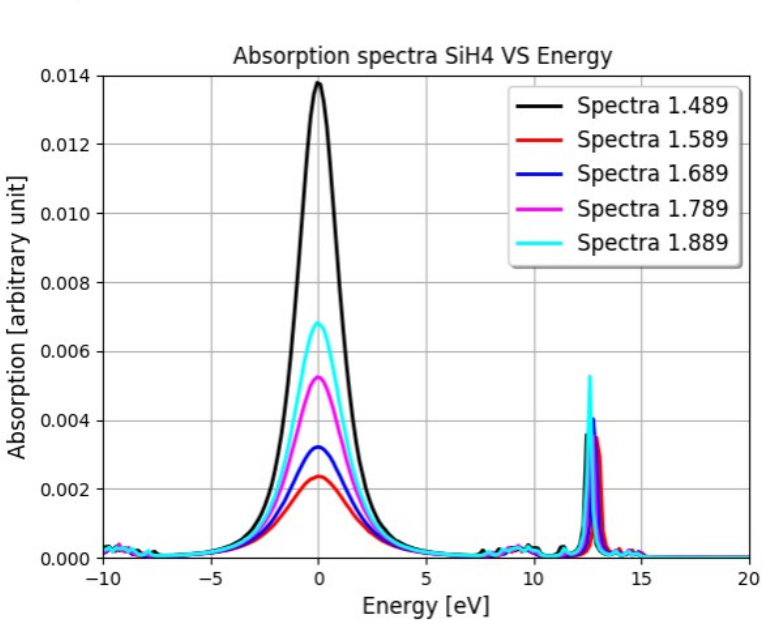


Diagramme du workflow obtenu via la GUI de FireWorks

Logiciels inclus dans le conteneur (Singularity v3) :

- QuantumExpresso (calcul des niveaux d'énergie d'une molécule)
- Yambo (calcul à n corps en spectroscopie moléculaire)
- Le tout étant exécuté avec mpi



Groupe de travail autour de k8s

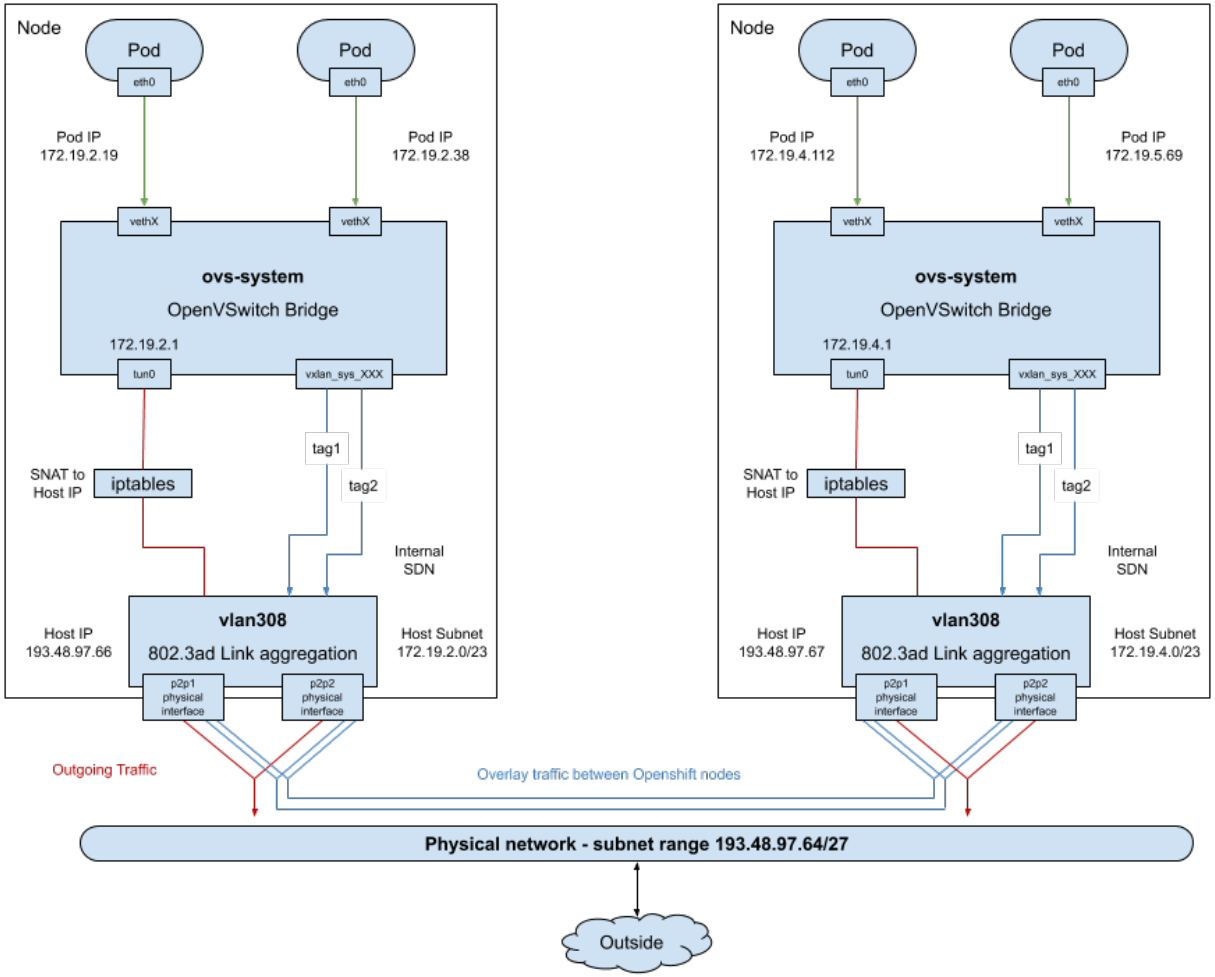
- **Veille techno** sur l'orchestration de conteneurs (principalement k8s)

- Réflexion sur l'utilisation de k8s au sein d'un Data Centre
  - Infrastructure basée sur k8s, permettant de mutualiser l'ensemble des ressources
  - Possibilité d'application au projet P.A.I.R. « Portail d'Accès Interactif aux Ressources »
    - point d'entrée unique et interactif à l'ensemble des ressources de calcul du CC-IN2P3
    - Facilité l'accès aux diverses ressources du Centre de l'ensemble de ses utilisateurs

Conclusions

- Micro-services
  - Docker & k8s
  - Nouvelle infra cluster web
    - Meilleure sécurité, maintenance facilitée, auto-scaling
- Singularity pour le calcul
  - Disponible sur tous les clusters
  - GPU : images dédiées pour TensorFlow
  - Dépôt CVMFS pour stocker les images
  - GitLab CI pour le build d'images
- Projet HPC-Europa3 : étude de workflows utilisant Singularity
  - 4 WMS étudiés : Makeflow, Parsl, FireWorks & Pegasus
- Groupe de travail autour de k8s

Nouvelle infra Web : réseau



Projet : Portail Accès Interactif aux Ressources

<u>1 personne</u>
Responsable du projet
Benjamin Guillon

- Point d'entrée unique à l'ensemble des ressources du CC
  - Projet qui débute
  - Étude de l'état de l'art effectuée
- Dans un premier temps
  - Fourniture d'une interface web interactive permettant de lancer un job sur un cluster quelconque
    - « aggrégateur », DIRAC ?
- Facilité l'accès aux diverses ressources du Centre à l'ensemble de ses utilisateurs
  - En particulier pour les petites collaborations / petits groupes non initiés aux outils informatiques
    - Service additionnel autour Jupyter