



Contexte

Définition
A l'APC

Docker

Application
Workflow

Singularity

Workflow
Application

Conclusion

Conteneurs pour le HTC/HPC

Cécile Cavet

ccavet at apc.in2p3.fr

Centre François Arago (FACe), Laboratoire APC, Université Paris Diderot



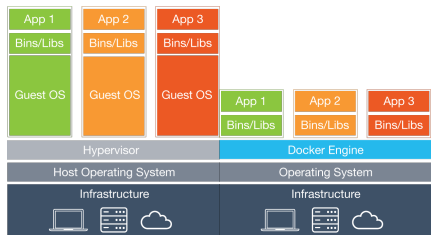
22 Février 2017



Conteneurs

- Contexte
- Définition
 - A l'APC
- Docker
 - Application
 - Workflow
- Singularity
 - Workflow
 - Application
- Conclusion

- Définition : encapsulation (sans virtualisation) d'un environnement spécifique dans un processus Linux isolé (namespace).
- Solutions : Docker, Rkt, Singularity...
- Utilisation : local, cloud (disponible en natif bientôt), cluster.
- Intérêts pour le HTC/HPC : **portabilité**.





Conteneurs : terminologie

- index : répertoire public (Hub), privé ou local
- image : conteneur en lecture seule (snapshot)
- conteneur : élément manipulable
- run : créer un conteneur (à partir d'une image)

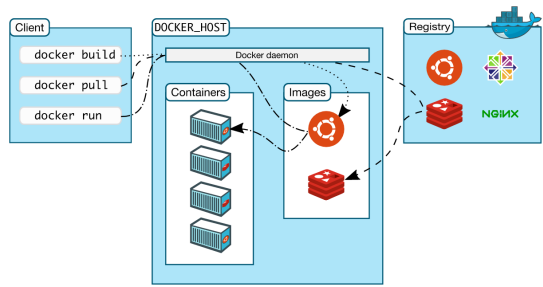


Figure: Cycle de vie @Docker.

Contexte
Définition
A l'APC
Docker
Application
Workflow
Singularity
Workflow
Application
Conclusion



Cas d'utilisation des conteneurs à l'APC

Contexte

Définition

A l'APC

Docker

Application

Workflow

Singularity

Workflow

Application

Conclusion

Projets scientifiques :

➔ LISAPathfinder (2015, succès !) / LISA (2034) : en charge du proto-DPC (Data Processing Center)

- conteneurisation et partage des applications :
 - LPF : analyse des données de LISAPathfinder.
 - LISACode : simulateur d'ondes gravitationnelles.
- mise en place de services :
 - registre privé.
 - intégration continue avec Jenkins et Sonar.
- **workflow : gestion de pics de charge ➔ R&T CNES/Atos.**

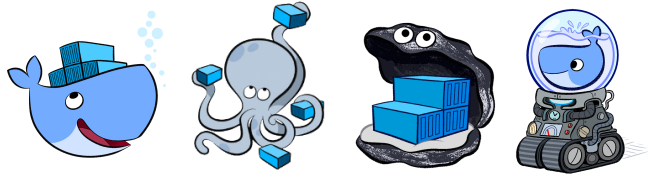


Cas d'utilisation des conteneurs à l'APC

- Contexte
- Définition
- A l'APC
- Docker
- Application
- Workflow
- Singularity
- Workflow
- Application
- Conclusion

Projets scientifiques :

➔ Besoin de la boîte à outils Docker :
Engine, Compose, Registry, Machine...



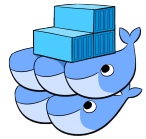


Cas d'utilisation des conteneurs à l'APC

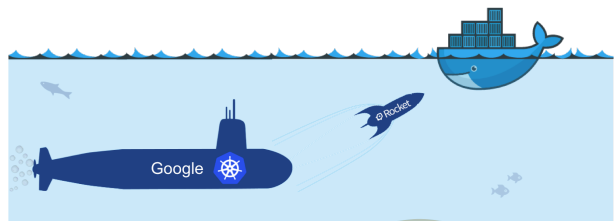
- Contexte
- Définition
- A l'APC
- Docker
 - Application
 - Workflow
- Singularity
 - Workflow
 - Application
- Conclusion

Projets scientifiques :

➔ Besoin d'un orchestrateur de conteneurs :
Docker Swarm, Kubernetes, Mesos...



Apache
MESOS™





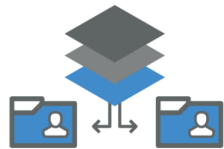
Cas d'utilisation des conteneurs à l'APC

- Contexte
- Définition
- A l'APC
- Docker
 - Application
 - Workflow
- Singularity
 - Workflow
 - Application
- Conclusion

Cluster HPC de l'APC :

➔ Besoin de conteneurs avec des restrictions sur les utilisateurs (sans élévation des privilèges) :

Singularity, uDocker, Shifter...





Contexte

- Définition
- A l'APC

Docker

- Application
- Workflow

Singularity

- Workflow
- Application

Conclusion

Ref. : Poncet et al., Enabling collaboration between space agencies using private and cloud based clusters, BiDS'16 (2016)



Gestion de pics de charge : contraintes

- Contexte
 - Définition
 - A l'APC
- Docker
 - Application
 - Workflow
- Singularity
 - Workflow
 - Application
- Conclusion

Infrastructure hybride cluster/cloud :

- Traffic réseau.
- Surveillance de la charge de calcul.
- Instanciation dynamique de MV sur le cloud.
- **Orchestration des conteneurs.**

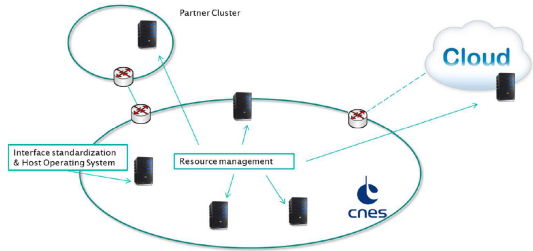


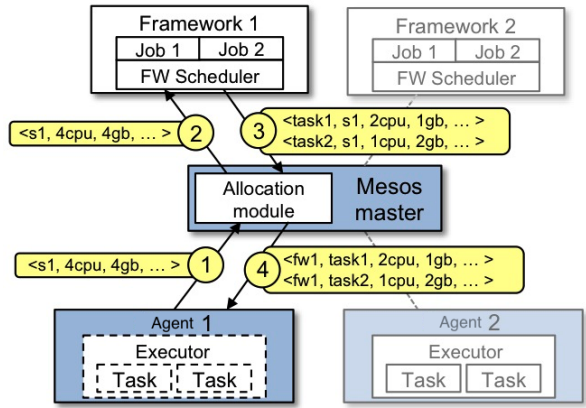
Figure: R&T APC/CNES/Atos ©M. Poncet, BiD'S 16.



Orchestrateurs : Mesos

- Contexte
 - Définition
 - A l'APC
- Docker
 - Application
 - Workflow
- Singularity
 - Workflow
 - Application
- Conclusion

- Généraliste : Spark, MPI, Docker...
- Visibilité restreinte des ressources.





Gestion de pics de charge

Contexte

Définition
A l'APC

Docker

Application
Workflow

Singularity

Workflow
Application

Conclusion

Application :

- Conteneurisation : LPF
 - code privé (industriel) ➔ registre privé sur une MV cloud.
 - algorithme MCMC (MATLAB/C++), parallèle (MPI), bibliothèques (LAPACK...).
- Exécution hybride : cluster HPC du CNES avec PBSPPro / MV du cloud Helix Nebula (Atos) + conteneurs.
- Orchestration des ressources : Mesos ; des jobs Docker : Chronos.



Workflow

- Contexte
- Définition
- A l'APC
- Docker
- Application
- Workflow**
- Singularity
- Workflow
- Application
- Conclusion

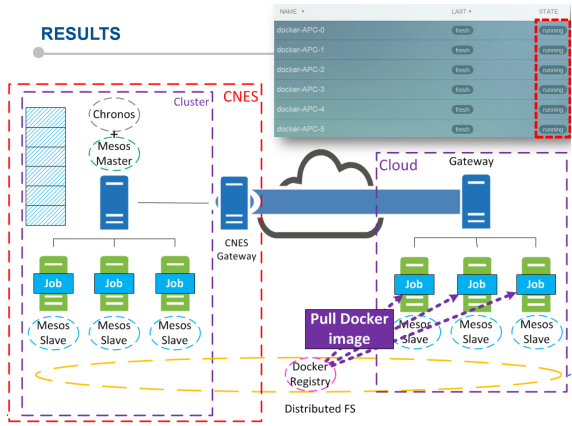


Figure: R&T APC/CNES/Atos ©M. Poncet, BiD'S 16.



Contexte

Définition

A l'APC

Docker

Application

Workflow

Singularity

Workflow

Application

Conclusion



Avec l'aide de Martin Souchal (sys admin cluster APC).



Conteneur HPC : contraintes de Docker

Contexte

Définition
A l'APC

Docker

Application
Workflow

Singularity

Workflow
Application

Conclusion

- Réseau : virtuel.
- Sécurité : élévation des privilèges.
- I/O : non transparents ➔ processus MPI externes et X11 non compatibles.
- Ordonnanceur : spécifique.



➔ **Solution : Singularity.**



Conteneur HPC : Singularity

- Contexte
 - Définition
 - A l'APC
- Docker
 - Application
 - Workflow
- Singularity
 - Workflow**
 - Application
- Conclusion

End Point the User Controls

Root/Superuser

- ▶ Create a new container
- ▶ Bootstrap/install container
- ▶ System (container) modifications



Shared Computational Resource

Regular User

- ▶ singularity shell ...
- ▶ singularity exec ...
- ▶ singularity run ...



Conteneur HPC : Singularity

Contexte

Définition
A l'APC

Docker

Application
Workflow

Singularity

Workflow
Application

Conclusion

Application :

- Conteneurisation : LISACode
 - code public ➔ DockerHub.
 - algorithme (C++), configuration XML, librairies (GSL...), scripts haut-niveau (Python).
- Exécution : cluster HPC du labo avec Torque/Maui.

```
#!/bin/bash
```

```
#PBS -N lisacode
```

```
#PBS -m abe ...
```

```
singularity exec lisacode.img python  
/usr/bin/makeTDI-lisacode2.py mytdi
```




Conclusions

Contexte

Définition
A l'APC

Docker

Application
Workflow

Singularity

Workflow
Application

Conclusion

Expérience très positive :

- multi-applications.
- multi-services.
- multi-workflows.
➔ **Conteneurs permettent de faire tout !**
- beaucoup de doc, tuto, blog, meetup...
➔ **Enorme communauté.**
- pas de limitations pour le HTC/HPC



Questions ?

Contexte

Définition
A l'APC

Docker

Application
Workflow

Singularity

Workflow
Application

Conclusion

