

Informatique Scientifique @ UPSud

Michel Jouvin, jouvin@lal.in2p3.fr

Réunion des utilisateurs

9 juillet 2019

Départs... Arrivée !

- Cécile Germain à la retraite (émérite) depuis le 1/9/2018
 - Un grand merci pour l'énergie mise au service de l'Informatique Scientifique @UPSud depuis 2014
 - La solution pour son remplacement n'a pas pu être trouvée avant son départ
- César Richard (qui avait remplacé Julien Nauroy) est parti en décembre 2018
- Arrivée de Marco Leoni en mai 2019 pour reprendre le flambeau de Julien/César
 - Une arrivée pérenne ! (en CDI avant la fin de l'année)
 - Rattaché à la DSU UPSud... avec qui les liens se sont beaucoup resserrés depuis l'arrivée de Arnaud Galisson (en remplacement de Nicolas Babut)
 - Soutien technique aux utilisateurs de l'IS : Marco a une formation de physicien qui devrait permettre une bonne appréhension des problématiques utilisateurs
 - Actuellement en « stage d'immersion/formation » au LAL
 - Volonté forte d'inscrire la relance de l'IS dans le contexte Paris Saclay

Site Web

- Nouveau site web de l’Informatique Scientifique @UPSud mis en service au printemps 2018
 - <https://www.mesocentre.u-psud.fr>
 - Remplace le site historique dont l’information était essentiellement obsolète
 - Information de ce site est maintenue à jour : documente en particulier les points de contacts des différents services
- Destiné à être enrichi avec le redémarrage de la dynamique
 - Site hébergé sur GitHub : permet la contribution de tous (un mode d’emploi reste à écrire, me contacter en attendant) avec un système de revue des contributions avant approbation (merge request)

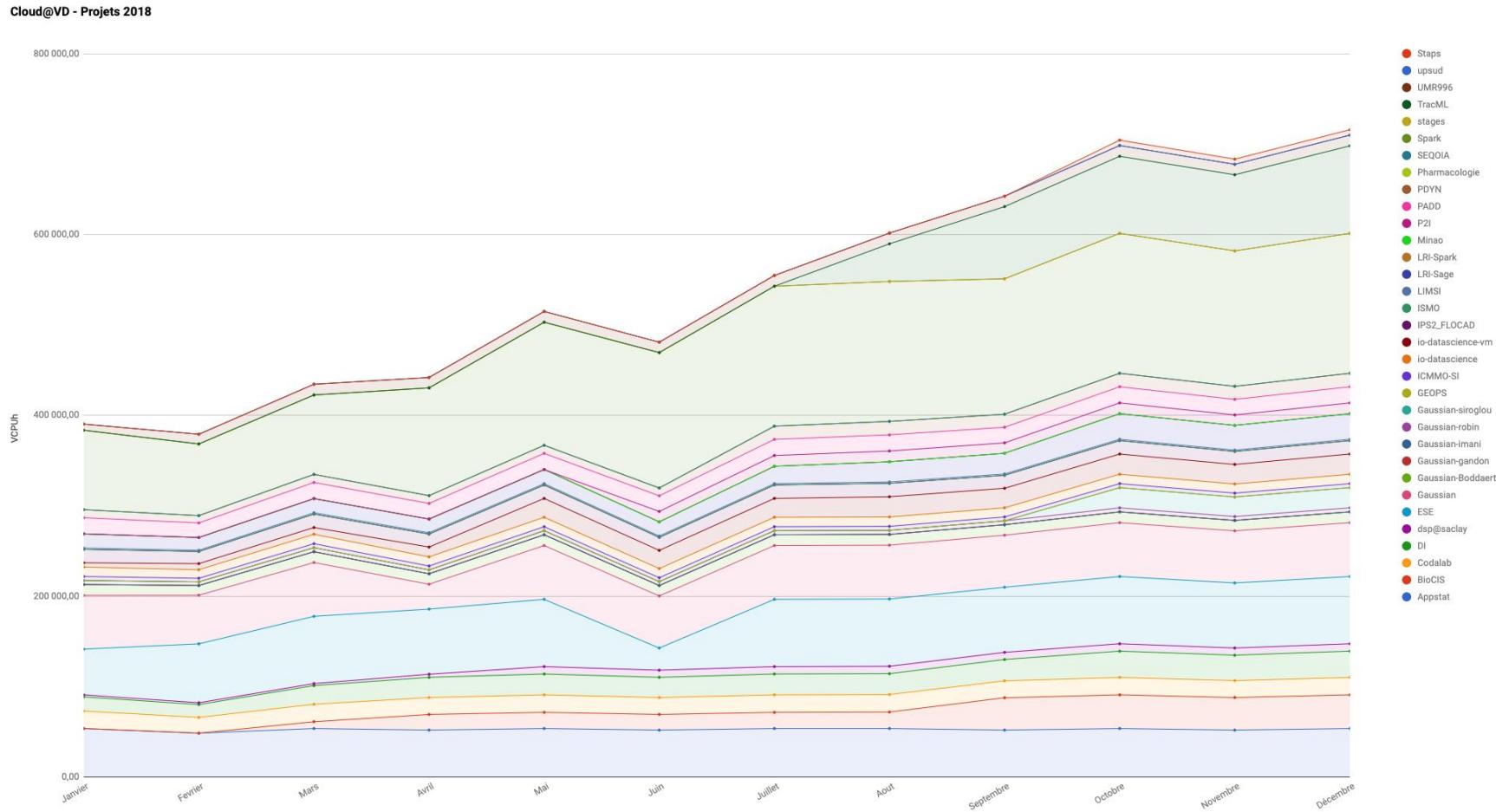
Salle Machine

- Salle actuelle (30 racks) presque pleine
 - 4 racks UPSud plein à 75% : $\frac{1}{2}$ rack supplémentaire demandé récemment par le LCP
- Extension en cours, financée par P2IO (CPER, 2 M€)
 - Travaux en cours : mise en production prévue courant novembre
 - 21 racks supplémentaires : possibilité de 40 racks de plus après l'extension (max = 90)
 - Puissance électrique/cooling IT : 600 kW
 - Sécurisation électrique par double alimentation HT/BT pour 300 kW (non localisé) : appelée « niveau argent » par opposition au « niveau bronze » actuel (simple alimentation non secourue)
- Extension 2020 prévue, financée par UPSud/Paris Saclay, pour ajouter un « niveau or »
 - Secours de 10 racks/80 kW par onduleur + groupe électrogène (localisé, rangée basse densité)
 - Permettre l'hébergement de services des DSI des composantes Paris Saclay, en particulier UPSud
 - Sécurisation électrique de l'accès réseau

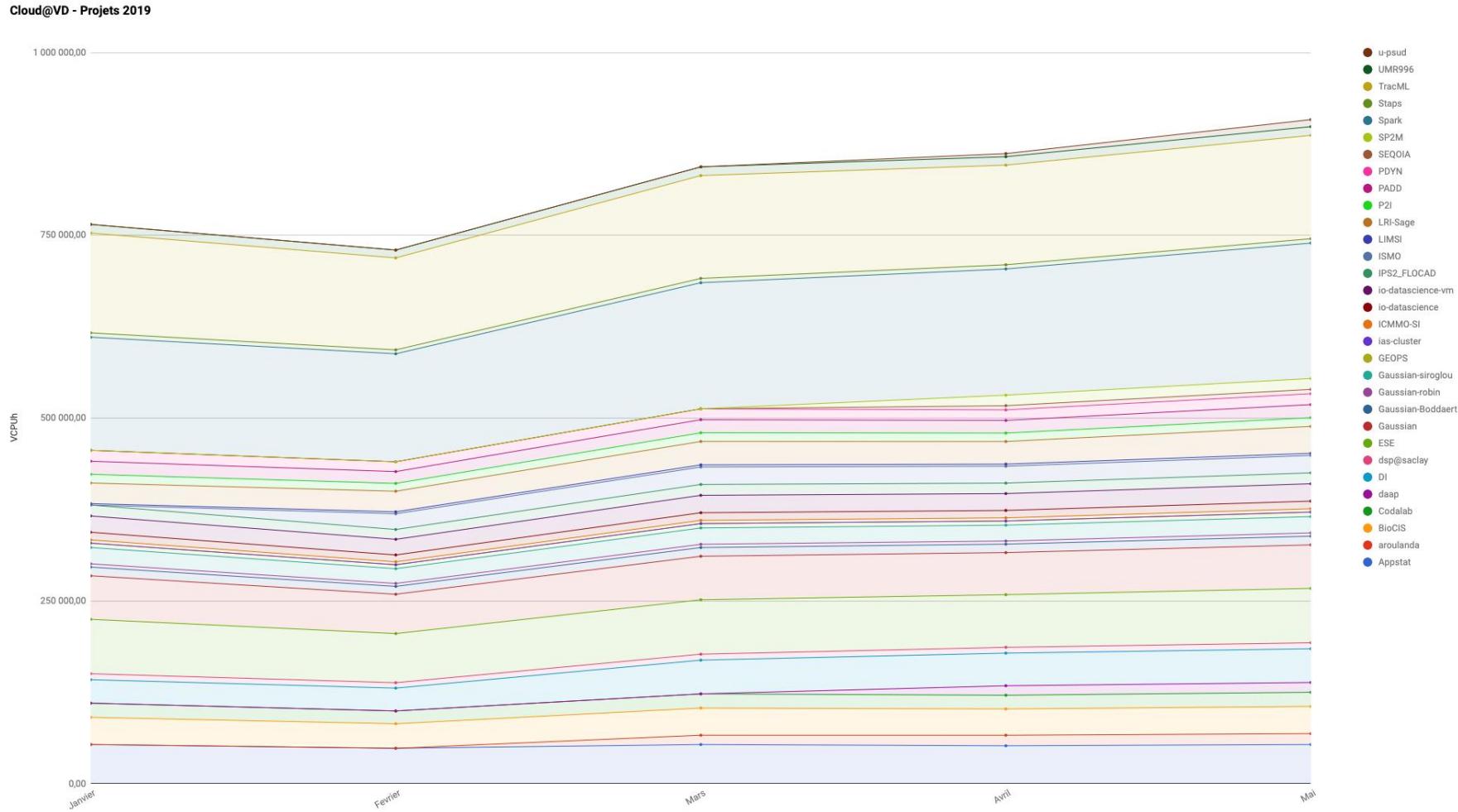
Cloud : Situation Actuelle

- Croissance des ressources du cloud : 4000 cœurs, 500 TB disque (non permanent)
 - Divers contributeurs, y compris extérieurs à UPSud
 - Du fait de la mutualisation, bénéficie à tout le monde
- Mise en place d'une notion de « durée de vie » des VMs pour récupérer les ressources des VMs oubliées...
 - Mail reçu par la personne ayant lancé 1 VM depuis plus de 3 mois l'invitant à confirmer qu'il a toujours besoin de la VM
 - Important de jouer le jeu et de ne pas préempter des ressources inutilement
- Gros travail de mise à jour du cloud depuis 1 an : sans impact sur les utilisateurs
 - Gros retard accumulé mais rattrapé : workflow maintenant bien en place
 - Objectif : pas plus d'une version de retard sur la dernière version OpenStack
- Des problèmes de performance identifiés sur le « dashboard » des VMs
 - Et des idées pour le résoudre ! Sans doute dans les mois qui viennent

Cloud : Utilisation UPSud...



... Cloud : Utilisation UPSud



Cloud : Evolutions Prévues...

- Ajout de machines avec une grosse quantité de mémoire par cœur
 - 40 GB/cœur, 1 TB par machine
 - Justifié par des besoins astro/cosmo, financé par le DIM ACAV+
 - En priorité pour les besoins astro/cosmo mais accessibles à d'autres si besoin...
- Support de cluster de containers à la demande dans le cloud
 - Cluster de containers, y compris instanciation coordonnée de plusieurs containers, à partir d'une description (relativement) simple des besoins
 - Support de différents orchestrateurs, dont Kubernetes, sans avoir à les administrer
 - Service en cours de configuration : une urgence pour plusieurs des services existants, probablement début de l'automne
- Support de file systems partagés entre VM
 - Probablement dans la foulée des clusters de containers

... Cloud : Evolutions Prévues

- Support d'une fonctionnalité de type « spot instance »
 - Des VMs au-delà du quota du projet qui peuvent être arrêtées à tout moment si besoin pour un autre projet plus prioritaire
 - D'ici la fin de l'année
- Interface job (batch) au cloud : éviter à l'utilisateur de gérer des VMs pour exécuter des applications de type batch
 - Serait basé sur HTCondor
 - Potentiellement exécution du job dans une VM ou un container, au choix
 - Après les autres projets... Utilisateurs intéressés ?

JupyterHub

- Instance JupyterHub multi-tenant démarrée il y a 18 mois
 - Permet l'exécution de Jupyter notebooks avec le support de plusieurs langages (kernels) : Python, C++
 - Intégré avec Adonis : même crédentiels mais demande une autorisation spéciale (voir site web de l'IS)
 - Projet commun avec le CEMAP (maths appliquées) à Polytechnique
- Utilisé avec succès par des enseignants de mathématiques et informatiques
 - Jusqu'à plusieurs dizaines d'utilisateurs simultanés sans problème
 - Référent @UPSud : Nicolas Thiery (LRI)
- Limitation actuelle : 1 machine (VM) pour le front-end et l'exécution des notebooks
 - En cours : connection à un backend Kubernetes (containers) auquel seront soumis les notebooks à exécuter : provisioning de resources à la demande
- Intégration en cours avec NBGrader (notation) et Binder
 - Binder : système pour construire les containers à partir d'une description de haut niveau

Spark

- R&D Spark démarré conjointement au LAL et pour Génomique2025 il y a plusieurs années
 - Plusieurs actions de formation/consultance
 - Animation UPSud par Chris Arnault
- Développement important de l'activité au LAL depuis 18 mois
 - Croissance de l'intérêt au sein de l'expérience d'astrophysique LSST (10 TB/nuit à partir de 2022)
 - Arrivée de Julien Peloton pour renforcer et développer l'expertise LAL
 - Soumission d'un projet d'Event Broker pour LSST dans le cadre d'un appel à projet : sélection en cours, fort espoir d'être sélectionné comme un des brokers officiels
- 2 axes majeurs : infrastructure scalable et expertise applicative
 - Cluster Spark à la demande : provisioning des workers en fonction des besoins dans le cloud. Connexion à venir avec Kubernetes
 - Déploiement des logiciels contrôlé par les utilisateurs via le service CVMFS
 - Projet Astrolab Software : <https://astrolabsoftware.github.io>

Linked Open Data...

- Un enjeu pour la science ouverte : permettre l'accès aux données d'une analyse, ou plus largement le partage de données et de connaissances, tout en gardant le contrôle
- LinkedWiki développé dans le cadre du Center for Datascience (UPSaclay CDS) par Karima Rafes, avec le soutien de UPSud (MRM)
 - Une extension de MediaWiki pour décrire les données partagées
 - schémas RDF (description des données et metadonnées associée)
 - requêtes SPARQL (langage de requête pour RDF)
 - règles SHACL (langage pour contrôler la qualité des données RDF dans des bases de données)
 - une plateforme intégrée au cloud UPSud pour faciliter le partage, la découverte et la réutilisation des données
 - travailler dans le cloud sur les données RDF, SQL ou NoSQL (SPARK)
 - partager à l'aide du cloud les données RDF au sein du Linked Open Data
 - référencer les données RDF ou non partagées (privées) entre les chercheurs
 - partager les exemples de requêtes SPARQL du Linked Open Data

... Linked Open Data

- La plateforme et deux instances de Wiki avec des données RDF sont déployées à Paris Sud
 - Projet DAAP (Faculté de Pharmacie)
 - Projet Gregorius (Faculté de droit)
 - Aussi utilisé pour un cours Web des données (Science de la Matière)
- Financement de la maintenance et de la formation autour de cette infrastructure par Paris Sud
 - Dans le cadre du MRM se terminant fin 2019
 - Réfléchir à la pérennisation du financement
- Intérêt pour une formation autour de la plateforme Linked Data à l'automne ?

Logiciels Scientifiques

- Plusieurs logiciels commerciaux utilisés par des laboratoires de UPSud
 - Gaussian, Schrodinger...
 - Leur coût peut être non négligeable
- Travail de recensement fait par Julien il y a quelques années : le reprendre (Marco)
- Pour chaque logiciel, comprendre sa valeur ajoutée (souvent réelle) et/ou identifier les alternatives open-source possibles
 - Pour les alternatives, proposer un accompagnement
 - Si pas d'alternative, discuter de la prise en charge des coûts suivant le nombre d'unités intéressées et faire connaître l'achat des logiciels à la communauté pour le cas où les besoins évolueraient

Paris Saclay

- Informatique Scientifique @UPSaclay : quelle animation/coordination ?
 - Initiative Paris Sud semble unique parmi les partenaires ?
 - Des activités de recherche utilisatrices d'informatique dans tous les établissements
 - Contact déjà établi avec AgroParisTech, très motivé par se joindre à la dynamique Paris Sud si elle s'élargit à Paris Saclay. D'autres contacts ?
 - Contact à établir avec le mésocentre Fusion (Centrale-Supelec/ENS)
- CDS : relance du projet pour la dernière phase (jusqu'à fin 2020)
 - Knowledge extraction from data: focus sur l'utilisation du machine learning
 - <https://www.datascience-paris-saclay.fr/contact-2/>
 - Groupe mail : <https://groups.google.com/forum/#!forum/cdsupsay>
- « Objets Transverses » : une proposition autour des enjeux du calcul HPC et de la performance portable ?
 - Contact préliminaire établi avec la Maison de la Simulation et les partenaires de l'IRS CEPS

2 Arrêts Virtual Data durant l'été

- Dans le cadre de l'extension, arrêt complet de la salle du 12/8 midi au 14/8 midi
 - Arrêt total de la climatisation pour intervention sur le réseau d'eau
 - Prévenez vos utilisateurs
 - Prendre contact avec Guillaume Philippon (philippo@lal.in2p3.fr) si besoin d'assistance pour l'arrêt ou le redémarrage des machines
- Entretien électrique annuel : lundi 26/8 à partir de midi
 - Pas d'électricité dans le bâtiment : aucun secours, **arrêt total**
 - Redémarrage en fin d'après-midi
 - A partir de 2020, plus d'impact pour le matériel avec une double alimentation

ERM2020

- Dernier appel à projets ERM (équipement) de UPSud : opportunité pour soutenir le redémarrage de la dynamique
- Timing défavorable : remise des projets avant le 12/7 (UFR des Sciences), trop tôt pour faire quelque chose de collectif
 - Possibilité d'une exception pour un projet multi-composante ?
 - Impossible en ce qui me concerne de rendre quelque chose avant début septembre...
- Si soumission tardive possible, quel objet ?
 - Renforcement des ressources du cloud ? (200 cœurs = 25 k€, 100 TB utiles = 25 k€)

Conclusions

- Après un passage à vide, perspective solide pour un redémarrage de la dynamique Informatique Scientifique
 - Préparer le passage à l'échelle Paris Saclay
- Un lieu d'hébergement des ressources informatiques unique dans le contexte Paris Saclay et au-delà
 - Extension en cours va permettre de faire face à de nouveaux besoins
- Une plateforme de base disponibles pour héberger des services mutualisées : le cloud
 - Une ressource déjà significative dont l'extension ne pose pas de problèmes
- Plusieurs services avancés déjà disponibles pour le traitement de données, le partage de données et de connaissance et le support à l'enseignement
 - Favoriser des solutions communes aux problèmes communautaires autant que possible