



INSTITUT DU
DÉVELOPPEMENT ET DES
RESSOURCES EN
INFORMATIQUE
SCIENTIFIQUE

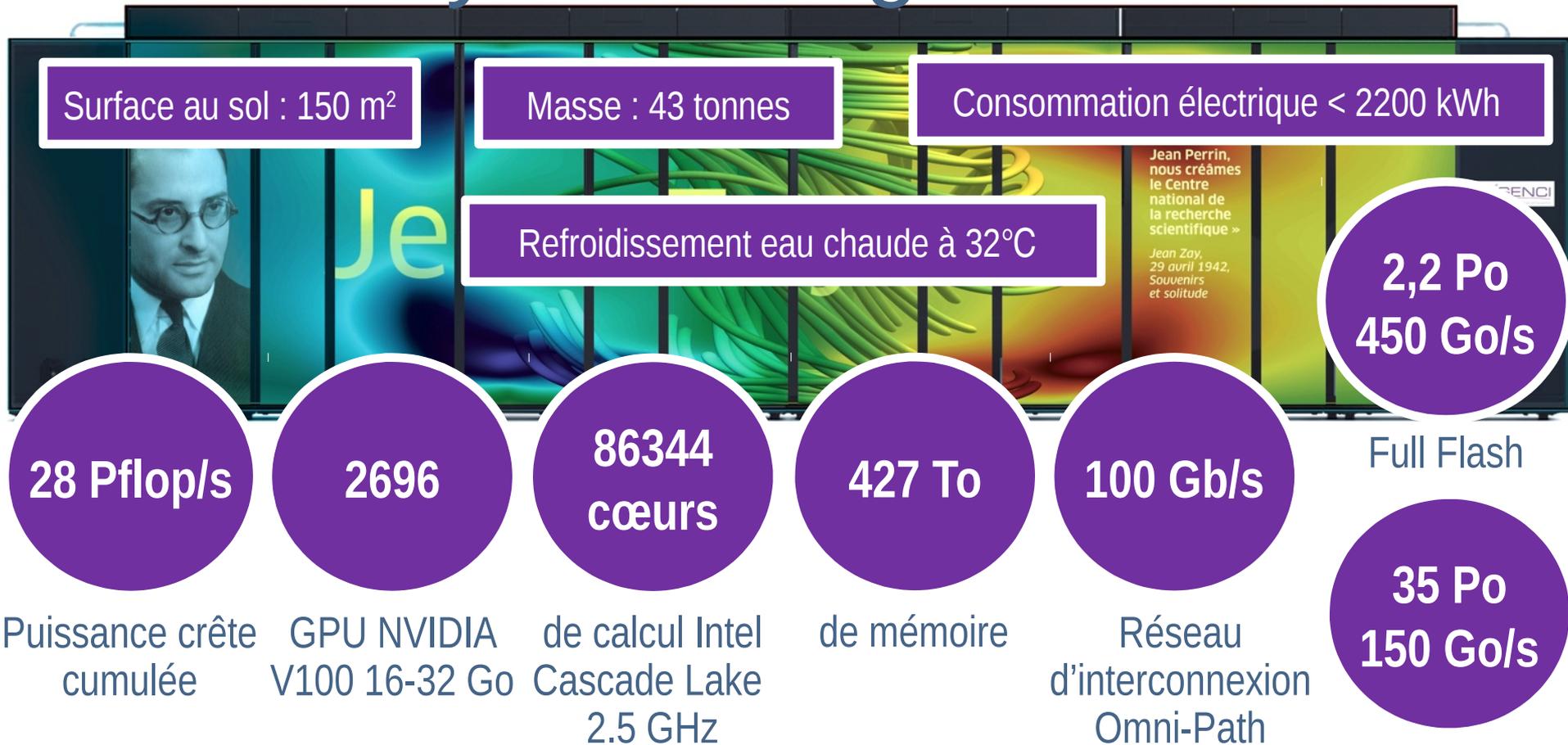
www.idris.fr

Jupyter Notebook à l'IDRIS : Retour d'expérience



Rémi Lacroix – UST4HPC 2021 – 25/01/2021

Jean Zay : convergence HPC/IA



Surface au sol : 150 m²

Masse : 43 tonnes

Consommation électrique < 2200 kWh

Refroidissement eau chaude à 32°C

28 Pflop/s

2696

86344
cœurs

427 To

100 Gb/s

2,2 Po
450 Go/s

Full Flash

35 Po
150 Go/s

Puissance crête
cumulée

GPU NVIDIA
V100 16-32 Go

de calcul Intel
Cascade Lake
2.5 GHz

de mémoire

Réseau
d'interconnexion
Omni-Path

Jupyter Notebook à l'IDRIS ?

- Avant Jean Zay :
 - usage impossible sur les nœuds de calcul
 - peut-être un usage discret sur les frontales ?
- Pas d'expérience de l'outil dans les équipes
- Considéré comme indispensable par la communauté IA

Sécurité

- Jupyter Notebook / Lab ⇒ un serveur web
 - Sécurisation désactivable
 - Détection simple : scan des ports
 - Accès équivalent à un accès SSH
- ⇒ Source d'inquiétude pour notre équipe sécurité

```
lacroix@...:~$ nmap ...
Starting Nmap 7.60 ( https://nmap.org ) at 2021-01-21 09:25 CET
Nmap scan report for ...
Host is up (0.000095s latency)
Not shown: 997 closed ports
PORT      STATE SERVICE
...
8888/tcp  open  sun-answerbook
Nmap done: 1 IP address (1 host up) scanned in 0.05 seconds
```

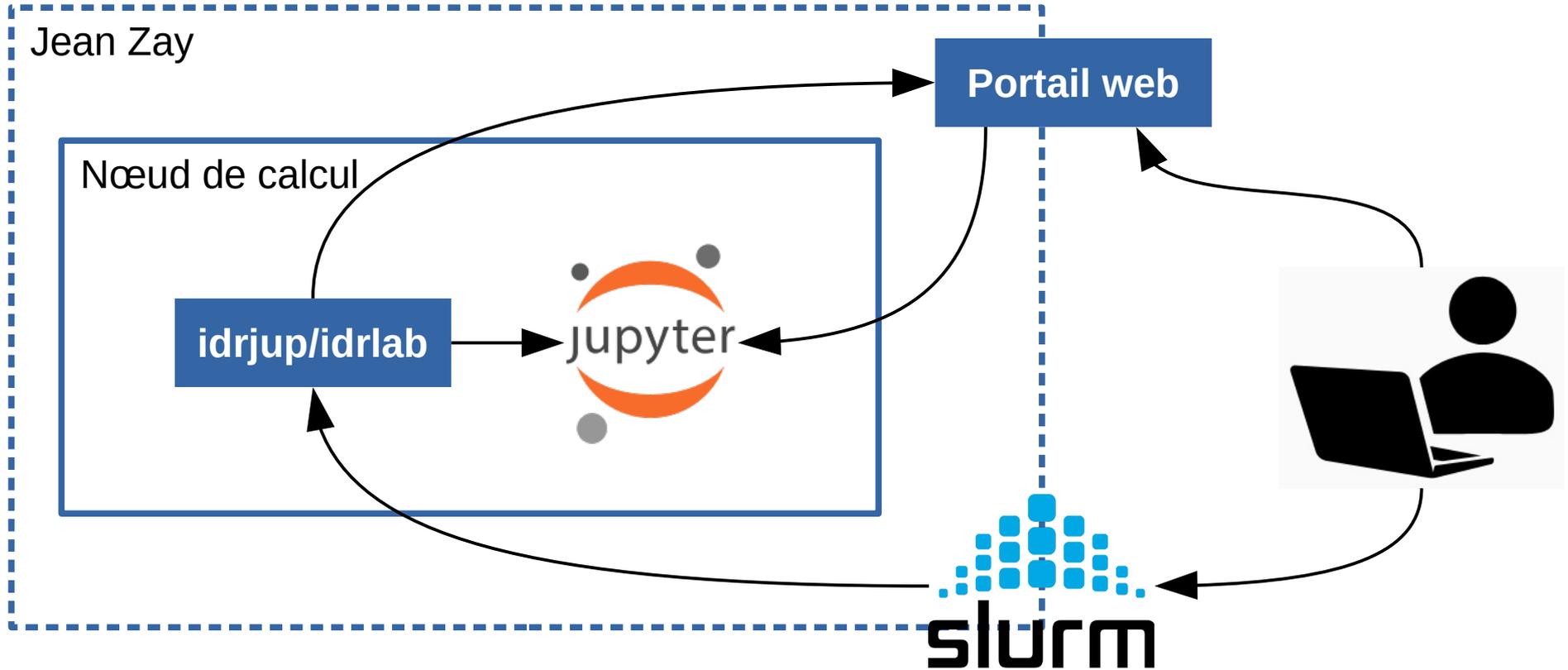
Connectivité des nœuds de calcul

- Nœuds de calcul sur un réseau isolé
 - Aucune connectivité vers l'extérieur
 - Frontales : redirection de port via SSH désactivée
- ⇒ Impossible d'utiliser Jupyter Notebook sur ces nœuds
- ⇒ Contrainte supplémentaire à intégrer

Besoins

- Usage des différents types de ressources
- Allocation via Slurm
- Sécurisation :
 - Mot de passe obligatoire
 - HTTPS

Solution mise en place



Solution mise en place

- Client développé en Python
- Portail web : technologies web classiques libres
- Réflexion en cours sur l'opportunité d'ouvrir le code :
 - Des demandes allant dans ce sens
 - Pas forcément soutenable au niveau RH

Allocation des ressources

- Travail Slurm classique (batch ou pseudo-interactif)
- Chargement d'un environnement Python :
 - Modules mis à disposition par IDRIS
 - Environnement personnel (Conda, ...)
- Appel à idrjup ou idrlab

Commandes idrjup / idrlab

- Lancement de Jupyter Notebook / Lab
- Configuration sécurisée du serveur :
 - Mot de passe renouvelé tous les mois
 - Certificats pour connexion HTTPS
- Enregistrement auprès du portail

Commandes idrjup / idrlab

- Affichage des informations de connexion

```
$ idrjup --notebook-dir=$WORK
INFO Starting Jupyter server. Please wait...:
INFO --Generating web password.
INFO --Launching Jupyter server. Please wait before attempting to connect...
INFO --Send data.
INFO Running command : ... --server -n XXX -l 0
INFO --Jupyter server launched. Please connect.
URL de connexion :      https://idrvprox.idris.fr
Mot de passe URL :      <mot de passe utilisateur>
Mot de passe jupyter :  HYMnrKvkWG3UgtgUhvvp1TFYazzR8eRx
```

Portail web

- Filtrage par IP
- Authentification login/mot de passe Jean Zay
- Liste les sessions en cours

Bienvenue dans votre espace, 

Vous trouverez sur cette page l'ensemble des sessions que vous avez ouvertes sur jean-jay.

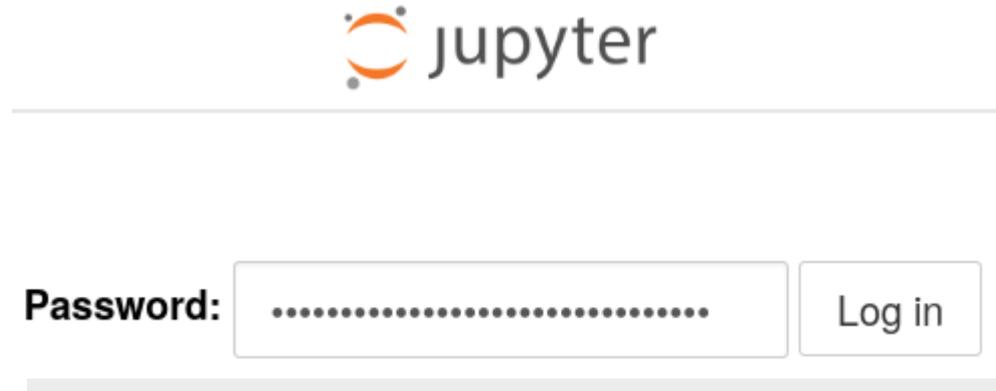
Déconnexion

Liste des sessions actives

Job	Application	Compute Node	Creation Date	Action
1270499	Jupyter		2021-01-21 15:24:50	<input type="button" value="Submit Query"/>

Jupyter Notebook / Lab

- Authentification avec le mot de passe éphémère



The image shows a Jupyter login interface. At the top, there is the Jupyter logo (an orange circle with a white dot) and the word "jupyter" in a grey sans-serif font. Below this, a horizontal line separates the header from the login area. The login area contains the text "Password:" followed by a text input field filled with dots. To the right of the input field is a "Log in" button.

Jupyter Notebook / Lab

The screenshot displays the Jupyter Notebook interface. On the left, a file browser shows the directory structure of a JupyterLab environment, including folders like 'old', 'tmp', and 'heat3d', and files such as 'bind_gpu.sh', 'cpu_cont.log', 'gpu_cont.log', and 'heat3d.F90'. The 'heat3d.F90' file is selected. The main area shows a code editor with the following Fortran code:

```
1 program heat3d
2   !$ use omp_lib
3   #ifdef _OPENACC
4     use openacc
5   #endif
6   use heat3d_mpi
7   implicit none
8
```

Below the code editor, a terminal window displays the output of the 'nvidia-smi' command, showing GPU information for a Tesla V100-SXM2 GPU. The output is as follows:

```
-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
| GPU   Name              Persistence-M| Bus-Id        Disp.A | Volatile Uncorr. ECC |
| Fan  Temp  Perf  Pwr:Usage/Cap|      Memory-Usage | GPU-Util  Compute M. |
|====+=====+====+=====+=====+=====+=====+=====+
|   0   Tesla V100-SXM2...    Off      | 00000000:88:00:0 Off |             0         |
| N/A   45C    P0     46W / 300W |  0MiB / 16160MiB |      0%    Default  |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
|
| Processes:
| GPU      PID  Type  Process name                        GPU Memory
|=====+=====+=====+=====+=====+=====+=====+=====+
| No running processes found
|
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
[nvme0n1@er1111id ~]$
```

TensorBoard

- Visualisation des données liées à un apprentissage
 - Lancement d'un serveur web
 - Aucune possibilité de sécurisation
- ⇒ Utilisation d'un plugin pour Jupyter Notebook / Lab
- ⇒ Réutilisation de l'infrastructure existante sécurisée

Usages ?

- Toujours principalement la communauté IA
- Post-traitement / visualisation dans d'autres communautés (notamment sciences du climat)
- Terminal « augmenté » pour certains

Jupyter pour les formations

- Usages intéressants au niveau pédagogique :
 - Exemples interactifs
 - Travaux pratiques guidés
- Formations à distance potentiellement facilitées
- Cours ayant fait ce choix :
 - Introduction à OpenACC et OpenMP GPU (T. Véry)
 - Introduction au Deep Learning (J.-L. Parouty)

Exemple : Cours OpenACC

- Besoin : limiter l'usage des ressources de calcul
 - Frontales : Notebook + compilation C, C++ et Fortran
 - Nœuds GPU : Exécution uniquement
- Utilisation d'une « magic » :
 - Écriture du contenu de la cellule dans un fichier temporaire
 - Compilation
 - Soumission d'un travail pseudo-interactif

Exemple : Cours OpenACC

2.1. Fortran example

```
[2]: %%idrrun -a -l fortran
program test
!$acc parallel num_gangs(4)
  print *, "Hello OpenACC"
!$acc end parallel
end program test

pgf90 -acc -Minfo=all -ta=tesla:cc70 -o ./Notebooks/Basics/tmpylx7iz9r.f90.exe ./Notebooks/Basics/tmpylx7iz9r.f90
test:
  2, Generating Tesla code
srun --ntasks=1 --gres=gpu:1 --unbuffered --qos=qos_gpu-dev --time=00:10:00 --hint=nomultithread ./Notebooks/Basics/tmpylx7iz9r.f90.exe
srun: job 1273209 queued and waiting for resources
srun: job 1273209 has been allocated resources
Hello OpenACC
Hello OpenACC
Hello OpenACC
Hello OpenACC
```

Autres outils étudiés

- Portail « généraliste » : ActiveEon Proactive
 - Nombreuses fonctionnalités (workflows, ...)
 - Intégration de Jupyter Notebook

⇒ Pour l'instant ne correspond pas à nos besoins
- Portail « formations » : ComputeLab (ROMEIO)

⇒ Toujours en cours d'évaluation

Jupyter Hub ?

- Intégration avec Slurm via un lanceur personnalisé
⇒ Des solutions existent mais plutôt basiques
 - Comment gérer des environnements différents ?
 - Respect de nos contraintes de sécurité ?
- ⇒ Encore du travail !