



Jupyter with Guix@GRICAD

Comment travailler avec des notebooks avec Guix dans un mésocentre de calcul ?

Café Guix, 25/03/2025

[Pierre-Antoine Bouttier](#), CNRS/[GRICAD](#)

TOC

- 1 Le mésocentre de calcul à GRICAD
- 2 Jupyter sur un supercalculateur
- 3 Remarques sur les notebooks et le HPC

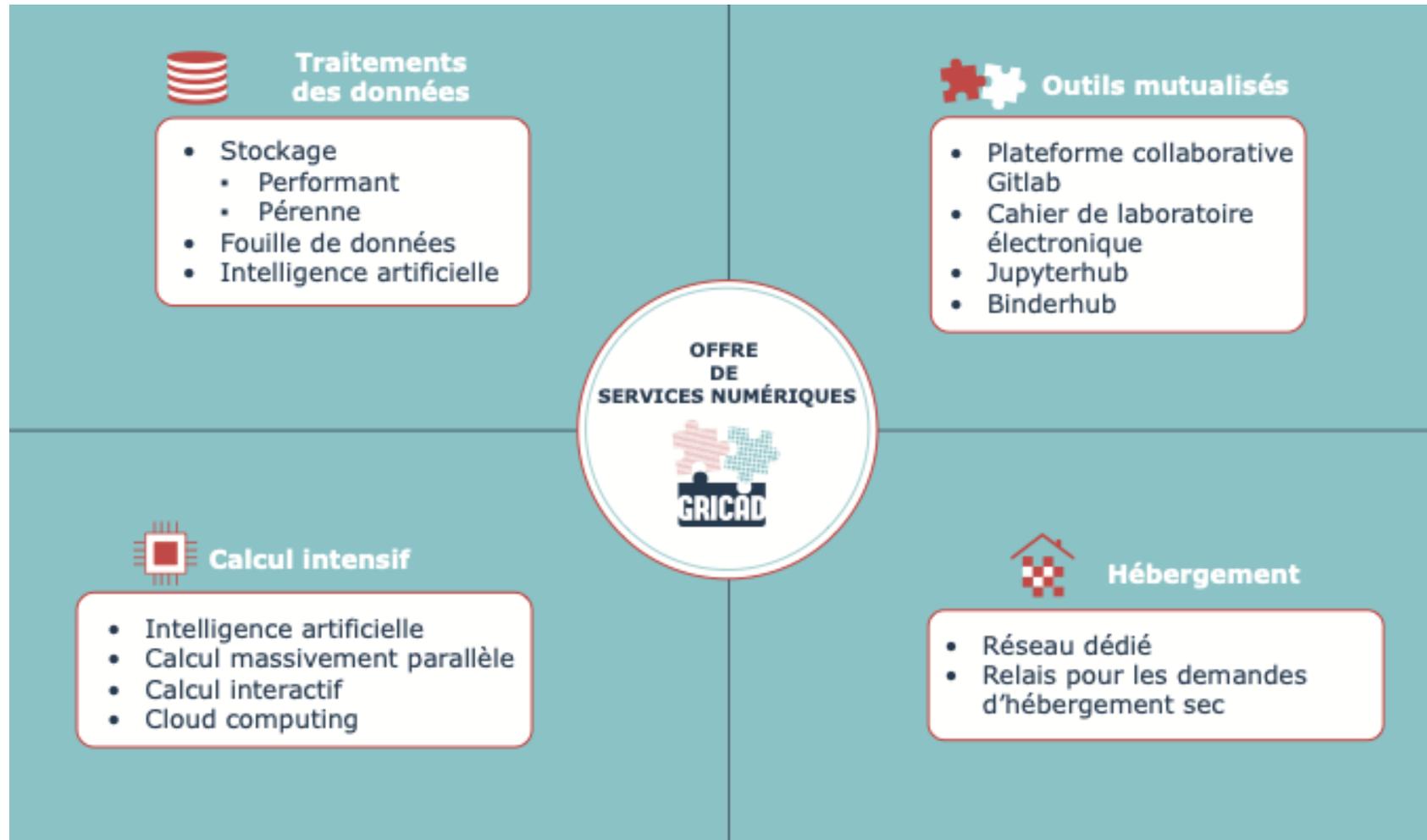
TOC

- 1 **Le mésocentre de calcul à GRICAD**
- 2 **Jupyter sur un supercalculateur**
- 3 **Remarques sur les notebooks et le HPC**

Les missions de GRICAD

- **Accompagnement, conseils et formations** aux chercheurs sur leurs besoins liés au calcul scientifique, aux données de la recherche
- Mise à disposition **de services et d'infrastructures avancés et mutualisés** pour le calcul intensif et l'exploitation des données de la recherche...
- ... **Librement accessibles** , à destination de l'ensemble des **communautés de recherche grenobloises et de leurs collaborateurs**

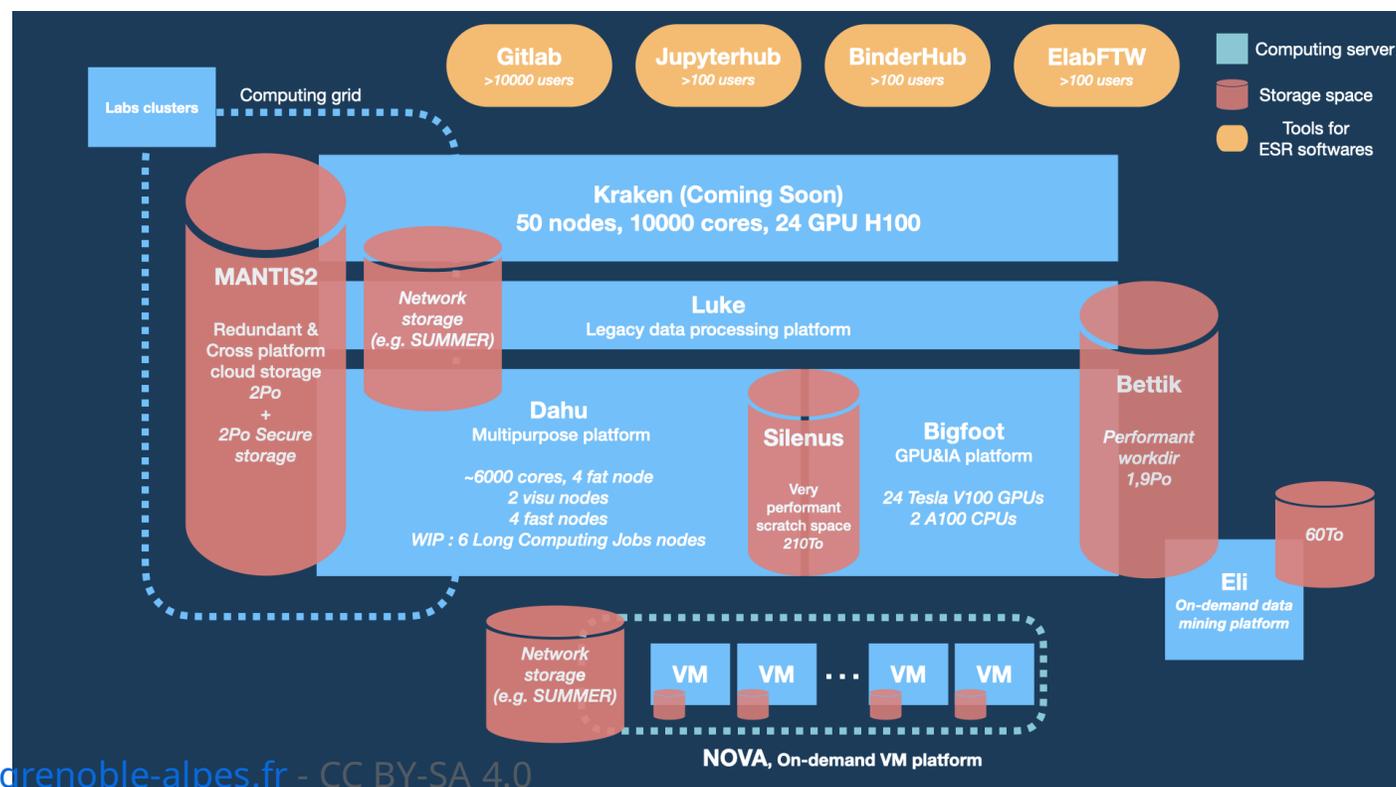
Notre offre de services numériques



Les supercalculateurs

2 principaux clusters :

- **Dahu**, orienté HPC classique, traitement massif de données
- **Bigfoot**, orienté IA/calcul sur GPU.

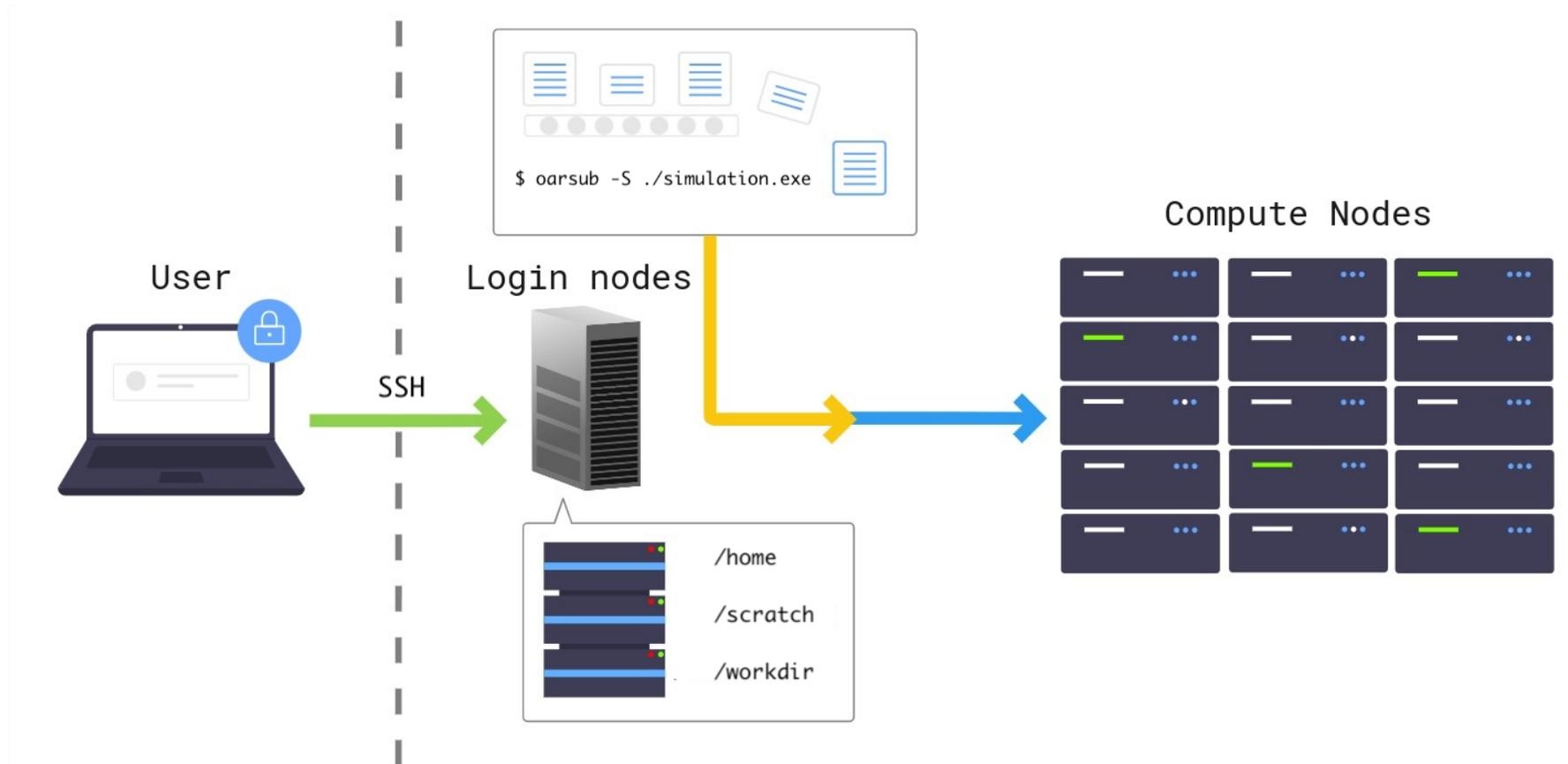


Pourquoi et comment exécuter des notebooks sur les supercalculateurs ?

TOC

- 1 Le mésocentre de calcul à GRICAD
- 2 **Jupyter sur un supercalculateur**
- 3 Remarques sur les notebooks et le HPC

Utilisation d'un supercalculateur



Pourquoi exécuter des notebooks sur un supercalculateur ?

- Pour accéder à plus de ressources pour exécuter le code du notebook !
- Tester, développer, reproduire, etc...
- ...Notamment pour les utilisateurs peu avertis en développement logiciel

En pratique - Installation et configuration de jupyter

- Une fois sur le noeud de login, besoin d'installer l'environnement logiciel
- À GRICAD, les commandes Guix sont accessibles en espace utilisateur :

```
[user@f-dahu ~]$ guix install jupyter python
[user@f-dahu ~]$ jupyter notebook --generate-config
[user@f-dahu ~]$ echo "c.NotebookApp.open_browser = False" >> ~/.jupyter/jupyter_notebook_config.py
[user@f-dahu ~]$ echo "c.NotebookApp.ip = '0.0.0.0'" >> ~/.jupyter/jupyter_notebook_config.py
```

- A ne faire qu'une seule fois !
- `guix shell` tout à fait utilisable ici, en lieu et place de `guix install`

En pratique - Lancement du job interactif

```
[user@f-dahu ~]$ oarsub -I --project test -l /core=1,walltime=2:00:00
[ADMISSION RULE] Modify resource description with type constraints
OAR_JOB_ID=14181444
Interactive mode : waiting...
[...]
Starting...

Initialize X11 forwarding...
Connect to OAR job 14181444 via the node dahu38
```

En pratique - exécution de jupyter sur les noeuds de calcul

```
[user@dahu38 ~]$ source /applis/site/guix-start.sh
[user@dahu38 ~]$ jupyter notebook
...
[I 15:48:09.697 NotebookApp] The Jupyter Notebook is running at:
[I 15:48:09.697 NotebookApp] http://(dahu38 or 127.0.0.1):8888/?token=524bfbd752f764ef447509bde0a5d8f9169ab603ce33f966
...
[C 15:48:09.727 NotebookApp]

To access the notebook, open this file in a browser:
  file:///home/user/.local/tmp/jupyter/nbserver-276827-open.html
Or copy and paste one of these URLs:
  http://(dahu38 or 127.0.0.1):8888/?token=524bfbd752f764ef447509bde0a5d8f9169ab603ce33f966
```

- `guix shell` tout à fait possible ici aussi !

En pratique - Ouvrir Jupyter dans un navigateur

Création d'un tunnel SSH sur le poste de travail utilisateur :

```
[user@workstation ~]$ ssh -fNL 8889:dahu38:8888 dahu.ciment
```

Ouverture de l'interface

```
http://localhost:8889/?token=524bfbd752f764ef447509bde0a5d8f9169ab603ce33f966
```

En pratique - Remarques

- Dans l'interface, accès à l'ensemble des espaces de stockage du cluster
- Pour les non-initiés, un peu ardu mais se systématise bien
- Usage du supercalculateur en mode interactif : **un frein** ?

TOC

- 1 Le mésocentre de calcul à GRICAD
- 2 Jupyter sur un supercalculateur
- 3 **Remarques sur les notebooks et le HPC**

HPC en interactif, un usage non-standard

Dus aux mécanismes de réservation de ressources, l'usage interactif d'un cluster HPC peut être compliqué :

- Temps d'attente potentiellement élevés
- Tributaire du créneau d'exécution

Du notebook à la production

- Devoir exécuter un notebook sur un cluster HPC == besoin de production (plus) massive de données/résultats.
- Que faire ?

Du notebook à la production

- Côté utilisateur
 - Un signe d'extraire le code du notebook pour passer sur un **projet de développement logiciel à part entière**
 - Permettra d'appliquer des bonnes pratiques de développement logiciel (gestion de version, modularité, maintenance, etc.)
- Côté GRICAD
 - Fournir des solutions simples pour accéder à plus de ressources facilement pour exécuter des notebooks
 - Accompagner les utilisateurs pour transformer le code du notebook en projet logiciel

Merci de votre attention !