

Proposition de stage

Développements sur la gestion et la visualisation de workflow via visjs dans XIOS

Dans le cadre du projet Européen du centre d'excellence ESIWACE2, le Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement (LSCE) en collaboration avec la Maison de la Simulation proposent un stage de Master 1 pour faire évoluer XIOS dans la fonctionnalité de gestion et de visualisation du workflow.

Contexte

Les modèles de système climatique terrestre produisent un important volume de données au cours de simulations réalisées sur des super-calculateurs pouvant compter jusqu'à 100 000 cœurs de calcul. A cette échelle, les écritures sur disque et le post-traitement des données, deviennent alors un important goulet d'étranglement. Afin de générer efficacement et exploiter de manière performante l'énorme flux de données générées par ses simulations, l'IPSL (Institut Pierre Simon Laplace) a développé la bibliothèque XIOS¹.

Cette bibliothèque, dédiée au calcul intensif, permet de gérer efficacement et simplement les entrée/sortie parallèles des données sur les systèmes de stockage. Dans cette nouvelle approche, orientée client/serveur, des cœurs de calcul sont exclusivement dédiés aux I/O de façon à minimiser leur impact sur le temps de calcul des modèles. L'utilisation des communications asynchrones entre les modèles (clients) et les serveurs I/O permet de lisser les pics I/O en envoyant un flux de données constant au système de fichiers tout au long de la simulation, recouvrant ainsi totalement les écritures par du calcul. Par ailleurs, XIOS implémente des fonctionnalités de workflow parallèle permettant d'effectuer le post-traitement des données « In Situ », c'est-à-dire en parallèle et sur l'ensemble des cœurs de calcul d'une simulation. Ce système de workflow, décrit la chaîne de traitement allant de l'extraction des données en provenance des modèles (flux d'entrée), le chaînage des opérateurs transformant et combinant ces flux et leur sortie dans les différents fichiers associés. Cette description s'effectue de manière souple à partir d'un fichier d'entrée XML (analysé au moment de l'exécution), déchargeant les modèles de cette tâche. Ce fichier XML est structuré hiérarchiquement et implémente des concepts d'héritages parent-enfants, amenant à des définitions de la chaîne de traitement extrêmement souples et compactes.

La bibliothèque XIOS est écrite en C++ (~120 000 lignes de codes) et utilise la bibliothèque MPI pour ses communications asynchrones entre clients et serveurs, ainsi que pour le traitement parallèle du workflow. Afin d'agréger la bande passante du système de fichiers parallèle des calculateurs, XIOS fait appel aux I/O parallèles à travers les bibliothèques NETCDF4, HDF5 et MPI-IO. Aujourd'hui, XIOS est utilisé par différents instituts en France et en Europe, et sa base d'utilisateurs est en constante progression.

¹ <https://forge.ipsl.jussieu.fr/ioserver/wiki>

Mission

Le workflow dans XIOS consiste à plusieurs aspects. Les entrées du workflow XIOS peuvent être liées à l'extraction des données provenant des modèles, à la lecture de fichiers externes, ou bien à la récupération des données envoyées par les serveurs IO. Le workflow effectue ensuite le chaînage des opérations appliquées sur les données. XIOS propose plusieurs types d'opérations parmi lesquelles on compte des opérations arithmétiques, des transformations géométriques, ou bien des intégrations temporelles. Une fois le chaînage des opérations effectué, le workflow se termine par l'envoi des flux calculés vers un fichier de sortie pour écriture, ou vers le modèle pour être utilisé lors des itérations suivantes.

Combiné avec l'utilisation du XML, notamment à travers le concept d'héritages parent-enfants, le workflow de XIOS présente une complexité importante. Pour identifier le parcours des flux à travers le workflow, nous avons besoin d'un outil qui permet de donner un aperçu visuel de chaque opération/transformation qui leur sont appliqués. Développé très récemment, nous avons mis en place un code écrit en C++ qui remplit cet objectif. Le workflow parcouru peut être facilement visualisé via un navigateur web.

Cet outil donne un aperçu du workflow et permet d'identifier visuellement le chaînage des opérations appliquées sur chaque flux de donnée. Il est aussi utile dans certains cas pour déboguer le workflow. Pour cela, nous visualisons l'ensemble des itérations temporelles de la simulation. Mais, quand le nombre de pas de temps est élevé, le workflow devient lourd et le graphe associé ne peut pas être correctement visualisé. Pour améliorer la performance de la visualisation, nous devons donc alléger le workflow à visualiser en nous concentrant uniquement sur la partie de workflow qui nous intéresse. De plus, nous souhaitons également donner le choix aux utilisateurs pour définir la période de simulation durant laquelle le workflow sera enregistré et visualisé.

Pour achever ces objectifs, nous avons besoin de modifier le code et d'introduire de nouvelles fonctionnalités. Le/La stagiaire va débuter son stage par se familiariser du fonctionnement de XIOS. Il/Elle sera amené(e) à étudier la gestion actuelle de workflow. Ensuite, il/elle effectuera le développement du code afin d'améliorer la performance de la visualisation du workflow. Nous envisageons aussi d'enrichir l'interactivité du graphe de workflow via HTML et vis.js².

Compétences :

- Maîtrise de langage de programmation (C++).
- Maîtrise du parallélisme en mémoire distribuée et partagée.
- Connaissance du HTML.
- Gestion de codes source sous Subversion (SVN).

Ce stage est prévu pour 3 mois et est destiné aux élèves de M1. La personne sera accueillie à la Maison de la Simulation³ (Gif-sur-Yvette). Pour toutes informations complémentaires, veuillez contacter Mme. Yushan WANG (yushan.wang@cea.fr)

² <https://visjs.org/>

³ <http://www.maisondelasimulation.fr/>