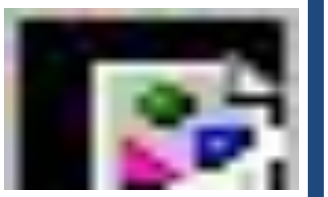
Session de formation 2018

South Green bioinformatics platform

12 Mars	Guide de survie à Linux : les commandes de base pour débuter sur un serveur linux
13 Mars	Linux avancé : manipuler et filtrer des fichiers sans connaissance de programmation
15 Mars	**Initiation à l'utilisation du cluster bioinformatique itrop**
23 Mars	Initiation aux gestionnaires de workflow South Green: Galaxy ou TOGGLe
26 Mars	Initiation aux analyses de données transcriptomiques
05 Avril	Initiation à git

Bioversity International



diade IPME









SouthGreen bioinformatics platform






agap UMR BGPI Biologie et Génétique des Interactions Plante-Parasite LSTM Laboratoire des Symbioses Tropicales et Méditerranéennes

INRA SCIENCE & IMPACT cirad



Bioversity International

Institut de Recherche pour le Développement

SouthGreen bioinformatics platform

diade

IPME

UMI233 TransVIH-MI

MIVEGEC Maladies Infectieuses et Vecteurs Écologie, Génétique, Évolution et Contrôle

plateau i-trop

agap

UMR BGPI Biologie et Génétique des Interactions Plante-Parasite

LSTM Laboratoire des Symbioses Tropicales et Méditerranéennes

INRA SCIENCE & IMPACT

cirad

www.southgreen.fr

https://github.com/SouthGreenPlatform

The South Green portal: a comprehensive resource for tropical and Mediterranean crop genomics, Current Plant Biology, 2016

Session de formation 2018

- Toutes nos formations :
  https://southgreenplatform.github.io/trainings/
- Topo & TP : **HPC IRD**
- Environnement de travail : **Logiciels à installer**

Initiation HPC cluster

www.southgreen.fr

https://southgreenplatform.github.io/trainings

Objectifs du module

Objectif

Acquérir les bonnes pratiques pour utiliser le cluster de calcul Itrop !

Applications

- Connaître l'architecture du cluster
- Connaître le rôle des différentes partitions
- Utiliser SGE (qusb, qrsh, qhost, qacct, qstat, qqdel)
- Utiliser les modules environment
- Faire du scripting de base

ARCHITECTURE

Qu’est ce qu’un cluster?

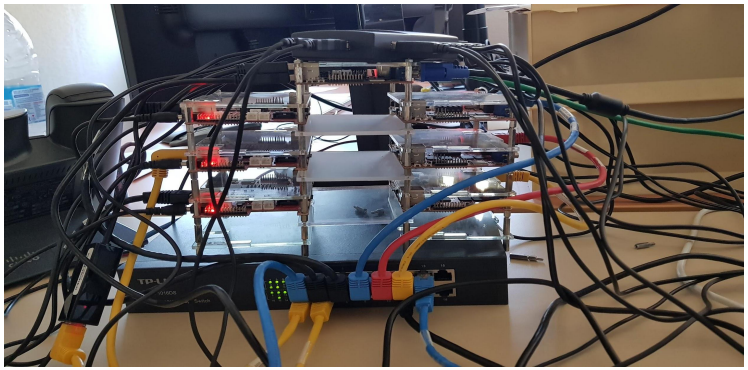
- Un cluster est une unité logique constituée de plusieurs serveurs
- Agit comme une unique machine puissante
- Permet d’ obtenir une puissance de calcul élevée
- Une plus grande capacité de stockage
- Une fiabilité supérieure
- Une plus grande disponibilité des ressources

Qu’est ce qu’un cluster?

- Un cluster est une unité logique constituée de plusieurs serveurs
- Agit comme une unique machine puissante
- Permet d’ obtenir une puissance de calcul élevée
- Une plus grande capacité de stockage
- Une fiabilité supérieure
- Une plus grande disponibilité des ressources

Qu’est ce qu’un cluster?

- Un cluster est une unité logique constituée de plusieurs serveurs
- Agit comme une unique machine puissante
- Permet d’ obtenir une puissance de calcul élevée
- Une plus grande capacité de stockage
- Une fiabilité supérieure
- Une plus grande disponibilité des ressources



Composants d'un cluster

- Nœud maître : Ordonnanceur.
  Gère les ressources et les priorités des jobs

- Nœuds de calcul : Ressources (CPU ou mémoire RAM) utilisées par le master

CALCUL

Composants d'un cluster

- Nœud maître : Ordonnanceur.
  Gère les ressources et les priorités des jobs

- Nœuds de calcul : Ressources (CPU ou mémoire RAM) utilisées par le master

- Serveur(s) NAS :
  Stockent les données utilisateurs et les résultats d'analyses

CALCUL

STOCKAGE

Architecture: rôle des éléments

bioinfo-master
.ird.fr
91.203.34.148

Rôle : Lancer et prioriser les jobs sur les nœuds de calcul

Accessible depuis Internet

Connexion : ssh login@bioinfo-master.ird.fr

Architecture: rôle des éléments

bioinfo-master.ird.fr
91.203.34.148

Rôle : Lancer et prioriser les jobs sur les nœuds de calcul

Accessible depuis Internet

Connexion : ssh login@bioinfo-master.ird.fr

22 noeuds avec bioinfo-inter.ird.fr
91.203.34.150

Rôle : Utilisés par le maître pour exécuter des jobs

Pas accessibles depuis Internet

node0 à node22

Noeud interactif : bioinfo-inter.ird.fr

Connexion : ssh login@bioinfo-inter.ird.fr

Architecture: rôle des éléments

bioinfo-master.ird.fr
91.203.34.148

Rôle : Lancer et prioriser les jobs sur les nœuds de calcul

Accessible depuis Internet

Connexion : ssh login@bioinfo-master.ird.fr

22 noeuds avec bioinfo-inter.ird.fr
91.203.34.150

Rôle : Utilisés par le maître pour exécuter des jobs

Pas accessibles depuis Internet

node0 à node22

Noeud interactif : bioinfo-inter.ird.fr

Connexion : ssh login@bioinfo-inter.ird.fr

bioinfo-nas3.ird.fr
91.203.34.180

Role : Stocker les données utilisateurs

Accessibles depuis Internet

Connexion : filezilla ou scp

bioinfo-nas.ird.fr
91.203.34.157

bioinfo-nas2.ird.fr
91.203.34.160

Partitions sur le cluster itrop

/home : Votre répertoire personnel
Quota 100Go
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/teams : Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
d'une même équipe
Quota 200Go
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/data2 : Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

Partitions sur le cluster itrop

/home : Votre répertoire personnel
Quota 100Go
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/team : Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
d'une même équipe
Quota 200Go
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/data2 : Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/data : Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : bioinfo-nas2.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/data3 :Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : bioinfo-nas3.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

Partitions sur le cluster itrop

/home : Votre répertoire personnel
Quota 100Go
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/team : Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
d'une même équipe
Quota 200Go
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/data2 : Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go to 1To
Hébergée sur : bioinfo-nas.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/data : Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : bioinfo-nas2.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/data3 :Données projet partagées
entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : bioinfo-nas3.ird.fr
Partagée sur toutes les machines

/scratch : Répertoire temporaire de travail
1To à 5To
Hébergée sur : **chaque noeud**
Pas partagée mais uniquement en local

SUN GRID ENGINE (SGE)

L’ordonnanceur sge

- SGE (SUN Grid Engine) est un gestionnaire de ressources de calcul sous linux, capable de gérer de deux à des milliers de serveurs et des centaines de clusters de plusieurs nœuds à la fois.
- Un outil opensource
- 3 fonctions principales :

  - Alloue les ressources (CPU,RAM) aux utilisateurs pour qu'ils puissent lancer leurs analyses
  - Fournit un cadre pour lancer,exécuter et monitorer les jobs sur l'ensemble des nœuds alloués
  - Gère la priorité des jobs en file d'attente

Les files d'attentes sge

Bioinfo.q : queue par défaut
Noeuds: node2, node8, node9, node10, node11,node12,node13, ,node14,node15,node16,node17, node19,node20
RAM: de 48Go à 64Go
Coeurs: de 12 à 20 coeurs

dynadiv.q : priorité pour l'équipe dynadiv
Noeuds: node2, node10
RAM: 48Go
Coeurs: 12 coeurs
/scratch de 5To pour node10

dynadiv.q : priorité pour thomas Couvreur
Noeuds: node20
RAM: 64Go
Coeurs: 20 coeurs

r900.q : queue avec noeud **DELL**
Noeuds: node5, node21
RAM: 32Go
Coeurs: 16 coeurs

longjob.q : jobs longs ou > à 10 jobs
Noeuds: node0, node1, node11
RAM: 48Go
Coeurs: 12 coeurs

alizon.q : priorité pour l'équipe de samuel Alizon
Noeuds: node8, node9, node12
RAM: 48Go
Coeurs: 12 coeurs

alizon.q : priorité pour le logiciel smrtportal
Noeuds: node17, node18
RAM: 64Go
Coeurs: 12 coeurs

Commandes sge: allocation de ressources

Actions	Commandes
• Réserver un coeur sur un nœud de manière interactive	$ **qrsh**
• Réserver un coeur sur un noeud en particulier	$ **qrsh -l hostname=nodeX** Avec X le numéro du noeud
• Réserver X coeur sur un noeud	$~ **qrsh -pe ompi X** Avec X : le nombre de processeurs de 0 0 12

Commandes sge: Options de qsub

Actions	Commandes
• Lancer un script en mode batch	$**qsub + script.sh**
• Propager l'environnement chargé au noeud	$**qsub -V script.sh**
• Donner un nom à votre job	$~ **qsub -N job_name script.sh**
• Utiliser plusieurs processeurs	$~ **qsub -pe ompi X script.sh** **Avec X le nombre de coeurs à utiliser**
• Demander un certain montant de RAM	**$~ qsub -l mem_free=XG script.sh** **Avec X le montant de mémoire à réserver**
• Demander un noeud en particulier	**$~ qsub -l hostname=nodeX script.sh**
• Lancer directement une commande avec qsub	**$~ qsub -b y « command »**

Commandes sge: Informations

Actions	Commandes
• Informations sur l'état des noeuds • Voir ses jobs en cours	$ **qhost** $~ qstat
• Informations sur les jobs lancés	$~ **qstat -j <JOB_ID>** With JOB_ID :the job number
• Informations sur les jobs terminés	$~ **qacct -j <JOB_ID>** With JOB_ID :the job number
• Informations globales sur les queues	$~ qstat -g c

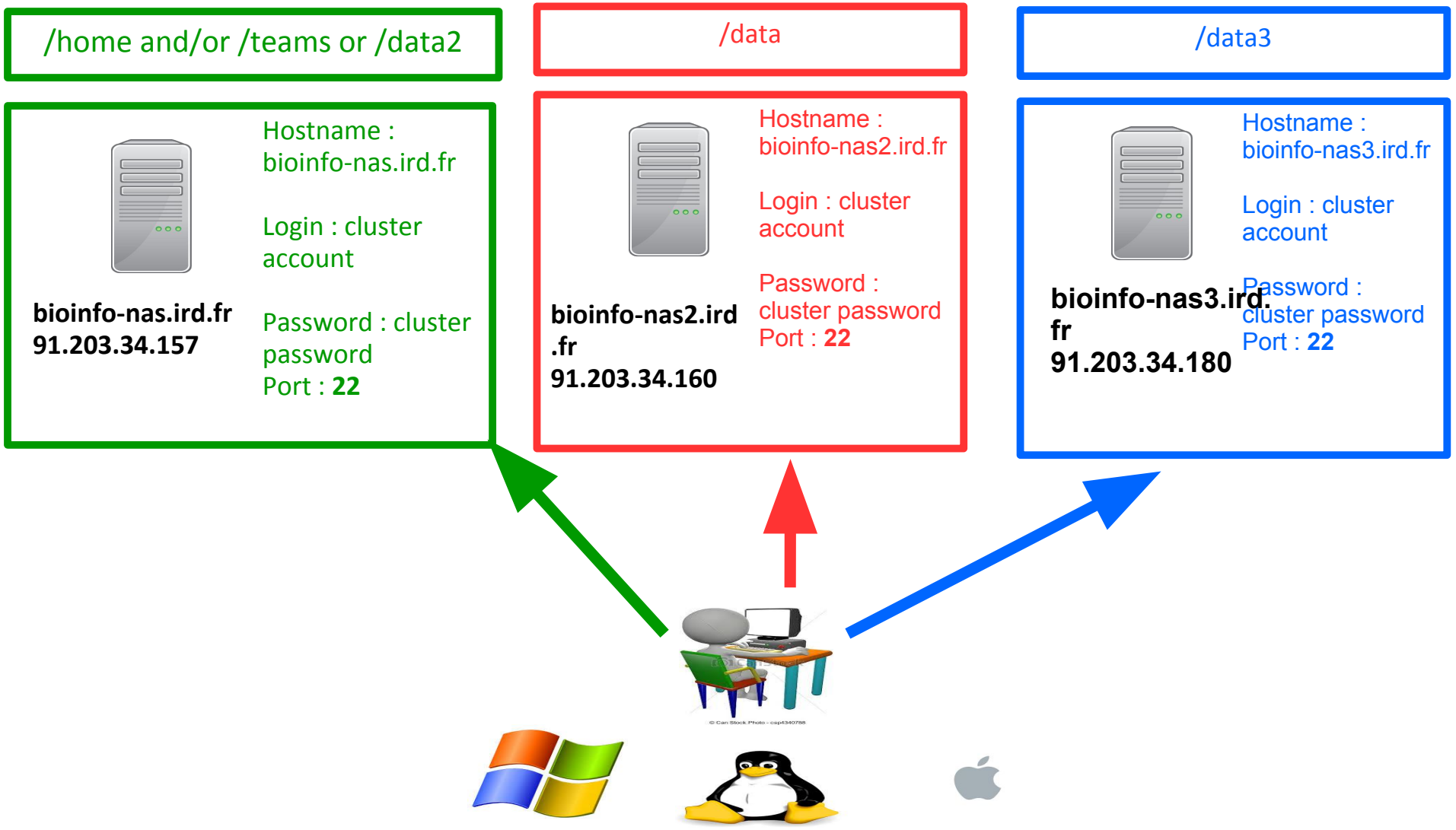
Commandes sge: suppression

Actions	Commandes
• Suppression d'un job	$~ **qdel <JOB_ID>** avec JOB_ID : l'identifiant du job

1

TP: Lancer une analyse blast de manière interactive

Transferts de données sur le cluster itrop



Etape1: copie des données sur le cluster

Ouvrir filezilla et récupérer le fichier « HPC_training_2018_fr.pdf »
dans /data/projects/tp-cluster/training_2018

Etape1: copie des données sur le cluster

Ouvrir filezilla et récupérer le fichier « HPC_training_2018_fr.pdf »
dans /data/projects/tp-cluster/training_2018

Renseigner les paramètres suivants :

Hostname : **bioinfo-nas2.ird.fr**
Login : votre login
Mot de passe : votre login
Port :**22**
Naviguer dans la fenêtre de droite jusqu'à /data/projects/tp-cluster/training_2018
Récupérer le fichier HPC_training_2018_fr.pdf en faisant un glisser-déposer

Connexion au cluster itrop

Launch scripts to several nodes

bioinfo-master.ird.fr
91.203.34.148

Hostname : bioinfo-master.ird.fr

Login : cluster account

Password : cluster password
Port : **22**

Use the qsub command

Test your script(s)

bioinfo-inter.ird.fr
91.203.34.150

Hostname : bioinfo-inter.ird.fr

Login : cluster account

Password : cluster password

Port : **22**

Or use the qrsh command on bioinfo-master.ird.fr

With Putty
Use parameters above

With terminal
Use the ssh command

Etape2: réservation d'un coeur sur un noeud

Se connecter à bioinfo-master.ird.fr via ssh

Taper :
$~ssh login@bioinfo-master.ird.fr sur Apple ou Linux

Sous windows : télécharger Mobaxterm à l'URL :
https://mobaxterm.mobatek.net/download-home-edition.html
Puis se connecter à bioinfo-master.ird.fr

Etape2: réservation d'un coeur sur un noeud

On peut réserver un nœud par lancer une analyse
pendant une durée limitée en utilisant la commande qrsh
Taper la commande qstat et analyser le résultat

Etape2: réservation d'un coeur sur un noeud

On peut réserver un processeur sur un nœud pour lancer une analyse pendant une durée limitée en utilisant la commande qrsh
Taper la commande qstat et analyser le résultat

Type :
$~qrsh
Vérifier sur quel noeud vous êtes avec la commande
$~ uname -a
$~ qstat

Etape3 : création d'un répertoire d'analyses

Se déplacer dans le répertoire d'accueil des données temporaires /scratch
Créer un répertoire pour y accueillir nos données

Etape3 : création d'un répertoire d'analyses

Se déplacer dans le répertoire d'accueil des données temporaires /scratch
Créer un répertoire pour y accueillir nos données

Taper les commandes :
$~cd /scratch
$~ mkdir login (avec le login le mot de répertoire de son choix)

Transfert de données avec scp

En étant connecté à A

Répertoire distant à transférer : /data/projects/tp-cluster/training_2018

Login : login

répertoire de destination sur le noeud : /scratch/tando

Copier le répertoire distant depuis le serveur B vers le serveur local A

Destination
ServerA

Source
ServerB

Transfert de données avec scp

En étant connecté à A

Répertoire distant à transférer : /data/projects/tp-cluster/training_2018

Login : tando

répertoire de destination sur le noeud : /scratch/tando

Copier le répertoire distant depuis le serveur B vers le serveur local A

scp -r login@source_server:/remote_path

/data/projects/tp-cluster/training_2018

Destination ServerA

Source ServerB

Transfert de données avec scp

En étant connecté à A

Répertoire distant à transférer : /data/projects/tp-cluster/training_2018

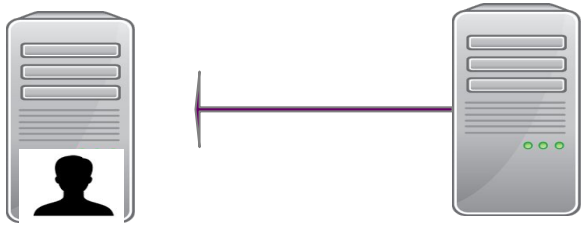
Login : tando

répertoire de destination sur le noeud : /scratch/tando

Copier le répertoire distant depuis le serveur B vers le serveur local A

scp -r login@source_server:/remote_path local_folder

/scratch/tando



/data/projects/tp-cluster/training_2018

Destination ServerA

Source ServerB

Transfert de données avec scp

En étant connecté à A

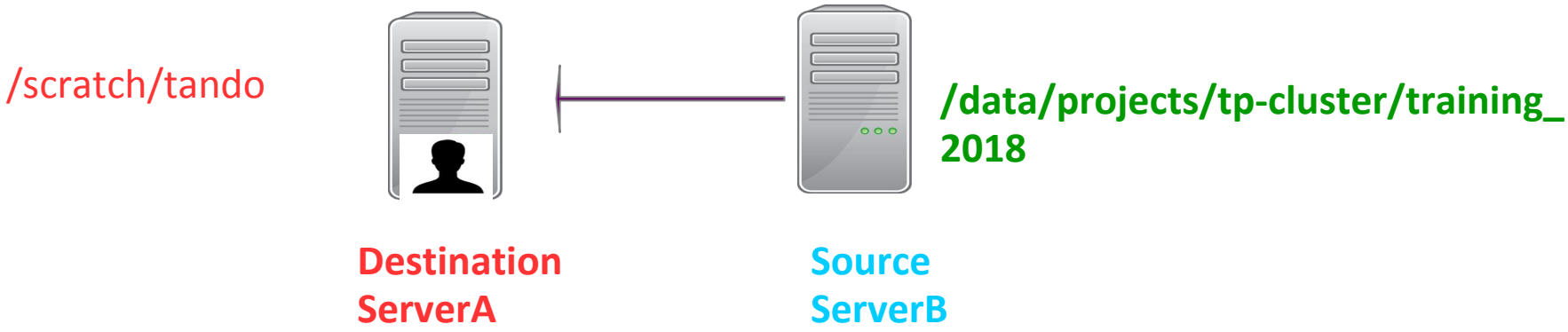
Répertoire distant à transférer : /data/projects/tp-cluster/training_2018

Login : tando

répertoire de destination sur le noeud : /scratch/tando

Copier le répertoire distant depuis le serveur B vers le serveur local A

scp -r login@source_server:/remote_path local_folder



scp -r login@serverB:/data/projects/tp-cluster/training_2018

Transfert de données avec scp

En étant connecté à A

Répertoire distant à transférer : /data/projects/tp-cluster/training_2018

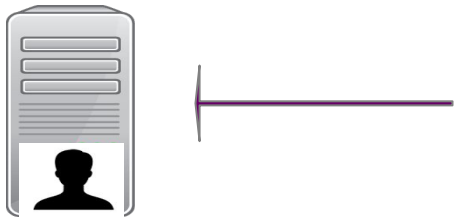
Login : tando

répertoire de destination sur le noeud : /scratch/tando

Copier le répertoire distant depuis le serveur B vers le serveur local A

scp -r login@source_server:/remote_path local_folder

/scratch/tando



/data/projects/tp-cluster/training_2018

Destination ServerA

Source ServerB

scp -r login@serverB:/data/projects/tp-cluster/training_2018 /scratch/tando

Etape4 : copie des données dans le répertoire d'analyses

Copier le répertoire /data/projects/tp-cluster/training_2018/Blast dans /scratch/login

Etape4 : copie des données dans le répertoire d'analyses

Copier le répertoire /data/projects/tp-cluster/training_2018/Blast dans /scratch/login

Taper les commandes :
$~cd /scratch/login
$~ scp -r login@bioinfo-nas2.ird.fr :/data/projects/tp-cluster/training_2018/Blast /scratch/login

Etape5 : se déplacer dans le répertoire copié

Aller dans le répertoire /scratch/login/Blast
Lister les fichiers du répertoire

Etape5 : se déplacer dans le répertoire copié

Aller dans le répertoire /scratch/login/Blast
Lister les fichiers du répertoire

Taper :
$~cd /scratch/login/Blast
$~ ls -ali

Module Environment

- Permet de choisir la version du logiciel que l'on veut utiliser

- 2 types de logiciels :
  bioinfo : désigne les logiciels de bioinformatique (exemple BEAST)
  system : désigne tous les logiciels systèmes(exemple JAVA)

- Surpassent les variables d'environnement

- 5 types de commandes :

Voir les modules disponibles : module avail
Obtenir une info sur un module en particulier : module whatis + module name
Par exemple module whatis bioinfo/blast/2.4.0+
Charger un module : module load + modulename
Par exemple module load bioinfo/blast/2.4.0+
Lister les modules chargés : module list
Décharger un module : module unload + modulename
Par exemple module unload bioinfo/blast/2.4.0+
Décharger tous les modules :
Module purge

Etape6 : Lancer une analyse

Charger le module version 2.4.0+
Utiliser la commande blastn pour lancer une analyse blast
qui fournira le fichier de sortie appelé blastn.out

Etape6 : Lancer une analyse

Charger le module version 2.4.0+
Utiliser la commande blastn pour lancer une analyse blast
qui fournira le fichier de sortie appelé blastn.out

Taper :
$~ module load bioinfo/blast/2.4.0+
$~ blastn -db All-EST-coffea.fasta -query sequence-NMT.fasta -out blastn.out

Etape7: analyse du fichier de résultat

Editer le fichier blastn.out avec l'utilitaire nano

Etape7 : Analyse du fichier de résultat

Editer le fichier blastn.out avec l'utilitaire nano

Taper :
$~ nano blastn.out

Etape8 : Copie du résultat vers son /home

Copier le fichier blastn.out vers son répertoire home utilisateur
Vérifier que le fichier est bien copié

Etape8 : Copie du résultat vers son /home

Copier le fichier blastn.out vers son répertoire home utilisateur
Vérifier que le fichier est bien copié

Taper :
$~scp blastn.out login@bioinfo-nas.ird.fr:/home/login
$~ ls -ali /home/login

Etape9 : Suppression du répertoire dans /scratch

Se déplacer dans le répertoire
Supprimer le répertoire de travail

Taper:
$~cd /scratch
$~ rm -rf *login*

2

TP: Lancer un bwa de manière interactive

TP: Lancer une analyse bwa

- Suivre les étapes du TP précédent et les adapter à celui-ci
- Le répertoire à copier est: /data/projects/training_2018/bwa
- La version de bwa à utiliser est la 0.7.12
- Les commandes à lancer sont:

bwa index referenceIrigin.fasta

bwa mem referenceIrigin.fasta irigin1_1.fastq irigin1_2.fastq >mapping.sam

- Récupérer le fichier mapping.sam et le mettre dans son /home/login

3

TP: Lancer une analyse à l’aide d’un script

Lancer un job en mode batch

- C’est le fait d’exécuter un script bash via sge
- On utilise la commande:

$~ **qsub** *script.sh*

Avec script.sh : le nom du script

Syntaxe des scripts bash

Dans la première partie du script on renseigne les options d'exécution de sge avec le mot clé #$ (partie en vert)

```
#!/bin/sh


#############     SGE CONFIGURATION     ####################
# Ecrit les erreur dans le fichier de sortie standard
#$ -j y

# Shell que l'on veut utiliser
#$ -S /bin/bash



# Email pour suivre l'execution
#$ -M prenom.nom@ird.fr          ######### Mettre son adresse mail

# Type de message que l'on reçoit par mail
#    -  (b) un message au demarrage
#    -  (e) a la fin
#    -  (a)  en cas d'abandon
#$ -m bea

# Queue que l'on veut utiliser
#$ -q bioinfo.q

# Nom du job
#$ -N Nom_a_choisir
#################################################################
```

Syntaxe des scripts bash

Dans la 2e partie du script on renseigne les actions à effectuer

```
path_to_dir="/data/projects/rep_a_choisir";
path_to_tmp="/scratch/nom_rep_a_choisir-$JOB_ID"

###### Creation du repertoire temporaire sur noeud et chargement du module blast
module load bioinfo/blastn/2.4.0+
mkdir $path_to_tmp
scp -rp nas2:$path_to_dir/* $path_to_tmp # choisir nas pour/home, /data2 et /teams ou nas2 pour /data
echo "tranfert donnees master -> noeud";
cd $path_to_tmp

###### Execution du programme
cmd="blastn -db All-EST-coffea.fasta -query  sequence-NMT.fasta -num_threads $NSLOTS  -out blastn1-$JOB_ID.out";
echo "Commande executee : $cmd";
$cmd;

##### Transfert des données du noeud vers master
scp -rp $path_to_tmp/ nas:$path_to_dir/
echo "Transfert donnees node -> master";

#### Suppression du repertoire tmp noeud
rm -rf $path_to_tmp
echo "Suppression des donnees sur le noeud";
```

Création du script blastn

- Reprendre le TP 1 et le mettre sous forme de script en s'aidant du script exemple précédent
- Lancer le script avec la commande qsub
- Observer le déroulement avec la commande watch qstat