Session de formation 2018



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











































































cirad









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 : <u>HPC IRD</u>
- 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

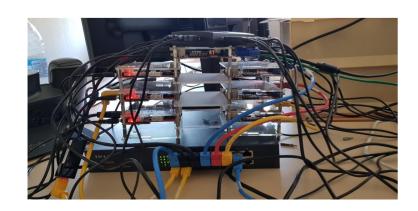




South Green Qu'est ce qu'un cluster?

- 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







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









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.ir d.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



22 noeuds avec bioinfo-inter.ird. fr 91.203.34.150



bioinfo-nas3.ird.fr 91.203.34.180 Rôle: Lancer et prioriser les jobs sur les nœuds de calcul

Accessible depuis Internet

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

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

Rôle: 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

Données conservées **3 semaines**



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



th Green 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

dynadiv2.q : priorité pour thomas

Couvreur

Noeuds: node20 RAM: 64Go

Coeurs: 20 coeurs

smrtportal.q: priorité pour le logiciel

smrtportal

Noeuds: node17, node18

RAM: 64Go Coeurs: 12 coeurs alizon.q: priorité pour l'équipe de

samuel Alizon

Noeuds: node8, node9, node12

RAM: 48Go

Coeurs: 12 coeurs



Green 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

dynadiv2.q : priorité pour thomas

Couvreur Noeuds: node20

RAM: 64Go

Coeurs: 20 coeurs

smrtportal.q : priorité pour le logiciel

smrtportal

Noeuds: node17, node18

RAM: 64Go Coeurs: 12 coeurs alizon.q: priorité pour l'équipe de

samuel Alizon

Noeuds: node8, node9, node12

RAM: 48Go Coeurs: 12 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

bigmem.q: besoin de mémoire

Noeuds: node3 RAM: 96Go

Coeurs: 12 coeurs

highmem.q : besoin de mémoire

Noeuds: node4 et node7

RAM: 144Go Coeurs: 12 coeurs



Commandes sge: allocation de ressources

Actions

Réserver un coeur sur un nœud de manière interactive

• Réserver un coeur sur un noeud en particulier

Réserver X coeur sur un noeud

Commandes

\$ qrsh

\$ qrsh -I hostname=nodeX

Avec X le numéro du noeud

\$~ qrsh -pe ompi X

Avec X : le nombre de processeurs de 0 à 12



Commandes sge: Options de qsub

Actions

- Lancer un script en mode batch
- Propager l'environnement chargé au noeud
- Donner un nom à votre job
- Utiliser plusieurs processeurs
- Demander un certain montant de RAM
- Demander un noeud en particulier

Lancer directement une commande avec qsub

Commandes

\$qsub + script.sh

\$qsub -V script.sh

\$~ qsub -N job_name script.sh

\$~ qsub -pe ompi X script.sh

Avec X le nombre de coeurs à utiliser

\$~ qsub -l mem_free=XG script.sh Avec X le montant de mémoire à réserver

\$~ qsub -I hostname=nodeX script.sh

\$~ qsub -b y command

Commandes sge: Informations

Actions

- Informations sur l'état des noeuds
- Voir ses jobs en cours

• Informations sur les jobs lancés

- Informations sur les jobs terminés
- Informations globales sur les queues

Commandes

```
$ qhost
```

\$~ qstat

\$~ qstat -j <JOB_ID>

With JOB_ID : the job number

\$~ qacct -j <JOB_ID>

With JOB_ID : the job number

\$~ qstat -g c



Commandes sge: suppression

Actions

Suppression d'un job

Commandes

\$~ qdel <JOB_ID>

avec JOB_ID : l'identifiant du job



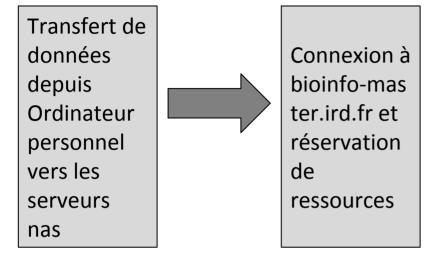
TP: Lancer une analyse blast de manière interactive



Transfert de données depuis Ordinateur personnel vers les serveurs nas

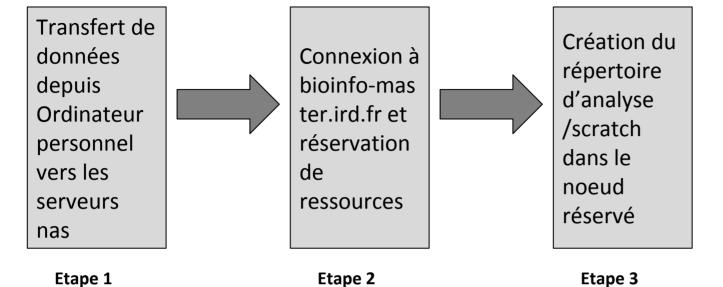
Etape 1



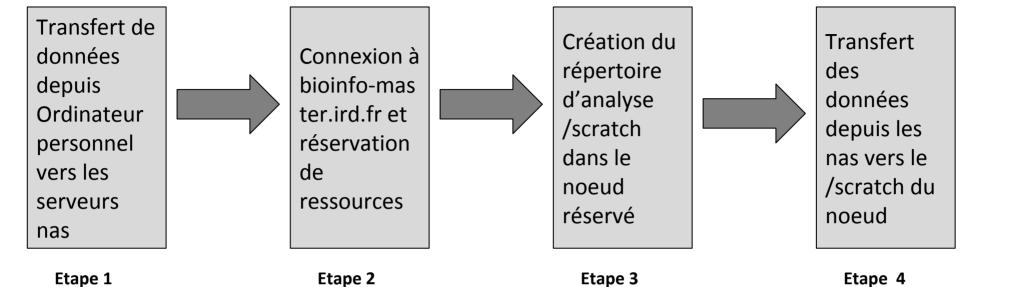


Etape 1 Etape 2

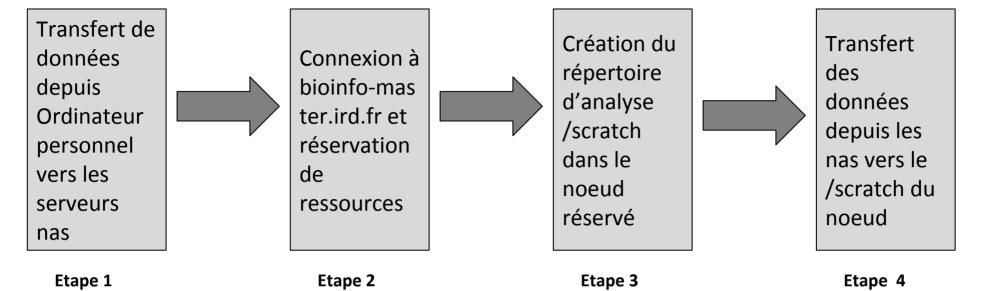


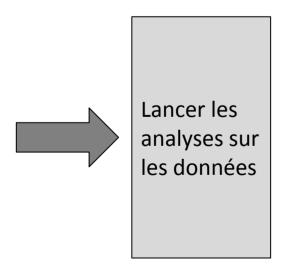






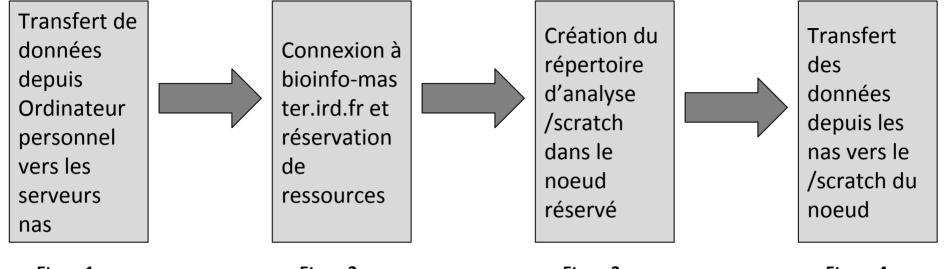




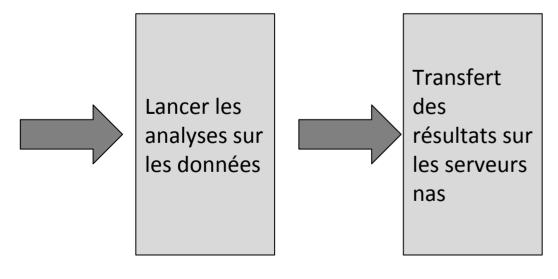


Etape 5



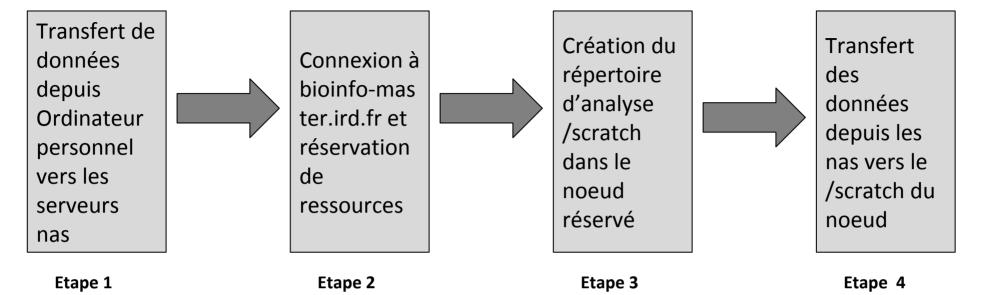


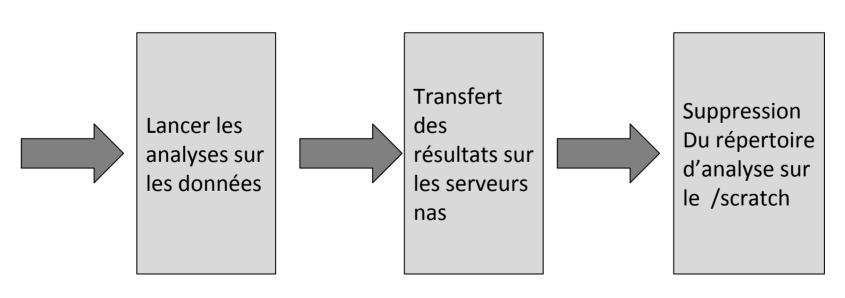
Etape 1 Etape 2 Etape 3 Etape 4



Etape 5 Etape 6







Etape 5 Etape 6 Etape 7



personnel

Transferts de données sur le cluster itrop





Transferts de données sur le cluster itrop

/home and/or /teams or /data2

Hostname: bioinfo-nas.ird.fr

Login: cluster account

bioinfo-nas.ird.fr 91.203.34.157

Password: cluster

password Port : 22

/data



.fr

91.203.34.160

Hostname: bioinfo-nas2.ird.fr

Login: cluster account

Password: cluster password bioinfo-nas2.ird Port : 22

/data3



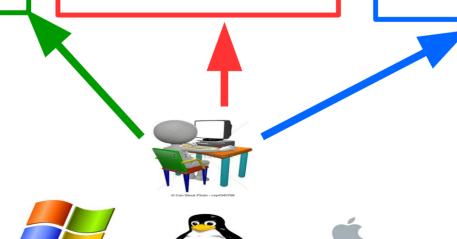
Hostname: bioinfo-nas3.ird.fr

Login: cluster account

bioinfo-nas3.irdassword: cluster password

Port : 22

91.203.34.180



Etape1: copie des données sur le cluster

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

Etape1: copie des données sur le cluster

Ouvrir filezilla et récupérer le fichier « HPC_french.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_french.pdf en faisant un glisser-déposer



Connexion au cluster itrop

Launch scripts to several nodes



bioinfo-master.ird.fr 91.203.34.148

Use the qsub

command

Hostname:

bioinfo-master.ird.f

Login: cluster

account

Password: cluster

password

Port: 22

Test your script(s)



Login: cluster account

Hostname:

bioinfo-inter.ird.fr

91.203.34.150

Password: cluster

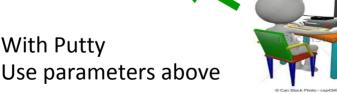
bioinfo-inter.ird.fr

password

Port : 22

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









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)



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



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



Destination ServerA



Source ServerB /data/projects/tp-cluster/training_2018



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_2
018

Destination ServerA

Source ServerB



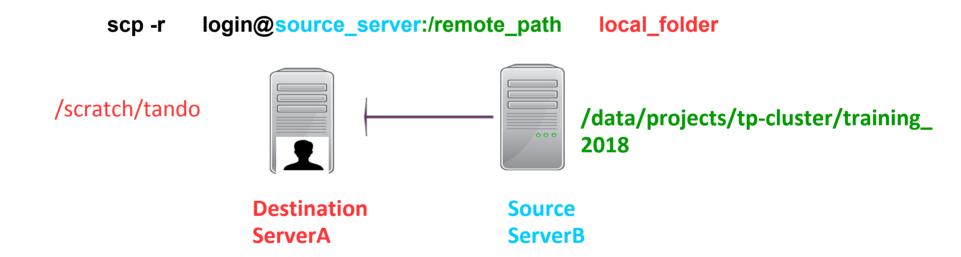
En étant connecté à A

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@serverB:/data/projects/tp-cluster/training_2018



En étant connecté à A

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

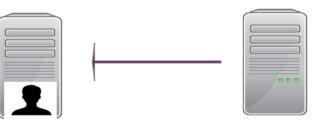
Login: tando

répertoire de destination sur le noeud : /scratch/tando

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



/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*



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 referencelrigin.fasta

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

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

Cf solution: **practice2**



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
###########
              SGF CONFIGURATION
                                  # Ecrit les erreur dans le fichier de sortie standard
#$ -i 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 ou nas3 pour /data3
echo "tranfert donnees master -> noeud";
cd Spath 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
- Rendre le script exécutable avec la commande

\$~ chmod 755 script.sh

- Lancer le script avec la commande qsub \$~ chmod 755 script.sh
- Observer le déroulement avec la commande watch qstat solution script blastn



Utiliser la commande dos2unix quand le script a été écrit sous windows



Green Création du script bwa

- Reprendre le TP 2 et le mettre sous forme de script en s'aidant du script exemple précédent
- Rendre le script exécutable avec la commande

\$~ chmod 755 script.sh

- Lancer le script avec la commande qsub
 \$~ chmod 755 script.sh
- Observer le déroulement avec la commande watch qstat solution script bwa



Utiliser la commande dos2unix quand le script a été écrit sous windows