

Initiation HPC cluster

www.southgreen.fr

<https://southgreenplatform.github.io/trainings>





Julie ORJUELA-BOUNOL¹, IE
Bioinformaticienne
25%



Ndomassi TANDO, IE
Administrateur systeme
100%
Animateur plateau



Aurore COMTE, IE
Bioinformaticienne
20%



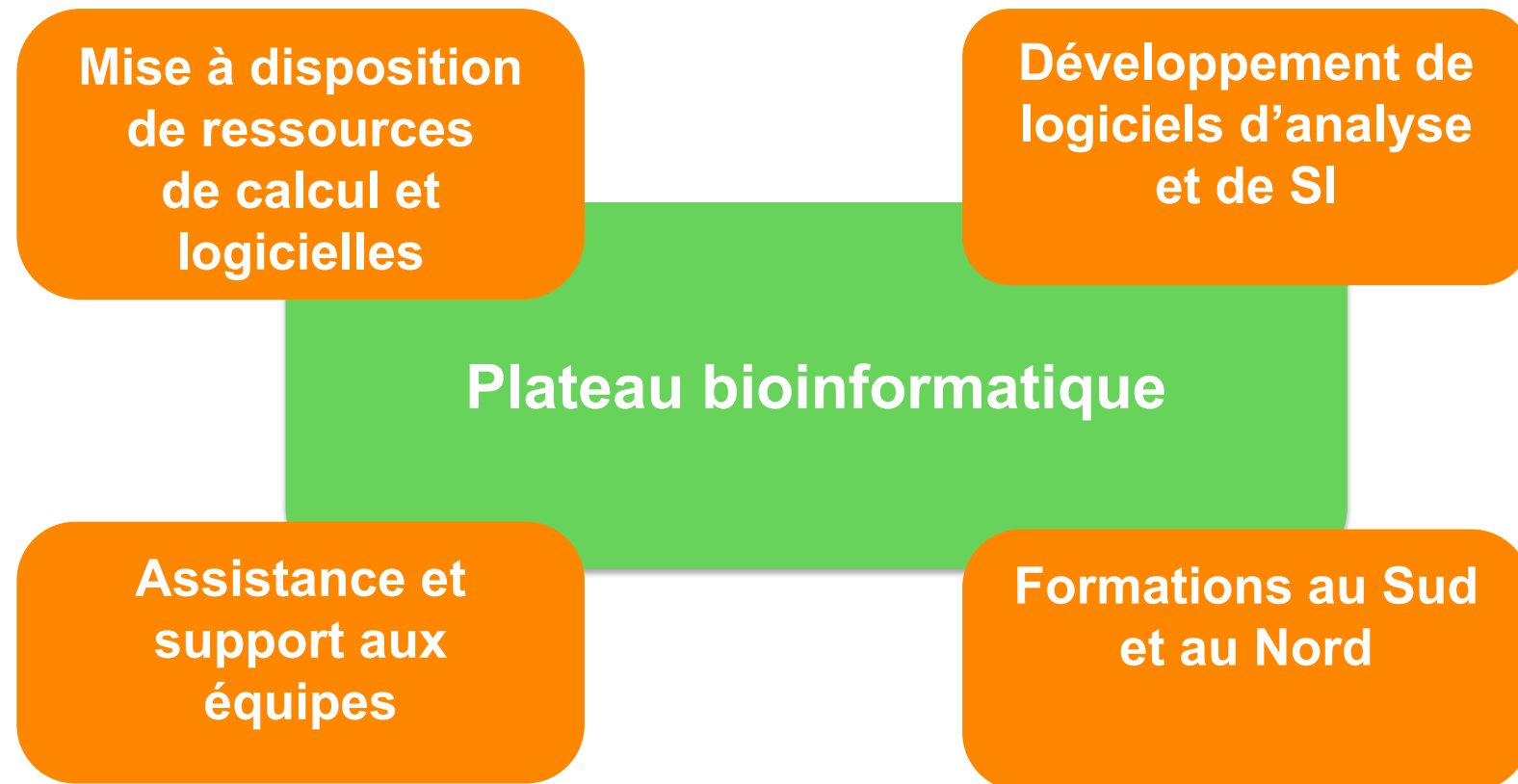
Valérie NOEL, TCS
Bioinformaticienne
25%



Bruno GRANOUILAC³, IE
Systèmes d'information
20%

Christine TRANCHANT-DUBREUIL, IE
Bioinformaticienne
20%

Alexis DEREPPER², IE
Bioinformaticien
20%



- Site <https://bioinfo.ird.fr>
 - Comptes
 - Installation logiciels
 - Projets
 - Logiciels installés
- Incidents: contacter bioinfo@ird.fr



ARCHITECTURE

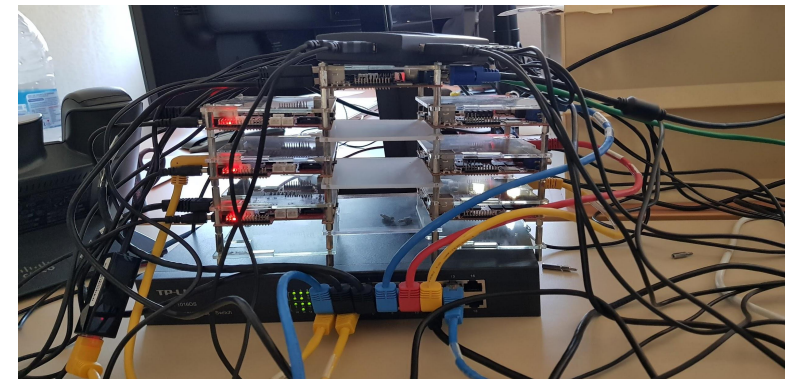
- une unité logique de plusieurs serveurs
- une unique machine puissante
- une puissance de calcul élevée
- Une plus grande capacité de stockage
- Une fiabilité supérieure
- Une plus grande disponibilité des ressources

- une unité logique de plusieurs serveurs
- une unique machine puissante
- 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?

- une unité logique de plusieurs serveurs
- une unique machine puissante
- une puissance de calcul élevée
- Une plus grande capacité de stockage
- Une fiabilité supérieure
- Une plus grande disponibilité des ressources



CALCUL



- **Noeud maître**
Gère les ressources et les priorités des jobs
- **Noeuds de calcul**
Ressources (CPU ou mémoire RAM)

CALCUL



- **Noeud maître**
Gère les ressources et les priorités des jobs
- **Noeuds de calcul**
Ressources (CPU ou mémoire RAM)

STOCKAGE



- **Serveur(s) NAS**
Stockage

- **1 Noeud Maître**



bioinfo-master.ird.fr

Rôle :

- Lancer et prioriser les jobs sur les nœuds de calcul
- Accessible depuis Internet
- Connexion :

```
ssh login@bioinfo-master.ird.fr
```

- **1 Noeud Maître**



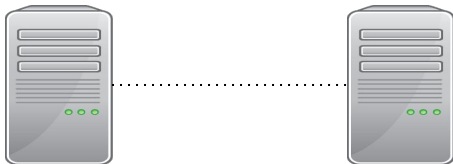
bioinfo-master.ird.fr

Rôle :

- Lancer et prioriser les jobs sur les nœuds de calcul
- Accessible depuis Internet
- Connexion :

```
ssh login@bioinfo-master.ird.fr
```

- **25 Noeud de Calcul**



nodeX
X : 0..24

Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet
- node0 à node24
- Connexion de master

```
ssh nodeX
```

● 1 Noeud Maître



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
```

● 25 Noeud de Calcul



nodeX
X : 0..24

Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet
- node0 à node24
- Connexion de master

```
ssh nodeX
```



Noeud interactif (node6)

- Accessible de l'extérieur **bioinfo-inter.ird.fr**
- Connexion :

```
ssh login@bioinfo-inter.ird.fr
```



Practice

Etape 1: Connexion, qhost

1

Aller sur le [Practice 1](#) du github

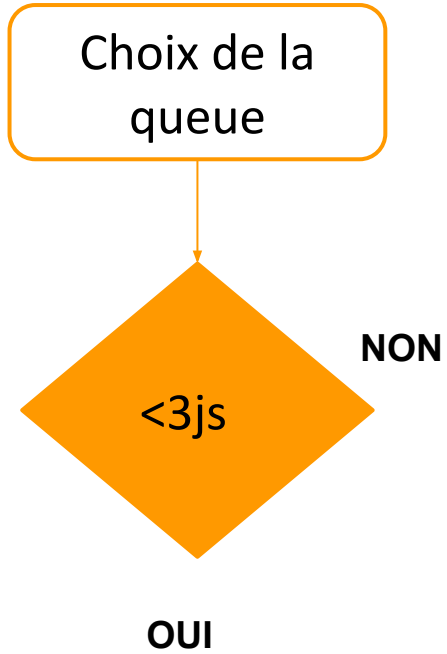
Connexion à
bioinfo-mas-
ter.ird.fr et
réservation
de
ressources



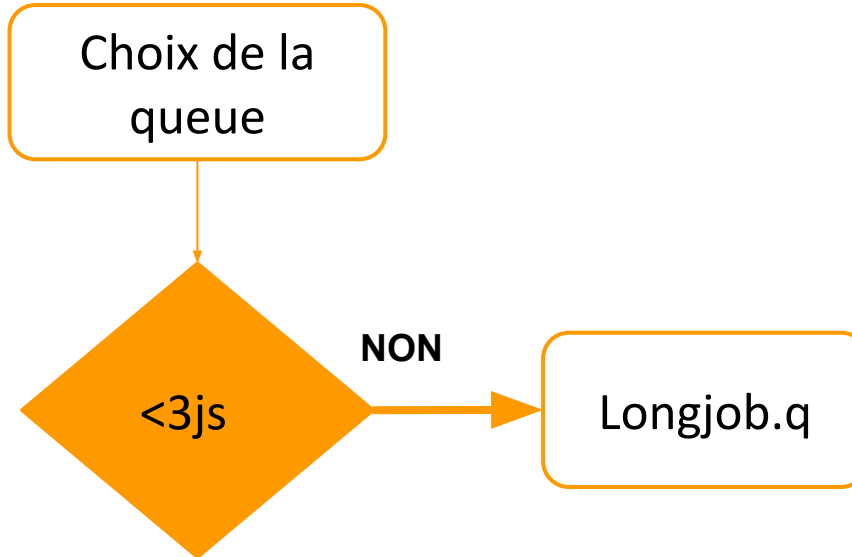
Etape 1
qrsh/qlogin
ou qsub

Queues	Utilisation	Caractéristiques RAM noeuds	Caractéristiques coeurs noeuds
bioinfo.q	Jobs courts < 3jours	48 à 64 Go	12 à 20 coeurs
longjob.q	Jobs longs > 3 jours	48 Go	12 coeurs
bigmem.q	Jobs avec besoin de plus de mémoire	96 Go	12 coeurs
highmem.q	Jobs avec besoin de beaucoup de mémoire	144 Go	12 coeurs

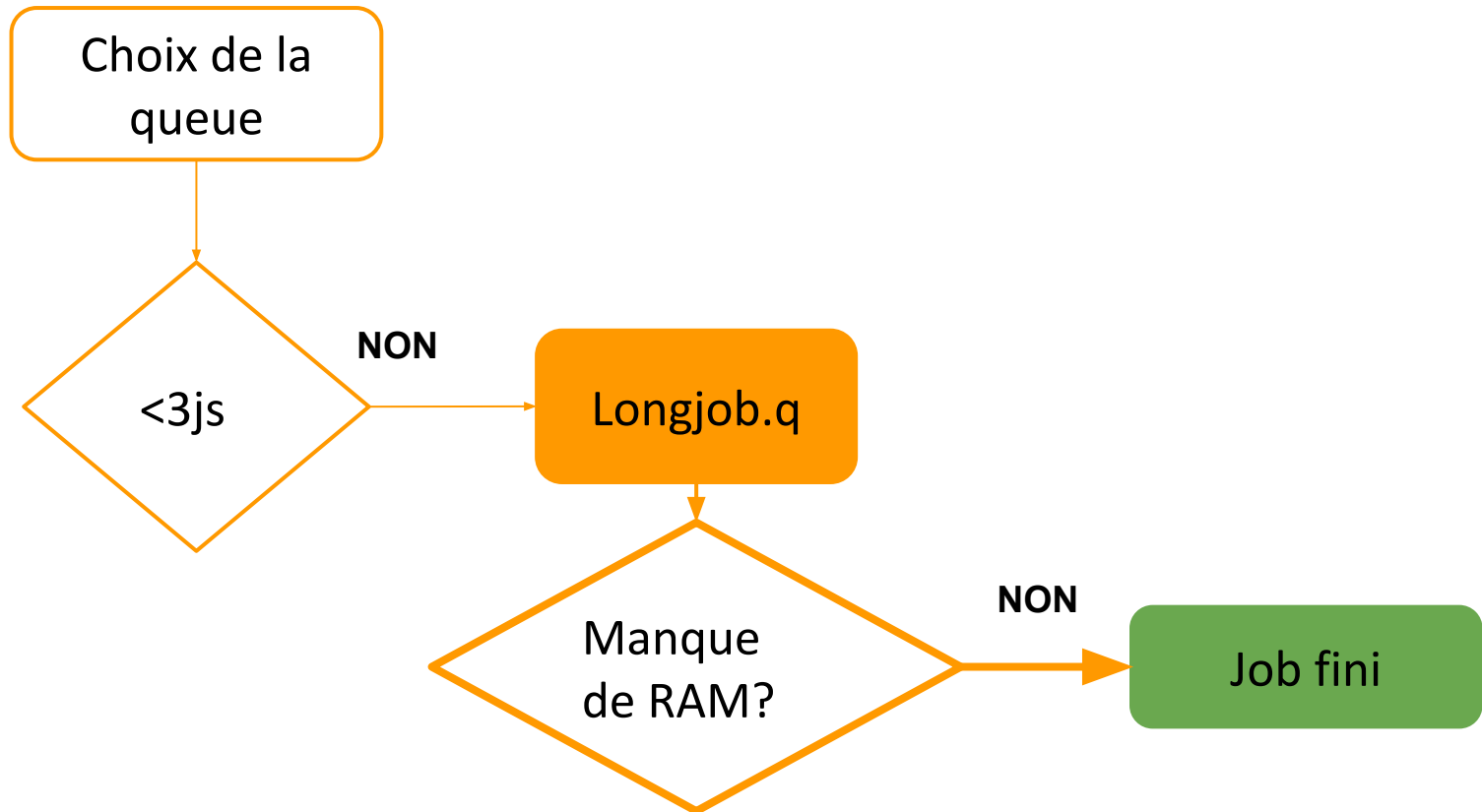
Quelle queue choisir?



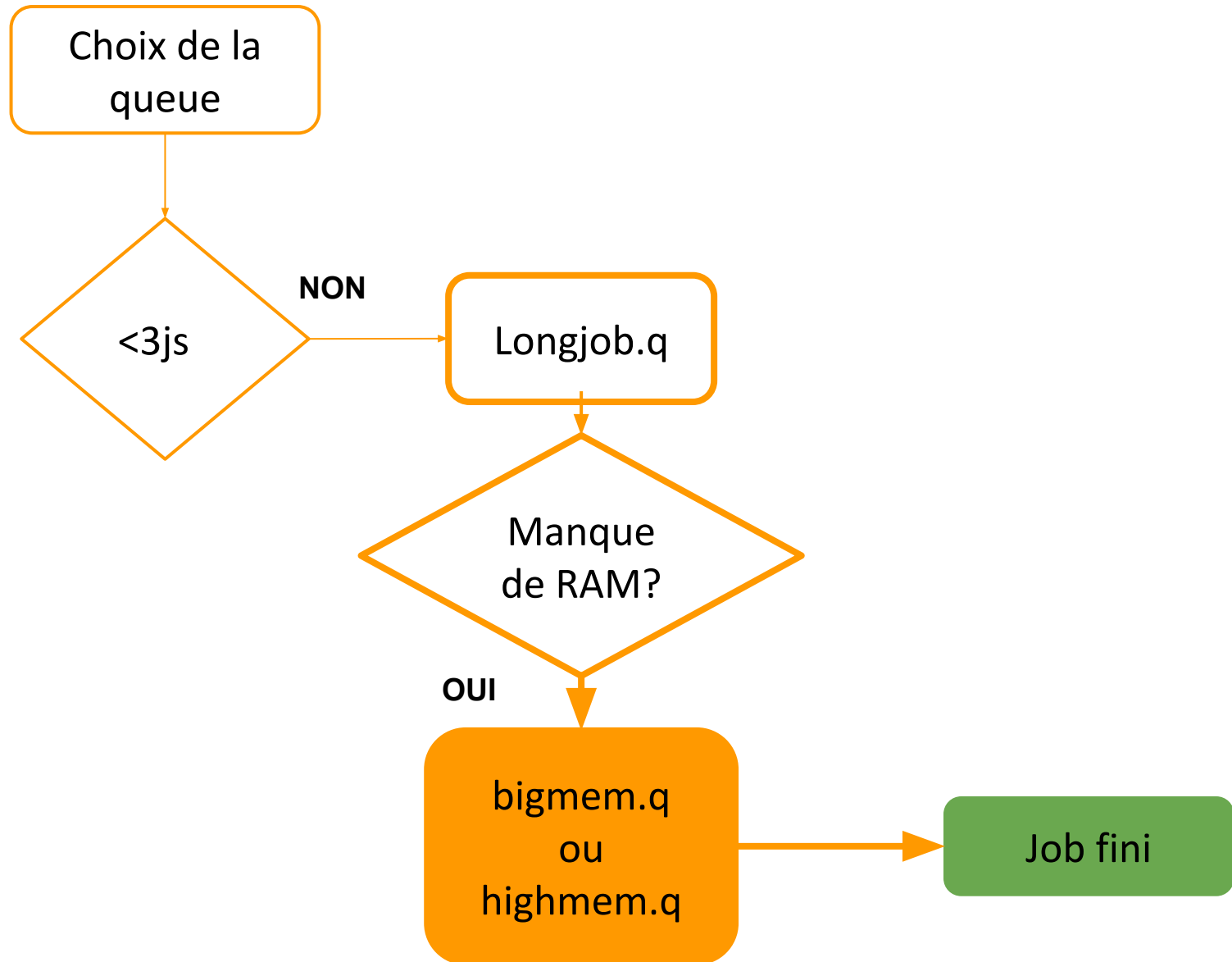
Quelle queue choisir?



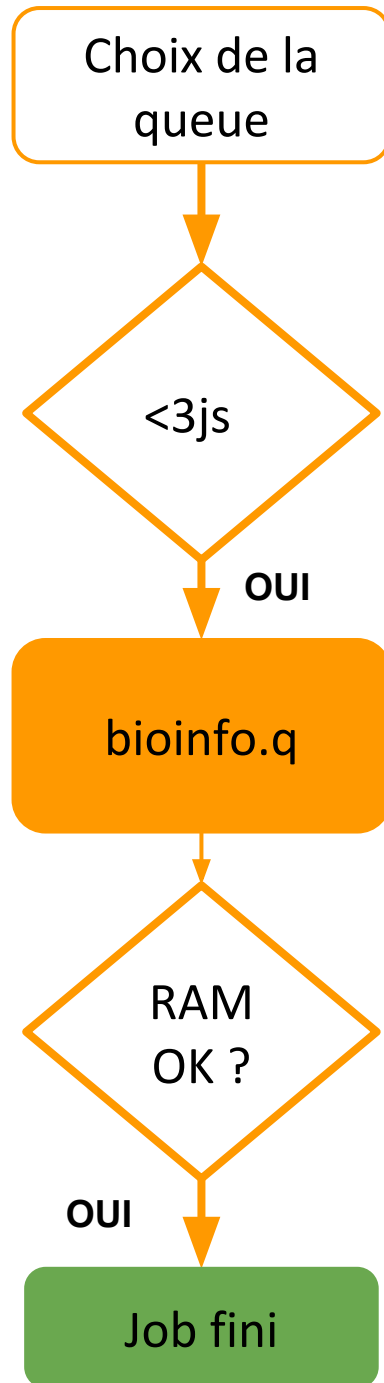
Quelle queue choisir?



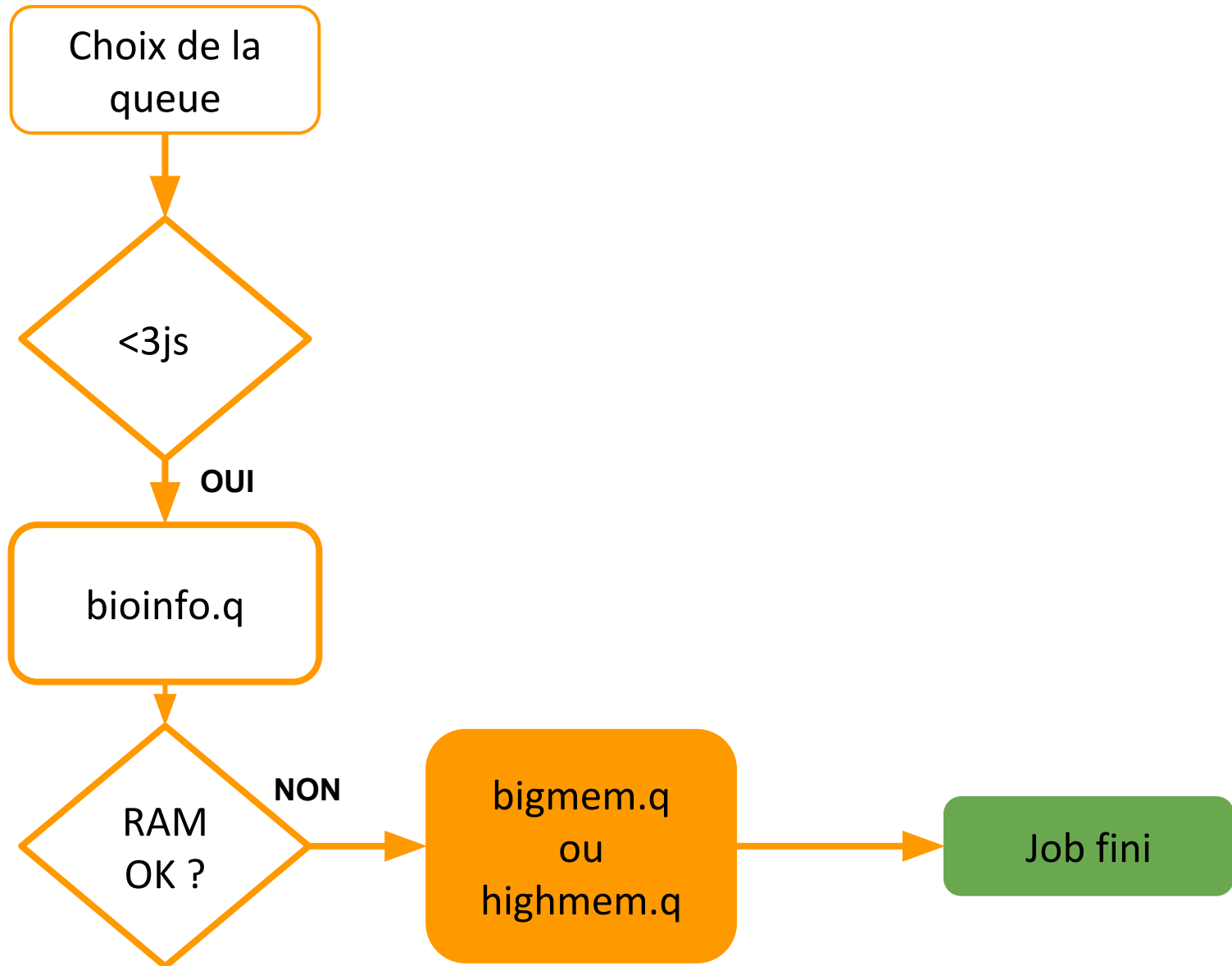
Quelle queue choisir?



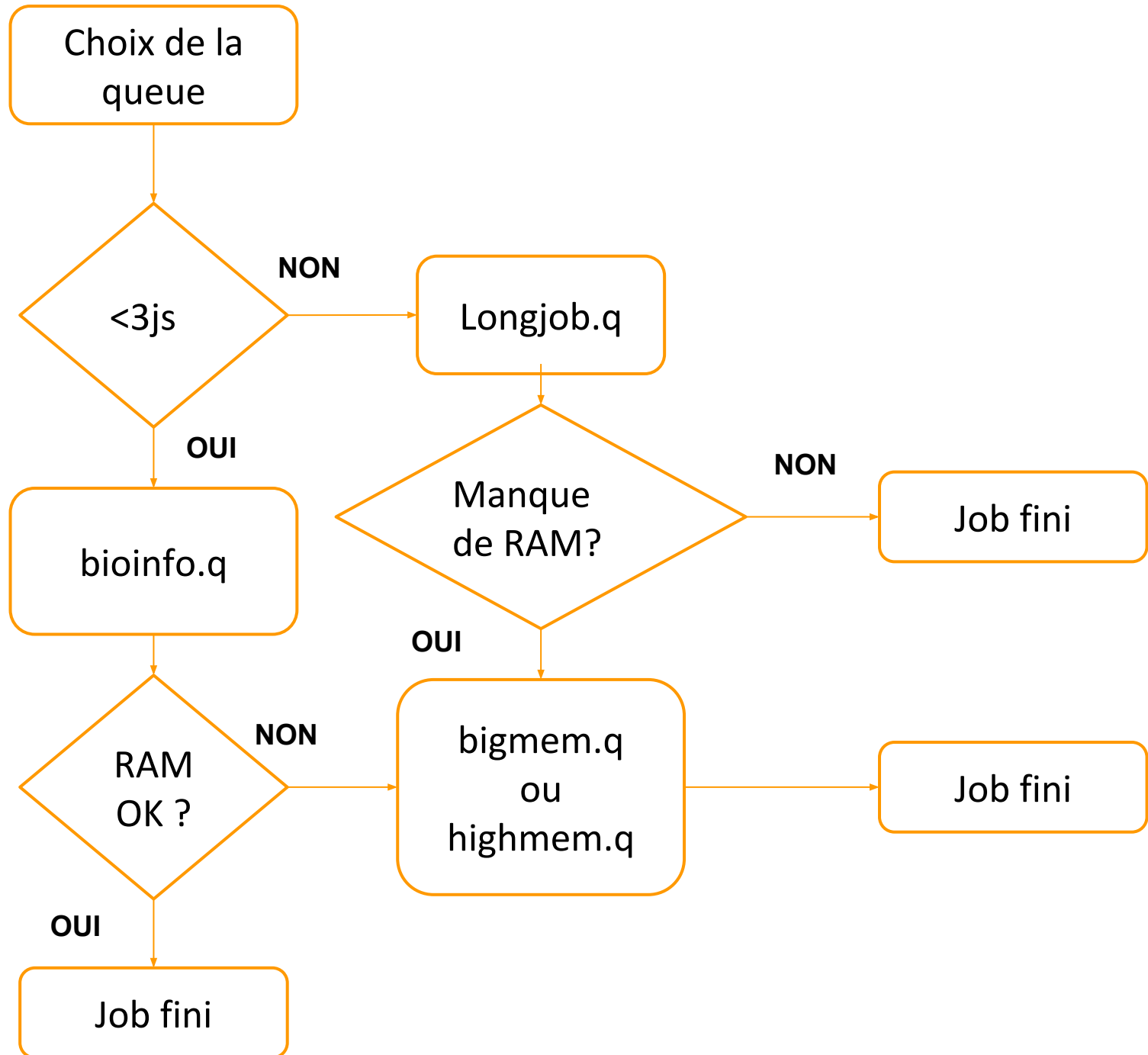
Quelle queue choisir?



Quelle queue choisir?



Quelle queue choisir?



● 1 Noeud Maître



bioinfo-master.ird.fr

91.203.34.148

Rôle :

- Lancer et prioriser les jobs sur les nœuds de calcul
- Accessible depuis Internet

● 25 Noeud de Calcul



nodeX

X : 0..24



Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet

● 3 serveurs NAS



Bioinfo-nas.ird.fr
(nas)

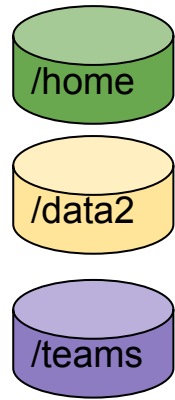
Bioinfo-nas2.ird.fr
(nas2)

Bioinfo-nas3.ird.fr
(nas3)

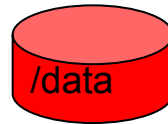
Rôle :

- Stocker les données utilisateurs
- Accessibles depuis Internet
- Pour transférer les données : *via filezilla ou scp*

Partitions disques sur le cluster i-Trop



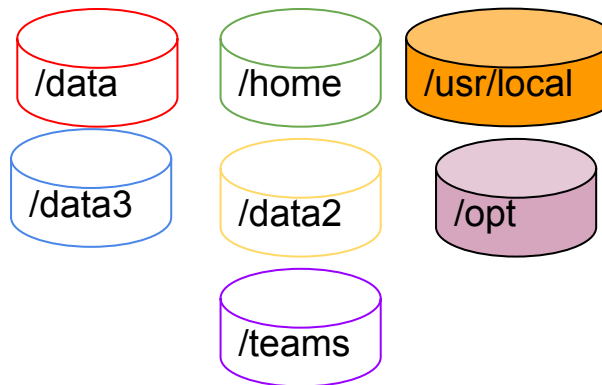
bioinfo-nas.ird.fr



bioinfo-nas2.ird.fr

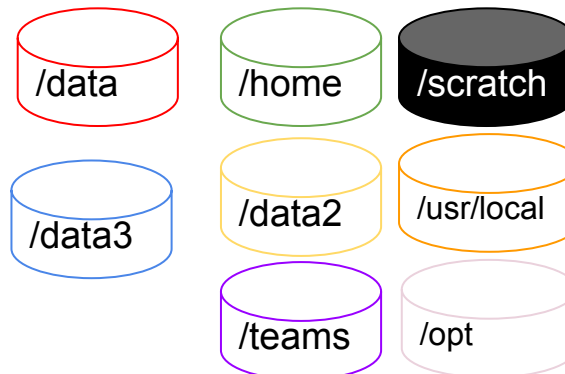


bioinfo-nas3.ird.fr



bioinfo-master.ird.fr

Liens virtuels vers les
partitions des autres
machines



25 noeuds



Connexion à
bioinfo-master.ird.fr et
réservation
de
ressources



Création du
répertoire
d'analyse
/scratch
dans le
noeud
réservé

Etape 1

Etape 2
mkdir



Practice

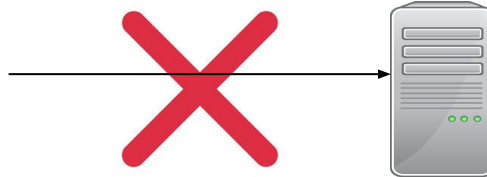
Etape 2:qrsh, partition

2

Aller sur le [Practice2](#) du github



Ordinateur
personnel

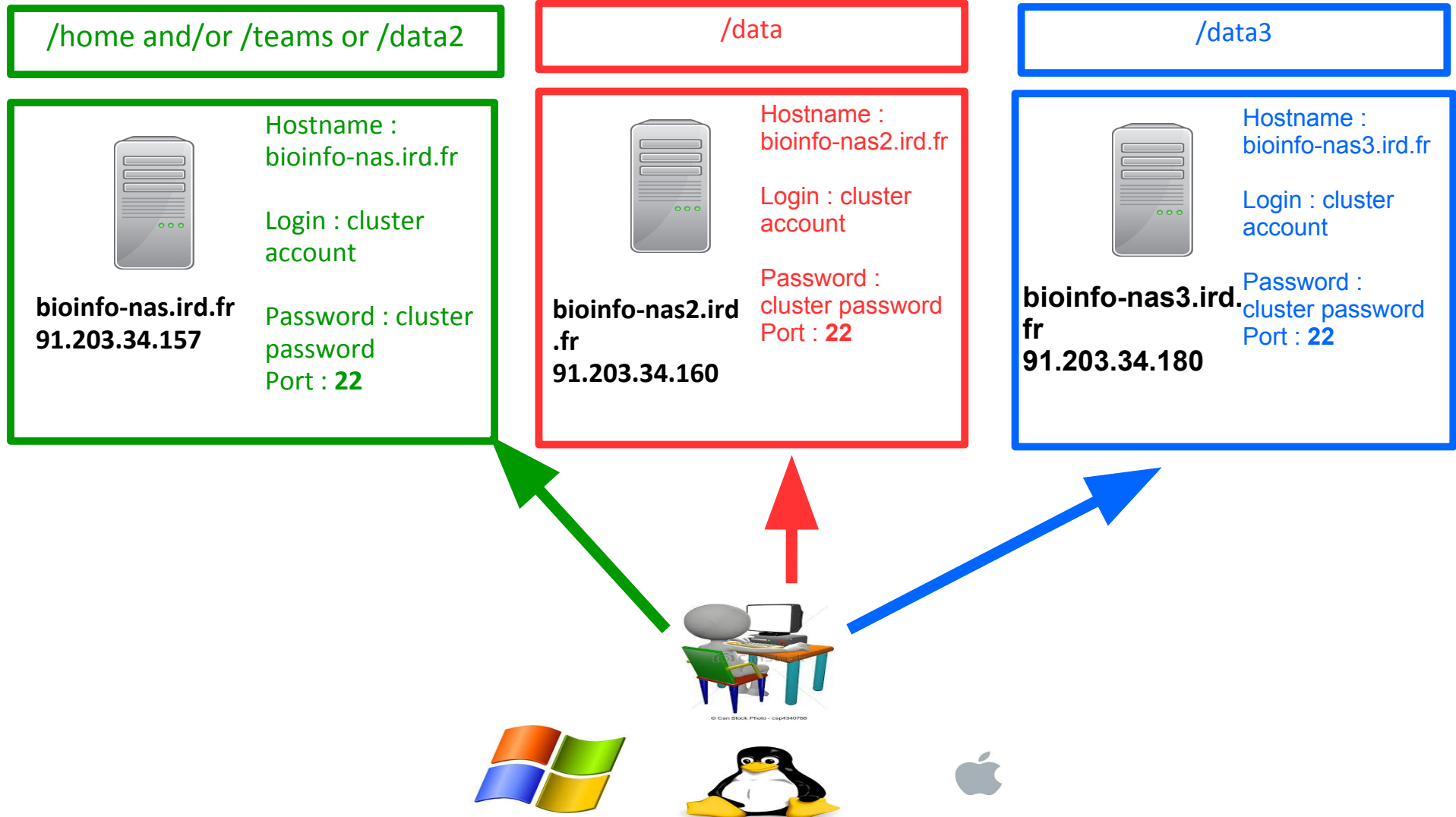


**Transfert direct
via filezilla
interdit**



**bioinfo-master.ird.fr
91.203.34.148**

Transferts de données sur le cluster itrop



Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à
bioinfo-mas-
ter.ird.fr et
réservation
de
ressources

Etape 1



Création du
répertoire
d'analyse
/scratch
dans le
noeud
réservé

Etape 2



Transfert de
données
depuis
Ordinateur
personnel
vers les
serveurs
nas

Etape 3
filezilla



Copier les données depuis son ordinateur personnel vers les serveurs nas si les données à analyser ne sont pas sur le cluster



Practice

Etape3: filezilla

3

Aller sur le [Practice3](#) du github

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp -r source destination
```

- Syntaxe si la source est distante :

```
scp -r nom_serveur:/chemin/fichier_a_copier repertoire_local
```

- Syntaxe si la destination est distante :

```
scp -r /chemin/fichier_a_copier nomserveur:/chemin/repertoire_distant
```

Ex: `scp -r nas:/home/tando/repertoire /scratch/tando/`

Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à
bioinfo-master.ird.fr et
réservation
de
ressources

Etape 1



Création du
répertoire
d'analyse
/scratch
dans le
noeud
réservé

Etape 2



Transfert de
données
depuis
Ordinateur
personnel
vers les
serveurs
nas

Etape 3



Transfert
des
données
depuis les
nas vers le
/scratch du
noeud

Etape 4
scp



Practice

Etape4: scp vers noeuds

4

Aller sur le [Practice4](#) du github

- 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`

- Charger un module :

`module load + modulename`

- Lister les modules chargés :

`module list`

- Décharger un module :

`module unload + modulename`

- Décharger tous les modules :

`Module purge`

Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à
bioinfo-mas-
ter.ird.fr et
réservation
de
ressources

Etape 1

Création du
répertoire
d'analyse
/scratch
dans le
noeud
réservé

Etape 2

Transfert de
données
depuis
Ordinateur
personnel
vers les
serveurs
nas

Etape 3

Transfert
des
données
depuis les
nas vers le
/scratch du
noeud

Etape 4

Charger ses
logiciels avec
modules
environment

Etape 5
module



Practice

Etape5: module environment

5

Aller sur le [Practice5](#) du github

Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à
bioinfo-mas-
ter.ird.fr et
réservation
de
ressources

Etape 1

Création du
répertoire
d'analyse
/scratch
dans le
noeud
réservé

Etape 2

Transfert de
données
depuis
Ordinateur
personnel
vers les
serveurs
nas

Etape 3

Transfert
des
données
depuis les
nas vers le
/scratch du
noeud

Etape 4

Charger ses
logiciels avec
modules
environnement

Etape 5

Lancer les
analyses sur
les données

Etape 6

- Charger la version du logiciel à lancer
- Lancer l'analyse des données

```
$~ commande <options> <arguments>
```

Avec *commande*: la commande à lancer

- Exécuter une commande bash via qsub
- Lance la commande sur un noeud
- On utilise la commande:

```
$~ qsub -b y "commande"
```

Avec *commande*: la commande à lancer

Options de la commande qsub

Options	Description	Exemple
qsub -N <name>	Donner un nom au job	qsub -N tando_blast
qsub -q <queue>	Choisir une queue en particulier	qsub -q highmem.q
qsub -l hostname=<nodeX>	Choisir un noeud en particulier	qsub -l hostname=node10
qsub -pe <ompi X>	Lancer un job avec plusieurs coeurs	qsub -pe ompi 4
qsub -M <emailaddress>	Envoyer un mail	qsub -M ndomassi.tando@ird.fr
qsub -m <eab>	Envoyer un mail quand: e: fin du job a: abandon b: début du job	qsub -m be
qsub -cwd	Lancer un job depuis le répertoire courant	qsub -cwd script.sh



Practice

Etape6: lancer l'analyse

6

Aller sur le [Practice6](#) du github

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp source destination
```

- Syntaxe si la source est distante :

```
scp nom_serveur:/chemin/fichier_a_copier répertoire_local
```

- Syntaxe si la destination est distante :

```
scp /chemin/fichier_a_copier nomserveur:/chemin/répertoire_distant
```

Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à
bioinfo-mas-
ter.ird.fr et
réservation
de
ressources

Etape 1

Création du
répertoire
d'analyse
/scratch
dans le
noeud
réservé

Etape 2

Transfert de
données
depuis
Ordinateur
personnel
vers les
serveurs
nas

Etape 3

Transfert
des
données
depuis les
nas vers le
/scratch du
noeud

Etape 4

Charger ses
logiciels avec
modules
environment

Etape 5

Lancer les
analyses sur
les données

Etape 6

Transfert
des
résultats sur
les serveurs
nas

Etape 7
scp



Practice

Etape7: Récupérer les résultats

7

Aller sur le [Practice7](#) du github

- Scratch= espaces temporaires
- Vérifier la copie des résultats avant
- Utiliser la commande rm

```
cd /scratch  
rm -rf nom_rep
```

Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à
bioinfo-mas-
ter.ird.fr et
réservation
de
ressources

Etape 1

Création du
répertoire
d'analyse
/scratch
dans le
noeud
réservé

Etape 2

Transfert de
données
depuis
Ordinateur
personnel
vers les
serveurs
nas

Etape 3

Transfert
des
données
depuis les
nas vers le
/scratch du
noeud

Etape 4

Charger ses
logiciels avec
modules
environment

Etape 5

Lancer les
analyses sur
les données

Etape 6

Transfert
des
résultats sur
les serveurs
nas

Etape 7

Suppression
Du répertoire
d'analyse sur
le /scratch

Etape 8
rm



Practice

Etape8: suppression des données

8

Aller sur le [Practice8](#) du github

Scripts pour visualiser/supprimer données temporaires

- Emplacement des scripts: /opt/scripts/scratch-scripts
- Visualiser ses données sur les scratches: scratch_use.sh

```
sh /opt/scripts/scratch-scripts/scratch_use.sh
```

- Supprimer ses données sur les scratches: clean_scratch.sh

```
sh /opt/scripts/scratch-scripts/clean_scratch.sh
```

BONUS

LANCER UN JOB

- Le scheduler choisit les ressources automatiquement
- Lancer des jobs utilisant jusqu'à 24 coeurs
- Possibilité de paramétrer ce choix
- Jobs lancés en arrière plan
 - possibilité d'éteindre son ordinateur
 - récupération des résultats automatique

- 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

Options de la commande qsub

Options	Description	Exemple
qsub -N <name>	Donner un nom au job	qsub -N tando_blast
qsub -q <queue>	Choisir une queue en particulier	qsub -q highmem.q
qsub -l hostname=<nodeX>	Choisir un noeud en particulier	qsub -l hostname=node10
qsub -pe <ompi X>	Lancer avec plusieurs coeurs	qsub -pe ompi 4
qsub -M <emailaddress>	Envoyer un mail	qsub -M ndomassi.tando@ird.fr
qsub -m <eab>	Envoyer un mail quand: e: fin du job a: abandon b: début du job	qsub -m be
qsub -cwd	Lancer un job depuis le répertoire courant	qsub -cwd script.sh

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 démarrage
# - (e) a la fin
# - (a) en cas d'abandon
#$ -m bea

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

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


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 "transfert donnees master -> noeud";
cd $path_to_tmp

##### Execution du programme
cmd="blastn -db All-EST-cofea.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";
```



Practice

Lancer un script avec qsub

9

Aller sur le [Practice9](#) du github

Si vous utilisez les ressources du plateau i-Trop.

Merci de nous citer avec:

“The authors acknowledge the IRD itrop HPC (South Green Platform) at IRD montpellier
for providing HPC resources that have contributed to the
research results reported within this paper.

URL: <https://bioinfo.ird.fr/>- <http://www.southgreen.fr>”

- Pensez à inclure un budget ressource de calcul dans vos réponses à projets
- Besoin en disques dur, renouvellement de machines etc...
- Devis disponibles
- Contactez bioinfo@ird.fr : aide, définition de besoins, devis...

Merci pour votre attention !



Le matériel pédagogique utilisé pour ces enseignements est mis à disposition selon les termes de la licence Creative Commons Attribution - Pas d'Utilisation Commerciale - Partage dans les Mêmes Conditions (BY-NC-SA) 4.0 International:

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>