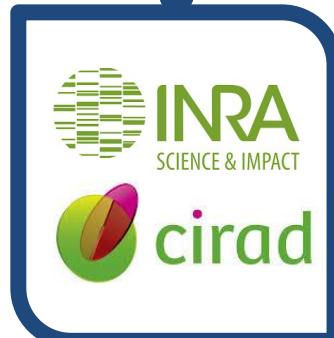




Institut de Recherche
pour le Développement

South Green

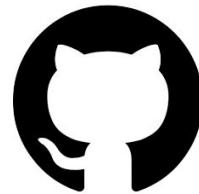
bioinformatics platform



plateau i-trop



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 2019



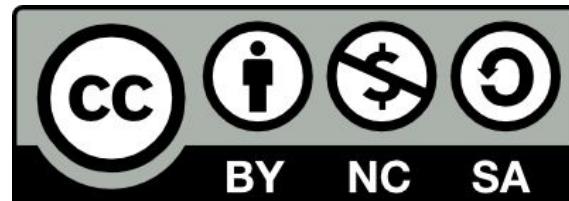
- Toutes nos formations :
<https://southgreenplatform.github.io/trainings/>
- Topo & TP : [HPC IRD](#)
- How-to : [HPC How to](#)
- Environnement de travail : [Logiciels à installer](#)



Initiation HPC cluster

www.southgreen.fr

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



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

- 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





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



**25 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 node25

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



**25 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 node25

Noeud interactif : bioinfo-inter.ird.fr

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



bioinfo-nas3.ird.fr
91.203.34.180

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

/data : Données projet partagées entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : [bioinfo-nas2.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

/data3 : Données projet partagées entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : [bioinfo-nas3.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

/data : Données projet partagées entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : [bioinfo-nas2.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

/data3 : Données projet partagées entre plusieurs utilisateurs
Quota 500Go à 1To
Hébergée sur : [bioinfo-nas3.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

/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)

- 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

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

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

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

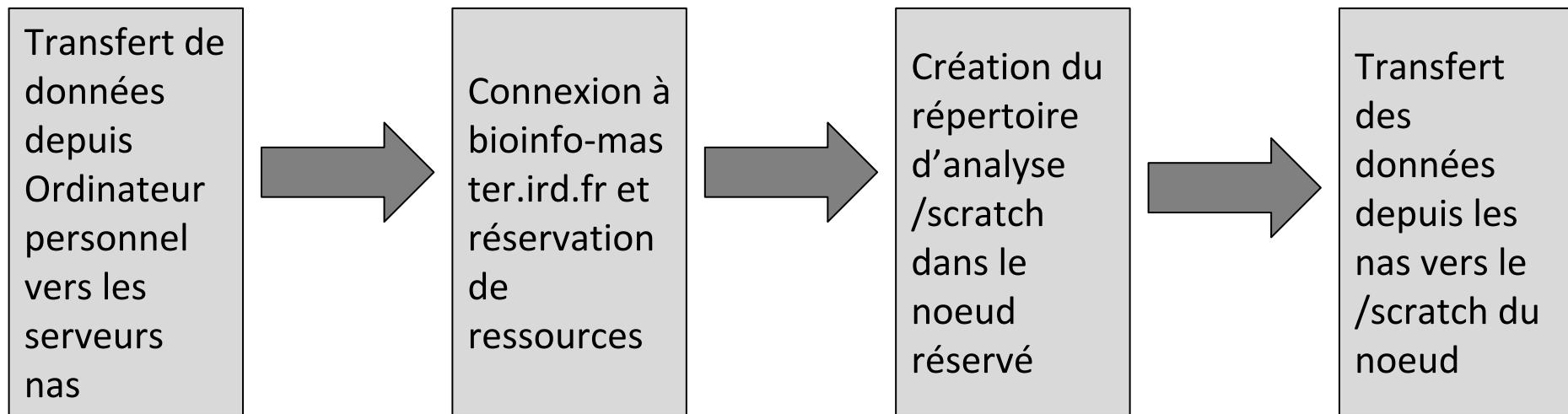
highmem.q : besoin de mémoire
Noeuds: node4 et node7
RAM: 144Go
Coeurs: 12 coeurs

1



TP: Lancer une analyse blast de manière interactive

Etapes d'une analyse sur le cluster

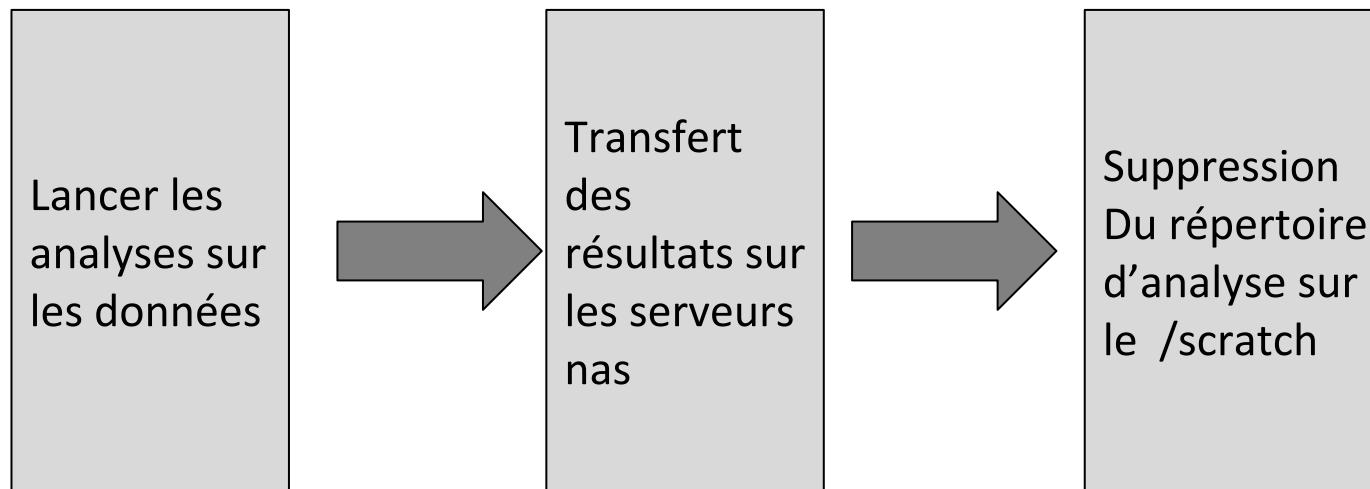


Etape 1

Etape 2

Etape 3

Etape 4



Etape 5

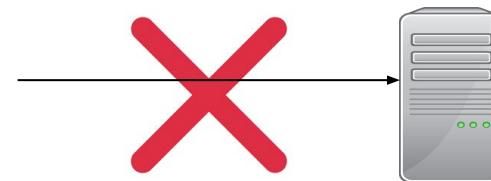
Etape 6

Etape 7

Transferts de données sur le cluster itrop



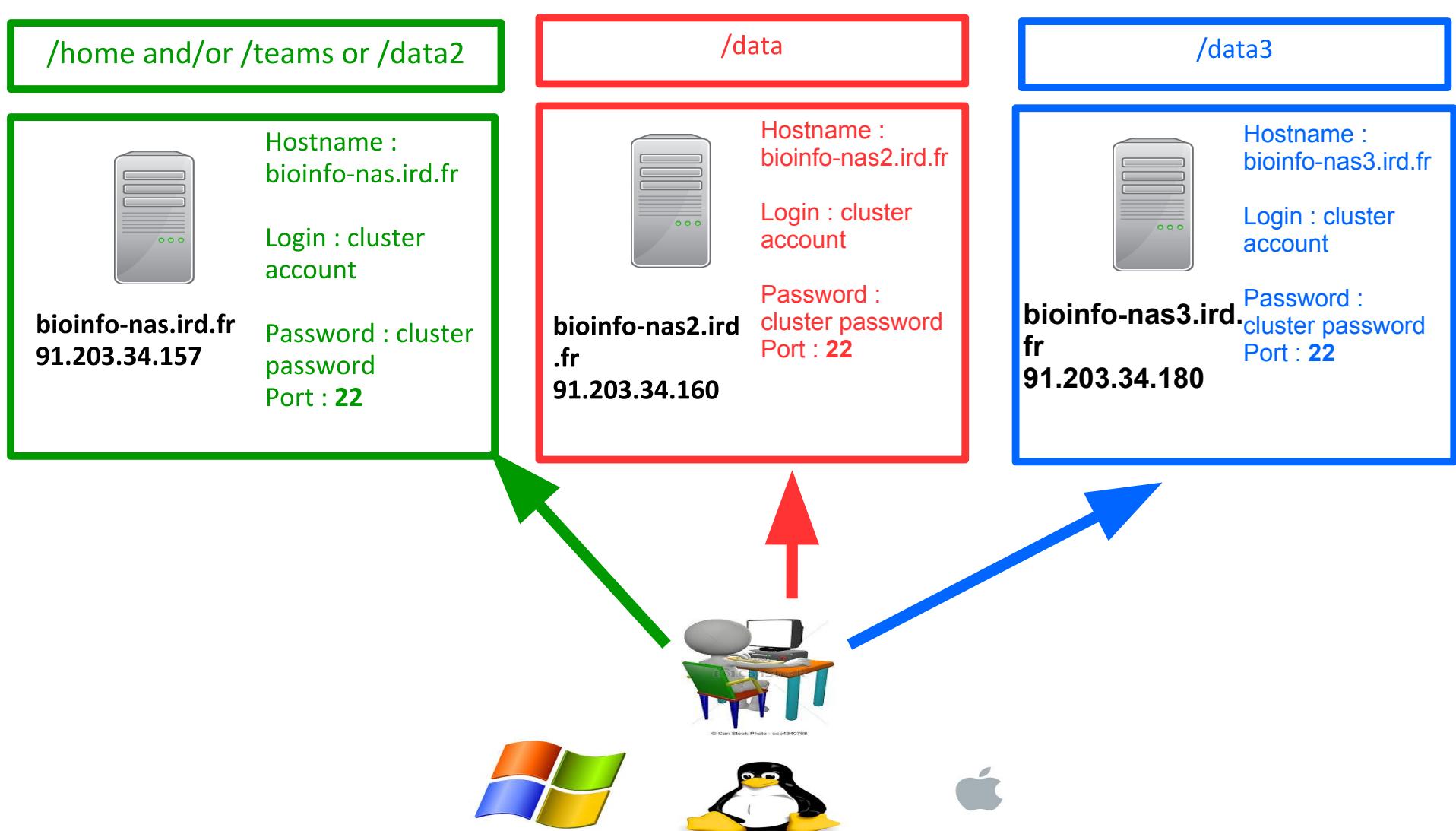
Ordinateur personnel



Transfert direct
via filezilla
interdit

bioinfo-master.ird.fr
91.203.34.148

Transferts de données sur le cluster itrop



Ouvrir filezilla et récupérer le fichier « HPC_french.pdf »
dans /data/projects/tp-cluster/training_2019

Ouvrir filezilla et récupérer le fichier « HPC_french.pdf »
dans /data/projects/tp-cluster/training_2019

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_2019

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
r**

Login : cluster
account

Password : cluster
password

Port : **22**



With Putty
Use parameters above



Test your script(s)



bioinfo-inter.ird.fr
91.203.34.150

Hostname :
**bioinfo-inter.ird.f
r**

Login : cluster
account

Password : cluster
password

Port : **22**

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



With terminal
Use the ssh command

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

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

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

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

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)

La copie avec scp

- 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
```

Etape4 : copie des données dans le répertoire d'analyses

Copier le répertoire /data/projects/tp-cluster/training_2019/Blast dans /scratch/login

Etape4 : copie des données dans le répertoire d'analyses

Copier le répertoire /data/projects/tp-cluster/training_2019/Blast dans /scratch/login

Taper les commandes :

\$~cd /scratch/login

\$~ scp -r login@bioinfo-nas2.ird.fr :/data/projects/tp-cluster/training_2019/Blast
/scratch/login

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

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

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

- 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`

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

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

Editer le fichier blastn.out avec l'utilitaire nano

Editer le fichier blastn.out avec l'utilitaire nano

Taper :
\$~ nano blastn.out

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

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

Se déplacer dans le répertoire
Supprimer le répertoire de travail

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



TP: Lancer un bwa de manière interactive

- Suivre les étapes du TP précédent et les adapter à celui-ci
- Le répertoire à copier est: /data/projects/training_2019/bwa
 - La version de bwa à utiliser est la 0.7.12
 - Les commandes à lancer sont:
`bwa index referenceIorigin.fasta`
`bwa mem referenceIorigin.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

##### 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) à 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 "transfert 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";
```

- 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
- \$~ qsub 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

- 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
\$~ qsub 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