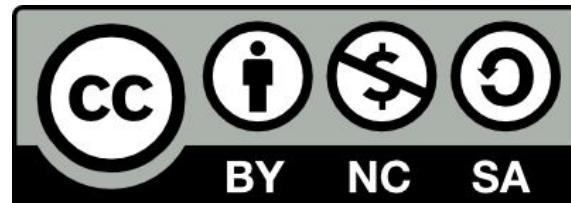


# Initiation HPC cluster

[www.southgreen.fr](http://www.southgreen.fr)

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





Julie ORJUELA-  
BOUNIOL<sup>1</sup>, IE  
Bioinformaticienne  
25%

Ndomassi TANDO, IE  
Administrateur système  
100%  
Animateur plateau

Christine TRANCHANT-  
DUBREUIL, IE  
Bioinformaticienne  
20%

Aurore COMPTE, IE  
Bioinformaticienne  
20%

Alexis DEREEPER<sup>2</sup>, IE  
Bioinformaticien  
20%

Valérie NOEL, TCS  
Bioinformaticienne  
25%

Thierry VALERO, IR  
Systèmes d'information  
20%

Bruno GRANOUILAC<sup>3</sup>, IE  
Systèmes d'information  
20%

Mise à disposition  
de ressources  
de calcul et  
logicielles

Développement de  
logiciels d'analyse  
et de SI

Plateau bioinformatique

Assistance et  
support aux  
équipes

Formations au Sud  
et au Nord

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



# ARCHITECTURE

# 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

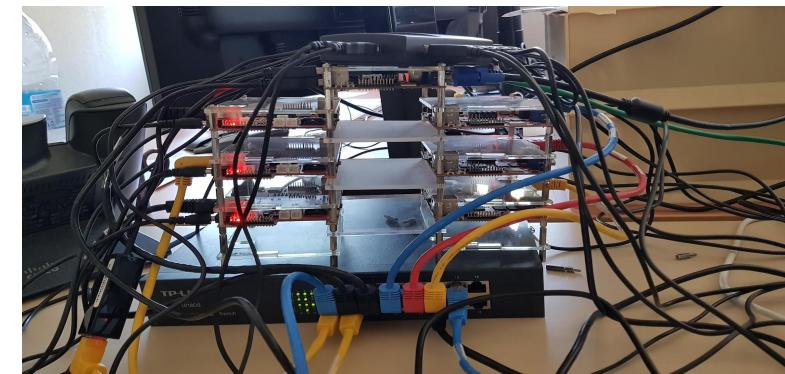
# Qu'est ce qu'un cluster?

- 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



# 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



# Composants d'un cluster

CALCUL



- **Noeud maître**

Gère les ressources et les priorités des jobs

- **Noeuds de calcul**

Ressources (CPU ou mémoire RAM)

# Composants d'un cluster

CALCUL



STOCKAGE



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

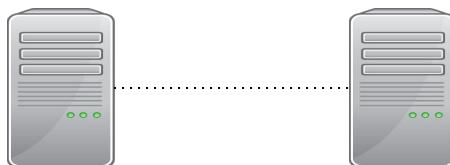
91.203.34.148

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*

# Etapes d'une analyse sur le cluster

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

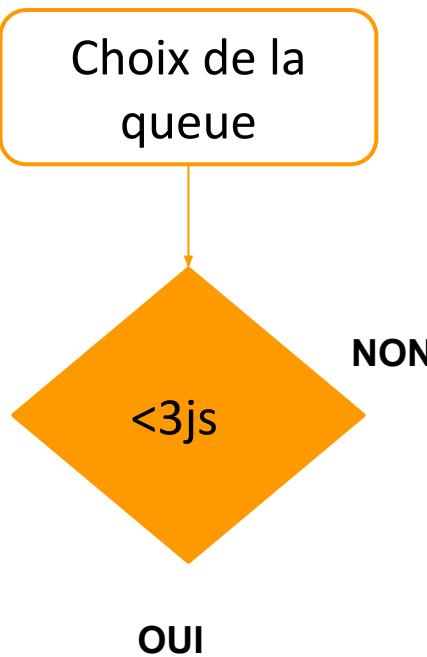


**Etape 1**  
qrsh/qlogin  
ou qsub

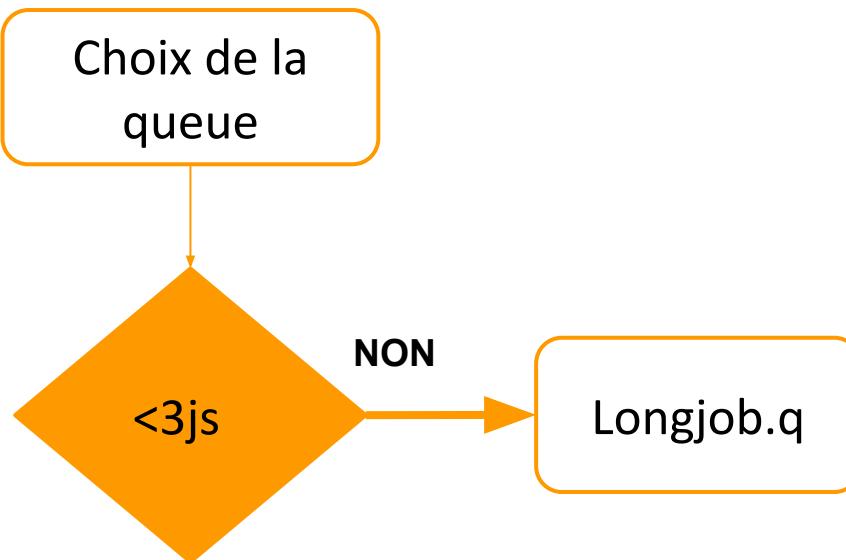
# Les files d'attentes

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

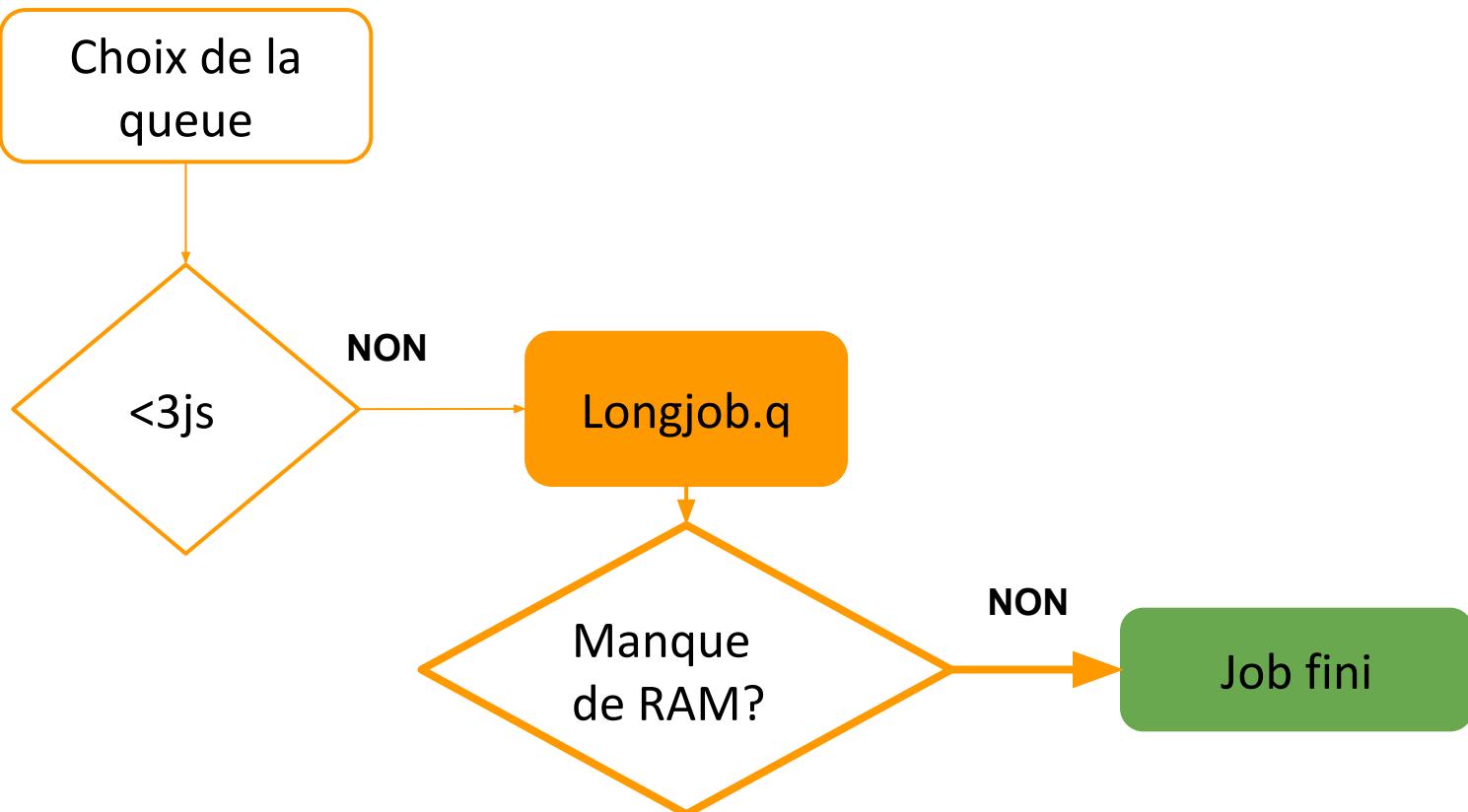
# Quelle queue choisir?



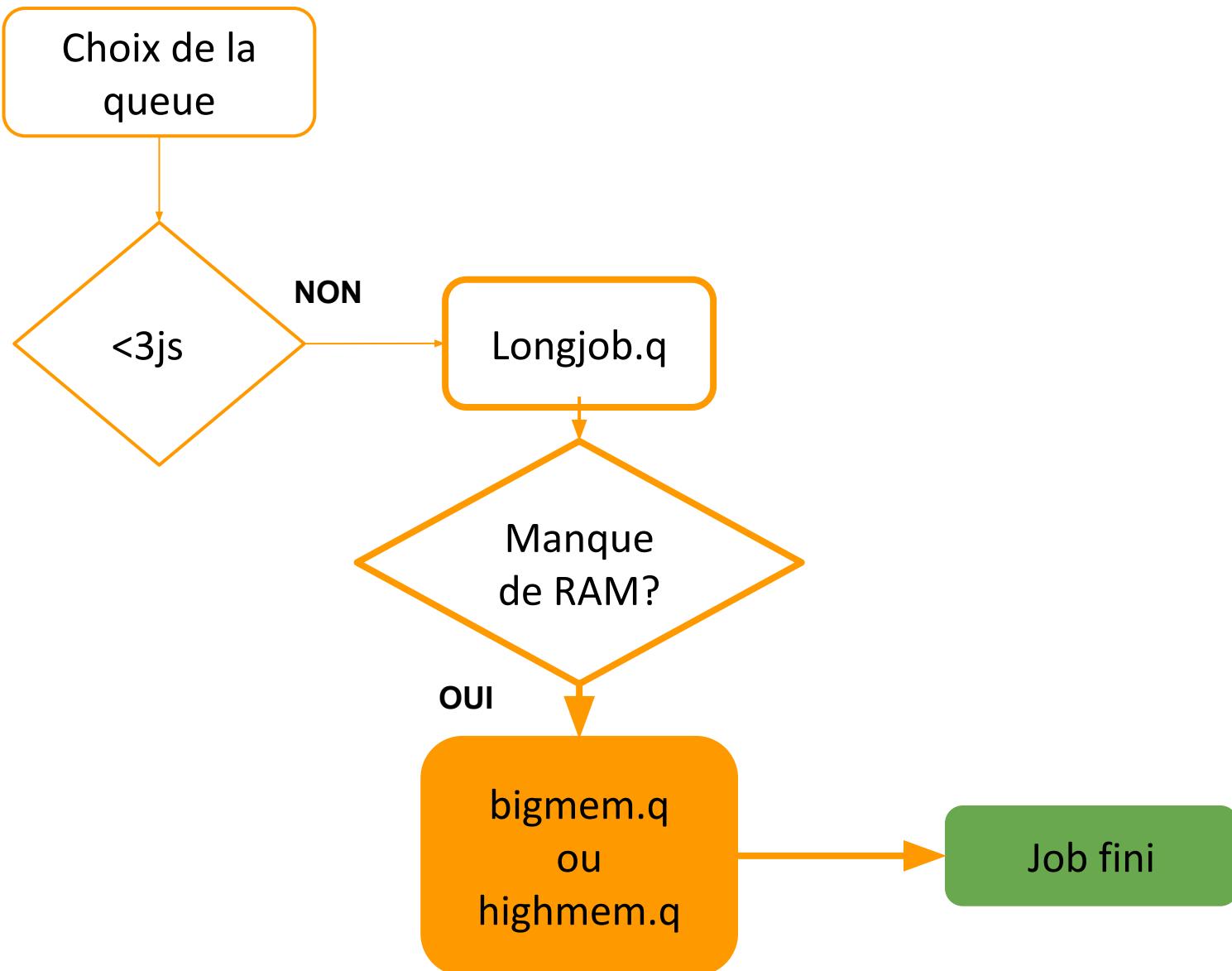
# Quelle queue choisir?



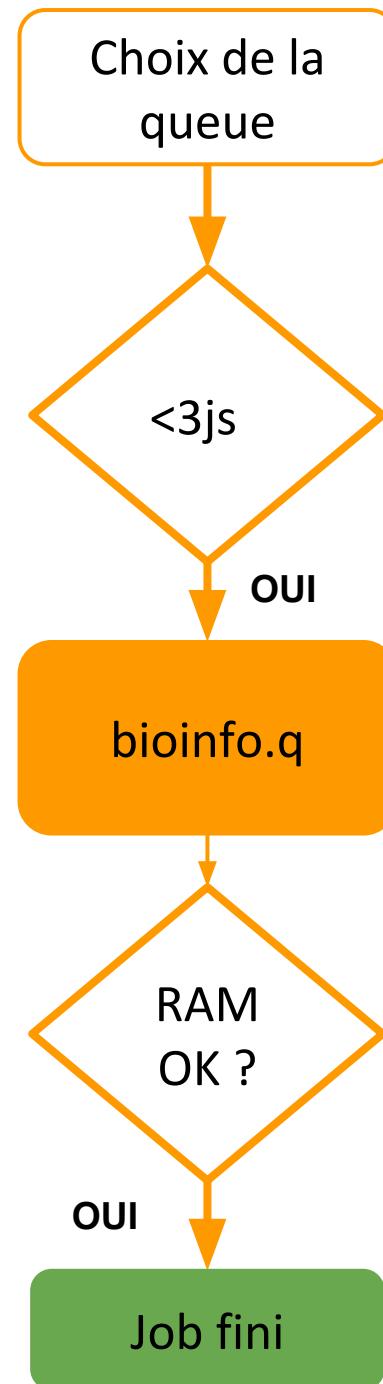
# Quelle queue choisir?



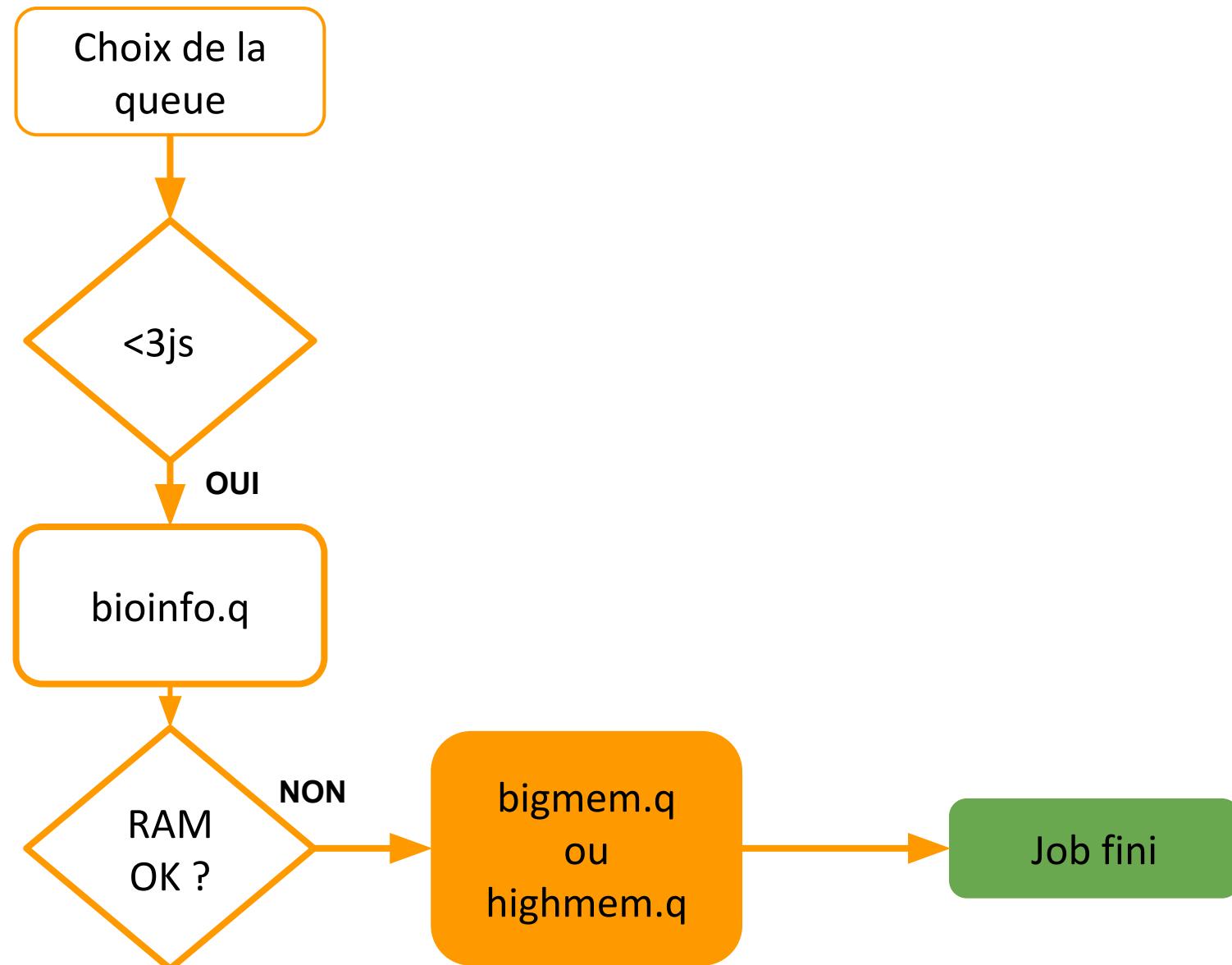
# Quelle queue choisir?



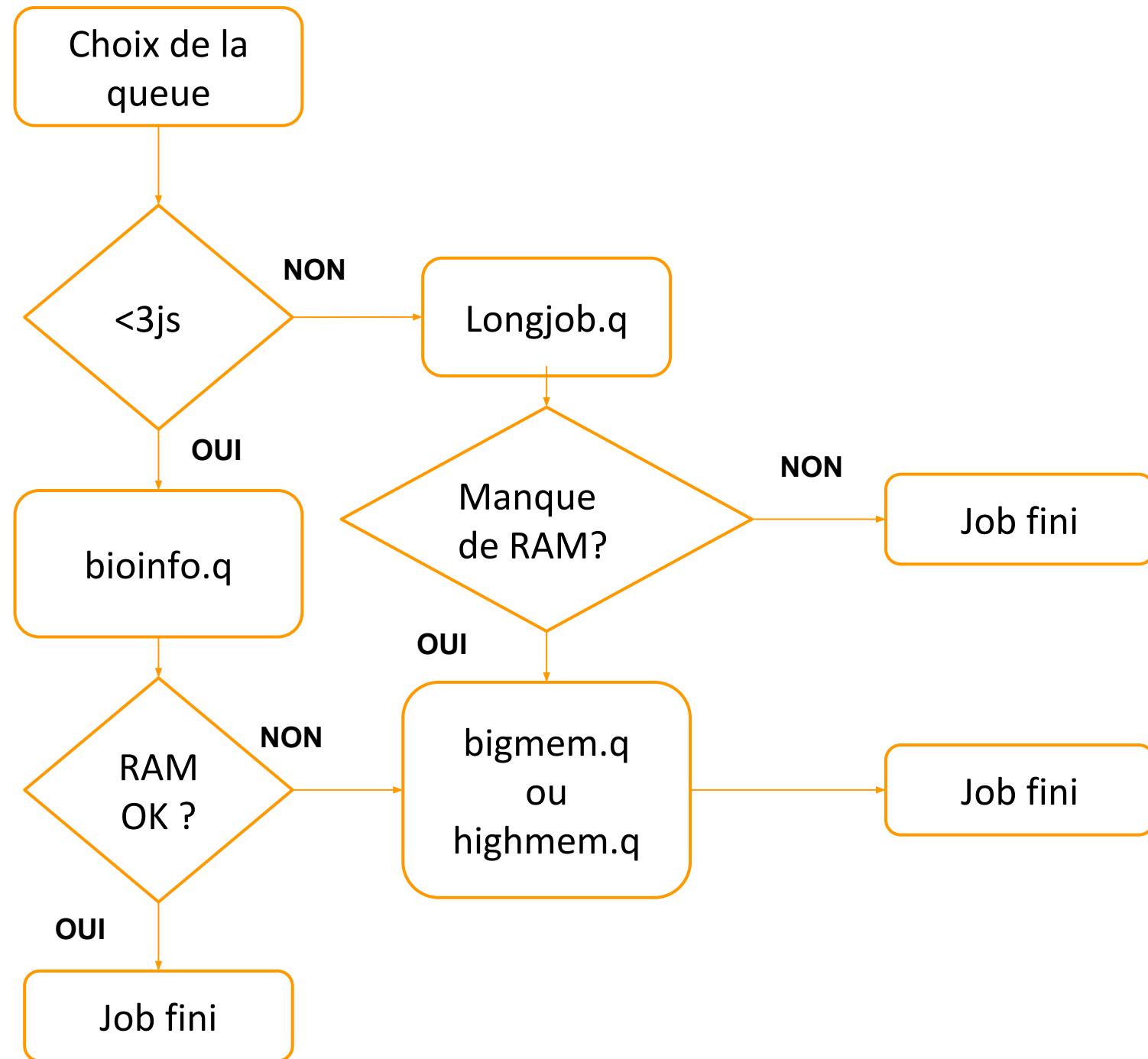
# Quelle queue choisir?



# Quelle queue choisir?



# Quelle queue choisir?



## ● 1 Noeud Maître



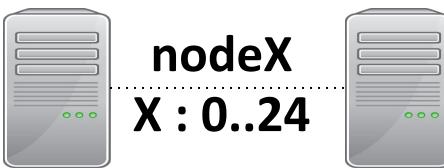
**bioinfo-master.ird.fr**

91.203.34.148

Rôle :

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

## ● 25 Noeud de Calcul



Rôle :

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

## ● 3 serveurs NAS



**bioinfo-nas.ird.fr**

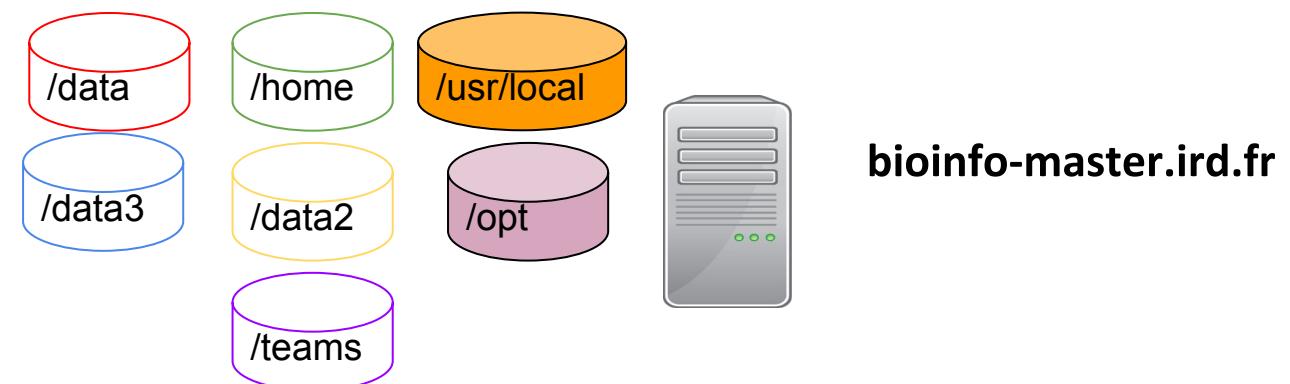
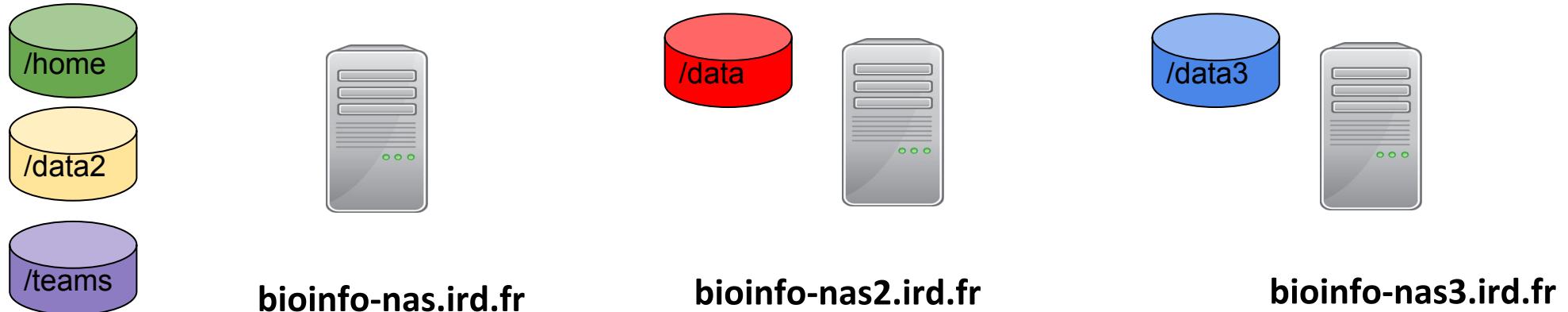
**bioinfo-nas2.ird.fr**

**bioinfo-nas3.ird.fr**

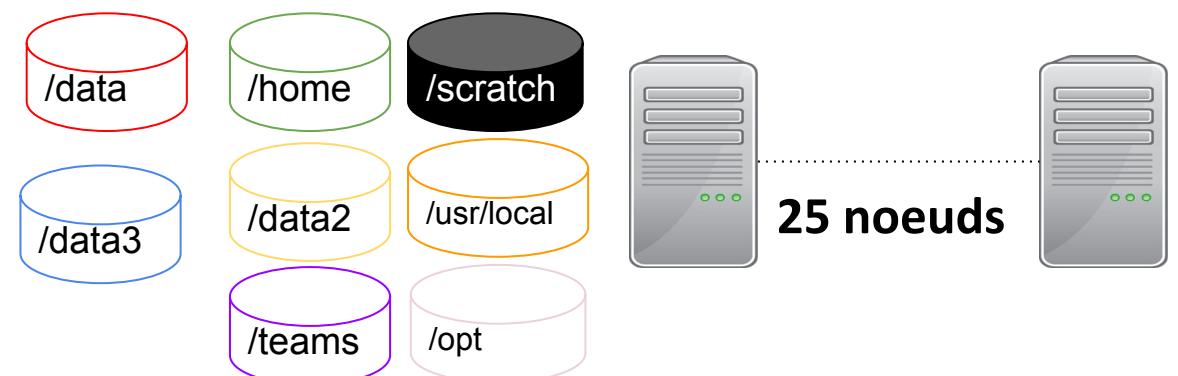
Rôle :

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

# Partitions disques sur le cluster i-Trop



**Liens virtuels vers les partitions des autres machines**



# Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à  
bioinfo-mas-  
ter.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**

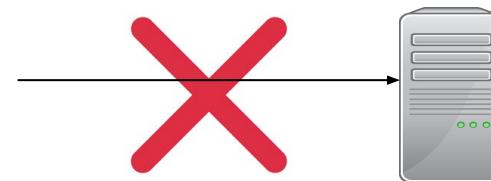
2

*Aller sur le [Practice2](#) du github*

# Transferts de données sur le cluster itrop



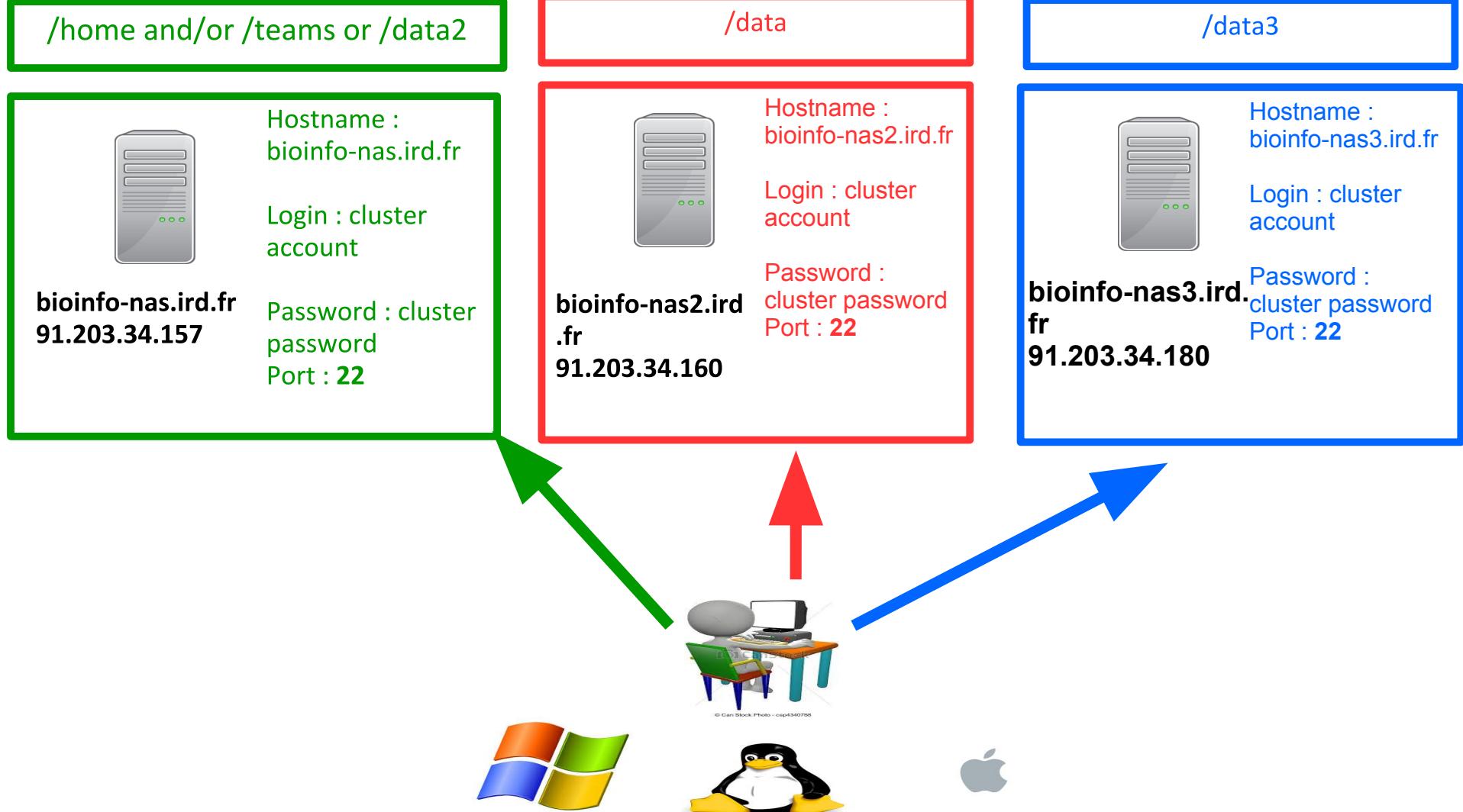
Ordinateur personnel



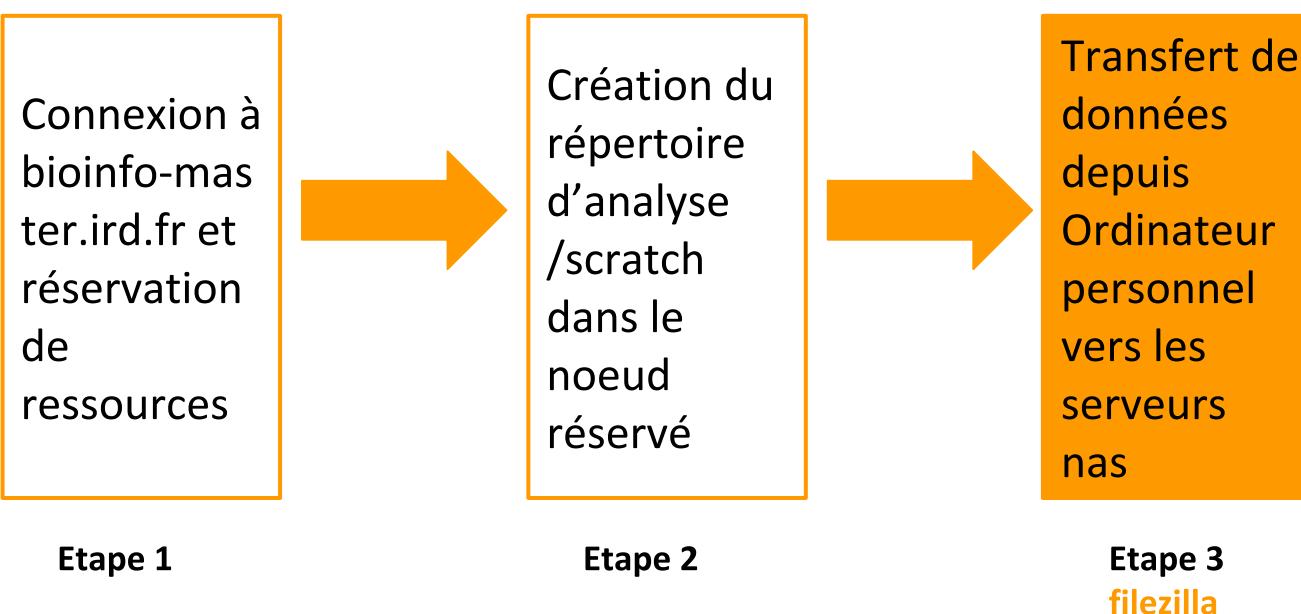
Transfert direct  
via filezilla  
interdit

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

# Transferts de données sur le cluster itrop



# Etapes d'une analyse sur le cluster



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*

# La copie avec scp

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp source destination
```

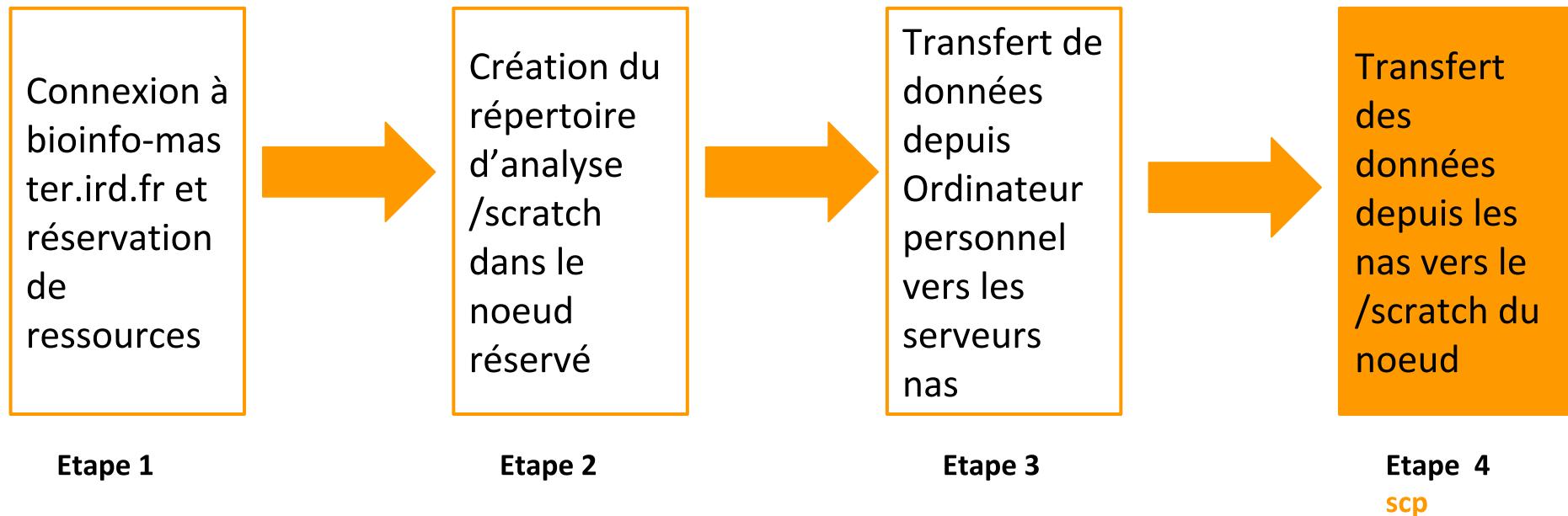
- Syntaxe si la source est distante :

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

- Syntaxe si la destination est distante :

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

# Etapes d'une analyse sur le cluster





# 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`

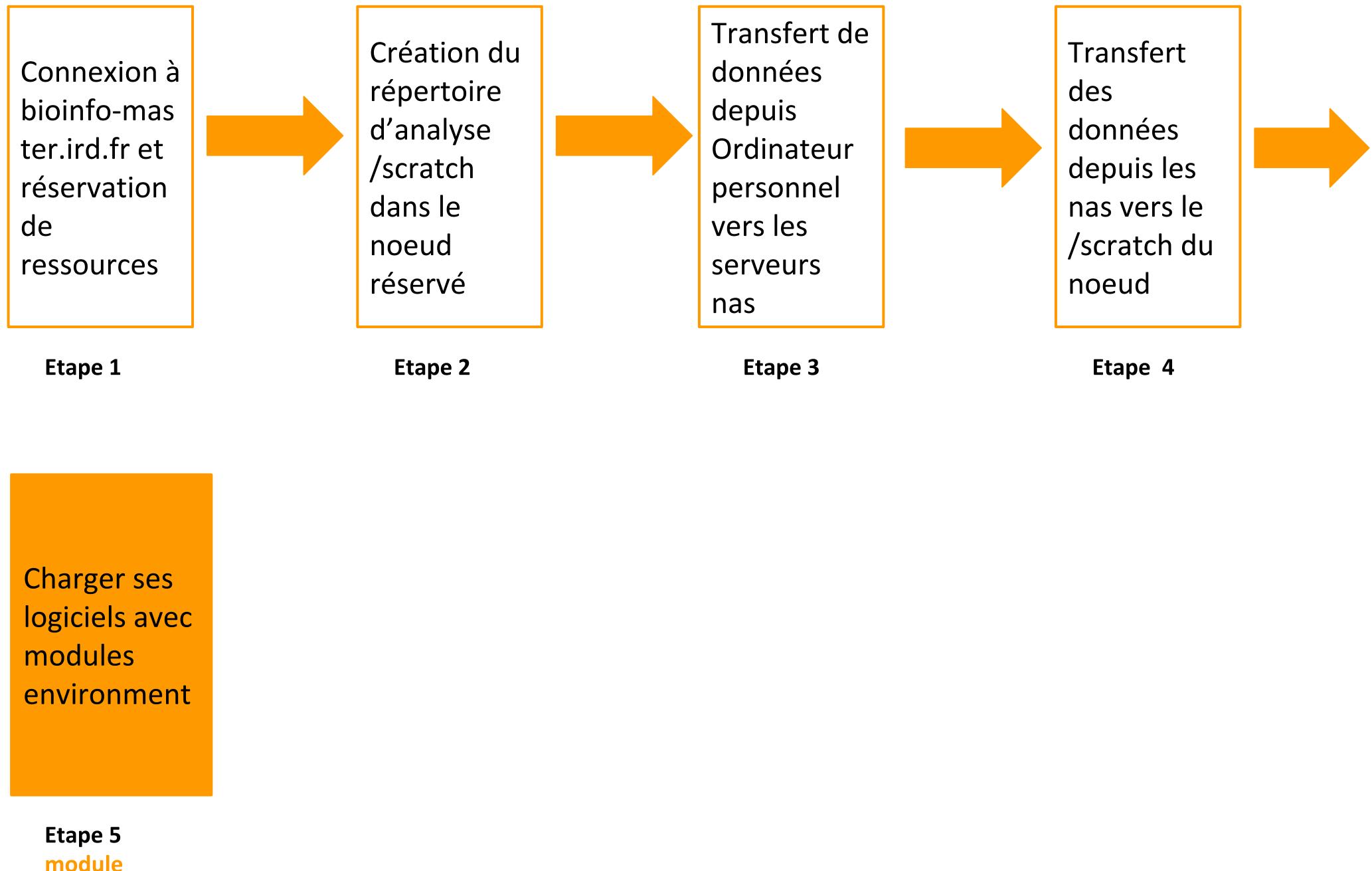
- Charger un module :  
`module load + modulename`

- 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





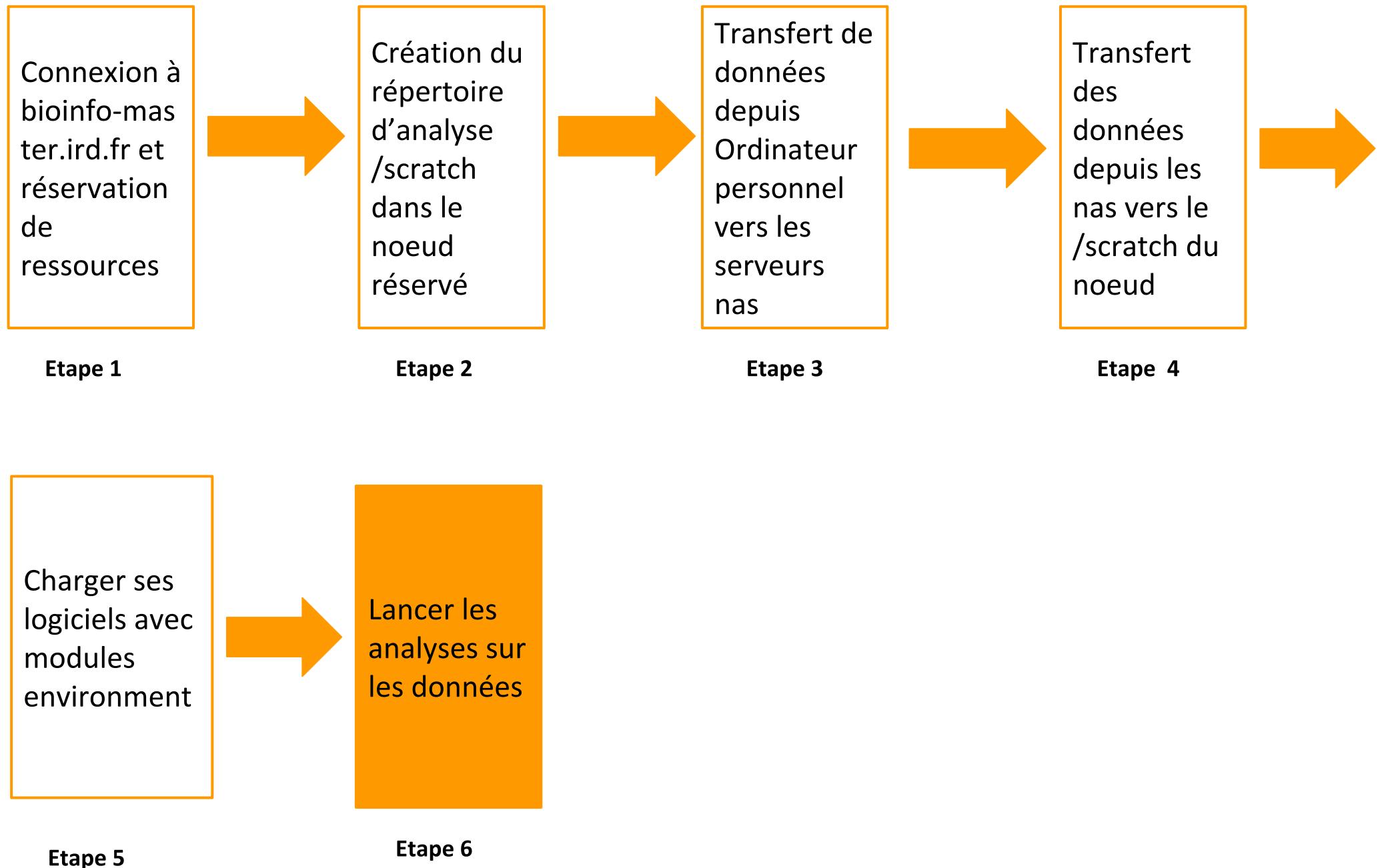
# Practice

**Etape5: module environment**

5

*Aller sur le [Practice5](#) du github*

# Etapes d'une analyse sur le cluster



# Lancer une commande depuis le prompt

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

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

Avec *commande*: la commande à lancer

# Lancer un job en ligne de commande

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



# Practice

**Etape6: lancer l'analyse**

6

*Aller sur le Practice6 du github*

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp source destination
```

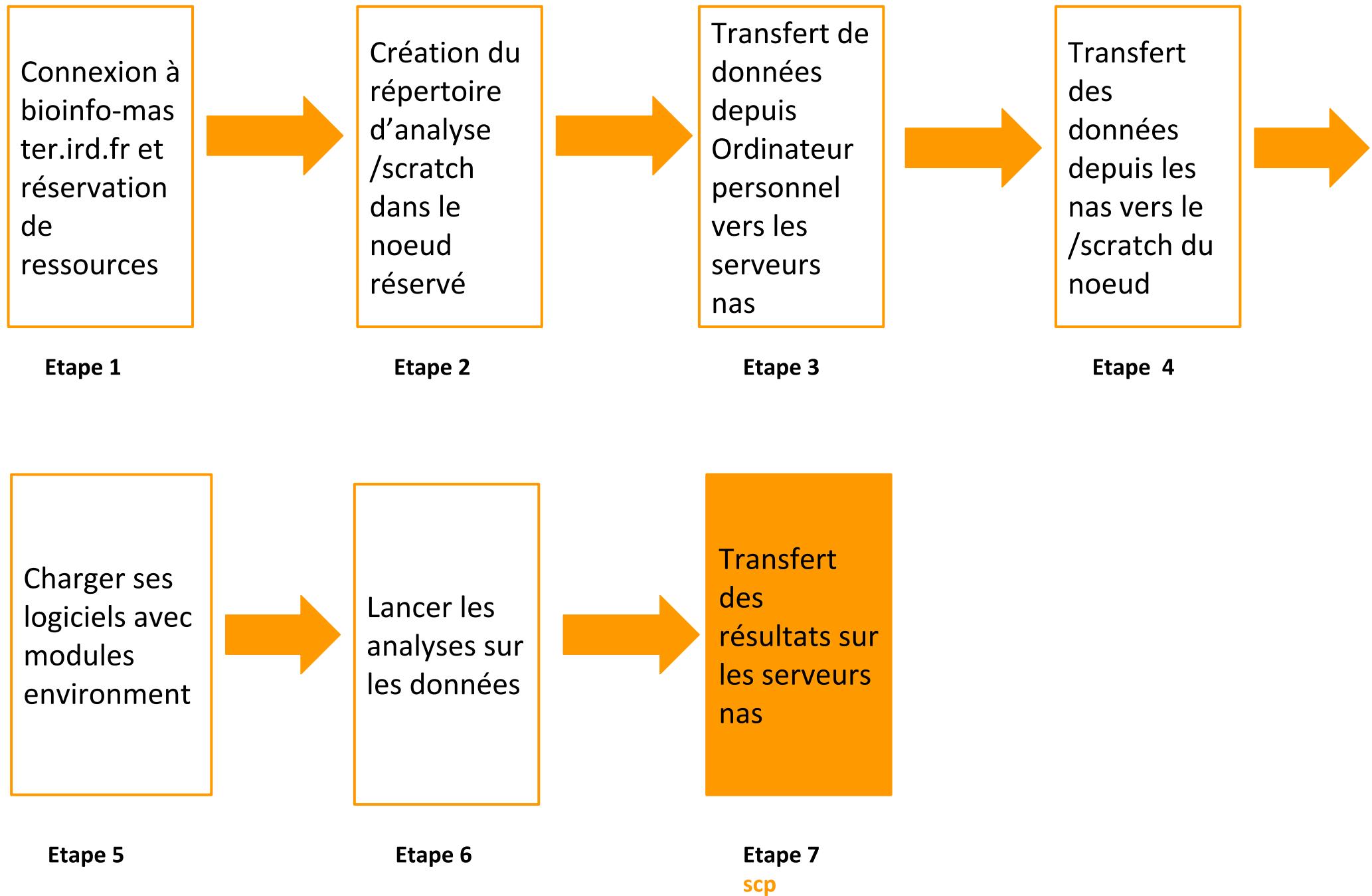
- Syntaxe si la source est distante :

```
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





# Practice

**Etape7: Récupérer les résultats**

7

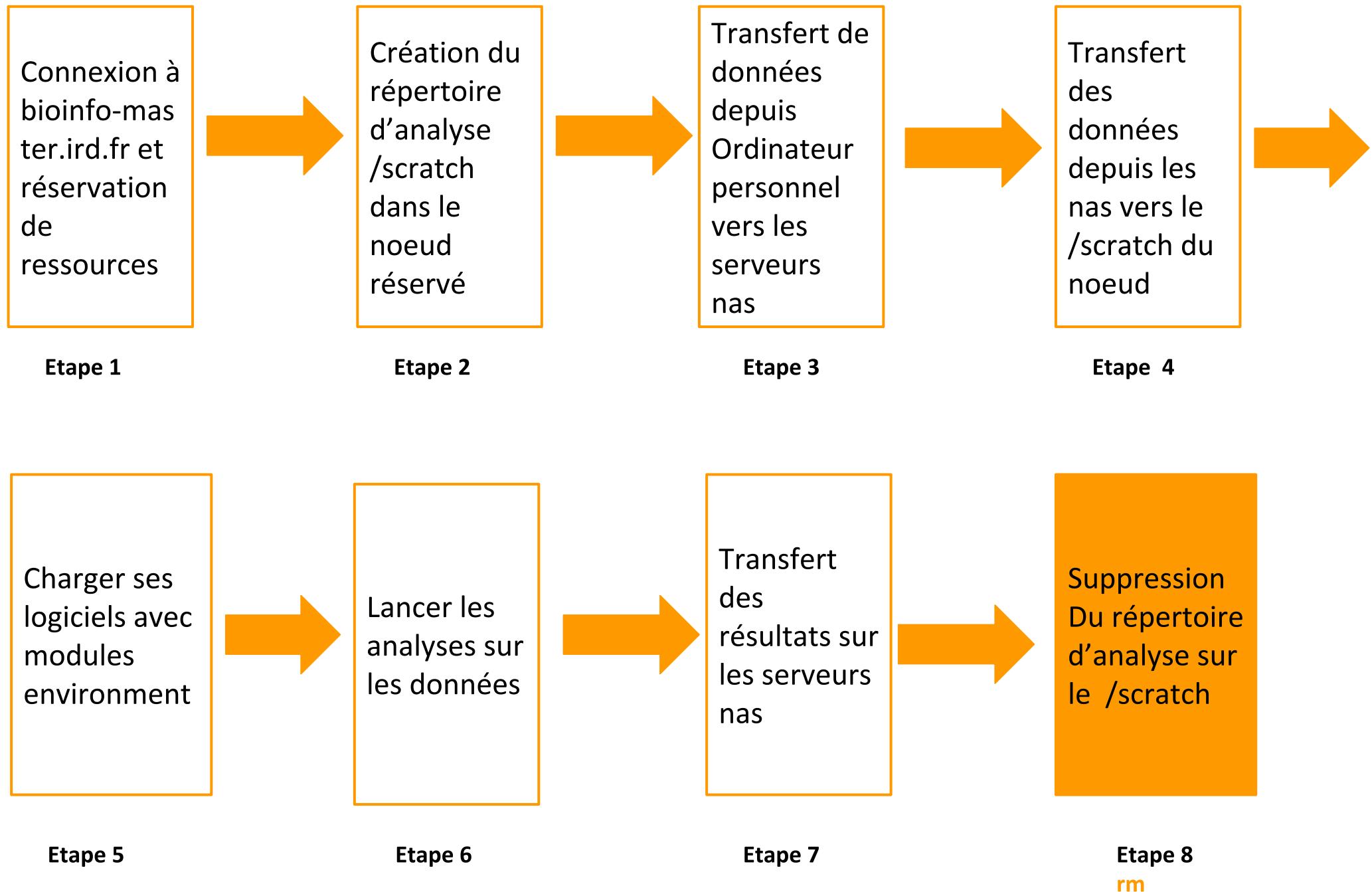
*Aller sur le Practice7 du github*

# Supprimer les résultats des scratchs

- 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





# 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 scratchs: scratch\_use.sh

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

- Supprimer ses données sur les scratchs: clean\_scratch.sh

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

# BONUS

# LANCER UN JOB

# Avantages

- Le scheduler choisit les ressources automatiquement
- Possibilité de paramétrier ce choix
  - Jobs lancés en arrière plan
    - possibilité d'éteindre son ordinateur
    - récupération des résultats automatique

# 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

# Options de la commande qsub

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

# 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 formation.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 donnees 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](mailto: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/>