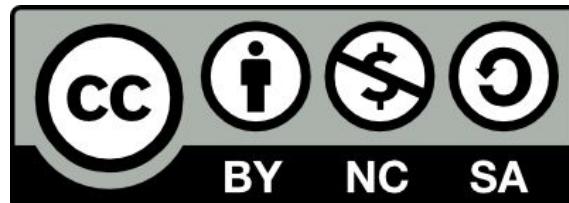




Initiation HPC cluster

www.southgreen.fr

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



Présentation i-Trop



Emmanuelle Beyne
20% ETP

Aurore COMTE
20% ETP

Bruno GRANOUILAC
50% ETP

Valérie NOEL
25% ETP

Julie ORJUELA-BOUNIOL
25% ETP

Ndomassi TANDO
100% ETP

Christine TRANCHANT-DUBREUIL
20% ETP



Partie cluster en cours
de certification

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

- Formulaires de demandes

<https://itrop-glpi.ird.fr/plugins/formcreator/front/formlist.php>

- Comptes
- Installation logiciels
- Projets

- Incidents: contacter bioinfo@ird.fr



- Howtos:

<https://southgreenplatform.github.io/tutorials/cluster-itrop/hpchowto/>

- Tutorials Slurm:

<https://southgreenplatform.github.io/tutorials//cluster-itrop/Slurm/>

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

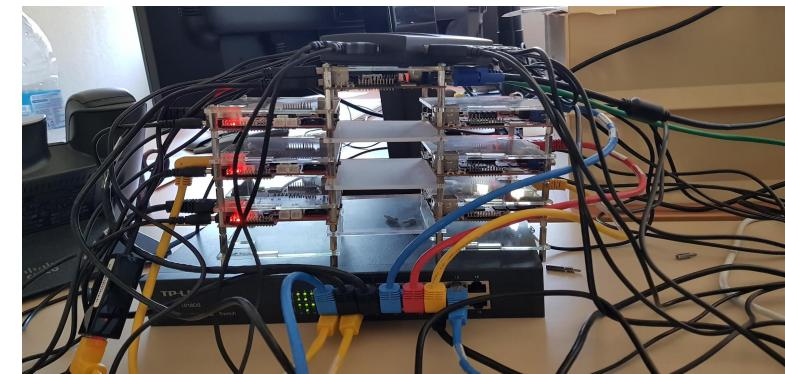
Qu'est ce qu'un cluster?

- 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 :

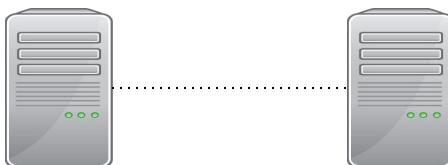
`ssh login@bioinfo-master.ird.fr`

- **1 Noeud Maître**



bioinfo-master.ird.fr

- **27 Noeuds de Calcul**



nodeX
X : 0..26

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 les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet
- node0 à node26



Practice

Etape 1: Connexion, srun

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
salloc/srun
ou sbatch

Les files d'attentes

Partitions	Utilisation	Caractéristiques RAM noeuds	Caractéristiques coeurs noeuds
short	Jobs courts < 1 jour (priorité plus haute, jobs interactif)	48 à 64 Go	12 coeurs
normal	Jobs courts max 7 jours	64 Go à 96 Go	12 à 24 coeurs
r900	Jobs courts max 7 jours	32Go	16 coeurs /scratch 117Go
long	45 jours >Jobs longs > 7 jours	48 Go	12 à 24 coeurs
highmem	Jobs avec besoin de plus de mémoire	144 Go	12 à 24 coeurs
supermem	Jobs avec besoin de beaucoup de mémoire	1To	40 coeurs
gpu	Besoin d'analyses sur des gpus	192Go	24 cpus et 8 coeurs GPUs

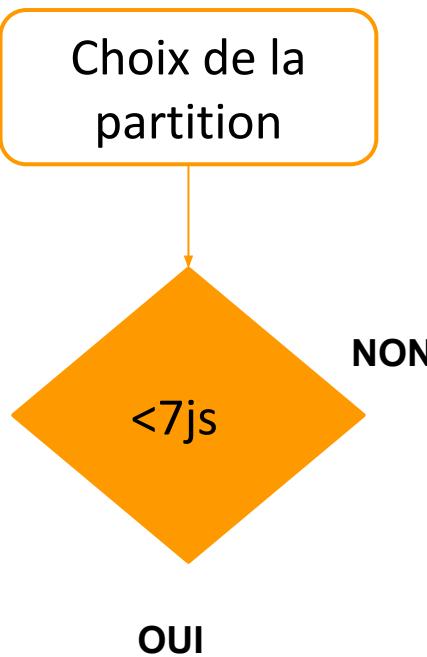
*Demande à faire avec argumentaire

Cas particulier : partition gpu

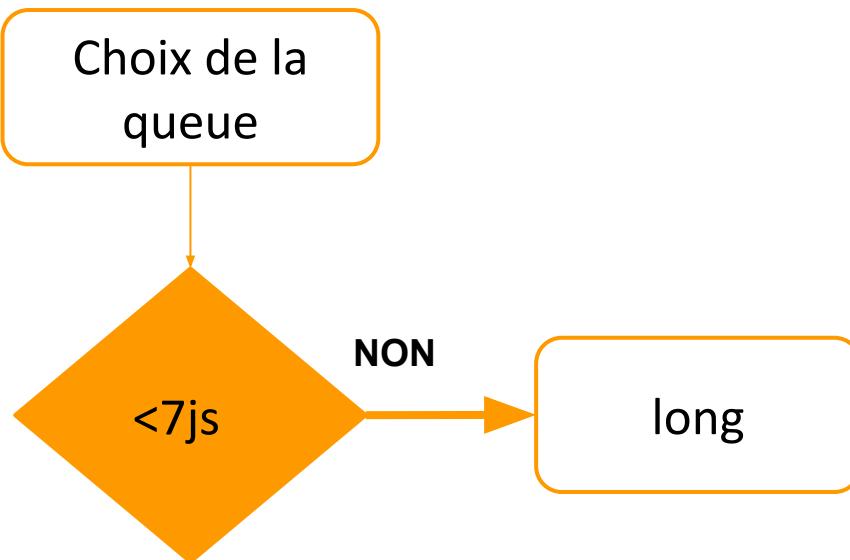
- Partition pour effectuer des travaux sur des processeurs GPUs: basecalling, MiniOn etc..
- Accès restreint au groupe gpu_account
- Demande d'accès avec argumentaire à faire sur

<https://itrop-glpi.ird.fr/plugins/formcreator/front/formlist.php>

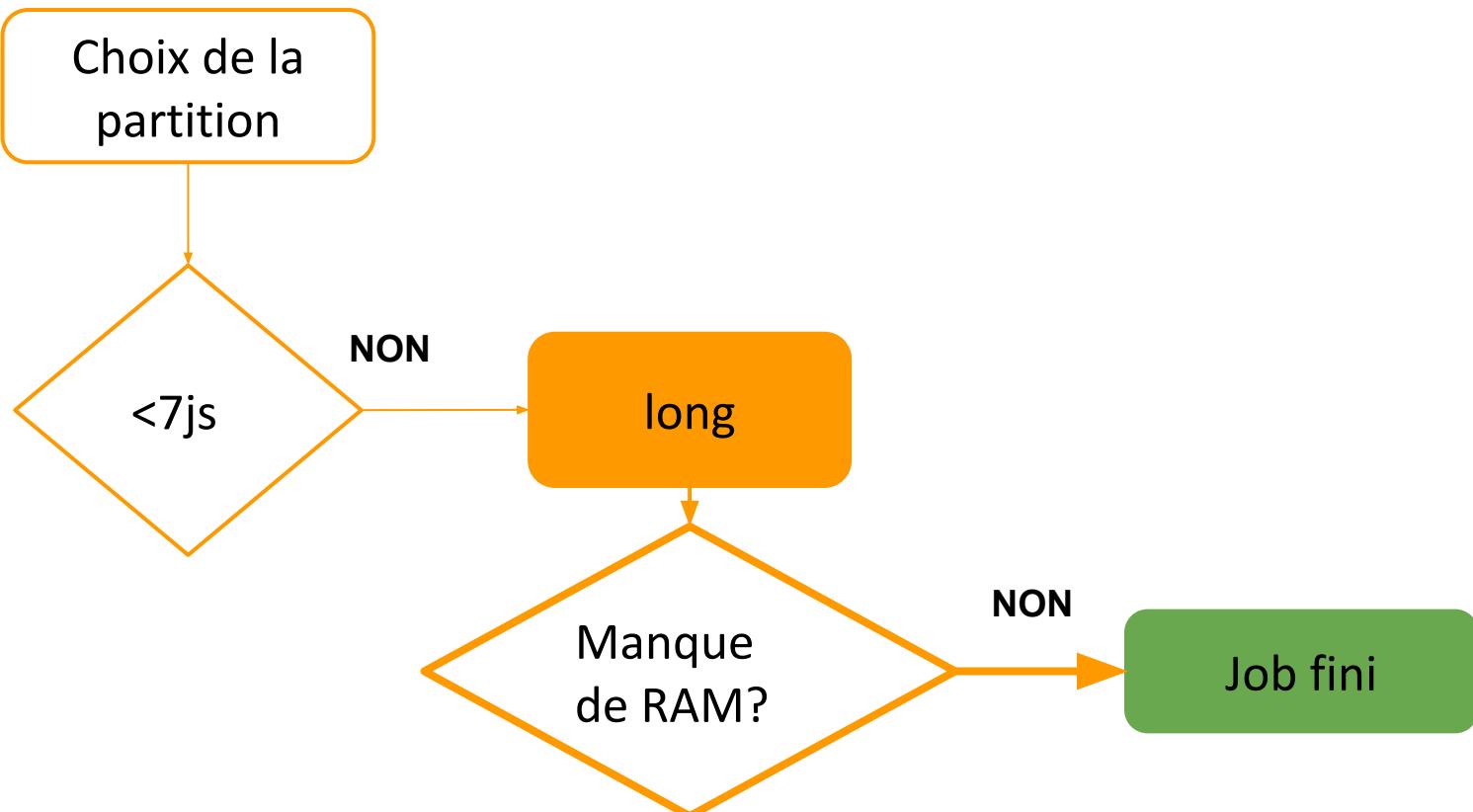
Quelle partition choisir?



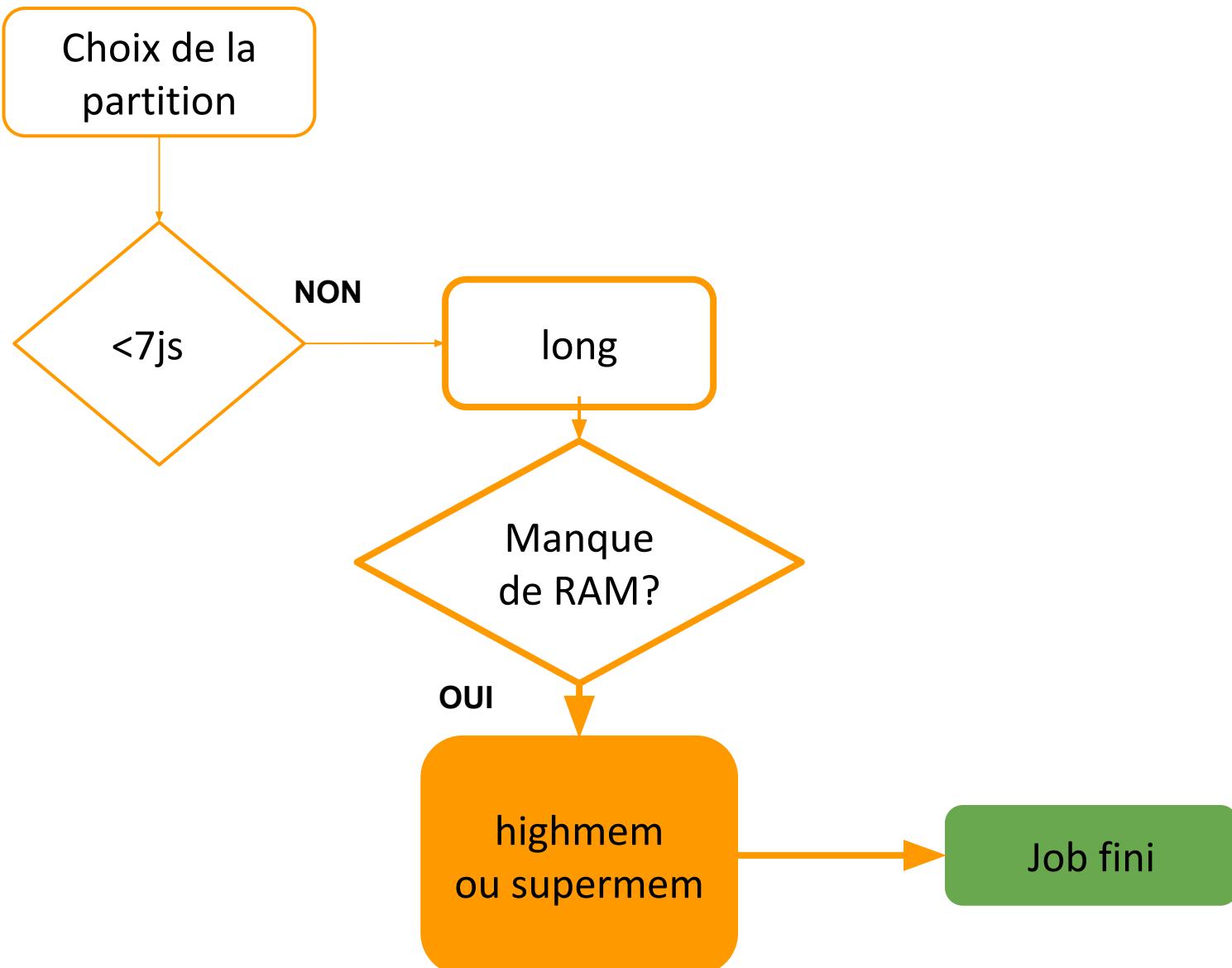
Quelle partition choisir?



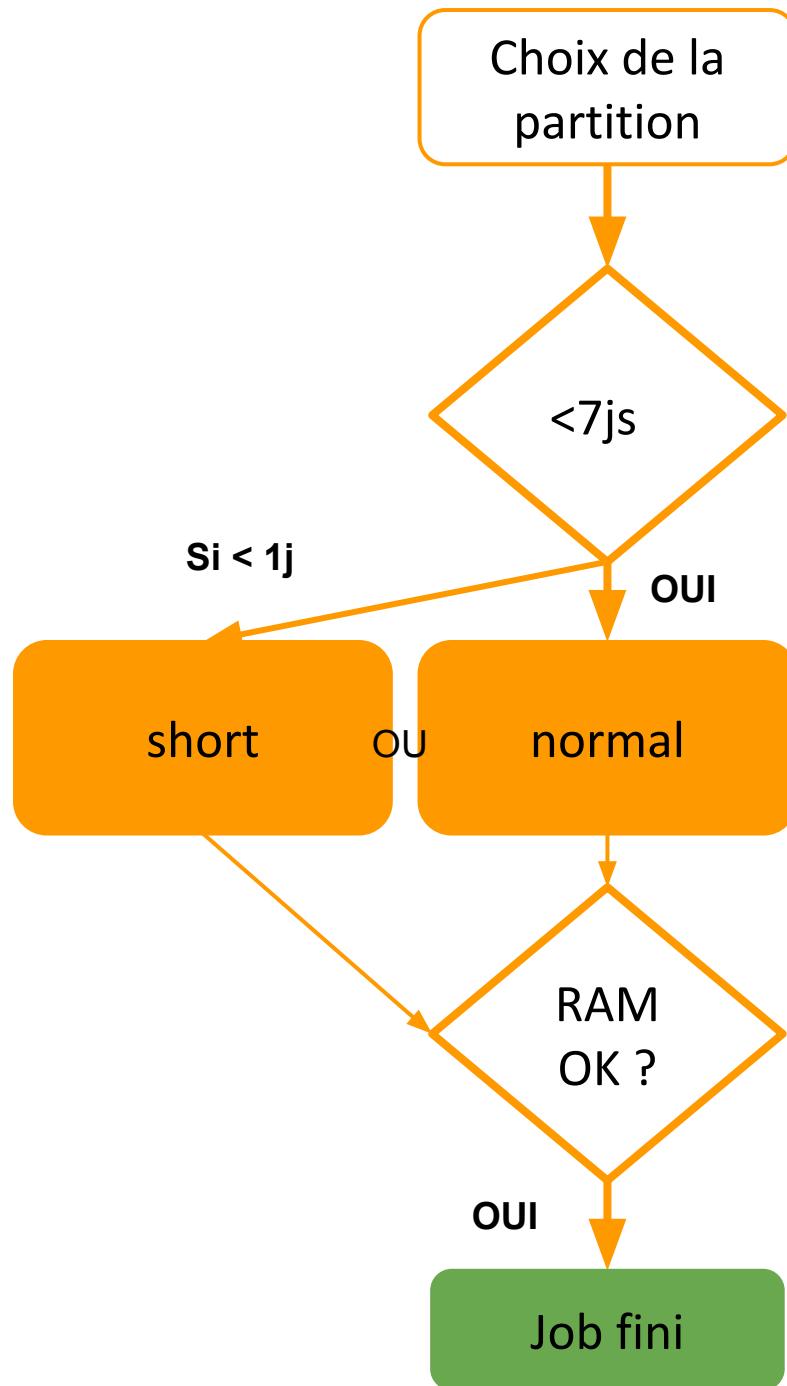
Quelle partition choisir?



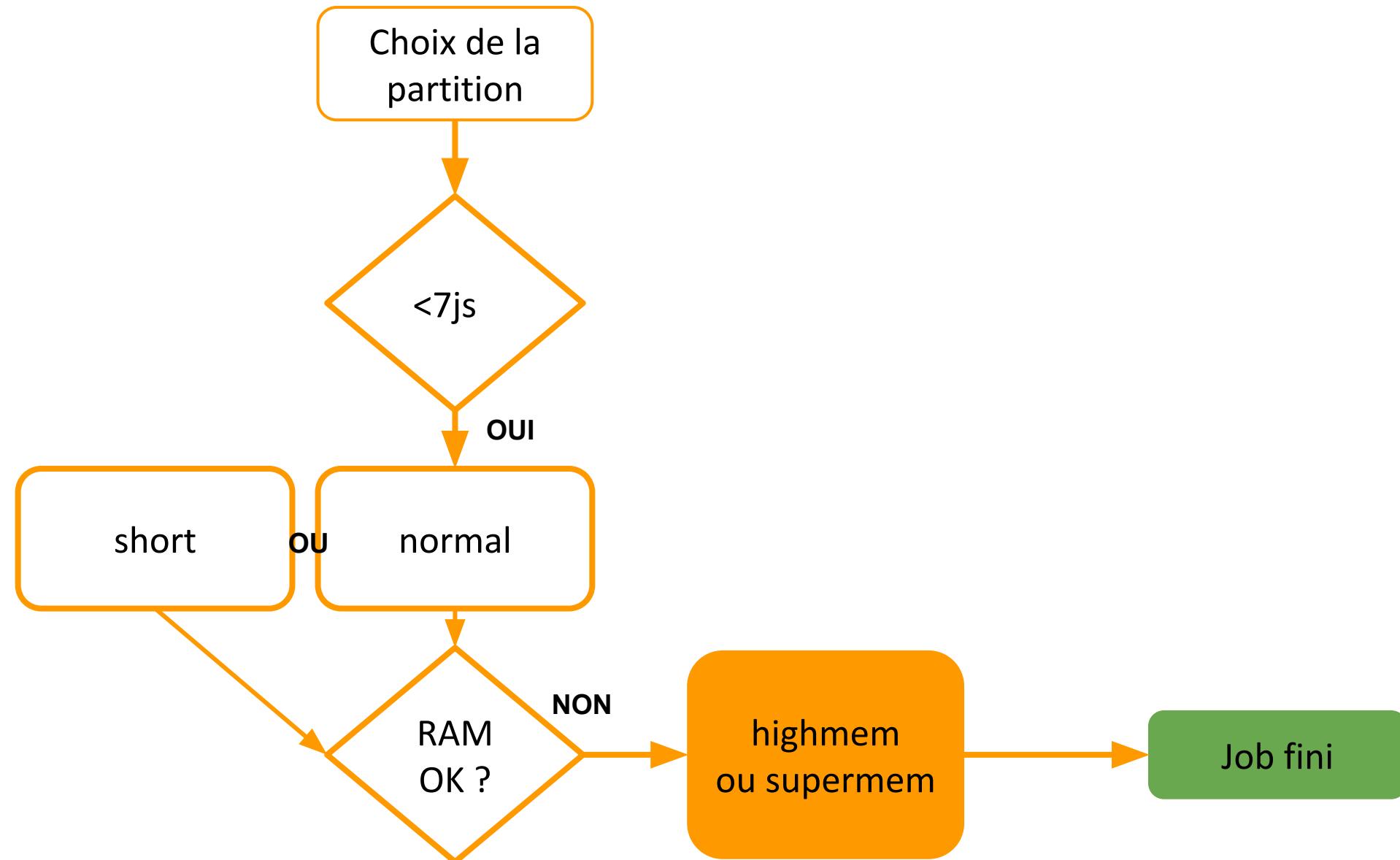
Quelle partition choisir?



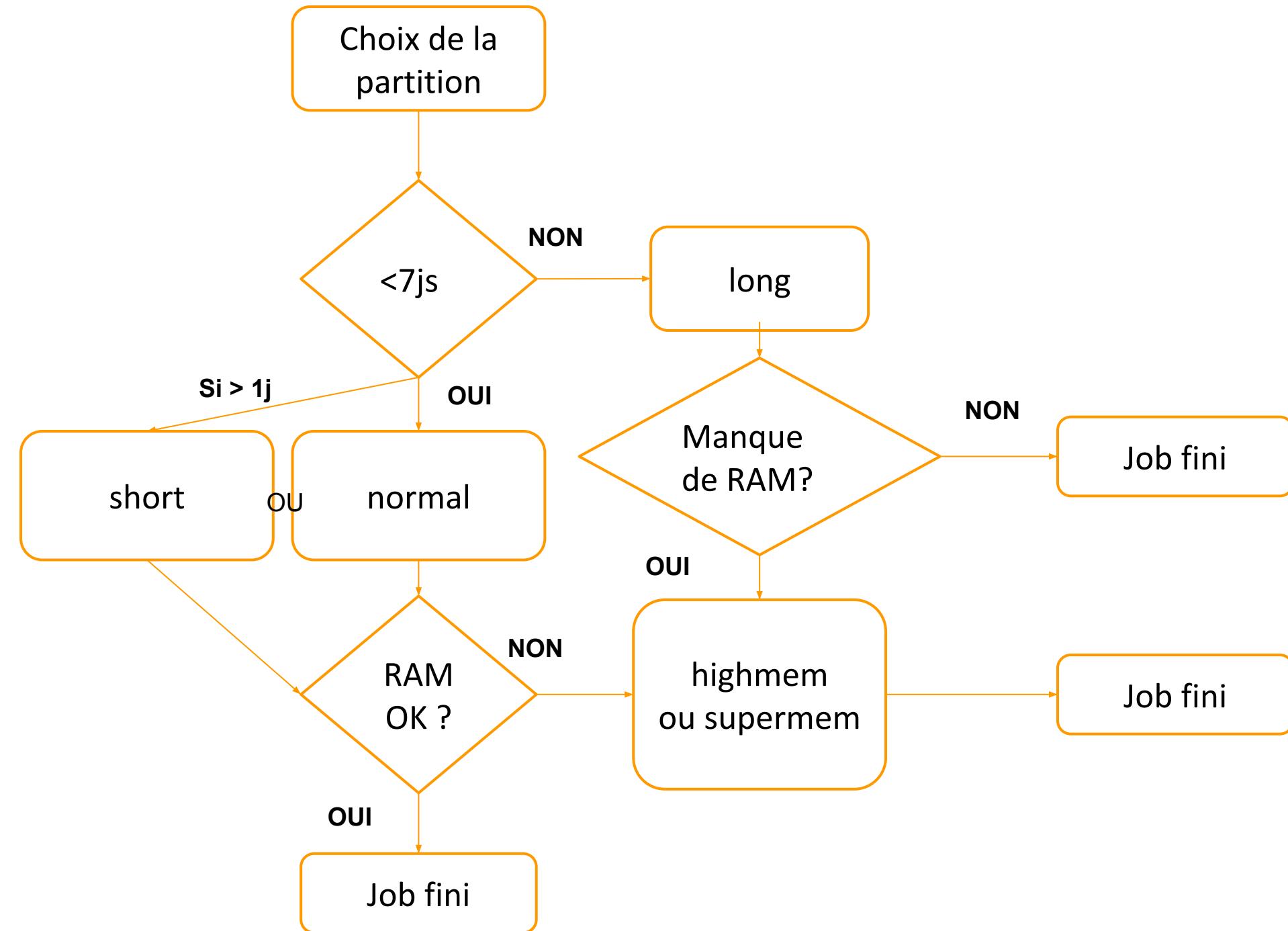
Quelle partition choisir?



Quelle partition choisir?



Quelle partition choisir?



● 1 Noeud Maître



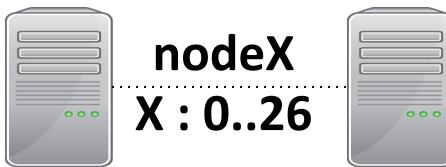
bioinfo-master.ird.fr

91.203.34.148

Rôle :

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

● 27 Nœuds de Calcul



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)

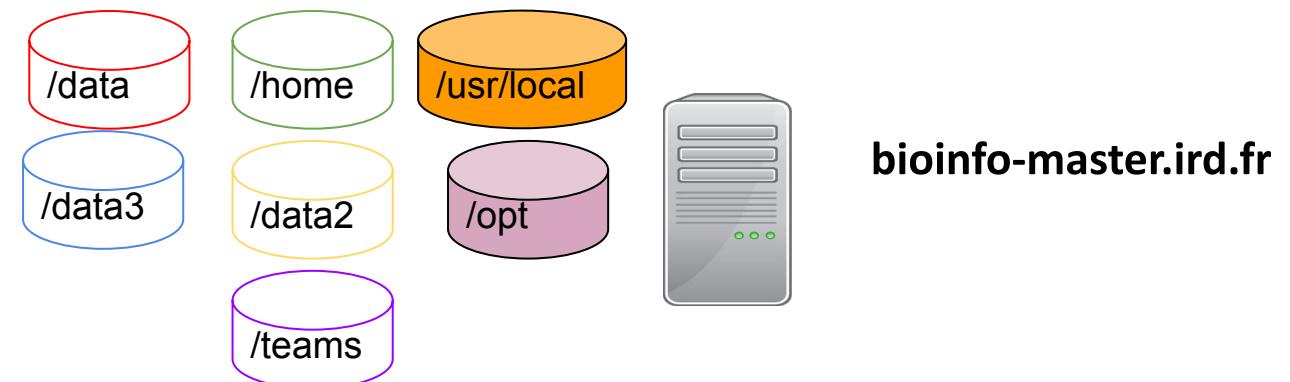
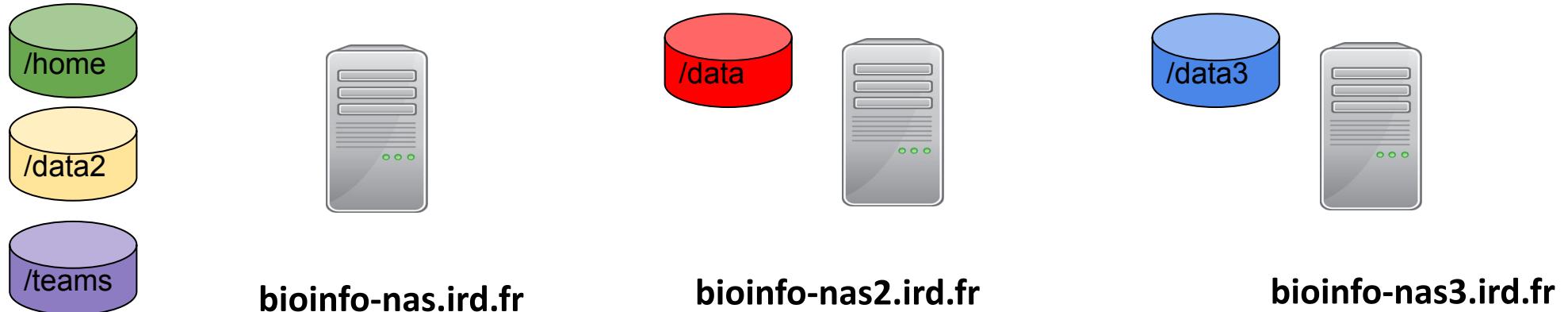
bioinfo-nas3.ird.fr

(nas3)

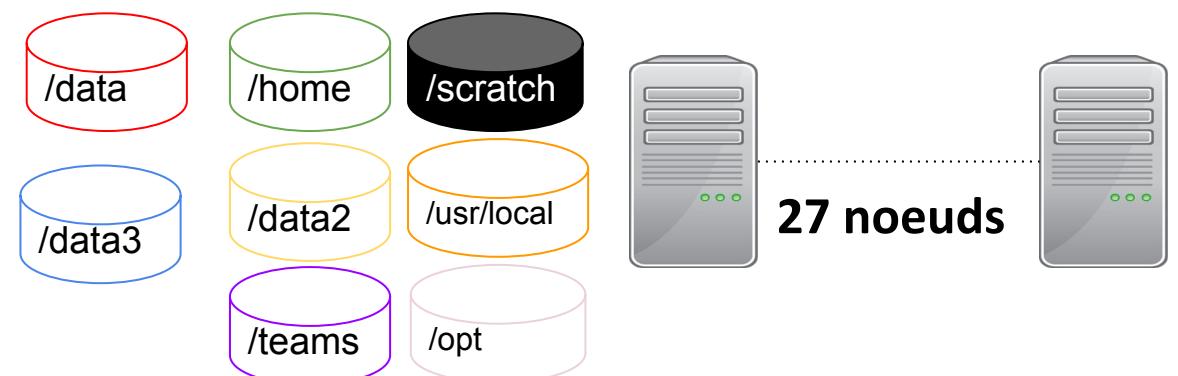
Rôle :

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

Partitions disques sur le cluster i-Trop



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:srun, partition

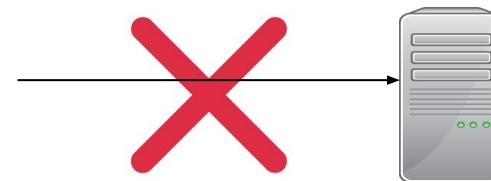
2

Aller sur le [Practice2](#) du github

Transferts de données sur le cluster itrop



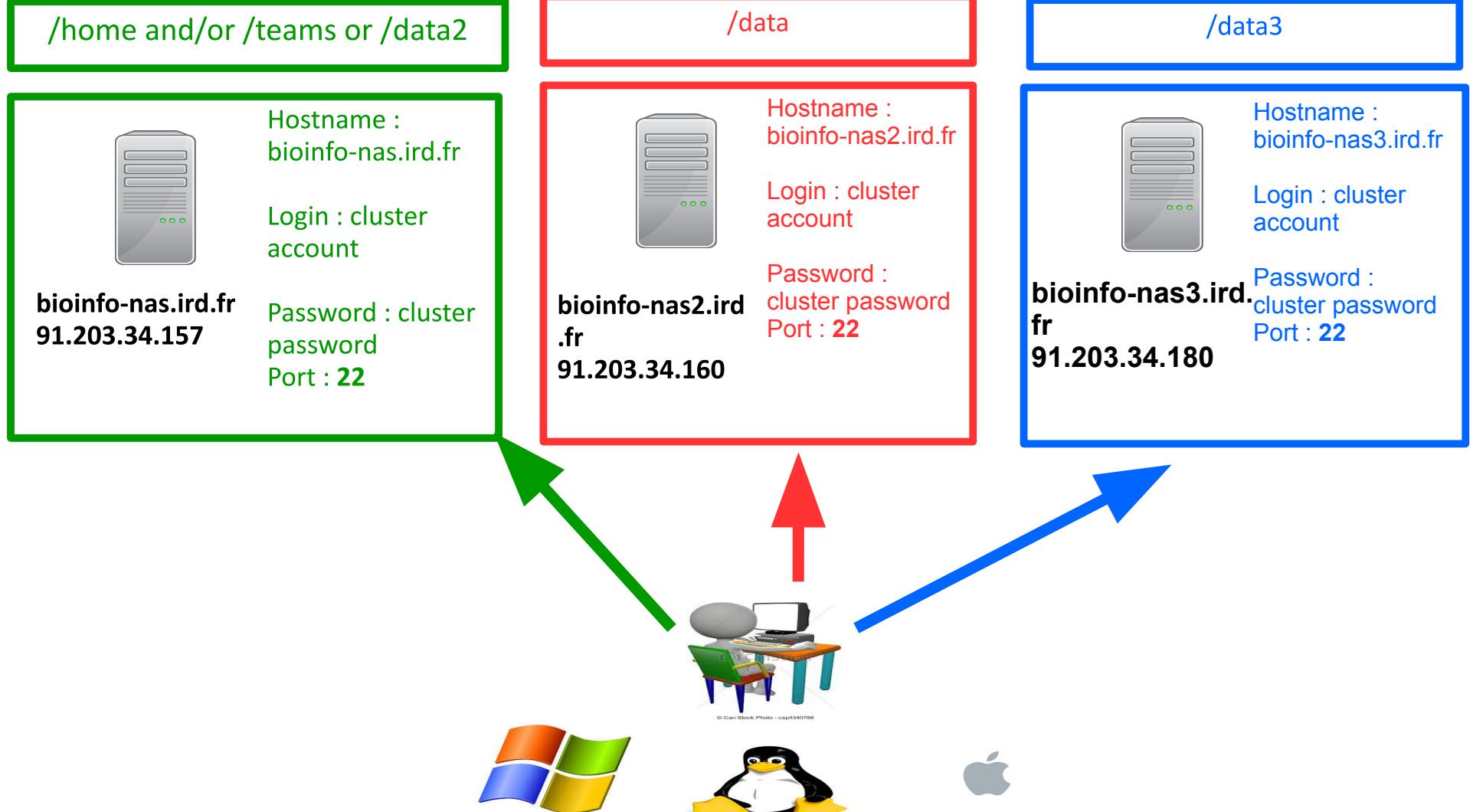
Ordinateur
personnel



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

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

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

Transfert de
données
depuis
Ordinateur
personnel
vers les
serveurs
nas

Etape 1

Etape 2

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

La copie avec scp

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp -r source destination
```

- Syntaxe si la source est distante :

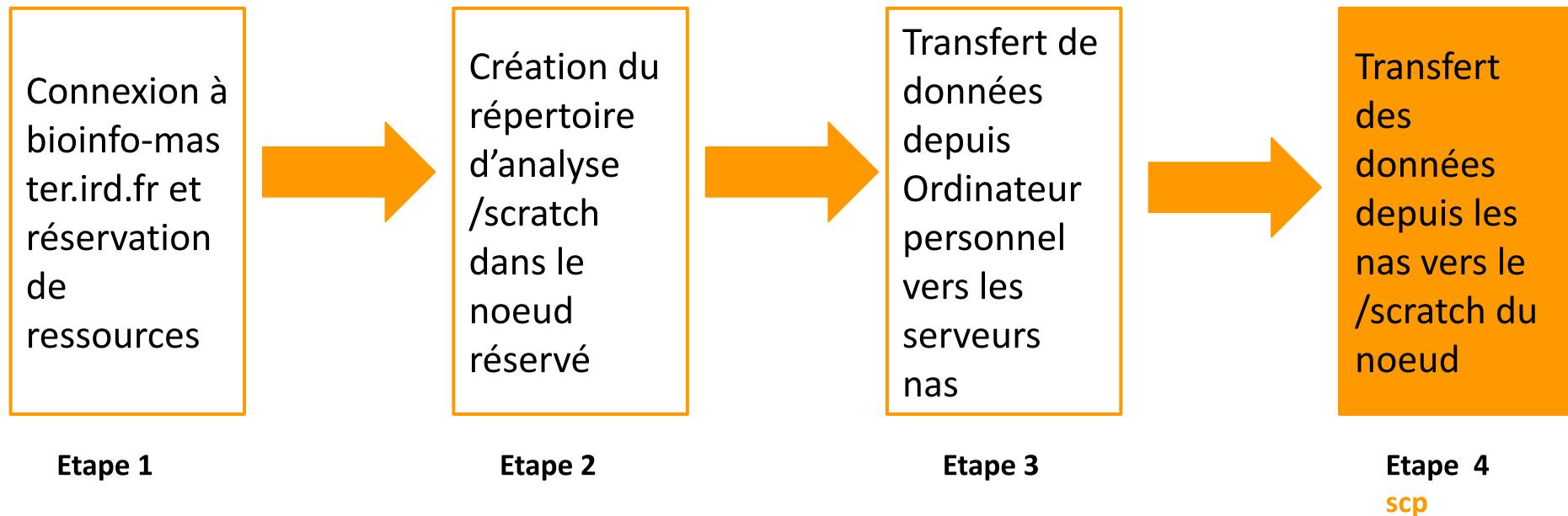
```
scp -r nom_serveur:/chemin/fichier_a_copier répertoire_local
```

- Syntaxe si la destination est distante :

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

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

Etapes d'une analyse sur le cluster





Practice

Etape4: scp vers noeuds

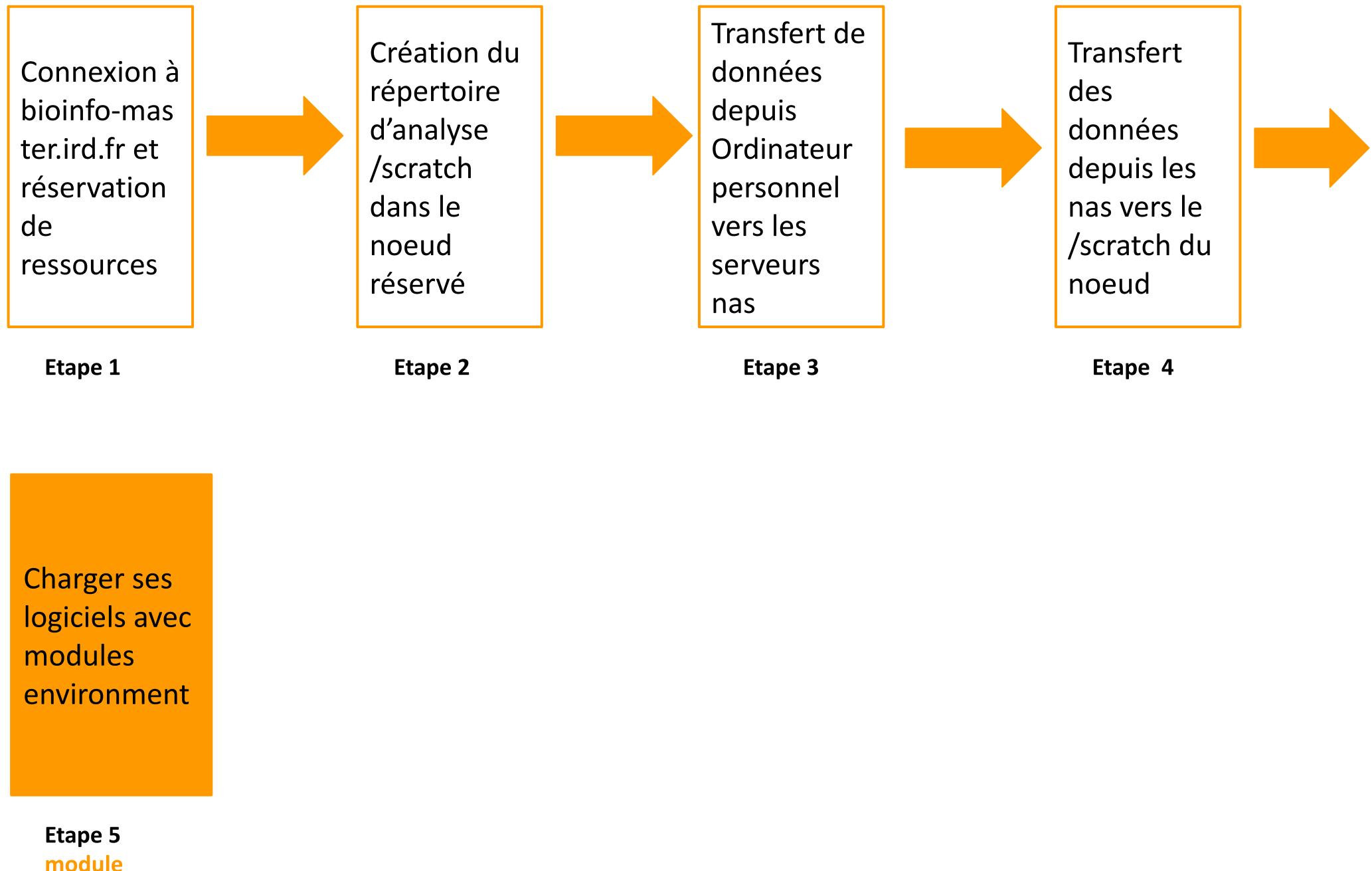
4

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





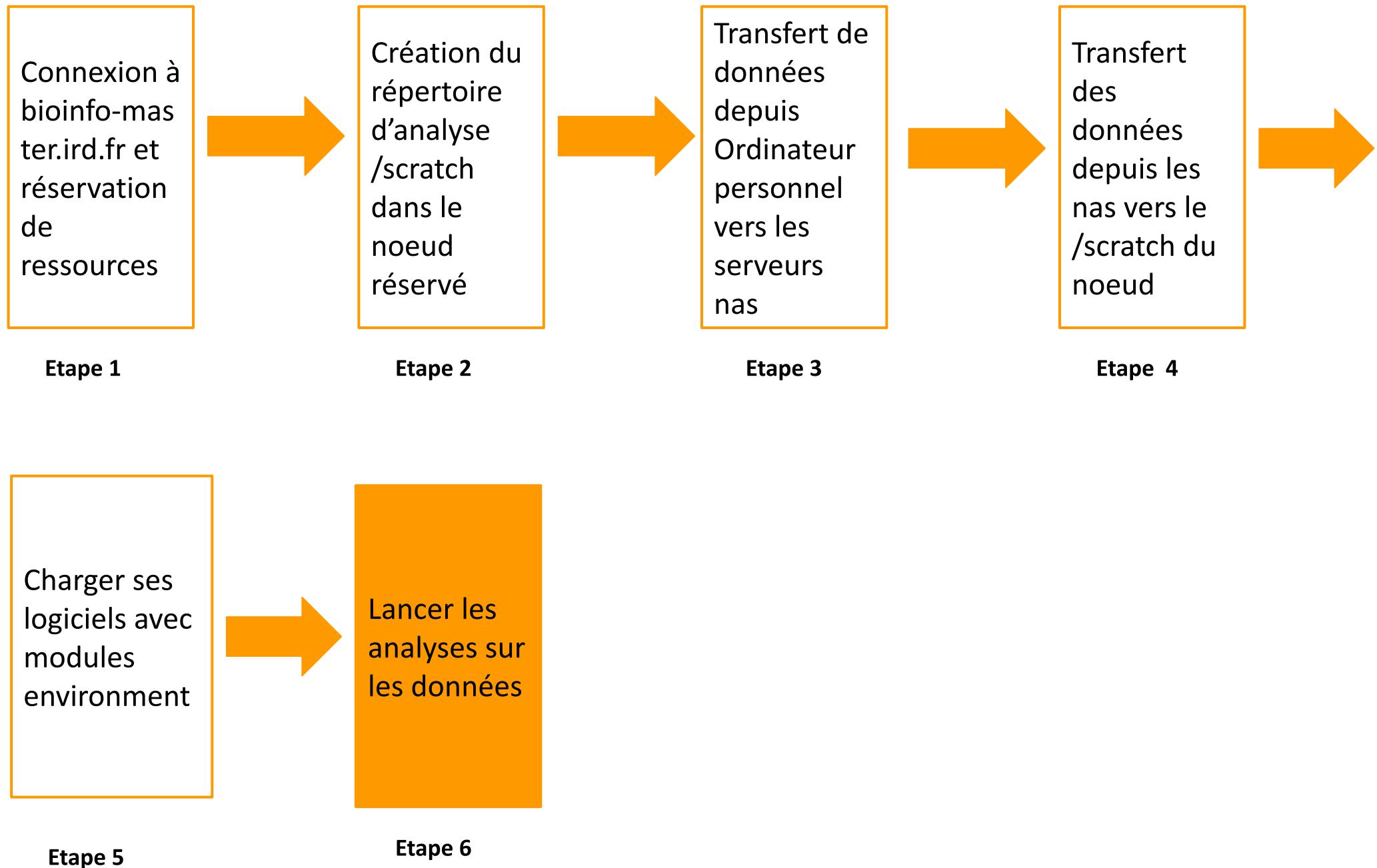
Practice

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



Practice

Etape6: lancer l'analyse

6

Aller sur le Practice6 du github

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp -r source destination
```

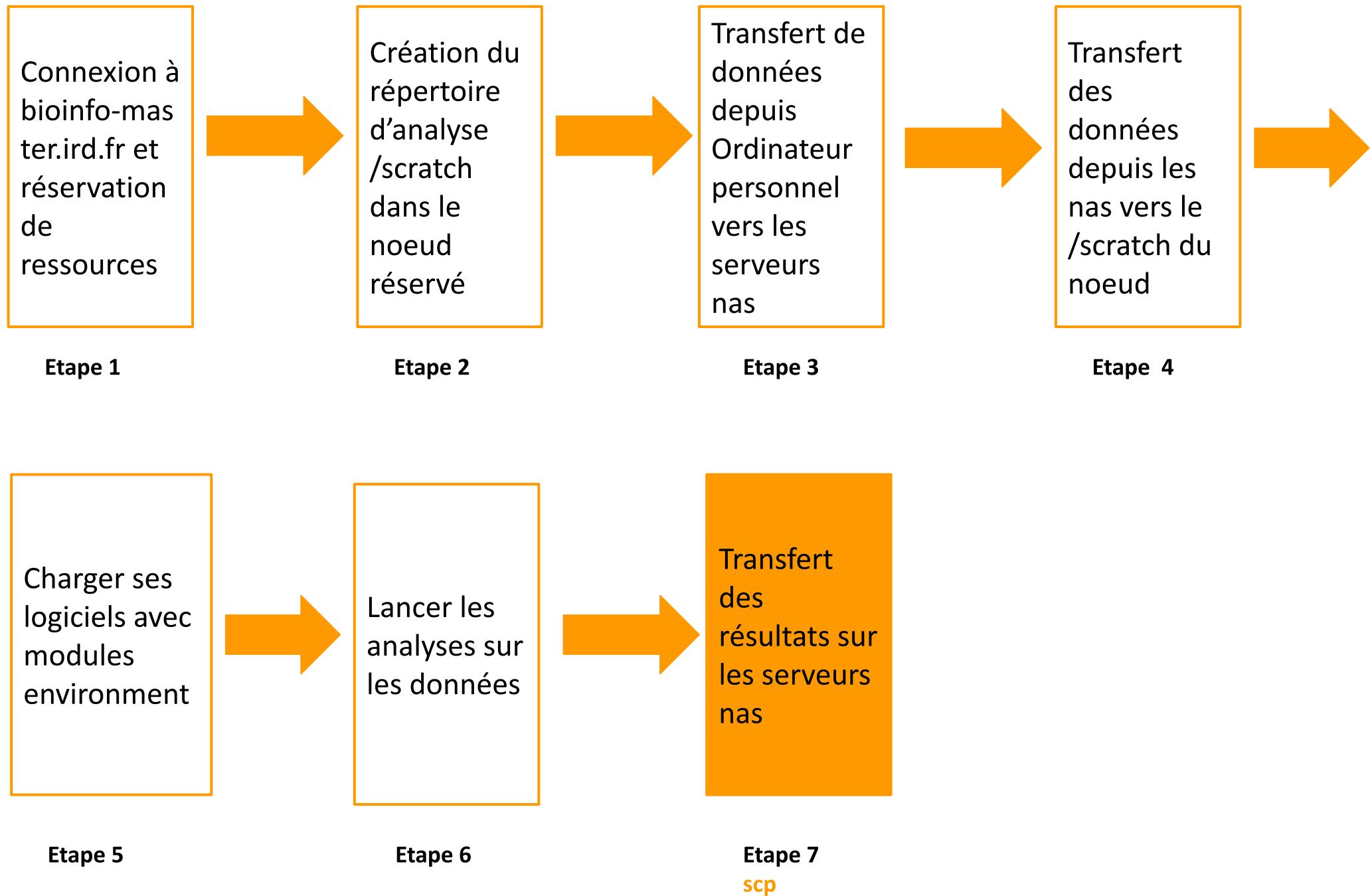
- Syntaxe si la source est distante :

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

- Syntaxe si la destination est distante :

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

Etapes d'une analyse sur le cluster





Practice

Etape7: Récupérer les résultats

7

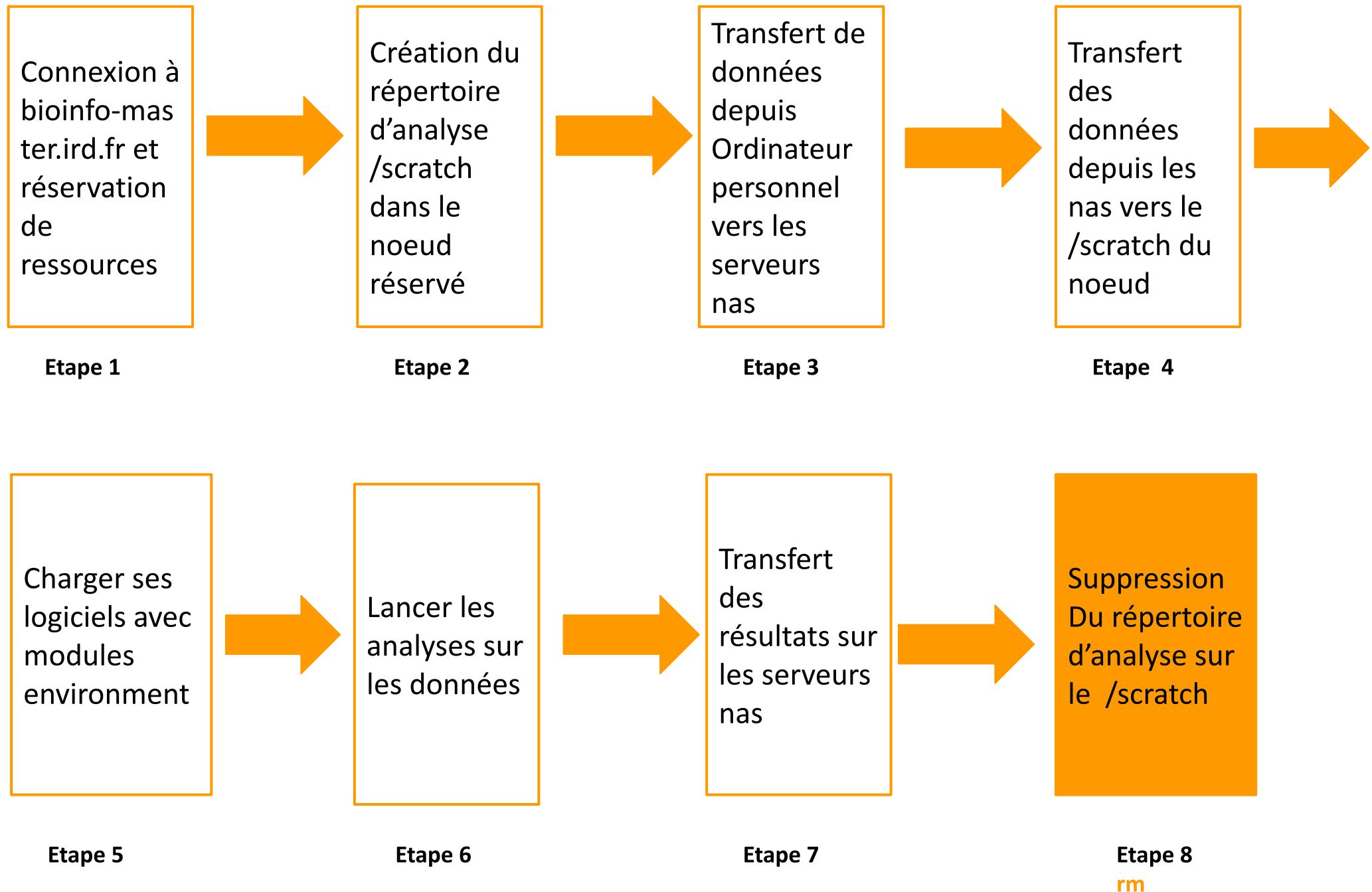
Aller sur le Practice7 du github

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
```

Principales commandes Slurm

Commande	Description	Exemple
srun --time=0X:00 --pty bash -i	Se connecter de manière interactive à un noeud pendant X minutes	srun --time=02:00:00 --pty bash -i Connexion pendant 2 heures
salloc --time=0X:00	S'allouer un ou plusieurs noeuds pour une utilisation future	salloc -N 2 --p short --time=05:00
sbatch	Lancer une analyse via script en arrière plan	sbatch script.sh
sinfo	Informations sur les partitions	sinfo
scancel	Supression des jobs <job_id>	scancel 1029
squeue	Infos sur tous les jobs	squeue -u tando
scontrol show job <job_id>	Infos sur le job actif <job_id>	scontrol show job 1029

Plus d'infos sur Slurm ici: <https://southgreenplatform.github.io/tutorials//cluster-itrop/Slurm/#part-2>

Options des commandes sbatch, srun, salloc

Options	Description	Exemple
--job-name=<name>	Donner un nom au job	sbatch --job-name=tando_blast
-p <partition>	Choisir une partition	sbatch -p highmem
--nodelist=<nodeX>	Choisir un noeud en particulier	sbatch -p normal --nodelist=node14
-n <nbre_taches>	Lancer plusieurs instance d'une commande	srun -n 4 hostname
-c <nb_cpu_par_tache>	Allouer le nombre de cpus par tâche	srun -n 4 -c 2 hostname
--mail-user=<emailaddress>	Envoyer un mail	sbatch --mail-user=ndomassi@ird.fr
--mail-type=<event>	Envoyer un mail quand: END: fin du job FAIL: abandon BEGIN: début du job ALL: tout	sbatch --mail-type=BEGIN
--workdir=[dir_name]	Préciser le répertoire de travail	sbatch --workdir=/scratch/tando script.sh

BONUS

LANCER UN JOB

- Le scheduler choisit les ressources automatiquement
- Lancer des jobs utilisant jusqu'à 24 coeurs
- Possibilité de paramétriser 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 slurm
- On utilise la commande:

```
$~ sbatch script.sh
```

Avec *script.sh* : le nom du script

Options des commandes sbatch, srun, salloc

Options	Description	Exemple
--job-name=<name>	Donner un nom au job	sbatch --job-name=tando_blast
-p <partition>	Choisir une partition	sbatch -p highmem
--nodelist=<nodeX>	Choisir un noeud en particulier	sbatch -p normal --nodelist=node14
-n <nbre_taches>	Lancer plusieurs instance d'une commande	srun -n 4 hostname
-c <nb_cpu_par_tache>	Allouer le nombre de cpus par tâche	srun -n 4 -c 2 hostname
--mail-user=<emailaddress>	Envoyer un mail	sbatch --mail-user=ndomassi@ird.fr
--mail-type=<event>	Envoyer un mail quand: END: fin du job FAIL: abandon BEGIN: début du job ALL: tout	sbatch --mail-type=BEGIN
--workdir=[dir_name]	Préciser le répertoire de travail	sbatch --workdir=/scratch/tando script.sh

Syntaxe des scripts bash

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

```
#!/bin/bash

##### Configuration SLURM#####
## On définit le nom du job
#SBATCH --job-name=test
## On définit le nom du fichier de sortie
#SBATCH --output=res.txt
## On définit le nombre de tâches
#SBATCH --ntasks=1
## On définit le temps limite d'exécution
#SBATCH --time=10:00
#####
```

Syntaxe des scripts bash

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

```
#####Partie exécution des commandes #####
```

```
nom_variable1="valeur_variable1"  
nom_variable2="valeur_variable2"
```

```
sleep 30  
hostname
```



Practice

Lancer un script avec qsub

9

Aller sur le [Practice9](#) du github

Enquête de satisfaction

Merci de compléter l'enquête à cette adresse:

<https://itrop-survey.ird.fr/index.php/562934?lang=fr>

Citations

Si vous utilisez les ressources du plateau i-Trop.

Merci de nous citer avec:

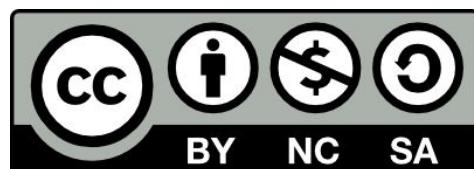
“The authors acknowledge the IRD itrop HPC (South Green Platform) at IRD montpellier

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 ressources 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/>