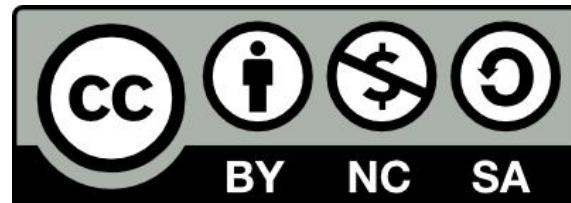


Initiation HPC cluster

www.southgreen.fr

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





Julie ORJUELA-
BOUNIOL¹, IE
Bioinformaticienne
25%

Ndomassi TANDO, IE
Ingénieur systèmes
100%
Animateur plateau

Christine TRANCHANT-
DUBREUIL, IE
Bioinformaticienne
20%

Aurore COMTE, IE
Bioinformaticienne
20%

Valérie NOEL, TCS
Bioinformaticienne
25%

Bruno GRANOUILLAC³, IE
Systèmes d'information
100%



Emmanuelle Beyne, IR
Bioinformaticienne
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

- 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/trainings/hpc/hpcHowto/>

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

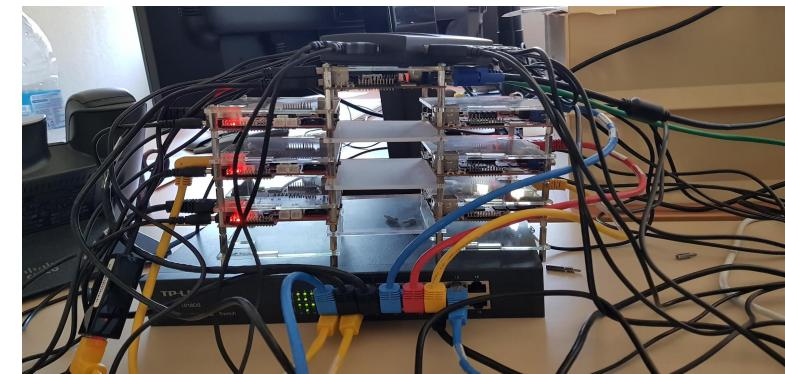
Qu'est ce qu'un cluster?

- 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



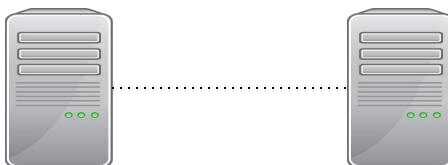
bioinfo-master.ird.fr

Rôle :

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

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

● 25 Noeuds 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

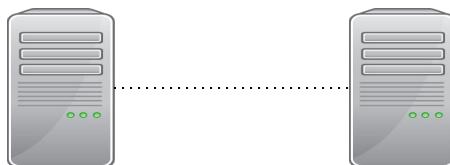
91.203.34.148

Rôle :

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

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

● 25 Noeuds 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

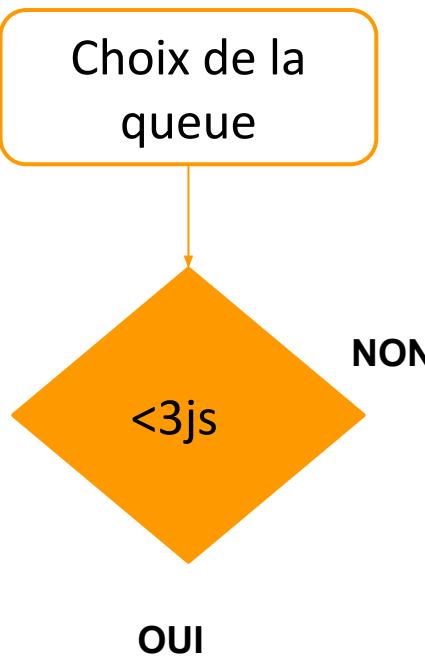


Etape 1
qrsh/qlogin
ou qsub

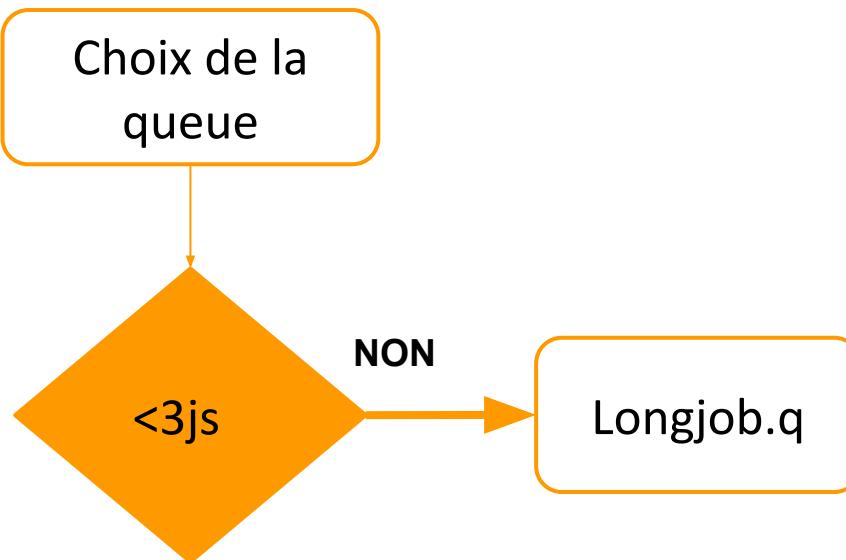
Les files d'attentes

Queues	Utilisation	Caractéristiques RAM noeuds	Caractéristiques coeurs noeuds
bioinfo.q	Jobs courts < 3jours	48 à 64 Go	12 coeurs
bioinfo2.q	Jobs courts < 3jours	64 Go	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

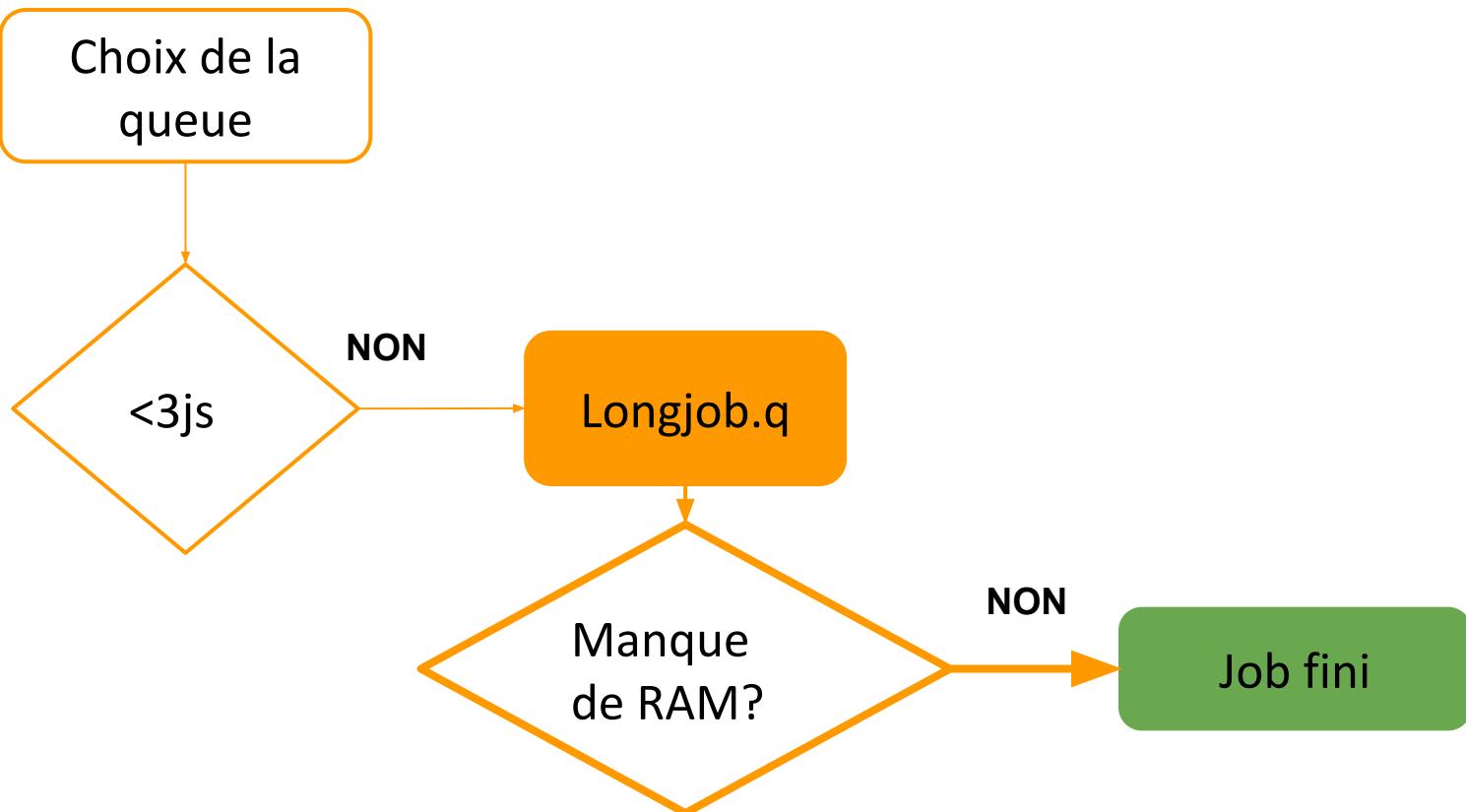
Quelle queue choisir?



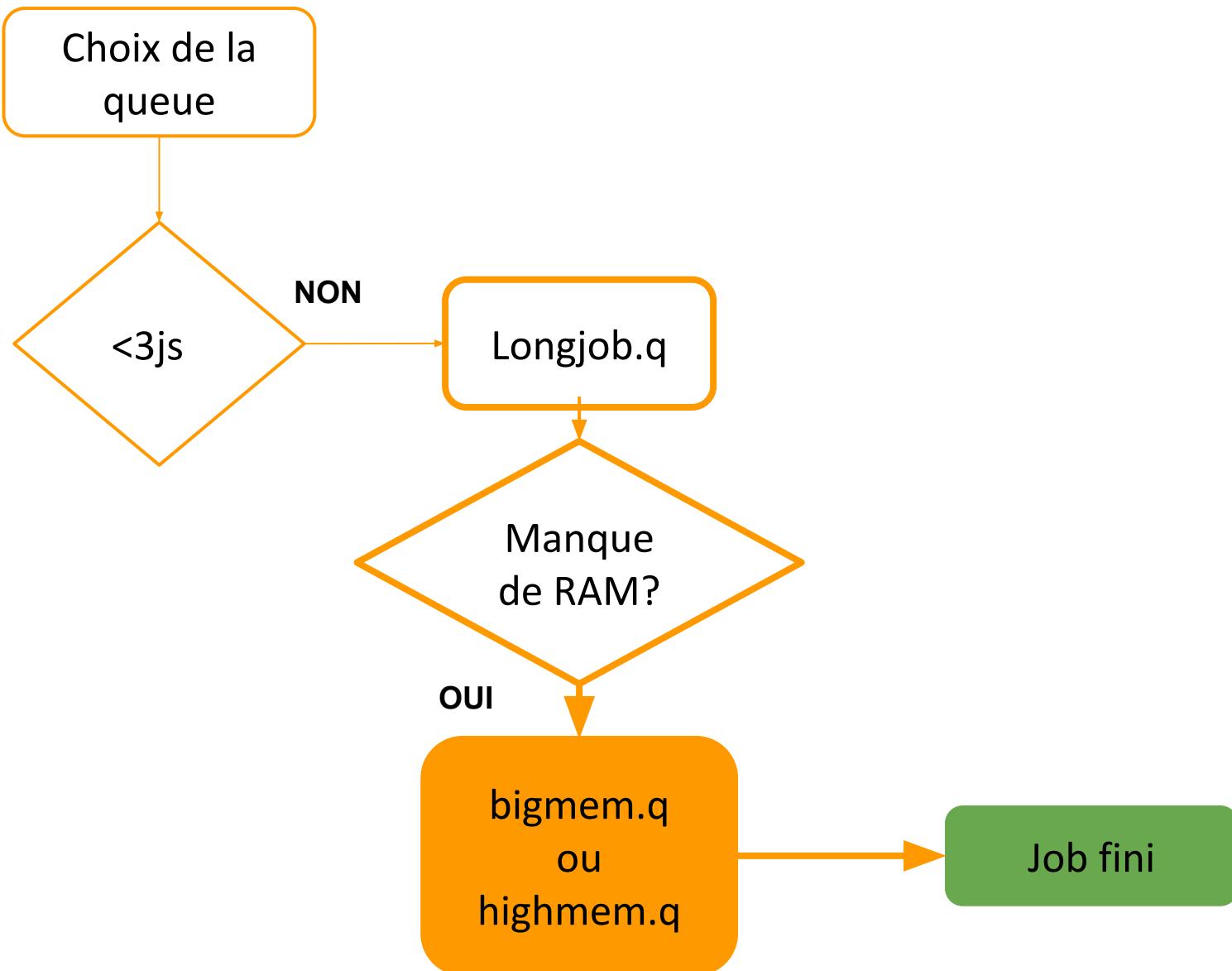
Quelle queue choisir?



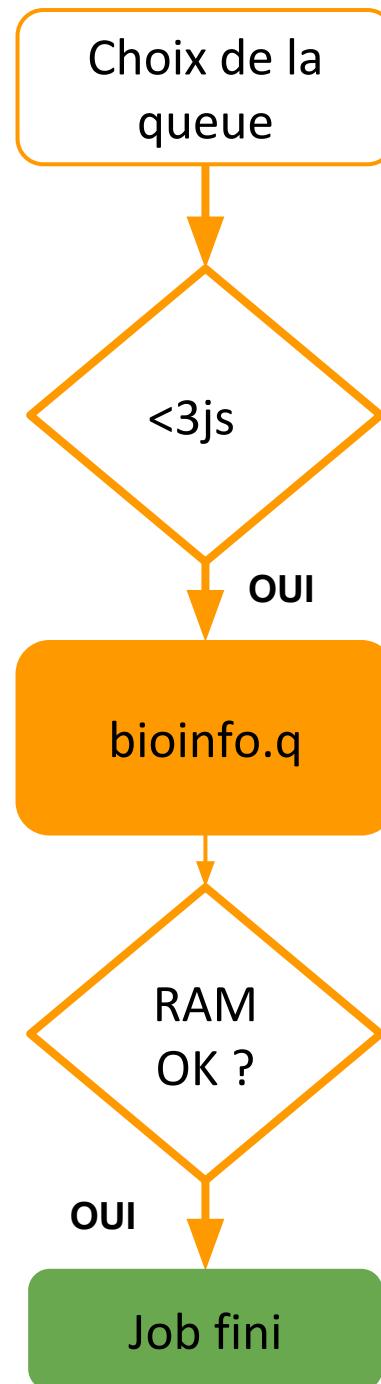
Quelle queue choisir?



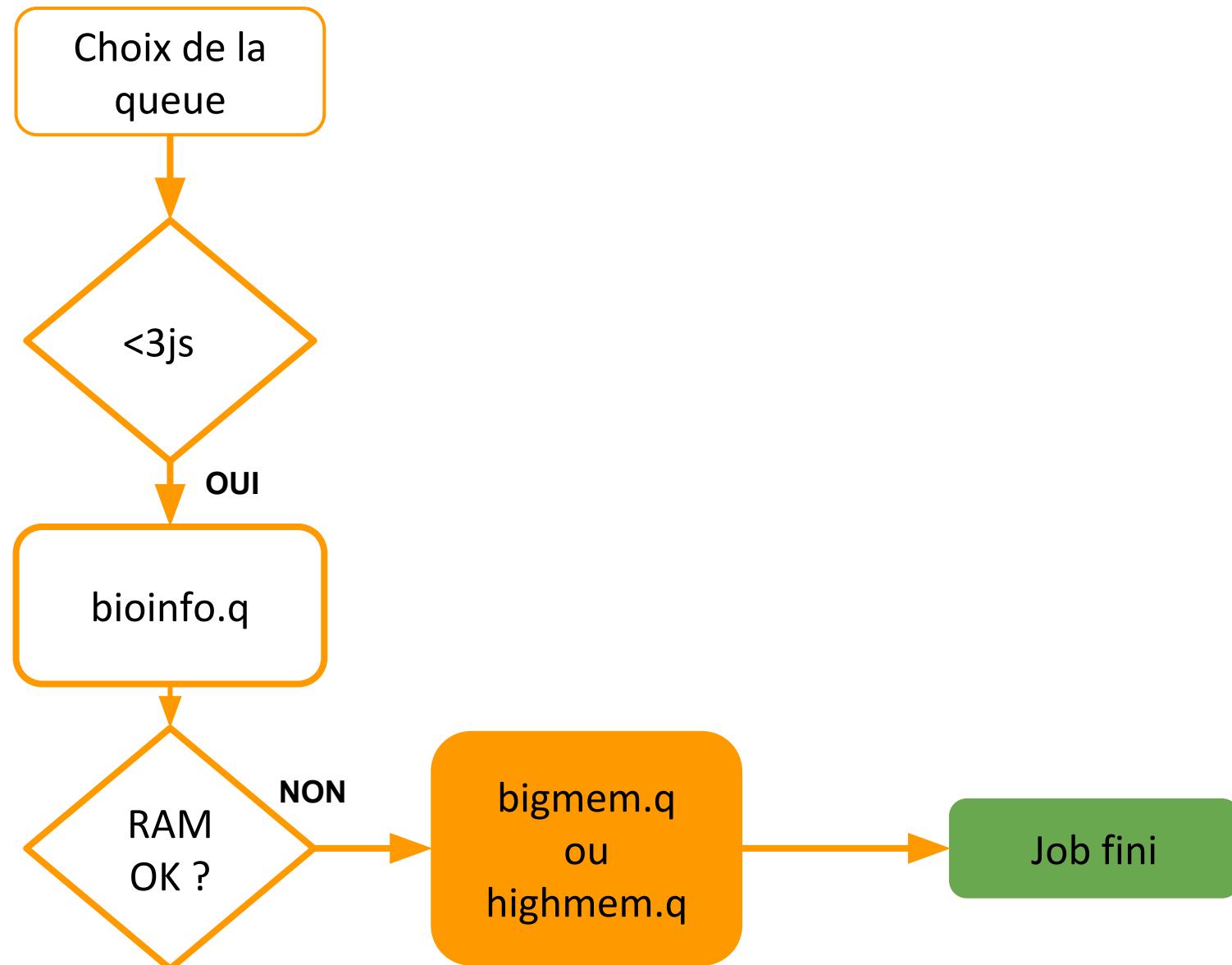
Quelle queue choisir?



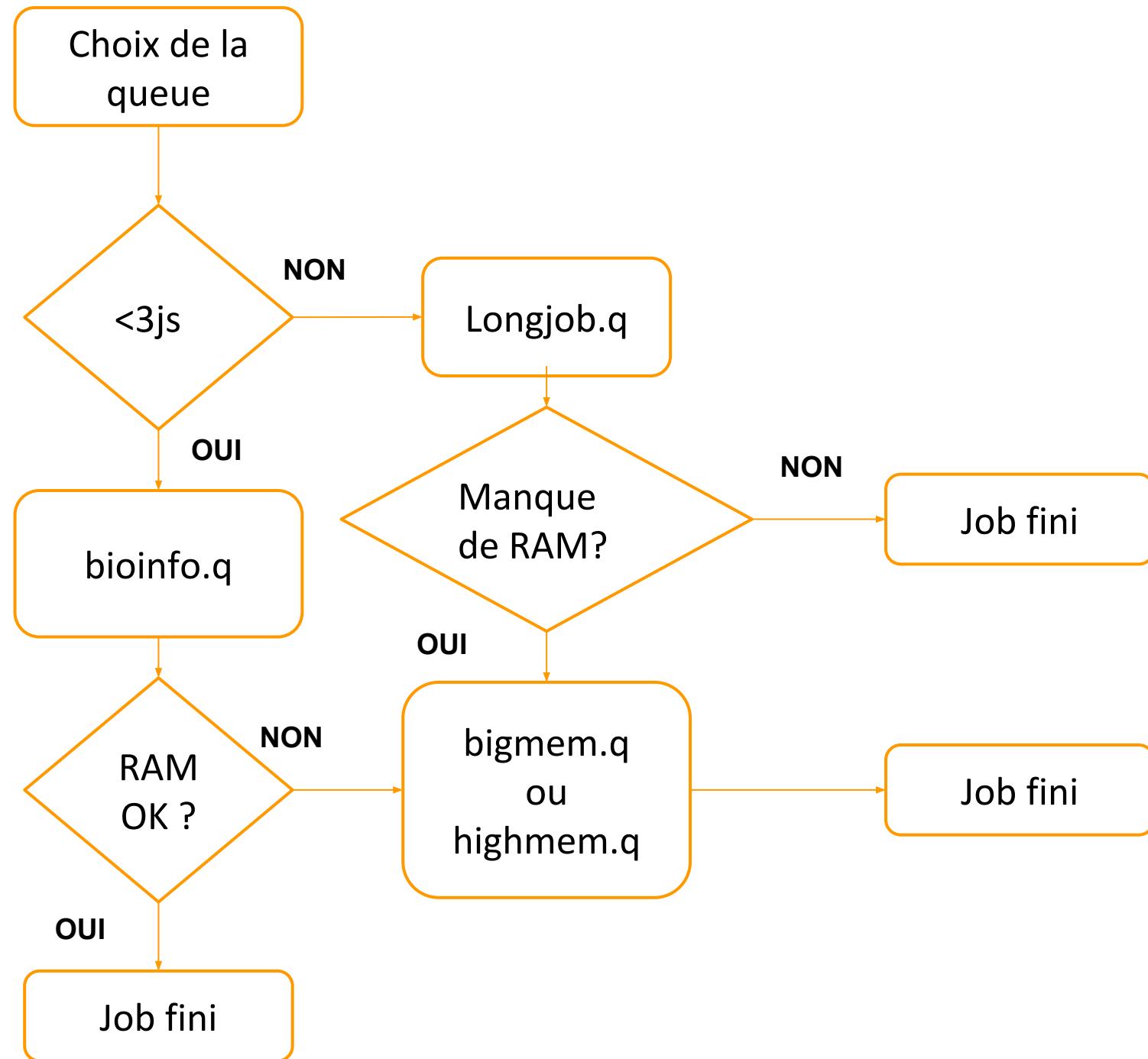
Quelle queue choisir?



Quelle queue choisir?



Quelle queue choisir?



- **1 Noeud Maître**



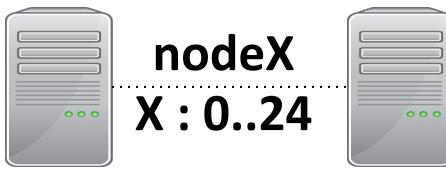
bioinfo-master.ird.fr

91.203.34.148

Rôle :

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

- **25 Noeuds de Calcul**



Rôle :

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

- **3 serveurs NAS**



Bioinfo-nas.ird.fr
(nas)

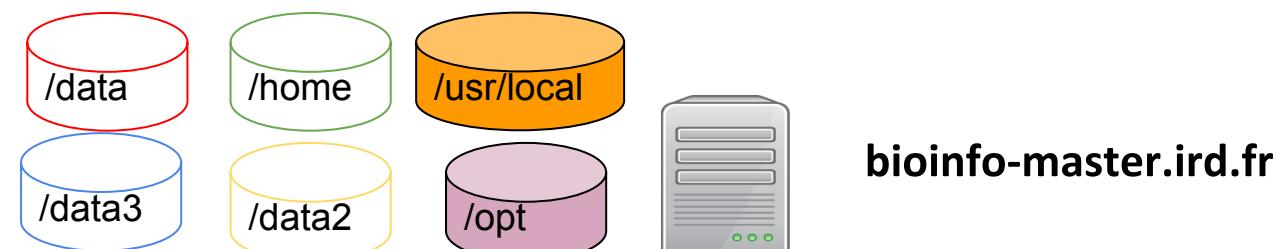
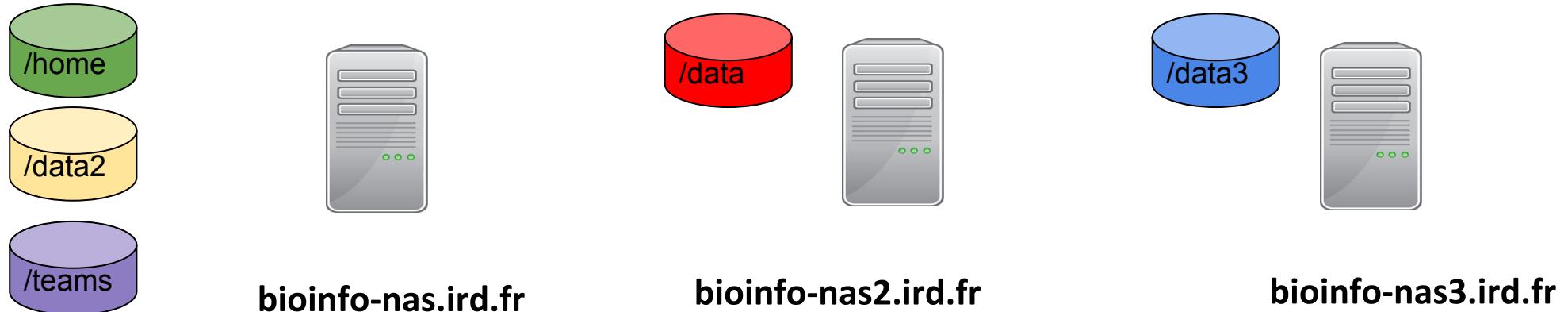
Bioinfo-nas2.ird.fr
(nas2)

Bioinfo-nas3.ird.fr
(nas3)

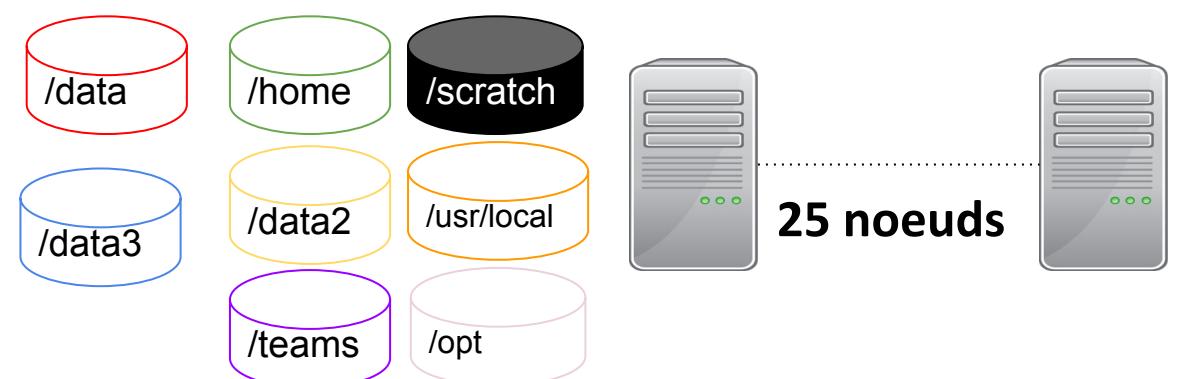
Rôle :

- 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:qrsh, partition

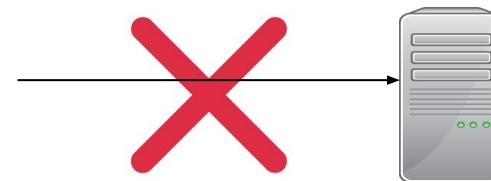
2

Aller sur le [Practice2](#) du github

Transferts de données sur le cluster itrop



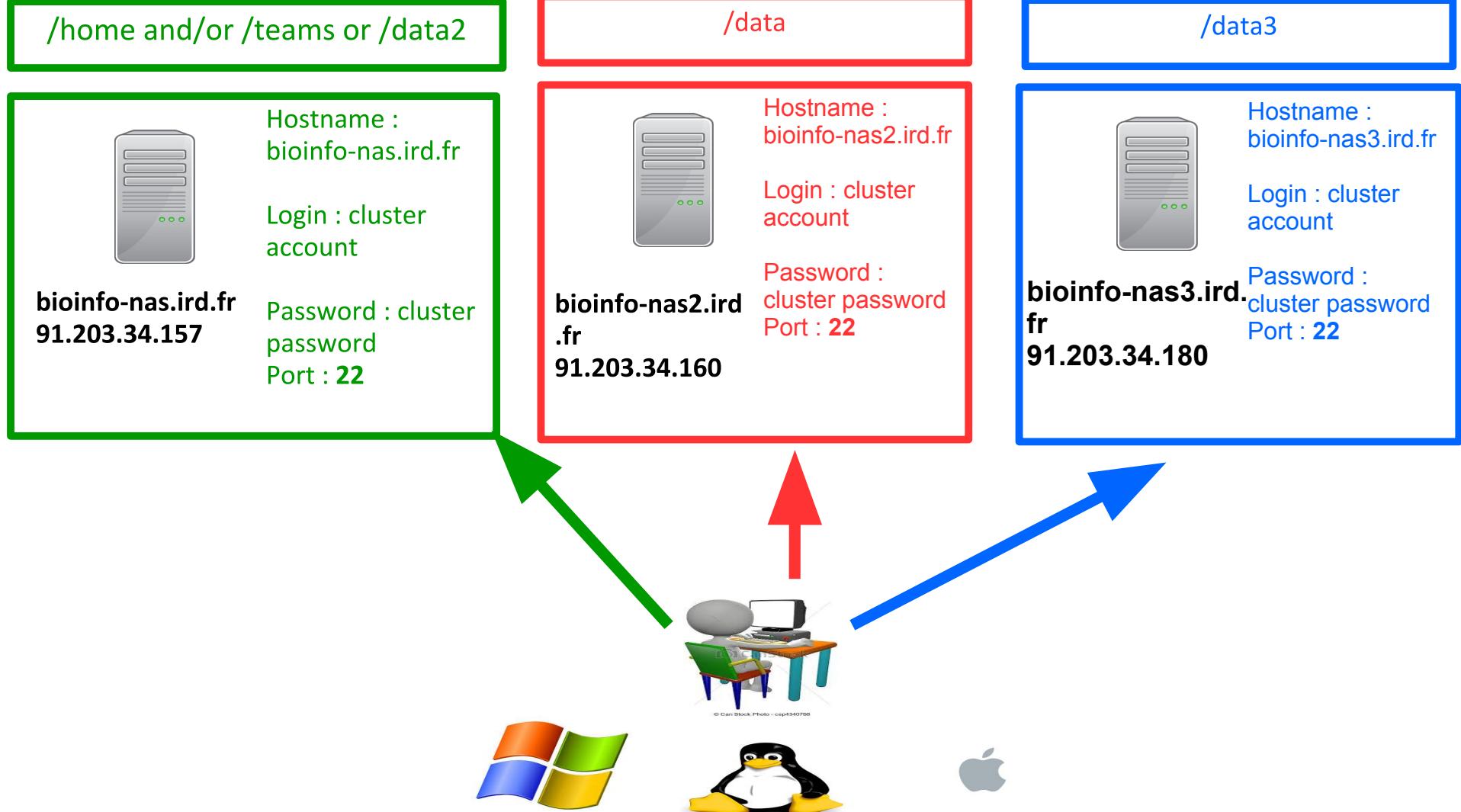
Ordinateur personnel



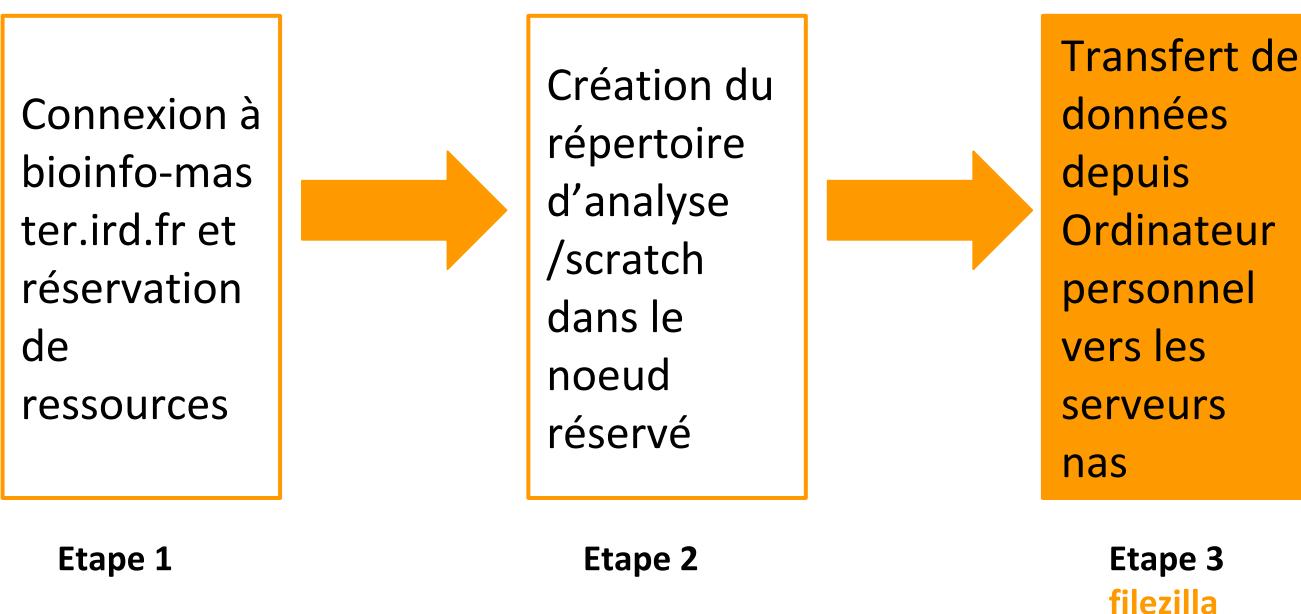
Transfert direct
via filezilla
interdit

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

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp -r source destination
```

- Syntaxe si la source est distante :

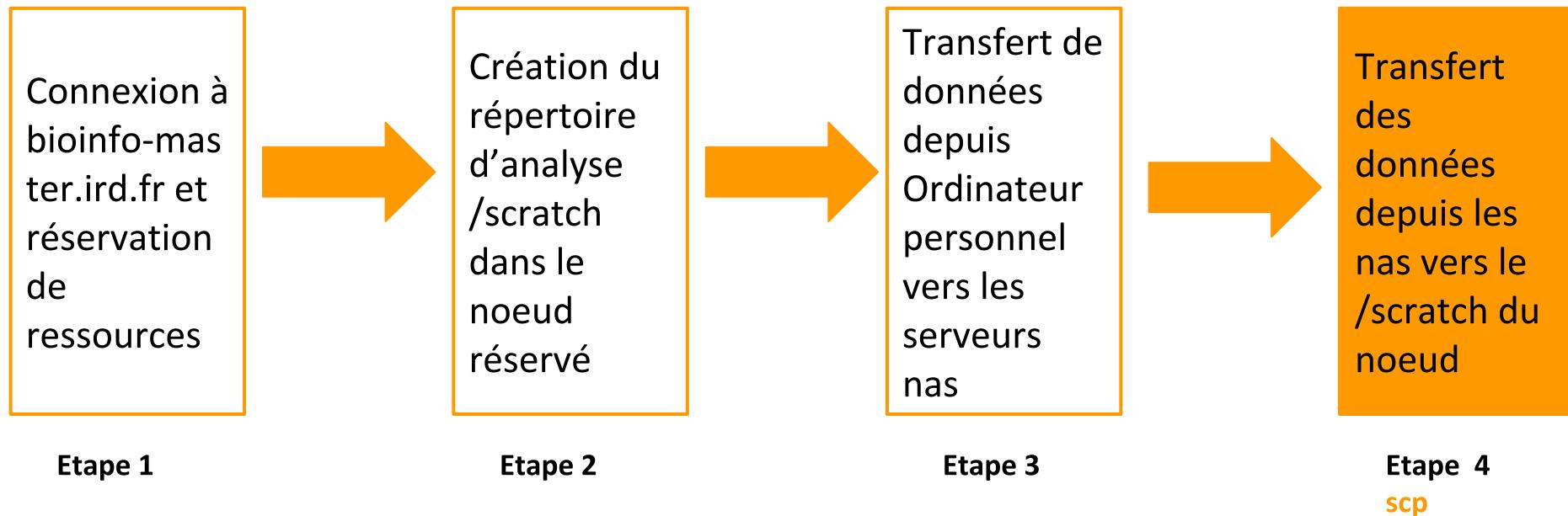
```
scp -r nom_serveur:/chemin/fichier_a_copier répertoire_local
```

- 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

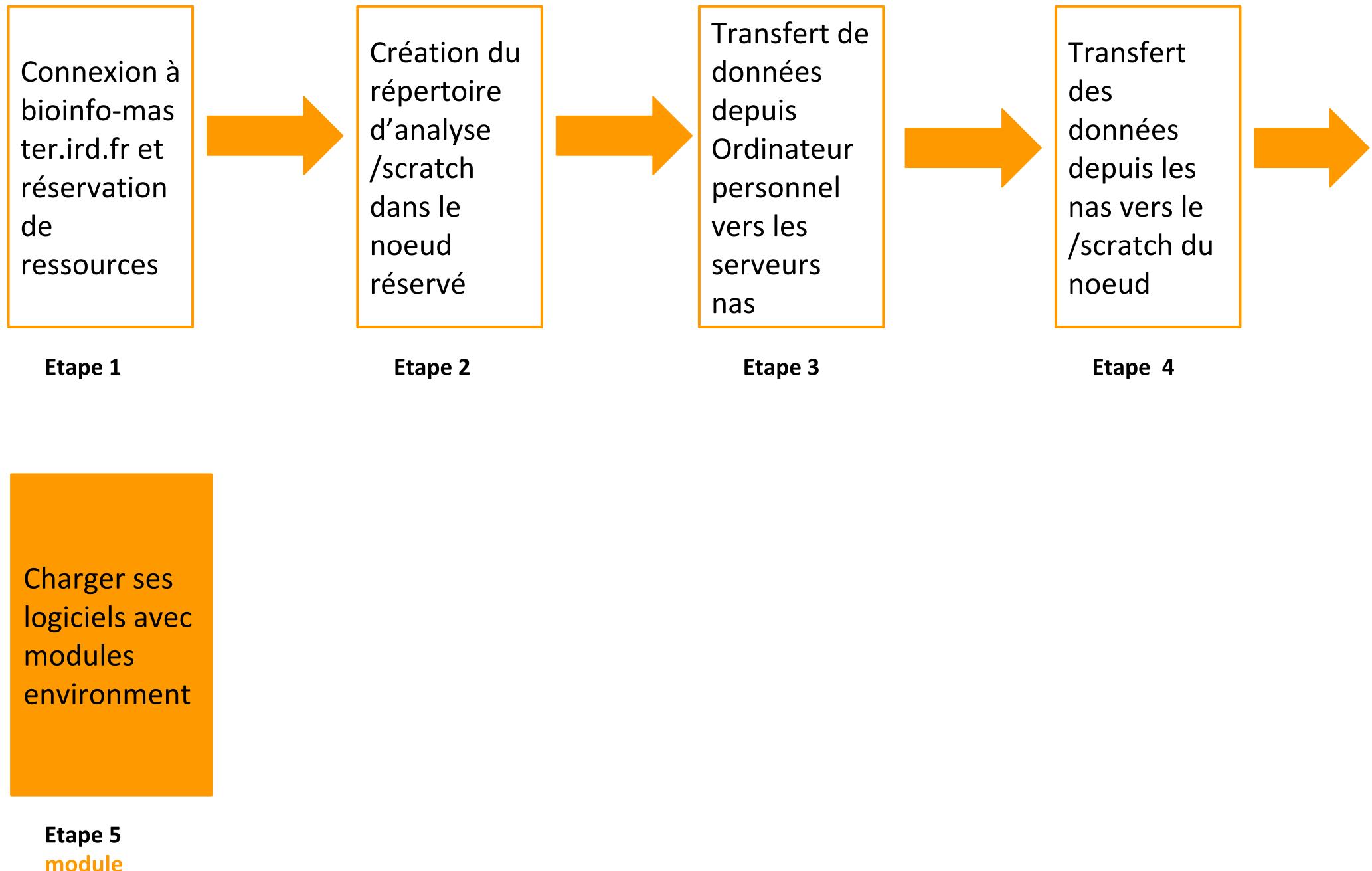
4

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





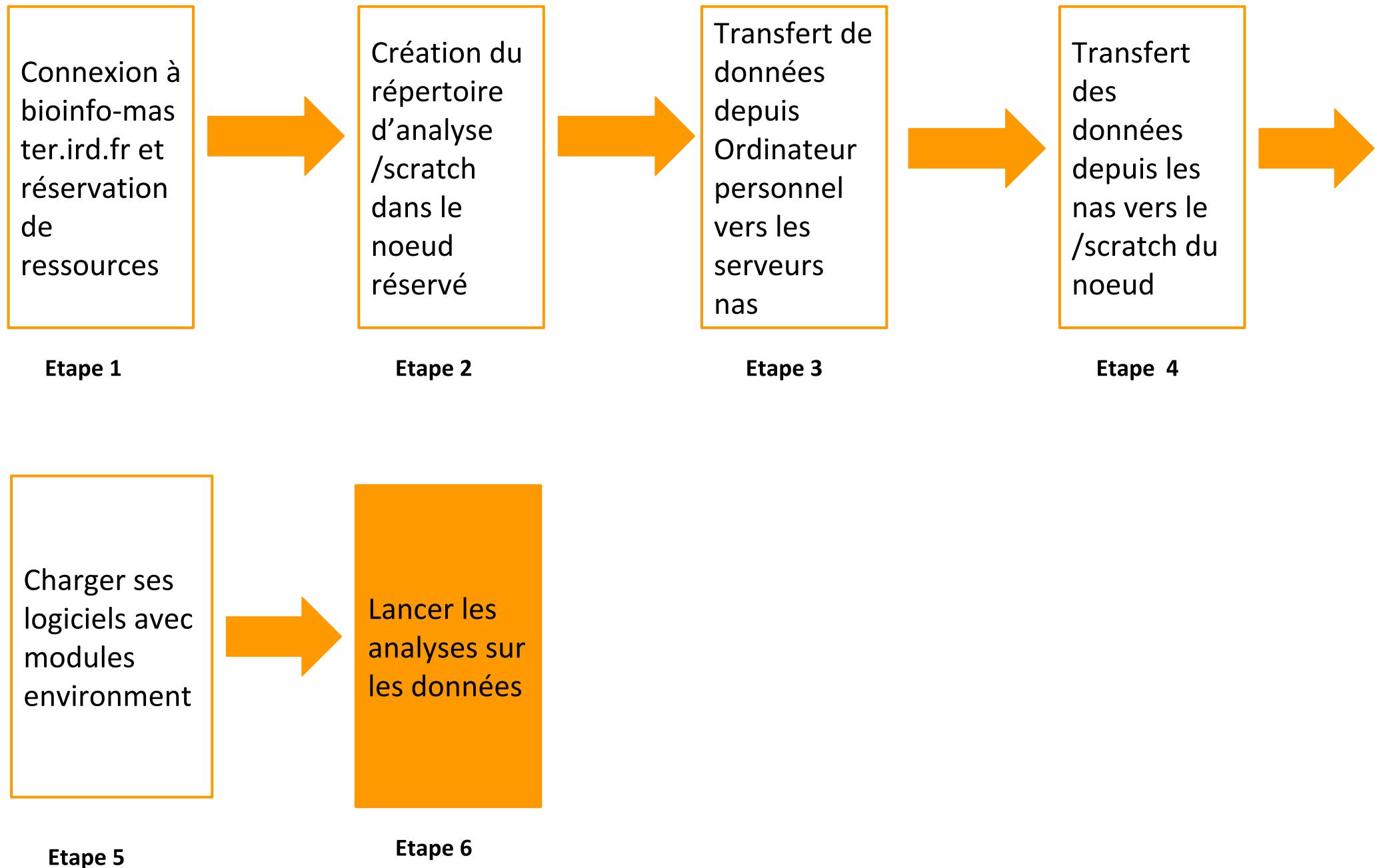
Practice

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

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 <name></code>	Donner un nom au job	<code>qsub -N tando_blast</code>
<code>qsub -q <queue></code>	Choisir une queue en particulier	<code>qsub -q highmem.q</code>
<code>qsub -l hostname=<nodeX></code>	Choisir un noeud en particulier	<code>qsub -l hostname=node10</code>
<code>qsub -pe <ompi X></code>	Lancer un job avec plusieurs coeurs	<code>qsub -pe ompi 4</code>
<code>qsub -M <emailaddress></code>	Envoyer un mail	<code>qsub -M ndomassi.tando@ird.fr</code>
<code>qsub -m <eab></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
```

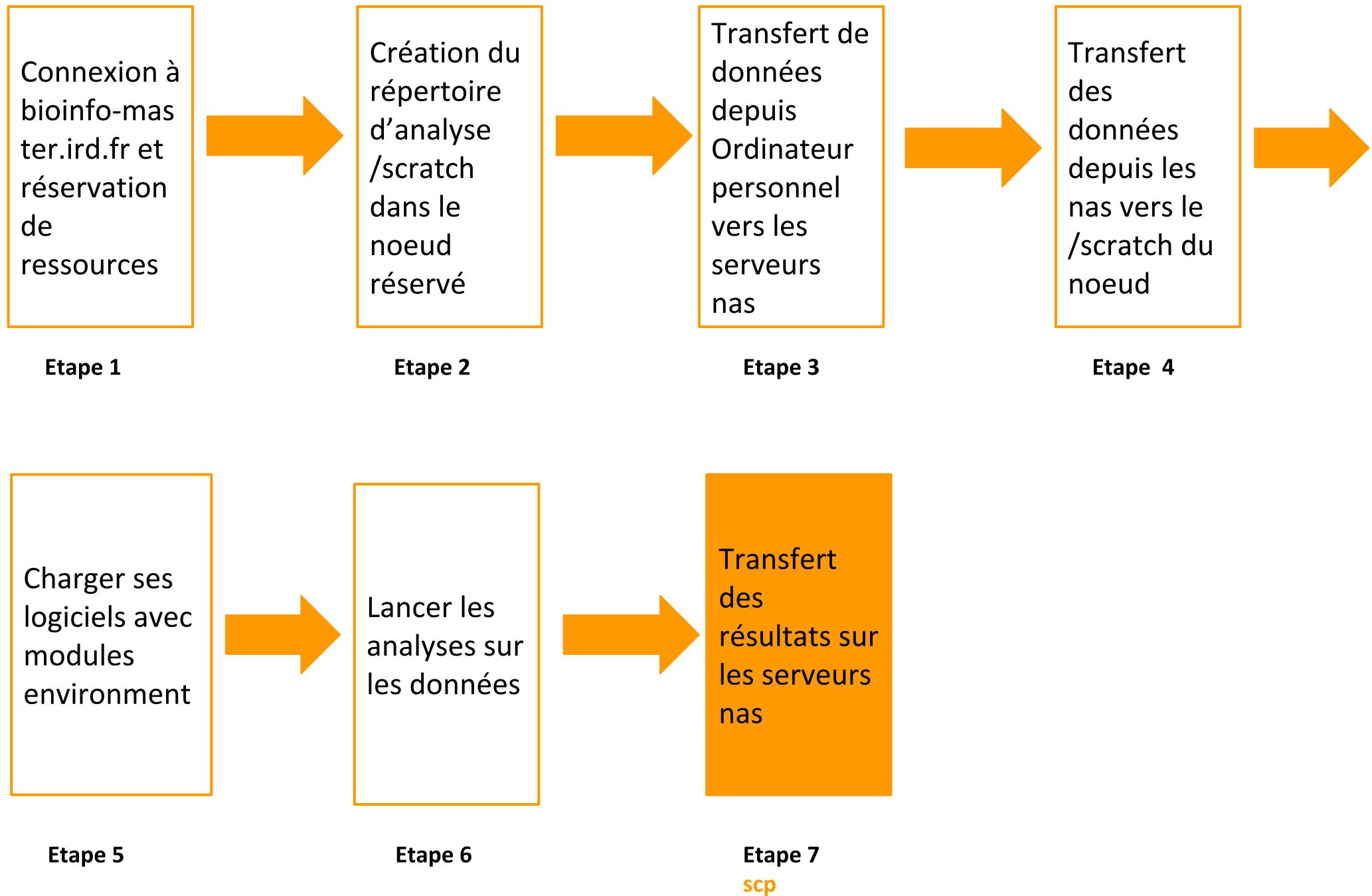
- Syntaxe si la source est distante :

```
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

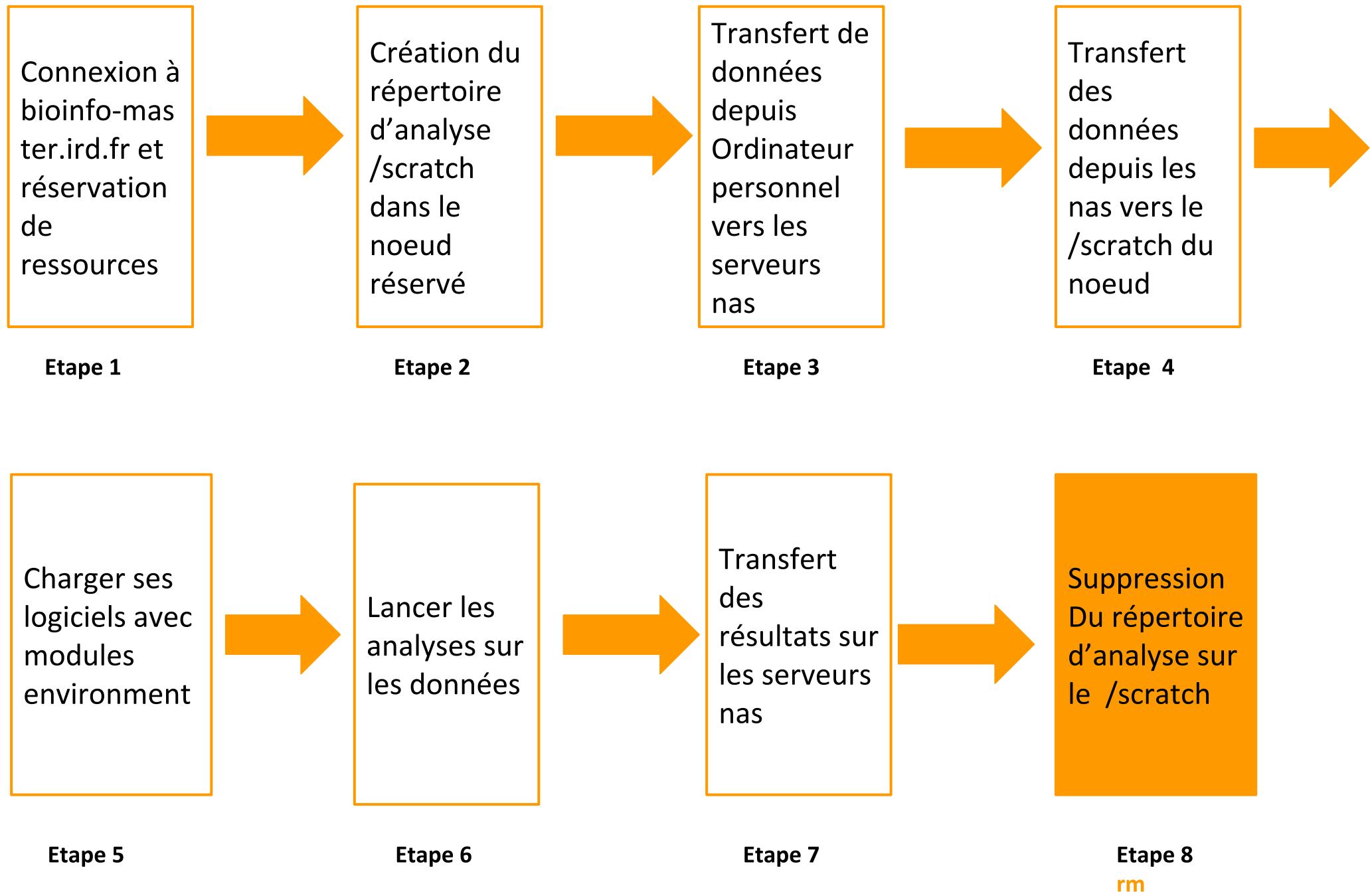
Aller sur le Practice7 du github

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
- Lancer des jobs utilisant jusqu'à 24 coeurs
- 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 <name></code>	Donner un nom au job	<code>qsub -N tando_blast</code>
<code>qsub -q <queue></code>	Choisir une queue en particulier	<code>qsub -q highmem.q</code>
<code>qsub -l hostname=<nodeX></code>	Choisir un noeud en particulier	<code>qsub -l hostname=node10</code>
<code>qsub -pe <ompi X></code>	Lancer avec plusieurs coeurs	<code>qsub -pe ompi 4</code>
<code>qsub -M <emailaddress></code>	Envoyer un mail	<code>qsub -M ndomassi.tando@ird.fr</code>
<code>qsub -m <eab></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

Enquête de satisfaction

Merci de compléter l'enquête à cette adresse:

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

Si vous utilisez les ressources du plateau i-Trop.

Merci de nous citer avec:

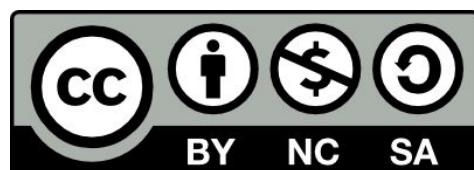
“The authors acknowledge the IRD itrop HPC (South Green Platform) at IRD montpellier

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/>