



# Initiation HPC cluster

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

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





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



Ndomassi TANDO, IE  
Administrateur systeme  
100%  
Animateur plateau



Aurore COMTE, IE  
Bioinformaticienne  
20%



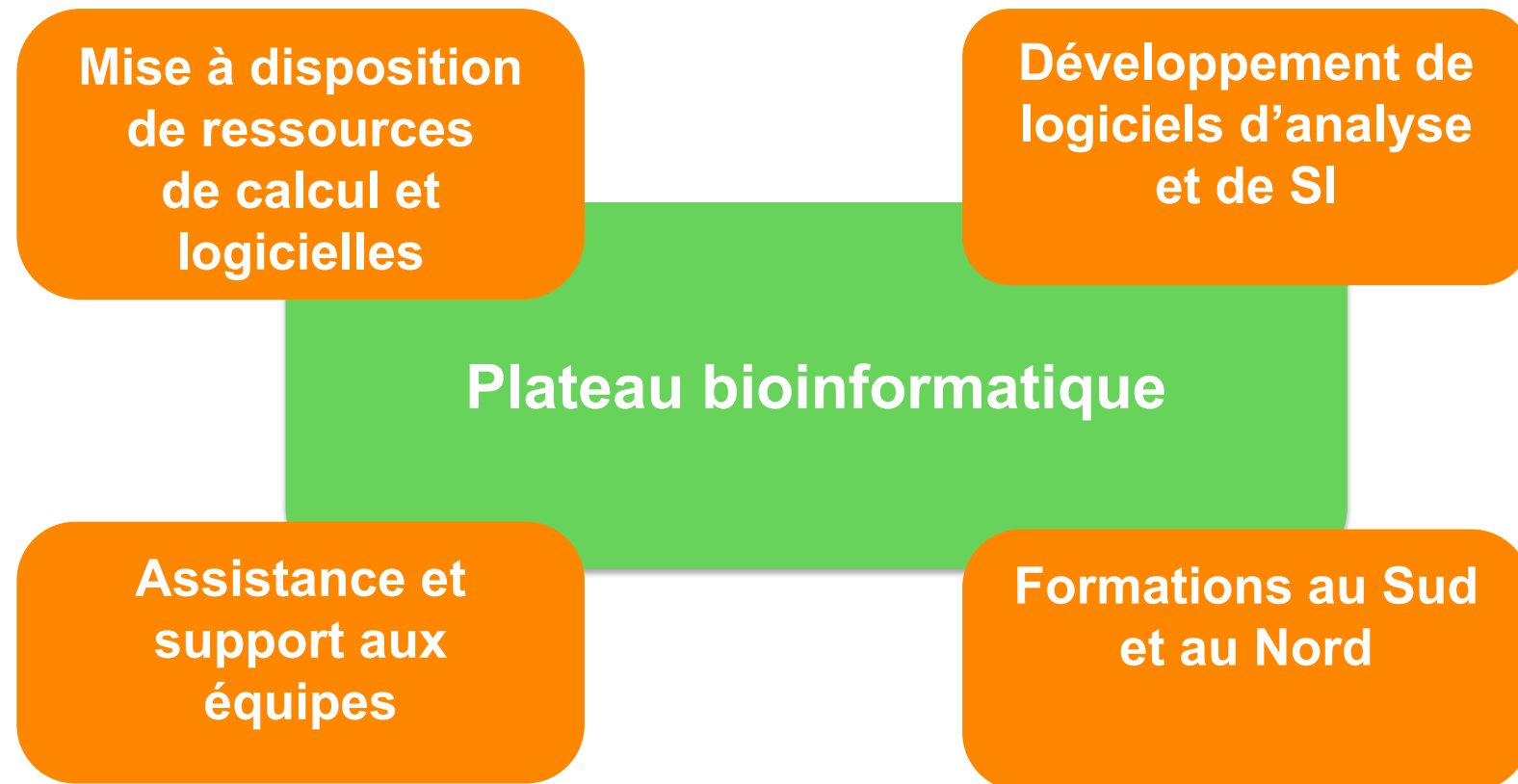
Valérie NOEL, TCS  
Bioinformaticienne  
25%



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

Christine TRANCHANT-DUBREUIL, IE  
Bioinformaticienne  
20%

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



# ARCHITECTURE

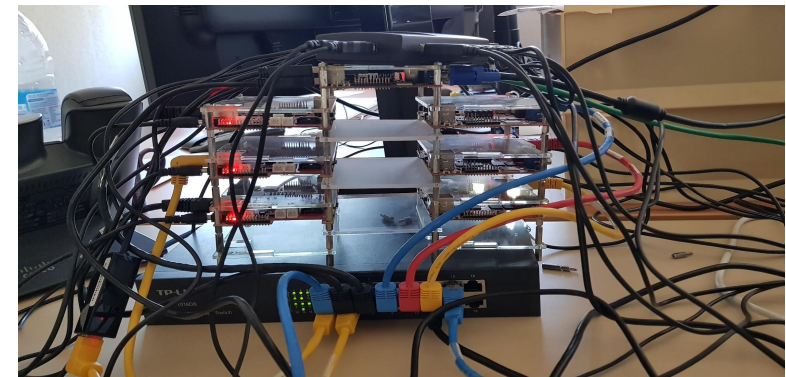
- une unité logique de plusieurs serveurs
- une unique machine puissante
- une puissance de calcul élevée
- Une plus grande capacité de stockage
- Une fiabilité supérieure
- Une plus grande disponibilité des ressources

- 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**



**master.univ-ouaga.bf**

Rôle :

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

```
ssh login@master.univ-ouaga.bf
```

- **1 Noeud Maître**



**master.univ-ouaga.bf**

Rôle :

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

```
ssh login@master.univ-ouaga.bf
```

- **1 Noeud de Calcul**



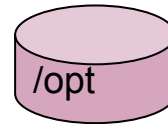
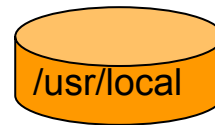
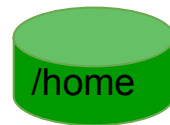
**node0**

Rôle :

- Utilisé par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessible depuis Internet
- node0
- Connexion depuis master

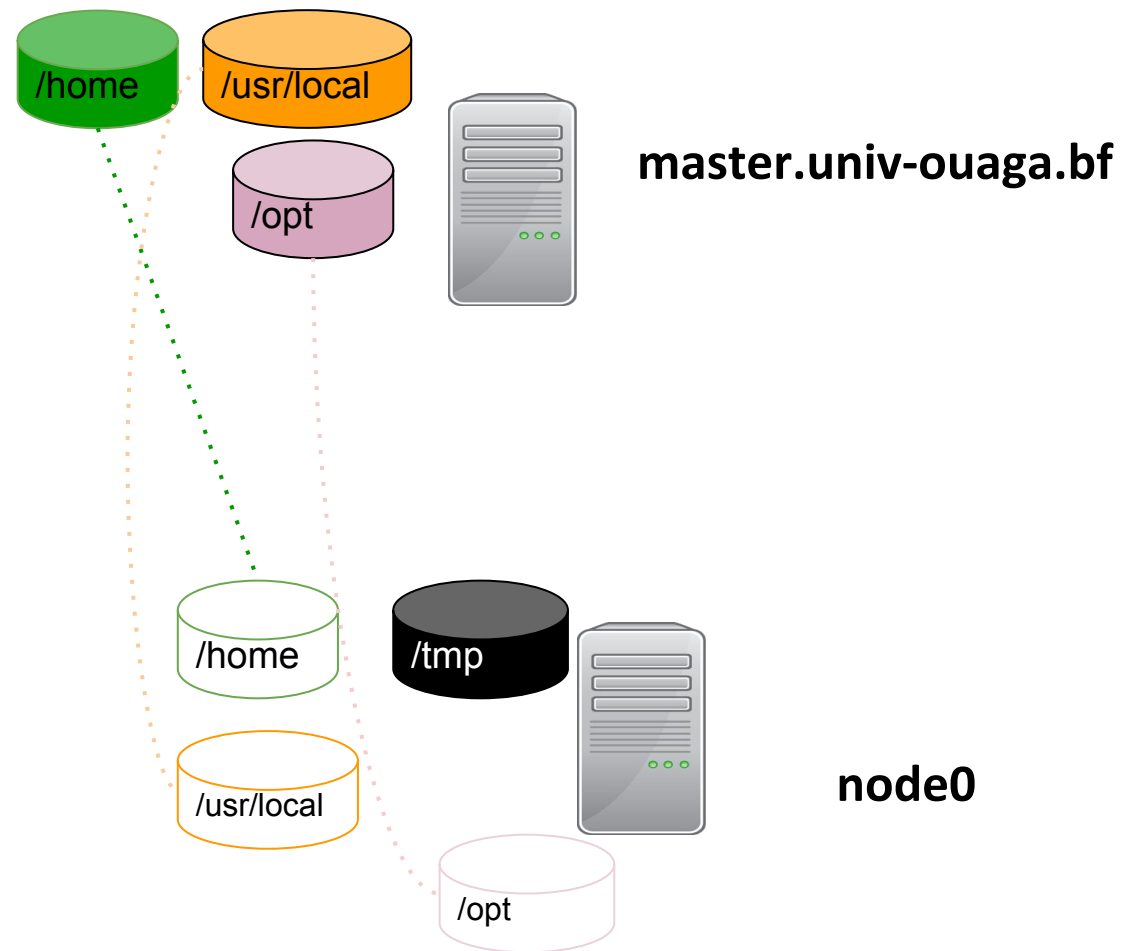
```
srun --time=60:00 node0
```

**Partitions sur la  
machine master**



**master.univ-ouaga.bf**

**Liens virtuels** vers les  
partitions de node0



Connexion à  
master.oua  
ga-univ.bf  
et  
réservation  
de  
ressources



**Etape 1**  
salloc,srun  
ou sbatch



# Practice

Etape 1: Connexion, sinfo

1

*Aller sur le [Exercice 1](#) du github*

| partition | noeud | Caractéristiques<br>RAM noeuds | Caractéristiques<br>coeurs noeuds | Caractéristique<br>partition |
|-----------|-------|--------------------------------|-----------------------------------|------------------------------|
| main      | node0 | 256 Go                         | 28 coeurs                         | Temps infini                 |
| short     | node0 | 256 Go                         | 28 coeurs                         | Limitée à 1 jour             |



Connexion à  
master et  
réservation  
de  
ressources



Création du  
répertoire  
d'analyse  
/tmp sur le  
noeud  
réservé

**Etape 1**

**Etape 2**



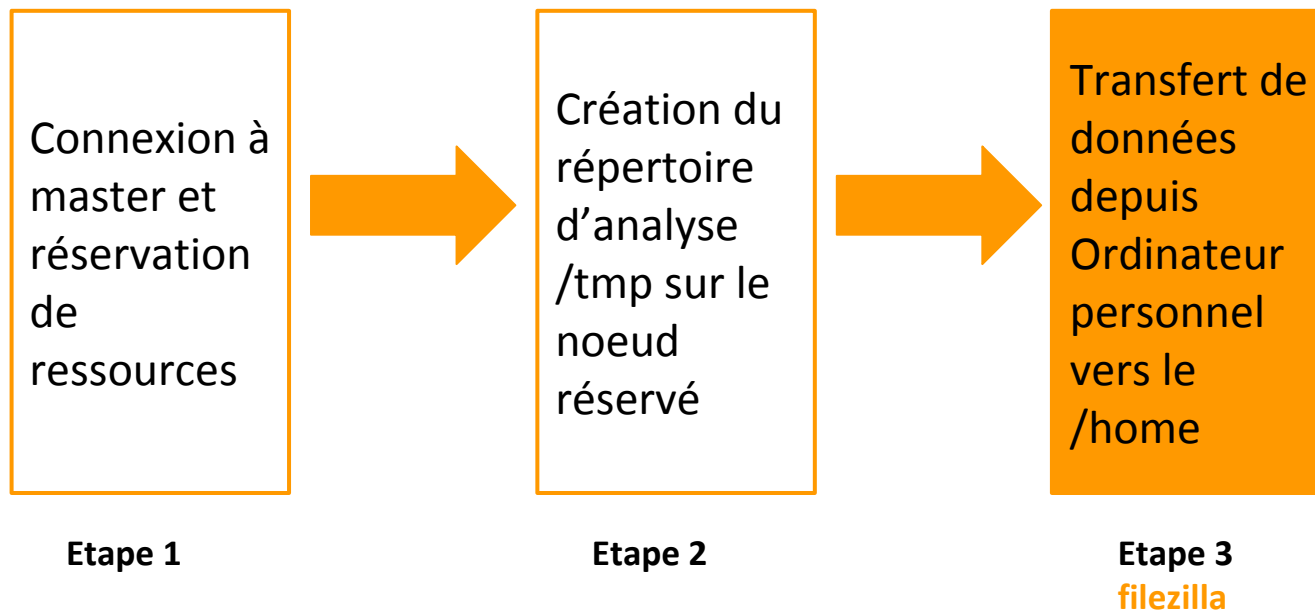
# Practice

Etape 2: srun, partition

2

*Aller sur l' [Exercice2](#) du github*

# Etapes d'une analyse sur le cluster



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

# Transferts de données sur le cluster en temps normal

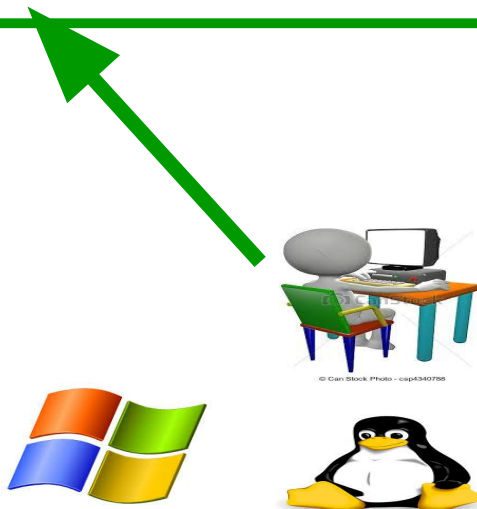
/home ou /opt



**master.univ-ouaga.bf**

Hostname :  
master.univ-ouaga.bf  
Login : cluster account

Password : cluster  
password  
Port : 22



# Transferts de données sur le cluster pour le tp

/home ou /opt

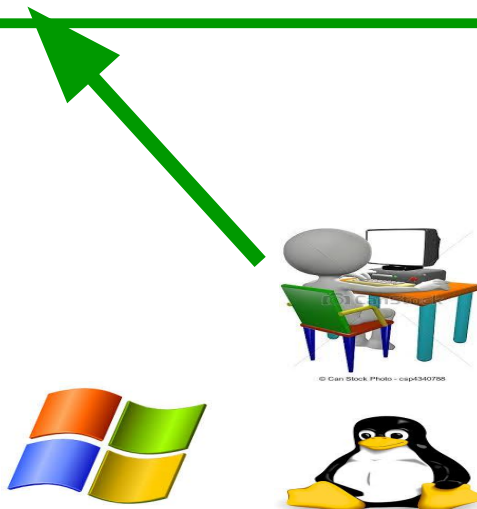


**192.168.4.102**

Hostname :  
192.168.4.102

Login : cluster  
account

Password : cluster  
password  
Port : 22





# Practice

Etape3: filezilla

3

*Aller sur l' [Exercice3](#) du github*

# 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 le  
/home vers  
le /tmp du  
noeud

**Etape 4**  
**scp**

- 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 master:/home/formationX/repertoire /tmp/formationX/`





# Practice

Etape4: scp vers noeuds

4

*Aller sur l' [Exercice4](#) du github*

- Permet de choisir la version du logiciel que l'on veut utiliser
- 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 le  
/home vers  
le /tmp du  
noeud

**Etape 4**

Charger ses  
logiciels avec  
module  
environment

**Etape 5**  
**module**



# Practice

Etape5: module environment

5

*Aller sur l' [Exercice5](#) du github*

- 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 srun
- Lance la commande sur un noeud
- On utilise la commande:

```
$~ srun "commande"
```

Avec *commande*: la commande à lancer

# 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**





# Practice

Etape6: lancer l'analyse

6

*Aller sur l' [Exercice6](#) 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-master.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources

**Etape 1**

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

**Etape 2**

Transfert de  
données  
depuis  
Ordinateur  
personnel  
vers le  
serveur

**Etape 3**

Transfert  
des  
données  
depuis le  
/home 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  
la partition  
/home

**Etape 7**  
scp



# Practice

Etape7: Récupérer les résultats

7

*Aller sur l'[Exercice7](#) du github*

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

```
cd /tmp  
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 l'[Exercice8](#) du github*

# 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:

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

Avec `script.sh` : le nom du script

| Options  | Description                         | Exemple   |
|--|-------------------------------------|---|
| <code>--job-name=[name]</code>                 | Donner un nom au job                | <code>sbatch --job-name=tando_blast</code>                |
| <code>-p <b>partition</b></code>               | Choisir une parttion en particulier | <code>sbatch -p main job.sh</code>                        |
| <code>--odelist=&lt;nodeX&gt;</code>           | Choisir un noeud en particulier     | <code>srun --odelist=node0</code>                         |
| <code>-N &lt;nombre de coeurs&gt;</code>       | Lancer avec plusieurs coeurs        | <code>Srun -N 2</code>                                    |
| <code>--mail-user=&lt;adresse_email&gt;</code> | Envoyer un mail                     | <code>sbatch<br/>--mail-user=ndomassi.tando@ird.fr</code> |

Voir plus d'options disponibles ici:

[Options de base avec Slurm](#) dans la rubrique Les principales options disponibles pour lancer une analyse sous Slurm:

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
#####
```

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 l' [Exercice9](#) du github*

# 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/>