



Initiation HPC cluster

www.southgreen.fr

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





Emmanuelle Beyne
20% ETP

Aurore COMTE
20% ETP

Bruno GRANOUILAC
50% ETP

Valérie NOEL
25% ETP

Julie ORJUELA-BOUNIOU
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/>



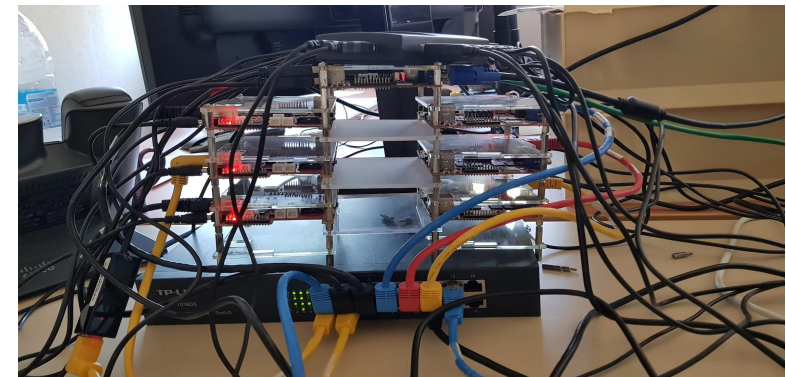
ARCHITECTURE

- 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



- 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**



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**



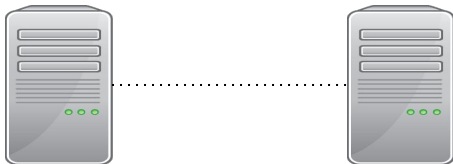
bioinfo-master.ird.fr

Rôle :

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

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

- **27 Noeuds de Calcul**



nodeX
X : 0..26

Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet
- node0 à node26

● 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
```

● 27 Noeuds de Calcul



nodeX
X : 0..26

Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet
- node0 à node26



Noeud interactif (node6)

- Accessible de l'extérieur **bioinfo-inter.ird.fr**
- Connexion :

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



Practice

Etape 1: Connexion, srin

1

Aller sur le [Practice 1](#) du github

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



Etape 1
salloc/srun
ou sbatch

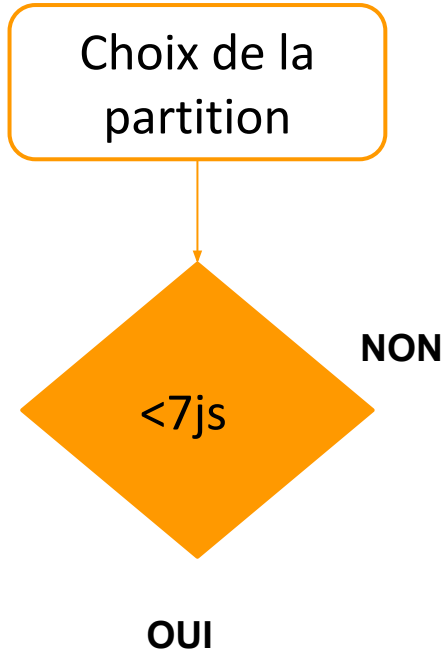
Partitions	Utilisation	Caractéristiques RAM noeuds	Caractéristiques coeurs noeuds
short	Jobs courts < 1 jour (priorité plus haute, jobs interactif)	48 à 64 Go	12 coeurs
normal	Jobs courts max 7 jours	64 Go à 96 Go	12 à 24 coeurs
r900	Jobs courts max 7 jours	32Go	16 coeurs /scratch 117Go
long	45 jours >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

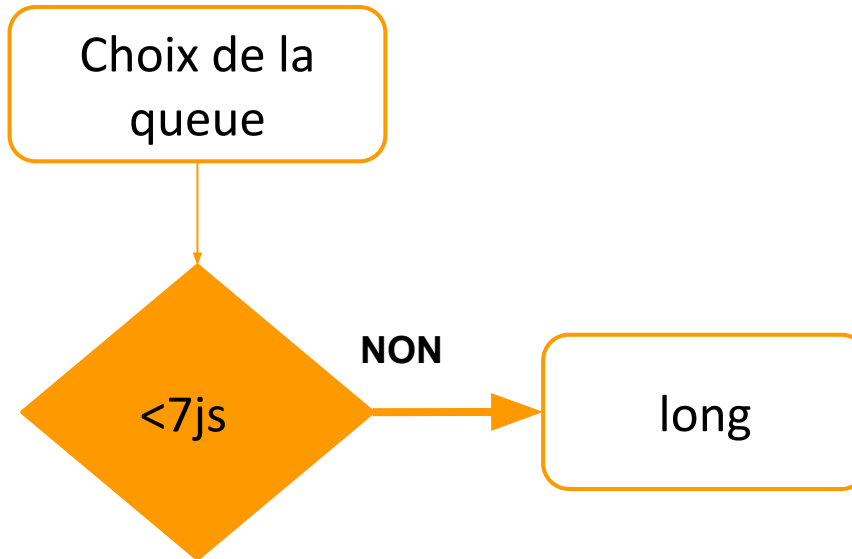
- Partition pour effectuer des travaux sur des processeurs GPUs: basecalling, MiniOn etc..
- Accès restreint au groupe gpu_account
- Demande d'accès avec argumentaire à faire sur

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

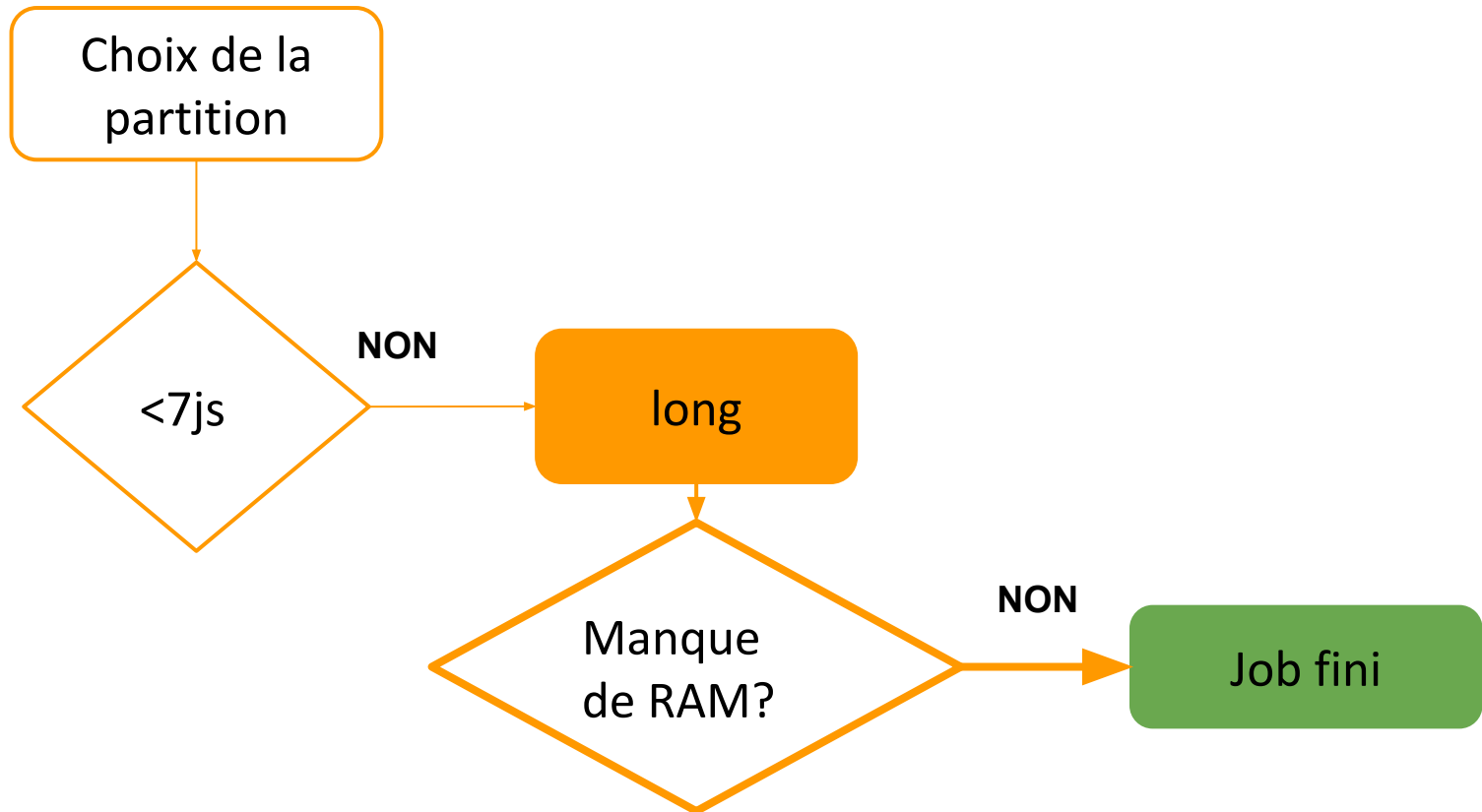
Quelle partition choisir?



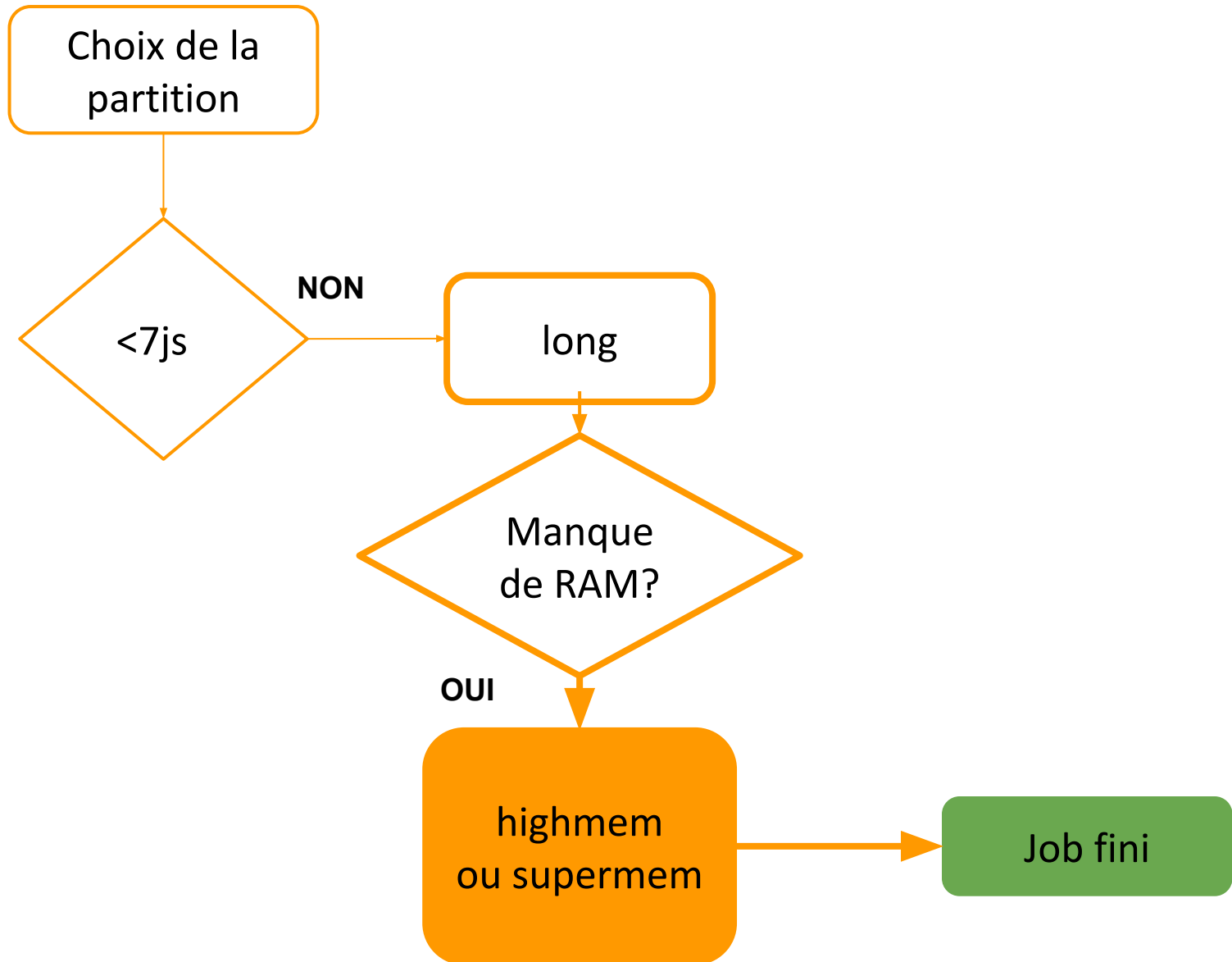
Quelle partition choisir?



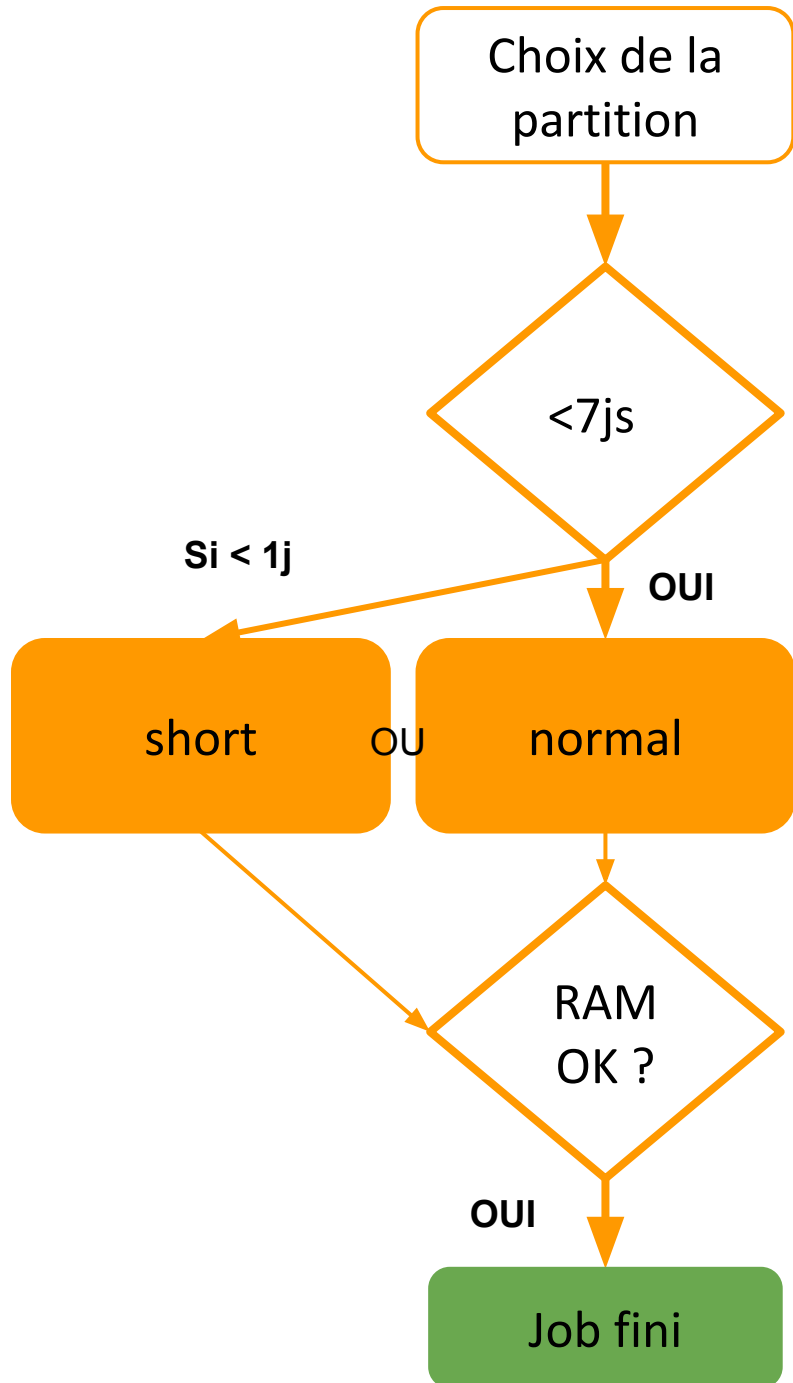
Quelle partition choisir?



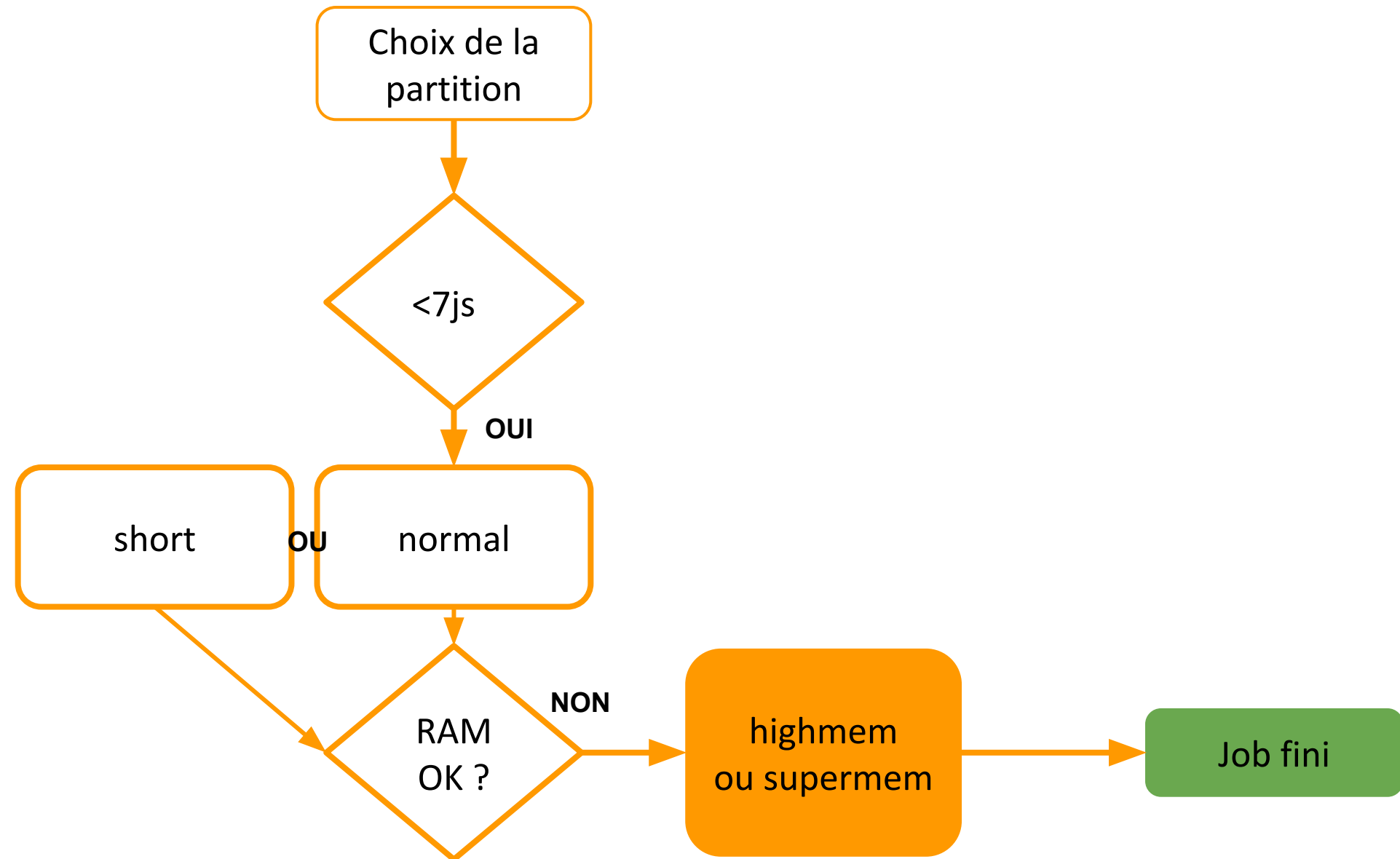
Quelle partition choisir?



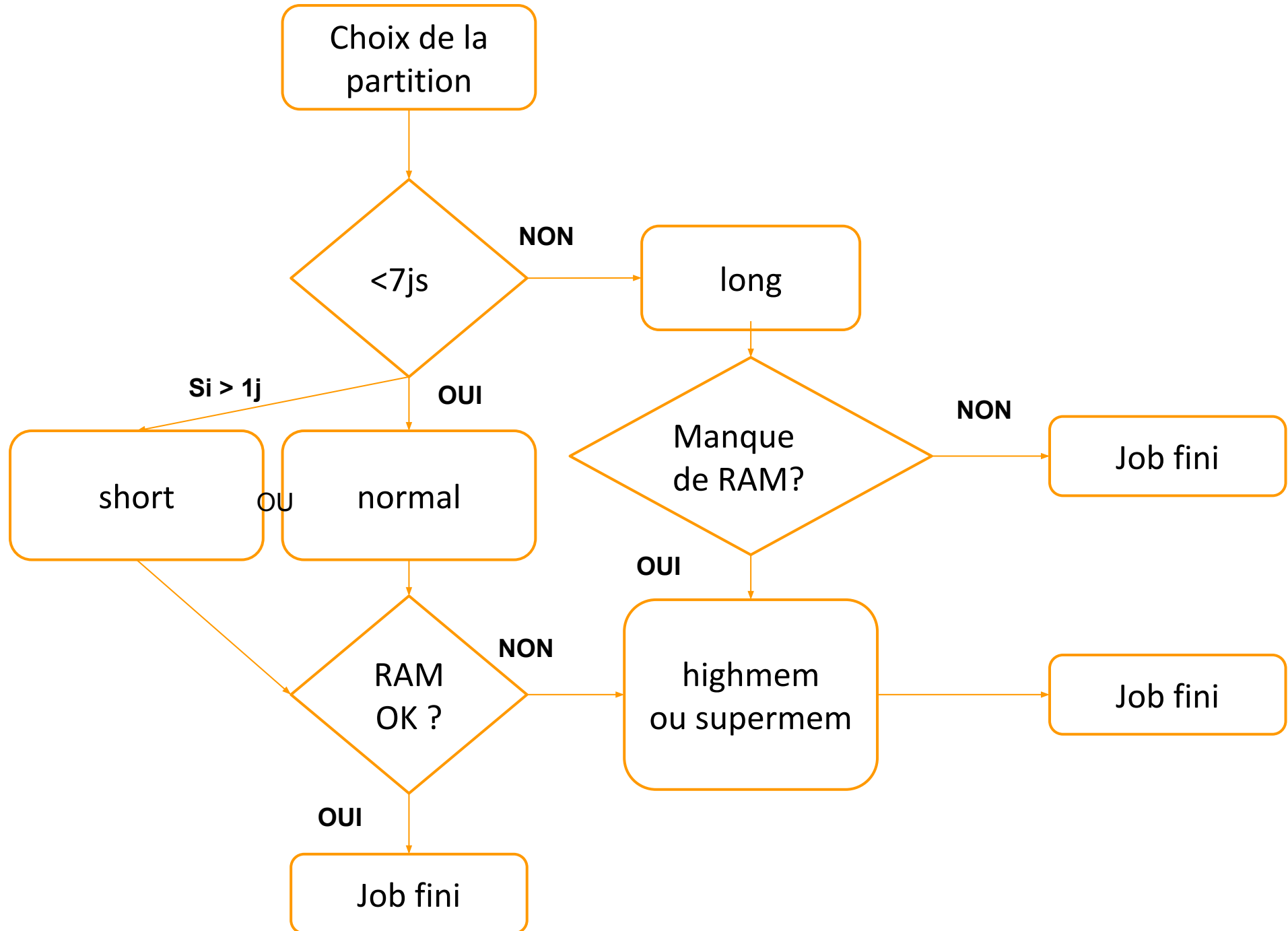
Quelle partition choisir?



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 Noeuds de Calcul



nodeX

X : 0..26



Rôle :

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

● 3 serveurs NAS



bioinfo-nas.ird.fr
(nas)

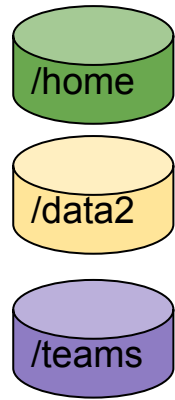
bioinfo-nas2.ird.fr
(nas2)

bioinfo-nas3.ird.fr
(nas3)

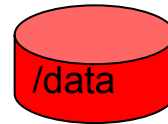
Rôle :

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

Partitions disques sur le cluster i-Trop



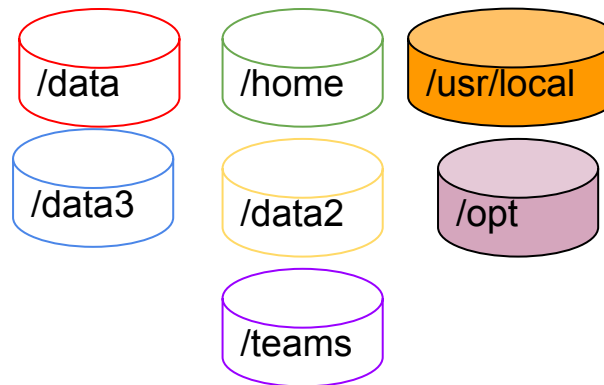
bioinfo-nas.ird.fr



bioinfo-nas2.ird.fr

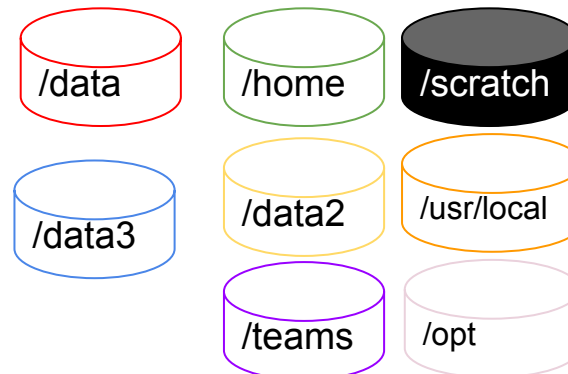


bioinfo-nas3.ird.fr



bioinfo-master.ird.fr

Liens virtuels vers les
partitions des autres
machines



27 noeuds



Connexion à
bioinfo-master.ird.fr et
réservation
de
ressources



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

Etape 1

Etape 2
mkdir



Practice

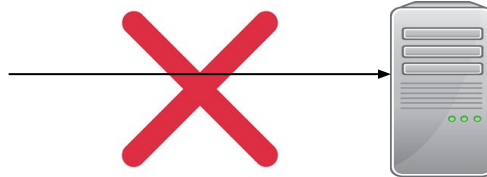
Etape 2:srun, partition

2

Aller sur le [Practice2](#) du github



Ordinateur
personnel

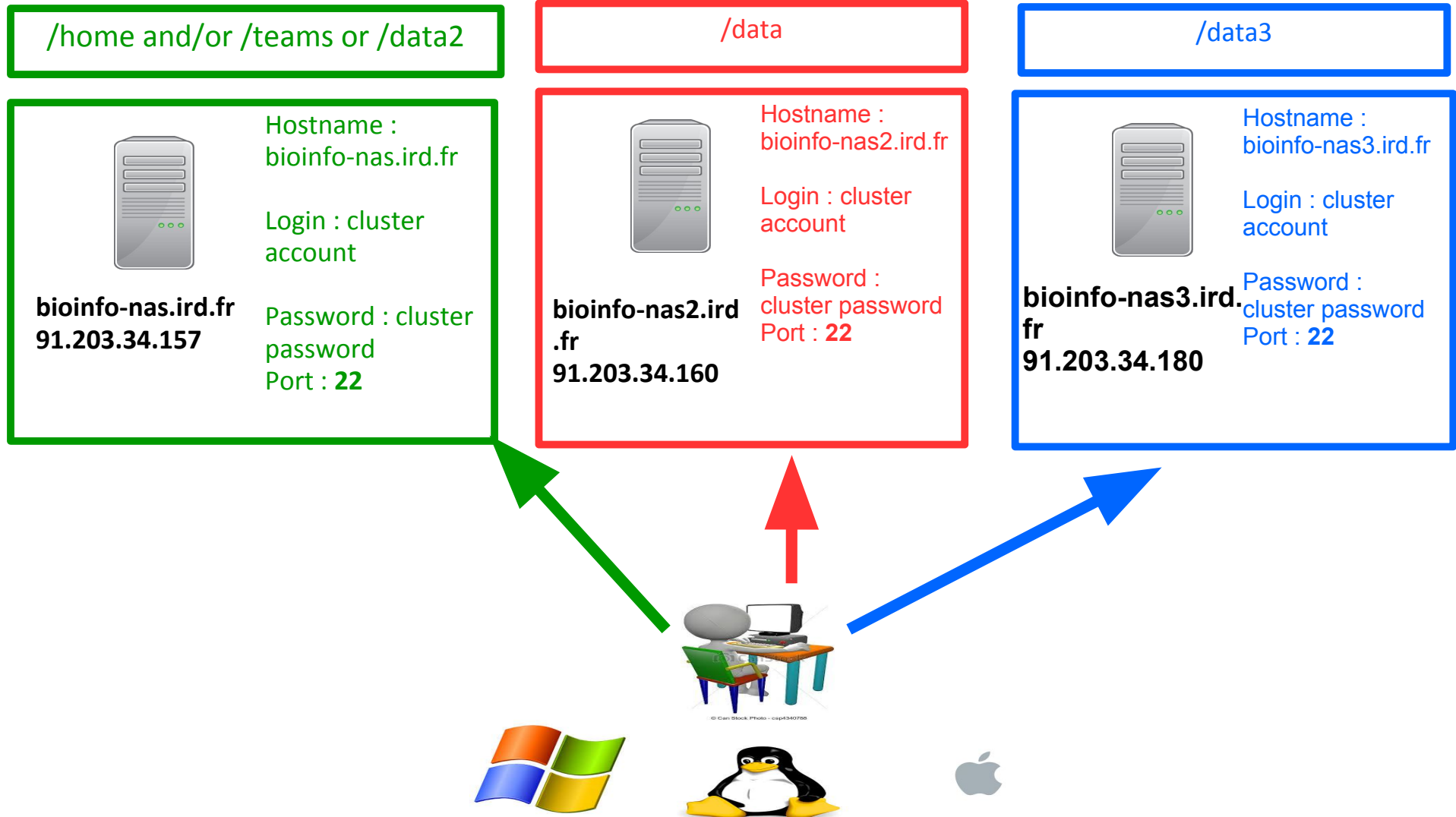


**Transfert direct
via filezilla
interdit**



**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

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
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

- 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 nas:/home/tando/repertoire /scratch/tando/`

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 les
nas vers le
/scratch du
noeud

Etape 4
scp



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

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
module



Practice

Etape5: module environment

5

Aller sur le [Practice5](#) du github

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

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

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

- 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 <options> <commande>
```

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 repertoire_local
```

- Syntaxe si la destination est distante :

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

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
scp



Practice

Etape7: Récupérer les résultats

7

Aller sur le [Practice7](#) du github

- 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

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

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 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

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

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 le [Practice9](#) du github

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 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/>