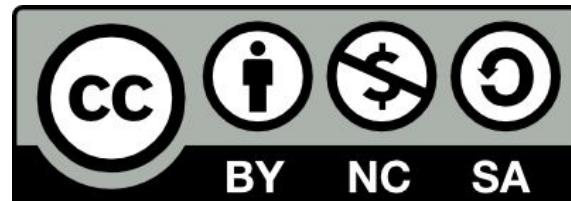


# Initiation HPC cluster

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

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





Ndomassi TANDO, IE  
Ingénieur systèmes  
Animateur plateau, RMQ

Christine TRANCHANT-  
DUBREUIL, IE  
Bioinformaticienne



Aurore COMTE, IE  
Bioinformaticienne



Julie ORJUELA-  
BOUNIOL, IE  
Bioinformaticienne



Valérie NOEL, TCS  
Bioinformaticienne



Bruno GRANOUILAC, IE  
Systèmes d'information



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](mailto: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



# 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



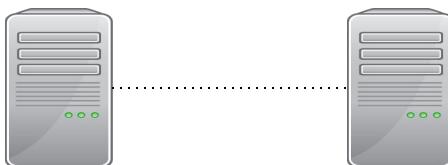
**bioinfo-master.ird.fr**

Rôle :

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

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

## ● 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



# 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**  
**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

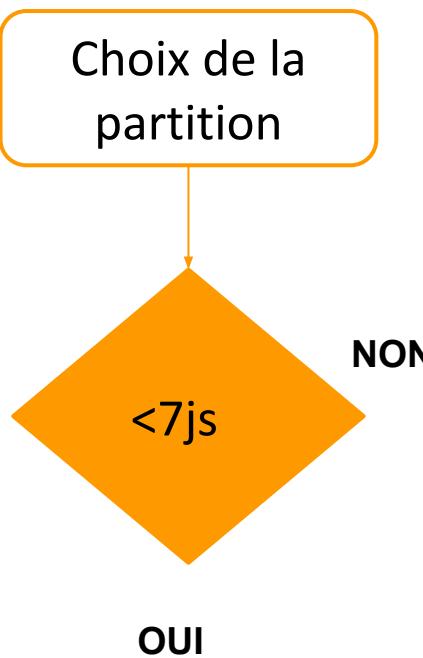
\*Demande à faire avec argumentaire

# Cas particulier : partition gpu

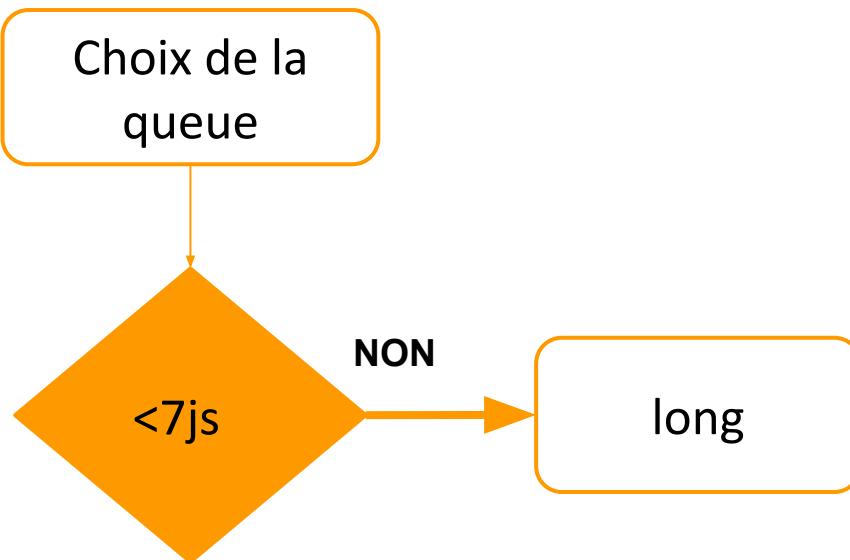
- Partition pour effectuer des travaux sur des processeurs GPUs: basecalling, MiniOn etc..
- Accès restreint au groupe gpu\_account
- Demande d'accès avec argumentaire à faire sur

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

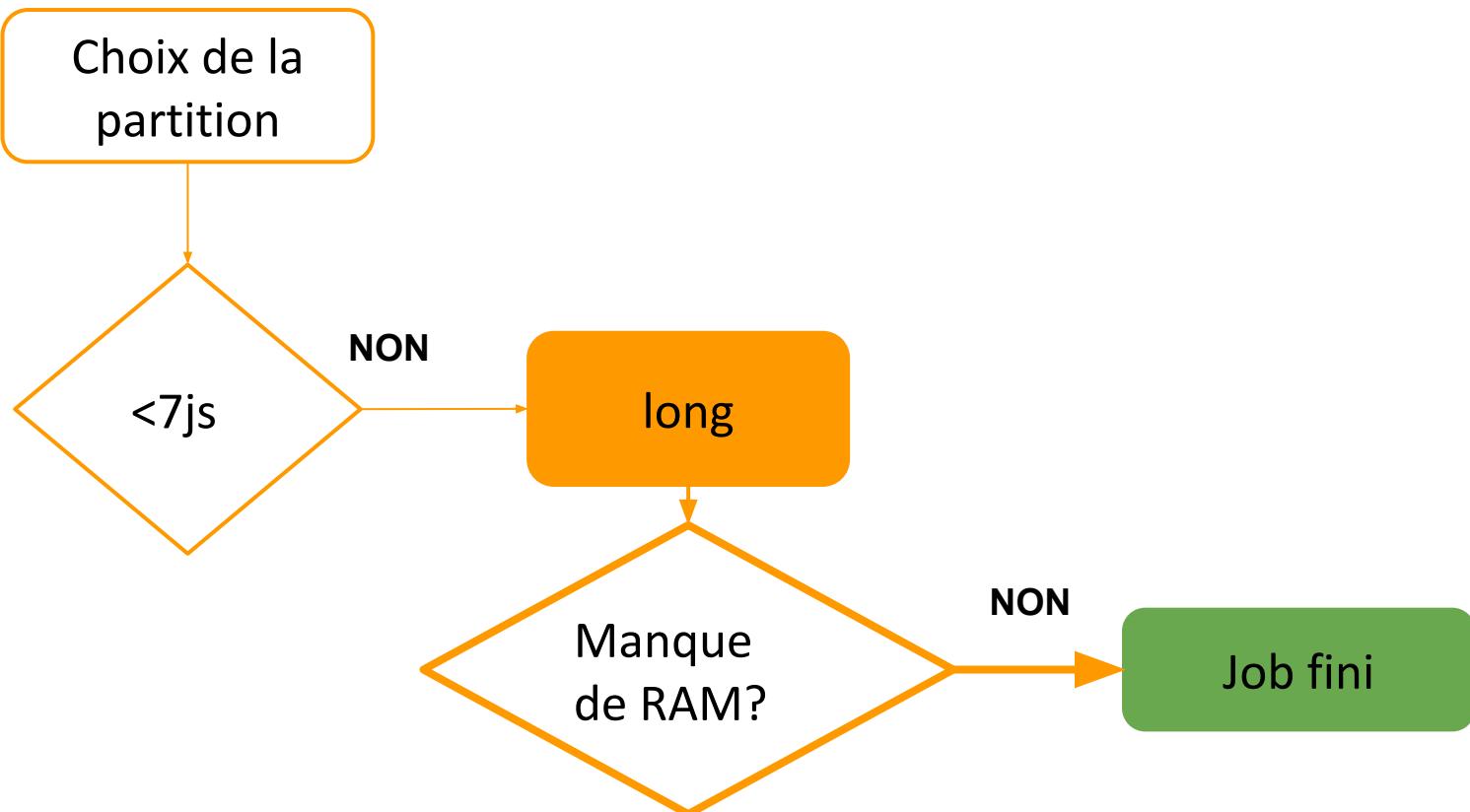
# Quelle partition choisir?



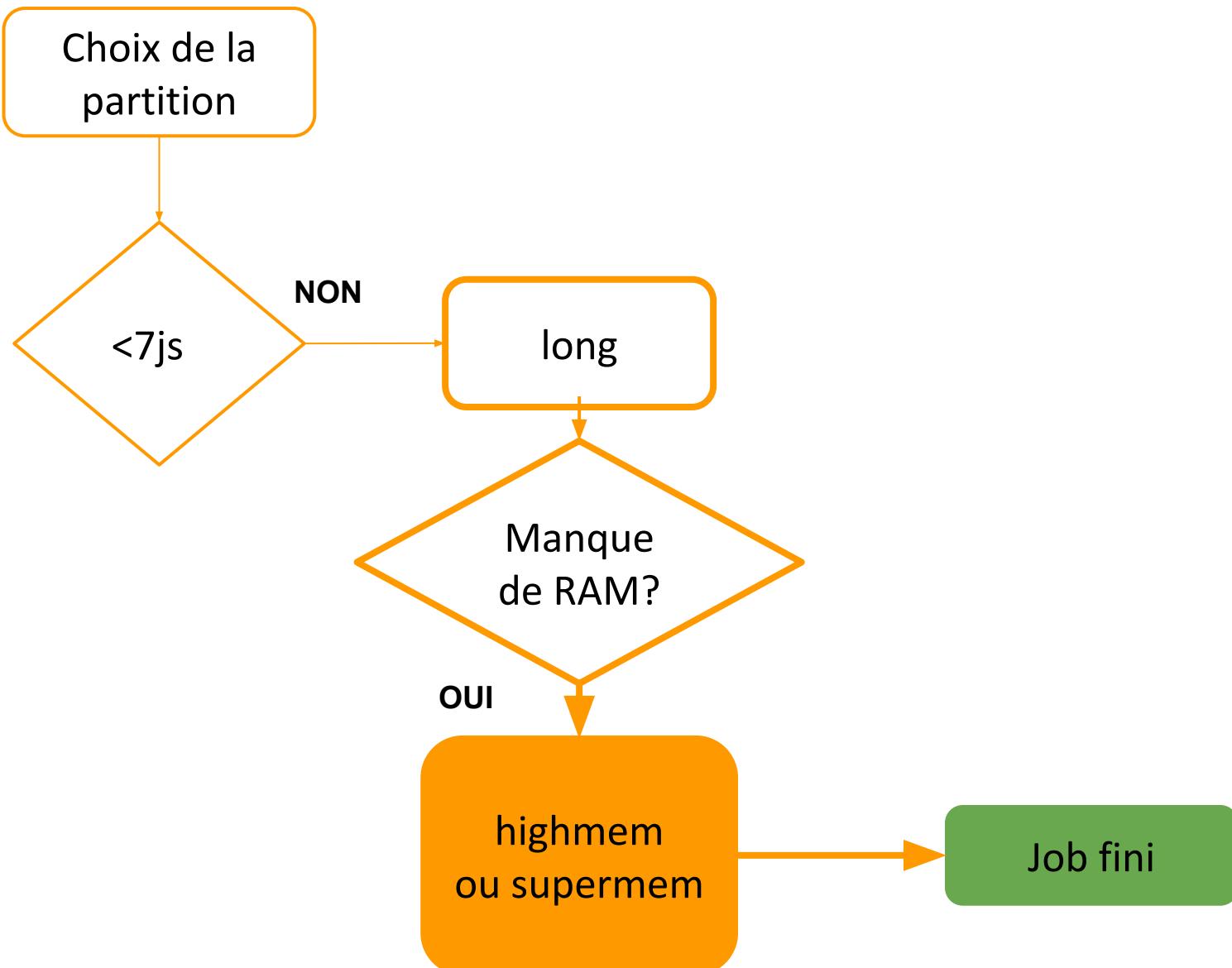
# Quelle partition choisir?



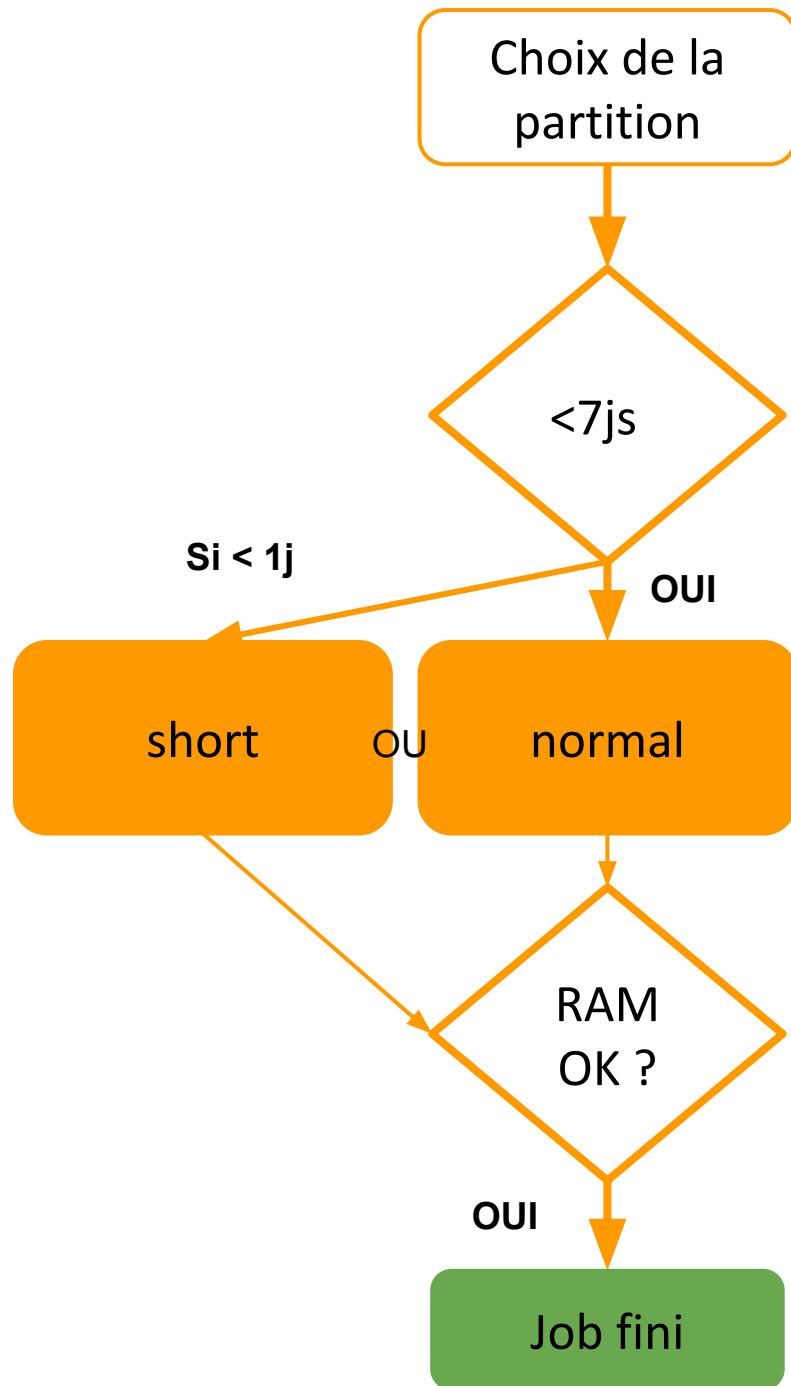
# Quelle partition choisir?



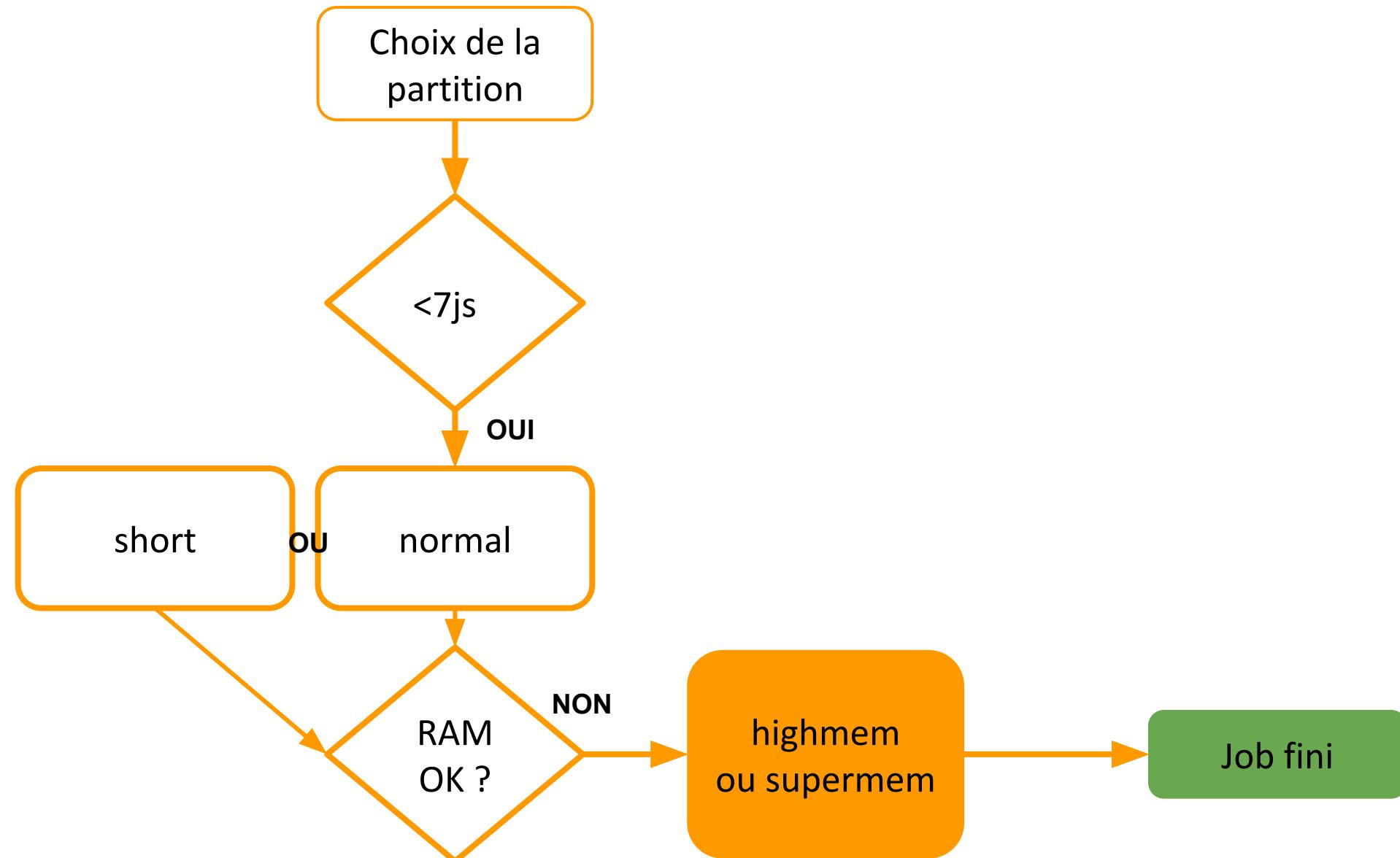
# Quelle partition choisir?



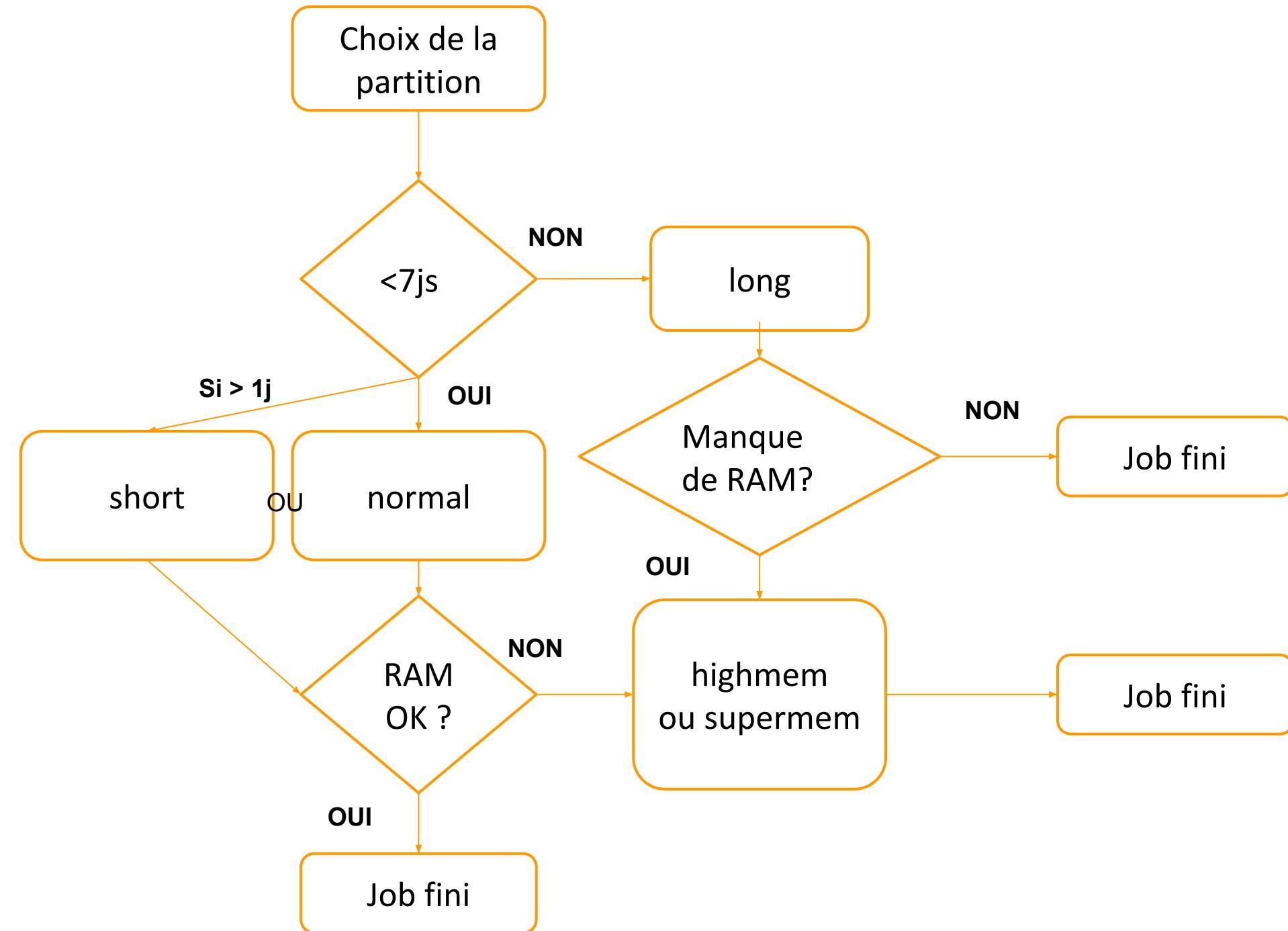
# Quelle partition choisir?



# Quelle partition choisir?



# Quelle partition choisir?



# Architecture: rôle des éléments

- **1 Noeud Maître**

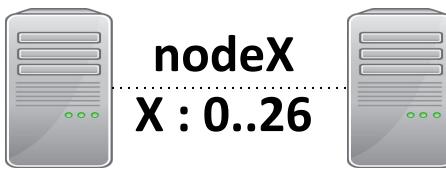


**bioinfo-master.ird.fr**

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)**

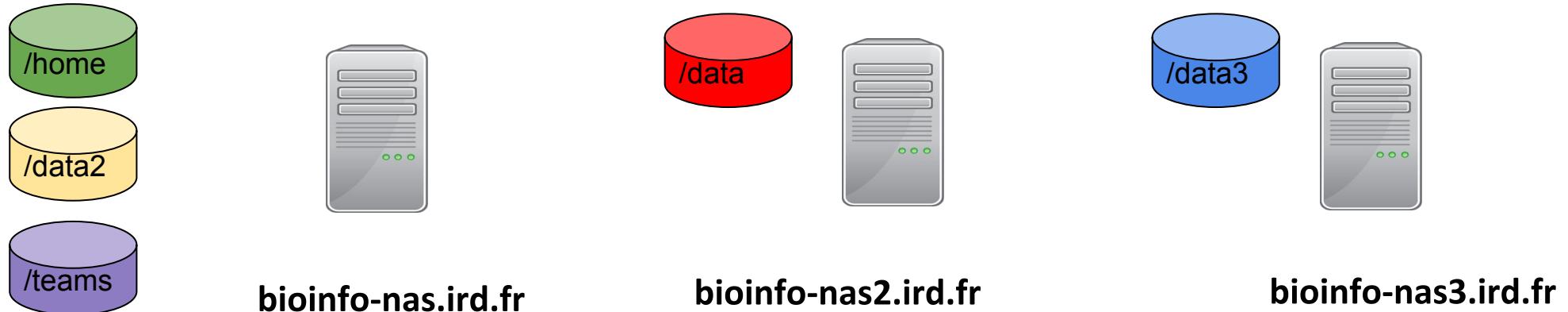
**bioinfo-nas2.ird.fr**  
**(nas2)**

**bioinfo-nas3.ird.fr**  
**(nas3)**

Rôle :

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

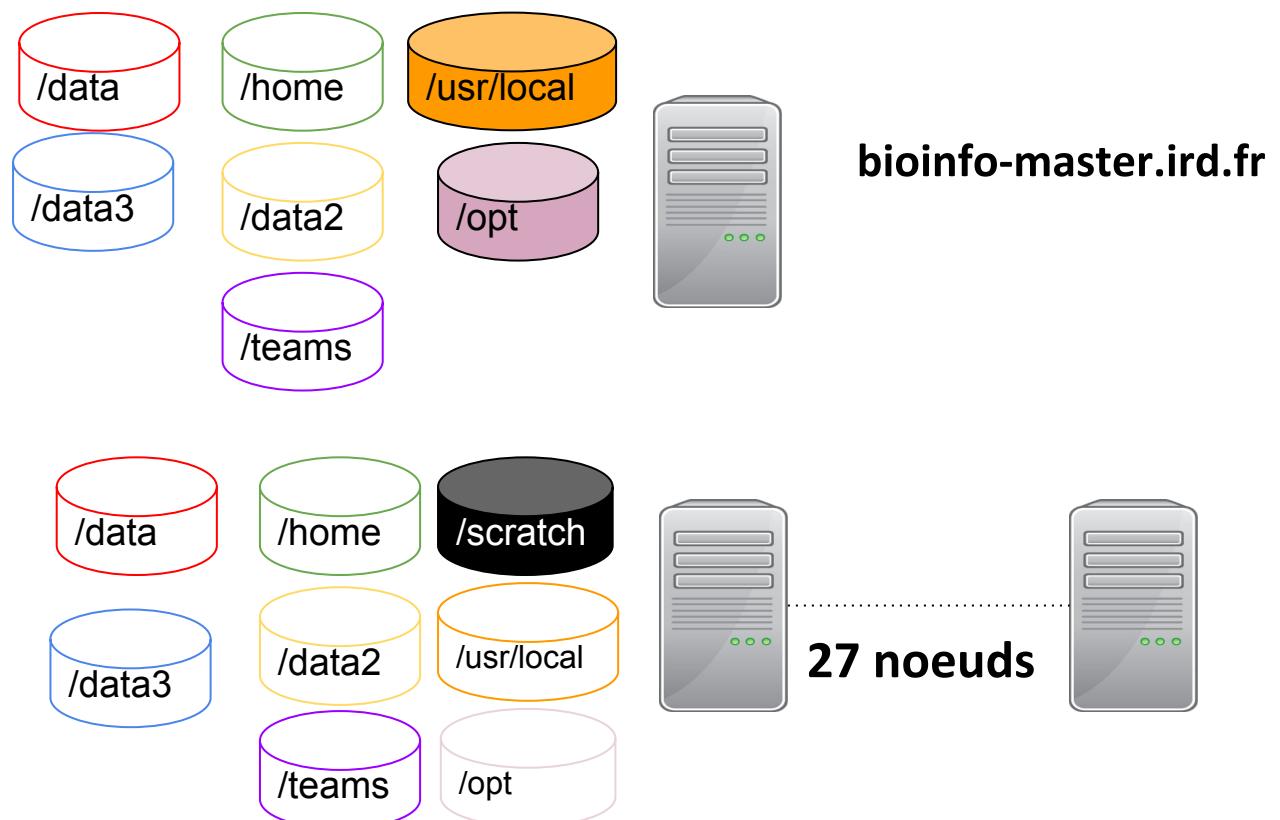
# Partitions disques sur le cluster i-Trop



## Légende:

**Disques durs locaux en cylindres pleins**

**Liens virtuels vers disques durs physiques (cylindres vides)**



# 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**

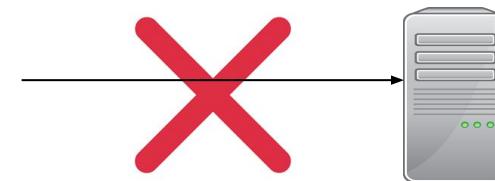
2

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

# Transferts de données sur le cluster itrop



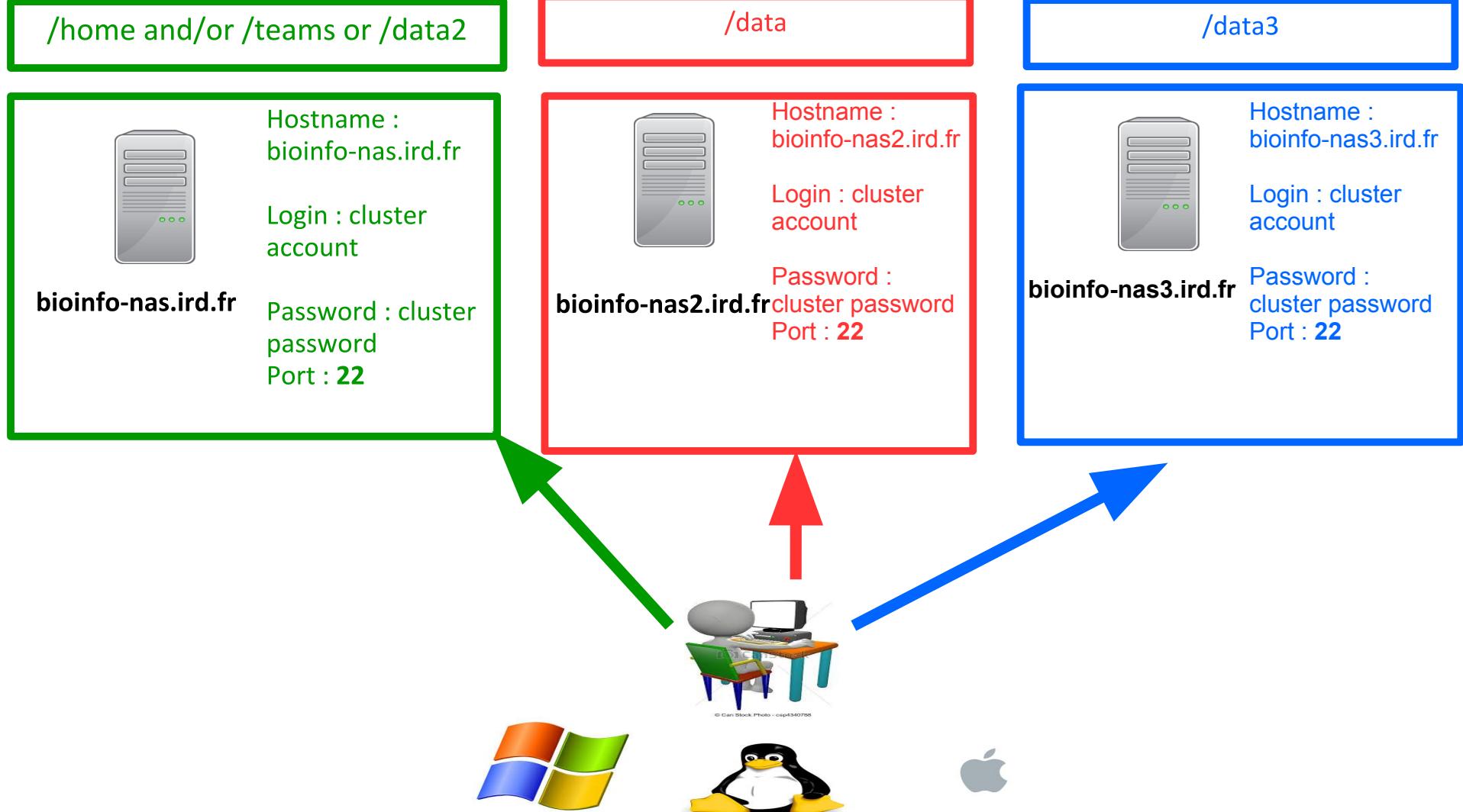
Ordinateur personnel



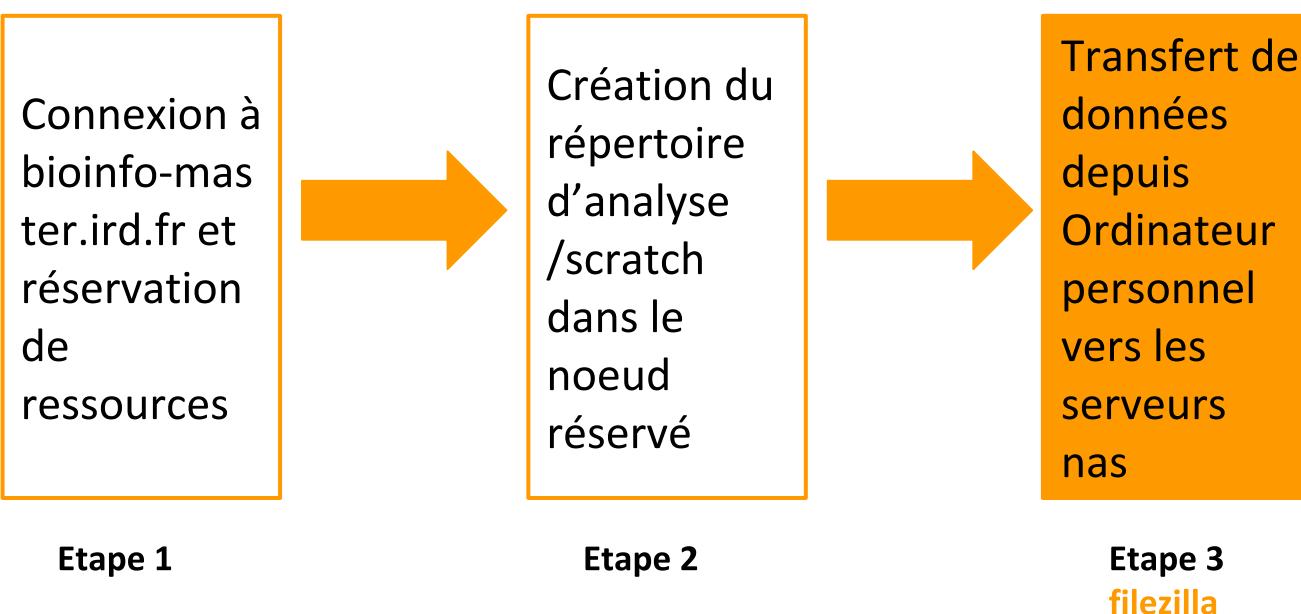
**bioinfo-master.ird.fr**

Transfert direct  
via filezilla  
interdit

# 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 :

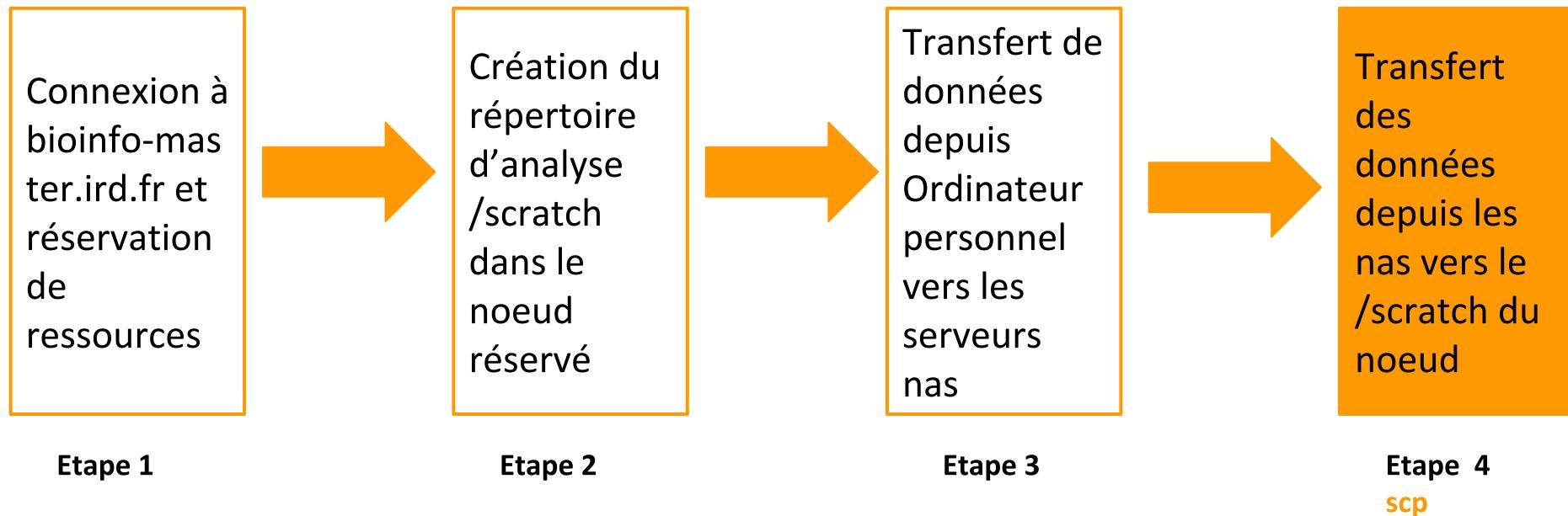
```
scp -r nom_serveur:/chemin/fichier_a_copier répertoire_local
```

- 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`

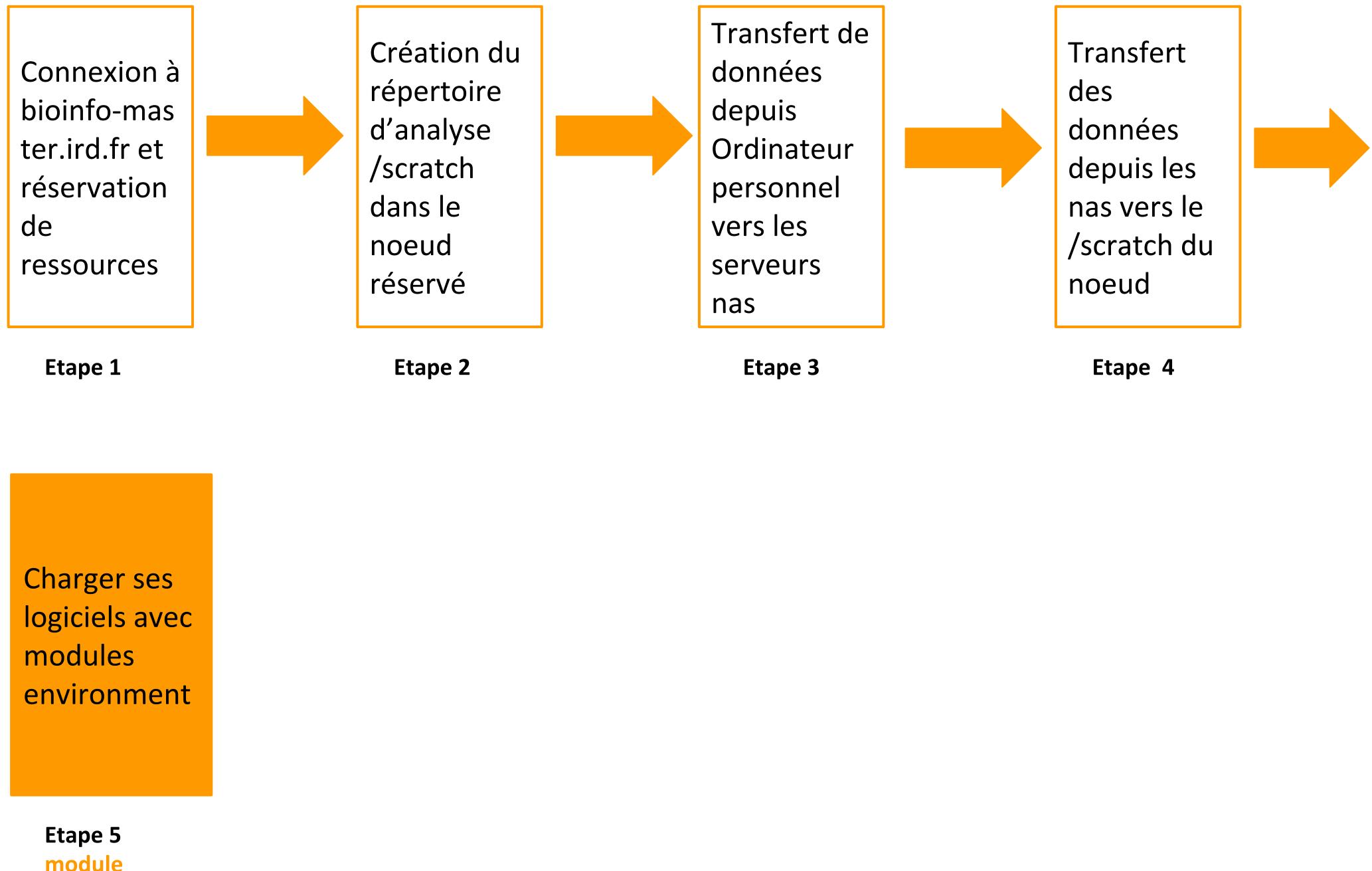
- Décharger un module :

`module unload + modulename`

- Décharger tous les modules :

`module purge`

# Etapes d'une analyse sur le cluster





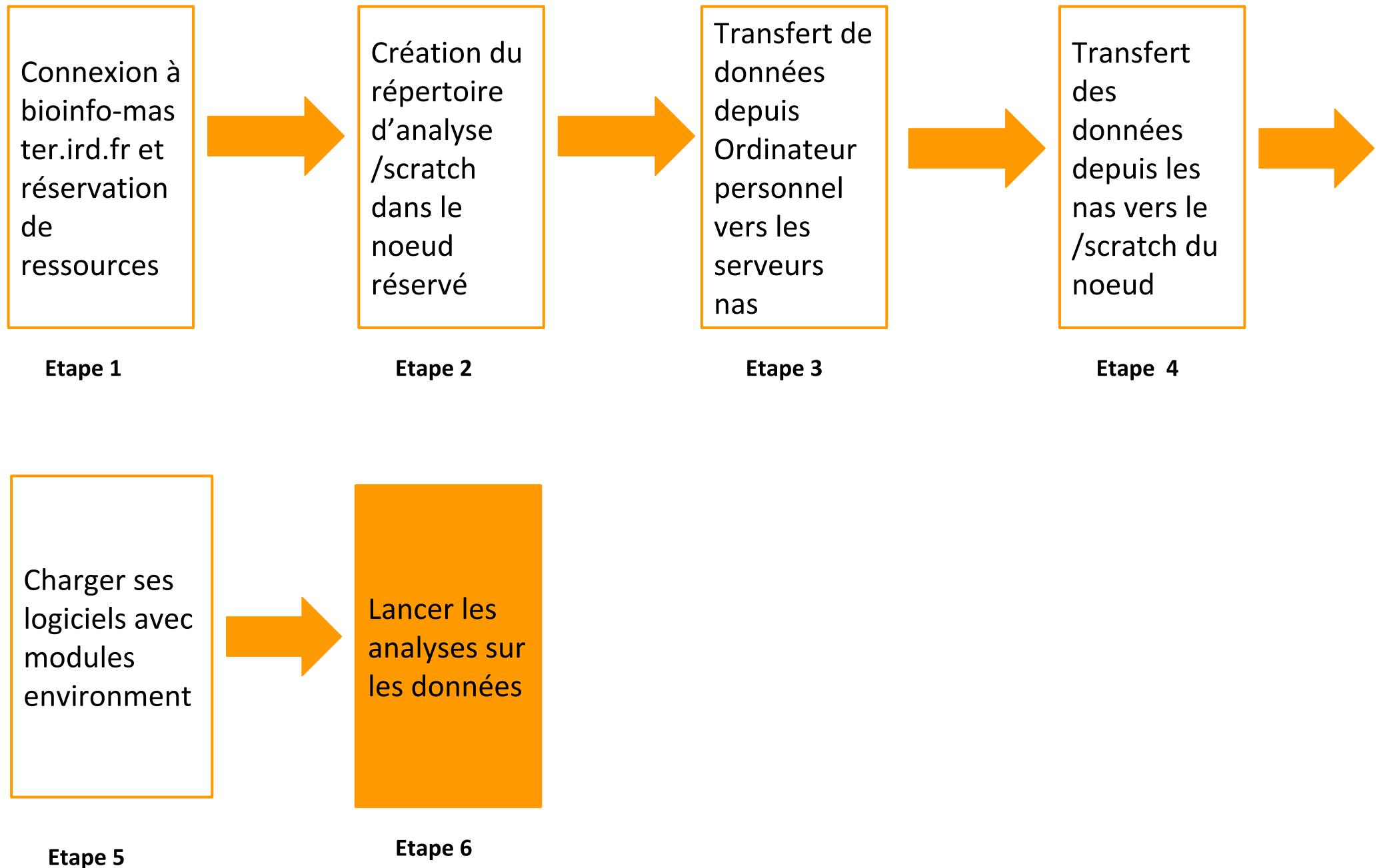
# Practice

**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



# Practice

**Etape6: lancer l'analyse**

6

*Aller sur le Practice6 du github*

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp -r source destination
```

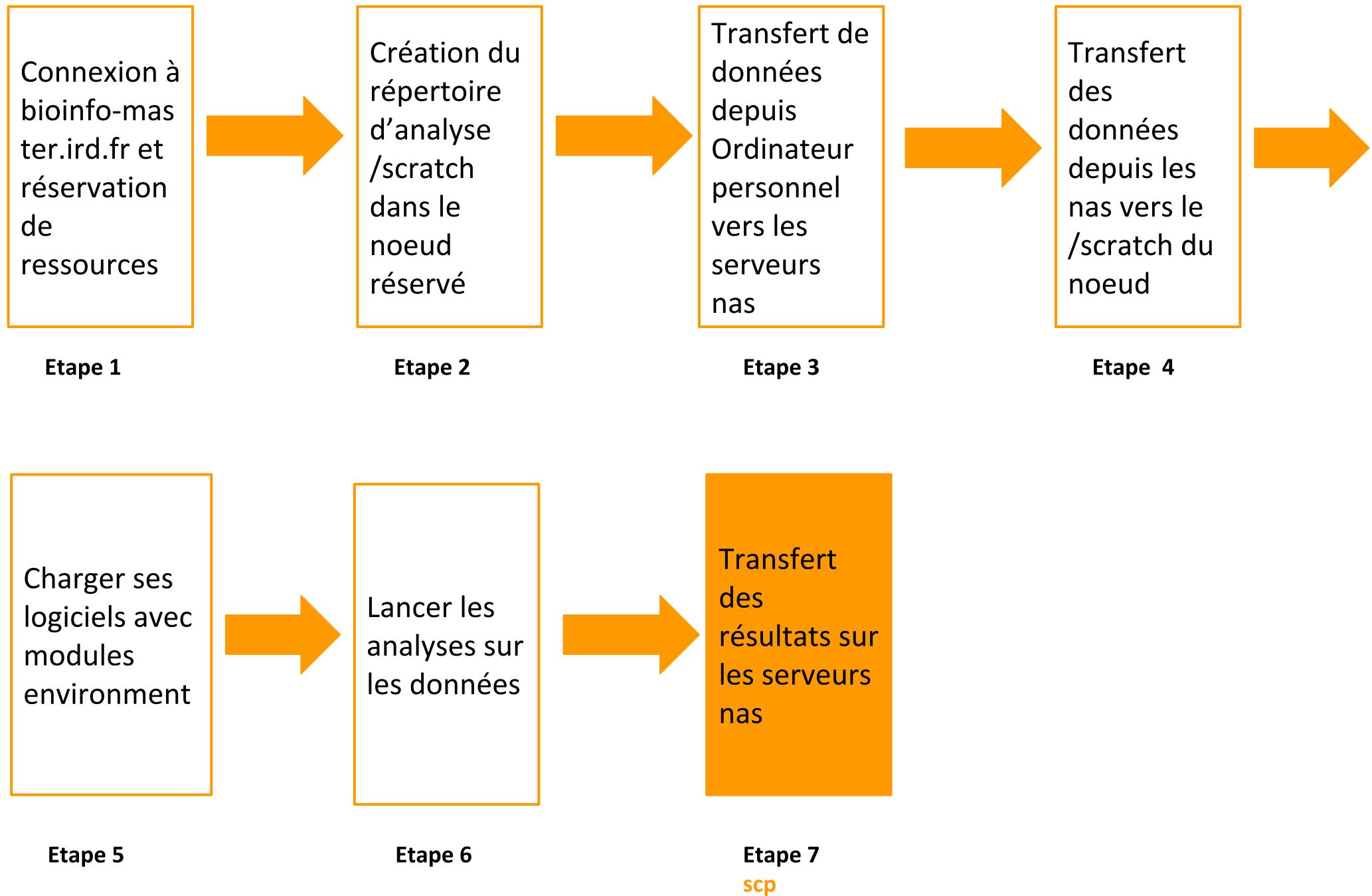
- Syntaxe si la source est distante :

```
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

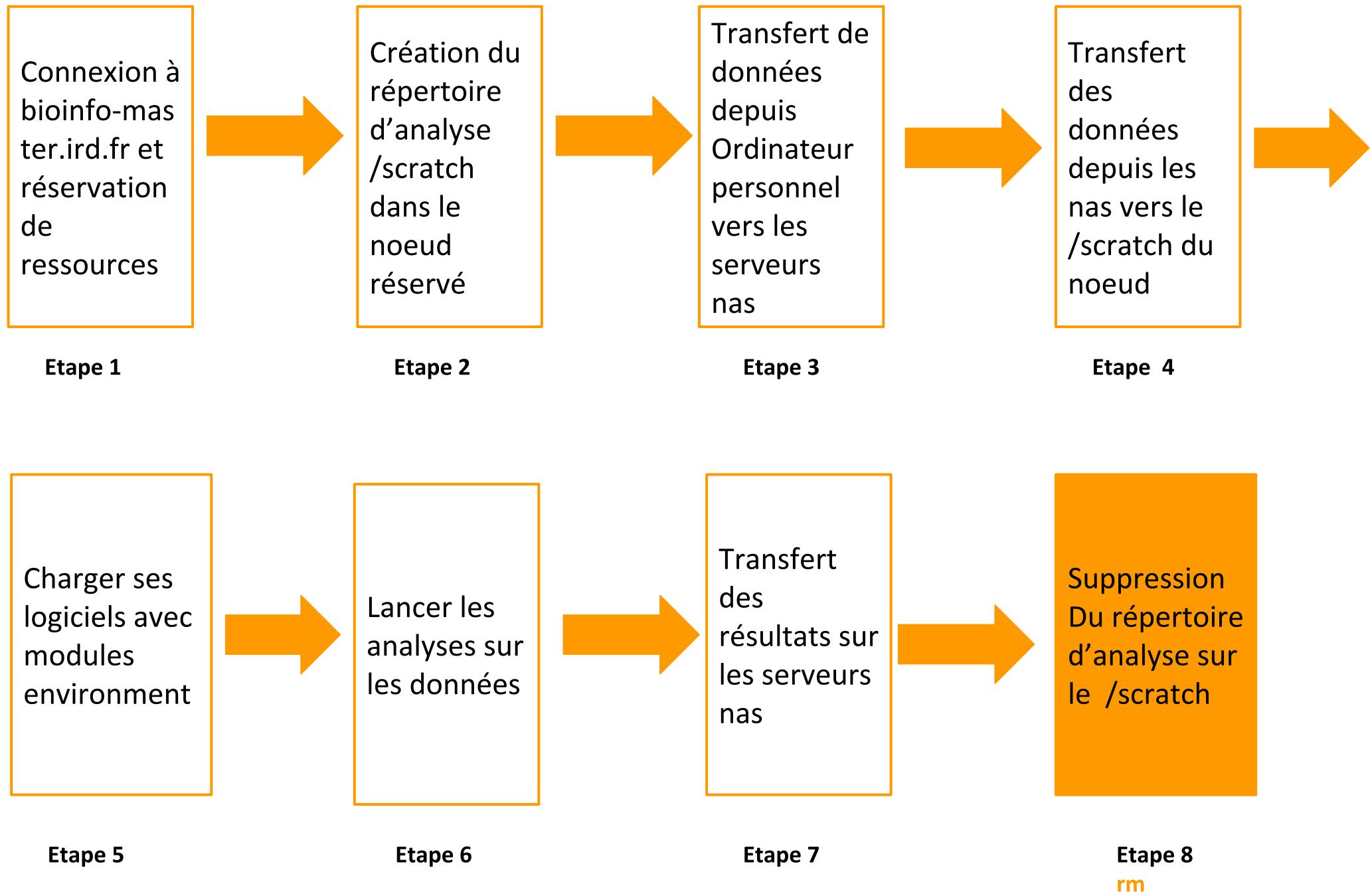
*Aller sur le [Practice7](#) du github*

# 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
sbatch	Lancer une analyse via script en arrière plan	sbatch script.sh
sinfo	Informations sur les partitions	sinfo
scancel	Suppression 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
sacct -j <job_id>	Infos sur le job terminé <job_id>	sacct -j 1029

# 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.tando@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

# 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 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

# 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 sbatch

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 ressources 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/>