

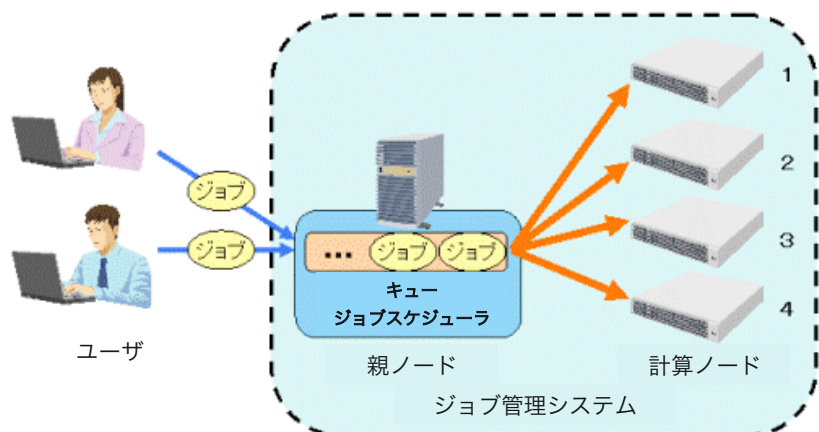
生物情報解析システム

SunGridEngine 利用方法

大型計算機を有効に使うには

複数の人間が同じ計算機群を使いたい...
どの計算機/CPUが空いてるか？
平等に使うには？

- ・ ユーザのジョブを
 - 実行された順番に
 - 空いている計算機に割り振ってくれる

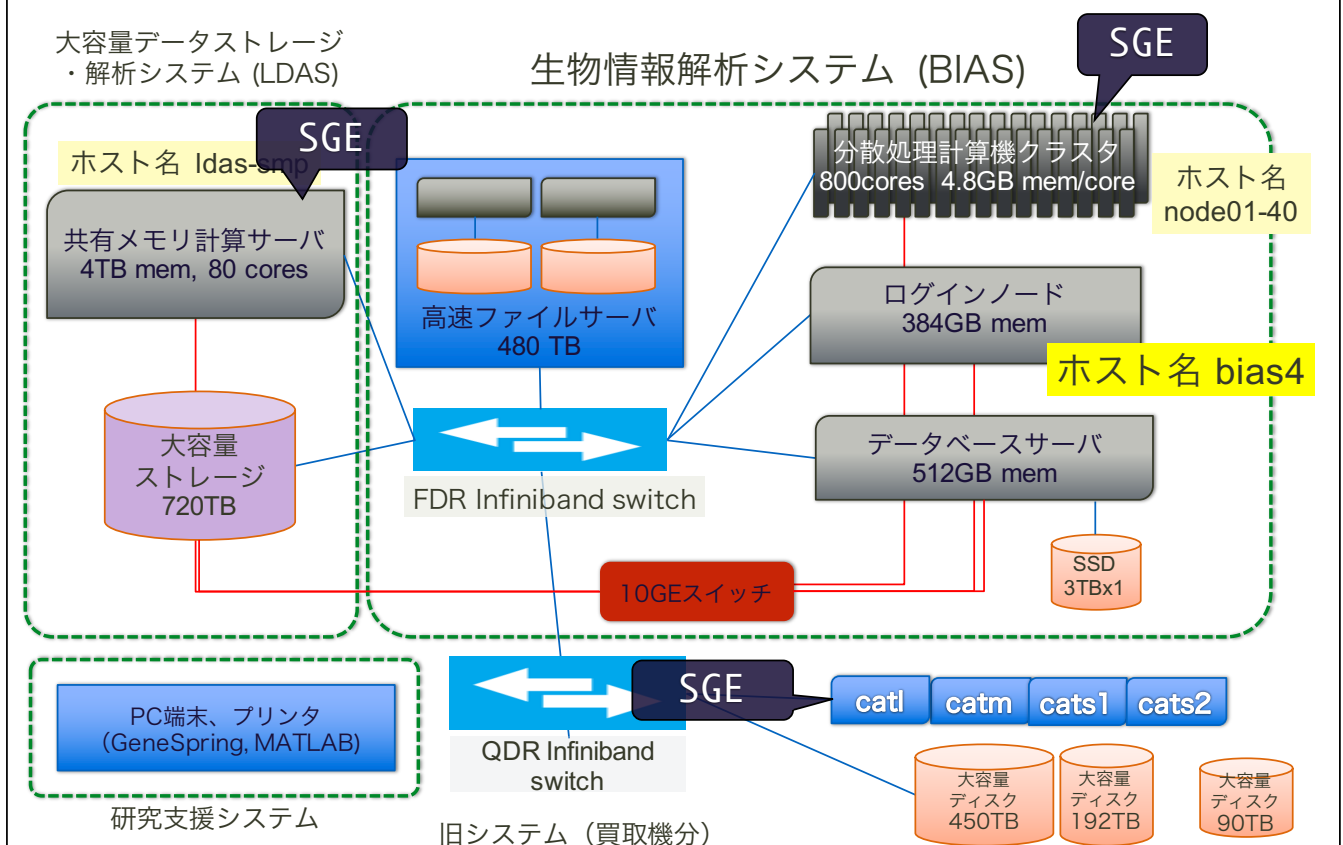


- ・ ジョブ管理システム

ジョブ管理システム

- ・ 親ノードが、複数ある計算機から資源の割り当てを自動で行い、効率を上げる
- ・ ユーザは親ノードにジョブを投げるだけ（親ノードの名前すら知らなくてもよい）
- ・ 生物情報解析システム上でのデータ解析は基本ジョブ管理システムを使うこと
 - bias4.nibb.ac.jp はパワーがないので、皆がbias4上で解析を行うとすぐ倒れます
- ・ **SunGridEngine (SGE)**

生物情報解析システムの構成



作業ディレクトリ

bias4.nibb.ac.jp 上での ~/6_sge

```
$ cd ~/6_sge  
$ ls
```

ジョブ管理システム:SGEの利用

- ・ 実行したいコマンドをシェルスクリプト内に記述し、**qsub**コマンド（後述）を用いてジョブ管理システムに実行させる
- ・ シェルスクリプト ex.sh の中身を確認

```
$ less ex.sh
```

```
#!/bin/sh  
#$ -cwd  
#$ -q small  
  
bowtie2 -x ecoli_genome -U ecoli.1.fastq -S ecoli.1.sam
```

qsub実行！

- ・ シェルスクリプトをジョブ管理システム(SGE)に投入：**qsub**

```
$ qsub scriptfile
```

- ・ ex.sh をqsubコマンドで実行

```
$ qsub ex.sh
```

```
Your job 814953 ("ex.sh") has been submitted
```

- ・ 投入されたジョブはログインノードから分散処理計算機クラスタ内のノードに送られて実行される
- ・ 標準出力と標準エラー出力のログがホームディレクトリにファイルとして作られる
- ・ 投入したジョブの状況を見るには **qstat** コマンドを使う

```
$ qstat
```

qsub (bowtie2) 結果の確認

```
$ ls
```

結果ファイルの確認

```
$ ls ex.sh.*
```

標準出力・標準エラー出力ファイル

```
ex.sh.e814953 ex.sh.o814953
```

```
$ less ex.sh.e814953
```

標準エラー出力ファイルの中身を確認

```
330118 reads; of these:
```

```
  330118 (100.00%) were unpaired; of these:
```

```
    3364 (1.02%) aligned 0 times
```

```
   229054 (69.39%) aligned exactly 1 time
```

```
    97700 (29.60%) aligned >1 times
```

```
98.98% overall alignment rate
```

SGEの主なコマンド

qsub <i>script_file</i>	<i>script_file</i> ジョブを投入
qstat	自分のジョブの状態を表示
qstat -u '*'	全ユーザのジョブ状態を表示
qdel <i>job-ID</i>	<i>job-ID</i> のジョブを削除

```
$ qstat
```

```
job-ID prior name user state submit/start at queue slots ja-task-ID
-----
814953 0.00000 ex.sh hiroyo r 01/08/2015 14:14:54 small@node04 1
814954 0.00000 job.sh hiroyo qw 01/08/2015 14:14:54 small@node05 1
814955 0.00000 job.sh hiroyo qw 01/08/2015 14:14:54 small@node05 1
```

```
$ qdel 814953
```

```
hiroyo has deleted job 814953
```

qsub のオプション

- qsub には様々なオプションがあり、シェルスクリプト内で「#\$」に続けて書いておくことで機能を加えることができる

```
$ less ex.sh
```

```
#!/bin/sh
```

```
#$ -q small          smallキューを指定
```

```
#$ -cwd              qsubしたディレクトリに移動してジョブを実行
```

```
bowtie2 -x ecoli_genome -U ecoli.1.fastq -S ecoli.1.sam
```

- -cwd を指定しているので、ファイルのパスを付けていない

qsub のオプション

オプション	説明
#\$ -o filename	標準出力の結果を指定したファイルに保存
#\$ -e filename	標準エラー出力の結果を指定したファイルに保存
#\$ -q queue_name	キューを指定してジョブを実行
#\$ -cwd	qsubした時のディレクトリに移動してジョブを実行
#\$ -v 環境変数=値	環境変数をジョブに渡す
#\$ -N job_name	ジョブ名を指定する
#\$ -s shell_name	ジョブスクリプトを指定したシェルで実行
#\$ -a MMDDhhmm	ジョブの開始日時を指定
#\$ -l resource_name 値	ジョブが使うリソース量を指定する
#\$ -pe PE_name プロセス数	並列ジョブを実行する場合の環境と並列数の指定
#\$ -t 開始番号-終了番号	アレイジョブを実行

キュー（ジョブの待ち行列）構成

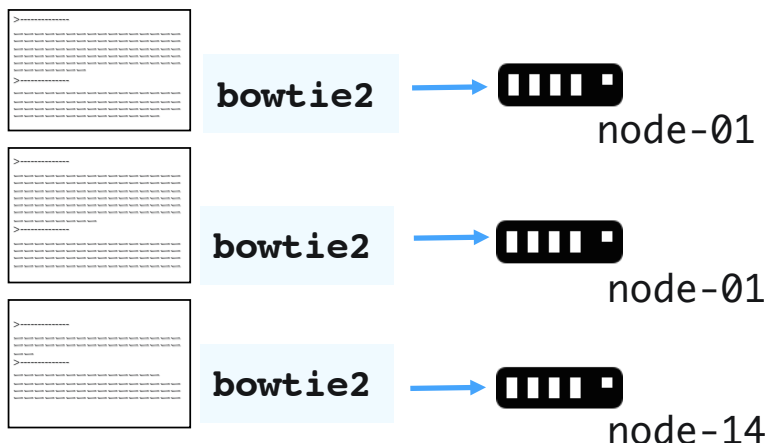
	分散並列処理型			共有メモリ型			
	分散処理計算機クラス			共有メモリ型計算サーバ			cat群
キュー名	small	medium	large	smps	smpm	smpl	cat
ジョブの特徴	短時間・並列多	中規模	長時間	中メモリ	大メモリ	最大メモリ	denovoアセンブリ用
利用ノード	node01-40	node01-40	node01-40	ldas-smp	ldas-smp	ldas-smp	catl, catm cat1, cat2
最大実行時間 /job	6時間	72時間	no limit	no limit	no limit	no limit	no limit
最大ジョブ数 /キュー	580	200	20	8	4	1	112
最大使用メモリ /ジョブ	4GB	4GB	4GB	500GB	1TB	4TB	512GB/1TB/ 96GB/96GB
利用できるPE	smp, mpi128, mpi256, make	smp, mpi128, mpi256, make	smp, mpi128, make	smp	smp	smp	smp, make

- ・ キューを指定しない場合、デフォルトでは「small」で実行される
- ・ ユーザあたりジョブ同時実行数は最大 400

for文を使って並列化



node-01~node40
分散処理計算機クラス



- ・ 1台で順次実行しては時間がかかる計算も、分割して複数台、複数CPUに仕事をさせれば数倍の速度で終わる

for文を使って並列化：実際の例

```
$ less ex2.sh
```

```
#!/bin/sh
#$ -cwd

num=${1}
bowtie2 -x ecoli_genome -U ecoli.${num}.fastq
        -S ecoli.${num}.sam
```

- ・ qsub に渡すシェルスクリプト

for文を使って並列化：例2

```
$ less ex3.sh
```

```
#!/bin/sh
for i in 1 2 3
do
  qsub ex2.sh ${i}
done
```

- qsubを実行するためのシェルスクリプト
- for文を使って以下のコマンドを順番にqsubしている

```
ex2.sh 1
```

```
ex2.sh 2
```

```
ex2.sh 3
```

- 実行

```
$ ./ex3.sh
```

for文を使って並列化：例3

- 投入したジョブを確認
- 3つのbowtie2が異なるマシンで実行されている

```
$ qstat
```

7769444	0.50500	ex3.sh	hiroyo	r	02/16/2016 10:19:38	small@node26	1
7769445	0.50500	ex3.sh	hiroyo	r	02/16/2016 10:19:38	small@node11	1
7769446	0.50500	ex3.sh	hiroyo	r	02/16/2016 10:19:38	small@node19	1