大規模なデータ解析のためのUNIX入門

SunGridEngine 利用方法

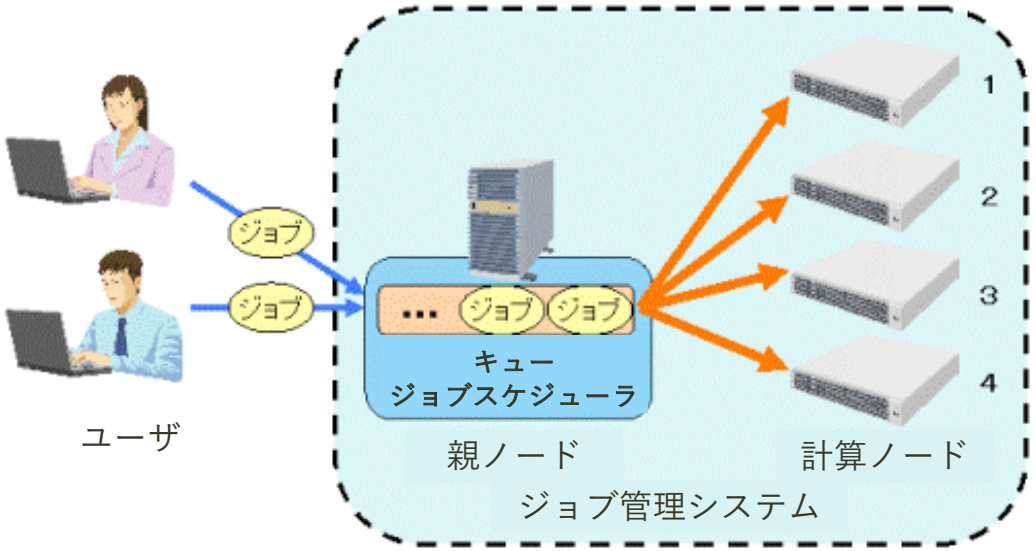
23/June/2017

情報管理解析室　西出 浩世

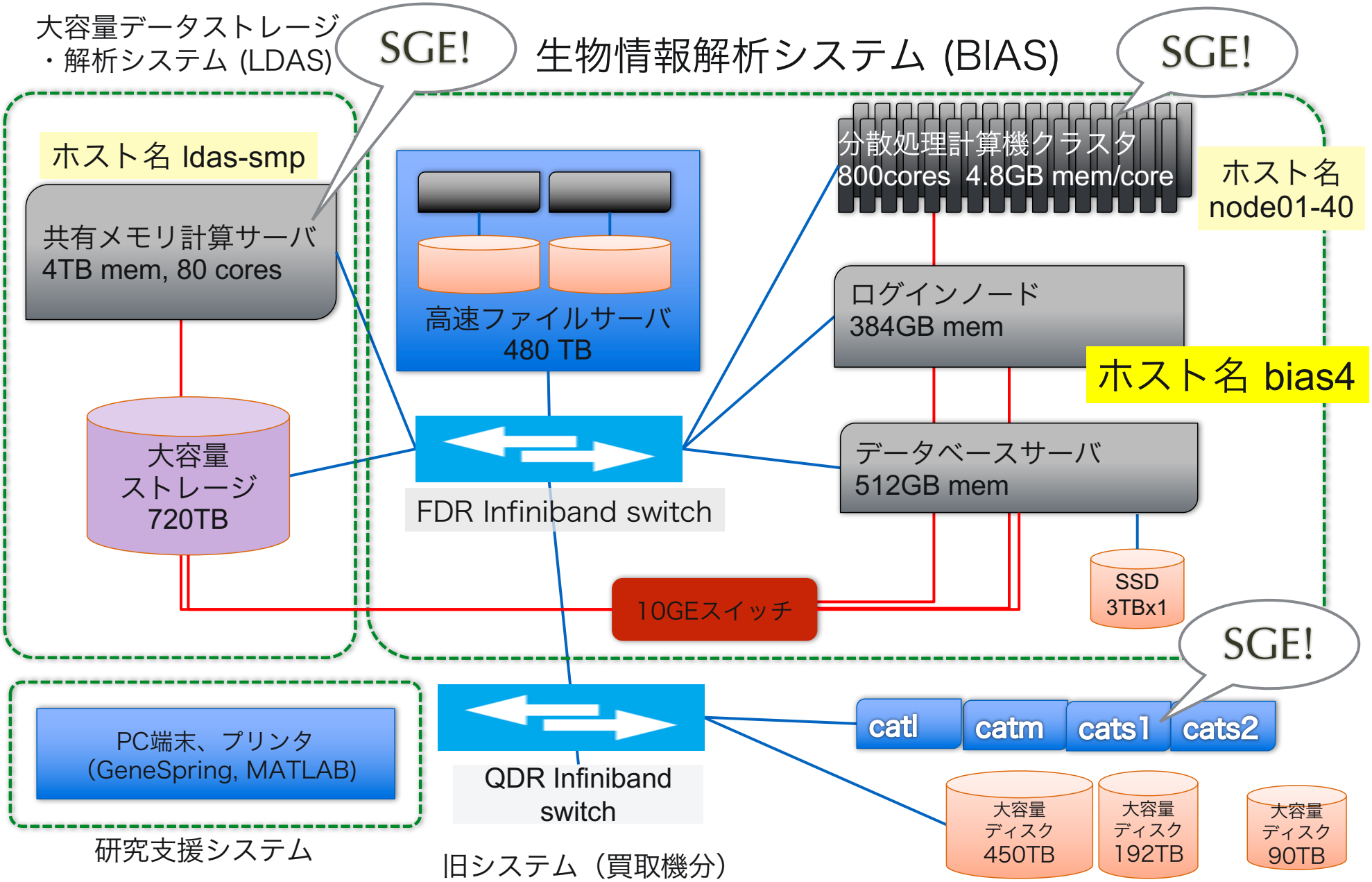
ジョブ管理システム：SunGridEngine

複数の人間が同じ計算機群を使いたい・・・
どのマシン/CPUが空いてるか？
どの計算を優先させるべきか？

- 親ノードを設置し、ジョブ管理システムを運用
- 計算機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）
- SunGridEngine (SGE)



生物情報解析システムの構成



作業ディレクトリ

~/data/4_sge

```
$ cd ~/data/4_sge
$ ls
bowtie1.sh   ex.sh   genome   test_fastq
```

genome ディレクトリ、test_fastq ディレクトリ内の内容を確認

```
$ ls genome
$ ls test_fastq
```

＊　解析結果を格納するディレクトリ「results」を作成する

```
$ mkdir results
```

ジョブ管理システムの利用

- 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）を用いて実行させる
- シェルスクリプト ex.sh の中身を確認

```
$ less ex.sh
```

ex.sh

```
#!/bin/sh
path=~/data/4_sge
bowtie2 -x ${path}/genome/ecoli_genome
        -U ${path}/test_fastq/ecoli.1.fastq
        -S ${path}/results/ecoli.1.sam
```

- ~/data/4_sge/rnaseq 内の ecoli.1.fastqファイルを、~/data/4_sge/genome にある ecoli_genome にbowtie2 でマッピングし、結果は ~/data/4_sge/results に保存

SGE 実行コマンド qsub

- シェルスクリプトをジョブ管理システム(SGE)に投入：qsub
- qsub コマンドの引数にシェルスクリプト名を付けて実行

```
$ qsub scriptname
```

- ex.sh をqsubコマンドで実行

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

ジョブ番号

- 投入されたジョブは番号が付けられ、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
  - シェルスクリプト名.oジョブ番号　（標準出力）
  - シェルスクリプト名.eジョブ番号　（標準エラー出力）

qsub (ex.sh) 結果の確認

```
$ cd results
$ ls                                                    結果ファイルの確認
ecoli.1.sam

$ 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

$ less ecoli.sam                        結果ファイルの中身を確認
$ cd ..                                   作業ディレクトリに戻る
```

SGE その他コマンド

qsub *script_filename*	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 *job-ID*	ジョブを削除

```
$ qstat
job-ID  prior   name       user         state submit/start at     queue                          slots ja-task-ID
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------
814953 0.00000 bowtie.sh  hiroyo       r     01/08/2015 14:14:54                                    1
814954 0.00000 bowtie.sh  hiroyo       qw    01/08/2015 14:14:54                                    1
814955 0.00000 bowtie.sh  hiroyo       qw    01/08/2015 14:14:54                                    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 bowtie1.sh
```

bowtie1.sh

```
#!/bin/sh
#$ -q gitc                    gitc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 genome/ecoli_genome
        -U test_fastq/ecoli.1.fastq
        -S results/ecoli.1.sam
```

- -cwd を指定しているので、データ等を相対パスで書いている
- この場合標準出力・エラー出力ログも同じ場所にできる

qsub の主なオプション

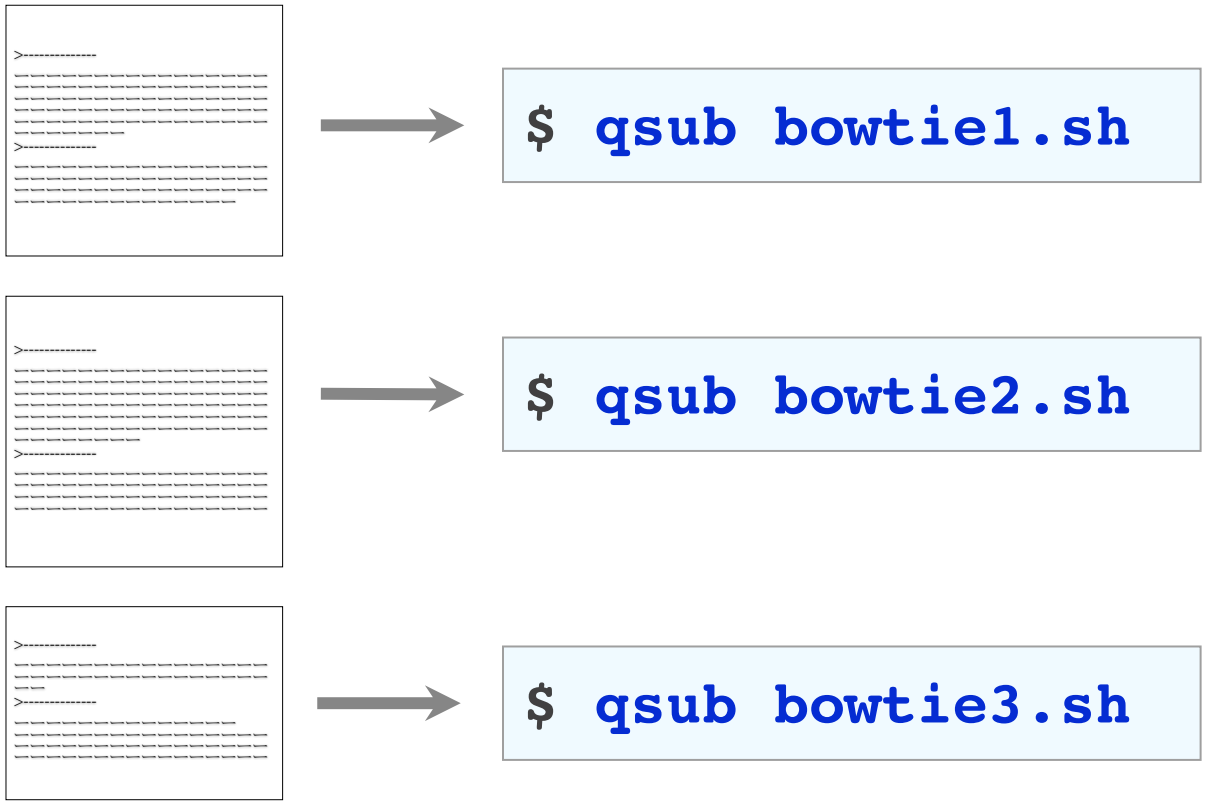
オプション	説明
#$ -o *filename*	標準出力の結果を指定したファイルに保存
#$ -e *filename*	標準エラー出力の結果を指定したファイルに保存
#$ -q *queue_name*	キューを指定してジョブを実行
#$ -cwd	qsubした時のディレクトリに移動してジョブを実行
#$ -v *環境変数*	環境変数をジョブに渡す
#$ -N *job_name*	ジョブ名を指定する
#$ -s *shell_name*	ジョブスクリプトを指定したシェルで実行
#$ -a *MMDDhhmm*	ジョブの開始日時を指定
#$ -l *resource_name 値*	ジョ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

当システムにおける
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タ			共有メモリ型計算サーバ		
キュー名	**small**	**medium**	**large**	**smps**	**smpm**	**smpl**
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
利用ノード	node01-40	node01-40	node01-40	ldas-smp	ldas-smp	ldas-smp
最大実行時間/job	6時間	72時間	no limit	no limit	no limit	no limit
最大ジョブ数/キュー	580	200	20	8	4	1
最大使用メモリ/ジョブ	4GB	4GB	4GB	500GB	1TB	4TB
利用できるPE	smp, mpi128, mpi256, make	smp, mpi128, mpi256, make	smp, mpi128, make	smp	smp	smp

- キューを指定しない場合、デフォルトでは「small」で実行されます
- ユーザあたりジョブ同時実行数は最大 400 です
- 今回の講習では特別キュー「gitc」を使っています。講義中しか使えません

並列化



- 1台で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
- 一つのスクリプトに複数の処理を併記しても「同じ計算機上で順次実行されるだけ」

並列実行

- emacs で bowtie1.sh を書き換えて、「bowtie2.sh」として保存する
  emacs ：別名で保存（C-x, C-w）

```
$ emacs bowtie1.sh
```

```
#!/bin/sh
#$ -q gitc
#$ -cwd
bowtie2 -x genome/ecoli_genome
        -U test_fastq/ecoli.2.fastq
        -S results/ecoli.2.sam
```

bowtie2.sh

- bowtie2.sh ＝ ecoli.2.fastq をマッピング
- 書き換えたらqsubでSGEに両方を投入し、qstat で実行状況を確認

```
$ qsub bowtie1.sh
$ qsub bowtie2.sh
$ qstat
```

結果ファイルの確認

```
$ cd results

$ ls
ecoli.sam ecoli.1.sam  ecoli.2.sam


$ less ecoli.2.sam



$ cd ..
```

アレイジョブ

- ✓ test_fastq には ecoli.1.fastq ~ ecoli.12.fastq ：12個のfastq ファイルがある
- ✓ 似たようなジョブファイルをいくつも作るのは面倒

- SGE のオプションである **アレイジョブ機能** を使う
- 1つのスクリプトファイルで複数の独立ジョブを実行させる
- **#$ -t** 開始番号-終了番号　でアレイジョブの数を指定
- 変数 ${SGE_TASK_ID} が自動生成される
- ${SGE_TASK_ID} にアレイジョブ数がセットされ、インクリメント（コンピュータ用語では変数を一つ増やすこと）しながら回数分実行される
- qsub は1回でよい

アレイジョブ用のスクリプトを用意

- emacsでbowtie1.shを改造し、bowtie_all.sh として保存

```
$ emacs bowtie1.sh
```

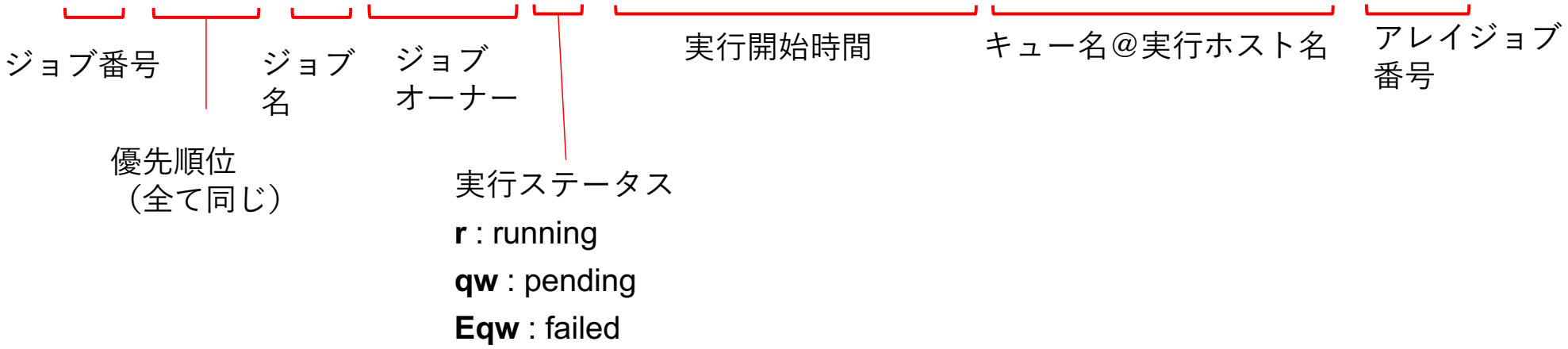
```
#!/bin/sh
#$ -q gitc
#$ -cwd
#$ -t 1-12

bowtie2 -x genome/ecoli_genome
   -U test_fastq/ecoli.${SGE_TASK_ID}.fastq
   -S results/ecoli.${SGE_TASK_ID}.sam
```

bowtie_all.sh

アレイジョブ実行

- 実行とジョブの確認

```
$ qsub bowtie_all.sh
Your job 814953 ("bowtie_all.sh") has been submitted
$ qstat
job-ID prior name user state submit/start at   queue    slots ja-task-ID
-----------------------------------------------------------------------
6597 0.5050 1job hiroyo   r  01/19/2017 18:04:04 gitc@node03.local  1 1
6597 0.5050 1job hiroyo   r  01/19/2017 18:04:04 gitc@node06.local  1 2
6597 0.5050 1job hiroyo   r  01/19/2017 18:04:04 gitc@node08.local  1 3
6597 0.5050 1job hiroyo   r  01/19/2017 18:04:04 gitc@node06.local  1 4
6597 0.5050 1job hiroyo   r  01/19/2017 18:04:04 gitc@node08.local  1 5
```



結果ファイルの確認

```
$ cd results
$ ls
ecoli.1.sam  ecoli.2.sam  ecoli.3.sam  ecoli.4.sam
ecoli.5.sam  ecoli.6.sam  ecoli.7.sam  ecoli.8.sam
ecoli.9.sam  ecoli.10.sam  ecoli.11.sam  ecoli.12.sam

$ less ecoli.12.sam

$ cd ..
$ ls bowtie_all.*
bowtie_all.e814953.1 bowtie_all.sh.e814953.2
bowtie_all.sh.e814953.3 bowtie_all.sh.o814953.4
bowtie_all.sh.o814953.4 bowtie_all.sh.o814953.1
bowtie_all.sh.o814953.2 bowtie_all.sh.o814953.3
bowtie_all.sh.o814953.4 bowtie_all.o814953.5  ・・・・・
```

- アレイジョブでは、スクリプト名.ジョブ番号.アレイ番号　のログが作られる

演習

- アレイジョブ機能を使って、~/data/4_sge/results 下の12個のsamファイルについて、htseq-count を使って ecoli.gtf にある遺伝子ごとのヒット数をカウントする。結果は、~/data/4_sge/results/ecoli.1.htseq 〜 ecoli.12.htseq に保存しよう。

  - スクリプトファイル名は htseq.sh とする
  - 遺伝子情報が載った gtf ファイルは ~/data/3_ngs/ecoli.gtf にある

回答

htseq.sh

```
#!/bin/sh
#$ -q gitc
#$ -cwd
#$ -t 1-12

htseq-count results/ecoli.${SGE_TASK_ID}.sam
  ../3_ngs/ecoli.gtf >
  results/ecoli.${SGE_TASK_ID}.htseq
```

```
$ qsub htseq.sh
Your job 814953 ("htseq.sh") has been submitted
```