

Trabajando en CLUSTERS

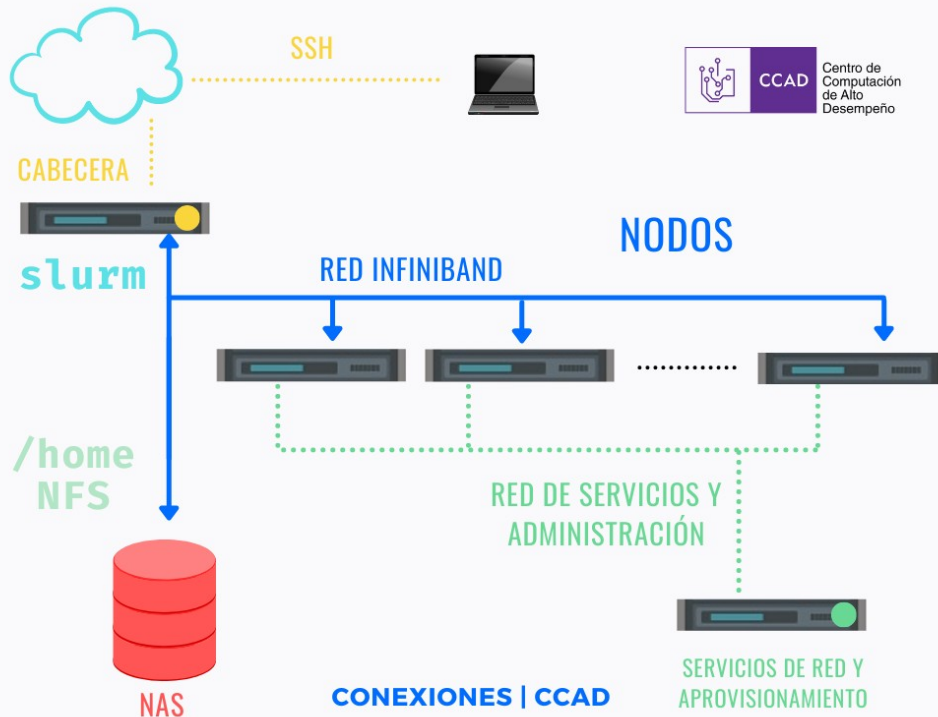


CCAD

Centro de Computación
de Alto Desempeño de la
Universidad Nacional de Córdoba



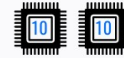
Universidad
Nacional
de Córdoba



MENDIETA



XEON E5-2680 V2
INTEL IVY BRIDGE



2 x 10 cores

@2.8 GHZ

64 GiB



64 GiB DDR3
1600 MHz

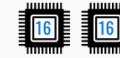


2 x NVIDIA A30
24GB HBM2

MULATONA



XEON E5-2683 V4
INTEL BROADWELL



2 x 16 cores

@3.0 GHZ

128 GiB



128 GiB DDR4
2400 MHz

EULOGIA



XEON PHI 7210
INTEL KNIGHTS LANDING



1 x 64 cores

@1.5 GHZ

96 GiB

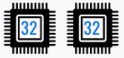


96 GiB DDR4
2400 MHz
+16 GiB MCDRAM

SERAFÍN



EPYC 7532
AMD ZEN2(ROME)



2 x 32 cores

@3.3 GHZ

128 GiB



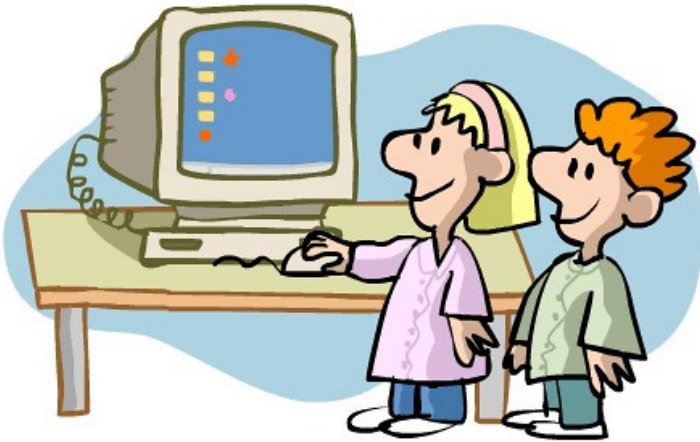
128 GiB DDR4
3200 MHz

ARQUITECTURA | CCAD

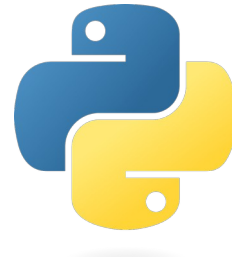
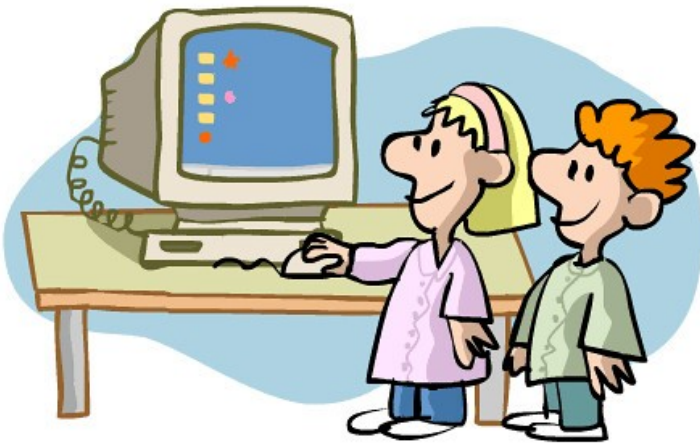


Centro de
Computación
de Alto
Desempeño

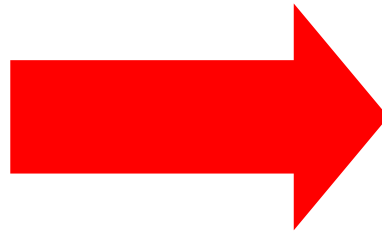
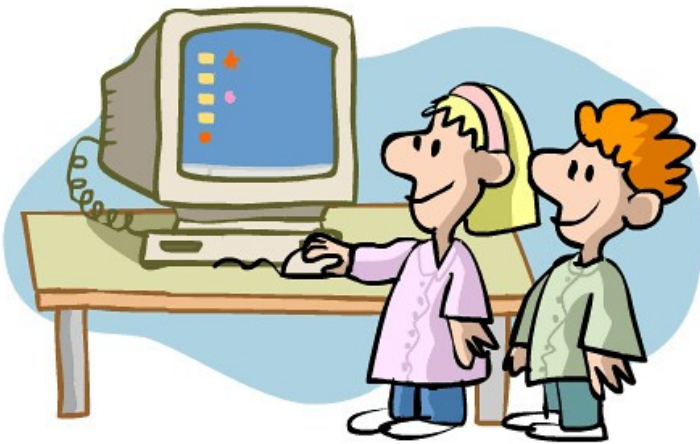
Trabajando en CLUSTERS



Trabajando en CLUSTERS



Trabajando en CLUSTERS



Trabajando en CLUSTERS



Trabajando en CLUSTERS

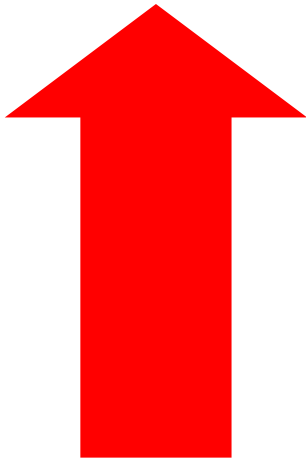
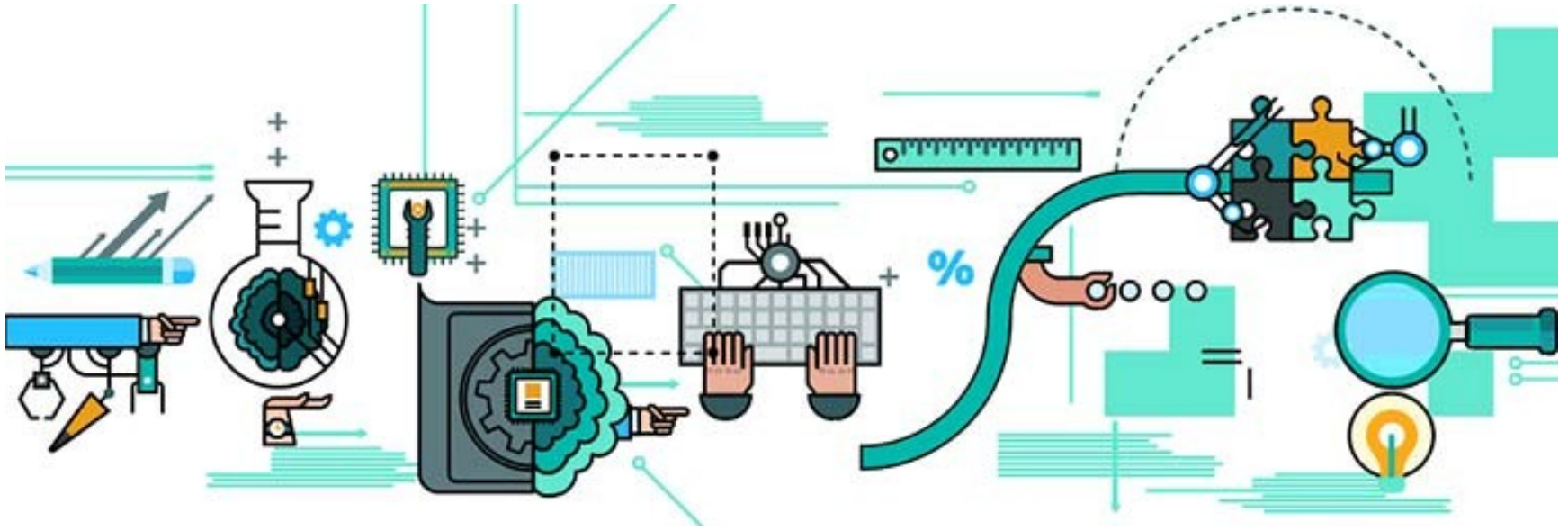
Computadoras de uso personal

Intel i7 (11^o gen) / AMD Ryzen7

- 8 núcleos y 16 subprocesos
- RAM variable (8-16-32 GB??)
- eventualmente 1 GPU



Trabajando en CLUSTERS



- Volumen de datos
- Complejidad de los análisis

Trabajando en CLUSTERS



CCAD

Centro de Computación
de Alto Desempeño de la
Universidad Nacional de Córdoba



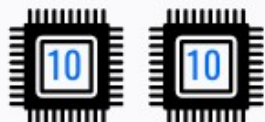
UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

MENDIETA



XEON E5-2680 V2
INTEL IVY BRIDGE



2 x 10 cores

@2.8 GHZ



64 GiB DDR3
1600 MHz

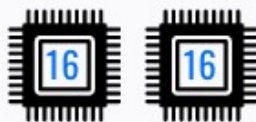


2 x NVIDIA A30
24GB HBM2

MULATONA



XEON E5-2683 V4
INTEL BROADWELL



2 x 16 cores

@3.0 GHZ



128 GiB DDR4
2400 MHz

EULOGIA



XEON PHI 7210
INTEL KNIGHTS LANDING



1 x 64 cores

@1.5 GHZ

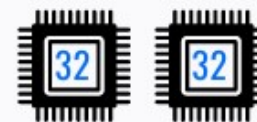


96 GiB DDR4
2400 MHz
+16 GiB MCDRAM

SERAFÍN



EPYC 7532
AMD ZEN2(ROME)



2 x 32 cores

@3.3 GHZ



128 GiB DDR4
3200 MHz

ARQUITECTURA | CCAD

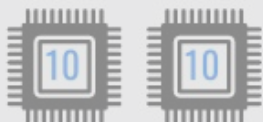


Centro de
Computación
de Alto
Desempeño

MENDIETA



XEON E5-2680 V2
INTEL IVY BRIDGE



2 x 10 cores

@2.8 GHZ



64 GiB DDR3
1600 MHz

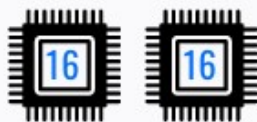


2 x NVIDIA A30
24GB HBM2

MULATONA



XEON E5-2683 V4
INTEL BROADWELL



2 x 16 cores

@3.0 GHZ



128 GiB DDR4
2400 MHz

EULOGIA



XEON PHI 7210
INTEL KNIGHTS LANDING



1 x 64 cores

@1.5 GHZ

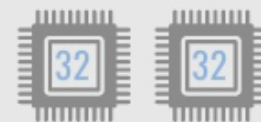


96 GiB DDR4
2400 MHz
+16 GiB MCDRAM

SERAFÍN



EPYC 7532
AMD ZEN2(ROME)



2 x 32 cores

@3.3 GHZ



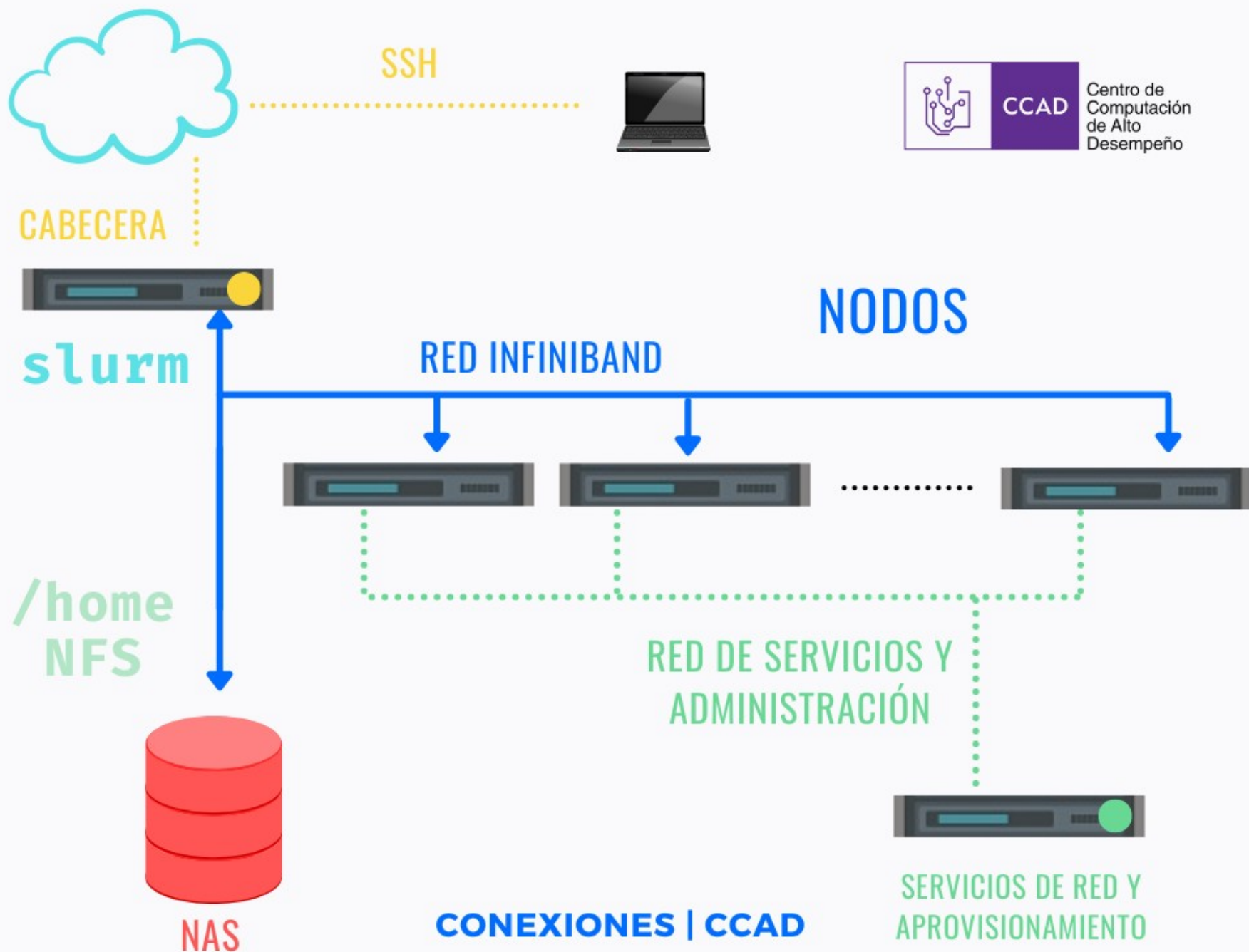
128 GiB DDR4
3200 MHz

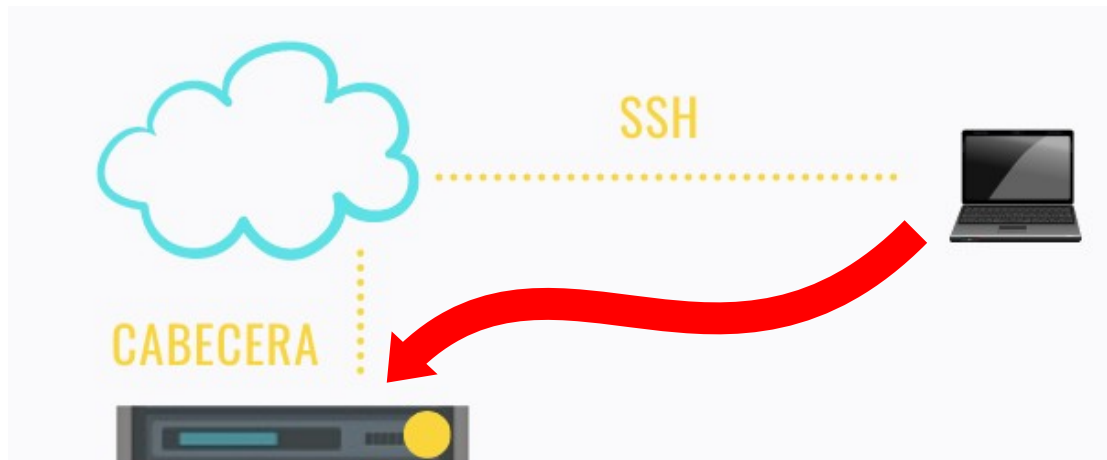
ARQUITECTURA | CCAD



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño





Conexión vía SSH

- Protocolo de conexión criptográfico.
- Todo lo que hacemos en nuestra terminal “local” se envía al terminal “remoto” por un tunel encriptado.
- Autenticación con llave público-privada.

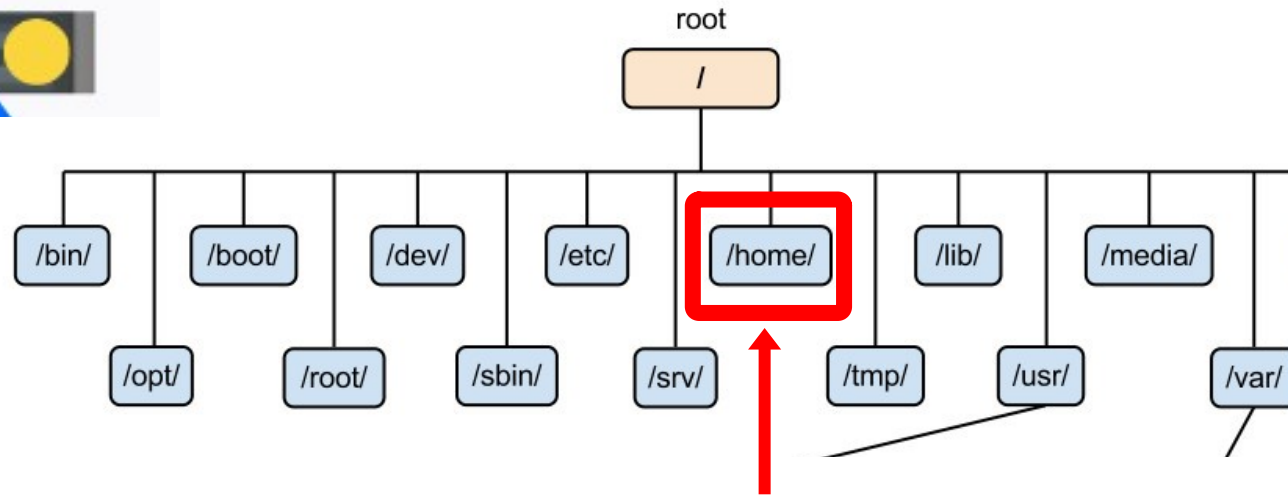
```
$ ssh usuario@mulatona.ccad.unc.edu.ar
```

- USUARIOS: cursojnab[1-12] (N.º estación - 1)

CABECERA

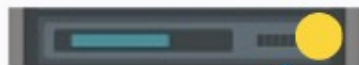


Cabecera



- Exploro, creo, copio, elimino...
- NO EJECUTO ANÁLISIS !!!
- Para ello, envío al gestor de colas: SLURM

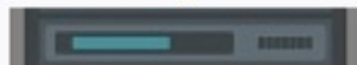
CABECERA



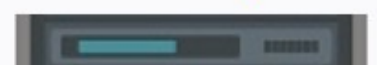
NODOS

slurm

RED INFINIBAND



.....



SLURM

Ver “colas” disponibles

\$ sinfo

```
[npastor@mulatona ~]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
short*      up    1:00:00      1  down* bdw05
short*      up    1:00:00      1    mix bdw01
short*      up    1:00:00      5  alloc bdw[02-04,06-07]
mono        up  2-00:00:00      1  down* bdw05
mono        up  2-00:00:00      1    mix bdw01
mono        up  2-00:00:00      5  alloc bdw[02-04,06-07]
batch       up  7-00:00:00      1  down* bdw05
batch       up  7-00:00:00      1    mix bdw01
batch       up  7-00:00:00      5  alloc bdw[02-04,06-07]
```

```
[npastor@mendieta ~]$ sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
multi      up  2-00:00:00      1    mix ivb14
multi      up  2-00:00:00      9  alloc ivb[08-13,17-19]
multi      up  2-00:00:00      2   idle ivb[15-16]
short*     up    1:00:00      1    mix ivb14
short*     up    1:00:00      9  alloc ivb[08-13,17-19]
short*     up    1:00:00      2   idle ivb[15-16]
```

SLURM

Ver trabajos en cola

\$ squeue

```
[npastor@mulatona ~]$ squeue
```

JOBID	PARTITION	NAME	USER	ST	TIME	NODES	NODELIST(REASON)
137148	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137147	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137146	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137145	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137702	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137701	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137700	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137699	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137698	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137697	mono	AA-Ca-14	kchattah	PD	0:00	1	(AssocMaxJobsLimit)
137436	mono	Bep03_gv	mfiguero	PD	0:00	1	(Resources)
138228	mono	pbj_redu	abarical	PD	0:00	1	(Priority)
137144	mono	AA-Ca-14	kchattah	R	20:15:58	1	bdw01
137143	mono	AA-Ca-14	kchattah	R	20:16:34	1	bdw01
137142	mono	AA-Ca-14	kchattah	R	20:25:48	1	bdw01
137141	mono	AA-Ca-14	kchattah	R	20:35:12	1	bdw01
136403	mono	full_350	vcrespi	R	1-00:27:18	1	bdw02
136888	mono	am_mas	abarical	R	1-10:43:39	1	bdw07
138261	mono	e-forces	eperassi	R	2:42:54	1	bdw04
138214	mono	h3_wa2	ksanchez	R	4:11:36	1	bdw03
125185	mono	p6_G2_35	vcrespi	R	1-00:27:17	1	bdw06
137435	mono	LR031_gv	mfiguero	R	9:20:36	1	bdw03
137434	mono	Be05_gvc	mfiguero	R	13:18:37	1	bdw01
137918	short	32	hbaldoni	PD	0:00	1	(Priority)
137919	short	36	hbaldoni	PD	0:00	1	(Priority)
137920	short	37	hbaldoni	PD	0:00	1	(Priority)

SLURM

Enviar trabajos a cola

```
$ sbatch submit_script.sh
```

```
#!/bin/bash
```

```
#SBATCH --reservation=cursojnab
```

```
#SBATCH -p short
```

```
#SBATCH -o ~/outputs/salida.o
```

```
#SBATCH -e ~/outputs/error.e
```

```
#SBATCH -J myjob
```

```
# reserva para el curso
```

```
# partición que usar
```

```
# ruta stdout
```

```
# ruta stderr
```

```
# nombre del trabajo
```


COMANDOS PARA CORRER

SLURM

Enviar trabajos a cola

```
$ sbatch trivialjob.sh
```

```
[npastor@mulatona ~]$  
[npastor@mulatona ~]$ sbatch trivialjob.sh  
Submitted batch job 138292  
[npastor@mulatona ~]$
```




```
$ squeue -u [USUARIO]
```

```
[npastor@mulatona ~]$ squeue -u npastor
```

JOBID	PARTITION	NAME	USER	ST	TIME	NODES	NODELIST(REASON)
138292	short	trivial_	npastor	PD	0:00	1	(Reservation)

```
[npastor@mulatona ~]$
```



Abrir ▾



trivialjob.sh

ccad_montar ~/ccad_montar

```
1 #!/bin/bash
2
3 #SBATCH --reservation=cursojnab           # reserva para el curso
4 #SBATCH -p short                         # partición que usar
5 #SBATCH -o ~/trivial_salida.o            # ruta stdout
6 #SBATCH -e ~/trivial_error.e            # ruta stderr
7 #SBATCH -J trivial_job                   # nombre del trabajo
8
9 srun echo -e "\nMi primer trabajo enviado al cluster del CCAD ;)\n"
10
11
```


SLURM

Ver estado de trabajos

\$ scontrol show job [JOBID]

```
[npastor@mulatona ~]$ scontrol show job 138292
JobId=138292 JobName=trivial_job
  UserId=npastor(10585) GroupId=npastor(10585) MCS_label=N/A
  Priority=782 Nice=0 Account=idacor QOS=normal
  JobState=PENDING Reason=Reservation Dependency=(null)
  Requeue=1 Restarts=0 BatchFlag=1 Reboot=0 ExitCode=0:0
  RunTime=00:00:00 TimeLimit=01:00:00 TimeMin=N/A
  SubmitTime=2023-11-06T16:22:42 EligibleTime=Unknown
  AccrueTime=Unknown
  StartTime=Unknown EndTime=Unknown Deadline=N/A
  SuspendTime=None SecsPreSuspend=0 LastSchedEval=2023-11-06T16:22:42 Scheduler=Main
  Partition=short AllocNode:Sid=slurmctld:639758
  ReqNodeList=(null) ExcNodeList=(null)
  NodeList=
  NumNodes=1 NumCPUs=1 NumTasks=1 CPUs/Task=1 ReqB:S:C:T=0:0:*:*
  TRES=cpu=1,mem=1M,node=1,billing=1
  Socks/Node=* NtasksPerN:B:S:C=0:0:*:* CoreSpec=*
  MinCPUsNode=1 MinMemoryNode=0 MinTmpDiskNode=0
  Features=(null) DelayBoot=00:00:00
  Reservation=cursojnab
  OverSubscribe=OK Contiguous=0 Licenses=(null) Network=(null)
  Command=/home/npastor/trivialjob.sh
  WorkDir=/home/npastor
  StdErr=/home/npastor/~trivial_error.e
  StdIn=/dev/null
  StdOut=/home/npastor/~trivial_salida.o
  Power=
```

SLURM

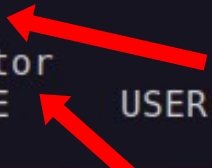
Cancelar trabajos

\$ scancel [JOBID]

```
[npastor@mulatona ~]$ scancel 138292
[npastor@mulatona ~]$ squeue -u npastor
```

JOBID	PARTITION	NAME	USER	ST	TIME	NODES	ODELIST(REASON)
-------	-----------	------	------	----	------	-------	-----------------

```
[npastor@mulatona ~]$
```



Abrir ▾



submit_after_beast.sh

ccad_montar ~/ccad_montar/run2023/r6

Guardar



```
1 #!/bin/bash
2
3 ### Configuración del trabajo
4
5 ### Nombre de la tarea
6 #SBATCH --mail-type=ALL
7 #SBATCH --mail-user=npastor@unc.edu.ar
8 #SBATCH --job-name=r6SCCS.2
9 #SBATCH --partition=multi
10 #SBATCH --nodes=1
11 #SBATCH --cpus-per-task=20
12 #SBATCH --gres=gpu:2
13 #SBATCH --time=2-00:00:00
14 #SBATCH --no-requeue
15
16 #-----
17
18 # Script que se ejecuta al arrancar el trabajo
19
20 # Cargar el entorno del usuario incluyendo la funcionalidad de modules
21 # No tocar
22 . /etc/profile
23
24 # Configurar OpenMP y otras bibliotecas que usan threads
25 # usando los valores especificados arriba
26 # export OMP_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK
27 # export MKL_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK
28
29 # Cargar los módulos para la tarea
30 module use /home/npastor/beast1/modules
31 module load openjdk
32 module load beast1
33
34 # Lanzar el programa
35 #srun beast -beagle_info
36 #srun beast -beagle_GPU -beagle_order 1,2,1,2,1,2 -save_every 12500000 -save_state checkpoint_r6.1.txt -prefix r6.1_
   Pampa_N1047_particiones_StrickClock_ConstSize_Prueba3.xml
37 srun beast -beagle_GPU -beagle_order 1,2,1,2,1,2 -save_every 7500000 -save_state checkpoint_r6.2.txt -prefix r6.2_ -load_state
   checkpoint_r6.1.txt -force_resume Pampa_N1047_particiones_StrickClock_ConstSize_Prueba3.xml
```

sh ▾ Anchura del tabulador: 8 ▾

Ln 30, Col 40 ▾

INS

Abrir ▾



submit_after_beast.sh

ccad_montar ~/ccad_montar/run2023/r6

Guardar



```
1 #!/bin/bash
2
3 ### Configuración del trabajo
4
5 ### Nombre de la tarea
6 #SBATCH --mail-type=ALL
7 #SBATCH --mail-user=npastor@unc.edu.ar
8 #SBATCH --job-name=r6SCCS.2
9 #SBATCH --partition=multi
10 #SBATCH --nodes=1
11 #SBATCH --cpus-per-task=20
12 #SBATCH --gres=gpu:2
13 #SBATCH --time=2-00:00:00
14 #SBATCH --no-requeue
15
16 #-----
17
18 # Script que se ejecuta al arrancar el trabajo
19
20 # Cargar el entorno del usuario incluyendo la funcionalidad de modules
21 # No tocar
22 . /etc/profile
23
24 # Configurar OpenMP y otras bibliotecas que usan threads
25 # usando los valores especificados arriba
26 # export OMP_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK
27 # export MKL_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK
28
29 # Cargar los módulos para la tarea
30 module use /home/npastor/beast1/modules
31 module load openjdk
32 module load beast1
33
34 # Lanzar el programa
35 #srun beast -beagle_info
36 #srun beast -beagle_GPU -beagle_order 1,2,1,2,1,2 -save_every 12500000 -save_state checkpoint_r6.1.txt -prefix r6.1_
   Pampa_N1047_particiones_StrickClock_ConstSize Prueba3.xml
37 srun beast -beagle_GPU -beagle_order 1,2,1,2,1,2 -save_every 7500000 -save_state checkpoint_r6.2.txt -prefix r6.2_ -load_state
   checkpoint_r6.1.txt -force_resume Pampa_N1047_particiones_StrickClock_ConstSize Prueba3.xml
```

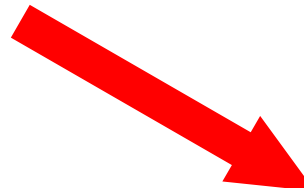
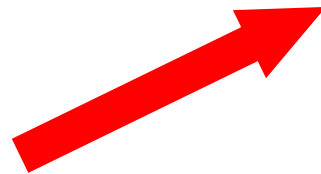


sh ▾ Anchura del tabulador: 8 ▾

Ln 30, Col 40 ▾

INS

Singularity



DReichLab/
AdmixTools



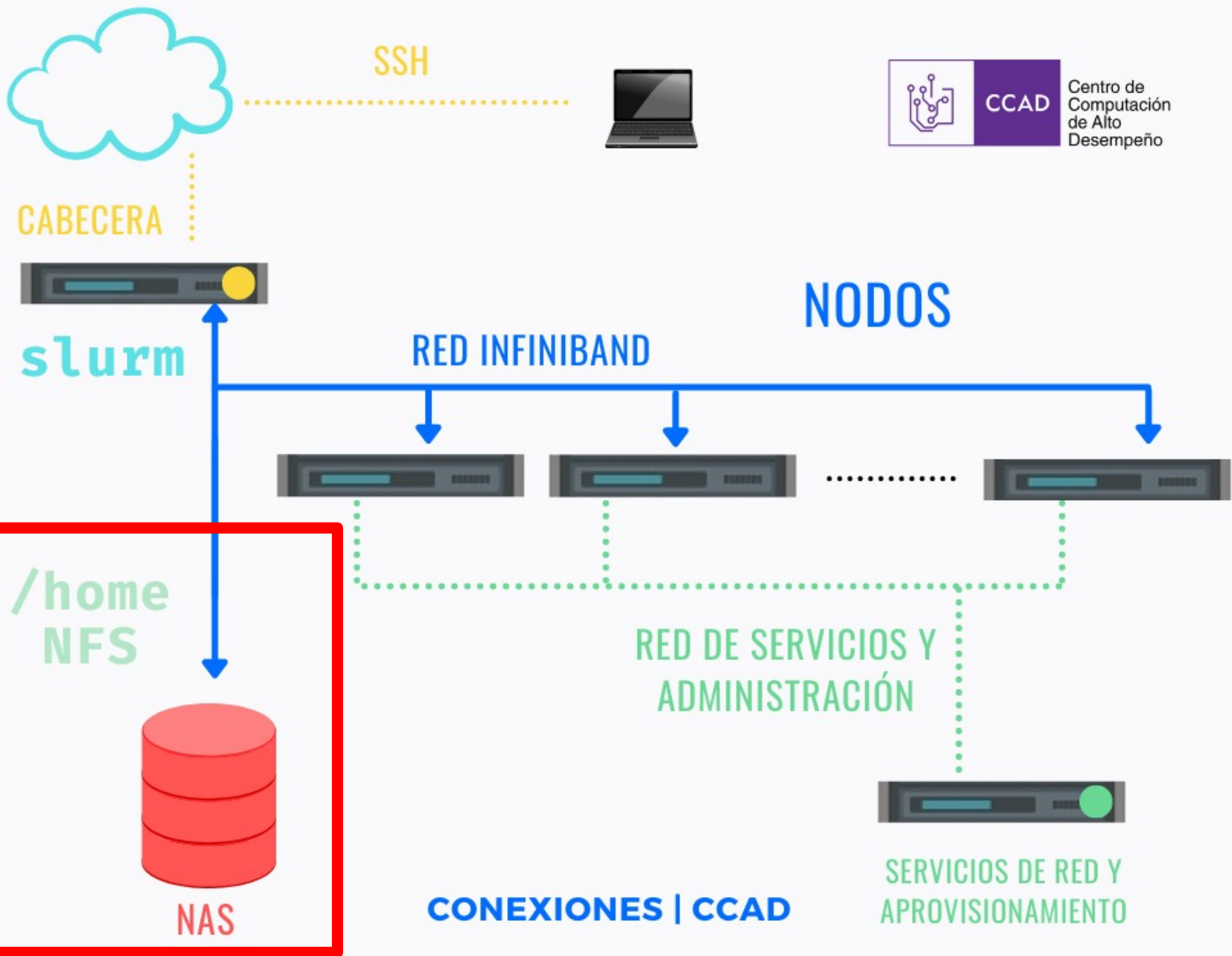
Tools test whether admixture occurred and more

2 Contributors 51 Issues 165 Stars 62 Forks

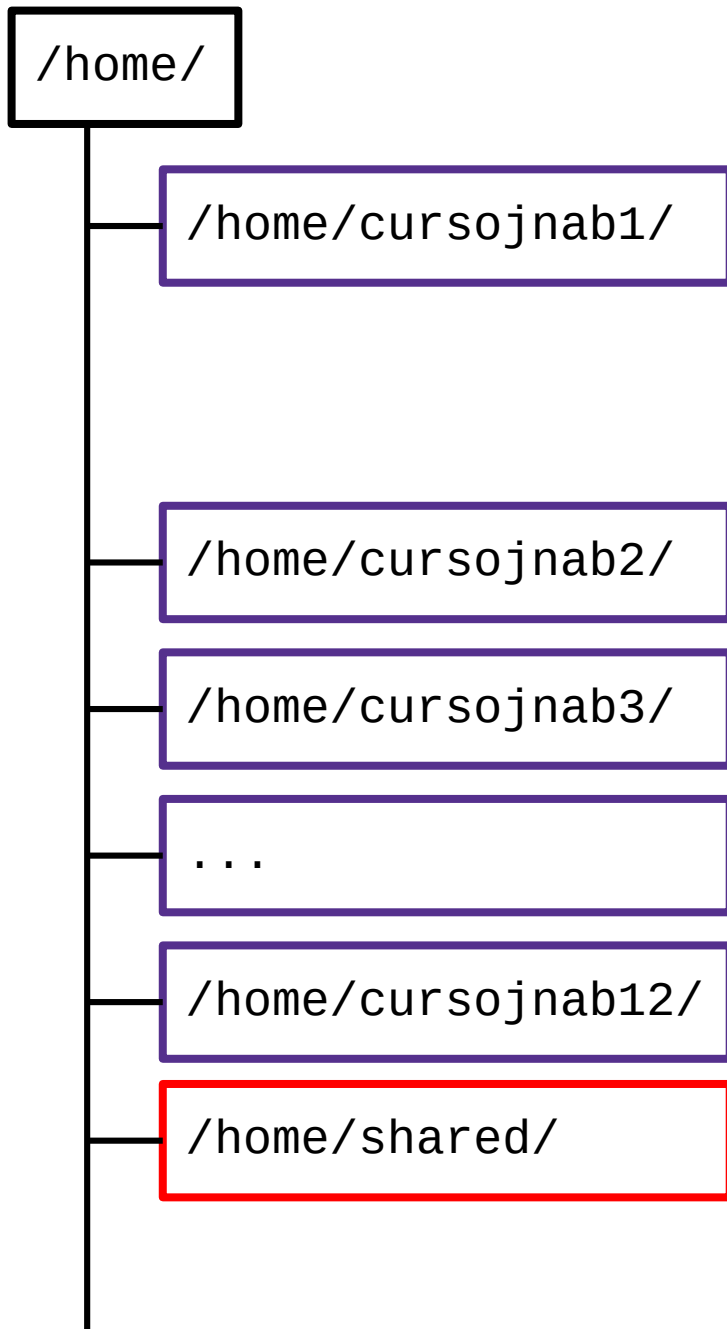
PLINK 1.90 beta

This is a comprehensive update to Shaun Purcell's [PLINK](#) command-line program, developed by [Christopher Chang](#) with support from the [NIH-NIDDK's Laboratory of Biological Modeling](#), the [Purcell Lab](#), and others. ([What's new?](#)) ([Credits.](#)) ([Methods paper.](#)) (Usage questions should be sent to the [plink2-users Google group](#), not Christopher's email.)

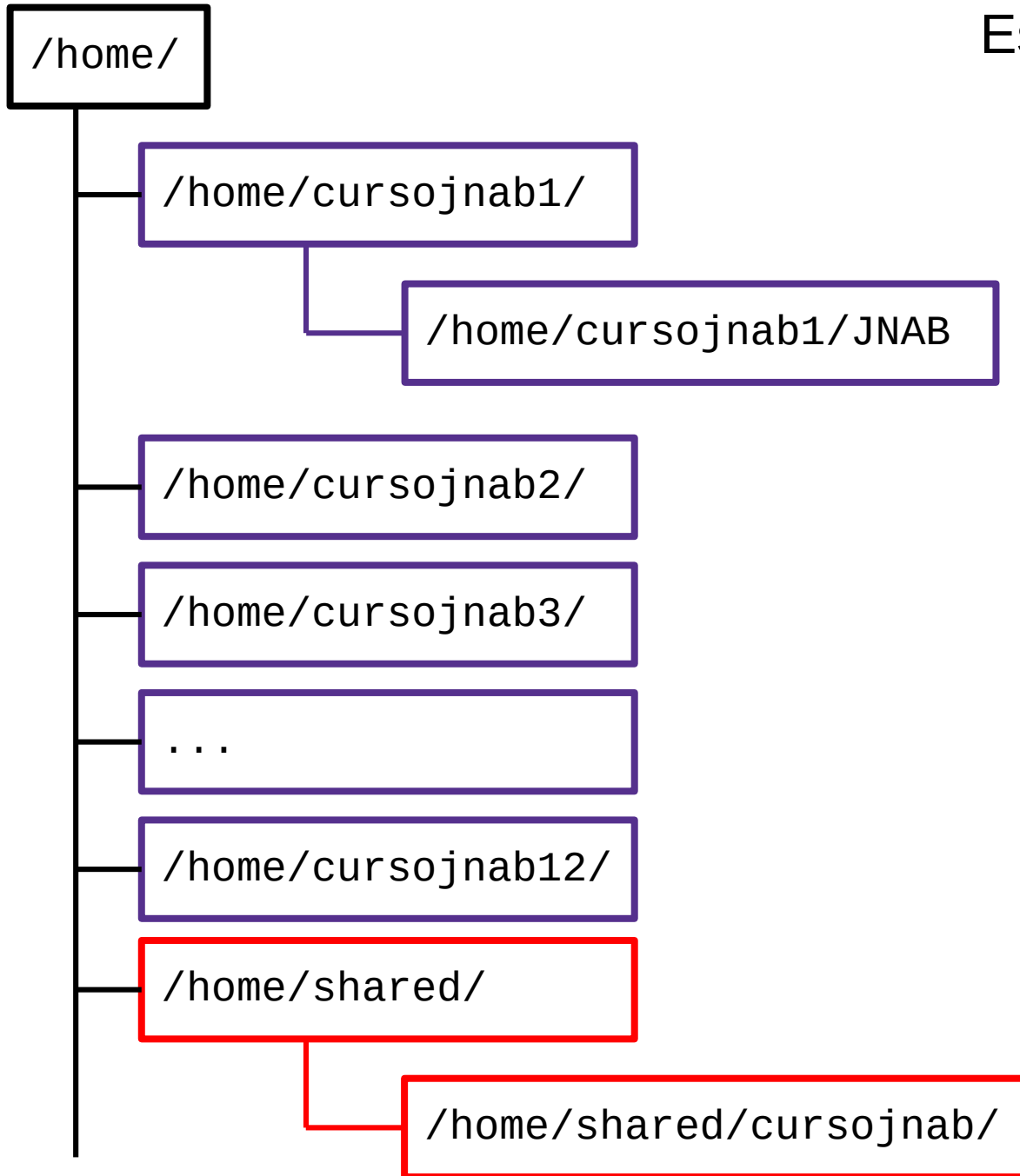
Y muchos más...!!!



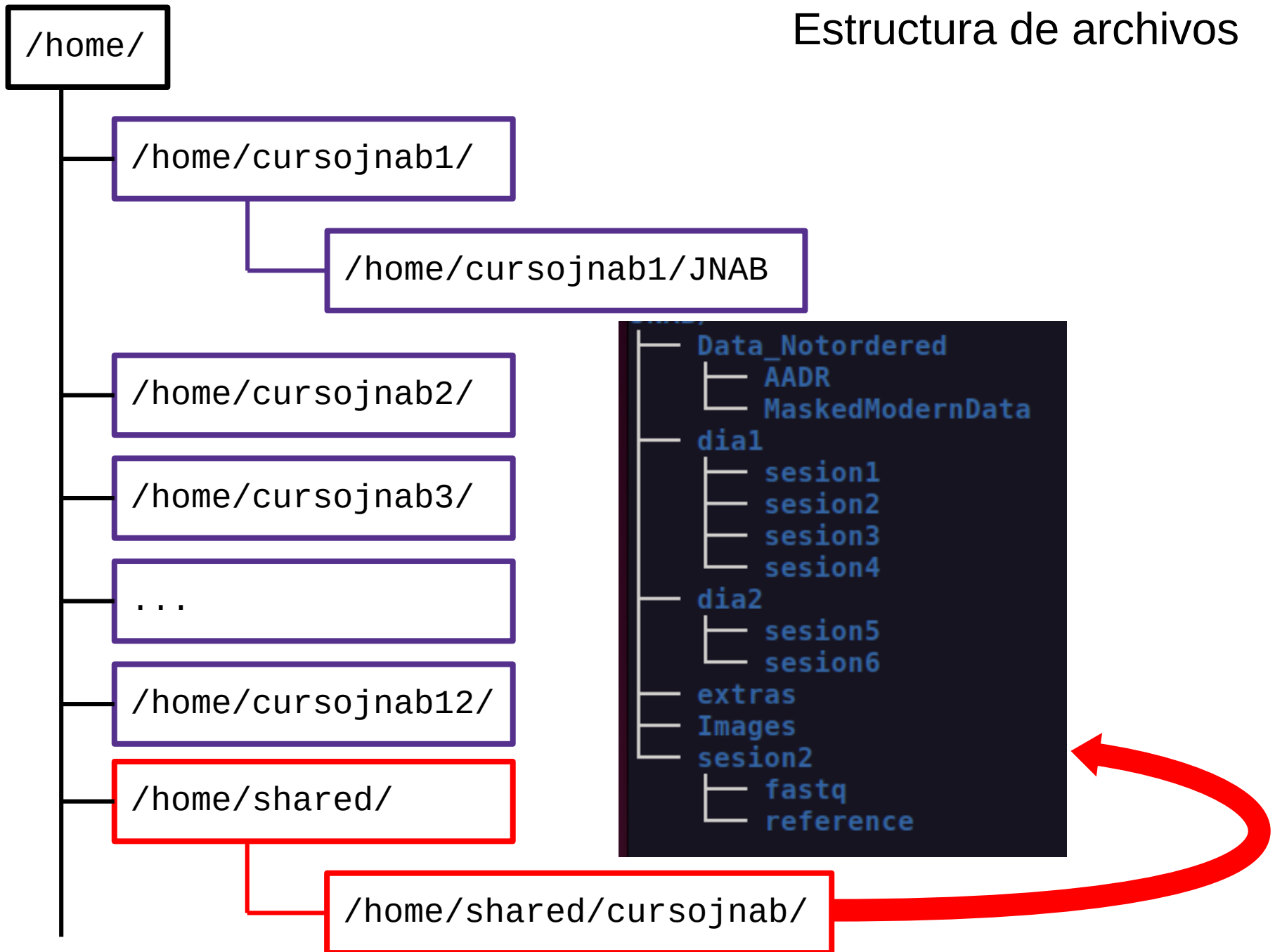
Estructura de archivos



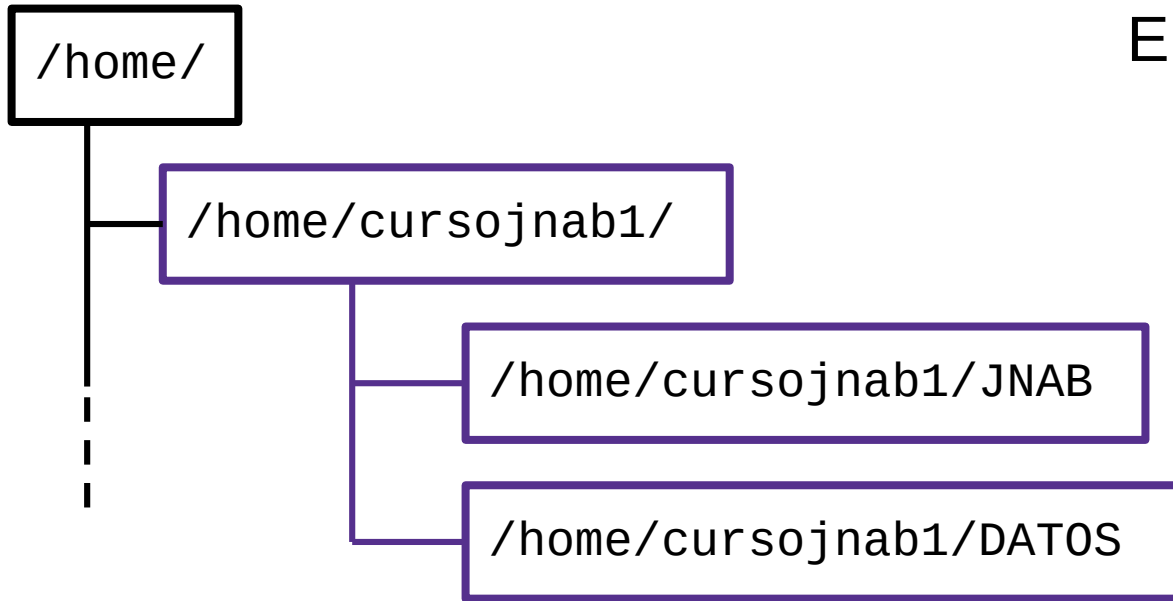
Estructura de archivos



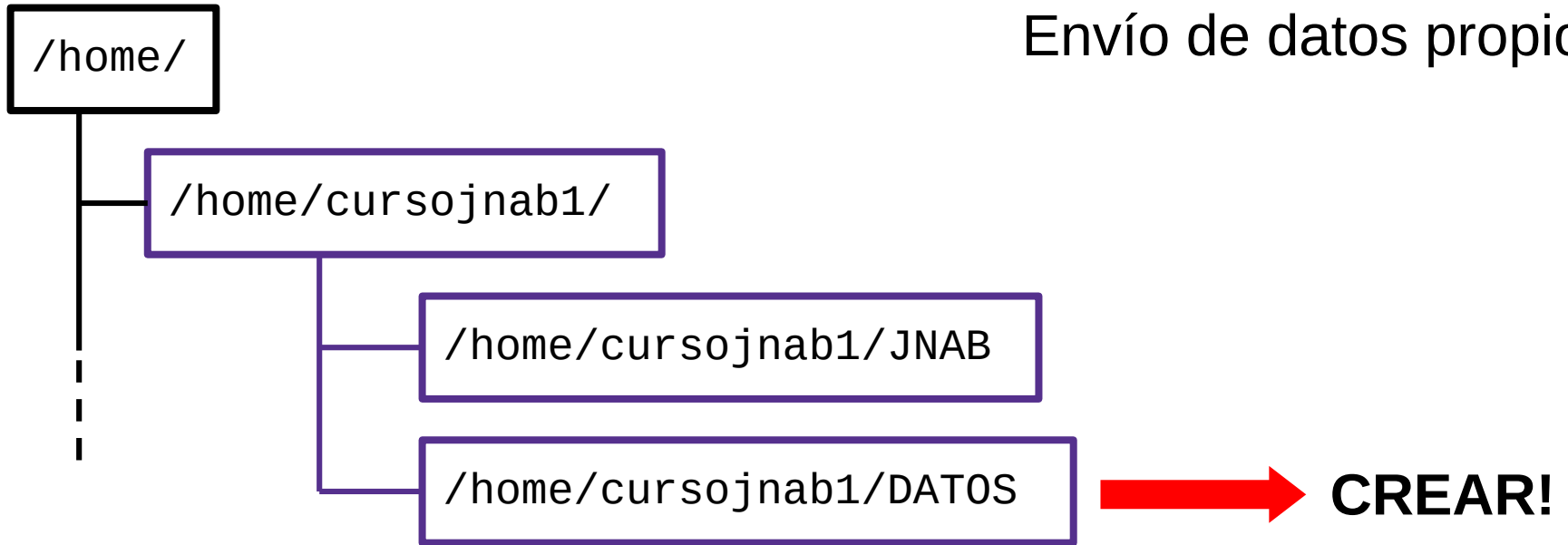
Estructura de archivos



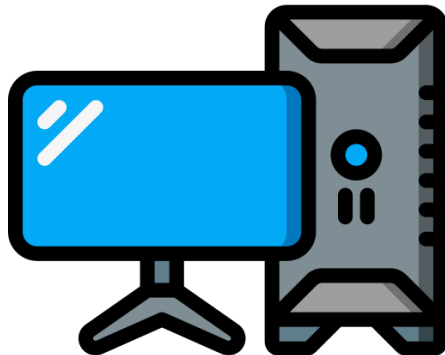
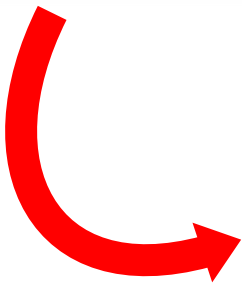
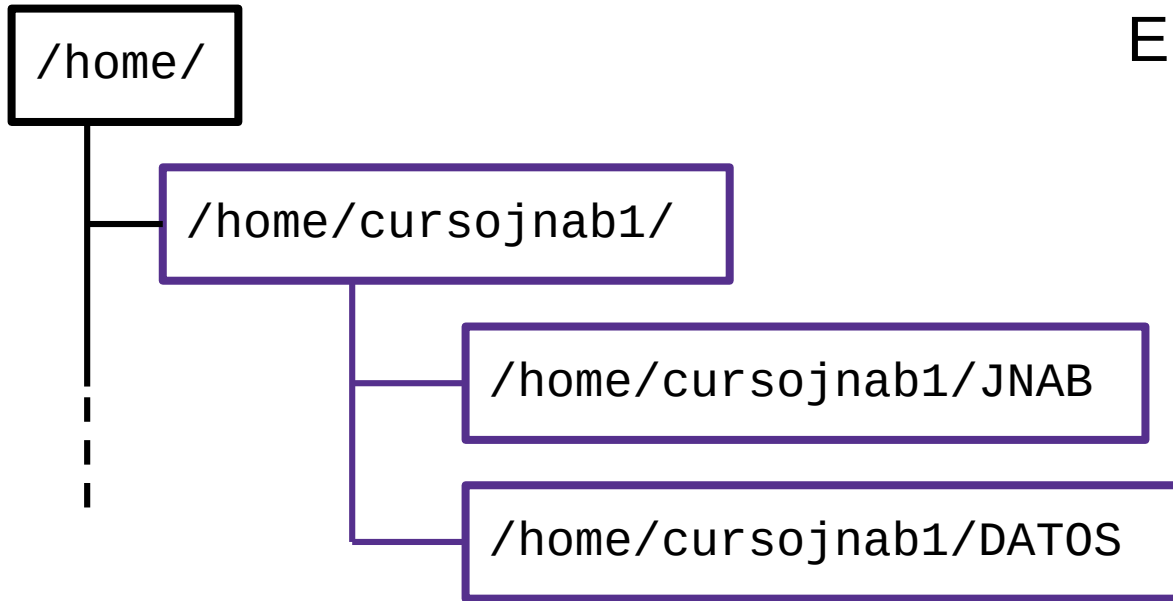
Envío de datos propios



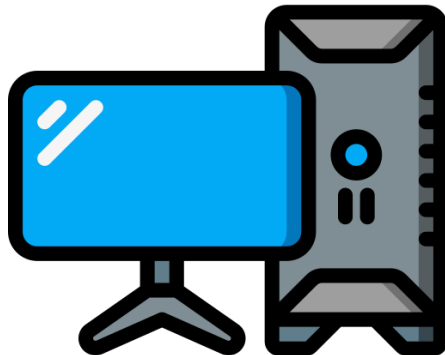
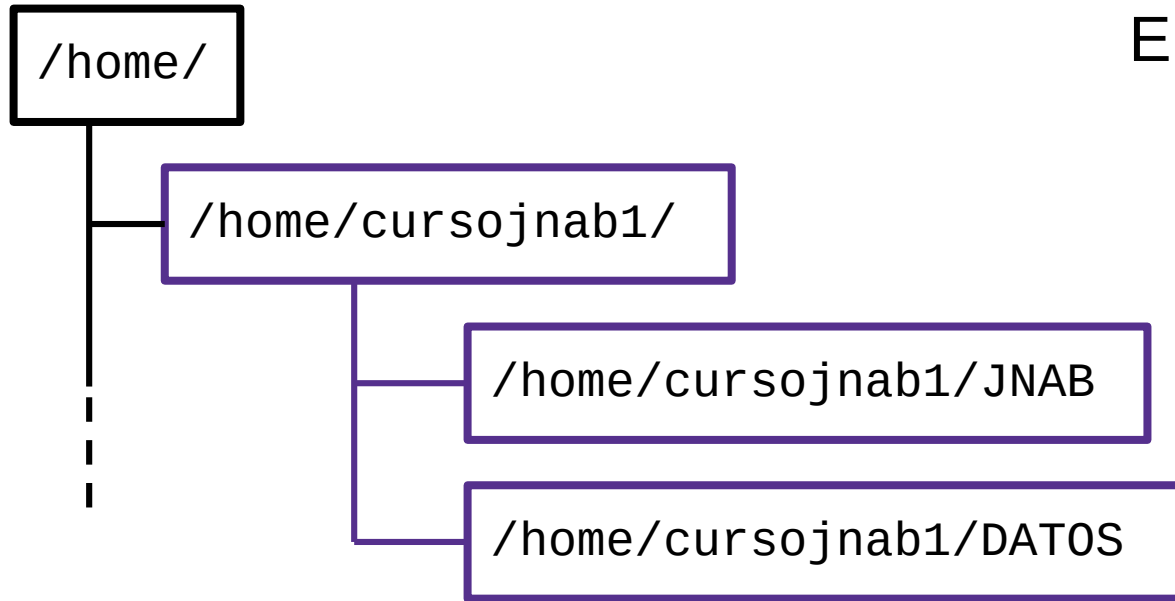
Envío de datos propios



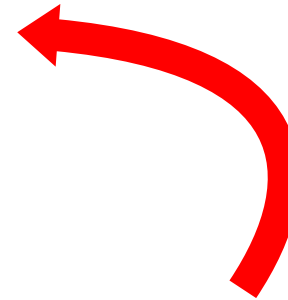
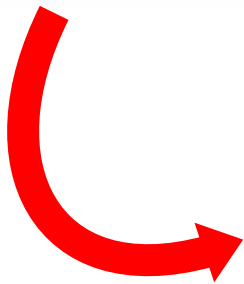
Envío de datos propios



Envío de datos propios



scp
"secure file copy"



Envío de datos propios

```
$ scp [ORIG_LOCAL] [USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

Envío de datos propios

```
$ scp [ORIG_LOCAL] [USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

```
$ scp [ORIG_LOCAL]
```

```
[USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

Envío de datos propios

```
$ scp [ORIG_LOCAL] [USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

```
$ scp [ORIG_LOCAL]  /media/USB/MISDATOS
```

```
[USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```


Envío de datos propios

```
$ scp [ORIG_LOCAL] [USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

```
$ scp [ORIG_LOCAL]  /media/USB/MISDATOS
```

```
[USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

```
 cursojnab8@mulatona.ccad.unc.edu.ar
```

Envío de datos propios

```
$ scp [ORIG_LOCAL] [USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

```
$ scp [ORIG_LOCAL]  /media/USB/MISDATOS
```

[USER@DEST_REMOTO:UBICACION]

 cursojnab8@mulatona.ccad.unc.edu.ar

 /home/cursojnab8/DATOS

Envío de datos propios

```
$ scp [ORIG_LOCAL] [USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

```
usuario@usuario-desktop:~/curso_JNAB/mios$  
usuario@usuario-desktop:~/curso_JNAB/mios$ scp -C clusters.odp npastor@mulatona.ccad.unc.edu.ar:/home/npastor/DATOS/  
Si tiene problemas para ingresar o solicita contraseña, consulte:  
https://dokuwiki.ccad.unc.edu.ar/doku.php?id=conexion  
=====  
clusters.odp 100% 3143KB 5.1MB/s 00:00  
usuario@usuario-desktop:~/curso_JNAB/mios$
```

Envío de datos propios

```
$ scp [ORIG_LOCAL] [USER@DEST_REMOTO:UBICACION]
```

```
usuario@usuario-desktop:~/curso_JNAB/mios$ scp -C clusters.odp npastor@mulatona.ccad.unc.edu.ar:/home/npastor/DATOS/  
Si tiene problemas para ingresar o solicita contraseña, consulte:  
https://dokuwiki.ccad.unc.edu.ar/doku.php?id=conexion  
=====
```

clusters.odp	100%	3143KB	5.1MB/s	00:00
--------------	------	--------	---------	-------

```
usuario@usuario-desktop:~/curso_JNAB/mios$
```

- Si los datos no están comprimidos uso la opción “-C”
- Recordar previamente crear la carpeta “DATOS”
- Errores posibles?? Rutas, rutas, rutas, siempre rutas...

Trabajando en CLUSTERS



CCAD

Centro de Computación
de Alto Desempeño de la
Universidad Nacional de Córdoba



Universidad
Nacional
de Córdoba

Vamos a jugar un poco!



BASH
THE BOURNE-AGAIN SHELL