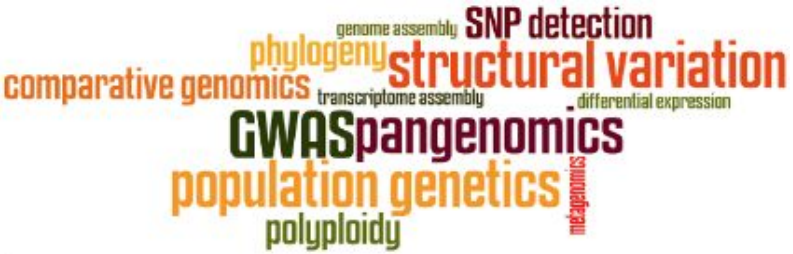
SouthGreen bioinformatics platform

Session de formation 2023

SouthGreen bioinformatics platform

bioinformatics platform dedicated to the genetics and genomics of tropical and Mediterranean plants and their pathogens



Mutualisation

Cacao | Banana | Coffee | Rice | Palm | *Cassava* | *Pseudocercospora* | *Magnaporthe*

Cacao | Banana | Coffee | Rice | Palm | *Cassava* | *Pseudocercospora* | *Magnaporthe*

.fr

SouthGreen bioinformatics platform

Alliance Bioversity & CIAT

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

cirad

INRAE

4 institutes

diade

PHIM

agAP

3 research units

25+

IFB INSTITUT FRANÇAIS DE BIOINFORMATIQUE

Storage and computing resources

Tools

Trainings

400+

Storage and computing resources

Meso@LR au CINES
1090 threads :
- 35 standard nodes
- 2 bigmem nodes
- 1 GPU node

500 To of replicated storage

CINES
1130 threads:
- 30 standard node
- 1 supermem node
- 1 GPU node

150 To on 3 NAS + 210 To scratch

400 +

600+ tools

Resources mutualised at Meso@LR through the **Mudis4Ls** project (purchase/storage/data)

Collaborative development of tools

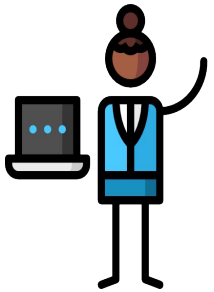
Genomics

- Pangenomic
- Gene families
- Comparative
- Phylogeny
- Assemblies
- Annotation
- Data mining

Diversity exploration

- genotype manipulation
- mosaic manipulation

Metagenomic



+20 tools

web applications (16)

visualisation (8)

workflows(5)

packages (4)

https://github.com/SouthGreenPlatform/

I-Trop

Plant & Health Bioinformatics Platform

Institut de Recherche pour le Développement FRANCE

https://bioinfo.ird.fr/

afaq ISO 9001 Qualité AFNOR CERTIFICATION


AURORE COMTE


JACQUES DAINAT


ALEXIS DEREEPER


BRUNO GRANOUILLAC


JULIE ORJUELA-


NDOMASSI TANDO


CHRISTINE TRANCHANT

bioinfo@ird.fr

@ItropBioinfo

SouthGreen bioinformatics platform

ASTRE Animal · Santé Territoires · Risques · Écosystèmes

Florian Charriat
Antoni Exbrayat

intertryp Host-vector-parasite-environment interactions in neglected tropical diseases due to trypanosomatids

Guilhem Sempere

MiVEGEC Maladies Infectieuses et Vecteurs Écologie, Génétique, Évolution et Contrôle

Bruno Granouillac
Jacques Dainat

i-Trop bioinformatics

TransVIH MI

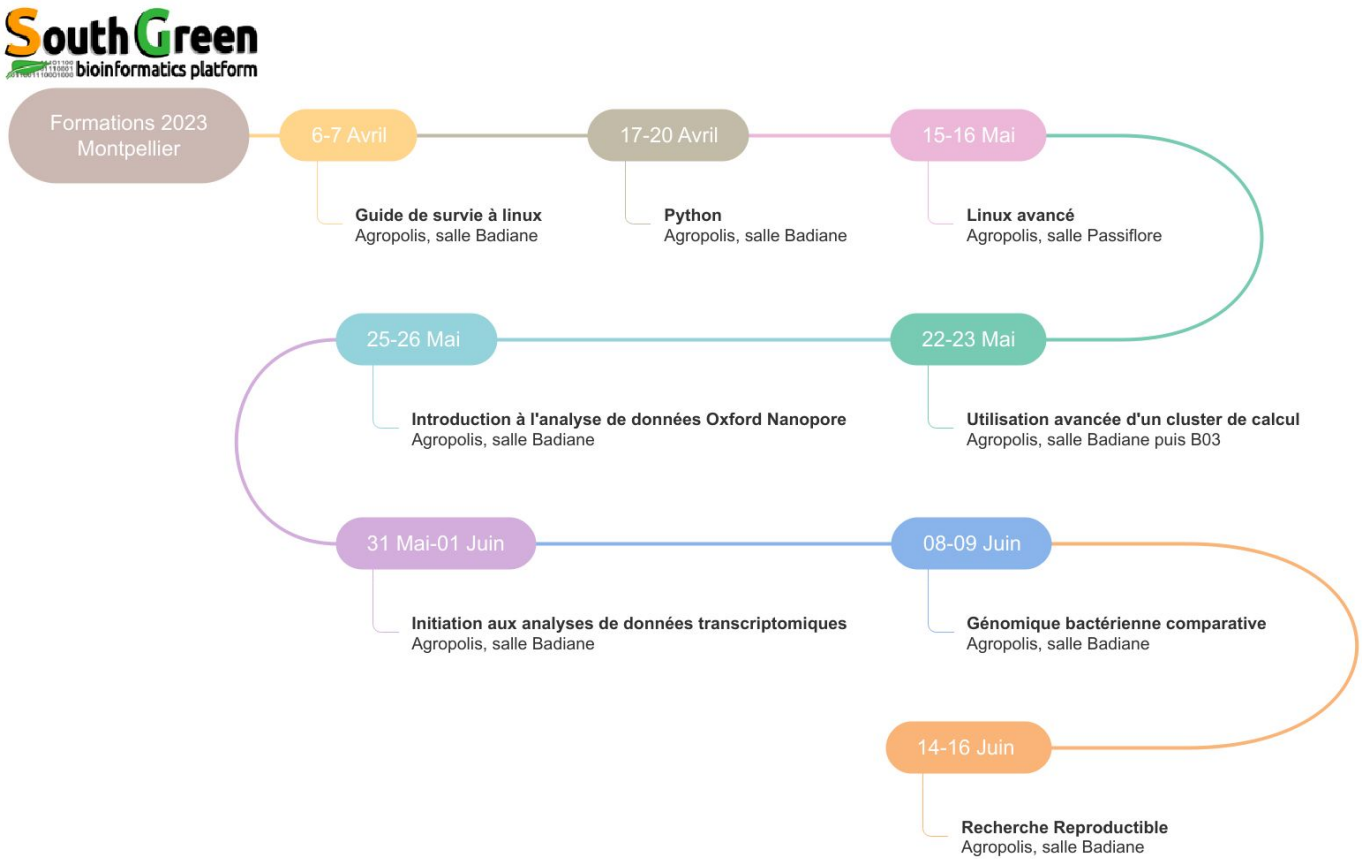
Nicolas Fernandez

IFB INSTITUT FRANÇAIS DE BIOINFORMATIQUE

Thomas Denecker

And more collaborators !

South Green bioinformatics platform



Modules de formation 2023

- Toutes nos formations : https://southgreenplatform.github.io/trainings/
- Topo & TP : Cluster avancé
- Environnement de travail : Logiciels à installer

HPC avancé

www.southgreen.fr

https://southgreenplatform.github.io/trainings

Objectifs du module

Objectif

Acquérir des notions avancées pour utiliser un cluster

Applications

- Installer ses propres logiciels
- Créer ses propres modules environment
- Lancer des jobs arrays via Slurm
- Utiliser et installer Singularity
- Créer des conteneurs singularity

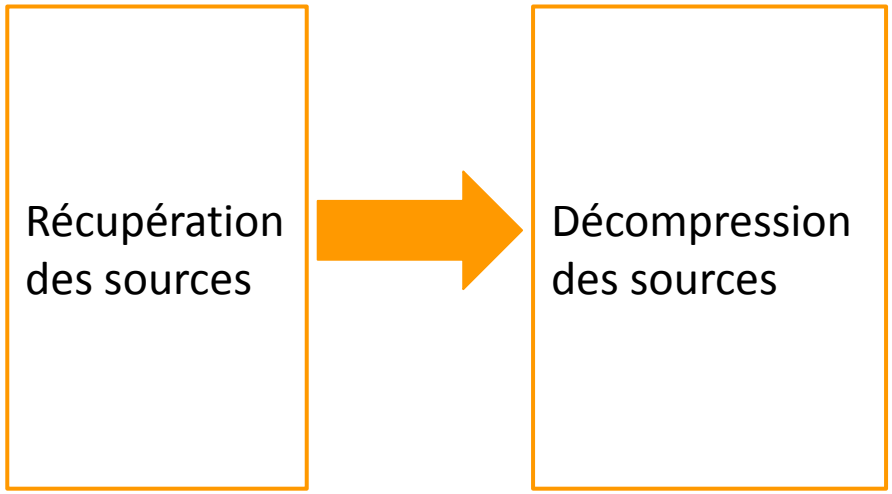
INSTALLER DES LOGICIELS

4 grandes étapes

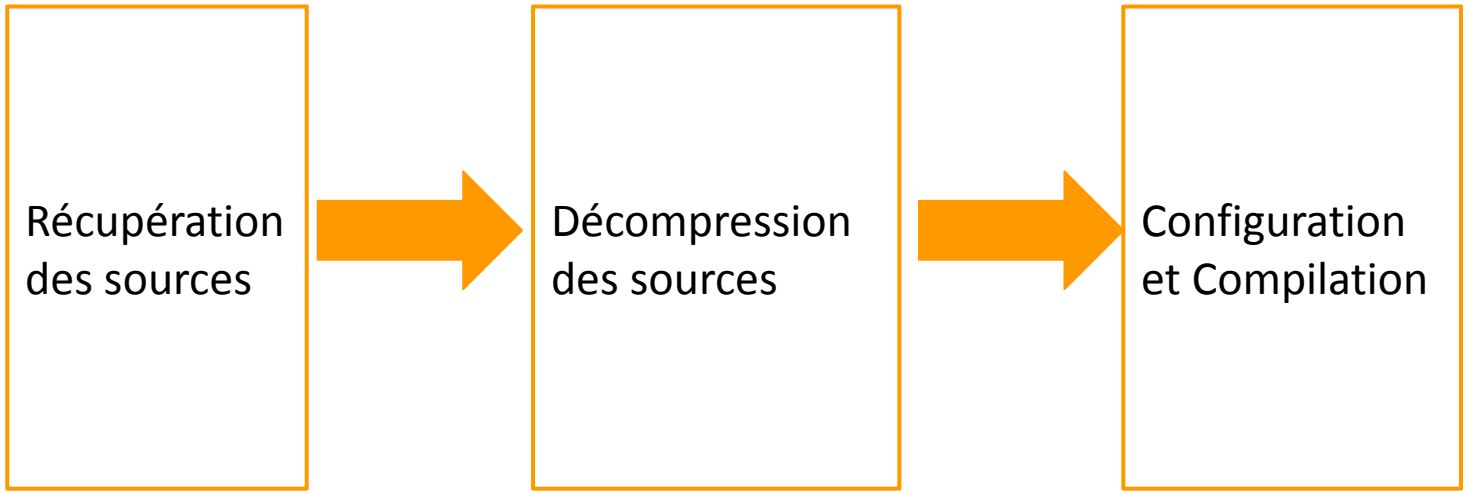
Récupération des sources

Etape 1

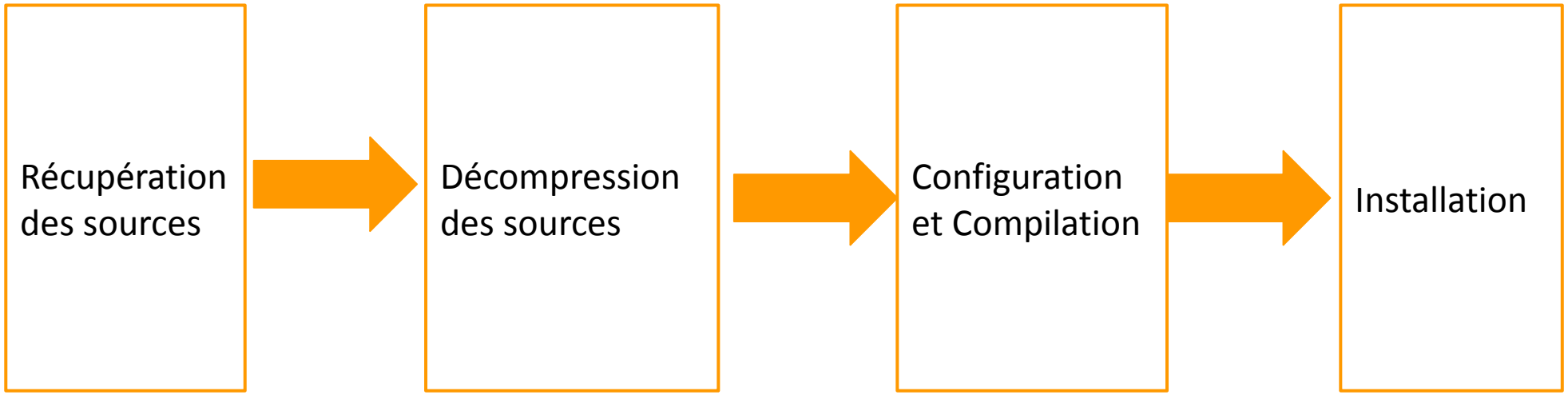
4 grandes étapes



4 grandes étapes



4 grandes étapes



Organiser son arborescence

- Créer un répertoire sources dans son home
- Créer un répertoire softs
- Créer dans softs un répertoire par logiciel et par version

Récupération des sources

- Téléchargement direct depuis le site
- Utiliser wget + lien vers le logiciel
- Faire un git clone du dépôt

Décompression des sources

- Fichier .tar.gz: tar xvfz fichier.tar.gz
- Fichier tar: tar -xvf fichier.tar
- Fichier .tar.xz: tar xf fichier.tar.xz
- Fichier tar.bz2: tar xjf fichier.tar.bz2
- Fichier .zip: unzip fichier.zip

Configuration et Compilation

- Suivre les instructions d'installation: README ou INSTALL

./configure --help
./configure
./configure --prefix=/home/user/softs/name-version

Détecte les infos systèmes et configure le code source pour s'y adapter

Configuration et Compilation

- Suivre les instructions d'installation: README ou INSTALL

./configure --help
./configure --prefix=/home/user/softs/name-version

Détecte les infos systèmes et configure le code source pour s'y adapter

make

Réalise la compilation du programme

Installation

make install

Copie les binaires (exécutables) produits à l'endroit spécifié dans le prefix

Installation

make install

Copie les binaires (exécutables) produits à l'endroit spécifié dans le prefix

```
echo  'export
PATH=/home/user/soft/bin:$PAT
H' >> ~/.bashrc
source  ~/.bashrc
```

Modifier son ~/.bashrc pour pouvoir lancer le logiciel

INSTALLER DES PACKAGES PERL

Récupération des sources

- Téléchargement direct depuis le site
- Utiliser wget + lien vers le logiciel
- Faire un git clone du dépôt

Décompression des sources

- Fichier .tar.gz: tar xvfz fichier.tar.gz
- Fichier tar: tar -xvf fichier.tar
- Fichier .tar.xz: tar xf fichier.tar.xz
- Fichier tar.bz2: tar xjf fichier.tar.bz2
- Fichier .zip: unzip fichier.zip

Configuration et Compilation

- Suivre les instructions d'installation: README ou INSTALL

perl Makefile.PL
PREFIX=~/lib/perl5

Détecte les infos systèmes et configure le code source pour s'y adapter

Configuration et Compilation

- Suivre les instructions d'installation: README ou INSTALL

perl Makefile.PL
PREFIX=~/lib/perl5

Détecte les infos systèmes et configure le code source pour s'y adapter

make
make test

Réalise la compilation du programme

Installation

make install

Copie les binaires (exécutables) produits à l'endroit spécifié dans le prefix

Installation

make install

Copie les binaires (exécutables) produits à l'endroit spécifié dans le prefix

```
echo  'export
PERL5LIB=~/lib/perl5/site_perl'
>> ~/.bashrc
source  ~/.bashrc
```

Modifier son ~/.bashrc pour pouvoir utiliser ses propres librairies perl

Autres installations possibles

cpan -i module_perl

Installe le *module_perl*

perl -CPAN -e 'install module_perl'

Installe le *module_perl*

INSTALLER DES PACKAGES PYTHON

Récupération des sources

- Téléchargement direct depuis le site
- Utiliser wget + lien vers le logiciel
- Faire un git clone du repository

Décompression des sources

- Fichier .tar.gz: tar xvfz fichier.tar.gz
- Fichier tar: tar -xvf fichier.tar
- Fichier .tar.xz: tar xf fichier.tar.xz
- Fichier tar.bz2: tar xjf fichier.tar.bz2
- Fichier .zip: unzip fichier.zip

Installation

python setup.py install --user

Copie les binaires (exécutables) produits à l'endroit spécifié dans le prefix

Installation

python setup.py install --user

Copie les binaires (exécutables) dans le répertoire ~/.local/lib/pythonX.X/site-packages/

```
echo  'export PYTHONPATH=$HOME/.local/lib/pythonX.X/site-packages:$PYTHONPATH' >> ~/.bashrc
source  ~/.bashrc
```

Modifier son ~/.bashrc pour pouvoir utiliser ses propres packages python

Autre installation possible

python -m pip install package_python

Installe le *package_python dans l*e répertoire ~/.local/lib/pythonX.X/site-packages/

INSTALLER DES LIBRAIRIES R

Organiser son arborescence

- Créer le répertoire Rlibs
- Créer un fichier ~/.Renviron avec :

R_LIBS=/path/to/Rlibs

Récupération des sources

- Téléchargement direct depuis le site
- Utiliser wget + lien vers le logiciel
- Faire un git clone du repository

Décompression des sources

- Fichier .tar.gz: tar xvfz fichier.tar.gz
- Fichier tar: tar -xvf fichier.tar
- Fichier .tar.xz: tar xf fichier.tar.xz
- Fichier tar.bz2: tar xjf fichier.tar.bz2
- Fichier .zip: unzip fichier.zip

Installation

R CMD INSTALL --library=/path/to/Rlibs packageR.tar.gz

Copie les librairies produites à l'endroit spécifié dans le prefix

Autres installations

R
install.packages("nom_package")

Installe le package R spécifié dans /home/user/R

INSTALLER DES SOFTS AVEC CONDA

Conda c’est quoi?

- Package manager écrit en python
- Permet la création d’environnement virtuel pour éviter d'éventuel problème de dépendance
- Permet d’installer des logiciels bioinfos depuis le dépot Bioconda (+7000 outils référencés)
-
  - https://anaconda.org/bioconda/repo

Conda c’est quoi?

bioconda / packages

Packages | Files | Install Instructions

Filters

Type: all Access: all Label: all

Package Name	Access	Summary	Updated
visor	public	Haplotype-aware structural variants simulator for short, long and linked reads	2022-05-10
python-chado	public	A Python library for interacting with Chado database.	2022-05-10
checkv	public	Assess the quality of metagenome-assembled viral genomes.	2022-05-10
extract_vcf	public	Tool to extract information from vcf file.	2022-05-10
mimseq	public	Modification-induced misincorporation tRNA sequencing.	2022-05-10
irma	public	IRMA: Iterative Refinement Meta-Assembler for the robust assembly, variant calling, and phasing of highly variable RNA viruses.	2022-05-10
agc	public	Assembled Genomes Compressor (AGC) is a tool designed to compress collections of de-novo assembled genomes. It can be used for various types of datasets: short genomes (viruses) as well as long (humans).	2022-05-10
macrel	public	A pipeline for AMP (antimicrobial peptide) prediction	2022-05-09
10x_bamtofastq	public	Tool for converting 10x BAMs produced by Cell Ranger, Space Ranger, Cell Ranger ATAC, Cell Ranger DNA, and Long Ranger back to FASTQ files that can be used as inputs to re-run analysis	2022-05-09
regenie	public	Regenie is a C++ program for whole genome regression modelling of large genome-wide association studies (GWAS).	2022-05-09
nanoq	public	Ultra-fast quality control and summary reports for nanopore reads	2022-05-09
r-grain	public	Probability propagation in graphical independence networks, also known as Bayesian networks or probabilistic expert systems.	2022-05-09
magphi	public	A bioinformatics tool allowing for examnination and extraction of genomic features using seed sequences.	2022-05-09

Environnements

Création d'un environnement

```
(base) [formateur2@master0 ~]$ conda create --name formation
```

Activation de l'environnement

```
(base) [formateur2@master0 ~]$ conda activate formation
```

Installation de logiciel dans cet environnement virtuel

```
(formation) [formateur2@master0 ~]$ conda install samtools bwa
(formation) [formateur2@master0 ~]$ which bwa
~/miniconda3/envs/formation/bin/bwa
```

Exporter et partager un environnement

```
(formation) [formateur2@master0 ~]$ conda env export > formation.yaml
```

```
(base) [drocg@muse-login01 cond]$ conda env create -n
new_environnement -f formation.yaml
(base) [drocg@muse-login01 cond]$  conda activate new_environnement
(new_environnement) [drocg@muse-login01 cond]$ which bwa
~/miniconda3/envs/new_environnement/bin/bwa
```

Environnements

Lister les environnements

```
(formation) [formateur2@master0 ~]$ conda env list
# conda environments:
#
base                     /home/formateur2/miniconda3
formation             *  /home/formateur2/miniconda3/envs/formation
```

Désactivation de l'environnement

```
(formation) [formateur2@master0 ~]$ conda deactivate
```

Supprimer un environnement

```
(formation) [formateur2@master0 ~]$ conda env remove formation
```

Practice

Installation de logiciels

1

Aller sur le Practice 1 *du github*

MODULE ENVIRONMENT

Module Environment

- 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

Module Environment

➢ 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

Créer ses propres modulefiles

- Fichier tcl permettant de gérer ses logiciels
- Permet de charger ses propres logiciels installés
- Permet de choisir les versions de ses logiciels
- Plus de modifications du bashrc

Exemple de modulefile

```
#%Module1.0#####################################################################
##
## modules modulefile
##
## modulefiles/modules.  Generated from modules.in by configure.
##
proc ModulesHelp { } {
        global version modroot

        puts stderr "blast/2.4.0+ version 2.4.0 de blast"
}

module-whatis   "charge la version 2.4.0 de blast.
URL: https://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi?PAGE_TYPE=BlastDocs&DOC_TYPE=Download
Description:BLAST finds regions of similarity between biological sequences
"

conflict blast


# for Tcl script use only
set     version         2.4.0+
set     topdir          /usr/local/ncbi-blast-$version


prepend-path    PATH            $topdir/bin
prepend-path    MANPATH         $topdir/man
```

Partie ModulesHelp

```
proc ModulesHelp { } {
        global version modroot

        puts stderr "blast/2.4.0+ version 2.4.0 de blast"
}
```

Permet de préciser la sortie de module help

Partie module-whatis

```
module-whatis   "charge la version 2.4.0 de blast.
URL: https://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi?PAGE_TYPE=BlastDocs&DOC_TYPE=Download
Description:BLAST finds regions of similarity between biological sequences
"
```

Permet de préciser la sortie de module whatis

Utilisation de conflict

```
conflict blast
```

Empêche le chargement du module si celui-ci est déjà monté

Utilisation de module load

```
module load bioinfo/softs/version
```

Permet de charger les modules des dépendances

Définition de variable et du PATH

```
# for Tcl script use only
set     version         2.4.0+
set     topdir          /usr/local/ncbi-blast-$version


prepend-path    PATH            $topdir/bin
prepend-path    MANPATH         $topdir/man
```

- Avec set : définition de variable pour le script Tcl
- Prepend-path: positionne les variables d'environnement (remplace la ligne du .bashrc)

Activation de l'utilisation de ses modulefiles

- Créer un répertoire ~/privatemodules

  mkdir ~/privatemodules

- Placer son modulefile à l'intérieur

- Modifier son ~/.bashrc pour utiliser ses modulefiles avec:
  module use --append $HOME/privatemodules

- Re-sourcer son ~/.bashrc
  source ~/.bashrc

Practice

Module environment

2

Aller sur le Practice2 du github

SLURM

Commandes de bases: rappel

- Liste des partitions :
  scontrol show partition

- Liste des noeuds (num cpu/memory)

sinfo -Ne --format "%.15N %.4c %.7z %.7m" -S c,m,N | uniq

- Vérifier si job actif

squeue -u <USER>

- Supprimer un job

scancel <JOB_ID>

- Connaître le noeud sur lequel un job terminé a été lancé

sacct -j JOB_ID --format=JobID,Start,End,Elapsed,NCPUS,NodeList,NTasks

LES JOBS ARRAY

Data parallelism

- Façon simple de mettre en oeuvre la parallélisation par les données
- Pour lancer un ensemble de calculs “identiques” (sur différents fichiers d’entrée) à partir d’un seul script de soumission

Job array

- *$SBATCH --array* pour lancer un job array
  - --array=0-X : pour définir la plage (Tableau d'index de 0 à X)
  - --array=0-X%Y : pour définir la plage et avec Y running en même temps

- Variables d'environnement:
  - *${SLURM_JOB_ID}*: précise le job ID
  - *${SLURM_ARRAY_JOB_ID}*: précise l'ID du job array
  - *{SLURM_ARRAY_TASK_ID}*: précise le nombre de tâches job array

Exemple

```
#!/bin/bash
#SBATCH --partition=short ### Partition
#SBATCH --job-name=ArrayJob ### Nom du job
#SBATCH --time=00:10:00 ### temps limite d'execution
#SBATCH --nodes=1 ### Nombre de noeuds
#SBATCH --ntasks=1 ### Nombre de tâches par job array
#SBATCH --array=0-19%4 ### Tableau d'index de 0 à 19 avec 4 jobs lancés à la fois

echo "I am Slurm job ${SLURM_JOB_ID}, array job ${SLURM_ARRAY_JOB_ID}, and array task ${SLURM_ARRAY_TASK_ID}."
```

Fichiers d’erreur et de sortie

- sortie : job_name.o$JOB_ID.$SLURM_JOB_ID
- erreur : job_name.e$JOB_ID.$SLURM_JOB_ID

Job array vs jobs simples

- Pour améliorer la lisibilité des scripts
- Pour faciliter la gestion des jobs :
  - suppression du job array : *scancel <JOBID>*
  - suppression d'une sous-tache : *scancel <JOBID>.<TASKID>*
- Pour limiter la charge du master

CONTRÔLE SLURM

Contrôle de jobs

scontrol hold <JOB_ID> : empêche un job (en queue) d'être lancé

scontrol release <JOB_ID> : repositionne le job hold dans la queue

scontrol suspend <JOB_ID>: suspend un job actif
scontrol resume <JOB_ID> : relance un job suspendu
scontrol requeue <JOB_ID>: repositionne le job dans la queue
scontrol update JobID=$jobid StartTime=MMDDYY: reprogramme un job mis en queu à une autre date

sbatch --dependency [Options]: dépendance des jobs

Workflow de jobs

--dependency=*after:<JOB_ID>*: démarre le job dès que <JOB_ID> commence

--dependency=*afterany:<JOB_ID>*: démarre le job dès que<JOB_ID> est terminé

--dependency=*afternotok:<JOB_ID>* : démarre le job dès que <JOB_ID> est terminé et en erreur

--dependency=afterok:<JOB_ID> : démarre le job dès que <JOB_ID> est terminé avec succès

--dependency=singleton: un seul job du même propriétaire te du même nom peut être lancé à la fois

Liens

- Slurm home page : https://www.schedmd.com/index.php
- Slurm documentation : https://slurm.schedmd.com/documentation.html Slurm
- cheat sheet : https://slurm.schedmd.com/pdfs/summary.pdf

Practice

Jobs array

3

Aller sur le Practice3 du github

SINGULARITY

Gestion logicielle sur un cluster HPC

- Au quotidien :
  - Compilation et installation
  - Mise à jour des logiciels
  - Utilisation de modules pour gérer l'utilisation des logiciels

- Problèmes :
  - Compilations complexes avec de nombreuses dépendances
  - Reproductibilité des compilations (versions dépendances et logiciels)
  - Compilation de nouveaux logiciels sur vieilles distributions

Une solution : les conteneurs d'applications

Docker	https://www.docker.com/
Shifter	https://github.com/NERSC/shifter
Singularity	http://singularity.lbl.gov/

Docker

- Les + :
  - Communauté
  - Dépôt central très riche

- Les - :
  - Accès root dans le conteneur
  - Forte isolation, pas d'accès à Infiniband et aux partages réseaux
  - Pas d'accès à l'affichage (donc pas de GPU)

Inadapté au HPC

Singularity

- Les + :
  - Accès au dépôt central de docker pour la création d'image
  - Accès Infiniband, aux partages réseaux et GPU
  - Pas d'accès root
  - Utilisable avec les modules et SGE comme un logiciel classique

- Les - :
  - Quelques bugs pour certaines images Docker
  - Intégration MPI nécessite OpenMPI 2

Adapté au HPC

Singularity: fonctionnalités

- Développé au laboratoire Lawrence Berkeley par le créateur de CentOS pour garantir :
  - **Portabilité** entre environnements Linux
  - **Reproductibilité**
  - **Mobilité** entre clusters

- Fonctionnalités :
  - Encapsulation de l'environnement utilisateur
  - Conteneur à base d'image
  - Droits utilisateurs identiques dans et hors conteneur
  - Montage automatique du répertoire utilisateur et des partages réseaux

Practice

Installation de Singularity

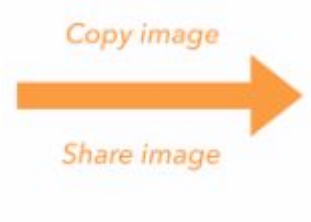
4

Aller sur le Practice4 *du github*

Singularity

Root / Superuser

- Création du container
- Build/install du container
- Modifications système du container



Regular User

- singularity shell ....
- singularity exec …
- singularity run ...

Lancement du conteneur

- shell : lance un shell au sein du conteneur

```
$ singularity shell ubuntu.img
Singularity: Invoking an interactive shell within container...

Singularity.ubuntu.img>
```

- exec : exécute une commande au sein du conteneur

```
$ singularity exec ubuntu.img python
Python 2.7.12 (default, Jul  1 2016, 15:12:24)
>>>
```

- run : lance un runscript au sein du conteneur

```
$ singularity run ubuntu.img
This is what happens when you run the container...
$
```

Lancement du conteneur

- Les commandes *singularity exec* et *singularity run* permettent d'exécuter des commandes

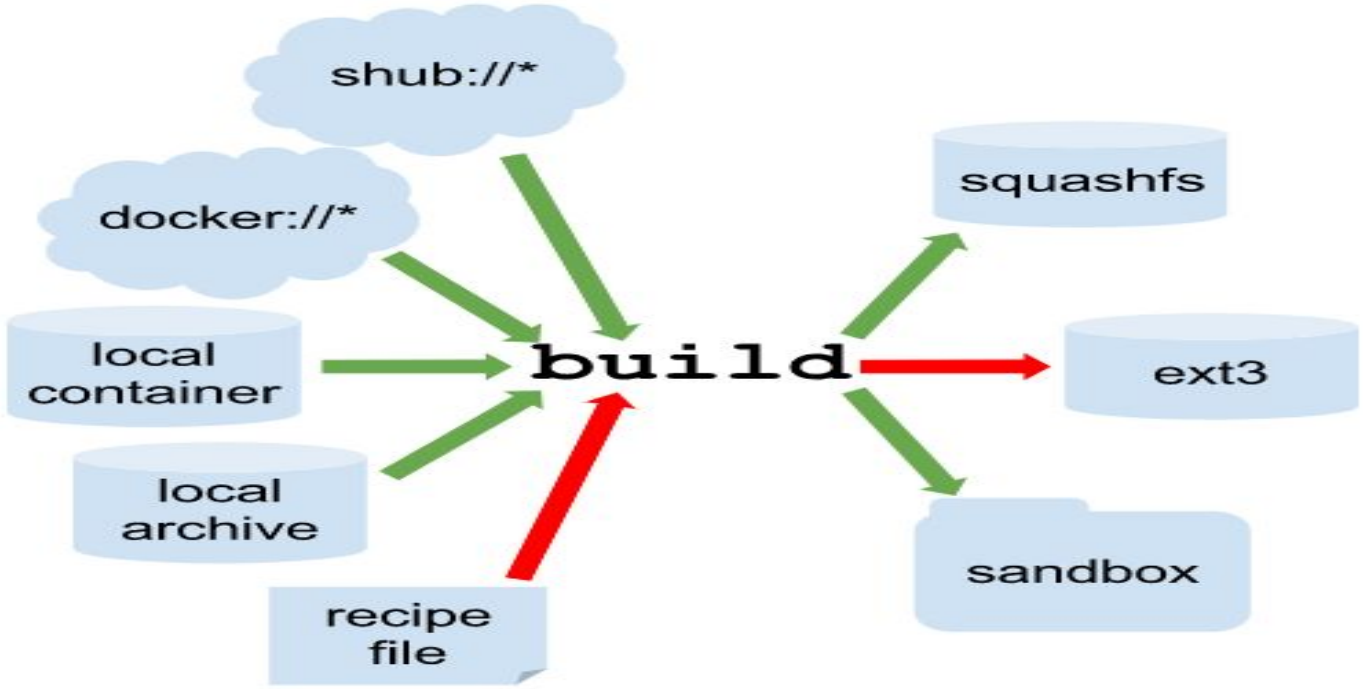
- *singularity run* lancera la commande par défaut définie dans le conteneur sans avoir à la préciser

ex: *singularity run bwa-0.7.17.simg + arg* lancera *bwa + arg*

- *singularity exec* lancera la commande précisée en arguments après *singularity exec <conteneur.simg>*

ex: *singularity exec blast-2.10.0+.simg blastn + arg* lancera *blastn + arg*

Création conteneur Singularity



https://github.com/SouthGreenPlatform/singularityRecipeFiles

Recipe conteneur Singularity

Bootstrap : définit le type de base de départ du conteneur

- shub (Singularity Hub)
- docker (Docker Hub)
- localimage
- yum (CentOS or Scientific Linux)
- debootstrap (Debian or Ubuntu)
- arch (Arch Linux)
- busybox
- zypper

From : définit la base de départ du conteneur.

Sections pour exécution de commandes :

- **%setup** : sur la machine hôte, hors du conteneur, après l'installation de l'OS
- **%post** : dans le conteneur après l'installation de l'OS
- **%runscript** : à chaque run du conteneur
- **%test** : à la fin de l'install de l'OS

Recipe container Singularity : exemple avec exec /bin/bash

```
BootStrap: docker
From: ubuntu:18.04
%labels
Maintainer Ndomassi Tando - IRD Itrop Cluster, DIADE Unit
base.image="ubuntu:18.04"
version="1"
software="ncbi-blast"
software.version="2.10.0+"
%help
URL: https://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi?PAGE_TYPE=BlastDocs&DOC_TYPE=Download
Description: This allows users to perform BLAST searches on their own server without size, volume and database restrictions. BLAST+ can be used with a command line so it can be integrated directly into your workflow
%environment
export PATH=$PATH:/usr/local/ncbi-blast-2.10.0+/bin
export LC_ALL=C
%post
apt update
apt install -y build-essential wget unzip python3 python-dev perl tar libidn11 libidn11-dev

cd /usr/local/
wget ftp://ftp.ncbi.nlm.nih.gov/blast/executables/blast+/LATEST/ncbi-blast-2.10.0+-x64-linux.tar.gz
tar xvfz ncbi-blast-2.10.0+-x64-linux.tar.gz

%runscript
exec /bin/bash "$@"
```

Recipe container Singularity : exemple avec exec /bin/bash

```
BootStrap: docker
From: ubuntu:18.04
%labels
Maintainer Ndomassi Tando - IRD Itrop Cluster, DIADE Unit
base.image="ubuntu:18.04"
version="1"
software="ncbi-blast"
software.version="2.10.0+"
%help
URL: https://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi?PAGE_TYPE=BlastDocs&DOC_TYPE=Download
Description: This allows users to perform BLAST searches on their own server without size, volume and database restrictions. BLAST+ can be used with a command line so it can be integrated directly into your workflow
%environment
export PATH=$PATH:/usr/local/ncbi-blast-2.10.0+/bin
export LC_ALL=C
%post
apt update
apt install -y build-essential wget unzip python3 python-dev perl tar libidn11 libidn11-dev

cd /usr/local/
wget ftp://ftp.ncbi.nlm.nih.gov/blast/executables/blast+/LATEST/ncbi-blast-2.10.0+-x64-linux.tar.gz
tar xvfz ncbi-blast-2.10.0+-x64-linux.tar.gz
```

```
%runscript
exec /bin/bash "$@"
```

→ **On utilise exec /bin/bash car il y a plusieurs commandes dans la suite logiciel** → **singularity exec**

Recipe container Singularity : exemple avec exec+ command pour singularity run

```
BootStrap: docker
From: ubuntu:18.04
%labels
Maintainer Ndomassi Tando - IRD Itrop Cluster, DIADE Unit
base.image="ubuntu:18.04"
version="1"
software="bamtools"
software.version="2.5.1"
%help
URL: https://github.com/pezmaster31/bamtools
Description: BamTools provides both a programmer's API and an end-user's toolkit for handling BAM files.
Launch the command: singularity run /PATH_TO_CONTAINER/bamtools-2.5.1.simg + arguments
%environment
export PATH=$PATH:/usr/local/bamtools-2.5.1/bin
export LC_ALL=C

%post
apt update
apt install -y build-essential wget zlib1g-dev libncurses5-dev libboost-iostreams-dev zlib1g-dev libgsl-dev libboost-graph-dev
libsuitesparse-dev liblpsolve55-dev libsqlite3-dev libmysql++-dev libbamtools-dev libboost-all-dev libbz2-dev liblzma-dev libncurses5-dev
libssl-dev libcurl3-dev cmake

cd /usr/local/
wget https://github.com/pezmaster31/bamtools/archive/refs/tags/v2.5.1.tar.gz
ttar xvfz v2.5.1.tar.gz
cd bamtools-2.5.1
mkdir build
cd build
cmake -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/usr/local/bamtools-2.5.1 ..
make
make install

%runscript
exec bamtools "$@"
```

On utilise exec bamtools pour ne lancer que bamtools → **singularity run**

Génération du conteneur

Interactive Development

```
sudo singularity build --sandbox tmpdir/ Singularity
```

```
sudo singularity build --writable container.img Singularity
```

BUILD ENVIRONMENT

Build from Recipe

```
sudo singularity build container.img Singularity
```

Build from Singularity

```
sudo singularity build container.img shub://vsoch/hello-world
```

Build from Docker

```
sudo singularity build container.img docker://ubuntu
```

Practice

Créer son conteneur Singularity

5

Aller sur le Practice5 *du github*

Module pour container Singularity : exemple

```
#%Module1.0#####################################################################
##
##
proc ModulesHelp { } {
      global name version prefix man_path

}

module-whatis   "loads the [module-info name] environment"

set     version      "2.3.7"

conflict bioinfo/guppy

set prefix /usr/local/bioinfo/guppy/2.3.7

if {![file exists $prefix]} {
      puts stderr "\t[module-info name] Load Error: $prefix does not exist"
      break
      exit 1
}

module load system/singularity/3.6.0

set topdir /usr/local/singularity-3.6.0/
 prepend-path PATH $topdir/container/wrappers/guppy-2.3.7
```

Construction d'un module pour container singularity

- Un conteneur peut contenir un ou plusieurs exécutables ceux-ci doivent être accessible dans le path de la machine hôte
- Etapes:
  - Créer un répertoire *wrappers/<nom_logiciel>-<version>*
  - Pour chaque exécutable du conteneur, créer un fichier du même nom
  - Le remplir avec :
  - *singularity exec <nom_conteneur>.simg <commande> $@*
  - les rendre executable avec: *chmod + x <nom_commande>*

Exemple pour guppy 2.3.7:

- on créera un répertoire guppy-2.3.7 contenant les fichiers guppy_basecaller, guppy_basecaller_server, guppy_basecaller_1d2, guppy_barcoder et guppy_aligner
- Par exemple pour le fichier guppy_basecaller on mettra:

singularity exec <path_to_container>/<container>.img guppy_basecaller $@

Practice

Lancer un job avec son conteneur Singularity

5

Aller sur le Practice6 du github

Formateurs

- Gaetan Droc
- Bruno Granouillac
- Nicolas Fernandez
- **Bertrand Pitollat**
- Sebastien Ravel
- Guilhem Sempere
- **Ndomassi Tando**







Merci pour votre attention !

SouthGreen bioinformatics platform

Merci de prendre 5 min pour remplir l'enquête

https://itrop-survey.ird.fr/index.php/515725?lang=fr

South Green bioinformatics platform

SUIVEZ NOUS SUR TWITTER !

South Green :
@green_bioinfo

I-Trop : @ItropBioinfo

N’oubliez pas de nous citer !

Comment citer les clusters?

"The authors acknowledge the IRD i-Trop HPC at IRD Montpellier for providing HPC resources that have contributed to the research results reported within this paper. URL: http://bioinfo.ird.fr/ "

“The authors acknowledge the CIRAD UMR-AGAP HPC (South Green Platform) at CIRAD montpellier for providing HPC resources that have contributed to the research results reported within this paper. URL: http://www.southgreen.fr”

SUIVEZ NOUS SUR TWITTER !

South Green : **@green_bioinfo**

I-Trop : **@ItropBioinfo**