

Initiation HPC cluster

www.southgreen.fr

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





Ndomassi TANDO,
Ingénieur systèmes
Animateur plateau, RMQ

Christine TRANCHANT-
DUBREUIL,
Bioinformaticienne



Aurore COMTE,
Bioinformaticienne



Julie ORJUELA-
BOUNOL,
Bioinformaticienne



 Valérie NOEL,
Bioinformaticienne



Bruno GRANOULLAC,
Systèmes d'information

EURO-QUALITY SYSTEM



- Formulaires de demandes
<https://bioinfo.ird.fr/index.php/cluster-fr/>
 - Comptes
 - Installation logiciels
 - Projets
- Incidents: contacter bioinfo@ird.fr
- Howtos:
<https://bioinfo.ird.fr/index.php/tutorials-fr/howtos-for-hpc-cluster-itrop/>
- Tutorials Slurm:
<https://bioinfo.ird.fr/index.php/tutorials-fr/slurm/>
- FAQ:
<https://bioinfo.ird.fr/index.php/faq-fr/>

ARCHITECTURE

- 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

- 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



CALCUL



- **Noeud maître**
Gère les ressources et les priorités des jobs
- **Noeuds de calcul**
Ressources (CPU ou mémoire RAM)

CALCUL



- **Noeud maître**
Gère les ressources et les priorités des jobs
- **Noeuds de calcul**
Ressources (CPU ou mémoire RAM)

STOCKAGE



- **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



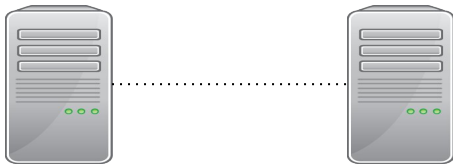
bioinfo-master.ird.fr

Rôle :

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

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

● 32 Noeuds de Calcul



nodeX
X : 0..31

Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet
- node0 à node31



Practice

Etape 1: Connexion, srin

1

Aller sur le [Practice 1](#) du github

Connexion
à bioinfo-
master.ird.f
r et
réservation
de
ressources



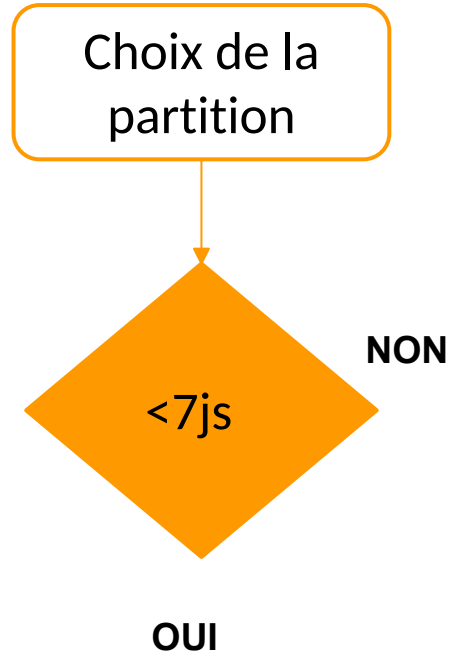
Etape 1
srunch
ou
sbatch

Partitions	Utilisation	Caractéristiques RAM noeuds	Caractéristiques coeurs noeuds
short	Jobs courts < 1 jour	48 à 64 Go	12 coeurs
normal	Jobs courts max 7 jours	64 Go à 96 Go	12 à 24 coeurs
long	45 jours > Jobs longs > 7 jours	48 Go	12 à 24 coeurs
highmem	Jobs avec besoin de plus de mémoire	144 Go à 256Go	12 à 24 coeurs
highmemplus	Jobs avec besoin de plus de mémoire	512Go	88 coeurs
highmemdell	Jobs avec besoin de plus de mémoire	512Go	112 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

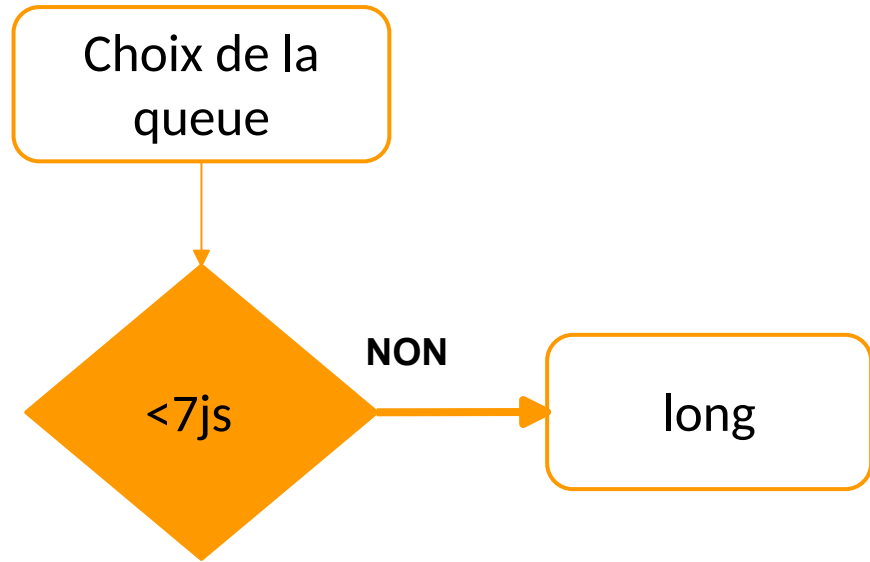
- Partition pour effectuer des travaux sur des processeurs GPUs: basecalling, MiniOn etc..
- Accès restreint au groupe gpu_account
- Demande d'accès avec argumentaire à faire sur

<https://itrop.ird.fr/glipi/plugins/formcreator/front/formdisplay.php?id=15>

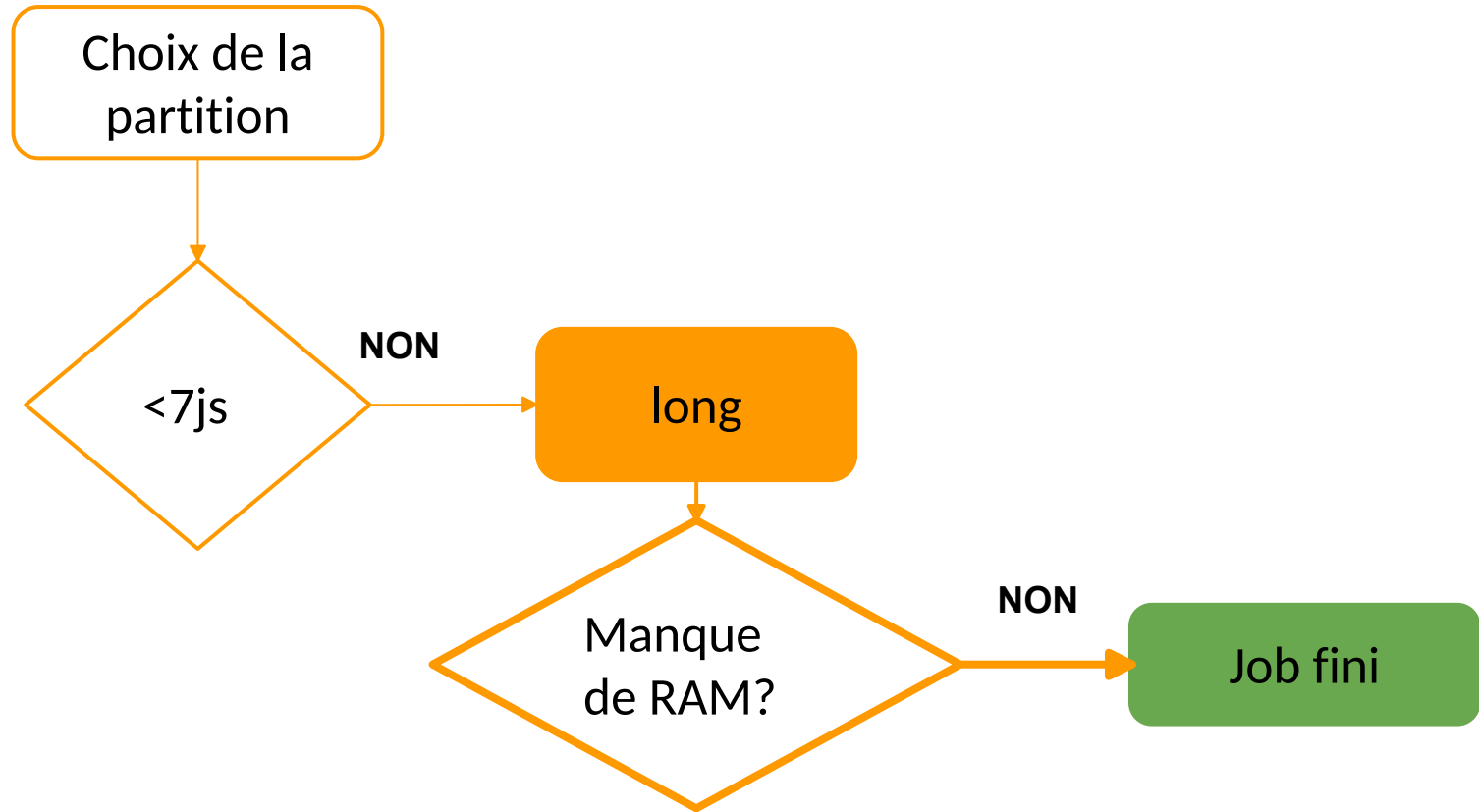
Quelle partition choisir?



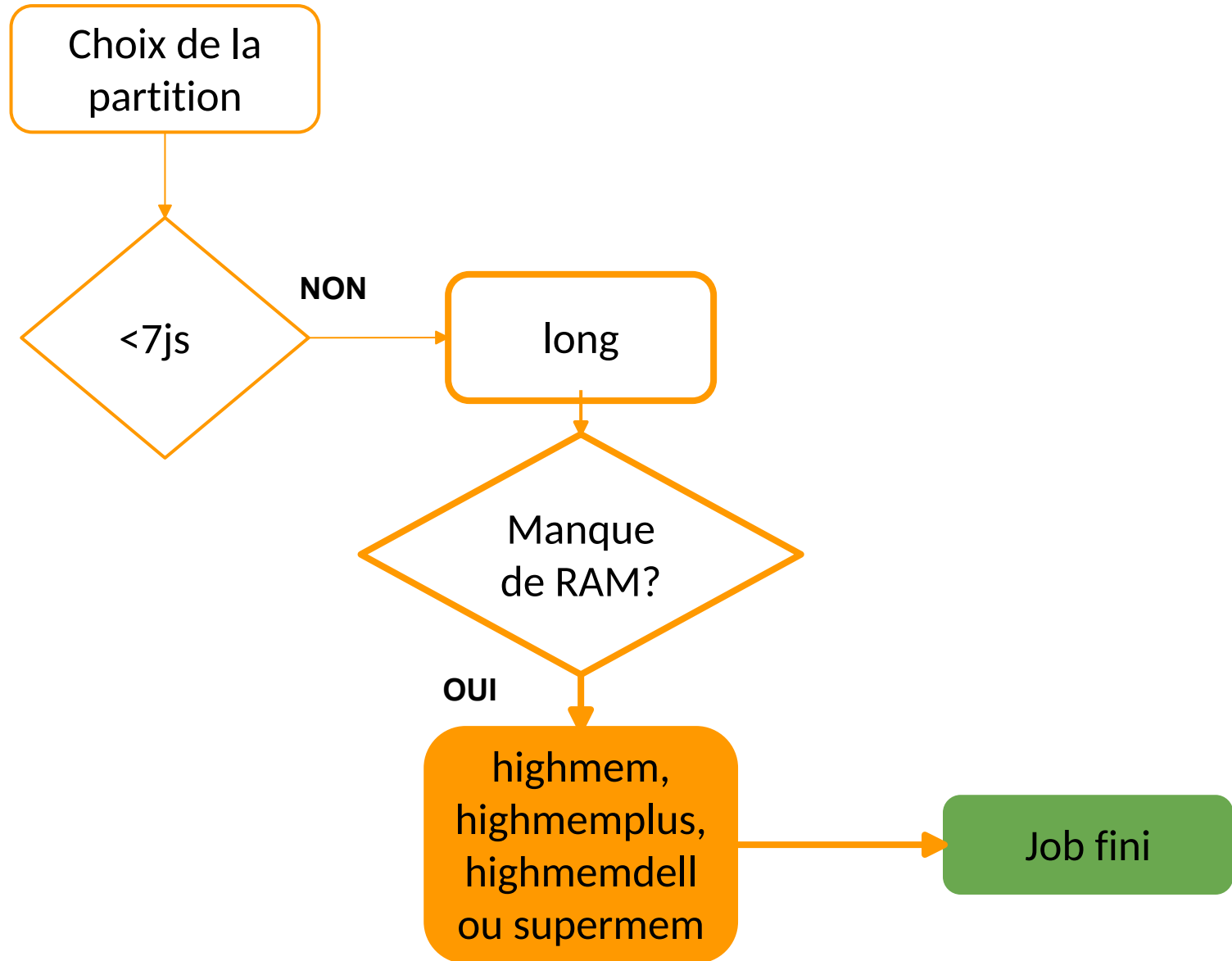
Quelle partition choisir?



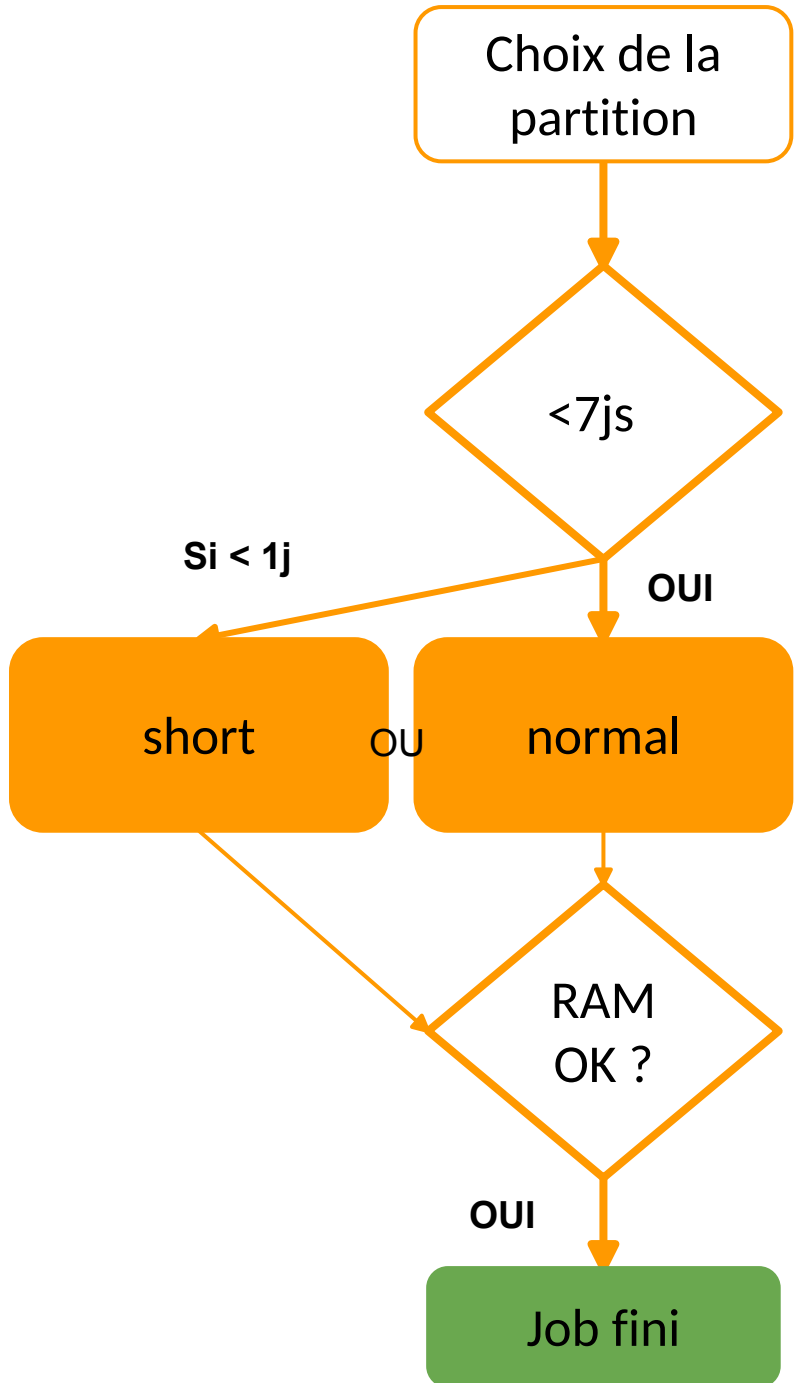
Quelle partition choisir?



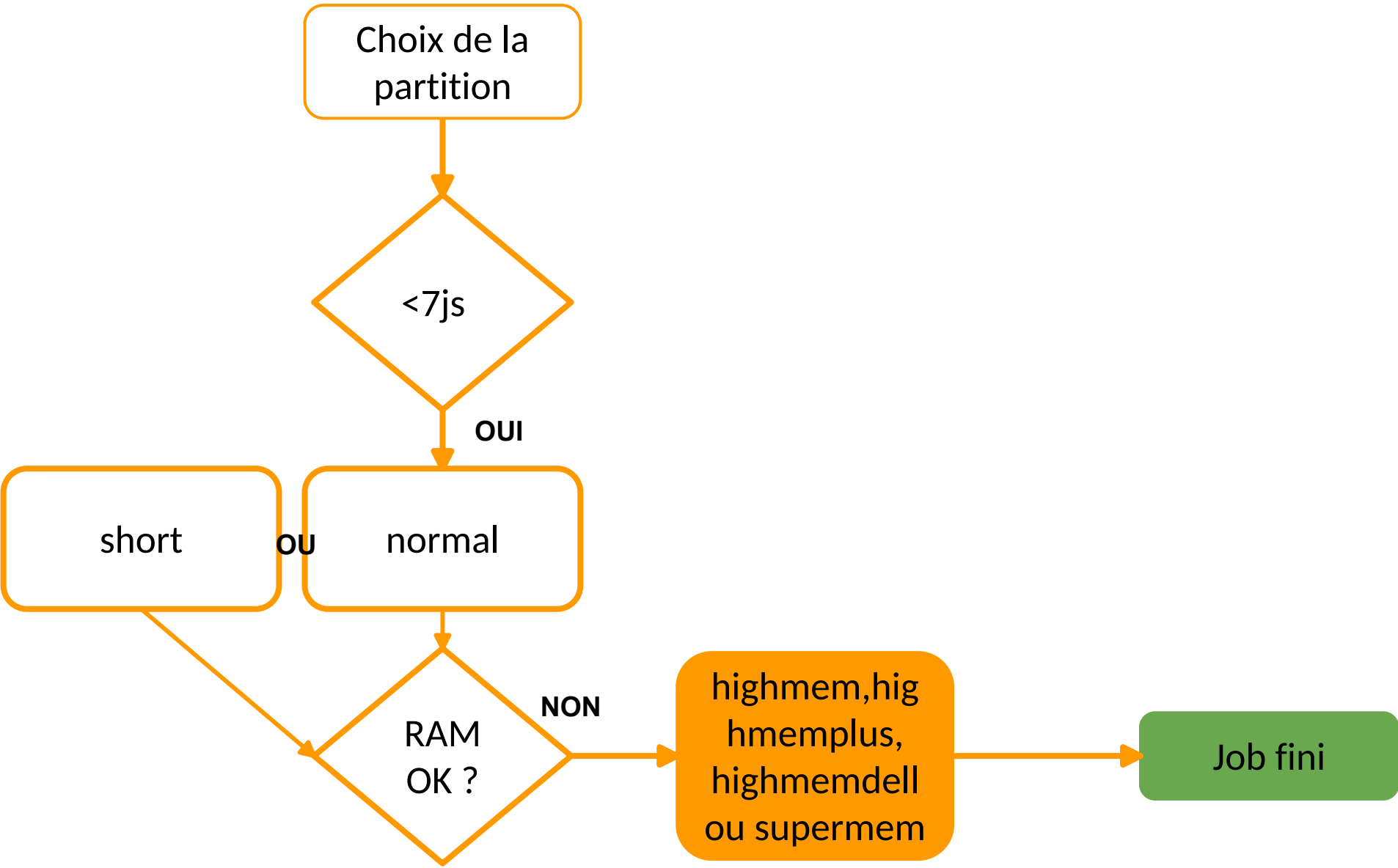
Quelle partition choisir?



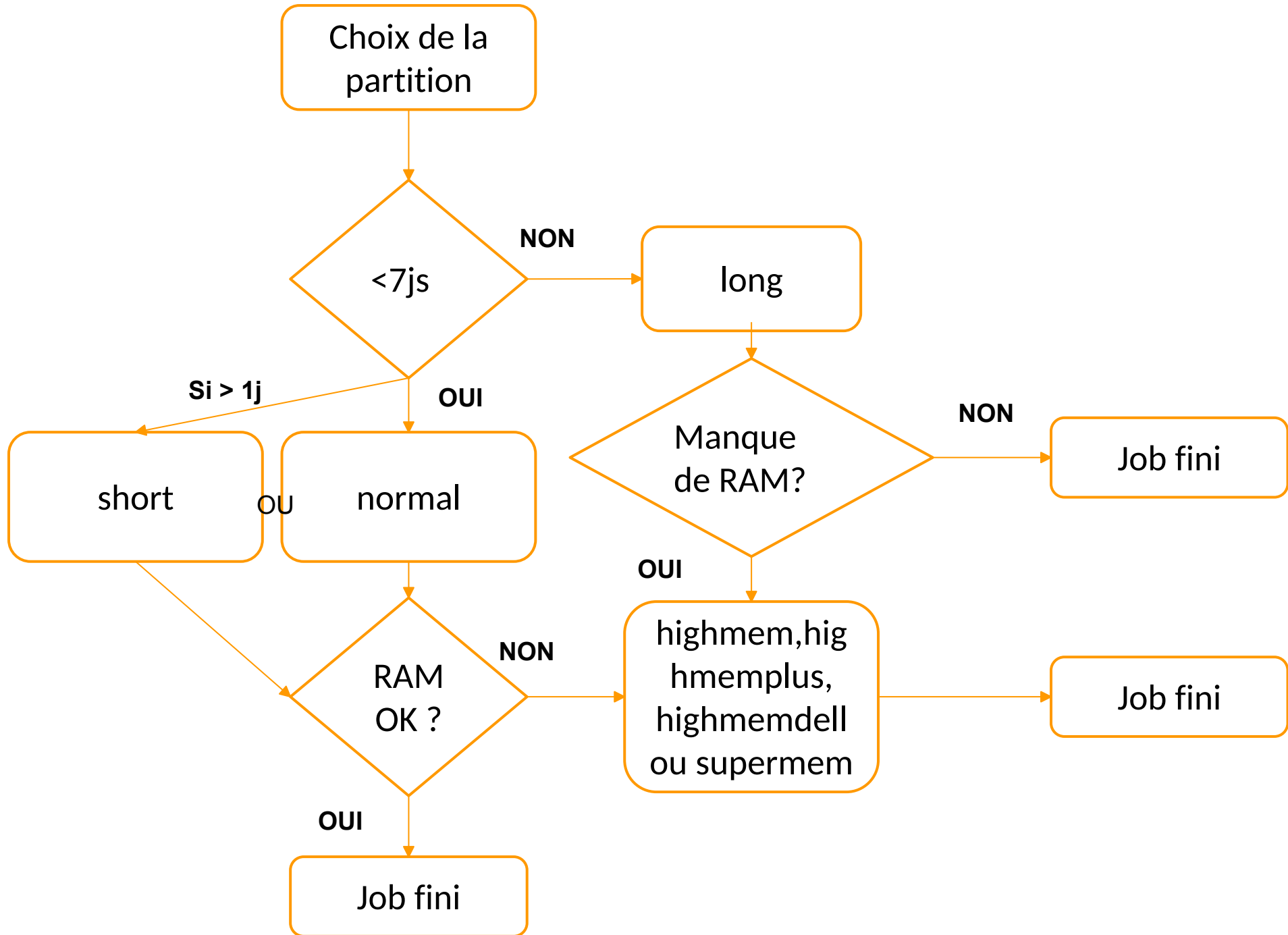
Quelle partition choisir?



Quelle partition choisir?



Quelle partition choisir?



Règles	Partition	exemple outils	commentaire
basecalling, demultiplexing, correction	<i>gpu</i>	medaka, guppy, machine learning tools	demande d'accès
assemblages >100G RAM	<i>supermem</i>	miniasm, flye, raven, smartdenovo	génomome cible > 400 Mb (Un génomome comme le riz ne consomme pas 100Go)
genomicsbd (gatk) > 100G RAM	<i>supermem</i>	GATK genomicsDB	genomome cible de plus de 400 Mb (>10 samples)
assemblages => 35G et < 120G RAM	<i>highmemplus,highmemdell</i>	miniasm, flye, raven, smartdenovo	génomome cible entre 100 et 400 Mb
assemblages => 35G et < 100G RAM	<i>highmem</i>	miniasm, flye, raven, smartdenovo	génomome cible entre 100 et 400 Mb
structure de pops	<i>long</i>		
simulations	<i>long</i>		
metagenomic	<i>normal</i>	quiime2, frogs	
mapping	<i>normal</i>	bwa, minimap2, hisat2	besoin de bcp des coeurs pas bcp de RAM. nb de coeurs tool = nb de coeurs à réserver
genotypage	<i>normal</i>	GATK haplotypcaller, samtools mpileup, bcftools	besoin de bcp des coeurs pas bcp de RAM. nb de coeurs tool = nb de coeurs à réserver
stats	<i>normal</i>	R	
test de scripts	<i>short</i>	bash, python, R	

● 1 Noeud Maître



bioinfo-master.ird.fr

Rôle :

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

● 32 Noeuds de Calcul



nodeX
X : 0..31



Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet

● 3 serveurs NAS



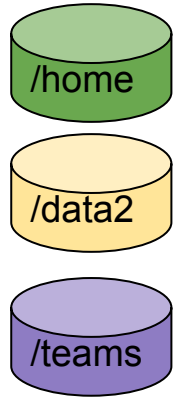
bioinfo-nas.ird.fr
(nas)

bioinfo-nas2.ird.fr
(nas2)

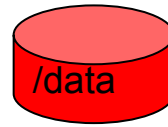
bioinfo-nas3.ird.fr
(nas3)

Rôle :

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



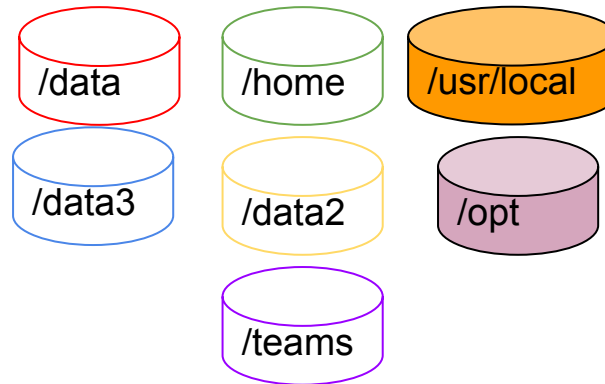
bioinfo-nas.ird.fr



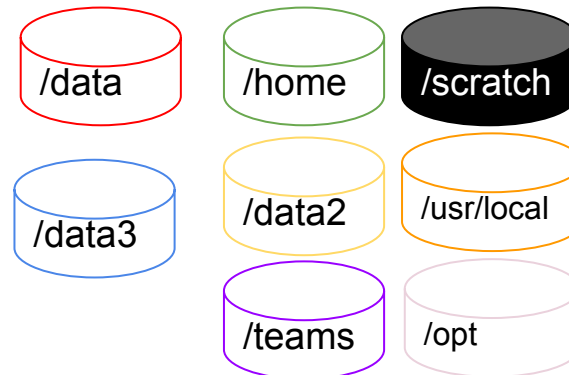
bioinfo-nas2.ird.fr



bioinfo-nas3.ird.fr



bioinfo-master.ird.fr



32 noeuds



Légende:

Disques durs locaux en cylindres pleins

Liens virtuels vers disques durs physiques (cylindres vides)

Connexion
à bioinfo-
master.ird.f
r et
réservation
de
ressources



Création du
répertoire
d'analyse
/scratch
dans le
noeud
réservé

Etape 1

Etape 2
mkdir



Practice

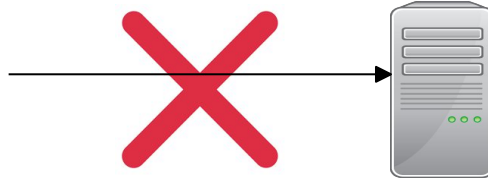
Etape 2:srun, partition

2

Aller sur le [Practice2](#) du github

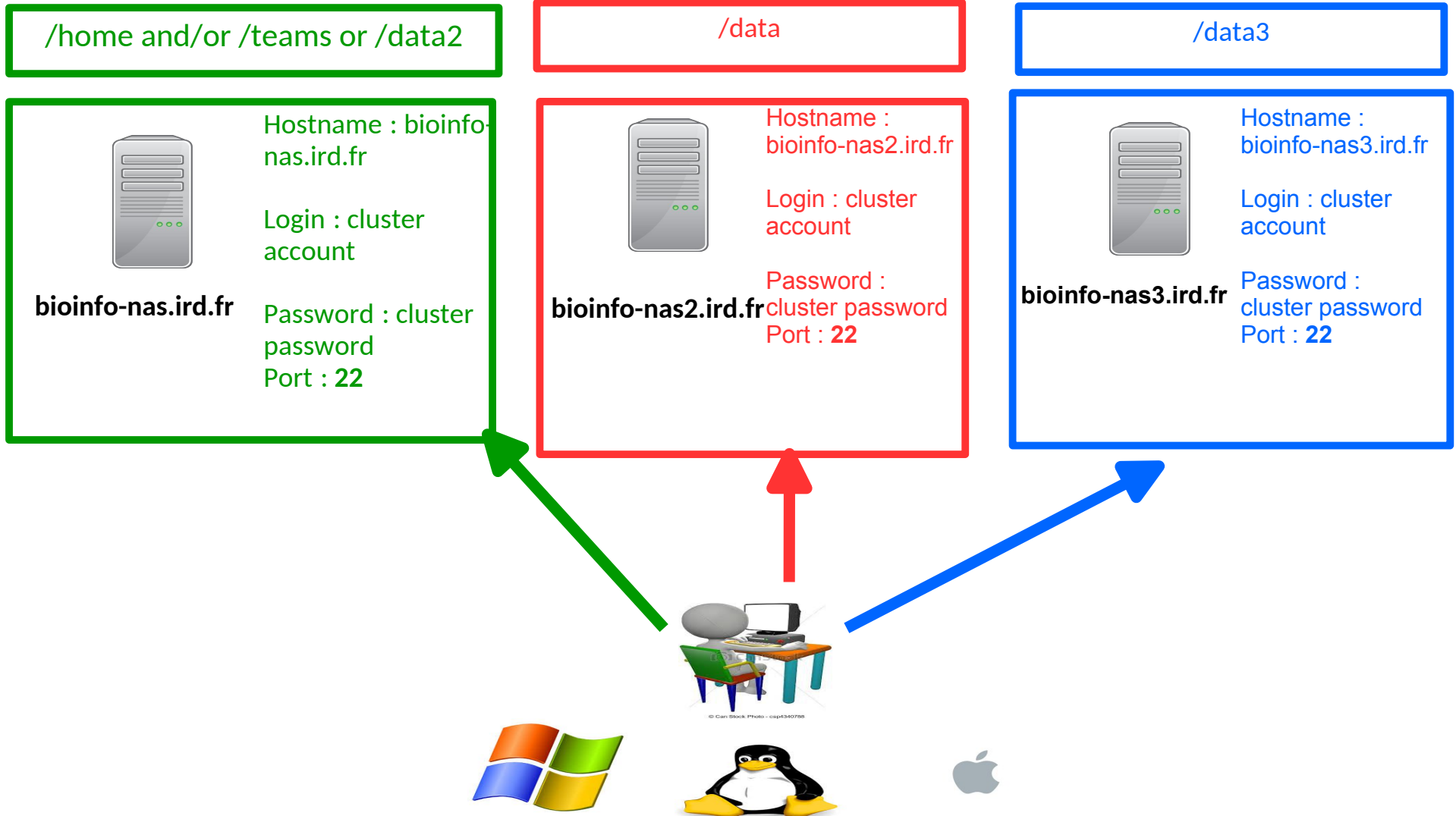


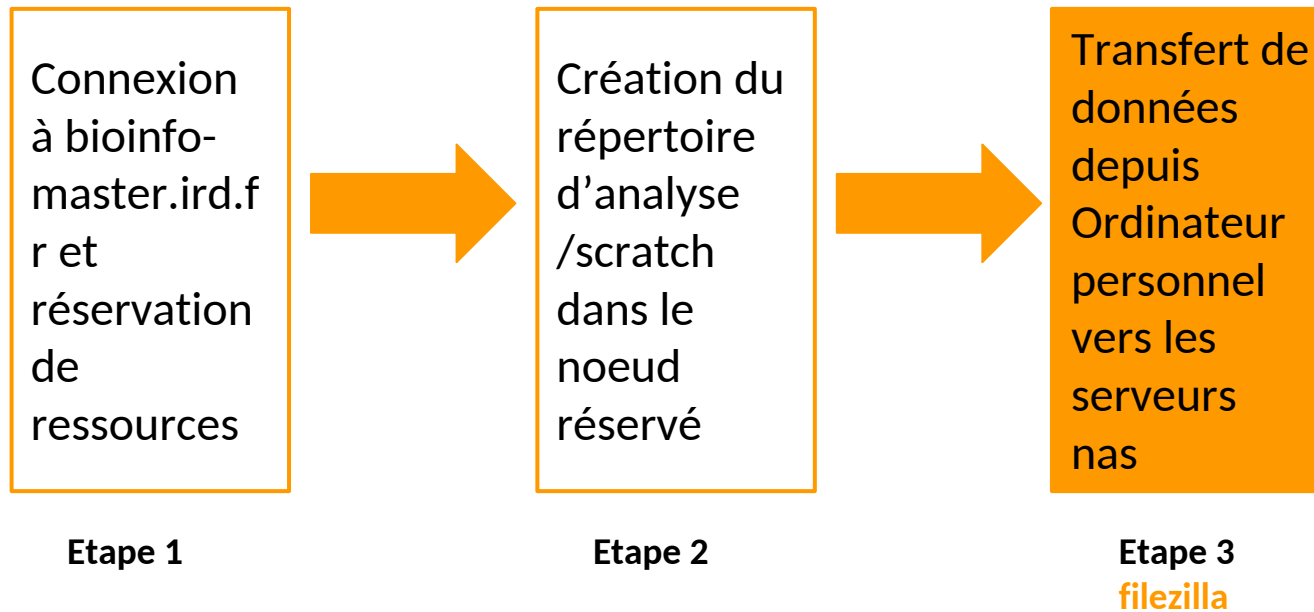
Ordinateur
personnel



**Transfert
direct via
filezilla interdit**

bioinfo-master.ird.fr





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
```

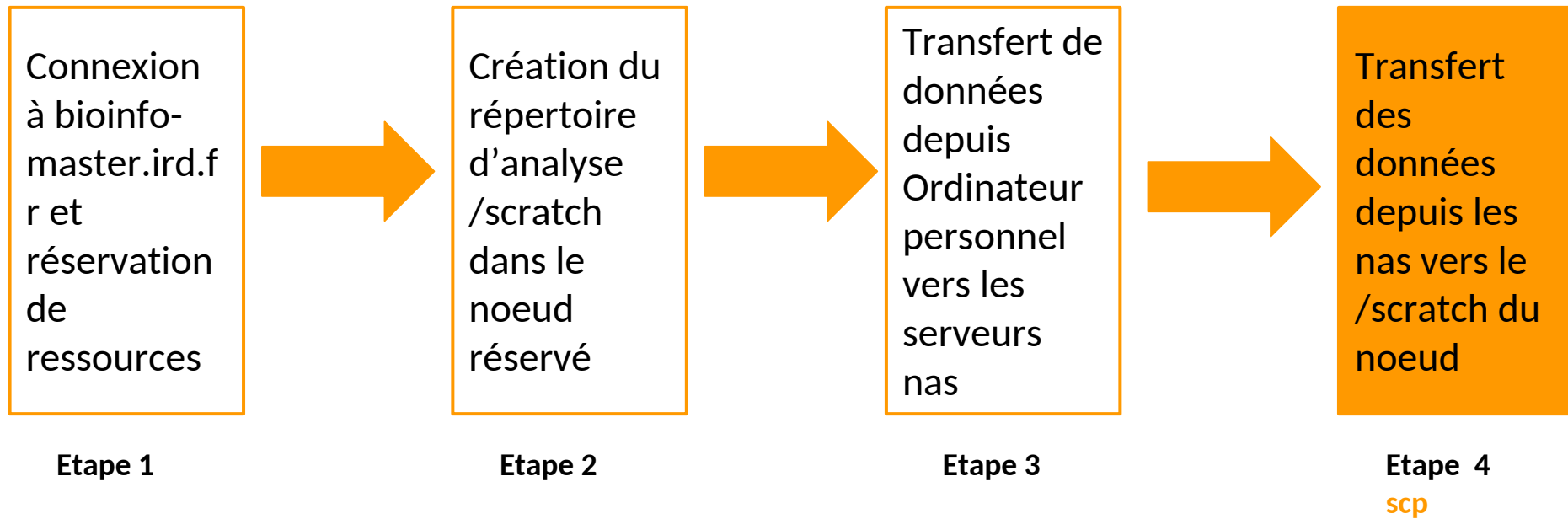
- Syntaxe si la source est distante :

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

- Syntaxe si la destination est distante :

```
scp -r /chemin/fichier_a_copier nomserveur:/chemin/repertoire_distant
```

Ex: `scp -r nas:/home/tando/repertoire /scratch/tando/`





Practice

Etape4: scp vers noeuds

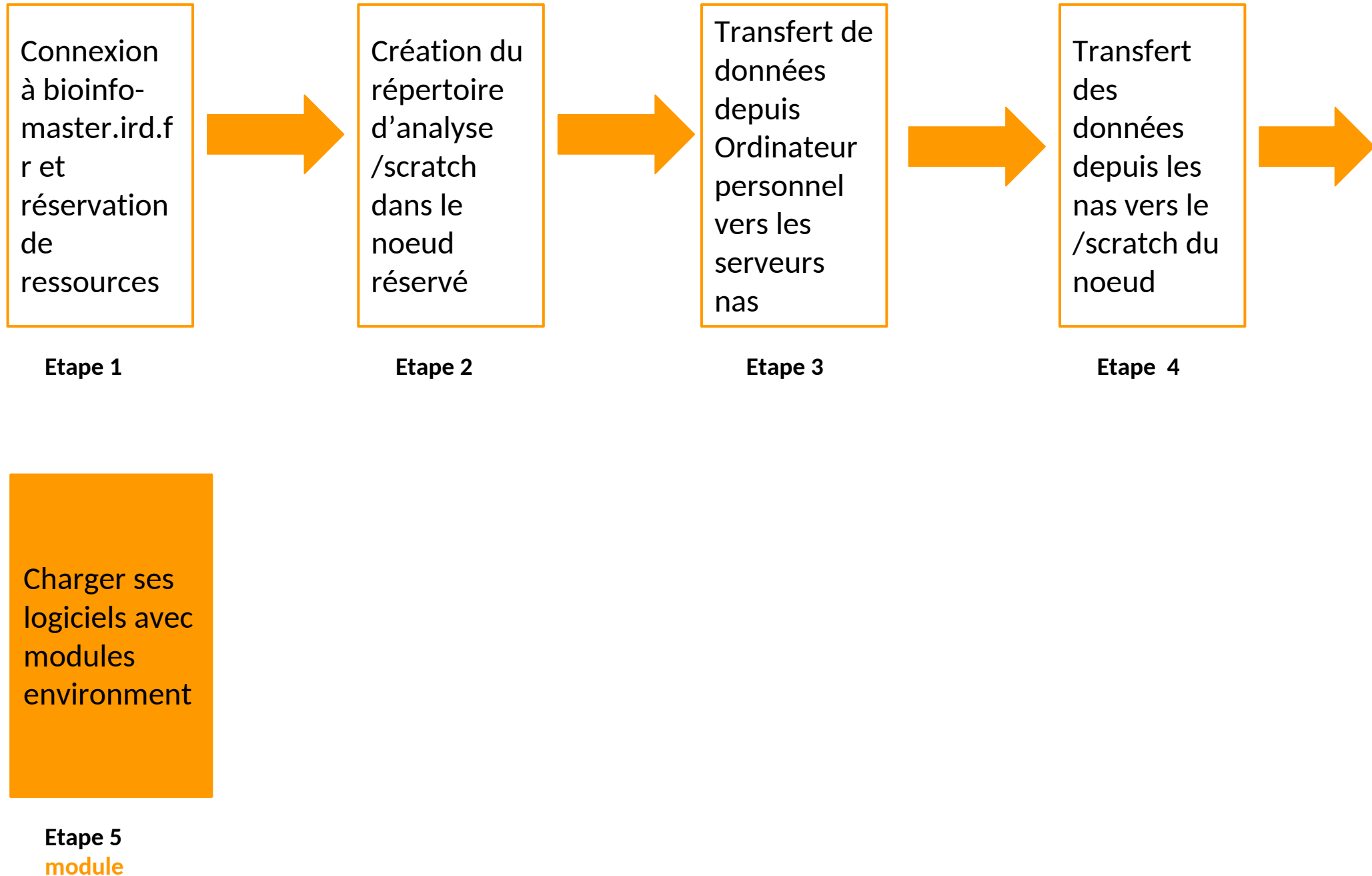
4

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





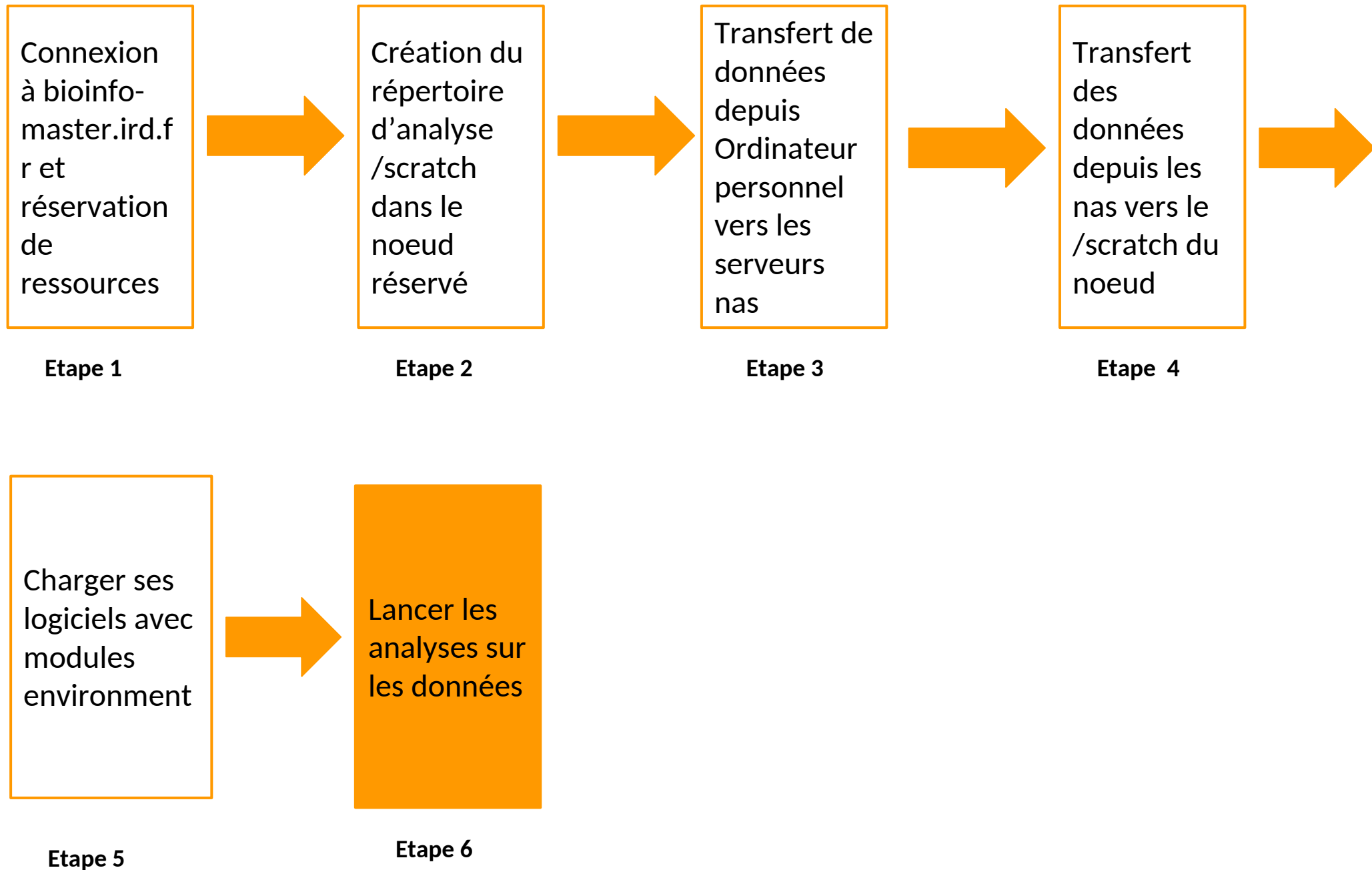
Practice

Etape5: module environment

5

Aller sur le [Practice5](#) du github

Etapes d'une analyse sur le cluster



- 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
```

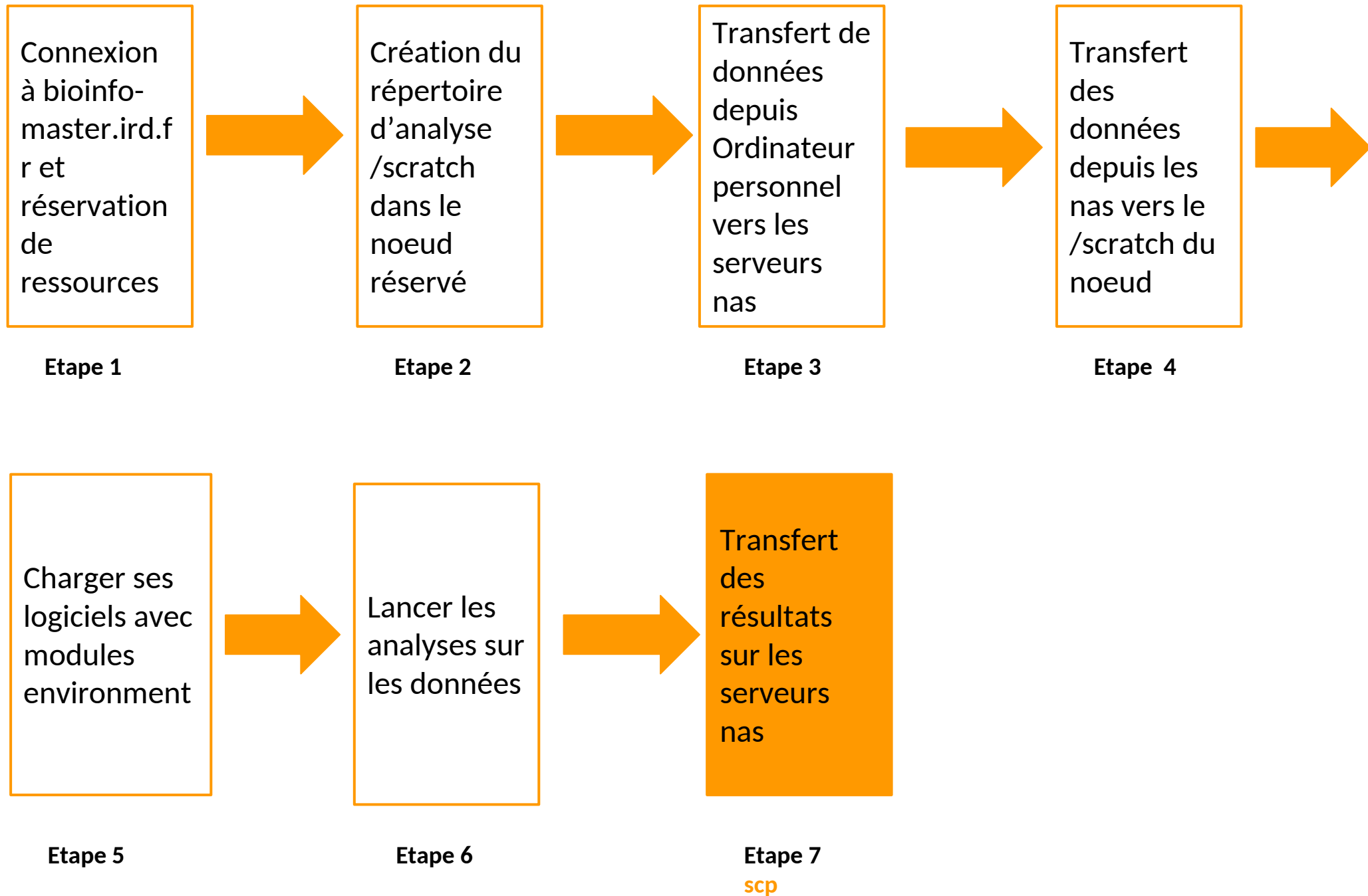
- Syntaxe si la source est distante :

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

- Syntaxe si la destination est distante :

```
scp -r /chemin/fichier_a_copier nomserveur:/chemin/repertoire_distant
```

Etapes d'une analyse sur le cluster





Practice

Etape7: Récupérer les résultats

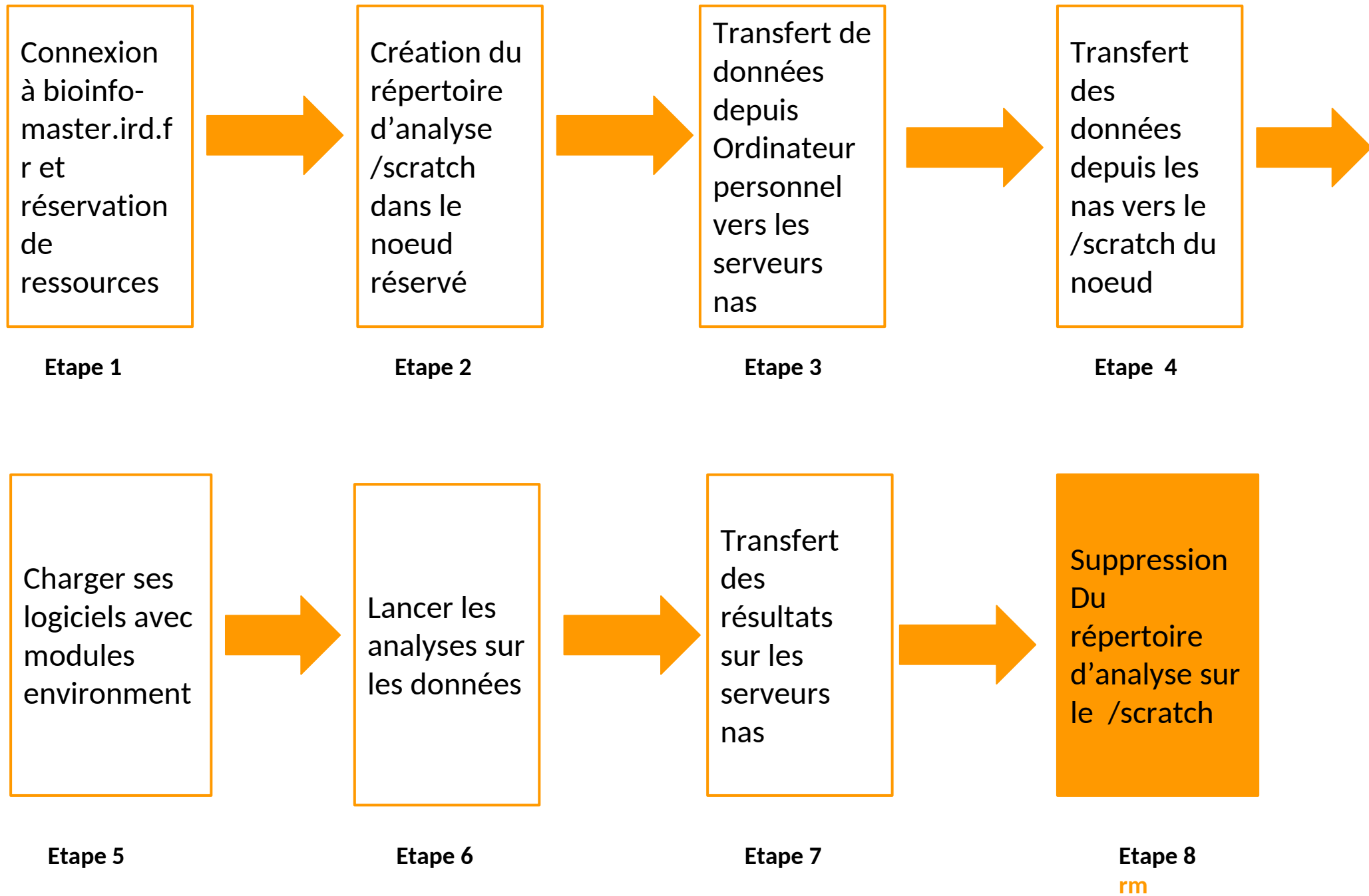
7

Aller sur le [Practice7](#) du github

- 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 scratches: scratch_use.sh

```
sh /opt/scripts/scratch-scripts/scratch_use.sh
```

- Supprimer ses données sur les scratches: clean_scratch.sh

```
sh /opt/scripts/scratch-scripts/clean_scratch.sh
```


Commande	Description	Exemple
<code>srun --time=0X:00 --pty bash -i</code>	Se connecter de manière interactive à un noeud pendant X minutes	<code>srun --time=02:00:00 --pty bash -i</code> Connexion pendant 2 heures
<code>sbatch</code>	Lancer une analyse via script en arrière plan	<code>sbatch script.sh</code>
<code>sinfo</code>	Informations sur les partitions	<code>sinfo</code>
<code>scancel</code>	Suppression des jobs <job_id>	<code>scancel 1029</code>
<code>squeue</code>	Infos sur tous les jobs	<code>squeue -u tando</code>
<code>scontrol show job <job_id></code>	Infos sur le job actif <job_id>	<code>scontrol show job 1029</code>
<code>sacct -j <job_id></code>	Infos sur le job terminé <job_id>	<code>sacct -j 1029</code>

Options	Description	Exemple
<code>--job-name=<name></code>	Donner un nom au job	<code>sbatch --job-name=tando_blast</code>
<code>-p <partition></code>	Choisir une partition	<code>sbatch -p highmem</code>
<code>--odelist=<nodeX></code>	Choisir un noeud en particulier	<code>sbatch -p normal --odelist=node14</code>
<code>-n <nbre_taches></code>	Lancer plusieurs instance d'une commande	<code>srun -n 4 hostname</code>
<code>-c <nb_cpu_par_tache></code>	Allouer le nombre de cpus par tâche	<code>srun -n 4 -c 2 hostname</code>
<code>--mail-user=<emailaddress></code>	Envoyer un mail	<code>sbatch --mail-user=ndomassi.tando@ird.fr</code>
<code>--mail-type=<event></code>	Envoyer un mail quand: END: fin du job FAIL: abandon BEGIN: début du job ALL: tout	<code>sbatch ---mail-type=BEGIN</code>

BONUS

LANCER UN JOB

- Le scheduler choisit les ressources automatiquement
- Lancer des jobs utilisant jusqu'à **24 coeurs**
- Possibilité de paramétrer ce choix
- Jobs lancés en arrière plan
 - possibilité d'éteindre son ordinateur
 - récupération des résultats automatique

- 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	Description	Exemple
<code>--job-name=<name></code>	Donner un nom au job	<code>sbatch --job-name=tando_blast</code>
<code>-p <partition></code>	Choisir une partition	<code>sbatch -p highmem</code>
<code>--nodelist=<nodeX></code>	Choisir un noeud en particulier	<code>sbatch -p normal --nodelist=node14</code>
<code>-n <nbre_taches></code>	Lancer plusieurs instance d'une commande	<code>srun -n 4 hostname</code>
<code>-c <nb_cpu_par_tache></code>	Allouer le nombre de cpus par tâche	<code>srun -n 4 -c 2 hostname</code>
<code>--mail-user=<emailaddress></code>	Envoyer un mail	<code>sbatch --mail-user=ndomassi@ird.fr</code>
<code>--mail-type=<event></code>	Envoyer un mail quand: END: fin du job FAIL: abandon BEGIN: début du job ALL: tout	<code>sbatch ---mail-type=BEGIN</code>

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
#####
```


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

La réponse à l'enquête suivante est **obligatoire** pour avoir **votre compte prolongé**:

<http://itrop-survey.ird.fr/index.php/417115?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 : 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/>