



# Initiation HPC cluster

[www.southgreen.fr](http://www.southgreen.fr)

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





Julie ORJUELA-BOUNIOL<sup>1</sup>, IE  
Bioinformaticienne  
25%



Ndomassi TANDO, IE  
Ingénieur systèmes  
100%  
Animateur plateau



Aurore COMTE, IE  
Bioinformaticienne  
20%

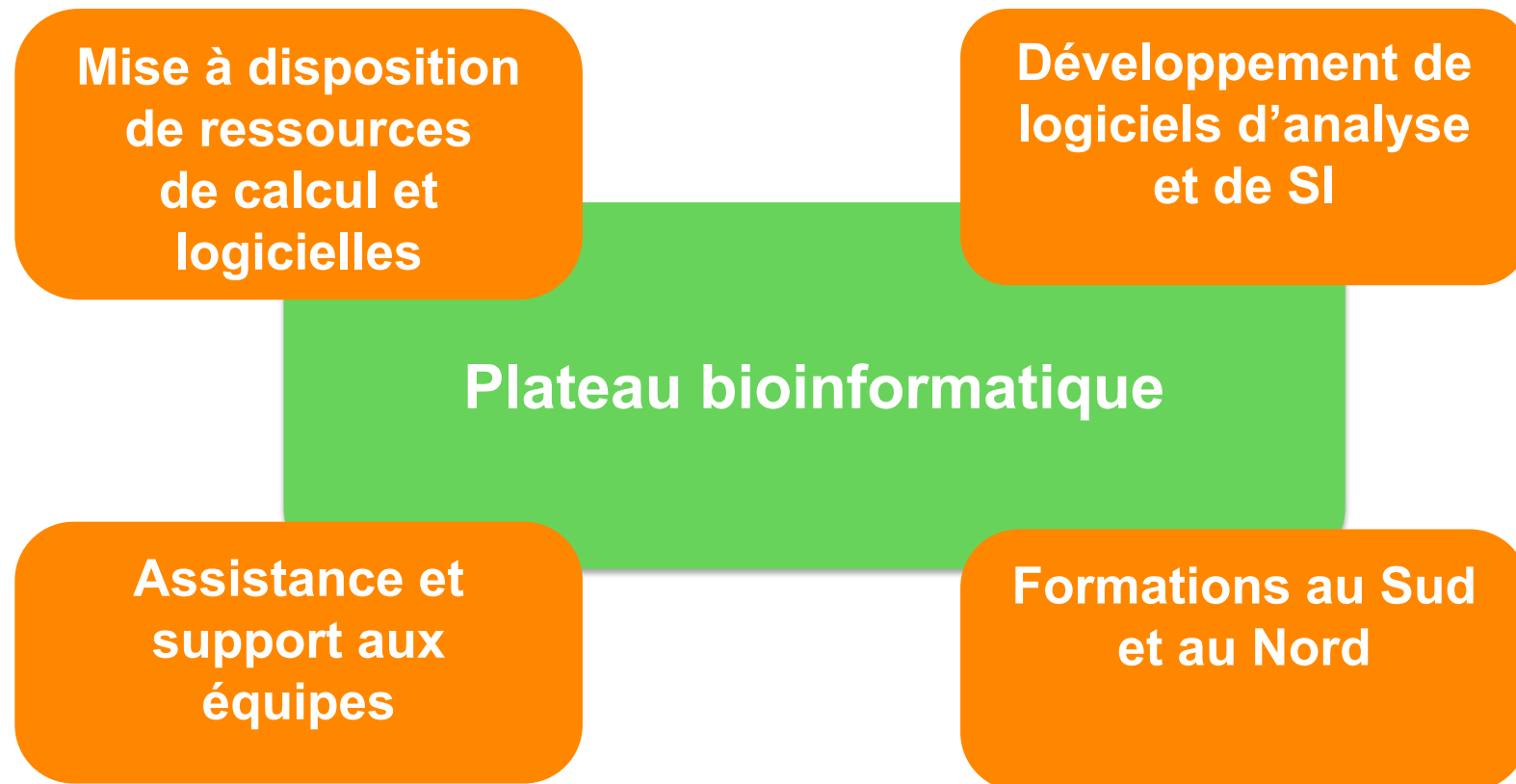


Valérie NOEL, TCS  
Bioinformaticienne  
25%



Bruno GRANOUILAC<sup>3</sup>, IE  
Systèmes d'information  
100%

Emmanuelle Beyne, IR  
Bioinformaticienne  
20%



- Formulaires de demandes

<https://itrop-glpi.ird.fr/plugins/formcreator/front/formlist.php>

- Comptes
- Installation logiciels
- Projets



- Incidents: contacter [bioinfo@ird.fr](mailto:bioinfo@ird.fr)

- Howtos:

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



# ARCHITECTURE

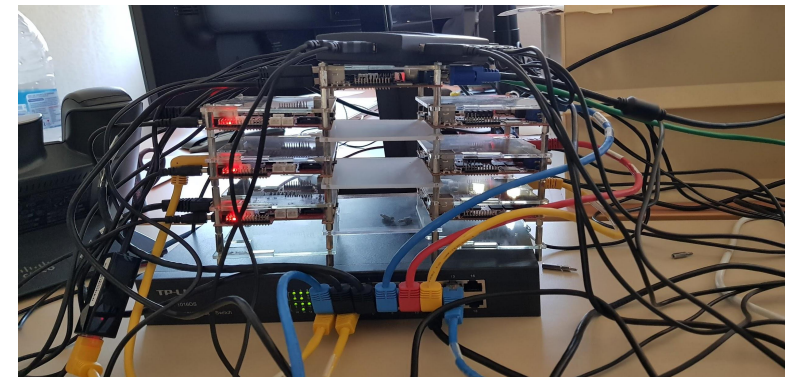
- une unité logique de plusieurs serveurs
- une unique machine puissante
- une puissance de calcul élevée
- Une plus grande capacité de stockage
- Une fiabilité supérieure
- Une plus grande disponibilité des ressources

- 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



# Qu'est ce qu'un cluster?

- 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**



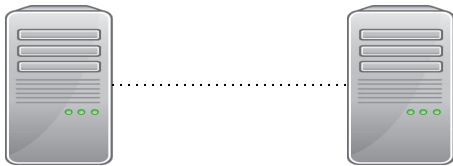
**bioinfo-master.ird.fr**

Rôle :

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

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

- **25 Noeuds de Calcul**



**nodeX**  
**X : 0..24**

Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet
- node0 à node24
- Connexion de master

```
ssh nodeX
```



## ● 1 Noeud Maître



**bioinfo-master.ird.fr**

91.203.34.148

Rôle :

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

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

## ● 25 Noeuds de Calcul



**nodeX**  
**X : 0..24**

Rôle :

- Utilisés par le maître pour exécuter les jobs/calculs
- Pas accessibles depuis Internet
- node0 à node24
- Connexion de master

```
ssh nodeX
```



Noeud interactif (node6)

- Accessible de l'extérieur **bioinfo-inter.ird.fr**
- Connexion : 

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



# Practice

Etape 1: Connexion, qhost

1

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

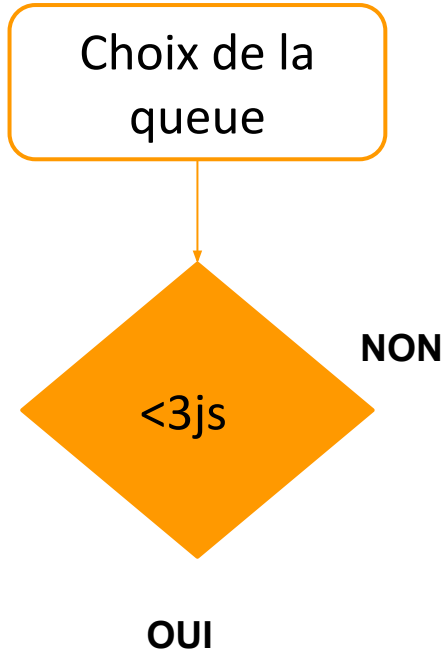
Connexion à  
bioinfo-master.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources



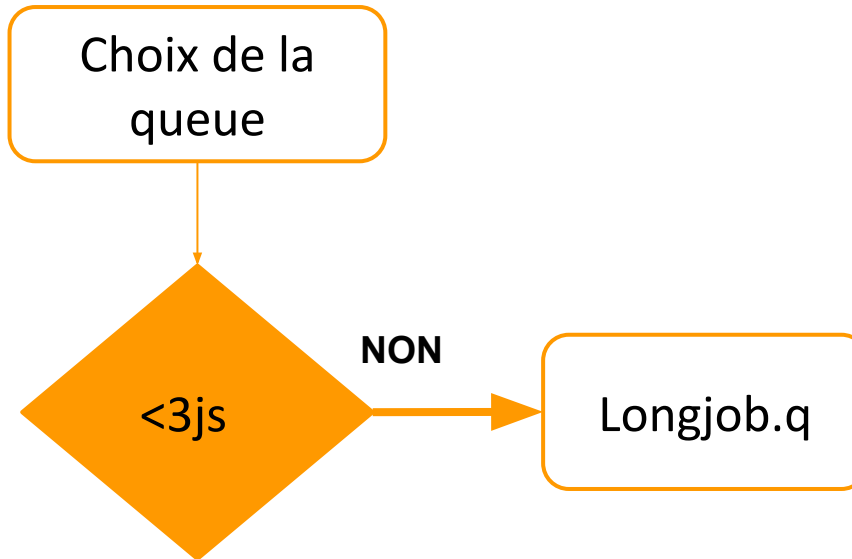
**Etape 1**  
**qrsh/qlogin**  
**ou qsub**

Queues	Utilisation	Caractéristiques RAM noeuds	Caractéristiques coeurs noeuds
bioinfo.q	Jobs courts < 3jours	48 à 64 Go	12 coeurs
bioinfo2.q	Jobs courts < 3jours	64 Go	20 coeurs
longjob.q	Jobs longs > 3 jours	48 Go	12 coeurs
bigmem.q	Jobs avec besoin de plus de mémoire	96 Go	12 coeurs
highmem.q	Jobs avec besoin de beaucoup de mémoire	144 Go	12 coeurs

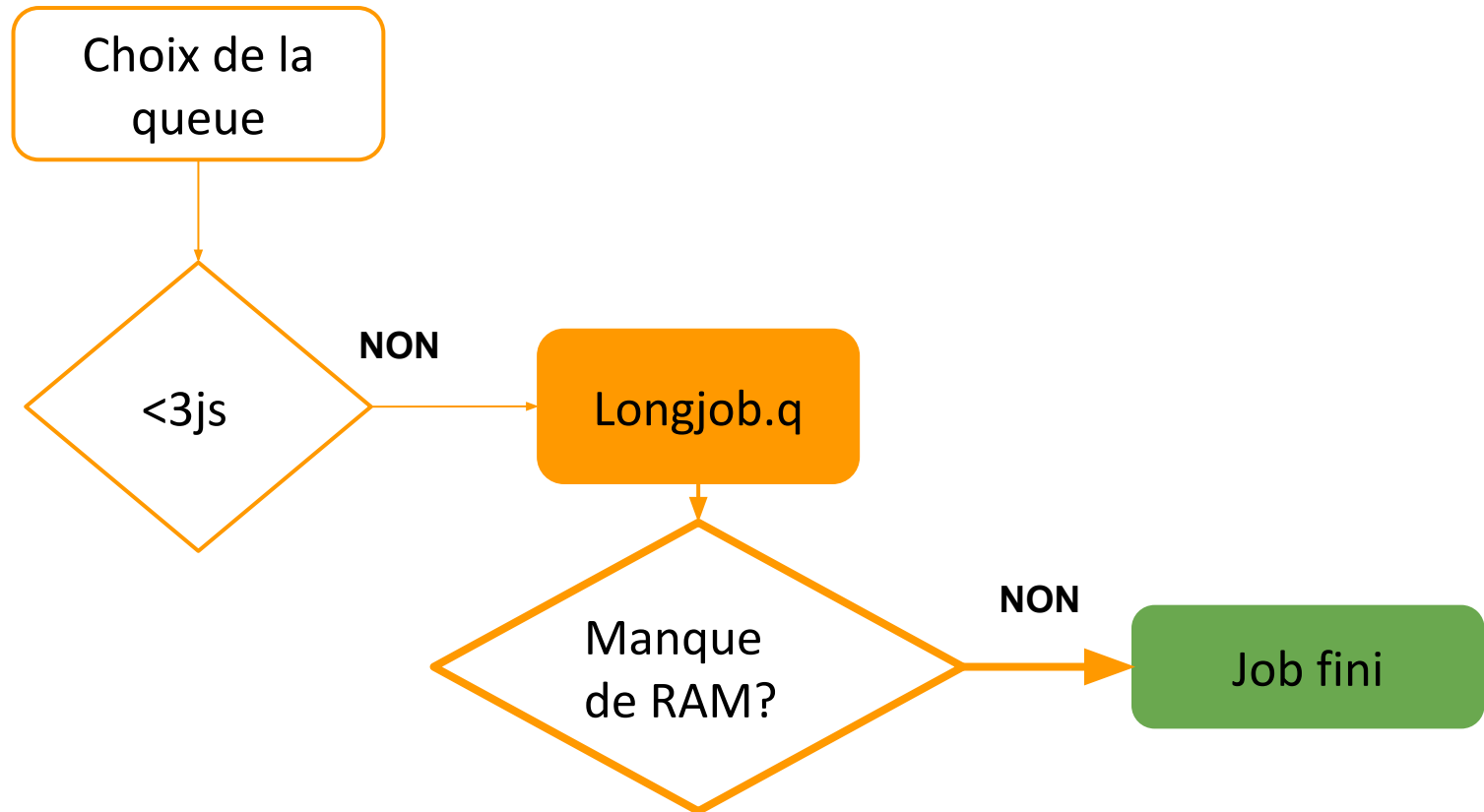
# Quelle queue choisir?



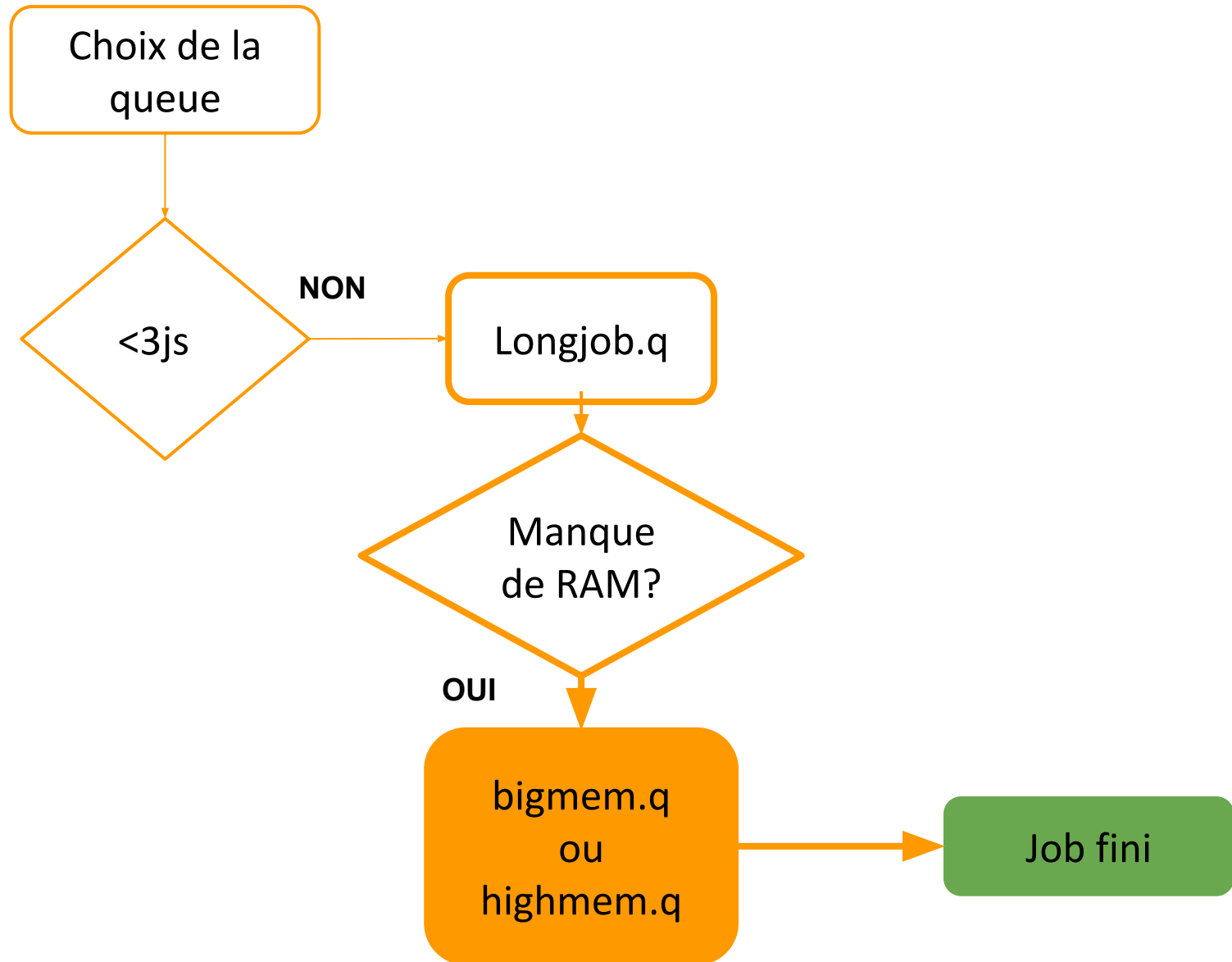
# Quelle queue choisir?



# Quelle queue choisir?

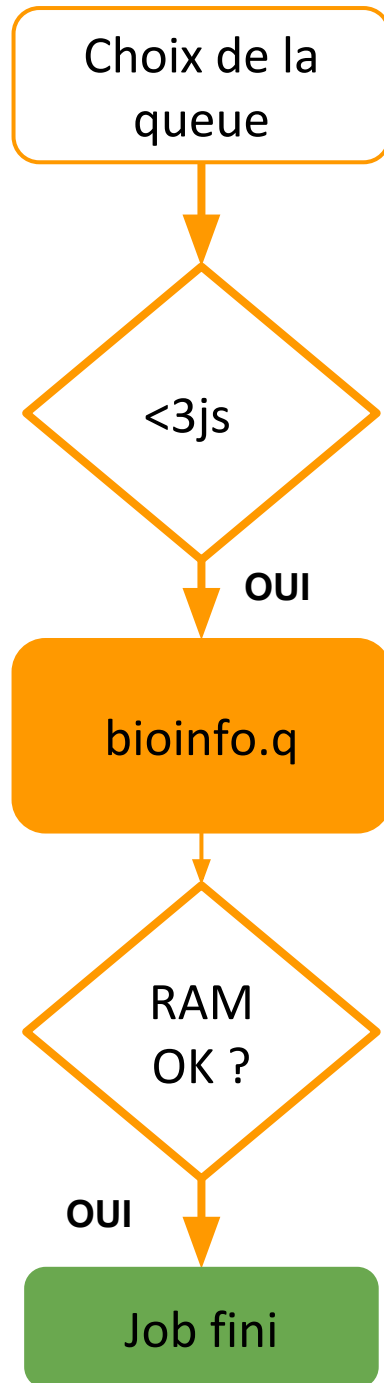


# Quelle queue choisir?

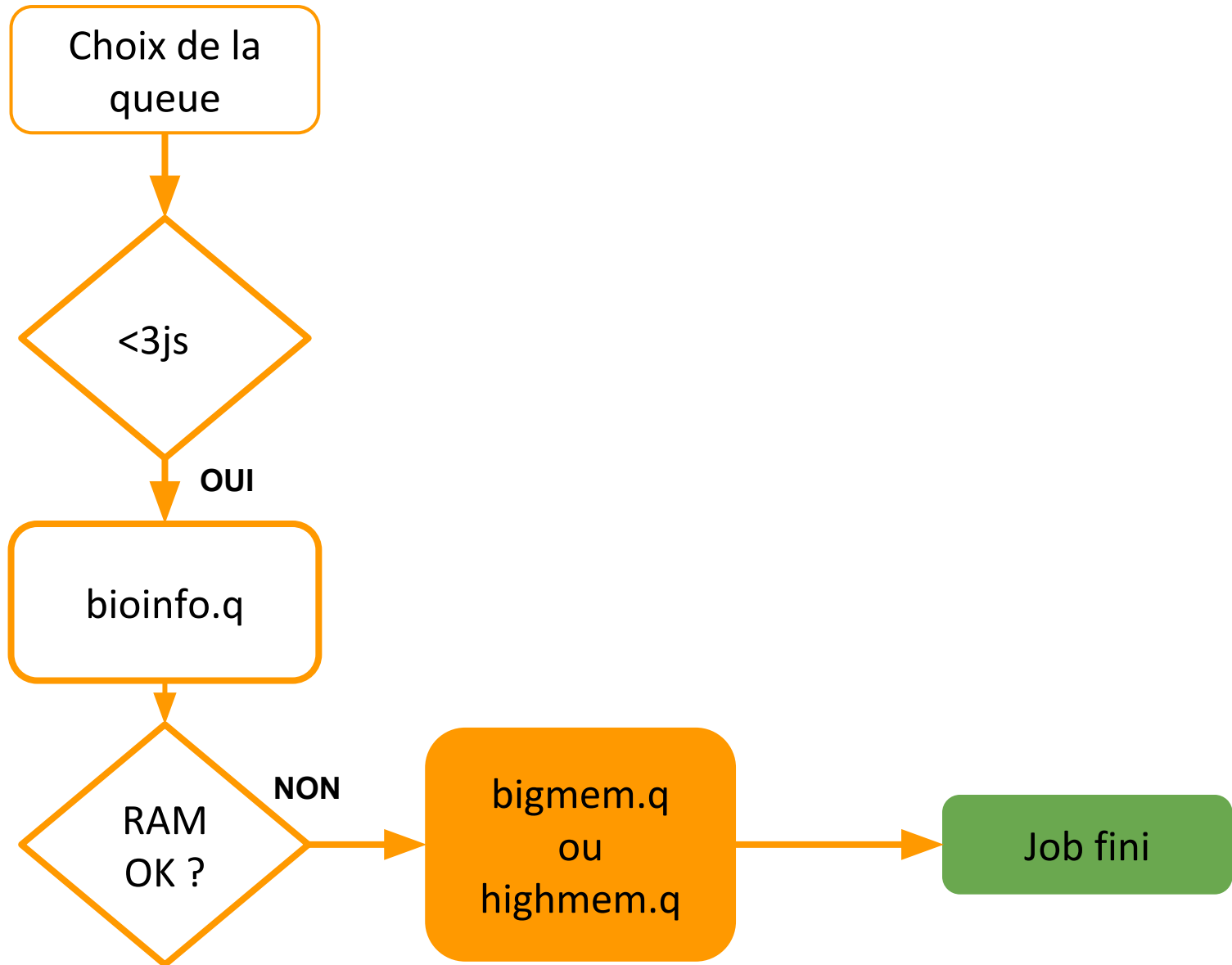




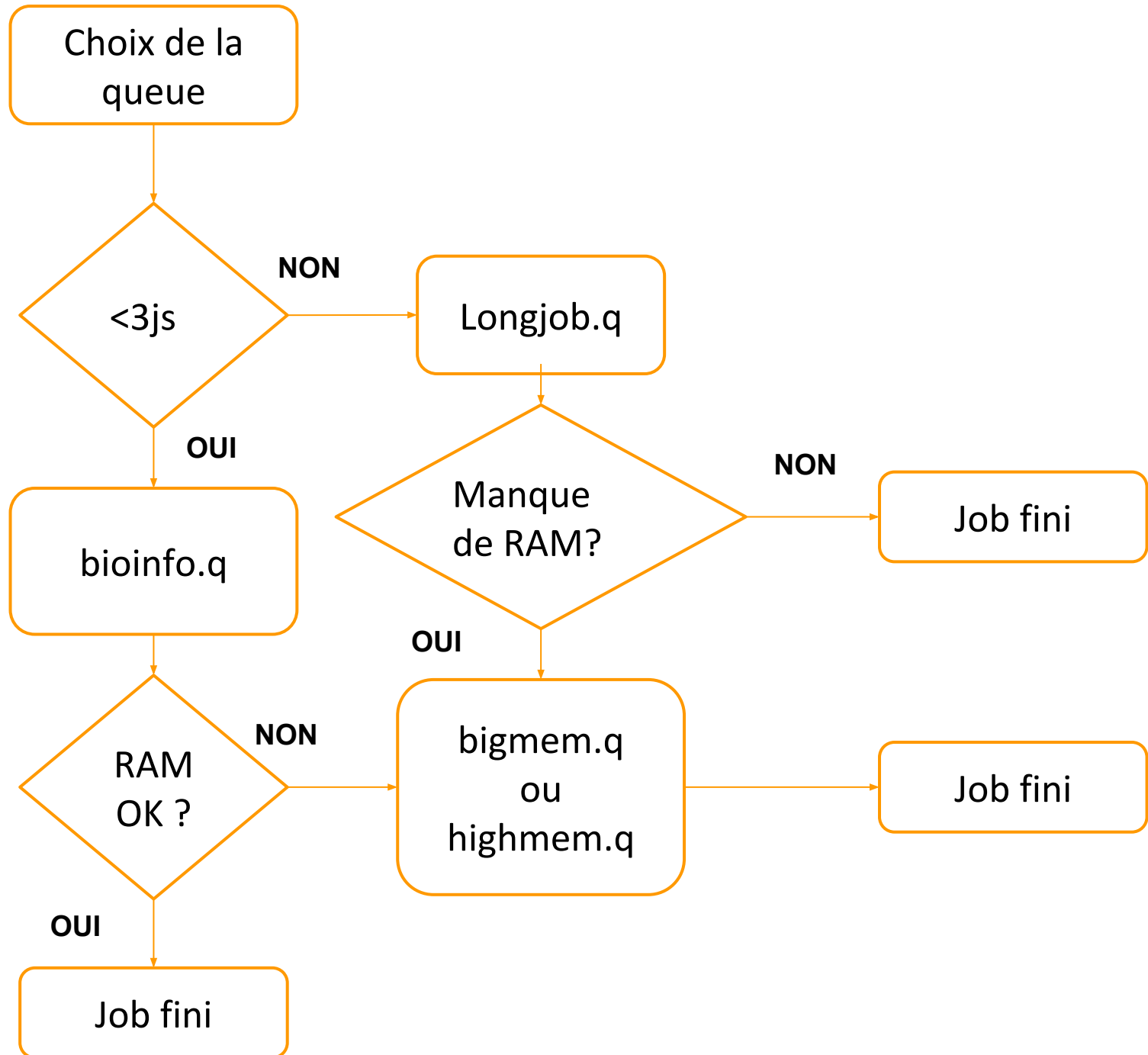
# Quelle queue choisir?



# Quelle queue choisir?



# Quelle queue choisir?



## ● 1 Noeud Maître



**bioinfo-master.ird.fr**

91.203.34.148

Rôle :

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

## ● 25 Noeuds de Calcul



**nodeX**

**X : 0..24**



Rôle :

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

## ● 3 serveurs NAS



**Bioinfo-nas.ird.fr**  
(nas)

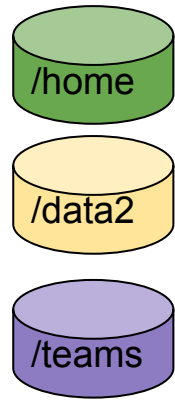
**Bioinfo-nas2.ird.fr**  
(nas2)

**Bioinfo-nas3.ird.fr**  
(nas3)

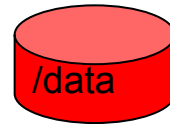
Rôle :

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

# Partitions disques sur le cluster i-Trop



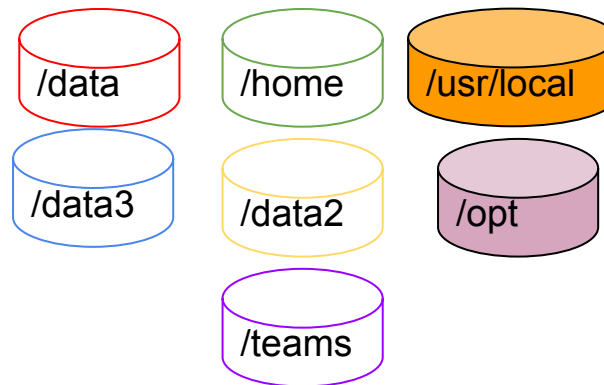
**bioinfo-nas.ird.fr**



**bioinfo-nas2.ird.fr**



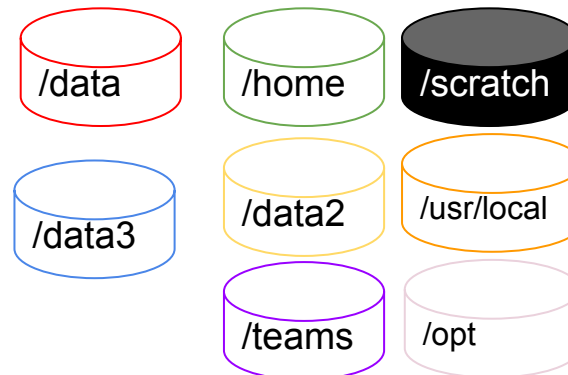
**bioinfo-nas3.ird.fr**



**bioinfo-master.ird.fr**



**Liens virtuels** vers les  
partitions des autres  
machines



**25 noeuds**



Connexion à  
bioinfo-master.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources



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

**Etape 1**

**Etape 2**  
**mkdir**



# Practice

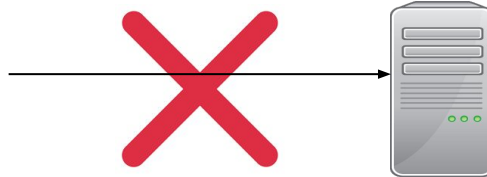
Etape 2:qrsh, partition

2

*Aller sur le [Practice2](#) du github*



Ordinateur  
personnel

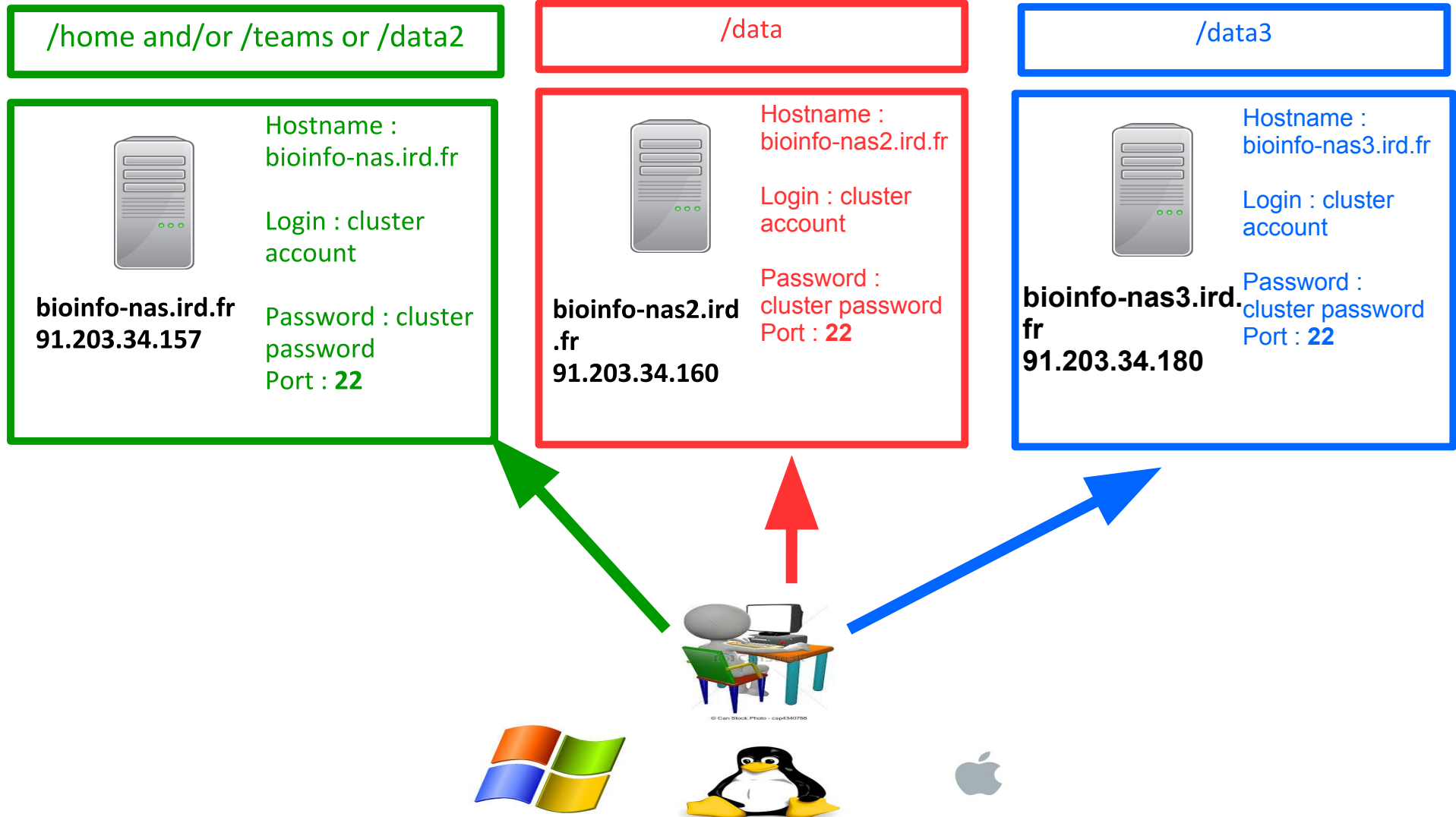


**Transfert direct  
via filezilla  
interdit**



**bioinfo-master.ird.fr  
91.203.34.148**





# Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à  
bioinfo-mas-  
ter.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources

**Etape 1**



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

**Etape 2**



Transfert de  
données  
depuis  
Ordinateur  
personnel  
vers les  
serveurs  
nas

**Etape 3**  
**filezilla**



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/`

# Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à  
bioinfo-master.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources

Etape 1



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

Etape 2



Transfert de  
données  
depuis  
Ordinateur  
personnel  
vers les  
serveurs  
nas

Etape 3



Transfert  
des  
données  
depuis les  
nas vers le  
/scratch du  
noeud

Etape 4  
**scp**



# 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

Connexion à  
bioinfo-mas-  
ter.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources

**Etape 1**

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

**Etape 2**

Transfert de  
données  
depuis  
Ordinateur  
personnel  
vers les  
serveurs  
nas

**Etape 3**

Transfert  
des  
données  
depuis les  
nas vers le  
/scratch du  
noeud

**Etape 4**

Charger ses  
logiciels avec  
modules  
environment

**Etape 5**  
**module**



# Practice

Etape5: module environment

5

*Aller sur le [Practice5](#) du github*

# Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à  
bioinfo-mas-  
ter.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources

**Etape 1**

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

**Etape 2**

Transfert de  
données  
depuis  
Ordinateur  
personnel  
vers les  
serveurs  
nas

**Etape 3**

Transfert  
des  
données  
depuis les  
nas vers le  
/scratch du  
noeud

**Etape 4**

Charger ses  
logiciels avec  
modules  
environnement

**Etape 5**

Lancer les  
analyses sur  
les données

**Etape 6**

- Charger la version du logiciel à lancer
- Lancer l'analyse des données

```
$~ commande <options> <arguments>
```

Avec *commande*: la commande à lancer

- Exécuter une commande bash via qsub
- Lance la commande sur un noeud
- On utilise la commande:

```
$~ qsub -b y "commande"
```

Avec *commande*: la commande à lancer

# Options de la commande qsub

Options	Description	Exemple
qsub -N <name>	Donner un nom au job	qsub -N tando_blast
qsub -q <queue>	Choisir une queue en particulier	qsub -q highmem.q
qsub -l hostname=<nodeX>	Choisir un noeud en particulier	qsub -l hostname=node10
qsub -pe <ompi X>	Lancer un job avec plusieurs coeurs	qsub -pe ompi 4
qsub -M <emailaddress>	Envoyer un mail	qsub -M ndomassi.tando@ird.fr
qsub -m <eab>	Envoyer un mail quand: e: fin du job a: abandon b: début du job	qsub -m be
qsub -cwd	Lancer un job depuis le répertoire courant	qsub -cwd script.sh



# Practice

## Etape6: lancer l'analyse

6

*Aller sur le [Practice6](#) du github*

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp source destination
```

- Syntaxe si la source est distante :

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

- Syntaxe si la destination est distante :

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



# Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à  
bioinfo-mas  
ter.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources

**Etape 1**

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

**Etape 2**

Transfert de  
données  
depuis  
Ordinateur  
personnel  
vers les  
serveurs  
nas

**Etape 3**

Transfert  
des  
données  
depuis les  
nas vers le  
/scratch du  
noeud

**Etape 4**

Charger ses  
logiciels avec  
modules  
environment

**Etape 5**

Lancer les  
analyses sur  
les données

**Etape 6**

Transfert  
des  
résultats sur  
les serveurs  
nas

**Etape 7**  
scp



# 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

Connexion à  
bioinfo-mas-  
ter.ird.fr et  
réservation  
de  
ressources

Etape 1

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

Etape 2

Transfert de  
données  
depuis  
Ordinateur  
personnel  
vers les  
serveurs  
nas

Etape 3

Transfert  
des  
données  
depuis les  
nas vers le  
/scratch du  
noeud

Etape 4

Charger ses  
logiciels avec  
modules  
environment

Etape 5

Lancer les  
analyses sur  
les données

Etape 6

Transfert  
des  
résultats sur  
les serveurs  
nas

Etape 7

Suppression  
Du répertoire  
d'analyse sur  
le /scratch

Etape 8  
**rm**



# 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 scratchs: scratch\_use.sh

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

- Supprimer ses données sur les scratchs: clean\_scratch.sh

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

**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 sge
- On utilise la commande:

```
$~ qsub script.sh
```

Avec `script.sh` : le nom du script

# Options de la commande qsub

Options	Description	Exemple
qsub -N <name>	Donner un nom au job	qsub -N tando_blast
qsub -q <queue>	Choisir une queue en particulier	qsub -q highmem.q
qsub -l hostname=<nodeX>	Choisir un noeud en particulier	qsub -l hostname=node10
qsub -pe <ompi X>	Lancer avec plusieurs coeurs	qsub -pe ompi 4
qsub -M <emailaddress>	Envoyer un mail	qsub -M ndomassi.tando@ird.fr
qsub -m <eab>	Envoyer un mail quand: e: fin du job a: abandon b: début du job	qsub -m be
qsub -cwd	Lancer un job depuis le répertoire courant	qsub -cwd script.sh

Dans la première partie du script on renseigne les options d'exécution de sge avec le mot clé `#$` (partie en vert)

```
#!/bin/sh

##### SGE CONFIGURATION #####
# Ecrit les erreur dans le fichier de sortie standard
#$ -j y

# Shell que l'on veut utiliser
#$ -S /bin/bash

# Email pour suivre l'execution
#$ -M prenom.nom@ird.fr ##### Mettre son adresse mail

# Type de message que l'on reçoit par mail
# - (b) un message au demarrage
# - (e) a la fin
# - (a) en cas d'abandon
#$ -m bea

# Queue que l'on veut utiliser
#$ -q formation.q

# Nom du job
#$ -N Nom_a_choisir
#####
```

Dans la 2e partie du script on renseigne les actions à effectuer

```
path_to_dir="/data/projects/rep_a_choisir";
path_to_tmp="/scratch/nom_rep_a_choisir-$JOB_ID"

##### Creation du repertoire temporaire sur noeud et chargement du module blast
module load bioinfo/blastn/2.4.0+
mkdir $path_to_tmp
scp -rp nas2:$path_to_dir/* $path_to_tmp # choisir nas pour/home, /data2 et /teams ou nas2 pour /data ou nas3 pour /data3
echo "transfert donnees master -> noeud";
cd $path_to_tmp

##### Execution du programme
cmd="blastn -db All-EST-cofea.fasta -query sequence-NMT.fasta -num_threads $NSLOTS -out blastn1-$JOB_ID.out";
echo "Commande executee : $cmd";
$cmd;

##### Transfert des données du noeud vers master
scp -rp $path_to_tmp/ nas:$path_to_dir/
echo "Transfert donnees node -> master";

##### Suppression du repertoire tmp noeud
rm -rf $path_to_tmp
echo "Suppression des donnees sur le noeud";
```



# Practice

Lancer un script avec qsub

9

*Aller sur le [Practice9](#) du github*

Merci de compléter l'enquête à cette adresse:

<https://itrop-survey.ird.fr/index.php/562934?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 ressource de calcul dans vos réponses à projets
- Besoin en disques dur, renouvellement de machines etc...
- Devis disponibles
- Contactez [bioinfo@ird.fr](mailto: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/>