

# Initiation HPC cluster

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

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





# Présentation i-Trop



Julie ORJUELA-  
BOUNIOL, IE  
Bioinformaticienne

Ndomassi TANDO, IE  
Ingénieur systèmes  
Animateur plateau, RMQ

Christine TRANCHANT-  
DUBREUIL, IR  
Bioinformaticienne



Aurore COMTE, IE  
Bioinformaticienne

Alexis DEREPPER, IE  
Bioinformaticien



Bruno GRANOULLAC, IE  
Systèmes d'information



Jacques Dainat, IR  
Bioinformaticien



# Présentation i-Trop





# Demandes/incidents/Howtos

- Formulaires de demandes  
<https://bioinfo.ird.fr/index.php/cluster-fr/>
  - Comptes
  - Installation logiciels
  - Projets
- Incidents: contacter [bioinfo@ird.fr](mailto: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



# 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

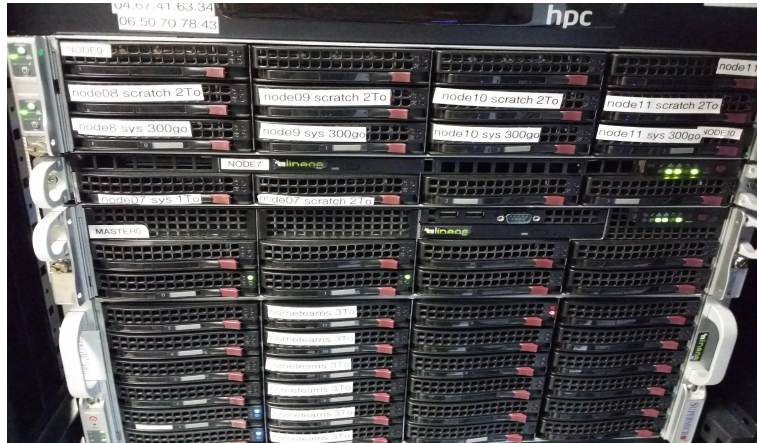


# Qu'est ce qu'un cluster?

- 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



# Architecture: rôle des éléments

## ● 1 Noeud Maître



**bioinfo-master1.ird.fr**

Rôle :

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

```
ssh login@bioinfo-master1.ird.fr
```



# Architecture: rôle des éléments

## ● 1 Noeud Maître



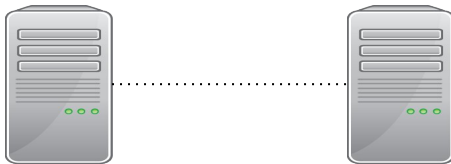
**bioinfo-master1.ird.fr**

Rôle :

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

```
ssh login@bioinfo-master1.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, srun

1

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





# Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion à  
bioinfo-  
master1.ird.f  
r et  
réservation  
de  
ressources



**Etape 1**  
srun ou  
sbatch



# Les files d'attente

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 512Go	12 à 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



# Cas particulier : partition gpu

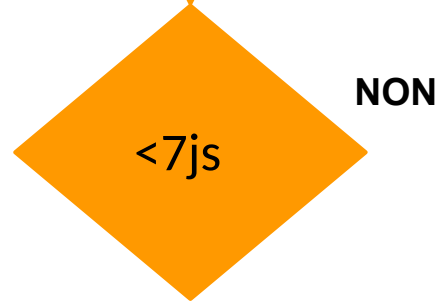
- Partition pour effectuer des travaux sur des processeurs GPUs: basecalling, MiniOn etc..
- Accès restreint au groupe gpu\_account
- Demande d'accès avec argumentaire à faire sur

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



# Quelle partition choisir?

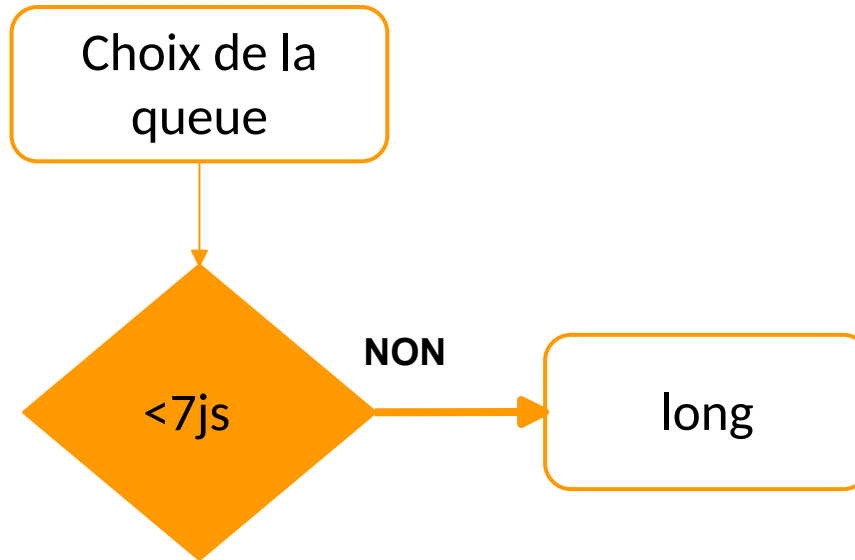
Choix de la  
partition



OUI

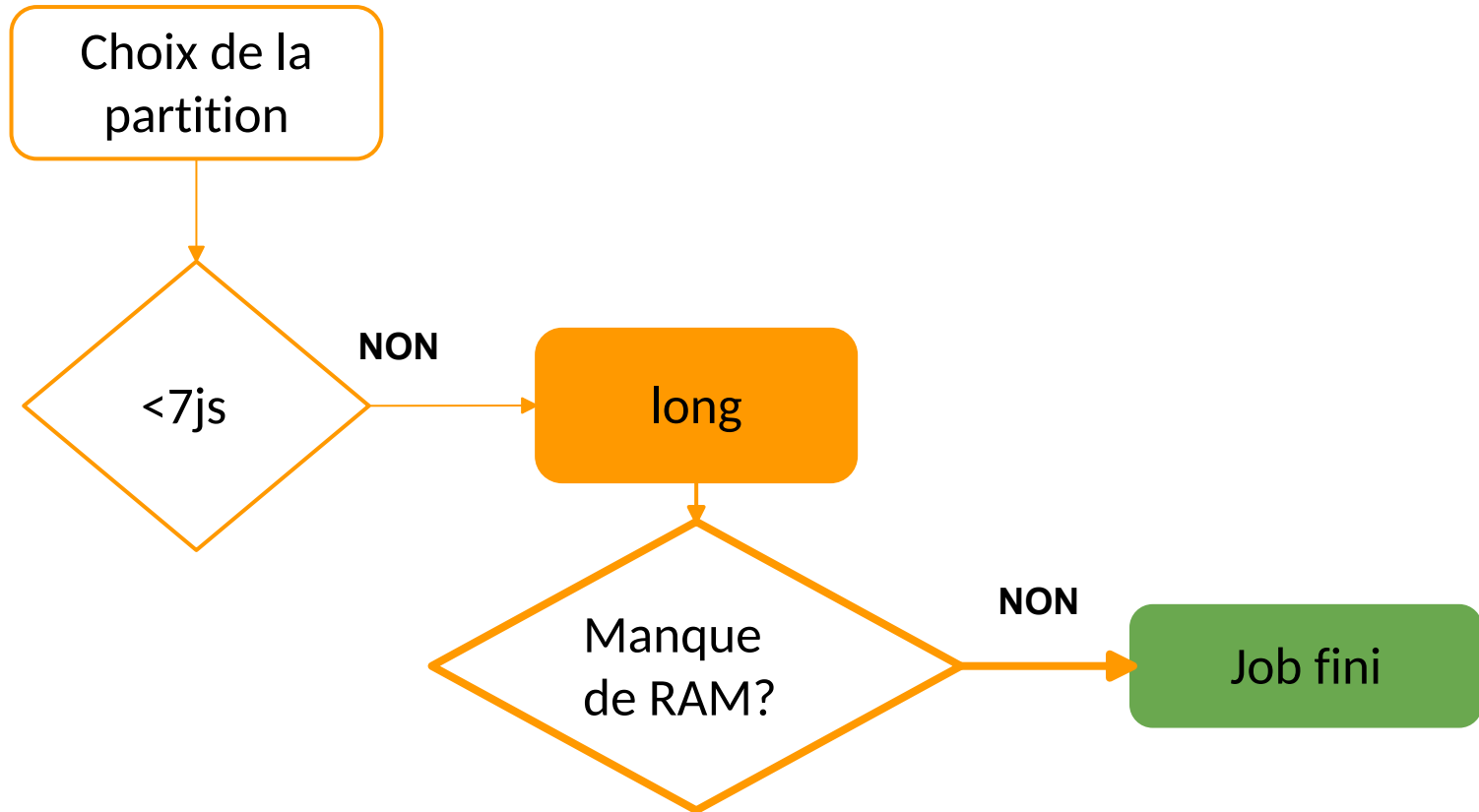


# Quelle partition choisir?



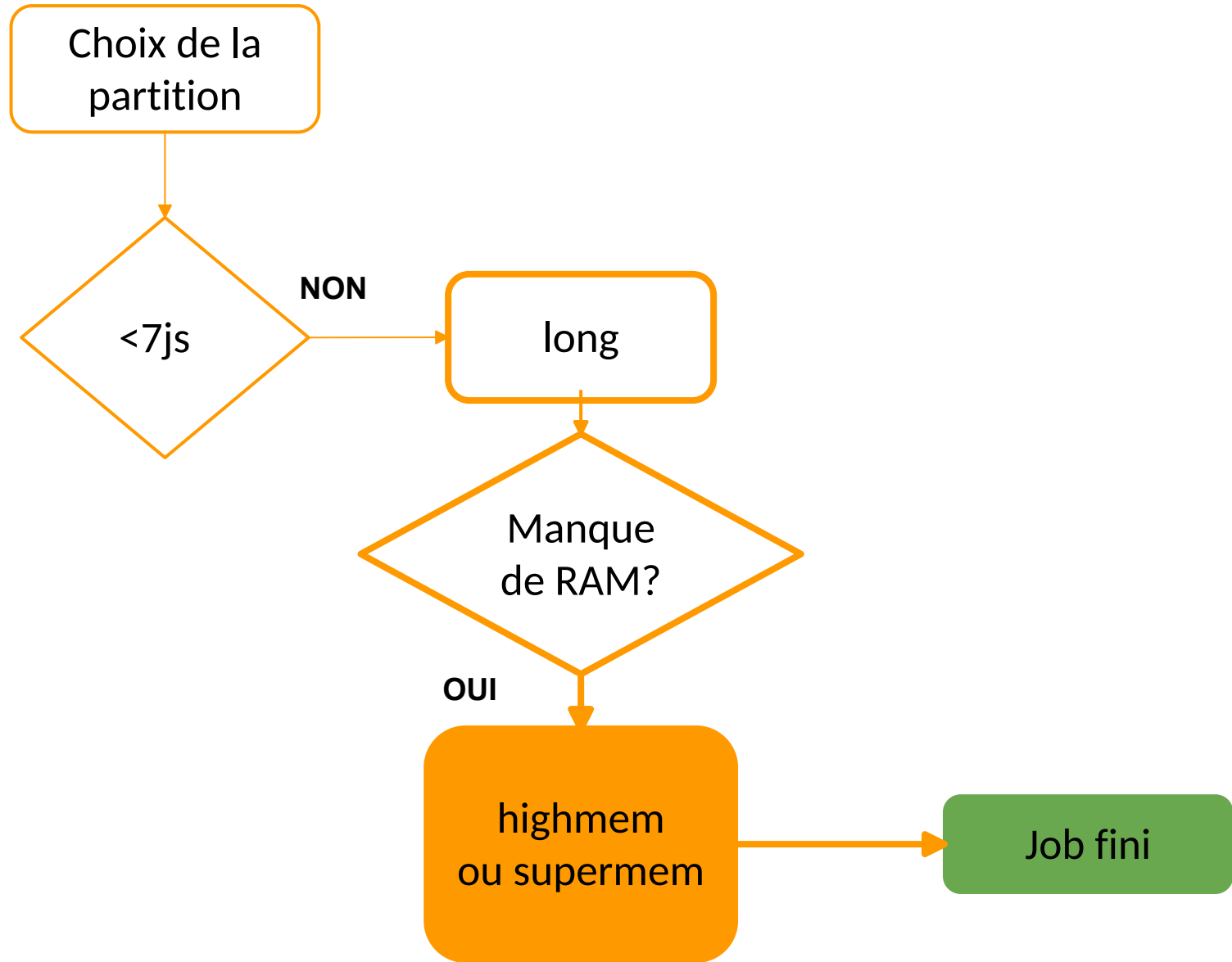


# Quelle partition choisir?



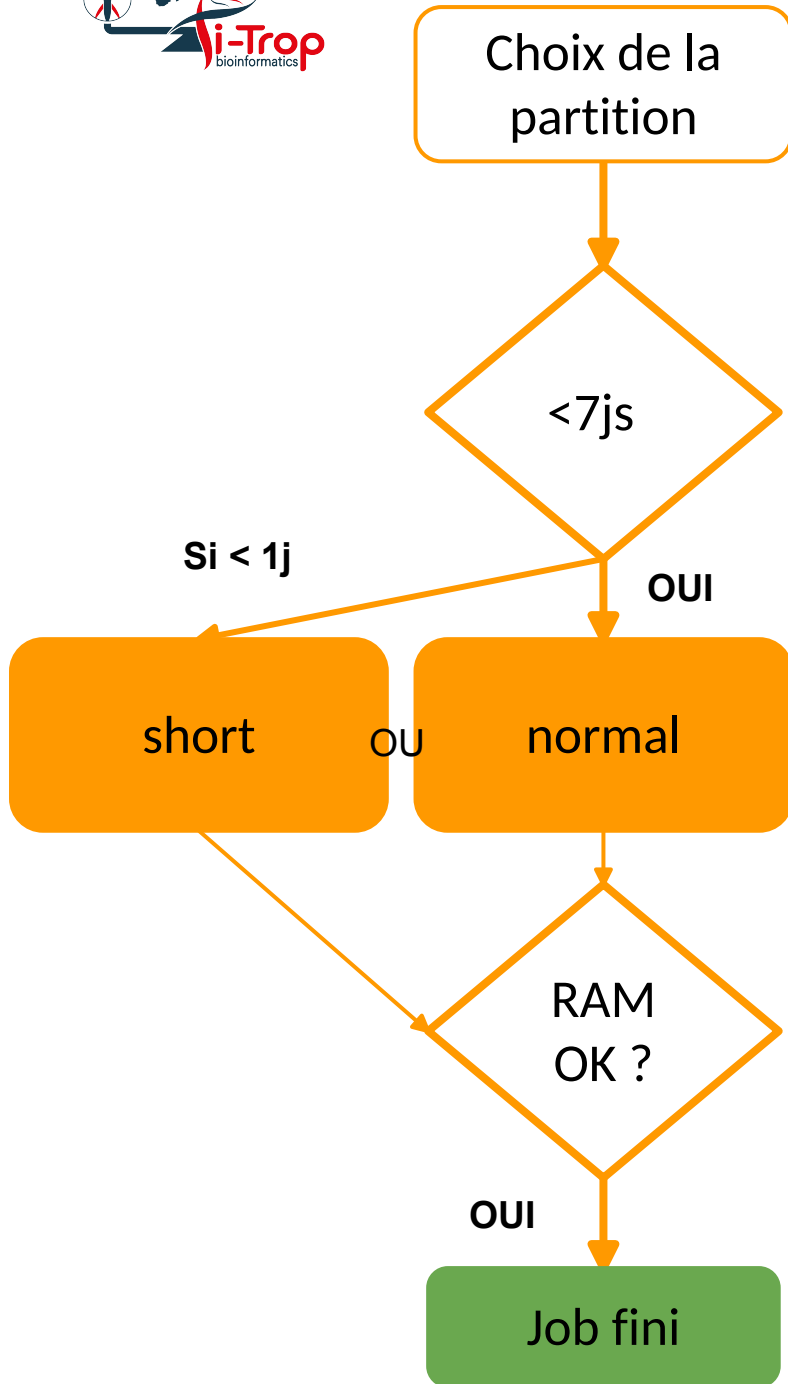


# Quelle partition choisir?





# Quelle partition choisir?







# Quelle partition choisir?

Choix de la partition

<7js

OUI

short

ou

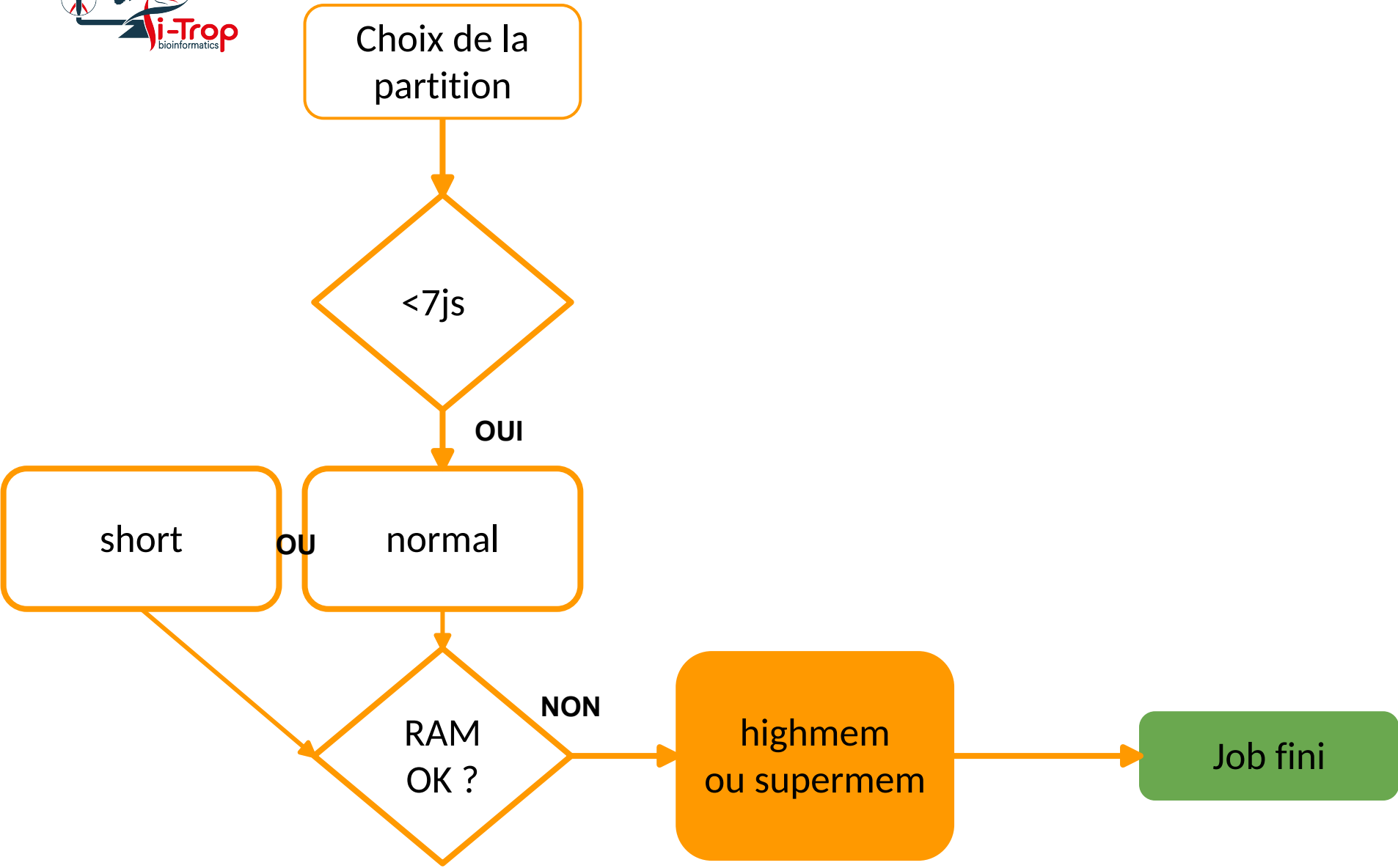
normal

RAM  
OK ?

NON

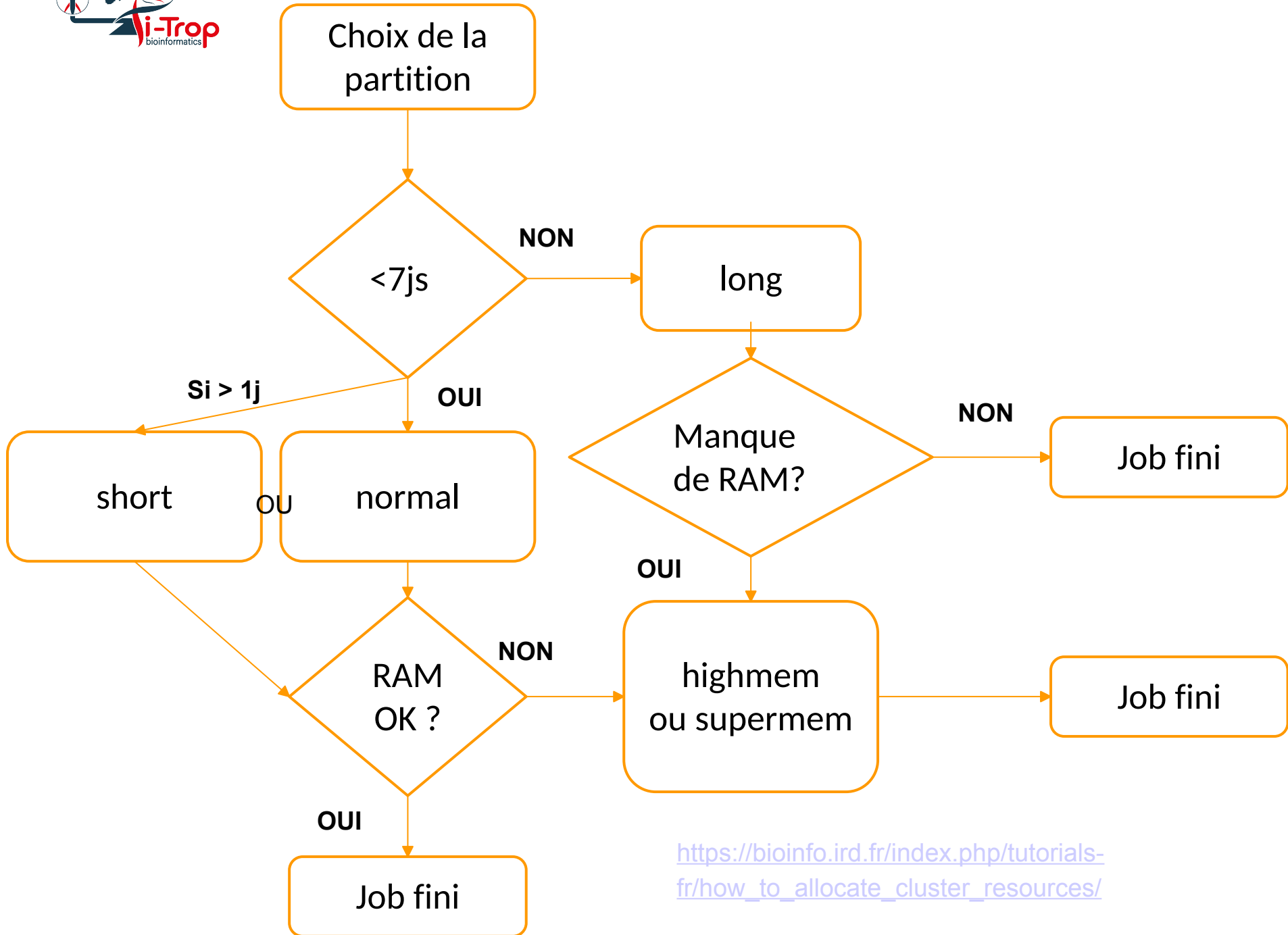
highmem  
ou supermem

Job fini





# Quelle partition choisir?



[https://bioinfo.ird.fr/index.php/tutorials-fr/how\\_to\\_allocate\\_cluster\\_resources/](https://bioinfo.ird.fr/index.php/tutorials-fr/how_to_allocate_cluster_resources/)



# 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. <b>nb de coeurs tool = nb de coeurs à réserver</b>
genotypage	<i>normal</i>	GATK haplotypcaller, samtools mpileup, bcftools	besoin de bcp des coeurs pas bcp de RAM. <b>nb de coeurs tool = nb de coeurs à réserver</b>
stats	<i>normal</i>	R	
test de scripts	<i>short</i>	bash, python, R	



# Architecture: rôle des éléments

## ● 1 Noeud Maître

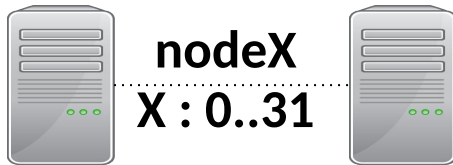


**bioinfo-  
master1.ird.fr**

Rôle :

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

## ● 32 Noeuds de Calcul



Rôle :

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

## ● 1 baie san



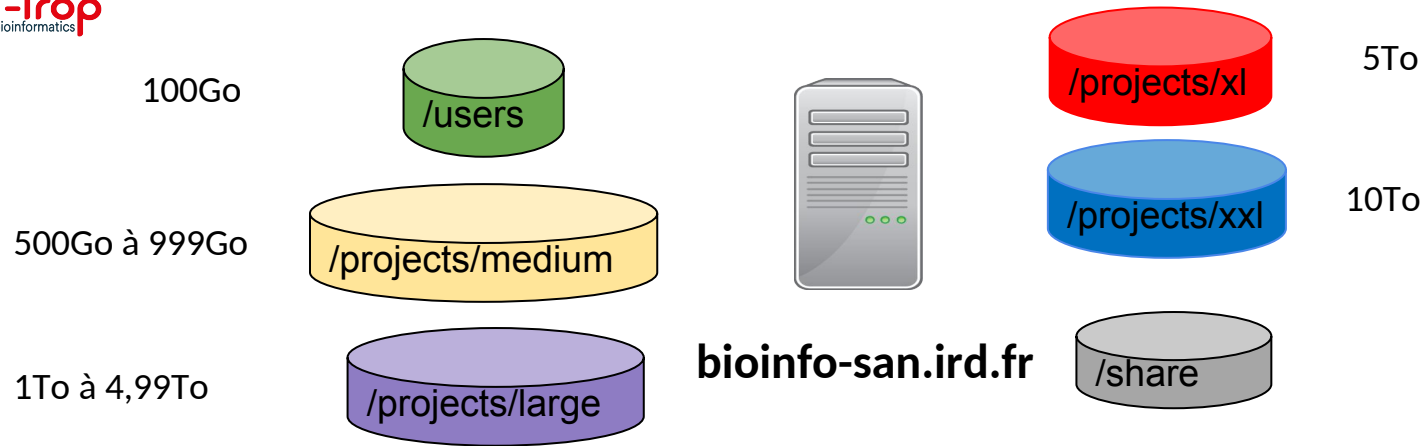
**bioinfo-san.ird.fr  
(san)**

Rôle :

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



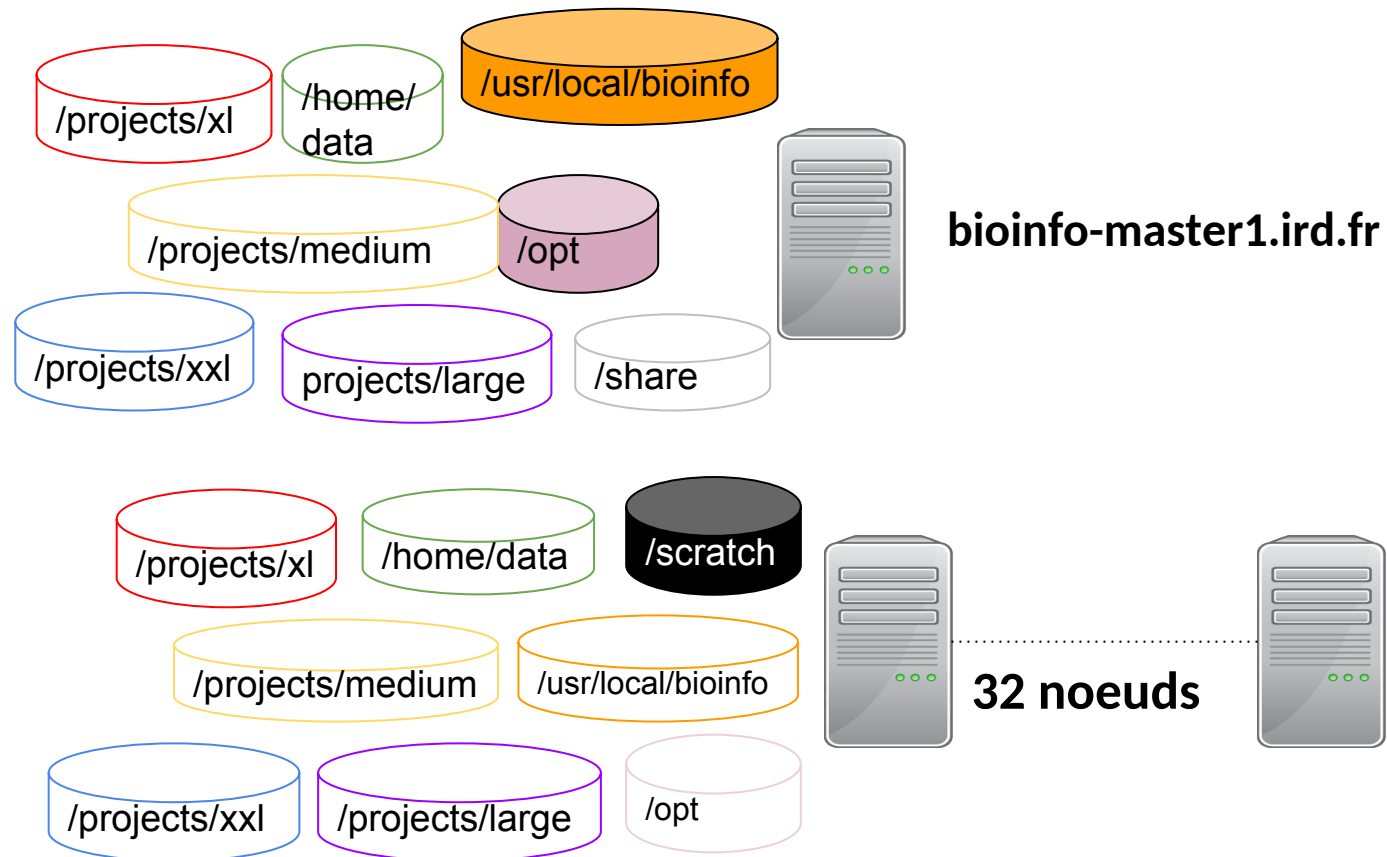
# Partitions disques sur le cluster i-Trop



## Légende:

**Disques durs locaux en cylindres pleins**

**Liens virtuels vers disques durs physiques (cylindres vides)**





# Etapes d'une analyse sur le cluster

Connexion  
à bioinfo-  
master1.ird.  
fr et  
réservation  
de  
ressources



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

**Etape 1**

**Etape 2**  
**mkdir**



# Practice

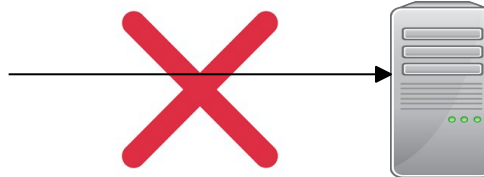
Etape 2:srun, partition

2

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



Ordinateur  
personnel



**Transfert  
direct via  
filezilla interdit**



**bioinfo-master1.ird.fr**





# Transferts de données sur le cluster itrop

/users, /projects/medium/, /projects/large,  
/projects/xl, projects/xxl ou /share



**bioinfo-san.ird.fr**

Hostname :  
bioinfo-san.ird.fr

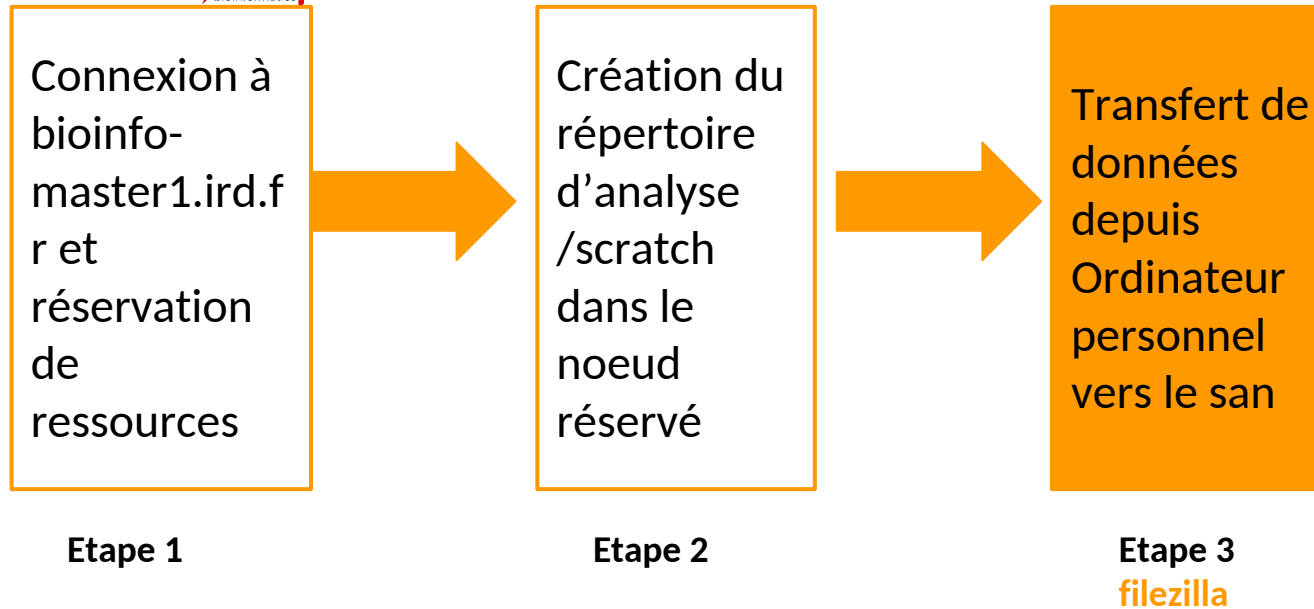
Login : cluster  
account

Clé ssh  
Port : 22





# Etapes d'une analyse sur le cluster



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*



# La copie avec scp

- 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
```

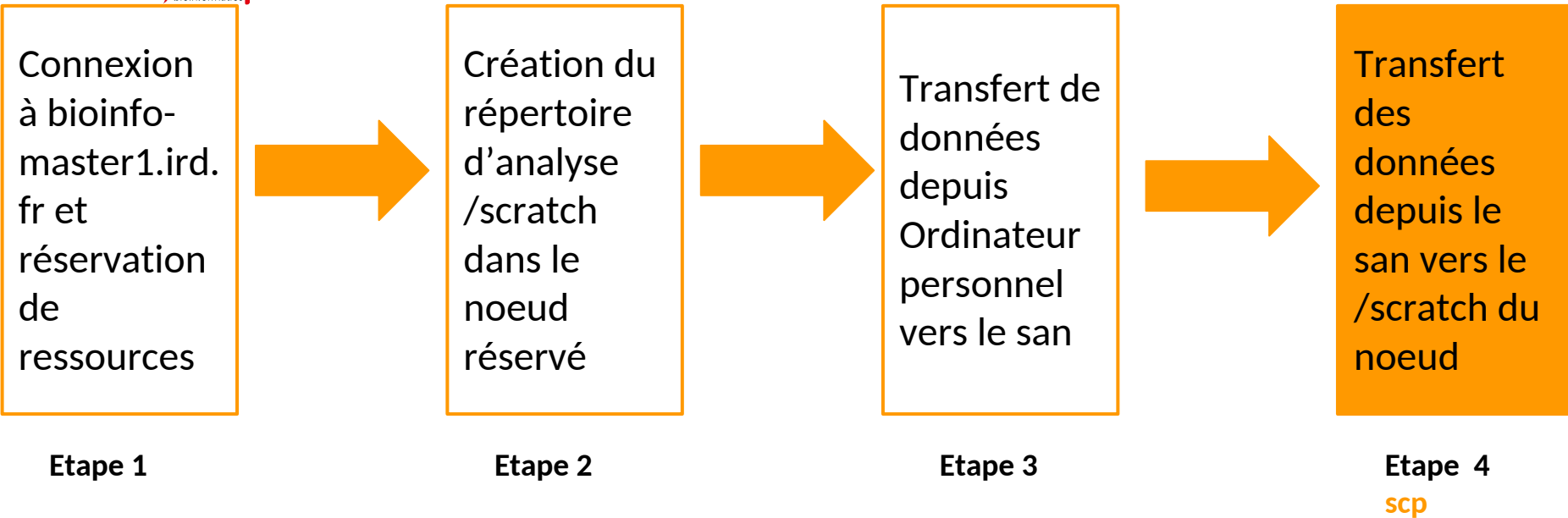
- Syntaxe si la destination est distante :

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

Ex: `scp -r san:/home/tando/data/repertoire /scratch/tando/`



# Etapes d'une analyse sur le cluster





# Practice

Etape4: scp vers noeuds

4

*Aller sur le [Practice4](#) du github*



# 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



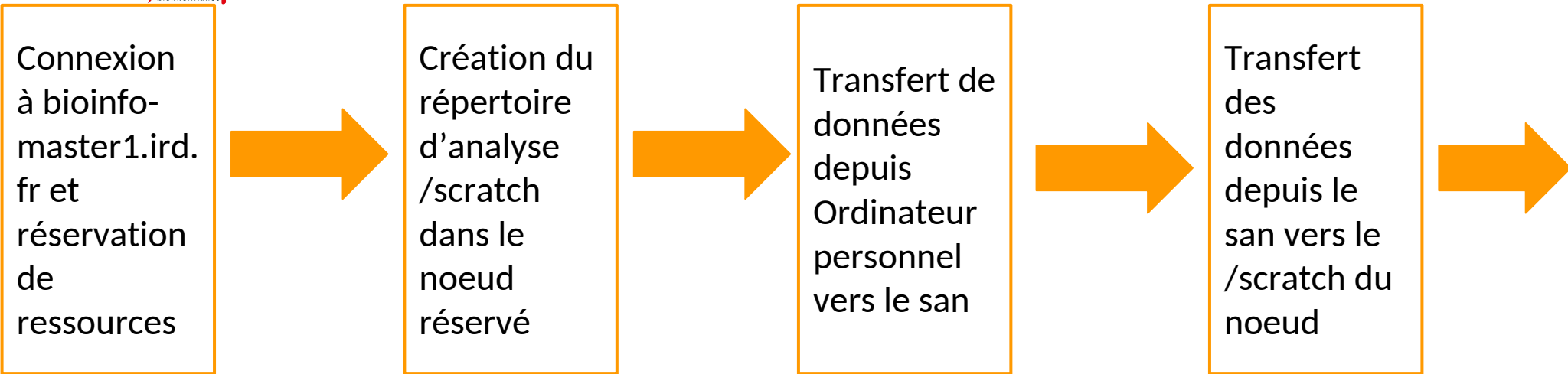
# Module Environment

- 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`





# Etapes d'une analyse sur le cluster



Connexion à bioinfo-master1.ird.fr et réservation de ressources

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

Transfert de données depuis Ordinateur personnel vers le san

Transfert des données depuis le san vers le /scratch du noeud

Etape 1

Etape 2

Etape 3

Etape 4

Charger ses logiciels avec modules environment

Etape 5

module



# Practice

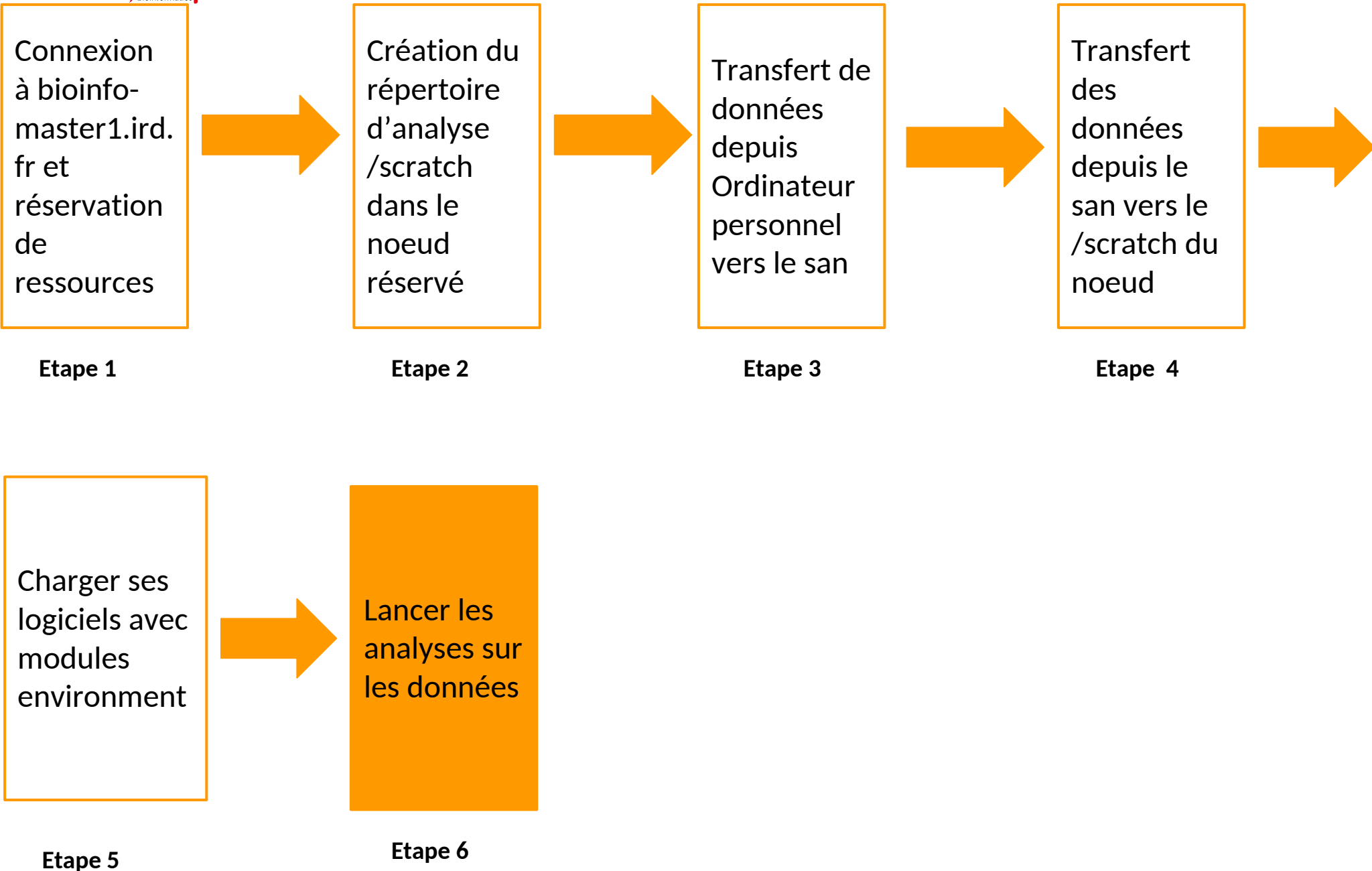
Etape5: module environment

5

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



# Etapes d'une analyse sur le cluster





# Lancer une commande depuis le prompt

- 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*



# Le transfert des résultats vers le san

- Copie entre 2 serveurs distants :

```
scp -r source destination
```

- Syntaxe si la source est distante :

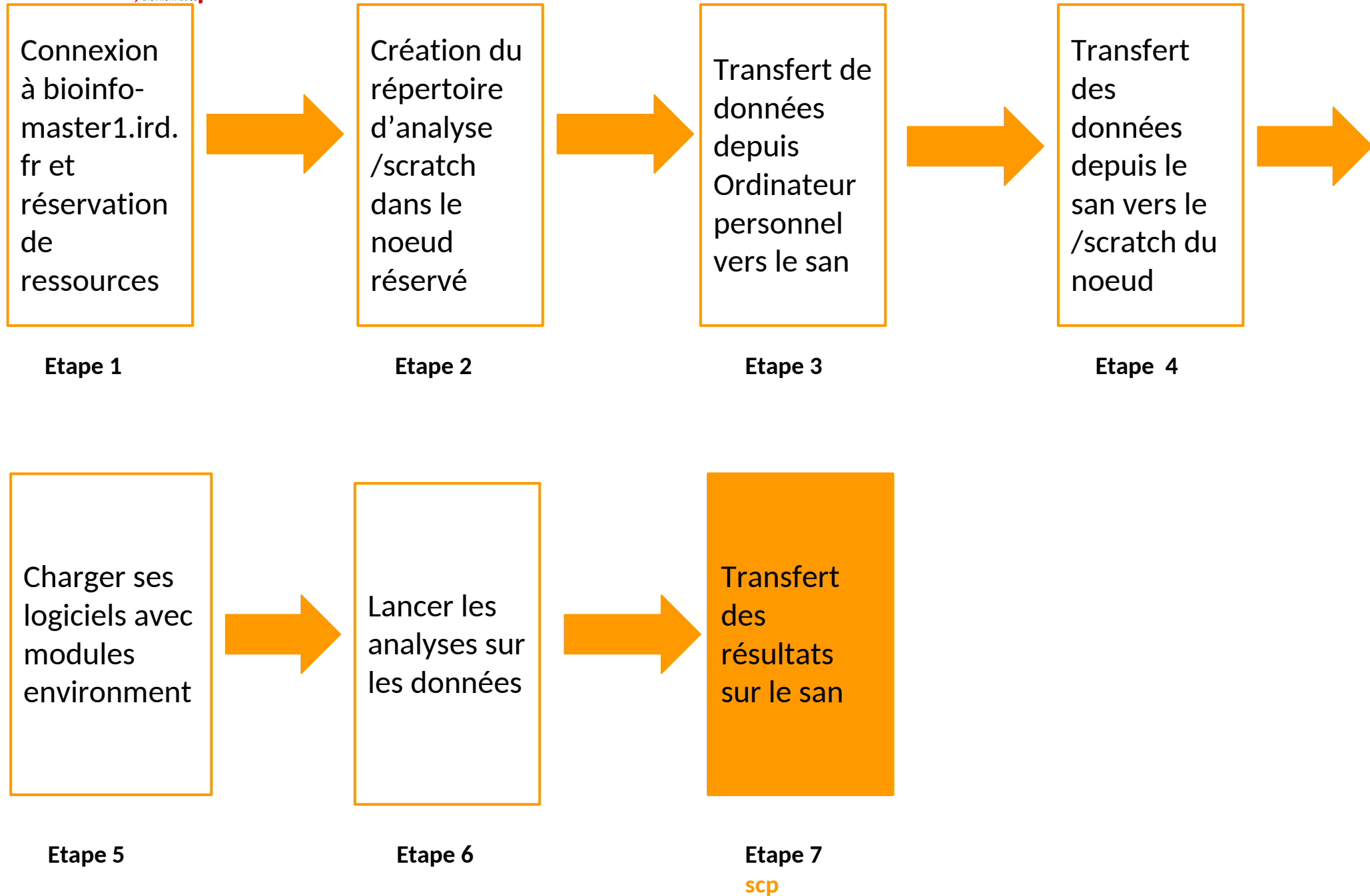
```
scp -r nom_serveur:/chemin/fichier_a_copier repertoire_local
```

- 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*





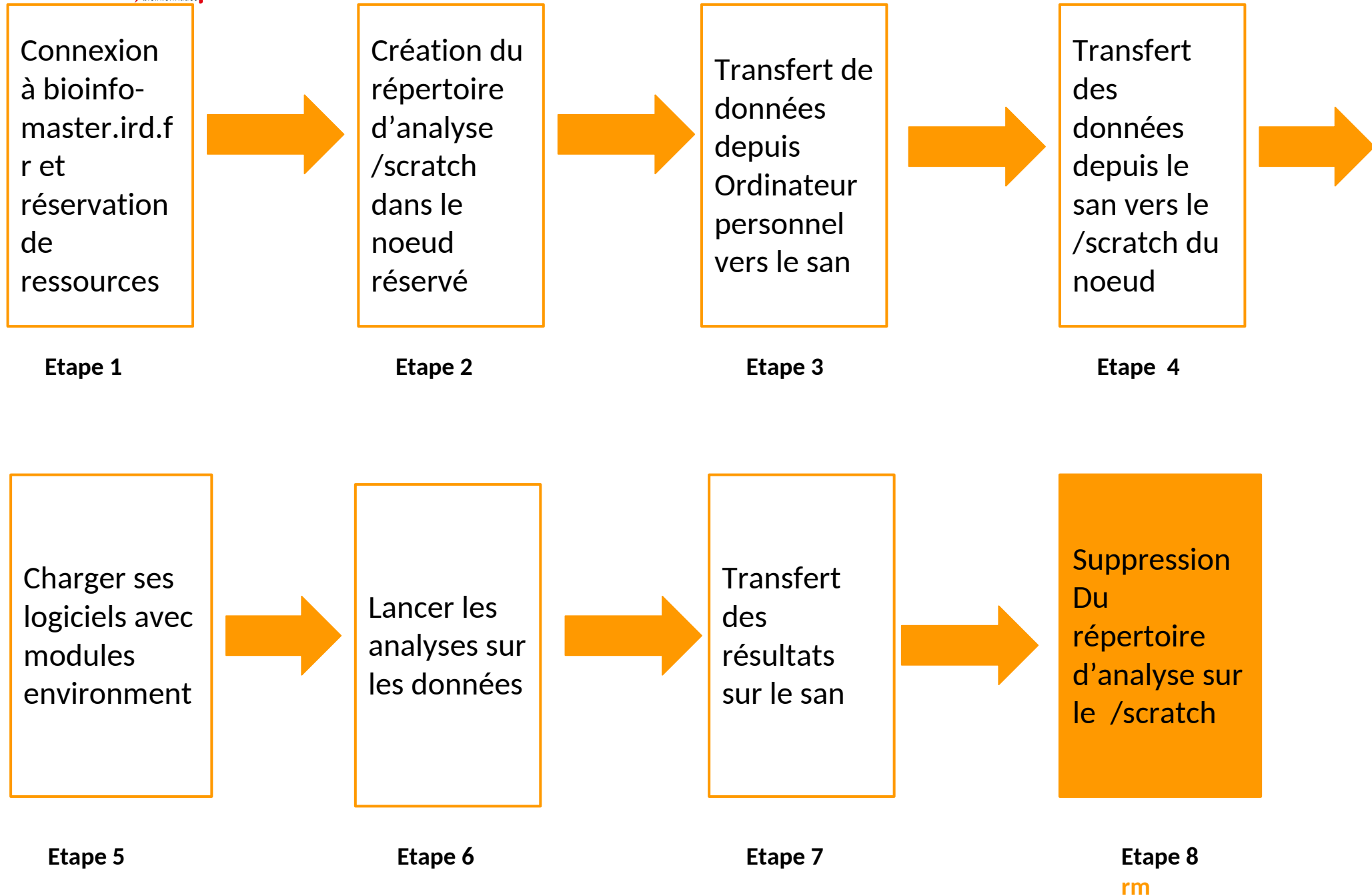
# Supprimer les résultats des scrachs

- 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
```



# Principales commandes Slurm

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 &lt;job_id&gt;</code>	Infos sur le job actif <job_id>	<code>scontrol show job 1029</code>
<code>sacct -j &lt;job_id&gt;</code>	Infos sur le job terminé <job_id>	<code>sacct -j 1029</code>



# Options des commandes sbatch, srun, salloc

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



# LANCER UN JOB



# Avantages

- Le scheduler choisit les ressources automatiquement
- Lancer des jobs utilisant jusqu'à **32 coeurs**
- Possibilité de paramétrer ce choix
- Jobs lancés en arrière plan
  - possibilité d'éteindre son ordinateur
  - récupération des résultats automatique





# Lancer un job en mode batch

- 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 des commandes sbatch, srun, salloc

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



# Syntaxe des scripts bash

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
#####
```



# Syntaxe des scripts bash

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*



# Enquête de satisfaction

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

<https://itrop-survey.ird.fr/index.php/432222?lang=fr>



# Citations

Si vous utilisez les ressources du plateau i-Trop.

Merci de nous citer avec:

“The authors acknowledge the ISO 9001 certified IRD i-Trop 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>  
”



# Projets

- 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](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/>