

FICHE TECHNIQUE CTIG

DGA20

Diffusée le :

Destinataires :

OBJET – CHAMP D'APPLICATION

Mode d'emploi destiné aux utilisateurs de DGA20 mis à disposition par le CTIG afin d'effectuer des tâches qui nécessitent de faire tourner x jobs en simultané.

CONDITIONS REQUISES

Avoir un compte sur dga20.

Avoir un compte sur dga-cluster si besoin de faire tourner des jobs via SGE ou pour compiler avec Intel Fortran

DEFINITIONS ET ABBREVIATIONS

SOMMAIRE

1	PRESENTATION DE DGA20	3
2	CONNEXION A DGA20	3
	2.1.1 <i>Ligne de commande (SSH)</i>	3
	2.1.2 <i>Connexion graphique (NX)</i>	3
3	ORGANISATION ESPACE DISQUE	3
4	L'ORDONNANCEUR SGE (TRAVAUX BATCH)	3
	4.1.1 <i>Présentation de SGE</i>	3
	4.1.2 <i>Files d'attentes</i>	4
	4.1.3 <i>Limites par nœud pour SGE</i>	4
	4.1.4 <i>Soumettre un job</i>	5
	4.1.5 <i>Suivre l'exécution d'un job</i>	5
	4.1.6 <i>Obtenir de l'information sur un job terminé</i>	6
	4.1.7 <i>Tuer un job</i>	6
5	CONTACTS	6

1 Présentation de dga20

dga20 est un serveur SuperMicro équipé de 2 processeurs Xeon 16 Core E5-2698v3 et de 512 Go de RAM. L'OS installé est RedHat Enterprise Linux 6.

dga20 est dédié à l'interactivité.

Les utilisateurs peuvent lancer des travaux, mais si ceux-ci demandent beaucoup de ressources (mémoire, processeurs), il est préférable d'utiliser l'ordonnanceur de travaux batch (SGE).

Le compilateur Intel Fortran n'est pas disponible sur dga20.

Pour compiler un programme avec ce compilateur, il faut aller sur **dga-cluster** (ssh user@dga-cluster) ou utiliser la classe SGE **ifort**.

Attention : les jobs s'exécutant sur dga20 pourront être supprimés sans préavis s'ils pénalisent les autres utilisateurs.

2 Connexion à dga20

2.1.1 Ligne de commande (SSH)

Pour se connecter utiliser un client SSH tel que PuTTY sous Windows, ou SSH sous Linux :

```
ssh user@dga20.jouy.inra.fr
```

Votre mot de passe vous est demandé. Vous arrivez ensuite dans votre répertoire personnel : /home/user.

2.1.2 Connexion graphique (NX)

Pour se connecter au bureau graphique GNOME il faut utiliser un client NX comme x2Go. Voir « Comment accéder à nos serveurs ? » dans la FAQ du Wiki du projet « CTIG Environnement » sur la forge du dga (<https://forge-dga.jouy.inra.fr/projects/ctig-env-base>).

3 Organisation espace disque

A la connexion vous vous retrouvez dans votre espace personnel sous /home. Cet espace à une taille totale de 600 Go, mais vous êtes limités à 4 Go par utilisateur. Cet espace est sauvegardé tous les jours.

Sauvegarde (classe MCAIX1) : tant que le fichier existe sur disque, la dernière version de sauvegarde de celui-ci est conservée. Les deux versions précédentes du fichier sont conservées 90 jours. Lorsque le fichier est supprimé du disque, la dernière version est conservée 40 jours.

4 L'ordonnanceur SGE (travaux batch)

4.1.1 Présentation de SGE

L'ordonnanceur utilisé pour soumettre des jobs de calcul sur **dga-cluster** est SGE (Son of Grid Engine), c'est un logiciel open source dont la documentation complète est disponible librement à l'adresse : <https://arc.liv.ac.uk/trac/SGE>

La différence principale par rapport à l'ancien serveur dga12 est qu'il n'y a plus de jobs batch qui s'exécutent sur dga20. Maintenant, les jobs soumis par SGE s'exécutent exclusivement sur

le cluster. **Avoir un compte sur dga-cluster** est donc nécessaire pour pouvoir soumettre des jobs via l'ordonnanceur

Il a été mis en place plusieurs files d'attente (queues) suivant entre autres la durée maximum d'exécution du job.

L'objectif des files est de répondre à la majeure partie des besoins tout en optimisant l'utilisation des ressources de la machine.

4.1.2 Files d'attentes

Nom de la file	Durée maximum du job*	Nombre de cœurs disponibles	Max jobs (2) / utilisateur
bigmem	Infinie	160	120
copyq	Infinie	16	12
ifort	infinie	1	1
longq	48h	154	110
sas	infinie	16	12
sasindex(1)	infinie	16	12
unlimitq	infinie	30	21
workq	02h	1001	640

(1) réservées aux utilisateurs inscrits dans le groupe index-sge.

(2) le nombre maximum de jobs actifs pour un utilisateur est de 890 (toutes classes confondues)

*Durée maximum d'utilisation du processeur

Les jobs en trop sont mis en attente.

4.1.3 Limites par nœud pour SGE

Ressources utilisables par nœud sur	72 Nœuds à 128 Go de mémoire	8 Nœuds à 256 Go de mémoire	2 Nœuds à 512 Go de mémoire
Mémoire	125 Go	250 Go	500 Go
CPU (nombre de cœurs)	16	16	32

4.1.4 Soumettre un job

En ligne de commande :

```
qsub - submit a batch job to Sun Grid Engine.
qsh - submit an interactive X-windows session to Sun Grid Engine.
qlogin - submit an interactive login session to Sun Grid Engine.
qrsh - submit an interactive rsh session to Sun Grid Engine.
qalter - modify a pending batch job of Sun Grid Engine.
qresub - submit a copy of an existing Sun Grid Engine job.
```

Exemple pour un job simple :

- 1 - Il faut préparer un fichier (script) contenant la (ou les) ligne(s) de commande
- 2 - Vos fichiers de sortie doivent être impérativement dirigés vers votre espace de travail
- 3 - Il faut **impérativement** préciser la quantité de mémoire à utiliser avec `-l h_vmem=` sinon il vous sera alloué 4Go maximum par job.
- 4 - Soumettre le job avec la commande de soumission (`qsub`)

Voici un exemple de script de soumission (il est aussi possible de lancer des jobs en interactif):
`monscript.sh`

```
#!/bin/sh
#$ -o /work/.../output.txt
#$ -e /work/.../error.txt
#$ -q long
#$ -M mon_email@inra.fr
#$ -m bea
#$ -l h_vmem=3G
# Mon programme commence ici :
blastall -d swissprot -p blastx -i /work/.../z72882.fa
```

Toute ligne commençant par `#$` indique une option à exécuter par `sgc` (e.g. : `-q long` indique à SGE d'exécuter le job sur la queue longue.)

Pour soumettre :
`qsub monscript.sh`

Ne pas mettre le droit d'exécution au fichier `monscript.sh` car la commande `qsub` renverra le message d'erreur « `qsub: Unknown option` ».

Alternativement, vous pouvez ne faire apparaître que les lignes de commandes dans le script et indiquer les options à l'appel de `qsub`.

Soit `qsub -l h_vmem=3G -q long -M mon_email@inra.fr -m bea Monscript.sh`

Avec l'interface graphique ce sont les mêmes commandes. Pour lancer l'interface taper « `qmon` ».

4.1.5 Suivre l'exécution d'un job

Utiliser la commande `qstat` dont voici quelques options :

```
# qstat : liste les jobs de tous les utilisateurs en cours
# qstat -u user : donne les informations uniquement sur l'utilisateur
# qstat -j job_id : détail sur un job en particulier (numéro id attribué par SGE)
# qstat -s r : donne uniquement les jobs avec le status r(unning)
# qstat -f : visualise les jobs en cours par file et par nœud
```

La commande `qmon` permet de donner le même type d'information via une interface graphique.

4.1.6 Obtenir de l'information sur un job terminé

Utiliser la commande qacct :

```
#qacct -j job_id : donne les informations sur un job en particulier.
```

4.1.7 Tuer un job

```
#qdel -j job_id : tue un job en particulier
```

```
#qdel -u user : tue l'ensemble de mes jobs
```

On ne peut pas tuer les jobs d'un autre utilisateur.

5 Contacts

Pour toute demande, question ou problème, contacter l'équipe système du CTIG à l'adresse ctig.systeme@dga.jouy.inra.fr