

CONNEXION AUX RESSOURCES

1. TERMINAL

Nous vous invitons à vous connecter sur `hpc-login.u-strasbg.fr` par `ssh` :

```
ssh -Y <login>@hpc-login.u-strasbg.fr
```

`<login>` : votre login sur le centre de calcul. L'option `-Y` permet de propager l'affichage graphique si nécessaire.

2. PUTTY

PuTTY est un client SSH et telnet pour Windows. Vous pouvez télécharger ce client ici : <https://www.putty.org>.

Voici comment configurer la connexion :

- Session > Host Name : `hpc-login.u-strasbg.fr` ;
- Connection > Data : Auto-login username : `<login>` ;
- Connection > SSH > Auth : Private key file for authentication : indiquez le chemin vers votre clé ssh privée ;
- Connection > SSH > Auth > X11 : cochez Enable X11 forwarding si vous avez besoin d'un affichage graphique (pensez à lancer un serveur Xming au préalable) ;
- vous pouvez ensuite sauvegarder/charger vos réglages dans l'onglet Session.

DÉCOUVRIR L'ENVIRONNEMENT

The different program preinstalled on the HPC can be loaded with the *module* command.

List the loaded modules:

```
module list
```

List the available modules:

```
module avail
```

You can specify the beginning of the module name to shorten the list

Load a module:

```
module load module-name/version
```

It is not mandatory to specify the version, it will be indicated when loading. The required other

modules will also be loaded automatically and listed.

List of potential useful modules for us:

- amber/amber14
- ccp4/ccp4-7.0
- charmm/charmm
- chimera/chimera-1.11.2
- cistem/cistem-1.0.0
- matlab/r2021a
- phenix/phenix-1.17.1
- R/R-3.6.1
- relion/relion-3.1.2
- vmd/vmd

GESTION DES DONNÉES

Attention : L'espace de stockage du cluster est un espace avec une sécurisation des données minimales. Veillez à ne transférer que des données de travail, et récupérer vos résultats vers des lieux de stockage plus adaptés.

Par défaut, le quota disque par utilisateur est de 500 Go, mais l'attribution de grands quota disque peut se faire sous certaines conditions :

le besoin doit être lié à un ou plusieurs projets bien identifiés ;

- la gestion des fichiers doit être assurée au plus près (suppression de tout fichier devenu inutile) ;
- les données doivent être supprimées à la fin du projet (pas d'archivage à long terme).
- Vous pouvez monitorer l'utilisation de votre quota avec la commande `diskquota`.

Vous pouvez copier vos données avec les outils classiques Linux ([scp](#), [rsync](#), etc...) ou des logiciels comme [FileZilla](#).

scp

Depuis votre poste de travail vers le centre de calcul :

```
scp -r <données> <login>@hpc-login.u-strasbg.fr:<destination> # À exécuter sur votre poste de travail
```

Depuis le centre de calcul vers votre poste de travail :

```
scp -r <login>@hpc-login.u-strasbg.fr:<données> <destination> # À exécuter sur votre poste de travail
```

- <données> : votre répertoire de données (ou simple fichier)
- <destination> : l'endroit où vous voulez copier vos données

- <login> : votre login sur le centre de calcul

Vous pouvez également faire des transferts à partir de hpc-login vers votre poste de travail si un serveur ssh est installé sur ce dernier.

rsync

Depuis votre poste de travail vers le centre de calcul :

```
rsync -e ssh -avz <données> <login>@hpc-login.u-strasbg.fr:<destination> # À exécuter sur votre poste de travail
```

Depuis le centre de calcul vers votre poste de travail :

```
rsync -e ssh -avz <login>@hpc-login.u-strasbg.fr:<données> <destination> # À exécuter sur votre poste de travail
```

- <données> : votre répertoire de données (ou simple fichier)
- <destination> : l'endroit où vous voulez copier vos données
- <login> : votre login sur le centre de calcul

Vous pouvez également faire des transferts à partir de hpc-login vers votre poste de travail si un serveur ssh est installé sur ce dernier.

FileZilla

Pour configurer une connexion entre le centre de calcul et votre poste de travail :

- Fichier > Gestionnaire de sites (ou Ctrl+S) ;
- Nouveau Site ;
- Hôte : hpc-login.u-strasbg.fr ;
- Protocole : SFTP - SSH File Transfer Protocol ;
- Type d'authentification : Fichier de clé ;
- Identifiant : votre login d'accès au centre de calcul ;
- Fichier de clé : chemin vers votre [clé ssh](#). N'oubliez pas de la convertir en .ppk si nécessaire (la procédure est dans le lien précédent) ;
- Valider.

Vous pouvez maintenant aller dans votre gestionnaire de site et cliquer sur hpc-login pour vous connecter et transférer vos fichiers.

From:
<https://bsi.inscog.eu/> - **BSI wiki**

Permanent link:
https://bsi.inscog.eu/doku.php?id=hpc_usage&rev=1636458723

Last update: **2023/11/01 20:14**



