



Kontejnery a podpora uživatelů – Singularity



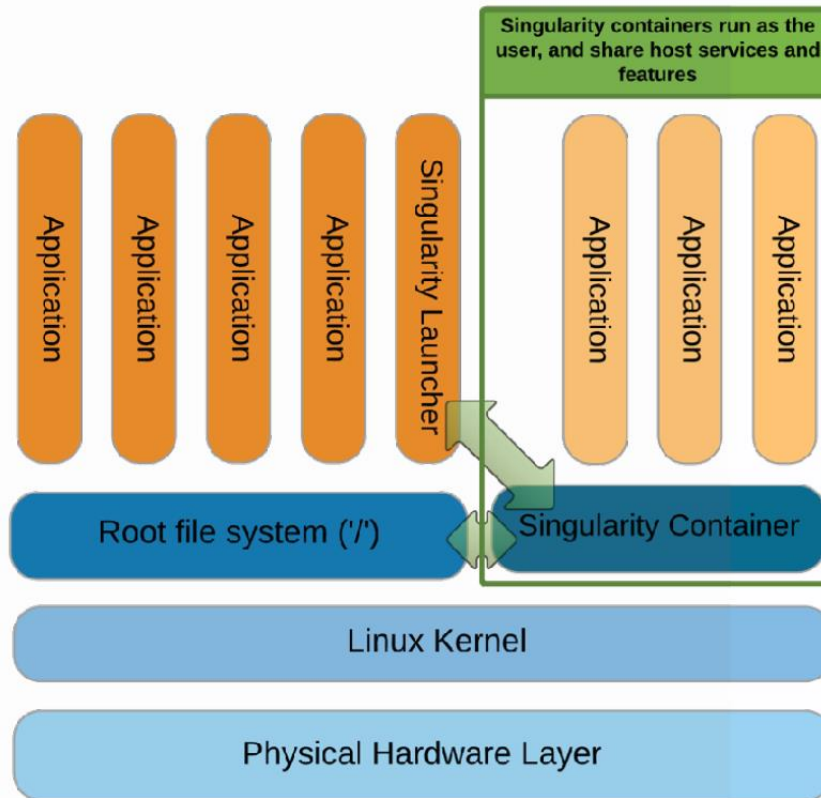
Seminář září 2021

Jan Hoidekr

- Kontejnery a Singularity
- Příklady použití
 - spuštění docker image
 - sestavení vlastní image
 - integrace storage a síť
- Podpora uživatelů se Singularity



- Kontejnery - OS-level virtualizace
- Docker, Podman, **Singularity**, ...
- Prostředí – aplikace a knihovny
- Image – upravené prostředí
- Kontejner – běžící image
- Registry – repozitář image
 - docker:// shub://
 - Filesystem, CVMFS



- Singularity
 - Sylabs.io původní tvůrce, HPCng převzal v 5/2020
 - Neběží jako démon
 - Singularity Image Format
 - Docker image -> SIF, naopak nelze
 - Integrace sítě, storage
 - GPU – CUDA i ROCm
 - MPI, Infiniband

**The Next Generation
of
High Performance
Computing**



- Motivace pro použití – unikátní prostředí
 - Vlastní definované prostředí - user/group/public
 - Sdílení prostředí
 - Opakovatelnost
- Jak začít v Metacentru
 - Použiju hotovou image – např. Docker, SIF
 - Vytvořím si vlastní image nebo upravím existující
 - Linux s rootem nebo subuid/subgid
 - v Metacentru - **builder.metacentrum.cz** + `builders`



■ Nástroj **ffmpeg** – multimedia framework

```
$ singularity run docker://jrottenberg/ffmpeg:4.2-ubuntu
INFO:   Converting OCI blobs to SIF format
INFO:   Starting build...
Getting image source signatures
Copying blob a70d879fa598 done
< ... shortened ... >
INFO:   Creating SIF file...
ffmpeg version 4.2.4 Copyright (c) 2000-2020 the FFmpeg developers
```

SIF se uloží do cache a druhý běh je rychlejší
 singularity cache clean

Sestavení SIF do souboru, alias a spuštění

soubor ffmpeg4.2.SIF

data v /storage/ and home přístupné

```
$ singularity build ffmpeg4.2.SIF docker://jrottenberg/ffmpeg:4.2-ubuntu
INFO:   Starting build...
INFO:   Creating SIF file...
INFO:   Build complete: ffmpeg4.2.SIF

$ singularity run ffmpeg4.2.SIF
ffmpeg version 4.2.4 Copyright (c) 2000-2020 the FFmpeg developers

$ alias ffmpeg4.2="singularity run ffmpeg4.2.SIF

$ ffmpeg4.2
ffmpeg version 4.2.4 Copyright (c) 2000-2020 the FFmpeg developers
```



- **builder.metacentrum.cz** nebo vlastní Linux
 - nutno pracovat v /scratch/username nelze na NFS!
- Příprava pomocí sandboxu
 1. Vytvoření sandboxu – adresář s „LSB“

```
singularity build -f -s deb11.sbox docker://debian:bullseye
```
 2. Příprava prostředí

```
singularity shell -f -w deb11.sbox
```

```
Singularity> (apt update; apt install ... ; make ; ... ; exit)
```
 3. Sestavení image

```
singularity build -f DEB11.SIF deb11.sbox
```

- Připojení adresářů
 - `-B /path/to/dir[:/inside/path] -H [/home/dir]`
 - Metacentrum default
 - `-B /storage -B /tmp -H`
 - scratch není automaticky připojen
- Environment vars – *většina* přenesena do kontejneru nebo `--env`
- GPU
 - `--nv` for NVIDIA (`--rocm` for AMD)

- Spuštění http serveru
 - změna portu 80 -> 8080
 - připojení zapisovatelného adresáře pro logy

```
$ singularity build -f -s apache.sbox docker://httpd
$ singularity exec -f -w apache.sbox sed -ie 's/Listen 80/Listen 8080/g' /usr/local/apache2/conf/httpd.conf
$ singularity build -f apache.sif apache.sbox
$ singularity run -B /tmp:/usr/local/apache2/logs apache.sif
# vlastní www obsah:
$ singularity run -B /scratch/hoidekr/html:/usr/local/apache2/htdocs/ -B /tmp:/usr/local/apache2/logs apache.sif
```

- <http://builder.metacentrum.cz:8080/>



■ Definition file – recept pro sestavení image

- podobný jako Dockerfile
- instalace aplikací
- kompilace aplikací
- nastavení proměnných
- úpravy adresářového stromu

```

Bootstrap: docker
From: httpd

%post
sed -ie 's/Listen 80/Listen 8080/g'
/usr/local/apache2/conf/httpd.conf

%labels
  Author Jan Hoidekr

%help
  This is a demo def.file for CESNET - 6. 9. 2021
  
```

■ Sestavení image z def.file a spuštění

```

$ singularity build -f httpd.sif httpd.def
< ... long output during building the image ... >
$ singularity run -B /scratch/hoidekr/html:/usr/local/apache2/htdocs/ -B /tmp:/usr/local/apache2/logs httpd.sif
[running apache ... ]
  
```



- IPMI console s javaws na strojích Meta
 - Skirit84 – VLAN k IPMI webovému rozhraní
 - -> tunel + starší prohlížeč na svém PC

```
Bootstrap: docker
From: debian:stretch

%post
apt-get -yqq update
apt-get -fyqq install iceweasel icedtea-netx
```

- spuštění staršího prohlížeče s javou na skirit84 + X11

```
$ ssh -X -l root skirit84

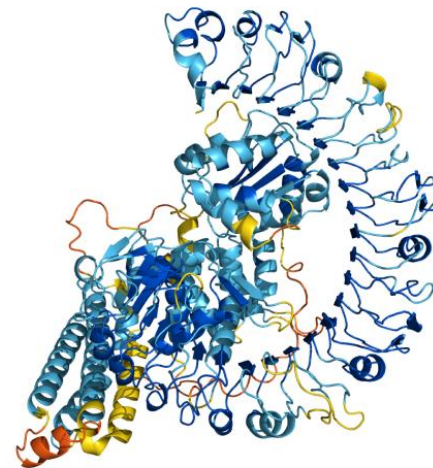
root@skirit84:~# singularity build stretch.sif debian.def
...
INFO: Build complete: stretch.sif

root@skirit84:~# singularity exec stretch.sif iceweasel
```

- AI a Deep Learning
 - GPU + frameworky TensorFlow a PyTorch
 - Mnoho verzí s mnoha závislostmi + živý vývoj
 - virtualenv není řešení
 - Kontejnery – NVIDIA GPU CLOUD – NGC <https://ngc.nvidia.com/>
 - Připravené kontejnery + „vylazené“ + dokumentace
 - Pro uživatele jednoduchá změna verze frameworku a sdílení prostředí
 - Nezávislé na meta modulech, pouze aktuální drivery
 - Uložené verze NGC image na `/cvmfs/singularity.metacentrum.cz/`
 - `builder:/scratch/hoidekrš singularity build PyTorch-latest.SIF docker://nvcr.io/nvidia/pytorch:21.08-py3`

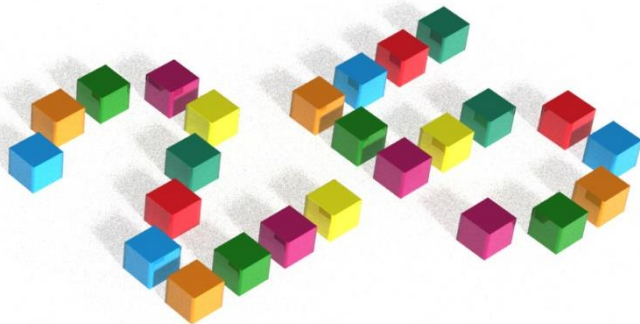
https://wiki.metacentrum.cz/wiki/NVidia_deep_learning_frameworks

- AI a DL uživatelé
 - obecně bez problémů včetně vlastních úprav
 - souvisí s jejich znalostí python prostředí a abstrakce
- Rychlost výpočtu
 - Běh programu je stejně rychlý jako nativní běh
 - Zpoždění je pouze při startu kontejneru
- Použití
 - AI skupiny z více univerzit
 - Elixir – AlphaFold
 - a solution to a 50-year-old grand challenge in biology*
 - jednotlivci se speciálními požadavky



- Přínosy kontejnerů:
 - Nezávislé na modulech
 - Vhodné na testování nových nástrojů
 - Sdílení prostředí mezi uživateli
 - Def.files jako historie verzí -> opakovatelnost výpočtu
- Vaše dotazy?
 - k diskuzi zde na semináři - povolení subuid/subgid v meta





Děkuji za pozornost!



Jan Hoidekr, hoidekr@cesnet.cz