

Utilizando programas através do Apptainer

O Apptainer é um programa para criação e execução de containers, compatível com o Docker e que permite rodar programas dentro de 'imagens' prontas. Isso evita problemas de compatibilidade entre pacotes do sistema e os requeridos pelo programa.

Sua principal vantagem em relação ao Docker é não precisar de permissões especiais dos usuários, tornando-o mais adequado a nossos servidores de uso compartilhado.

Quase tudo que serve para o Singularity serve para o Apptainer.

Abaixo um guia de como rodar um programa dentro do ambiente (no caso, o R).

Imagens pré-baixadas

Para facilitar, deixaremos algumas imagens baixadas em `/opt/apptainer`.

Para rodar o R com a imagem `ml-verse`:

```
apptainer exec --nv /opt/apptainer/ml-verse_latest.sif R
```

Rodar o Rscript é análogo.

Para rodar o RStudio, siga [o guia](#).

Baixando uma imagem

As imagens do Apptainer são ambientes com as dependências necessárias para que o programa funcionar. Para baixar uma imagem podemos usar o subcomando `pull`, como:

```
apptainer pull docker://rocker/ml-verse
```

O exemplo baixa uma imagem do R do [Projeto Rocker](#) que já vem com o R dentro de um ambiente Ubuntu com um repositório de pacotes pré-configurado para instalação mais rápida. A imagem deve ser baixada no diretório onde o comando foi executado, com extensão `.sif` (no exemplo, seria `ml-verse_latest.sif`).

O comando aceita URIs que apontem para imagens que seguem o padrão OCI. Imagens de docker como a do exemplo costumam funcionar.

Executando uma imagem

Para executar a imagem, utilizamos o subcomando `apptainer run`, especificando o nome do arquivo da imagem:

```
# não deve funcionar, pois o container chama o RStudio por padrão e
```

```
precisará de alguns bind mounts  
apptainer run ml-verse_latest.sif
```

Também é possível executar um comando no escopo da imagem:

```
apptainer exec ml-verse_latest.sif R
```

Ao executar o comando, o apptainer irá criar um container baseado na imagem e executar o programa.

Particularidades do ambiente

O apptainer irá automaticamente disponibilizar seu \$HOME dentro do ambiente, então seus arquivos devem continuar a ser acessíveis normalmente. A maior diferença se dá nas bibliotecas e outras dependências inclusas na imagem. Caso algum pacote dependa de bibliotecas que não estejam inclusas, o ideal é baixar ou criar uma imagem mais completa.

Para instalar pacotes é preciso configurar o .libPaths(). No R, rodar:

```
dir.create(Sys.getenv('R_LIBS_USER'), recursive=TRUE)  
.libPaths(Sys.getenv('R_LIBS_USER'))
```

Por padrão isso resultará em pacotes instalados em seu \$HOME na pasta R. É possível alterar a variável de ambiente para mexer nesse comportamento.

Particularidades dos servidores do IME

Além do \$HOME, o apptainer já disponibiliza o /tmp e o /var/tmp (entre outros diretórios). Nas brucutus também configuramos acesso ao /var/fasttmp, que é sempre um SSD.

Referências

- <https://apptainer.org/docs/user/latest/>
- <https://rocker-project.org/use/singularity.html>

From:

<https://wiki.ime.usp.br/> - Wiki da Rede IME

Permanent link:

<https://wiki.ime.usp.br/tutoriais:apptainer?rev=1715179404>

Last update: **2024-05-08 11:43**

