

Singularity 使用說明

Container 可以用來包裝使用者已客製化的執行環境，在高速計算平台想利用 Container 進行運算得透過 singularity 機制。目前 Taiwania 主機上已提供基本之 Singularity images，images 檔案放置路徑在/pkg/singularity/images 之下，各 image 檔皆已安裝 Anaconda3(於/use/local/anaconda3)、Tensorflow、keras、cudnn 與 Taiwania 主機所需之 Nvidia GPU 驅動程式；各 image 已設定 python 與 cuda 所需之環境變數與函式庫變數。

各 image 差別如下：

Image 檔名稱	說明
ubuntu16.04_cuda9.0	OS: ubuntu16.04，已安裝 cuda9.0
ubuntu16.04_cuda8.0	OS: ubuntu16.04，已安裝 cuda8.0

快速入門 Singularity

1.將 images 複製到自己的帳號家目錄下，測試簡單 python script (hello.py)

```
$ cd ~
$ cp /pkg/singularity/images/ubuntu16.04_cuda9.0.img /home/username
$ cp /pkg/singularity/example/hello.py /home/username
$ module add singularity/2.5.2
$ singularity exec ubuntu16.04_cuda9.0.img python --version
Python 3.6.5 :: Anaconda, Inc.
$ singularity exec ubuntu16.04_cuda9.0.img python hello.py
Hello
```

2.執行 MNIST 手寫數字辨識 python script (mnist_cnn.py)

```
$ cp /pkg/singularity/example/mnist_cnn.py ./
$ singularity exec ubuntu16.04_cuda9.0.img python mnist_cnn.py
```

3.派送 job 到 Taiwania 主機

撰寫 job script 範例如下(ProjectName 請置換成你的 project name)，存檔為 jobtest.sh

```
#!/bin/bash
#PBS -P ProjectName
#PBS -N singularity_job
```

```
#PBS -l select=1:ncpus=40:ngpus=4
#PBS -l walltime=00:30:00
#PBS -q gtest
#PBS -j oe
cd $PBS_O_WORKDIR
module add singularity/2.5.2
singularity exec ubuntu16.04_cuda9.0.img python ./mnist_cnn.py
```

於命令提示字元執行 qsub 指令派送 job

```
$ qsub jobtest.sh
```

計算完成之後，會輸出每一個訓練周期結果

```
Epoch 12/12
60000/60000 [=====] - 3s 51us/step - loss: 0.0282 -
acc: 0.9910 - val_loss: 0.0301 - val_acc: 0.9906
Test loss: 0.03007881408132125
Test accuracy: 0.9906
```

客製化 Taiwania 提供之 Singularity image

熟悉 Docker 容器軟體技術的進階用戶，可以自行修改本系統提供的 image 自行客製化 AI framework 軟體堆疊。

- 1.使用 WinSCP 或 FileZilla 軟體將 Taiwania 上的 image 檔下載到你的 Linux 電腦中
- 2.於你的 Linux 電腦中安裝 singularity，安裝方式可參考如下網址

<https://singularity.lbl.gov/quickstart>

- 3.使用 root 身份執行 singularity

```
# singularity shell --writable ubuntu16.04_cuda9.0.img
於 image 中修改或安裝軟體
# singularity ubuntu16.04_cuda9.0.img:~> cat /etc/os-release
NAME="Ubuntu"
VERSION="16.04.4 LTS (Xenial Xerus)"
ID=ubuntu
ID_LIKE=debian
PRETTY_NAME="Ubuntu 16.04.4 LTS"
VERSION_ID="16.04"
HOME_URL="http://www.ubuntu.com/"
SUPPORT_URL="http://help.ubuntu.com/"
BUG_REPORT_URL="http://bugs.launchpad.net/ubuntu/"
VERSION_CODENAME=xenial
```

```
UBUNTU_CODENAME=xenial
# singularity ubuntu16.04_cuda9.0.img:~> apt-get update
# singularity ubuntu16.04_cuda9.0.img:~> apt-get install nano
# singularity ubuntu16.04_cuda9.0.img:~> nano /etc/bash.bashrc
離開 container
# singularity ubuntu16.04_cuda9.0.img:~> exit
Exit
```

4.將修改完之 image，再使用 WinSCP 或 FileZilla 軟體上傳到你的 Taiwania 家目錄中，並透過 singularity 執行你於 image 中客製化的應用程式

5.若 image 裡可用空間太小，可依如下方式擴展空間

```
# singularity image.create --size 15360 my_custom.img (15360 為 15GB)
# singularity build --writable my_custom.img ubuntu16.04_cuda9.0.img
```

6.Container 啟動之後預設會與 host 端共享帳號家目錄，如果想存取 host 端的其他目錄，可依如下加上 bind 參數，例如指定把 host 端的/work1/username 目錄掛載到 container 內的/mnt/host/work1

```
$ echo "Luke, I am your father" > /work1/username/data_on_host.txt
$ singularity exec --bind /work1/username:/mnt/host/work1
ubuntu16.04_cuda9.0.img cat /mnt/host/work1/data_on_host.txt
Luke, I am your father
```

(完)