Python, pip i conda

Sadržaj

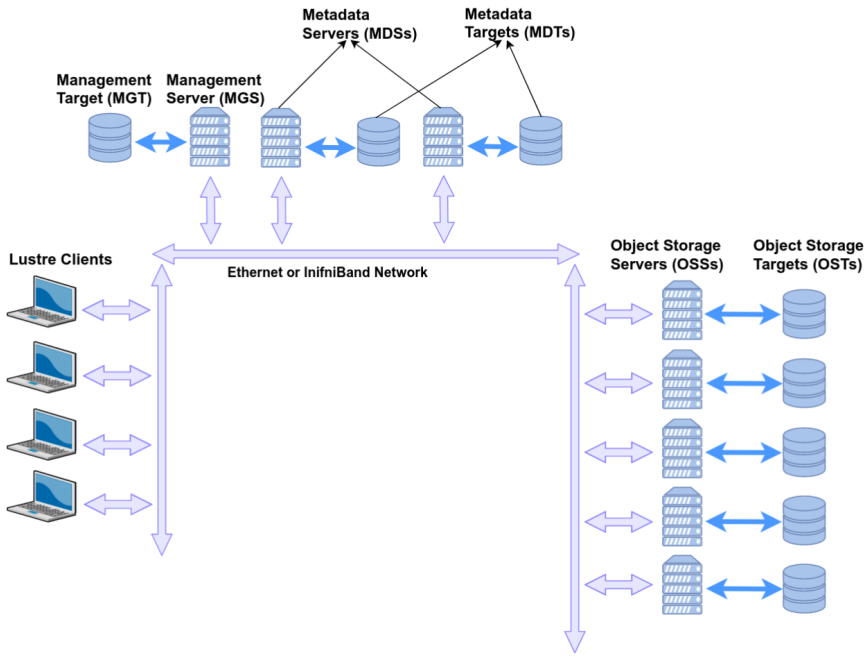
Lustre i virtualna okruženja

Lustre je paralelni raspodijeljeni datotečni sustav koji koristi Supek, namijenjen okruženju HPC u kojem veliki broj korisnika generira i koristi iznimnu količinu podataka, i čija je visoka dostupnost i brzina prijenosa bitna radi što efikasnijeg izvođenja paralelnih aplikacija.

Način na koji ovo postiže je fizičkim razdvajanjem opisa datotečnog sustava (tzv. *namespacea*) od njegovog stvarnog sadržaja (u objektnom obliku) koji je na Supeku pohranjen na stotinjak SSD-ova u tehničkoj izvedbi ClusterStor E1000.

Lustre datotečni sustav se sastoji od nekoliko glavnih komponenata (s pripadnim dijagramom ispod):

- **Metadata Server** - Poslužitelji za upravljanje pohranjenim podacima s informacijama poput njihovog imena, vlasništva i prava pristupa
- **Object Storage Server** - Poslužitelji na kojima se podaci fizički nalaze i koji se mogu proizvoljno skalirati
- **Management Server** - Poslužitelji koji su odgovorni za nadzor i upravljanje cjelokupnim datotečnim sustavom Lustre
- **Lustre Networking** - Brza i visoko propusna veza kojom se podaci prenose
- **Client -** Mount point na pristupnim poslužiteljima koji otkriva datotečni sustav Lustre korisničkim aplikacijama



Slika 1. *Dijagram datotečnog sustava Lustre (Figure 1 u izvornoj publikaciji)*

Kako Lustre radi i kako ga pravilno koristiti

Pri svakoj datotečnoj operaciji čitanja ili pisanja, klijent šalje zahtjev **Metadata Serveru** na kojem se nalazi virtualni zapis opisa i lokacija pravog podatka raspodijeljenog na više **Object Storage Servera**. Jednom kada se tražena datoteka (ili datoteke) pronađu, stvara se direktna veza između klijenta i fizičkog zapisa, koja osigurava pristup i njeno daljnje upravljanje.

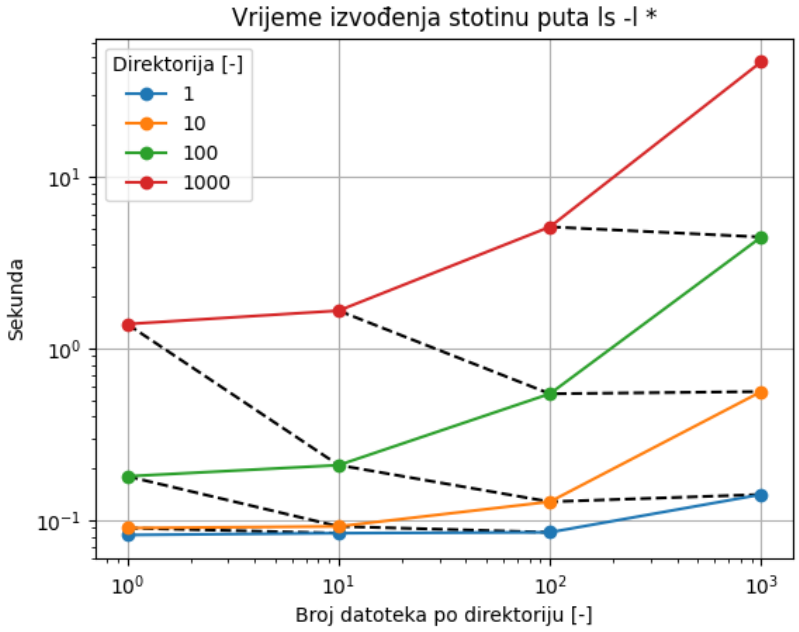
U višekorisničkom okruženju poput klastera Supek, pristup i upravljanje podataka mora biti usklađeno između svake korisničke aplikacije koja im pristupa. Ovo se postiže naizmjeničnim osvježavanjem i usklađivanjem virtualnog zapisa koje ima svoje granice optimalnog izvođenja, iznad kojeg se performanse drastično smanjuju za cijeli datotečni sustav kojim se upravlja i sve korisnike koji ga koriste.

Neke od preporuka za Lustre dijeljeni datotečni sustav uključuju:

- štedljivo korištenje naredbi za opis datotečnog sustava poput `ls, find, du` ili `df`
- izbjegavanje osobnog prevođenja i instalacije aplikacija
- izbjegavanje pokretanja izvršnih datoteka s datotečnog sustava Lustre
- izbjegavanje direktorija s velikim brojem datoteka (optimalno je manje od tisuću) ili datotekama malog obujma (optimalno više od 1GB)

Ispod se nalazi primjer čitanja sadržaja direktorija komandom `ls -l *` stotinu puta zaredom (što je tipično opterećenje jednog klastera) nad raznim kombinacijama broja direktorija i datoteka koje zajedno sadrže 10GB podataka.

Ako uzmemo u obzir dva rubna slučaja: 1) tisuću datoteka u jednom direktoriju naspram 2) tisuću direktorija s jednom datotekom, vidljivo je da se množenjem direktorija efikasnost ove operacije značajno smanjuje (approx. 20 puta). Slični trend vidljiv je i u ostalim kombinacijama (10/100 vs. 100/10, itd.) što upućuje na nužnost agregacije podataka u manji broj direktorija i idealno datoteke većeg obujma.



Slika 2. *Vrijeme izvođenja komande `ls -l *` stotinu puta nad kombinacijama broja direktorija (1-1000) i datoteka (1-100) koje zajedno sadrže 10GB podataka. Crne crtane linije povezuju točke s istim brojem datoteka.*

Python i virtualna okruženja

Python knjižnice danas se većinom instaliraju korištenjem aplikacija pip ili conda; upraviteljima knjižnica koji osiguravaju dopremanje svih ovisnosti potrebnih za instalaciju i razvoj aplikacija python.

Iako ove aplikacije pružaju veoma jednostavno i efikasno okruženje za brzi razvoj i eksperimentiranje raznih kombinacija knjižnica, svakom novom instalacijom broj datoteka se multiplicira i dodatno opterećuje dijeljeni sustav (učestalim čitanjem i pisanjem pri razvoju ili izvršavanju).

Ispod se nalazi primjer okruženja nastalog pip instalacijama za **samo jednu verziju pythona**, koje u sebi sadrži tipični data stack u kojem se nalazi (approx.):

- 4000 direktorija
- 15 datoteka po direktoriju

- 2G podataka

Ako pretpostavimo slična ubrzanja iz prethodnog dijagrama, Lustre datotečni sustav možemo potencijalno koristiti i do **deset puta efikasnije** (ili barem jedan značajan dio njegove funkcionalnosti) ako okrupnimo podatke u jednu veću, zasebnu cjelinu.

```
# broj direktorija
[korisnik@kompjuter:] $ find ~/.local/lib/python3.9/site-packages /usr/local/lib/python3.9/dist-packages -type
d | wc -l
4338

# broj datoteka
[korisnik@kompjuter:] $ find ~/.local/lib/python3.9/site-packages /usr/local/lib/python3.9/dist-packages -type
f | wc -l
47355

# veliine
[korisnik@kompjuter:] $ du -hcs ~/.local/lib/python3.9/site-packages /usr/local/lib/python3.9/dist-packages
939M        /home/marko/.local/lib/python3.9/site-packages
747M        /usr/local/lib/python3.9/dist-packages
1.7G        total
```

Apptainer i python

> **Primjeri izgradnje**
>
> Upute ispod pretpostavljaju da kontejner gradite na osobnom računalu.
>
> U slučaju da niste u mogućnosti graditi kontejnere na svojem računalu, upute za izgradnju na Supeku možete naći na našem wikiju.

Jedan od sve ustaljenijih načina dopremanja aplikacija na HPC klastere su apptainer i singularity; sučelja za stvaranje izoliranih razvojnih okolina zvanih *ko ntejneri.*

Kontejneri su datoteke koje u sebi sadrže aplikacije i njihove ovisnosti potrebne za izvršavanje u formi slike (engl. *image*) koja se stvara na osobnom računalu i, jednom kada se pripremi, doprema na superračunalo i koristi kao bilo koja druga aplikacija.

Upravo zbog činjenice da *image* sadrži sve ovisnosti i strukturu direktorija unutar **samo jedne** datoteke je ovaj način najpoželjniji za rad na Lustreu.

Ispod se nalaze upute za razvoj osnovnog python data stacka koji se sastoji od knjižnica:

- NumPy - upravljanje matričnim podacima
- SciPy - osnovne znanstvene funkcije
- Pandas - upravljanje strukturiranim podacima
- matplotlib - vizualizacija podataka

Detaljnije upute možete naći na službenim stranicama i našem wikiju.

Izgradnja pipom

Prvi korak je stvaranje osnovnog kontejnera `data_stack_sandbox` u interaktivnom modu ili verziji *sandbox:*

```
# izgradnja sandbox verzije
[korisnik@kompjuter:~] $ apptainer build --sandbox data_stack_sandbox docker://ubuntu:20.04
...
INFO:    Creating sandbox directory...
INFO:    Build complete: data_stack_sandbox

# sadržaj trenutnog direktorija
[korisnik@kompjuter:~] $ ls -l
total 154520
drwxr-xr-x 18 korisnik korisnik      4096 svi  23 16:33 data_stack_sandbox
drwxr-xr-x 18 korisnik korisnik      4096 svi  23 09:51 ubuntu_20.04
-rw-r--r--  1 korisnik korisnik       119 svi  23 15:17 ubuntu_20.04.def
-rwxr-xr-x  1 korisnik korisnik 158208000 svi  23 15:24 ubuntu_20.04.sif
```

Nakon stvaranja interaktivne *sandbox* verzije, otvorimo ljusku unutar kontejnera korištenjem sudo ovlasti i instaliramo sve ovisnosti korištenjem pip installa:

```
# interaktivna sjednica u kontejneru
[korisik@kompjuter] $ sudo apptainer shell --writable data_stack_sandbox/
INFO:    /etc/singularity/ exists; cleanup by system administrator is not complete (see https://apptainer.org
/docs/admin/latest/singularity_migration.html)
WARNING: Skipping mount /etc/localtime [binds]: /etc/localtime doesn't exist in container
Apptainer> apt update
...
Reading state information... Done
10 packages can be upgraded. Run 'apt list --upgradable' to see them.

# instalacija pip3
Apptainer> apt install python3-pip -y
...
Running hooks in /etc/ca-certificates/update.d...
done.

# instalacija python knjižnica
Apptainer> pip3 install numpy scipy pandas matplotlib ipython
...
Successfully installed asttokens-2.2.1 backcall-0.2.0 contourpy-1.0.7 cycler-0.11.0 decorator-5.1.1 executing-
1.2.0 fonttools-4.39.4 ipython-8.13.2 jedi-0.18.2 kiwisolver-1.4.4 matplotlib-3.7.1 matplotlib-inline-0.1.6
numpy-1.24.3 packaging-23.1 pandas-2.0.1 parso-0.8.3 pexpect-4.8.0 pickleshare-0.7.5 pillow-9.5.0 prompt-
toolkit-3.0.38 ptyprocess-0.7.0 pure-eval-0.2.2 pygments-2.15.1 pyparsing-3.0.9 python-dateutil-2.8.2 pytz-
2023.3 scipy-1.10.1 six-1.16.0 stack-data-0.6.2 traitlets-5.9.0 tzdata-2023.3 wcwidtWARNING: Running pip as the
'root' user can result in broken permissions and conflicting behaviour with the system package manager. It is
recommended to use a virtual environment instead: https://pip.pypa.io/warnings/venv
h-0.2.6

# ispis verzija knjižnica
Apptainer> pip3 freeze
...
ipython==8.12.2
matplotlib==3.7.1
matplotlib-inline==3.7.1
numpy==1.24.3
pandas==2.0.1
scipy==1.10.1
...
```

Nakon instalacije knjižnica, prebacujemo *sandbox* direktorij `data_stack_sandbox` u *image* verziju `data_stack.sif` i dostavljamo ju na Supeka:

```
# prebacivanje sandbox verzije u image
[korisnik@kompjuter:~] $ sudo apptainer build data_stack.sif data_stack_sandbox/
...
INFO:    Build complete: data_stack.sif

# veliine verzija sandbox i image
[korisnik@kompjuter:~] $ du -hcs data_stack*
832M        data_stack_sandbox
272M        data_stack.sif
1.1G        total

# dopremanje image verzije na Supek
[korisnik@kompjuter:~] $ scp data_stack.sif mkvakic@login-gpu.hpc.srce.hr:.
data_stack.
sif
100%  272MB 111.0MB/s   00:02m
```

Nakon spajanja na superračunalo Supek, kontejner možemo koristiti pozivom naredbe `apptainer exec`:

```
# login na pristupni poslužitelj gpu
[korisnik@kompjuter:~] $ ssh korisnik@login-gpu.hpc.srce.hr
Last login: Wed May 24 08:16:00 2023 from x.x.x.x

# sadržaj korisnikog direktorija
[korisnik@kompjuter:~] $ ls -l
total 278088
-rwxr-xr-x  1 mkvakic hpc 284729344 May 24 08:02 data_stack.sif

# pokretanje dopremljenog imagea na Supeku
[korisnik@kompjuter:~] $ apptainer exec data_stack.sif python3 --version
Python 3.8.10
```

Izgradnja pipom + definicijska datoteka

Prethodni koraci lokalne izgradnje mogu se lokalno zapisati u *.def* datoteci, što omogućuje dosljedniju instalaciju u slučaju nadogradnje, ali i direktno pozivanje *imagea* putem poglavlja `%runscript`

Koraci koji se nalaze ispod su:

- ispisivanje definicijske datoteke (linija 1)
    - `%post` poglavlje s koracima instalacije (linija 5)
    - `%runscript` poglavlje s zadanom izvršnom datotekom python3 (linija 10)
- kreiranje *imagea* (linija 13)
- dopremanje na Supeka (linija 18)
- direktno izvršavanje *imagea* (linija 24)

```
# ispis definicijske datoteke
[korisnik@kompjuter:~] $ cat data_stack.def
Bootstrap: docker
From: ubuntu:20.04

%post
  apt update
  apt install python3-pip -y
  pip3 install numpy scipy pandas matplotlib ipython

%runscript
  exec python3 $@

# izgradnja imagea
[korisnik@kompjuter:~] $ apptainer build data_stack.sif data_stack.def
...
INFO:    Creating SIF file...
INFO:    Build complete: data_stack.sif

# dopremanje na Supeka
[korisnik@kompjuter:~] $ scp data_stack.sif mkvakic@login-gpu.hpc.srce.hr:.
data_stack.sif      100%  335MB 110.9MB/s   00:03

# login na pristupni poslužitelj gpu
[korisnik@kompjuter:~] $ ssh mkvakic@login-gpu.hpc.srce.hr
Last login: Wed May 24 09:18:44 2023 from x.x.x.x

# direktno izvršavanje imagea na Supeku
[korisnik@x3000c0s27b0n0] $ ./data_stack.sif --version
Python 3.8.10
```

Izgradnja condom

U slučaju da želimo specifičnu verziju pythona i njegovih knjižnica, možemo koristiti miniforge verziju conde; upravitelj python paketima koji stvara virtualna okruženja.

Prvi korak je izgradnja *sandbox* verzije i instalacija mambe korištenjem službenih uputa:

```
# izgradnja sandbox verzije
[korisnik@kompjuter:~] $ sudo apptainer build --force --sandbox data_stack_sandbox docker://ubuntu:20.04
...

# otvaranje interaktivne sjednice u sandbox kontejneru
[korisnik@kompjuter:~] $ sudo apptainer shell --writable data_stack_sandbox/

# osvježavanje apt repozitorija
Apptainer> apt update
...

# instalacija curl
Apptainer> apt install curl -y
...

# preuzimanje Miniforge conde
Apptainer> curl -L -O https://github.com/conda-forge/miniforge/releases/latest/download/Miniforge3-Linux-x86_64.
sh
...
100 82.9M  100 82.9M    0     0  30.7M      0  0:00:02  0:00:02 --:--:-- 42.0M

# batch instalacija u /usr/local/miniforge
Apptainer> bash Miniforge3-Linux-x86_64.sh -b -p /usr/local/miniforge
...
installation finished.
```

Ispod se nalaze detalji za dopremanje python verzije v3.10 i prethodno navedenih python knjižnica.

Koraci koji su potrebni su opisani ispod, dok se detaljnije upute nalaze na službenim stranicama. Instalacija se sastoji od:

- inicijalizacije conde (linija 1)
- kreiranja virtualnog okruženja `data_stack` (linija 3)
- aktivacije virtualnog okruženja `data_stack` (linija 14)
- instalacije korištenjem upravitelja pip (linija 16)

Napomena: Komande ispod pretpostavljaju da ste **i dalje** u *sandbox* kontejneru.

```
# aktivacija conde u kontejneru
Apptainer> source /usr/local/miniforge/bin/activate

# kreiranje virtualnog okruženja data_stack
(base) Apptainer> conda create -n data_stack python=3.10 -y
...

# aktivacija virtualnog okružaenja data_stack
(base) Apptainer> conda activate data_stack

# instalacija knjižnica pipom
(data_stack) Apptainer> pip3 install numpy scipy pandas matplotlib ipython
...
Downloading and Extracting Packages


Preparing transaction:
done

Verifying transaction:
done

Executing transaction: done

# ispis instaliranih knjižnica
(data_stack) Apptainer> pip3 list
...
ipython           8.13.2
matplotlib        3.7.1
matplotlib-inline 0.1.6
numpy             1.24.3
pandas            2.0.1
scipy             1.10.1
...
```

Korištenje instaliranog `data_stack` virtualnog okruženja osigurava se izvršavanjem python izvršne datoteke u `/usr/local/miniforge/envs/data_stack/bin/python3`:

```
# ispis verzije i staze __init__.py datoteke knjižnice matplotlib u kontejneru
[korisnik@kompjuter:~] $ apptainer exec data_stack_sandbox/ /usr/local/miniforge/envs/data_stack/bin/python3 -c
'import matplotlib; print("matplotlib verzija je: ", matplotlib.__version__); print("matplotlib __init__
datoteka je:", matplotlib.__file__)'
...
matplotlib verzija je:  3.7.1
matplotlib __init__ datoteka je: /usr/local/miniforge/envs/data_stack/lib/python3.10/site-packages/matplotlib
/__init__.py
```

Ostali koraci pretvaranja u *image* i dopremanja na Supek ostaju isti, dok se cjelokupan proces kao i prije može zapisati u *.def* datoteci u kojoj je moguće definirati `/usr/local/mambaforge/envs/data_stack/bin/python3` kao direktnu izvršnu naredbu.

Izgradnja condom + online repozitoriji

Cjelokupan proces izgradnje specifičnog python virtualnog okruženja može se preskočiti korištenjem već pripremljenih kontejnera koji u sebi već sadrže condu, poput condaforge/miniforge3

Ako se koriste kao baza za izgradnju gore navedenog virtualnog okruženja, definicijska datoteka *.def* izgledala bi na sljedeći način i mogla koristiti za izgradnju slike koja se može dopremiti na Supeka:

- zaglavlje s osnovnim condaforge kontejnerom (linije 1 i 2)
- `%post` poglavlje s instalacijskim naredbama (linije 4 do 9)
- `%environment` poglavlje koje postavlja okoliš za virtualno okruženje `data_stack` (linije 11 do 22)
- `%runscript` poglavlje koje definira izvršnu naredbu python3 (linije 24 do 26)

```
Bootstrap: docker
From: condaforge/miniforge3

%post

  conda create -n data_stack python=3.10 -y
  . /opt/conda/bin/activate
  conda activate data_stack
  pip3 install numpy scipy pandas matplotlib ipython

%environment

  . /opt/conda/bin/activate
  conda activate data_stack

%runscript

  exec python3 $@
```

Kako dalje?

- Lustre
  - Wiki - osnove dijeljenog datotečnog sustava Lustre
  - Priručnik - Lustre priručnik s detaljnim opisom
  - Najbolje prakse na ostalim superračunalnim centrima
    - Maryland
    - INCD
    - NASA
    - CSC
- Apptainer
  - Službena dokumentacija - za detalje o raznim komandama
  - Originalni članak - Zašto je Singularity/Apptainer uopće nastao?
- Pip
  - Službena dokumentacija - za detalje o raznim komandama pipa
  - RealPython tutorial - super tutorial za uvod u pip
- Conda
  - Službena dokumentacija - za detalje o raznim komandama conde
  - Isabella wiki - naš stari wiki s najkorištenijim komandama i njihovim opisom