容器化

容器技术

容器技术能够对应用及其整个运行时环境（包括全部所需文件）一起进行打包或隔离。从而可以在不同环境（
如开发、测试和生产等环境）之间轻松迁移应用，同时还可保留应用的全部功能。有了容器不再需要管理员为
你安装任何东西。容器是一个独立的系统，你可以在里面做任何想做的事情。

Apptainer

2021年 11月， Singularity 开源项目加入 Linux 基金会，并更名为 Apptainer。Apptainer 是一套类似于
Docker 的容器解决方案，是用于 HPC容器系统。 Apptainer 兼容 Singularity Image File (SIF)、Singularity 的环境变量、 Singularity 的命令、自动迁移 Singularity 的用户配置。

镜像

一般保存为压缩只读 Singularity Image File (SIF)格式的镜像文件。

公共镜像

在 /fs00/software/singularity-images/ 已存放了许多常用的 SIF镜像文件，可直接使用。

导入镜像

以从 Docker Hub 等镜像仓库或镜像文件直接创建 SIF镜像文件
从 Docker Hub 导入镜像： apptainer build ubuntu.sif docker://docker.nju.edu.cn/library/ubuntu

- 从 NVIDIA NGC 导入镜像: `apptainer build ngc_cuda.sif docker://ngc.nju.edu.cn/nvidia/cuda`
- 从 docker save 保存的镜像文件导入镜像: `apptainer build abc.sif docker-archive://abc.tar`

制作镜像

1. 创建沙盒目录: `apptainer build --fix-perms --sandbox build docker://docker.nju.edu.cn/library/ubuntu`
2. 进入沙盒容器: `apptainer shell build/`
3. 在容器中安装和编译软件: 如 `apt` `make`
4. 退出容器: `exit`
5. 将沙盒打包成 SIF镜像文件: `apptainer build abc.sif build`

因登录节点无 root权限，可能出现问题，因此建议在自己的系统上制作镜像。

CI创建镜像

用 git.nju.edu.cn 上的 CI/CD 自动调用 kaniko 构建 Docker 镜像，详见 CI/CD 使用指南，然后再导入 `apptainer build ocr.sif docker://reg.nju.edu.cn/yaoge123/ocr`

一个简单的示例见: CI/CD自动化构建 Docker镜像

提交作业

提交容器作业的示例脚本

```
#BSUB -q 62v100ib
#BSUB -gpu num=4

apptainer exec --nv cuda.sif app
```

常用选项

- `--nv`: 提供 NVIDIA GPUs & CUDA支持
- `--bind/-B src[:dest[:opts]]`: 绑定额外的路径

- Apptainer
- Apptainer User Guide
- Docker Hub
- NVIDIA NGC

Revision #35
Created 2021-05-09 23:05:29 CST by Yao Ge
Updated 2026-09-27 18:34:58 CST by Yao Ge