

- **Inventario de archivos generados**

Se crea un espacio en GitHub para este laboratorio: <https://github.com/fjredondo/lab6-singularity>.

- **Explorando las posibilidades de Singularity**

En este apartado se crea una imagen `my-python.sif` a partir de la imagen `docker: fjredondoa/lab-docker:v1`.

Es muy interesante comprobar cómo es posible realizar ejecuciones de archivos, tanto en el interior del contenedor, como fuera de éste.

```
singularity exec my-python.sif ipython ../source/pi.ipynb 10**5
singularity exec my-python.sif ipython /app/pi.ipynb 10**5
```

Otra de las grandes ventajas de las imágenes de singularity es que permiten encapsular entornos de ejecución de versiones específicas con todas sus librerías y dependencias precargadas. Esto mejora la productividad ya que no es necesario instalar dicho entorno en cada servidor.

- **Usando mas a fondo Singularity**

Se realiza la comparación de secuencias de una muestra FAST de priones humanos (P04156.fasta), con una base de datos de secuencias conocidas en el pez cebra.

La aplicación BLAST está disponible en una imagen `.sif` accesible en una ruta compartida desde una NAS. De esta manera, no es necesario copiarla a una ruta local. Tras la consulta en la base de datos se obtiene el fichero de respuesta y se almacena en:

<https://github.com/fjredondo/lab6-singularity/blob/main/blast/results-blast.txt>

- **Actividades extras**

En este apartado se va a crear una imagen de singularity (`.sif`) a partir de la imagen de `docker fjredondoa/lab5-pi-docker:v1`. Esta imagen permite la ejecución por defecto (sin paso de parámetros) de la estimación de pi por el método de Monte-Carlo, usando distintas aproximaciones de ejecución: secuencial, secuencial con numpy sin arrays, secuencial con numpy con arrays y usando numba.

Lo primero que se realiza es la generación de la imagen `lab6-pi.sif` a partir de la imagen en DockerHub

```
$ singularity pull lab6-pi.sif docker://fjredondoa/lab5-pi-docker:v1
```

Se comprueba que en el interior de la imagen `lab6-pi.sif` se encuentra el notebook `pi.ipynb` en la ruta interna `/app`

```
\$ singularity exec lab6-pi.sif ls /app
pi.ipynb
```

Se ejecuta (con el comando "run") en pacioli mediante sbatch (`submit_run_pi_pacioli-alumno24.sh`) la imagen `lab6-pi.sif` usando singularity y se manda la salida de su ejecución al archivo: `lab6_run_pi_pacioli-alumno24.out`

```
$ sbatch submit_run_pi_pacioli-alumno24.sh
```

Se sube el script de sbatch y la salida `lab6_run_pi_pacioli-alumno24.out` a la dirección de GitHub:

<https://github.com/fjredondo/lab6-singularity/extra>